Διαγράμματα Feynman

Υπολογισμοί ρυθμών

Οι νόμοι διατήρησης που έχουμε δει μας λένε τι δεν μπορεί να συμβεί

Δεν λένε τίποτα σχετικά με τους ρυθμούς εμφάνισης κάποιας αλληλεπίδρασης πέρα από το γεγονός ότι κάτι απαγορευμένο για τις ισχυρές αλληλεπιδράσεις είναι επιτρεπτό για τις ΕΜ αλλά θα εμφανιστεί με μικρότερο ρυθμό. Και κάτι επιτρεπτό από τις ασθενείς αλλά απαγορευμένο από τις ΕΜ θα εμφανιστεί με ακόμα μικρότερο ρυθμό

Ωστόσο πραγματικοί ρυθμοί διάσπασης διέπονται από κανόνες της κβαντικής και οι υπολογισμοί μπορεί να γίνουν αρκετά πολύπλοκοι.

Ο ρυθμός Γ_{fi} για μια διεργασία είναι το απόλυτο τετράγωνο ενός κβαντομηχανικού πλάτους V_{fi} το οποίο εμπλέκει την αρχική κατάσταση, την τελική κατάσταση, τον τελεστή της αλληλεπίδρασης, πολλαπλασιαζόμενα με την πυκνότητα των καταστάσεων $\rho(E_f)$ της ενέργειας για δυνατές παραπλήσιες καταστάσεις, επί ένα παράγοντα $2\pi/\hbar$:

$$\boxed{\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi}\right|^2 \rho\left(E_s\right)}$$

Το πλάτος V_{fi} συχνά ονομάζεται πινακοστοιχείο ή matrix element της διεργασίας

Η πυκνότητα των καταστάσεων, $\rho(E_f)$, συχνά ονομάζεται φασικός χώρος

Το κβαντομηχανικό πλάτος

Το πλάτος της μετάβασης από την αρχική κατάσταση *i*, στην τελική κατάσταση *f*, αναπαραστάται συνήθως:

$$\boxed{V_{fi} = \left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle}$$

Η κυματοσυνάρτηση της αρχικής και τελικής κατάστασης εξαρτάται από το μέτρο της ορμής και διεύθυνση των αρχικών και τελικών σωματιδίων, και σαν αποτέλεσμα το πλάτος είναι συνάρτηση της ορμής.

- Εν γένει μπορεί να υπάρχουν πολλά σωματίδια στην αρχική και τελική κατάσταση

Η ισχύς της αλληλεπίδρασης εμπεριέχεται στον τελεστή της αλληλεπίδρασης *V*

Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος προϋποθέτει τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων.

- Συμμετρίες της αλληλεπίδρασης μπορεί να οδηγήσουν στο μηδενισμό του ολοκληρώματος σε κάποιες περιπτώσεις
- Αν οι ενέργειες ή και ορμές των σωματιδίων της αρχικής και τελικής κατάστασης δεν συμφωνούν τότε το ολοκλήρωμα μπορεί επίσης να μηδενιστεί

Η πυκνότητα των καταστάσεων

Ο παράγοντας της πυκνότητας των καταστάσεων, ρ(E_f), δηλώνει ότι ο ρυθμός μετάβασης από την αρχική στην τελική κατάσταση είναι ανάλογος του αριθμού των δυνατών ταξινομήσεων της διαθέσιμης ενέργειας:

Ο αριθμός αυτός των δυνατών τρόπων/καταστάσεων διευθέτησης της ενέργειας αυξάνει με την αύξηση της ενέργειας

Η πυκνότητα των καταστάσεων συνδέεται έμεσα με το μέτρο της ορμής και της διεύθυνσης των σωματιδίων της τελικής κατάστασης. Μπορεί να θέλουμε να ολοκληρώσουμε ως προς όλες ή μέρος όλων αυτών των μεταβλητών.

Πυκνότητα καταστάσεων – πλάτος – κανονικοποίηση

Το πλάτος $V_{fi} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$ εξαρτάται από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης

Αλλά άπειρα επίπεδα κύματα δεν μπορούν να κανονικοποιηθούν στην 1

Υπολογισμός της πυκνότητας των καταστάσεων προϋποθέτει την καταμέτρηση των καταστάσεων. Αλλά για συνεχείς μεταβλητές ο αριθμός αυτός είναι άπειρος.

Μια λύση για την αντιμετώπιση των προβλημάτων αυτών είναι η κανονικοποίηση του κουτιού

- Κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων σε 1 μέσα σε κουτί και εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών ώστε οι ορμές να γίνουν διακριτές.
- Το μέγεθος του κουτιού εμφανίζεται τόσο στον υπολογισμό του πλάτους μετάβασης όσο και στον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων αλλά απαλοίφεται στον πολλαπλασιασμό τους

Κανονικοποίηση και σχετικότητα

Το κουτί που χρησιμοποιούμε για την κανονικοποίηση υπόκειται σε μετασχηματισμούς Lorentz.

- Το μέγεθός του Lorentz συστέλεται, το μήκος κύματος του σωματιδίου επίσης Lorentz συστέλεται αλλά η κυματοσυνάρτηση είναι συνήθως βαθμωτό μέγεθος και επομένως το πλάτος της δεν αλλάζει

Επομένως αν γ=2, ο όγκος του κουτιού θα είναι μισός, και επομένως το ολοκλήρωμα ως προς τον όγκο του κουτιού με την αρχική κυματοσυνάρτηση δίνει μόνο το μισό ενός σωματιδίου.

Για το λόγο αυτό αντί να κανονικοποιήσουμε στην μονάδα, κανονικοποιούμε σε $2E_{\text{σχετικιστική}}$.

- Στην κατάσταση της ηρεμίας και σε μή σχετικιστικές ταχύτητες αυτο σημαίνει ότι η κανονικοποίηση θα γίνει σε 2M
- Σε σχετικιστικές ταχύτητες, απαλοίφετε ο παράγοντας γ από το γ του συστελόμενου κουτιού
- Ο αριθμητικός παράγοντας 2 εισάγεται για ευκολία αργότερα

Κβαντικές μεταβάσεις Ι

Υποθέστε ότι γνωρίζετε τις ακριβείς ιδιοκαταστάσεις μιας Hamiltonian

Αν βρισκόμαστε σε μια ιδιοκατάσταση, παραμένουμε σε αυτή για πάντα

Αν εισάξουμε μια διαταραχή στην Hamiltonian τότε η αρχική κατάσταση δεν είναι ιδιοκατάσταση και η ακριβής λύση θα έχει χρονοεξάρτηση

Μπορούμε πάντοτε να γράψουμε την ακριβή χρονο-εξαρτώμενη λύση σαν γραμμικό συνδυασμό χρονοεξαρτώμενων συντελεστών που πολλαπλασιάζουν τις ιδιοκαταστάσεις της αδιατάρακτης Hamiltonian.

- Επομένως είναι αρκετό και ικανοποιητικό να υπολογίσουμε τους παράγοντες αυτούς

Για παράδειγμα έστω ότι έχουμε να λύσουμε: $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (H_0 + V)\psi$ όπου $H_0\psi_n = E_n\psi_n$

Θεωρούμε: $\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ και αντικαθιστώντας στην εξίσωση Schrödinger

$$\sum_n \left[i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} + i\hbar\left(-i\frac{E_n}{\hbar}\right)c_n(t)\right]\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \sum_n c_n(t)(H_0 + V)\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\sum_n \left[i\hbar\frac{dc_n}{dt} + E_n c_n(t)\right]\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \sum_n c_n(E_n + V)\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$i\hbar\sum_n \frac{dc_n}{dt}\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \sum_n c_n V\psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

Κβαντικές μεταβάσεις ΙΙ

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με $\psi_k^* e^{+i\frac{E_k}{\hbar}t}$ την τελευταία εξίσωση και ολοκληρώνουμε ως προς όλο το φασικό χώρο

Η ορθογωνικότητα καταλήγει το αριστερό σκέλος σε ένα όρο και έχουμε ένα πινακοστοιχείο στο άθροισμα στο αριστερό μέλος:

$$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_n \langle \psi_k | V | \psi_n \rangle c_n e^{i\left(\frac{E_k - E_n}{\hbar}\right)t}$$

Σε περισσότερο σύντομο συμβολισμό γράφουμε: $V_{kn} = \langle \psi_k | V | \psi_n \rangle$ και: $\left(\frac{E_k - E_n}{\hbar}\right) = \omega_{kn}$

οπότε καταλήγουμε: $$i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_n V_{kn} c_n e^{i\omega_{kn} t}$$

που αποτελούν ένα σετ από συζευγμένους αρμονικούς ταλαντωτές

Να σημειωθεί ότι μέχρι το στάδιο αυτό δεν έχουμε κάνει κάποια προσέγγιση

Κβαντικές μεταβάσεις ΙΙΙ

Υποθέτουμε ότι ξεκινούμε από την κατάσταση S την χρονική στιγμή $t < 0$

Αυτό σημαίνει ότι $C_s = 1$ ενώ όλα τα άλλα $C_k = 0$ για $t < 0$

Για τουλάχιστο ένα μικρό χρονικό διάστημα, ο κυρίαρχος όρος στο άθροισμα θα προέρχεται από την κατάσταση k=S και μπορούμε να αγνοήσουμε τους υπόλοιπους όρους

Μετέπειτα έχουμε: $i\hbar \dfrac{dc_k}{dt} = V_{kS} e^{i\omega_{kS} t}$

Αν περιοριστούμε σε μια διαταραχή V που είναι μηδέν για $t < 0$ και σταθερή για $t > 0$, δηλαδή ότι εφαρμόζεται μια σταθερή διαταραχή την χρονική στιγμή $t = 0$, τότε μπορούμε να ολοκληρώσουμε:

$$\int_0^t i\hbar \frac{dc_k}{dt} dt = \int_0^t V_{kS} e^{i\omega_{kS} t}\, dt \;\rightarrow i\hbar\left[c_k(t) - c_k(0)\right] = \frac{V_{kS}}{i\omega_{kS}}\left[e^{i\omega_{kS} t} - 1\right]$$

Αντικατάσταση των ορισμών των V_{kS} και ω_{kS} θα δώσει:

$$i\hbar c_k(t) = \frac{\langle \psi_k | V | \psi_S \rangle}{i\dfrac{E_k - E_S}{\hbar}}\left[e^{i\omega_{kS} t} - 1\right] \;\rightarrow c_k(t) = \frac{\langle \psi_k | V | \psi_S \rangle}{E_k - E_S}\left[1 - e^{i\omega_{kS} t}\right]$$

Κβαντικές μεταβάσεις IV

$$c_k(t) = \frac{\langle \psi_k | V | \psi_S \rangle}{E_k - E_S}\left[1 - e^{i\omega_{kS}t}\right]$$

Πέρνουμε το απόλυτο τετράγωνο της τελευταίας σχέσης για να βρούμε την πιθανότητα:

Το απόλυτο τετράγωνο του τελευταίου όρου θα δώσει:

$$\left[1 - e^{i\omega_{kS}t}\right]\left[1 - e^{-i\omega_{kS}t}\right] = 1 - e^{i\omega_{kS}t} - e^{-i\omega_{kS}t} + e^{i\omega_{kS}t}e^{-i\omega_{kS}t} = 2 - 2\cos\omega_{kS}t$$

Επομένως: $$|c_k(t)|^2 = 2\frac{\left|\langle \psi_k | V | \psi_S \rangle^2\right|}{(E_k - E_S)^2}\left[1 - \cos\omega_{kS}t\right] \Rightarrow |c_k(t)|^2 = 2|V_{kS}|^2 \frac{1 - \cos\omega_{kS}t}{(\hbar\omega_{kS})^2}$$

Χρειάζεται να αθροίσουμε τώρα όλες τις πιθανότητες μετάβασης για όλες τις καταστάσεις:

Θα θεωρήσουμε το άθροισμα αυτό σαν ένα ολοκλήρωμα ως προς τις ενέργειες όλων των τελικών καταστάσεων, όπου υπάρχει μια πυκνότητα καταστάσεων σε μια περιοχή ενέργειας E_k:

$$\rho(E_k) = dN/dE_k$$

$$P(t) = \sum_k |c_k(t)|^2 = 2\int |V_{kS}|^2 \frac{1 - \cos\omega_{kS}t}{(E_k - E_S)^2}\rho(E_k)\,dE_k$$

Ο παρονομαστής σημαίνει ότι οι καταστάσεις με $E_k \approx E_S$ κυριαρχούν

Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούμε την προσέγγιση ότι $|V_{kS}|^2$ και $\rho(E_k)$ σταθερά στη περιοχή αυτή

$$P(t) = 2|V_{kS}|^2 \rho(E_S)\int \frac{1 - \cos\omega_{kS}t}{(E_k - E_S)^2}dE_k$$

Κβαντικές μεταβάσεις V

$$P(t)=2\left|V_{kS}\right|^2\rho\left(E_S\right)\int\frac{1-\cos\omega_{kS}t}{\left(E_k-E_S\right)^2}dE_k$$

Πέρνουμε τώρα την χρονική παράγωγο και κάνουμε αλλαγή μεταβλητής:

$$\Gamma=\frac{dP}{dt}=2\left|V_{kS}\right|^2\rho\left(E_S\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\omega_{kS}\frac{\sin\omega_{kS}t}{\left(\hbar\omega_{kS}\right)^2}\hbar\,d\omega_{kS}\Rightarrow\Gamma=\frac{2}{\hbar}\left|V_{kS}\right|^2\rho\left(E_S\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\omega_{kS}t}{\omega_{kS}}d\omega_{kS}$$

$$\Rightarrow\Gamma=\frac{2}{\hbar}\left|V_{kS}\right|^2\rho\left(E_S\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\omega_{kS}t}{\omega_{kS}t}d\left(\omega_{kS}t\right)$$

Το ολοκλήρωμα είναι απλά της μορφής: $\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin x}{x}dx=\pi$

ενώ οι υπόλοιποι παράγοντες δεν εξαρτώνται από τον χρόνο.

Σαν αποτέλεσμα, η ποσότητα $\Gamma=\frac{dP}{dt}$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου

- Ο ολικός ρυθμός μετάβασης από την αρχική κατάσταση είναι σταθερός

Χρυσός κανόνας του Fermi – Fermi's Golden Rule

Ο ρυθμός μετάβασης από μια αρχική κατάσταση S σε μια κατάσταση k

είναι το τετράγωνο του πινακοστοιχείου: $V_{kS} = \langle \psi_k | V | \psi_S \rangle$

επί την πυκνότητα καταστάσεων ενέργειας, $\rho(E_S) = dN/dE_S$ με ένα παράγοντα $2\pi/\hbar$

$$\boxed{\Gamma = \frac{dP}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kS}|^2 \rho(E_S)}$$

Η βασική υπόθεση (η οποία ισχύει σχεδόν πάντοτε) είναι ότι το πινακοστοιχείο και η πυκνότητα καταστάσεων είναι ουσιαστικά σταθερά για ένα πολύ μικρό εύρος ενεργειών γύρω από την ενέργεια ενδιαφέροντος

Για την χρησιμότητα του αποτελέσματος και την ευρεία εφαρμογή του, ο Fermi το ονόμασε χρυσό κανόνα

Χρυσός κανόνας και διαστάσεις

Για κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση, το πλάτος $V_{kn} = \langle \psi_k | V | \psi_n \rangle$

έχει τις διαστάσεις του δυναμικού V της διαταραχής, που είναι ενέργεια

και επομένως $|V_{kn}|^2$ έχει διαστάσεις E^2

Η πυκνότητα καταστάσεων: $\rho(E_k) = dN/dE_k$ έχει διαστάσεις 1/E από την στιγμή που ο αριθμός των καταστάσεων είναι αδιάστατος

Έτσι: $\boxed{\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kS}|^2 \rho(E_S)}$ έχει διαστάσεις $E/\hbar$

Εφόσον $E = \hbar\omega$ η έκφραση του χρυσού κανόνα έχει διαστάσεις ω (radians)/sec και επομένως εκφράζει ρυθμό γεγονότων

Πινακοστοιχεία και Μετασχηματισμός Fourier

Το πινακοστοιχείο για ένα σωματίδιο το οποίο έχει αρχική ορμή $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ για να σκεδαστεί σε τελική ορμή $\vec{p}' = \hbar\vec{k}'$ σε ένα δυναμικό $V\left(\vec{x}\right)$ είναι:

$$V_{\vec{k}'\vec{k}} = \left\langle \psi_{\vec{k}'} \middle| V \middle| \psi_{\vec{k}} \right\rangle = \int \left(e^{+i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\right) V\left(\vec{x}\right) \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right) d^3x$$

όπου αγνοήθηκαν παράγοντες κανονικοποίησης

Το παραπάνω είναι ισοδύναμο με: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \int e^{-i\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\cdot\vec{x}} V\left(\vec{x}\right) d^3x$

Που είναι ο 3-Δ Fourier μετασχηματισμός του δυναμικού
(πέρα από κάποιο όρο κανονικοποίησης)

Σχόλια I

Αρκετά βιβλία δεν χρησιμοποιούν το παράγοντα ħ που υπάρχει στον παρονομαστή. Στο σύστημα μονάδων ħ=1 αυτό δεν κάνει καμιά διαφορά, αλλά κάνει τις διαστάσεις λίγο δυσκολότερες να βρεθούν.

Κατά την εξαγωγή του αποτελέσματος υπήρχε ένας παράγοντας: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(\omega_{fi}t)}{(\omega_{fi}t)} d(\omega_{fi}t) = \pi$

με $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar = \Delta E/\hbar$ που προκύπτει από την ολοκλήρωση ως προς τις ενέργειες όλων των τελικών καταστάσεων. Η ολοκληρωτέα ποσότητα είναι $\sin(x)/x$ και παρουσιάζει έντονη κορυφή, ενώ $x = \Delta E \cdot t/\hbar$

Για σύντομα χρονικά διαστήματα, καταστάσεις με μεγάλη ΔΕ βρίσκονται στην περιοχή της κορυφής και είναι ιδιαίτερα σημαντικές. Για μεγάλα χρονικά διαστήματα, μόνο καταστάσεις με μικρή ΔΕ είναι σημαντικές. Το γινόμενο $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$

Σχόλια ΙΙ

Στην απόδειξη αγνοήθηκε το γεγονός ότι καθώς οι άλλες καταστάσεις ενέργειας αρχίσουν να καταλαμβάνονται θα ανατροφοδοτήσουν την αρχική κατάσταση

Αυτό μπορεί να ληφθεί υπόψη στο επόμενο στάδιο προσέγγισης. Το αποτέλεσμα παραμένει $\Gamma = 2\pi \left|V_{kS}\right|^2 \rho\left(E_S\right)/\hbar$ το γινόμενο του απόλυτου τετραγώνου του πλάτους και της πυκνότητας καταστάσεων, αλλά το πλάτος αλλάζει σε

$$V_{fi} = \left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle + \sum_{k \neq i} \frac{\left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_k \right\rangle \left\langle \psi_k \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle}{E_i - E_k}$$

Αυτό αντιπροσωπεύει την μετάβαση από την αρχική κατάσταση i, σε μια ενδιάμεση κατάσταση k και κατόπιν από την k στην τελική κατάσταση f.

Ο παρονομαστής στην $\dfrac{\left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_k \right\rangle \left\langle \psi_k \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle}{E_i - E_k}$ κάνει την συνεισφορά μικρή αν ΔΕ μεγάλη

Κάτι ανάλογο εμφανίζεται στην περίπτωση των διαγραμμάτων Feynman. Η ενδιάμεση κατάσταση είναι ένα virtual σωματίδιο. Αν η μάζα του δυνητικού σωματιδίου είναι διαφορετική από την φυσική μάζα του σωματιδίου τότε το πλάτος της μετάβασης (από το διάγραμμα) είναι μικρό

Είναι επίσης δυνατό να υπάρξει μετάβαση μέσω δυο ενδιάμεσων καταστάσεων. Αυτό προσθέτει επιπλέον όρους στο πλάτος ή το πινακοστοιχείο. Αυτό ονομάζεται ανάπτυγμα Born.

Χρησιμοποιώντας μόνο τον όρο $\left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle$ είναι ο 1ος όρος της προσέγγισης Born

Πυκνότητα καταστάσεων

Σκέδαση από σταθερό δυναμικό

Χρυσός κανόνας του Fermi – Fermi's Golden Rule

Ο ρυθμός μετάβασης από μια αρχική κατάσταση S σε μια κατάσταση k

είναι το τετράγωνο του πινακοστοιχείου: $V_{kS} = \langle \psi_k | V | \psi_S \rangle$

επί την πυκνότητα καταστάσεων ενέργειας, $\rho(E_S) = dN/dE_S$ με ένα παράγοντα $2\pi/\hbar$

$$\boxed{\Gamma = \frac{dP}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kS}|^2 \rho(E_S)}$$

Η βασική υπόθεση (η οποία ισχύει σχεδόν πάντοτε) είναι ότι το πινακοστοιχείο και η πυκνότητα καταστάσεων είναι ουσιαστικά σταθερά για ένα πολύ μικρό εύρος ενεργειών γύρω από την ενέργεια ενδιαφέροντος

Για την χρησιμότητα του αποτελέσματος και την ευρεία εφαρμογή του, ο Fermi το ονόμασε χρυσό κανόνα

Κανονικοποίηση - I

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε απλά επίπεδα κύματα όταν υπολογίζουμε $V_{fi} = \left\langle \psi_f \middle| V \middle| \psi_i \right\rangle$ αλλά εκτείνονται στο άπειρο και επομένως δεν μπορούμε να τα κανονικοποίησουμε με τον συνηθισμένο τρόπο

Μια λύση είναι να έχουμε μια υπέρθεση κατανομής ορμών (συχνά Gaussian) που οδηγεί σε ένα κυματοπακέτο πεπερασμένου μεγέθους το οποίο μπορεί να κανονικοποιηθεί.

Αλλά τότε οι υπολογισμοί γίνονται πολύπλοκοι

Ο ευκολότερος τρόπος είναι να χρησιμοποιήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες

Θεωρούμε ότι τα κύματα βρίσκονται σε ένα κουτί με διαστάσεις L x L x L και κανονικοποιούμε την κυματοσυνάρτηση σε 1 μέσα σε ένα πεπερασμένο όγκο

Μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση θα έχει την τιμή: $\psi_{\vec{k}}\left(x\right) = L^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$

και επομένως το πινακοστοιχείο θα είναι: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \int d^3x \left(L^{-3/2} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\right) V\left(\vec{x}\right) \left(L^{-3/2} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right)$

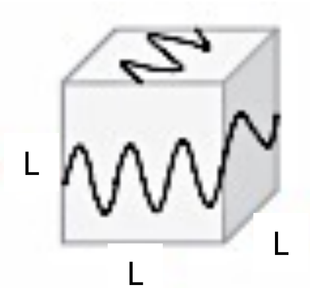
Από την οποία διαχωρίζουμε τους παράγοντες L οπότε $V_{\vec{k}'\vec{k}} = L^{-3} \int d^3x \left(e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\right) V\left(\vec{x}\right) \left(e^{+i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right)$

Το ολοκλήρωμα έχει διαστάσεις Ενέργειας (από την αλληλεπίδραση V) επί μήκος^3 (από d^{3}x)

Επομένως το πινακοστοιχείο $V_{\vec{k}'\vec{k}}$ για μια κανονικοποιημένη κυματοσυνάρτηση έχει διαστάσεις ενέργειας χωρίς οποιαδήποτε δύναμη μήκους, αλλά είναι αριθμητικά ανάλογη του L^{-3}

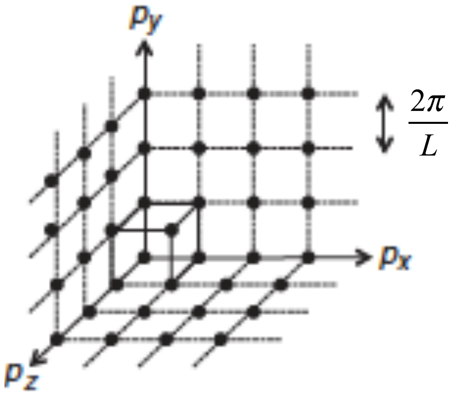
Κανονικοποίηση -II

Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες, λύνουν επίσης ένα πρόβλημα με την απαρίθμηση άπειρων καταστάσεων στον καθορισμό της πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων



Η χρήση περιοδικών συνοριακών συνθηκών υποδηλώνει ότι θα πρέπει να υπάρχει ένας ακέραιος αριθμός απο περιόδους κατά μήκος κάθε διάστασης του κουτιού. Επομένως μόνο διακεκριμένες τιμές του $\vec{k}$ επιτρέπονται:

$$\vec{k} = 2\pi\left(\hat{x}n_x + \hat{y}n_y + \hat{z}n_z\right)/L$$ για ακέραιες τιμές των n_x, n_y, n_z

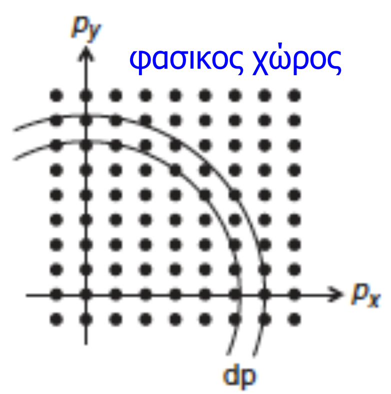


Στον k-χώρο, οι επιτρεπτές καταστάσεις είναι σημεία ενός πλεγματικού κύβου, με πλεγματικό διάστημα 2π/L.

Ο k-όγκος ανά κατάσταση είναι $V = \left(2\pi/L\right)^3$

Οι καταστάσεις με ενέργεια Ε, ικανοποιούν την: $E = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Βρίσκονται στην επιφάνειας μιας σφαίρας στον k-χώρο ακτίνας $k_E = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$



Ο όγκος της σφαίρας στον k-χώρο θα είναι: $w = \dfrac{4}{3}\pi k_E^3 = \dfrac{4\pi}{3\hbar^3}\left(2mE\right)^{3/2}$

Ο αριθμός των καταστάσεων μέσα στην σφαίρα θα είναι:

$$N_{<E} = \frac{w}{v} = \frac{4\pi}{3\hbar^3}\left(2mE\right)^{3/2}\frac{L^3}{\left(2\pi\right)^3}$$

Κανονικοποίηση - ΙΙΙ

Η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων ρ(Ε) είναι η παράγωγος του Ν ως προς Ε:

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{d}{dE}\left[\frac{4\pi}{3\hbar^3}(2mE)^{3/2}\frac{L^3}{(2\pi)^3}\right] = \frac{4\pi}{3\hbar^3}\frac{L^3}{(2\pi)^3}(2m)^{3/2}\frac{3}{2}E^{1/2} = \frac{L^3}{3\hbar^3}\frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi)^2}\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = \frac{L^3}{\hbar^2}\frac{mk}{2\pi^2}$$

- πρόσεξτε τον παράγοντα L^3 που εμφανίζεται

Ο χρυσός κανόνας του Fermi είναι: $\Gamma = \frac{dP}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi}\right|^2 \rho(E_i)$

Το τετράγωνο του πινακοστοιχείου $|V_{fi}|^2$, είναι αριθμητικά ανάλογο του L^{-6} από την κανονικοποίηση στο κουτί, και η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων είναι ανάλογη του L^3 από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες

Επομένως ο συνολικός ρυθμός είναι αριθμητικά ανάλογος ως προς L^{-3} όταν χρησιμοποιούμε συνοριακές συνθήκες. Διαστατικά ωστόσο είναι και πάλι 1/χρόνος

Ο παράγοντας L^{-3} απαλοίφεται όπως θα δούμε αργότερα με ανάλογο παράγοντα L^{+3} που εμφανίζεται στην αρχική κατάσταση.

Πυκνότητα καταστάσεων και η συνάρτηση δ-Dirac

Ένας διαφορετικός τρόπος υπολογισμού των ενεργειακών καταστάσεων είναι ο ακόλουθος.

Ο αριθμός των καταστάσεων στο χώρο των ορμών, p, με ενέργεια < E είναι:

$$N_{<E} = \frac{w_p}{v_p} = \frac{1}{v_p}\int \theta\left(E - \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}\right) dp_x dp_y dp_z$$

όπου θ είναι η συνάρτηση βήματος και $v_p = \left(2\pi\hbar/L\right)^3$ είναι ο όγκος μιας κατάστασης στον χώρο των ορμών.

Η πυκνότητα καταστάσεων είναι η παράγωγος αυτού ως προς E.

Η παράγωγος της συνάρτησης βήματος όμως είναι η συνάρτηση δ του Dirac.

Επομένως η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων γράφεται ως:

$$\rho\left(E\right) = \frac{dN_{<E}}{dE} = \frac{L^3}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int \delta\left(E - \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}\right) dp_x dp_y dp_z$$

Αλλά για σκέδαση από σταθερό δυναμικό, το μέτρο της τελικής ορμής προσδιορίζεται από κινηματική αλλά οι διευθύνσεις των ορμών είναι ελεύθερες. Επομένως ο υπολογισμός της ολικής ενεργού διατομής απαιτεί ολοκλήρωση ως προς όλες τις διευθύνσεις

- Αυτό εκφράζεται μέσω του τρικ της δ-συνάρτησης: απλά ολοκλήρωση ως προς τις τρεις συνιστώσες της ορμής του τελικού σωματιδίου. Το ολοκλήρωμα της πρώτης συνιστώσας μετατρέπει την δ-συνάρτηση σε πραγματική συνάρτηση, και τα ολοκληρώματα ως προς τις άλλες δυο συνιστώσες είναι ισοδύναμα με ολοκλήρωση ως προς τις γωνίες θ και φ

Θυμηθείτε ότι: $\int g\left(x\right)\delta\left(f\left(x\right)\right) = \frac{g\left(y\right)}{df/dx|_y}$ με: $f\left(x\right) = 0$ για $y = x$

Πυκνότητα καταστάσεων και η συνάρτηση δ-Dirac

Ο υπολογισμός της πυκνότητας των ενεργειακών καταστάσεων με την χρήση της δ-συνάρτησης είναι ιδιαίτερα εύχρηστος όταν υπολογίζουμε τον χρόνο διάσπασης, γιατί συνήθως χρειάζεται να ολοκληρώσουμε ως όλες τις δυνατές τελικές διευθύνσεις των σωματιδίων διάσπασης

Η μέθοδος χρησιμοποιείται εκτεταμένα όταν υπολογίζουμε διαφορικές ενεργές διατομές. Γράφουμε την ολική ενεργό διατομή, σ, χρησιμοποιώντας τον τρόπο με τις δ-συναρτήσεις και αλλάζουμε κατόπιν τις μεταβλητές:

$$dp_x dp_y dp_z \to p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi = p^2 dp d\Omega$$

Εκτελούμε το ολοκλήρωμα ως προς το μέτρο της ορμής και αυτό αλλάζει την δ-συνάρτηση. Ωστόσο δεν εκτελούμε το ολοκλήρωμα ως προς την στερεά γωνία αλλά διαιρούμε και τα δυο μέλη της εξίσωσης με dΩ.

Ενεργός διατομή και παράγοντας ροής

- Η ενεργός διατομή σκέδασης, σ, ορίζεται σαν ο αριθμός των σκεδαζόμενων σωματιδίων, ως προς τον αριθμό των σωματιδίων της δέσμης διαιρούμενα με την επιφάνεια.

  Για ένα στόχο αποτελούμενο από ένα και μόνο σωματίδιο, θα χρησιμοποιούσαμε την επιφάνεια της δέσμης. Ο ίδιος αριθμός σωματιδίων δέσμης εστιασμένα στην μισή επιφάνεια θα προκαλούσε διπλάσιο αριθμό σκεδασμένων σωματιδίων.

  Για πυκνό στόχο, θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα επιφάνειας (ίδιο με πυκνότητα αριθμού σωματιδίων στόχου επί πάχος του στόχου)

- Θα μπορούσαμε να ορίσουμε την ενεργό διατομή, σ, σαν τον αριθμό των σκεδαζόμενων σωματιδίων ανά δευτερόλεπτο, διαιρούμενα με τον αριθμό των σωματιδίων της δέσμης ανά δευτερόλεπτο, διαιρούμενα με την επιφάνεια

  Ορίζουμε σαν ροή Φ, τα σωματίδια της δέσμης ανά δευτερόλεπτο ανά μονάδα επιφάνειας

- Ο χρυσός κανόνας του Fermi, δίνει τον ρυθμό σκέδασης σωματιδίων, Γ, σε συγκεκριμένη γωνία. Θα χρειαστεί να ολοκληρώσουμε τον ρυθμό αυτό ως προς μια στερεά γωνία Ω, ώστε να βρούμε ένα πραγματικό ρυθμό γεγονότων

- Επομένως η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης είναι ο ρυθμός σκέδασης Γ, ως προς την ροή Φ.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\Gamma}{\Phi} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\left|V_{fi}\right|^2 \rho\left(E\right)}{\Phi}$$

Κανονικοποίηση της ροής και ενεργός διατομή

- Αν χρησιμοποιήσουμε την κανονικοποίηση του κουτιού για τις κυματοσυναρτήσεις, υπάρχει ένα σωματίδιο δέσμης ανα όγκο L^3.
- Το σωματίδιο κινείται με ταχύτητα $\upsilon = p/m = \hbar k/m$ και καλύπτει απόσταση L σε $T = L/\upsilon$
- Επομένως η κανονικοποίηση του κουτιού οδηγεί σε 1 σωματίδιο ανά επιφάνεια L^2 ανα χρόνο T

$$\Phi = \frac{1}{L^2 T} = \frac{1}{L^2\, L/\upsilon} = \frac{\upsilon}{L^3}$$

- Η διαφορική ενεργός διατομή θα γραφεί επομένως: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\Gamma}{\Phi} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{\upsilon}\left|V_{fi}\right|^2 \rho(E) L^3$
- Εφόσον $\left|V_{fi}\right|^2 \rho(E)$ είναι ανάλογο του L^{-3}, η εξάρτηση από το μέγεθος του κουτιού απαλοίφεται
- Θα μπορούσαμε να θέσουμε L = 1 και ο παράγοντας ροής θα είναι: $\Phi = \frac{\upsilon}{L^3} \Rightarrow \upsilon = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$
- Η μη σχετικιστική πυκνότητα καταστάσεων για ένα σωματίδιο θα δίνεται από τη σχέση:

$$\rho(E) = \frac{L^3}{\hbar^2}\frac{mk}{2\pi^2} \Rightarrow \frac{mk}{2\pi^2\hbar^2} = \frac{2mk}{(2\pi\hbar)^2}$$

- Αντικατάσταση στην εξίσωση της ενεργού διατομής για L = 1 δίνει: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\upsilon}\left[\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi}\right|^2 \rho(E)\right]$

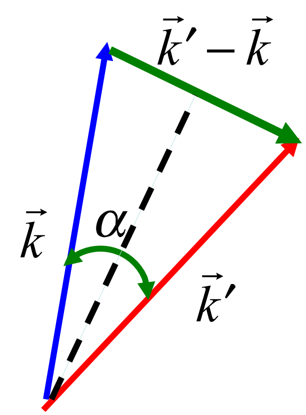
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar k}\frac{2\pi}{\hbar}\frac{mk}{2\pi^2\hbar^2}\left|V_{\vec{k}'\vec{k}}\right|^2 \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\left|V_{\vec{k}'\vec{k}}\right|^2$$

- Υπολογισμός του πινακοστοιχείου δίνει: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \left\langle \psi_{\vec{k}'} \middle| V \middle| \psi_{\vec{k}} \right\rangle = \int \left(e^{+i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\right) V(\vec{x}) \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right) d^3x$

Παράδειγμα – Σκέδαση Rutherford

- Το δυναμικό Coulomb είναι απλά: $V(r) = \dfrac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{1}{r}$
- Η άπειρη εμβέλεια του δυναμικού αυτού δημιουργεί προβλήματα στην ολοκλήρωση.
- Είναι επίσης μη φυσικό, γιατί τα άτομα έχουν ηλεκτρόνια τα οποία θωρακίζουν το δυναμικό σε μεγάλες αποστάσεις. Θα προσεγγίσουμε την θωράκιση αυτή με ένα εκθετικό εμβέλειας α

$$V(r) = \frac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}e^{-r/a}$$



- Τα πινακοστοιχεία θα είναι επομένως: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \int \left(e^{+i\vec{k}'\cdot\vec{x}}\right) V(\vec{x}) \left(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right) d^3x$

$$\Rightarrow V_{\vec{k}'\vec{k}} = \frac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\left(\frac{e^{+i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}e^{-r/a}}{r}\right)d^3x$$

- Στο όρισμα του εκθετικού $\vec{k}'$ και $\vec{k}$ έχουν το ίδιο μέτρο k, και

$\left|\vec{k}' - \vec{k}\right| = 2k\sin(\alpha/2)$ με α την γωνία σκέδασης

- Αλλάζουμε σε σφαιρικές συντεταγμένες, με τον z-άξονα στην k-διεύθυνση και γράφουμε για το εσωτερικό γινόμενο στο εκθετικό:

$$\left(\vec{k}' - \vec{k}\right)\cdot\vec{x} = \left|\vec{k}' - \vec{k}\right|\left|\vec{x}\right|\cos\theta = 2k\sin(\alpha/2)\,r\cos\theta$$

- Το ολοκλήρωμα είναι επομένως: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \dfrac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} d\varphi \int_{r=0}^{\infty} r^2\,dr \int_{\theta=0}^{\pi} \sin\theta\,d\theta\,\frac{e^{+2ik\sin(\alpha/2)r\cos\theta}e^{-r/a}}{r}$

Σκέδαση Rutherford - II

Κάνουμε πρώτα το ολοκλήρωμα ως προς θ, μετατρέποντας $\cos\theta \to u$ και $2ikr\sin(\alpha/2) \to b$

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \sin\theta\, d\theta \frac{e^{+2ik\sin(\alpha/2)r\cos\theta} e^{-r/a}}{r} = \frac{e^{-r/a}}{r} \int_{\cos\theta=+1}^{\cos\theta=-1} -d(\cos\theta) e^{+2ik\sin(\alpha/2)r\cos\theta} = \frac{e^{-r/a}}{r} \int_{u=-1}^{u=+1} d(u) e^{+bu}$$

$$= \frac{e^{-r/a}}{r} \left[\frac{e^{bu}}{b}\right]_{u=-1}^{u=+1} = \frac{e^{-r/a}}{r} \left[\frac{e^{b} - e^{-b}}{b}\right] = \frac{e^{-r/a}}{r} \left[\frac{e^{i2kr\sin(\alpha/2)} - e^{-i2kr\sin(\alpha/2)}}{2i\left(kr\sin(\alpha/2)\right)}\right] = \frac{e^{-r/a}\sin\left(kr\sin(\alpha/2)\right)}{kr^2\sin(\alpha/2)}$$

- Άρα το ολοκλήρωμα ως προς θ δίνει: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = \dfrac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0} \displaystyle\int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} d\varphi \int_{r=0}^{\infty} r^2\, dr \frac{e^{-r/a}\sin\left(kr\sin(\alpha/2)\right)}{kr^2\sin(\alpha/2)}$

Εκτελούμε τώρα το ολοκλήρωμα ως προς r αλλάζοντας μεταβλητή: $k\sin(\alpha/2) \to c$

$$\int_{r=0}^{\infty} r^2\, dr \frac{e^{-r/a}\sin\left(kr\sin(\alpha/2)\right)}{kr^2\sin(\alpha/2)} = \frac{1}{c}\int_{r=0}^{\infty} e^{-r/a}\sin(cr)\, dr = \frac{1}{c}\left[-\frac{e^{-r/a}\left\{ac\cos(cr) + \sin(cr)\right\}}{a^2c^2+1}\right]_{r=0}^{r=\infty}$$

- Το ολοκλήρωμα ώς προς r δίνει επομένως: $-\dfrac{a^2}{a^2\left(k\sin(\alpha/2)\right)^2+1}$
- Τέλος το ολοκλήρωμα ως προς φ δίνει απλά 2π
- Βάζοντας όλα τα αποτελέσματα μαζί έχουμε: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = -2\pi\dfrac{Zq^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{a^2}{a^2\left(k\sin\alpha/2\right)^2+1}$

Σκέδαση Rutherford - III

Άρα το αποτέλεσμα για το πινακοστοιχείο είναι: $V_{\vec{k}'\vec{k}} = -\frac{Zq^2}{2\varepsilon_0}\frac{a^2}{a^2k^2\sin^2(\alpha/2)+1}$

Η ενεργός διατομή σκέδασης Rutherford θα είναι:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\left|V_{\vec{k}'\vec{k}}\right|^2 = \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\left(\frac{Zq^2}{2\varepsilon_0}\right)^2\left\{\frac{a^2}{a^2k^2\sin^2(\alpha/2)+1}\right\}^2$$

Όταν η τιμή του k είναι μεγάλη (μεγαλύτερη ορμή), μπορούμε να αγνοήσουμε στον παρονομαστή τον όρο +1 του αθροίσματος με αποτέλεσμα να απλουστευθεί η εξίσωση:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{\pi}\left(\frac{Zq^2}{2\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{\hbar^4k^4\sin^4(\alpha/2)} \quad \boxed{\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{\pi}\left(\frac{Zq^2}{2\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{p^4\sin^4(\alpha/2)}}$$

Η ενεργός διατομή σκέδασης Rutherford είναι αντιστρόφως ανάλογη του p^{-4} και αν η γωνία σκέδασης είναι μικρή τότε είναι επίσης αντιστρόφως ανάλογη του θ^{-4}

- Σημειώστε ότι στο όριο των υψηλών ορμών, μπορούμε να απορροφήσουμε τον όρο ħ στην ορμή p. Έτσι, το κβαντικό αποτέλεσμα είναι ίδιο με το κλασικό αποτέλεσμα
- Καθώς η ορμή πηγαίνει στο μηδέν, η τιμή του k, πηγαίνει στο μηδέν και όρος μέσα στα άγκιστρα γίνεται απλά a^4, ανεξάρτητος της ορμής και γωνίας.
- Αυτό συμβαίνει όταν το μήκος κύματος των σωματιδίων της δέσμης είναι μεγάλο συγκρινόμενο με την ακτίνα της θωράκισης. Η ενεργός διατομή στην περίπτωση αυτή είναι: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2a^4}{\pi\hbar^4}\left(\frac{Zq^2}{2\varepsilon_0}\right)^2$