קוונטים 2 – תרגול 8

תורת ההפרעות II ו-WKB

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

תוכן העניינים

1 תורת הפרעות – חזרה

1.1 תורת הפרעות ללא ניוון

כאשר אנחנו פותרים בעיות בתורת ההפרעות אנחנו מחלקים המילטוניאן H (לרוב לא פתיר במדויק) להמילטוניאן מוכר (פתיר וסימטרי) H_0 והפרעה *קטנה* V (ששוברת את הסימטריה):

$$H = H_0 + V \tag{1.1}$$

אנחנו יודעים מנק' ההנחה שהפתרון של H_0 ידוע, עם מ"ע ואנרגיות עצמיות:

$$H_0 \left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|n^{(0)}\right\rangle \tag{1.2}$$

כאשר H_0 ו-V **לא תלויים בזמן**, אנחנו יכולים לפתח את את האנרגיות העצמיות והמ"ע של H המלא,

$$H\left|n\right\rangle = E_n \left|n\right\rangle \tag{1.3}$$

בטור חזקות של ההפרעה לפתרון של H_0,

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)} + \Delta E_n^{(2)} + \ldots \\ \left|n\right\rangle &= \left|n^{(0)}\right\rangle + \left|n^{(1)}\right\rangle + \left|n^{(2)}\right\rangle + \ldots \end{aligned} \tag{1.4}$$

כאשר החזקה (i) מסמנת את התיקון מסדר i לפתרון.
התיקון מסדר ראשון ושני לאנרגיה של המצב $\left|n\right\rangle$ הוא

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \left\langle n^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle = V_{nn} \\ \Delta E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{\left|V_{mn}\right|^2}{\Delta_{n,m}^{(0)}} \end{aligned} \tag{1.5}$$

כאשר סימנו $\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle \equiv V_{mn}$ אלמנטי המטריצה ו-$\Delta_{n,m}^{(0)} \equiv E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ ההפרש בין רמות האנרגיה הלא מופרעות.
התיקון מסדר ראשון למצב $\left|n\right\rangle$ הוא

$$\left|n^{(1)}\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{\Delta_{n,m}^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle \tag{1.6}$$

אם אין ניוון אז אין בעיה עם המכנים במשוואות (1.5) ו-(1.6).
הפיתוח ההפרעתי יהיה תקף כאשר המקדמים בטור קטנים,

$$\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle\right| \ll \left|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right| \iff \left|V_{mn}\right| \ll \left|\Delta_{n,m}^{(0)}\right| \tag{1.7}$$

1.2 תורת הפרעות עם ניוון

כאשר יש ניוון במערכת המכנה $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ במשוואות (1.5) ו-(1.6) מתאפס והתיקון להפרעות מתבדר – מה עושים?

נניח שיש לנו תת-מרחב מנוון, נסמנו $D = \left\{\left|n_a^{(0)}\right\rangle\right\}_{a=1}^{g}$ כאשר g הניוון של רמת האנרגיה $E_n^{(0)}$:

$$H_0 \left|n_a^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|n_a^{(0)}\right\rangle \tag{1.8}$$

בתת-המרחב המנוון D יש לנו חופש לעבור לבסיס אחר כרצוננו ועדיין H_0 יהיה מלוכסן ב-D עם אנרגיות $E_n^{(0)}$ – כלומר, מעבר בסיס ב-D לא משנה את H_0! זה כי כפי שראינו בעבר, כל סופרפוזיציה של $|\psi\rangle = \sum_{a=1}^{g} c_a \left|n_a^{(0)}\right\rangle$ היא גם מ"ע של H_0 עם אותה אנרגיה:

$$H_0 |\psi\rangle = \sum_{a=1}^{g} c_a H_0 \left|n_a^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \sum_{a=1}^{g} c_a \left|n_a^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} |\psi\rangle \tag{1.9}$$

אם כך, **נמצא בסיס חדש של D שבה ההפרעה V מלוכסנת.** שימו לב שאנחנו רק מלכסנים את V בתת-המרחב D, כלומר V_D – הבלוק של V השייך לתת-המרחב D – מלוכסן. לא לכסנו (בהכרח) את כל V.

נסמן את הבסיס המלכסן ב-$D = \left\{\left|n_\alpha^{(0)}\right\rangle\right\}_{\alpha=1}^{g}$, עם אינדקס α במקום a. בבסיס זה של V אין אלמנטי מטריצה לא-אלכסוניים בתת-המרחב D, כלומר $(V_D)_{\alpha\beta} = \left\langle n_\alpha^{(0)}\middle|V\middle|n_\beta^{(0)}\right\rangle = 0$ אם $\alpha \neq \beta$. אנחנו רואים שכל התרומות המסוכנות עם מכנים מתאפסים במשוואות (1.5) ו-(1.6) מלוות עם מונים שמתאפסים גם הם. בפועל צריך לחזור לפיתוח לתורת ההפרעות ולראות שכאשר V_D מלוכסן לא סוכמים את התרומות של המצבים מ-D בתיקונים.

היישום של תורת ההפרעות בתת-המרחב המנוון D בבסיס המלוכסן $\left\{\left|n_\alpha^{(0)}\right\rangle\right\}_{\alpha=1}^{g}$ הוא

$$\begin{aligned}
\Delta E_\alpha^{(1)} &= \left\langle n_\alpha^{(0)}\middle|V\middle|n_\alpha^{(0)}\right\rangle = V_{\alpha\alpha} \\
\Delta E_\alpha^{(2)} &= \sum_{m\notin D} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n_\alpha^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_\alpha^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\notin D} \frac{|V_{m\alpha}|^2}{\Delta_{\alpha,m}^{(0)}} \\
\left|n_\alpha^{(1)}\right\rangle &= \sum_{m\notin D} \frac{\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n_\alpha^{(0)}\right\rangle}{E_\alpha^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle = \sum_{m\notin D} \frac{V_{m\alpha}}{\Delta_{\alpha,m}^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle
\end{aligned} \tag{1.10}$$

כשכמובן, $E_\alpha^{(0)} = E_n^{(0)}$ לכל $\alpha \in \{1,\dots,g\}$. מכיוון ש-$m \notin D$ אין סכנה שהמונה יתאפס. שימו לב ש-$V_{\alpha\alpha}$ הם פשוט הע"ע של V_D שנמצאו בזמן הלכסון.

ייתכן ולמערכת יהיו כמה תת-מרחבים מנוונים, במקרה כזה נלכסן את כל אחד מהם בנפרד.

תרגיל 1

נתון אוסצילטור הרמוני דו-מימדי איזוטרופי בעל מסה m ותדירות ω

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x^2 + y^2\right) \tag{1.11}$$

מוסיפים הפרעה קטנה $(\lambda \ll 1)$

$$V = \lambda m\omega^2 xy \tag{1.12}$$

א. מהם המצבים העצמיים והאנרגיות העצמיות של H_0? מהו הניוון $g(n)$ של רמת האנרגיה ה-n?

ב. חשבו את התיקון מסדר ראשון ושני לאנרגיה של מצב היסוד.

ג. חשבו את התיקון מסדר ראשון ושני לאנרגיה של המצב המעורר **השני**.

ד. חשבו את התיקון מסדר ראשון למצבים הקוונטים המעוררים השניים (המצבים המתאימים ל-$E_2^{(0)}$).

ה. פתרו את הבעיה במדויק. השוו לתוצאה שקיבלתם.

א. הפתרון של הבעיה הלא מופרעת הוא פשוט שני אוסצילטורים בלתי-תלויים. המ"ע הם

$$\left|n_x, n_y^{(0)}\right\rangle \equiv \left|n_x^{(0)}\right\rangle \otimes \left|n_y^{(0)}\right\rangle \tag{1.13}$$

והאנרגיות הן סכום האנרגיות של כל אוסצילטור בנפרד,

$$E_n^{(0)} = E_{n_x}^{(0)} + E_{n_y}^{(0)} = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1\right) \tag{1.14}$$

מה הניוון? אנחנו רואים שרמות האנרגיה תלויות רק בסכום של כל אוסצילטור בנפרד,

$$n \equiv n_x + n_y \tag{1.15}$$

בהינתן n מסוים, $n_y = n - n_x$ נקבע מ-n_x ולכן הניוון הוא

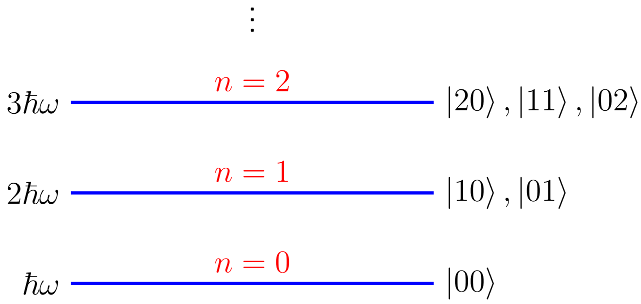
$$g_2(n) = n + 1 \tag{1.16}$$

במקרה כללי יותר בו היינו מסתכלים על מספר הקומבינציות שפותרות

$$n = n_1 + n_2 + \ldots + n_d \tag{1.17}$$

הפתרון הוא

$$g_d(n) = \binom{n+d-1}{n} = \frac{(n+d-1)!}{n!\,(d-1)!} \implies g_2(n) = \frac{(n+1)!}{n!} = n + 1 \tag{1.18}$$



איור 1: ניוון רמות האנרגיה באוסצילטור הרמוני איזוטרופי דו-מימדי.

ב. מכיוון שהמ"ע של המערכת הלא-מופרעת הם $\left|n_x, n_y^{(0)}\right\rangle$, נתרגם את ההפרעה למונחי אופרטורי סולם,

$$\begin{cases} x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_x^\dagger + a_x\right) \\ y = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_y^\dagger + a_y\right) \end{cases} \implies V = \lambda m\omega^2 xy = \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega\left(a_x^\dagger + a_x\right)\left(a_y^\dagger + a_y\right) \tag{1.19}$$

ונמצא בעזרתם כללי ברירה לאלמנט המטריצה $\langle m_x, m_y | V | n_x, n_y\rangle$ (נשמיט את החזקה $^{(0)}$ לשם הפשטות): a_i ו-$a_i^\dagger$ יכולים רק להוריד או להעלות את המצב $|n_i\rangle$, לכן כללי הברירה הם

$$m_x = n_x \pm 1, \qquad m_y = n_y \pm 1 \tag{1.20}$$

כל אלמנט מטריצה אחר יתאפס. שימו לב שהאי-זוגיות של x ו-y תחת שיקופים גוררת ש-$m_i - n_i$ צריך להיות מספר אי-זוגי, ותנאי זה כבר מתקיים.

ניגש לתיקון מצב היסוד $\left|0, 0^{(0)}\right\rangle$, שאינו מנוון. התיקון מסדר ראשון לאנרגית מצב היסוד הוא

$$\Delta E_0^{(1)} = \left\langle 0, 0^{(0)} \middle| V \middle| 0, 0^{(0)}\right\rangle = 0 \tag{1.21}$$

התיקון מסדר שני לאנרגית מצב היסוד הוא

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{|m_x, m_y\rangle \neq |00\rangle} \frac{\left|\left\langle m_x, m_y^{(0)} \middle| V \middle| 00^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_0^{(0)} - E_{m_x, m_y}^{(0)}} = \frac{\left|\left\langle 11^{(0)} \middle| V \middle| 00^{(0)}\right\rangle\right|^2}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} = -\frac{1}{8}\lambda^2\hbar\omega \tag{1.22}$$

בסה"כ

$$\boxed{E_0 = \hbar\omega\left(1 - \frac{1}{8}\lambda^2\right)} \tag{1.23}$$

ג. המצב המעורר השני מנוון, ותת-המרחב המנוון הוא $D = \{|20\rangle, |11\rangle, |02\rangle\}$ עם אנרגיה $E_2^{(0)} = 3\hbar\omega$. נלכסן את ההפרעה בתת-המרחב המנוון,

$$V_D = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} |20\rangle & |11\rangle & |02\rangle \end{array} \\ \begin{array}{c} \langle 20| \\ \langle 11| \\ \langle 02| \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{1.24}$$

שימו לב ש-$a = \langle 11|V|02\rangle = \langle 11|V|20\rangle$ כי האוסצילטור איזוטרופי ולכן אפשר להחליף בין x ו-y כאן. נחשב:

$$a = \langle 11|V|02\rangle = \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega \underbrace{\langle 1|a_x^\dagger|0\rangle}_{\sqrt{1}}\underbrace{\langle 1|a_y|2\rangle}_{\sqrt{2}} = \frac{\lambda\hbar\omega}{\sqrt{2}} \tag{1.25}$$

נלכסן את V_D:

$$V_D = \frac{\lambda\hbar\omega}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} \implies \begin{vmatrix}-\lambda&1&0\\1&-\lambda&1\\0&1&-\lambda\end{vmatrix} = -\lambda\left(\lambda^2-1\right)+\lambda = 0 \implies \lambda = 0,\pm\sqrt{2} \tag{1.26}$$

המצבים העצמיים המתאימים הם $(\alpha = +,0,-)$

$$\begin{aligned}\left|2_+^{(0)}\right\rangle &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(|20\rangle + \sqrt{2}\,|11\rangle + |02\rangle\right)\\ \left|2_0^{(0)}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|20\rangle - |02\rangle\right)\\ \left|2_-^{(0)}\right\rangle &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(|20\rangle - \sqrt{2}\,|11\rangle + |02\rangle\right)\end{aligned} \tag{1.27}$$

שימו לב שאלה *לא* התיקונים מסדר 1 למ"ע, אלא רק הבסיס החדש! התיקונים מסדר ראשון לאנרגיה הם הע"ע של V_D,

$$\Delta E_{2(\pm)}^{(1)} = \pm\lambda\hbar\omega, \qquad \Delta E_{2(0)}^{(1)} = 0 \tag{1.28}$$

נחשב את התיקונים מסדר שני לאנרגיות,

$$\Delta E_{2(\alpha)}^{(2)} = \sum_{|m_x,m_y\rangle\notin D}\frac{\left|\left\langle m_x, m_y^{(0)}\middle|V\middle|2_\alpha^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_{2(\alpha)}^{(0)} - E_{m_x,m_y}^{(0)}} = \sum_{|m_x,m_y\rangle\notin D}\frac{\left|\left\langle m_x, m_y^{(0)}\middle|V\middle|2_\alpha^{(0)}\right\rangle\right|^2}{\hbar\omega\left(2-m_x-m_y\right)} \tag{1.29}$$

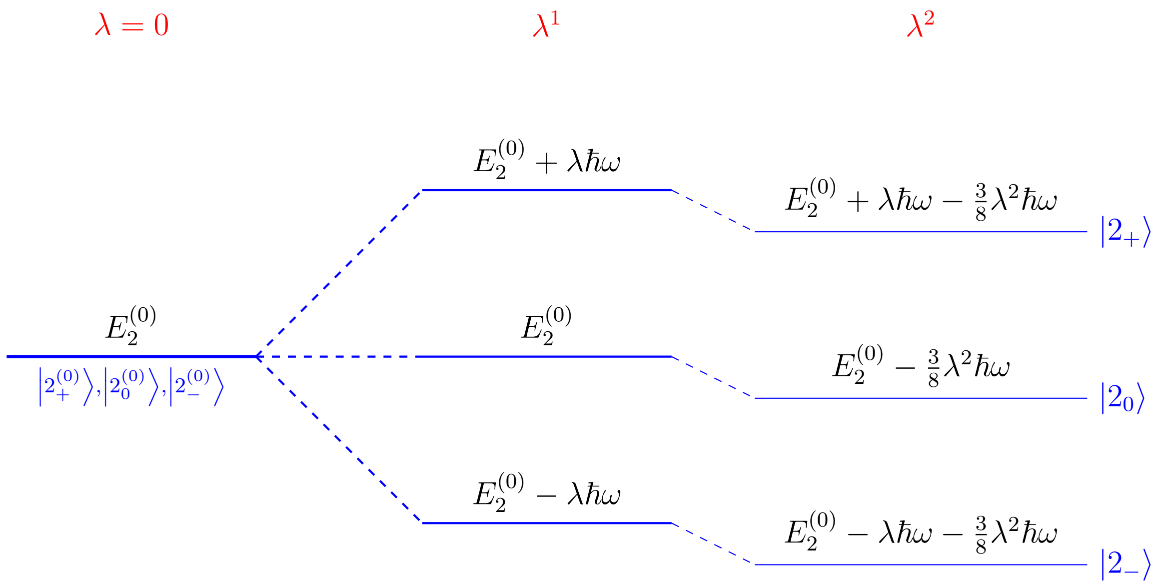
כדי להקל על החישוב, נכתוב באופן כללי כל מצב מנוון כסופרפוזיציה

$$\left|2_\alpha^{(0)}\right\rangle = a\,|20\rangle + b\,|11\rangle + c\,|02\rangle \tag{1.30}$$

כאשר $a^2+b^2+c^2=1$ מנרמול. נפעיל את כללי הברירה, בלי לשכוח ש-$|m_x,m_y\rangle \notin D$,

$$\begin{aligned}\Delta E_{2(\alpha)}^{(2)} &= \sum_{|m_x,m_y\rangle\notin D}\frac{\left|a\left\langle m_x,m_y^{(0)}\middle|V\middle|20^{(0)}\right\rangle + b\left\langle m_x,m_y^{(0)}\middle|V\middle|11^{(0)}\right\rangle + c\left\langle m_x,m_y^{(0)}\middle|V\middle|02^{(0)}\right\rangle\right|^2}{\hbar\omega\left(2-m_x-m_y\right)}\\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\left[\left(a^2+c^2\right)\frac{\left|\left\langle 31^{(0)}\middle|V\middle|20^{(0)}\right\rangle\right|^2}{2-3-1} + b^2\frac{\left|\left\langle 22^{(0)}\middle|V\middle|11^{(0)}\right\rangle\right|^2}{2-2-2} + b^2\frac{\left|\left\langle 00^{(0)}\middle|V\middle|11^{(0)}\right\rangle\right|^2}{2-0-0}\right]\\ &= \frac{\lambda^2\hbar\omega}{4}\left[-\left(a^2+c^2\right)\frac{\left|\sqrt{3}\sqrt{1}\right|^2}{2} - b^2\frac{\left|\sqrt{2}\sqrt{2}\right|^2}{2} + b^2\frac{\left|\sqrt{1}\sqrt{1}\right|^2}{2}\right]\\ &= -\frac{3}{8}\lambda^2\hbar\omega\underbrace{\left(a^2+b^2+c^2\right)}_{1} = -\frac{3}{8}\lambda^2\hbar\omega\end{aligned} \tag{1.31}$$

התיקון מסדר שני זהה לכל המצבים.



איור 2: פיצול של האנרגיות $n=2$ בסדרים של λ.

ד. התיקונים מסדר ראשון למצבים מחושבים באופן זהה לתיקונים מסדר שני לאנרגיות,

$$\begin{aligned}
\left|2_\alpha^{(1)}\right\rangle &= \sum_{|m_x,m_y\rangle \neq D} \frac{\left\langle m_x, m_y^{(0)} \middle| V \middle| 2_\alpha^{(0)} \right\rangle}{E_{2(\alpha)}^{(0)} - E_{m_x,m_y}^{(0)}} \left|m_x, m_y^{(0)}\right\rangle \\
&= \frac{\lambda}{2}\left[a\frac{\left\langle 31^{(0)}\middle|V\middle|20^{(0)}\right\rangle}{2-3-1}\left|31^{(0)}\right\rangle + c\frac{\left\langle 13^{(0)}\middle|V\middle|02^{(0)}\right\rangle}{2-3-1}\left|13^{(0)}\right\rangle\right. \\
&\qquad \left. +b\frac{\left\langle 22^{(0)}\middle|V\middle|11^{(0)}\right\rangle}{2-2-2}\left|22^{(0)}\right\rangle + b\frac{\left\langle 00^{(0)}\middle|V\middle|11^{(0)}\right\rangle}{2-0-0}\left|00^{(0)}\right\rangle\right] \\
&= \frac{\lambda}{2}\left[-a\frac{\sqrt{3}}{2}\left|31^{(0)}\right\rangle - c\frac{\sqrt{3}}{2}\left|13^{(0)}\right\rangle - b\frac{2}{2}\left|22^{(0)}\right\rangle + b\frac{1}{2}\left|00^{(0)}\right\rangle\right] \\
&= \frac{\lambda}{4}\left[\sqrt{3}\left(a\left|31^{(0)}\right\rangle + c\left|13^{(0)}\right\rangle\right) + b\left(\left|00^{(0)}\right\rangle - 2\left|22^{(0)}\right\rangle\right)\right]
\end{aligned} \tag{1.32}$$

נציב את a, b, c המתאימים,

$$\boxed{\begin{cases}
\left|2_+^{(1)}\right\rangle = \frac{\lambda}{8}\left[\sqrt{3}\left(\left|31^{(0)}\right\rangle + \left|13^{(0)}\right\rangle\right) + \sqrt{2}\left(\left|00^{(0)}\right\rangle - 2\left|22^{(0)}\right\rangle\right)\right] \\
\left|2_0^{(1)}\right\rangle = \frac{\lambda}{4}\sqrt{\frac{3}{2}}\left(\left|31^{(0)}\right\rangle - \left|13^{(0)}\right\rangle\right) \\
\left|2_-^{(1)}\right\rangle = \frac{\lambda}{8}\left[\sqrt{3}\left(\left|31^{(0)}\right\rangle + \left|13^{(0)}\right\rangle\right) - \sqrt{2}\left(\left|00^{(0)}\right\rangle - 2\left|22^{(0)}\right\rangle\right)\right]
\end{cases}} \tag{1.33}$$

ה. נעבור לקואורדינטות נורמליות:

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+y\right), \quad P_X = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(p_x+p_y\right)$$
$$Y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-y\right), \quad P_Y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(p_x-p_y\right) \tag{1.34}$$

במונחי האופרטורים החדשים ההמילטוניאן הוא שני אוסצילטורים הרמוניים *בלתי תלויים*,

$$H = \frac{P_X^2}{2m} + \frac{1}{2}m\underbrace{\omega^2\left(1+\lambda\right)}_{\Omega_X^2}X^2 + \frac{P_Y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\underbrace{\omega^2\left(1-\lambda\right)}_{\Omega_Y^2}Y^2 \tag{1.35}$$

עם שתי תדירויות שונות,

$$\Omega_X = \sqrt{1+\lambda}\omega, \qquad \Omega_Y = \sqrt{1-\lambda}\omega \tag{1.36}$$

ההמילטוניאן ניתן להפרדה $H = H_X + H_Y$ ולכן האנרגיות העצמיות הן הסכום

$$E = \hbar\Omega_X\left(n_X+\frac{1}{2}\right) + \hbar\Omega_Y\left(n_Y+\frac{1}{2}\right) \tag{1.37}$$

נבדוק מול התוצאות שקיבלנו: עבור $\lambda \ll 1$ נפתח את התדירויות בטור טיילור

$$\Omega_X \simeq \left(1+\frac{1}{2}\lambda-\frac{1}{8}\lambda^2\right)\omega, \qquad \Omega_y \simeq \left(1-\frac{1}{2}\lambda-\frac{1}{8}\lambda^2\right)\omega \tag{1.38}$$

ולכן האנרגיות הן

$$E_{n_X,n_Y} \simeq \hbar\omega\left[\left(n_X+n_Y+1\right)+\frac{1}{2}\lambda\left(n_X-n_Y\right)-\frac{1}{8}\lambda^2\left(n_X+n_Y+1\right)\right] \tag{1.39}$$

רמת היסוד היא $n_X = n_Y = 0$ ונקבל

$$E_{0,0} \simeq \hbar\omega\left(1-\frac{1}{8}\lambda^2\right) \tag{1.40}$$

הרמות המעוררות השניות מקיימות $n_X + n_Y = 2$ ואכן

$$E_{2,0} \simeq \hbar\omega\left(3+\lambda-\frac{3}{8}\lambda^2\right), \qquad E_{1,1} \simeq \hbar\omega\left(3-\frac{3}{8}\lambda^2\right), \qquad E_{0,2} \simeq \hbar\omega\left(3-\lambda-\frac{3}{8}\lambda^2\right) \tag{1.41}$$

אלו בדיוק אותם תיקונים שקיבלנו מתורת ההפרעות.

תרגיל 2 (דיאמגנטיות)

אטום הליום נמצא תחת השפעת שדה מגנטי חיצוני $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ (בחרו את הפוטנציאל הוקטורי $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$). התעלמו מהאינטראקציה האלקטרוסטטית בין האלקטרונים.

א. כתבו את ההמילטוניאן בתור סכום של המילטוניאן של הליום לא מופרע (ללא אינטראקציה בין האלקטרונים), איבר זימן ועוד הפרעה.

ב. חשבו את התיקון מסדר ראשון בתורת ההפרעות לאנרגית היסוד.

א. ההמילטוניאן של אטום הליום בנוכחות שדה מגנטי (וללא אינטראקציה חשמלית בין האלקטרונים) הוא

$$H = \frac{\left[\mathbf{p}_1 - \frac{q_e}{c}\mathbf{A}\right]^2}{2m} + q_e\frac{2e}{r_1} + \frac{\left[\mathbf{p}_2 - \frac{q_e}{c}\mathbf{A}\right]^2}{2m} + q_e\frac{2e}{r_2} + \underbrace{g_e\frac{eB}{2mc}\left(S_{1z} + S_{2z}\right)}_{-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}} \tag{1.42}$$

כאשר $q_e = -e$ מטען האלקטרון ו-$g_e = 2$ מומנט הדיפול המגנטי. נפתח את הסוגריים עבור האיבר הקינטי (חשבו מדוע כאן $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$),

$$\frac{\left[\mathbf{p}_i + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right]^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left[p_i^2 + 2\frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_i + \left(\frac{e}{c}A\right)^2\right] \tag{1.43}$$

נחשב את $2\frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_i$:

$$2\frac{e}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_i = 2\frac{e}{c}\left(\frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}_i\right)\cdot\mathbf{p}_i = \frac{e}{c}\left(\mathbf{r}_i\times\mathbf{p}_i\right)\cdot\mathbf{B} = \frac{e}{c}\mathbf{L}_i\cdot\mathbf{B} \tag{1.44}$$

נחשב את A^2:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r} \implies A^2 = \frac{1}{4}B^2r^2 = \frac{B^2}{4}\left(x^2+y^2\right) \tag{1.45}$$

ולכן קיבלנו

$$H = \sum_{i=1}^{2}\left\{\underbrace{\frac{p_i^2}{2m} - \frac{e^2}{r_i}}_{H_0} + \underbrace{\frac{eB}{2mc}\left(L_{iz} + g_eS_{iz}\right)}_{\text{Zeeman}} + \underbrace{\frac{e^2B^2}{8mc^2}\left(x_i^2+y_i^2\right)}_{V_A}\right\} \tag{1.46}$$

ב. מצב היסוד של הליום (ללא השדה המגנטי) הוא

$$|\Psi_{\text{GS}}\rangle = |100;100\rangle \otimes |\text{Singlet}\rangle \tag{1.47}$$

במצב היסוד $L_i = 0$ ו-$S_{\text{tot}} = S_1 + S_2 = 0$ (סינגלט) ולכן אין תרומה מאיבר זימן בסדר ראשון בתורת ההפרעות, ורק יתרום V_A:

$$\Delta E_{100}^{(1)} = \langle\Psi_{\text{GS}}|V_A|\Psi_{\text{GS}}\rangle = 2\cdot\frac{e^2B^2}{8mc^2}\langle 100|\left(x^2+y^2\right)|100\rangle = \frac{e^2B^2}{4mc^2}\cdot\frac{2}{3}\langle 100|r^2|100\rangle \tag{1.48}$$

נחשב את האיבר האחרון:

$$\langle 100|r^2|100\rangle = 4\pi \int \left[\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}\right]^2 r^4 \,\mathrm{d}r = \frac{a_0^2}{8} \underbrace{\int_0^\infty \rho^4 e^{-\rho} \,\mathrm{d}\rho}_{4!} = 3a_0^2 \tag{1.49}$$

ולכן:

$$\boxed{\Delta E_{\mathrm{GS}}^{(1)} = \frac{e^2 B^2}{2mc^2} a_0^2} \tag{1.50}$$

הליום הוא **דיאמגנטי**. למעשה זה נכון לכל האטומים שמצב היסוד שלהם הוא $^1S_0$ (גזים אצילים ומתכות אלקליות).

2 קירוב WKB

שיטת WKB היא קירוב סמי-קלאסי. כאשר הפוטנציאל משתנה לאט על-פני אורך גל, כלומר

$$\frac{\delta V}{V} \ll 1 \tag{2.1}$$

אז אפשר לקרב את פונקצית הגל של חלקיק עם אנרגיה E (**באזור הקלאסי**, $E > V\left(x\right)$):

$$\boxed{\psi_{\pm}\left(x\right) \approx \frac{1}{\sqrt{p\left(x\right)}} \exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p\left(x\right) \mathrm{d}x\right]} \tag{2.2}$$

כאשר $p\left(x\right)$ היא הנוסחא לתנע הקלאסי

$$p\left(x\right) = \sqrt{2m\left[E - V\left(x\right)\right]} \tag{2.3}$$

פתרון כללי למשוואת שרדינגר יהיה סופרפוזיציה של שני הפתרונות,

$$\psi\left(x\right) \simeq C_1\psi_{+}\left(x\right) + C_2\psi_{-}\left(x\right) \tag{2.4}$$

עבור פוטנציאל התחום בין שני קירות קשיחים (אחד ב-x_1 והשני ב-x_2) מתקבל תנאי הקוונטיזציה

$$\int_{x_1}^{x_2} p\left(x\right) \mathrm{d}x = n\pi\hbar \tag{2.5}$$

בתוך מחסום פוטנציאל (**האזור הלא-קלאסי**, $E < V\left(x\right)$) קירוב WKB מאפשר לנו לחשב את מקדם ההעברה

$$T \approx e^{-2\gamma} \tag{2.6}$$

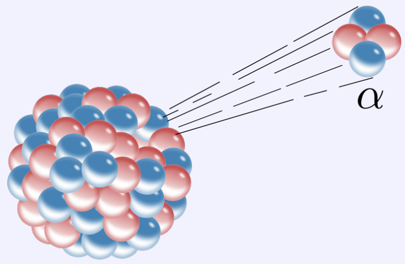
כאשר γ האקספוננט של פונקצית הגל,

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \left|p\left(x\right)\right| \mathrm{d}x \tag{2.7}$$

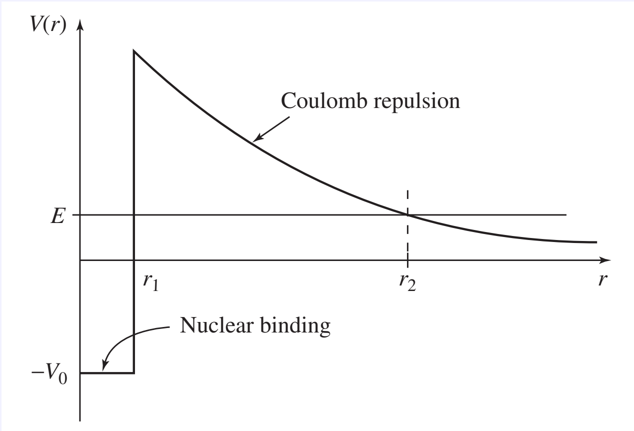
כש-x_1 ו-x_2 הן **נקודות המפנה** עבורן $E = V \iff p = 0$. שימו לב ש-p מדומה באזור זה.

תרגיל 3 (דעיכת אלפא, החישוב של Gamow)

בדעיכת אלפא חלקיק α (המורכב משני פרוטונים ושני ניוטרונים, מטען כולל $+2e$) מתמנהר דרך מחסום פוטנציאל גרעיני ולאחר מכן נדחה על-ידי המטען החשמלי של הגרעין.



בשאלה זו נקרב את מחסום הפוטנציאל הגרעיני להיות בור פוטנציאל סופי בעומק V_0 ורדיוס r_1. נפתור את הבעיה החד-מימדית האפקטיבית עבור חלקיק אלפא בבור פוטנציאל כזה.



א. כתבו את הפוטנציאל המלא כפונקציה של r.

ב. חשבו את אמפליטודת המנהור עבור חלקיק α עם אנרגיה E.

ג. העריכו את קצב הדעיכה.

א. בתוך הגרעין חלקיק ה-α מרגיש רק בכוח החזק שמחזיק את הגרעין, אותו אנחנו מקרבים עם פוטנציאל קבוע $-V_0$. לאחר שיצא מהגרעין חלקיק ה-α מרגיש במטען החשמלי של **גרעין הבת**, הגרעין המקורי (**גרעין האם**) פחות שני פרוטונים וניוטרונים (גרעין הליום). נניח שלגרעין הבת Z פרוטונים, ולכן המטען החשמלי שמרגיש חלקיק ה-α (שיש לו שני פרוטונים ולכן מטען $+2e$) הוא $+Ze$:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & 0 < r < r_1 \\ \frac{2Ze^2}{r} & r > r_1 \end{cases} \tag{2.8}$$

ב. לפי קירוב WKB, קודם נמצא את נקודות המפנה כדי לחשב את γ. נקודת מפנה אחת היא כמובן ב-r_1, והשנייה באזור הקולומבי

$$E = \frac{2Ze^2}{r_2} \implies r_2 = \frac{2Ze^2}{E} \tag{2.9}$$

נחשב את γ בתוך מחסום הפוטנציאל:

$$\gamma=\frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m\left[V\left(r\right)-E\right]}\,\mathrm{d}r=\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{2Ze^2}{r}-E}\,\mathrm{d}r=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{r_2}{r}-1}\,\mathrm{d}r \tag{2.10}$$

נחשב את האינטגרל, למשל ע"י ההצבה $\cos^2 x=r/r_2$, ונקבל

$$\gamma=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\arccos\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}-\sqrt{r_1\left(r_2-r_1\right)}\right] \tag{2.11}$$

רדיוס הגרעין $r_1\sim 1\,\mathrm{fm}=10^{-15}\,\mathrm{m}$ לרוב קטן בהרבה מ-r_2 (ככל ש-E קטן r_2 גדל), ולכן נקרב $r_2\gg r_1$ ונקבל

$$\boxed{\gamma\approx\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2-\sqrt{r_1r_2}\right]=K_1\frac{Z}{\sqrt{E}}-K_2\sqrt{Zr_1}} \tag{2.12}$$

כאשר הגדרנו

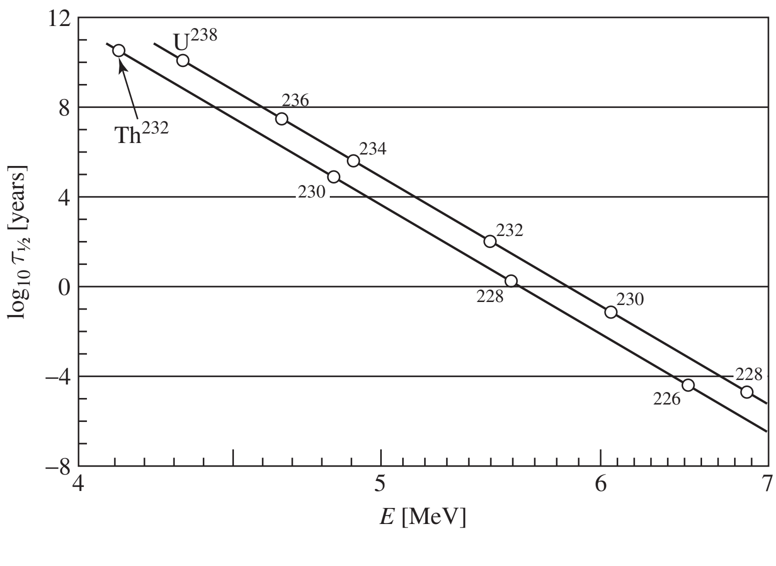
$$K_1\equiv e^2\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar}\approx 1.98\,\mathrm{MeV}^{1/2},\qquad K_2\equiv e\frac{4\sqrt{m}}{\hbar}\approx 1.49\,\mathrm{fm}^{-1/2} \tag{2.13}$$

אמפליטות המנהור היא $T\approx e^{-2\gamma}$.

ג. אנחנו יודעים שכאשר α פוגע ב"קירות" הגרעין הוא מתמנהר לצד השני בהסתברות של $e^{-2\gamma}$. כדי להעריך את קצב הדעיכה נותר לנו לחשב את התדירות ν שבה α "מתנגש" בקירות. אנחנו נתייחס ל-α כאילו הוא נע בתוך הבור הלוך וחזור במהירות ממוצעת v, ולכן הזמן הממוצע בין התנגשויות עוקבות בקיר הוא $2r_1/v$. תדירות ההתנגשויות היא אז $\nu=v/2r_1$, ולכן קצב המנהור (הוא קצב הדעיכה של גרעין האם) הוא

$$\Gamma\approx\frac{v}{2r_1}e^{-2\gamma}\iff\tau=\frac{1}{\Gamma}\approx\frac{2r_1}{v}e^{2\gamma} \tag{2.14}$$

אמנם אנחנו לא יודעים להעריך את v, אבל השינוי באקספוננט משמעותי הרבה יותר ממנו על-פני גרעינים שונים. יתרה מכך, אם נשרטט גרף של $\log\tau$ של התוצאות הנסיוניות כפונקציה של $1/\sqrt{E}$ ($\sim\gamma$) נקבל התאמה יפה מאוד לחישוב שביצענו:



איור 3: זמן החיים τ של גרעינים כנגד $1/\sqrt{E}$ (גם הציר האופקי לוגריתמי).