הצגת הייזנברג והצגת שרדינגר

$$|\psi_s(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle$$

$$\equiv e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat H}$$

הצגת שרדינגר - פונקצית הגל משתנה בזמן (עפ"י $e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat H}$) והאופרטורים (בד"כ) לא תלויים בזמן.

האם זהו התאור היחיד האפשרי לתלות בזמן?

הגדלים המדידים (=פיזיקלים) הם ערכי התצפית, הנתונים ע"י !

אוגל שהינו!

$$\langle A(t)\rangle = \langle \psi(t)|\hat A|\psi(t)\rangle$$

$$= \langle \hat U\psi(t_0)|\hat A|\hat U\psi(t_0)\rangle$$

$$= \langle \underbrace{\psi(t_0)}|\underbrace{\hat U^\dagger \hat A\hat U}|\underbrace{\psi(t_0)}\rangle$$

$$\equiv \langle \psi_H|\hat A_H|\psi_H\rangle$$

הצגת הייזנברג

פונקצית הגל קבועה, והאופרטורים תלויים בזמן.

פונקצית הגל בהצגת הייזנברג - $|\psi_H\rangle = |\psi_s(t_0)\rangle = \hat U^{-1}|\psi_s(t)\rangle$

האופרטור בהצגת הייזנברג - $\hat A_H = \hat U^\dagger \hat A\hat U = \hat U^{-1}\hat A\hat U$.

למשל במקרה של $\hat A = \hat H$, עבורו אין תלות בזמן העוברת מהמעבר להצגת הייזנברג

$$\hat H_H = \hat U^{-1}\hat H\hat U = \underbrace{\hat H\hat U^{-1}}\hat U = \hat H$$

$$\hat H_H = \hat H$$

$\hat U = f(\hat H)$ ולכן $\hat U^{-1}\hat H = \hat H\hat U^{-1}$

ולמעשה כלל $\hat A_H = \hat A$ לכל $\hat A$ החליפי עם $\hat H$ (קבוע תנועה)

מהי משוואת התנועה עבור $\hat{A}_H(t)$?

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{d\hat{U}^{-1}}{dt}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{A}\frac{d\hat{U}}{dt} + \hat{U}^{-1}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U}$$

מכיון ש $\hat{r}$ ו $\hat{p}$ ב"ת בזמן (בתמונת שרדינגר)

$$\frac{d\hat{A}(\hat{r},\hat{p},t)}{dt} = \frac{\partial A(\hat{r},\hat{p},t)}{\partial t}$$

מהי הנגזרת בזמן של $\hat{U}$?

$$\frac{d\hat{u}(t,t_0)}{dt} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{U}(t+\varepsilon,t_0)-\hat{U}(t,t_0)}{\varepsilon}$$

$$\hat{U}(t+\varepsilon,t_0) = \hat{U}(t+\varepsilon,t)\,\hat{U}(t,t_0)$$

מקדם בזמן מ t_0 ל t מקדם בזמן מ t ל $t+\varepsilon$ מקדם בזמן מ t_0 ל $t+\varepsilon$.

$$\rightarrow \quad \frac{d\hat{u}(t,t_0)}{dt} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\left[\hat{U}(t+\varepsilon,t)-1\right]\hat{U}(t,t_0)}{\varepsilon}$$

עפ"י הגדרת $\hat{U}$

$$\hat{U}(t+\varepsilon,t) = e^{-\frac{i\varepsilon\hat{H}}{\hbar}} \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} 1-\frac{i\varepsilon\hat{H}}{\hbar}$$

נציב בביטוי ל $\frac{du}{dt}$ ונקבל

$$\frac{d\hat{u}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{u}$$

ובאותו אופן

$$\frac{d\hat{u}^{-1}}{dt} = \frac{d\hat{u}^{\dagger}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\hat{U}^{\dagger}\hat{H}^{\dagger} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}^{-1}$$

נציב בביטוי ל $\frac{d\hat{A}_H}{dt}$ ונקבל

$$\underline{\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{A}_H\right] + \frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t}} \longleftarrow \frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t} \equiv \hat{U}^{-1}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U}$$

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{A}\right] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

משוואה זהה לזו שקיבלנו עבור ההתפתחות בזמן של ערכי התצפית (בתמונת שרדינגר)

תורת ההפרעות הב"ת בזמן

במקרים מסוימים מתקיים: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$

פתיר אנליטית ← $\hat{H}_0$, $\hat{H}'$ → הפרעה "קטנה"

(לדוגמא: אפקט זימן, אפקט שטרק, פיצול רמות בהתחשב ב $\vec{L}\cdot\vec{S}$)

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$$

$$\hat{H}_0\varphi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\varphi_n^{(0)}$$

הנחת רציפות ← הפרעה קטנה ל $\hat{H}$ גוררת שינוי קטן ל φ_n ול E_n

$$\frac{\varphi_n - \varphi_n^{(0)}}{\varphi_n} \ll 1 \quad , \quad \frac{E_n - E_n^{(0)}}{E_n} \ll 1$$

פיתוח ב λ

נרשום $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}'$

כאשר $\hat{H}'$ מסדר גודל של $\hat{H}$, אבל $\lambda \ll 1$.

ונחפש פתרונות מהצורה

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

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

נציב במשוואת שרדינגר

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}')(\varphi_n^{(0)} + \lambda\varphi_n^{(1)} + \lambda^2\varphi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)\cdot(\varphi_n^{(0)} + \lambda\varphi_n^{(1)} + \dots)$$

נכנס איברים עם אותו מקדם

$$\left[\hat{H}_0\varphi_n^{(0)} - E_n^{(0)}\varphi_n^{(0)}\right] + \lambda\left[\hat{H}_0\varphi_n^{(1)} + \hat{H}'\varphi_n^{(0)} - E_n^{(0)}\varphi_n^{(1)} - E_n^{(1)}\varphi_n^{(0)}\right]$$
$$+\lambda^2\left[\hat{H}_0\varphi_n^{(2)} + \hat{H}'\varphi_n^{(1)} - E_n^{(0)}\varphi_n^{(2)} - E_n^{(1)}\varphi_n^{(1)} - E_n^{(2)}\varphi_n^{(0)}\right]$$
$$+\lambda^3[\dots] + \dots = 0$$

נחפש פתרון ל λ כלשהו (המקדים ו־λ), כלומר λ שרירותי.

← כל אחד מהאיברים הכופלים את λ^n יתאפס בנפרד.

נקבל C_0 משוואות מצומדות ל $\varphi_n^{(i)}, E_n^{(i)}$.

$$\hat{H}_0\varphi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\varphi_n^{(0)} \qquad \underline{\lambda^0}$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\varphi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}')\varphi_n^{(0)} \qquad \underline{\lambda^1}$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\varphi_n^{(2)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}')\varphi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\varphi_n^{(0)} \qquad \underline{\lambda^2}$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\varphi_n^{(3)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}')\varphi_n^{(2)} + E_n^{(2)}\varphi_n^{(1)} + E_n^{(3)}\varphi_n^{(0)} \qquad \underline{\lambda^3}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad \underline{\lambda^n}$$

אם $\varphi_n^{(1)}$ מסוים פותר את המשוואה השנייה (ל λ')

אזי גם $\varphi_n^{(1)} + a\varphi_n^{(0)}$ הוא פתרון (= תוספת אפס לצד שמאל)

← הפתרון ל $\varphi_n^{(1)}$ לא חד ערכי!

על מנת לקבל פתרונות חד ערכיים נשתמש בתנאי נוסף

לכל n, עבור $i>0$: $\quad \langle\varphi_n^{(i)}|\varphi_n^{(0)}\rangle = 0$

מכיון ש $\{\varphi_n^{(0)}\}$ מהווה C_0 שלם, ניתן לרשום

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_i C_{ni}|\varphi_i^{(0)}\rangle$$

נציב במשוואה ל $|\varphi_n^{(1)}\rangle$

תזכורת

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\sum_i C_{ni}|\varphi_i^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}')|\varphi_n^{(0)}\rangle$$

$$\hat{H}_0|\varphi_i^{(0)}\rangle = E_i^{(0)}|\varphi_i^{(0)}\rangle$$

נכפול משמאל ב $\langle\varphi_j^{(0)}|$ ונקבל

$$(E_j^{(0)} - E_n^{(0)})C_{nj} = E_n^{(1)}\delta_{nj} - H'_{jn}$$

$$\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_n^{(0)}\rangle$$

תיקון מסדר ראשון

מהם $E_n^{(1)}$ ו $\varphi_n^{(1)}$?

המקדמים בפיתוח של $\varphi_n^{(1)}$ נתונים בביטוי לע"ל

עבור $j\neq n$

$$c_{nj} = \frac{H'_{jn}}{E_n^{(0)}-E_j^{(0)}}$$

עבור $j=n$

הביטוי לע"ל יתן אפס במכנה, ולכן מהתנאי

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

נקבל $C_{nn}=0$ - לאמור חפיפה בין $\varphi_n^{(1)}$ ו $\varphi_n^{(0)}$.

הביטוי לע"ל $(E_n^{(0)}-E_n^{(0)})C_{nn} = E_n^{(1)}-H'_{nn}$

נותן $\underline{E_n^{(1)}=H'_{nn}}$ (אנרגית ההפרדה = ערך התצפית של H')

הפונקציות העצמיות והערכים העצמיים של $H=H_0+H'$

בקרוב תיקון מסדר ראשון הם

$$\varphi_n = \varphi_n^{(0)} + \underbrace{\sum_{i\neq n}\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}\varphi_i^{(0)}}_{\varphi_n^{(1)}}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn}$$

על מנת שיתקיים התנאי הראשון שהנחנו $\frac{\varphi_n-\varphi_n^{(0)}}{\varphi_n}\ll 1$

צריך להתקיים ש $\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}\ll 1$ (המקדמים של $\varphi_n^{(1)}$)

ומהתנאי $\frac{E_n-E_n^{(0)}}{E_n}\ll 1$ נקבל $\frac{H'_{nn}}{E_n^{(0)}}\ll 1$ $\left(\frac{H'_{nn}}{H_{0nn}}=\right)$

זאת המשמעות הכמותית של $\lambda\hat{H}'\ll\hat{H}_0$

תיקון מספר שני

חישוב $E_n^{(2)}$ ו $\varphi_n^{(2)}$.

נפתח את $\varphi_n^{(2)}$ באמצעות הפונקציות העצמיות של $\hat{H}_0$

$$\varphi_n^{(2)}=\sum_i d_{ni}\varphi_i^{(0)}$$

ונציב במשוואה ל $\varphi_n^{(2)}$ (משוואת המקדמים של λ^2)

$$(\hat{H}_0-E_n^{(0)})\sum_i d_{ni}\varphi_i^{(0)}=(E_n^{(1)}-\hat{H}')\varphi_n^{(1)}+E_n^{(2)}\varphi_n^{(0)}$$

נכפול משמאל ב $\langle\varphi_j^{(0)}|$ ונקבל

$$\underbrace{(E_j^{(0)}-E_n^{(0)})}_{=0}d_{nj}+\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(2)}\underbrace{\delta_{jn}}_{=1}+E_n^{(1)}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle}_{=0}$$

עבור $j=n$

$$\rightarrow\quad E_n^{(2)}=\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_n^{(1)}\rangle$$

$$=\sum_{i\neq n}\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{H}'\cdot\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}|\varphi_i^{(0)}\rangle$$

$$=\sum_{i\neq n}\frac{H'_{in}}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}\underbrace{\langle\varphi_n^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_i^{(0)}\rangle}_{=H'_{ni}=H'^{*}_{in}\ (=H'^{+}_{ni})}$$

התיקון לאנרגיה:

$$\boxed{E_n^{(2)}=\sum_{i\neq n}\frac{|H'_{in}|^2}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}}}$$

עבור $n=1$ $E_1^{(2)}$ תמיד ש.ל., רמות קרובות (חזק) משפיעות במיוחד על $E_n^{(2)}$

התיקון לפונקצית הגל

נמצא את d_{ni} מהמשוואה ל $\varphi_n^{(2)}$ כאשר $j\neq n$.

(אופרטור)

$$(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})d_{nj}=\langle\varphi_j^{(0)}|\hat{H}'\sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}|\varphi_k^{(0)}\rangle$$

(מספר k)

$$\xrightarrow{E_n^{(1)}}\ -H'_{nn}\underbrace{\langle\varphi_j^{(0)}|\sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}|\varphi_k^{(0)}\rangle}_{\delta_{jk}}$$

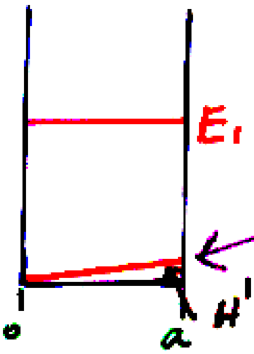
סה"כ נקבל עבור d_{nj}

$$d_{nj}=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_j^{(0)}}\left[\sum_{k\neq n}\frac{H'_{jk}H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}-\frac{H'_{nn}H'_{jn}}{E_n^{(0)}-E_j^{(0)}}\right]$$

והתיקון לפונקציות הגל

$$\varphi_n^{(2)}=-H'_{nn}\sum_{i\neq n}\frac{H'_{in}\cdot\varphi_i^{(0)}}{\left(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\right)^2}+\sum_{i\neq n}\sum_{k\neq n}\frac{H'_{ik}H'_{kn}\cdot\varphi_i^{(0)}}{\left(E_n^{(0)}-E_i^{(0)}\right)\cdot\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}$$

דוגמא/



נתון חלקיק בבור חד מימדי אינסופי בין 0 ל a. תחתית הבור אינה שטוחה

$$\hat{H}=\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}_{\hat{H}_0}+\underbrace{0.1E_1\frac{x}{a}}_{\hat{H}'}$$

<u>מהו התיקון מסדר ראשון לרמות האנרגיה</u> ?

$E_n^{(0)}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}$, $\varphi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ – הפתרונות עבור $\hat{H}_0$.

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{0.1E_1}{a}\int_0^a x\,\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}\,dx$$

$$\left(\int x\sin^2 bx\,dx=\frac{x^2}{4}-\frac{x\sin 2bx}{4b}-\frac{\cos 2bx}{8b^2}\right)$$

$$=\frac{0.1E_1}{a}\cdot\frac{2}{a}\cdot\frac{a^2}{4}$$

$$\underline{E_n^{(1)}=0.05E_1}$$

הזזה באותו פקטור לכל רמות האנרגיה $\quad\underline{E_n=(n^2+0.05)E_1}$

דוגמא נוספת

מהן רמות האנרגיה של חלקיק הנתון בפוטנציאל:

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2+k'x^4$$

$$\longrightarrow \quad \hat H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}k\hat x^2 \;, \quad \hat H'=k'\hat x^4$$

$\hat H_0$ - מתאר הרמוני חד מימדי $\leftarrow$ $E_n^{(0)}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$

$\omega_0^2=k/m$ $\qquad$ $\hat H_0$ ע"ע $|\psi_n\rangle$

צריך לחשב את: $E_n^{(1)}=H'_{nn}=\langle n|k'\hat x^4|n\rangle$

נבטא את $\hat x$ באמצעות a ו- $a^\dagger$ $\qquad$ $\hat x=\frac{\hat a+\hat a^\dagger}{\sqrt2\,\beta}\;,\quad \beta^2\equiv\frac{m\omega_0}{\hbar}$

לכן $\hat H'$ נתון ע"י $\hat H'=\frac{k'}{4\beta^4}(\hat a+\hat a^\dagger)^4$

נפתח את הביטוי של $(\hat a+\hat a^\dagger)^4$

$$(\hat a+\hat a^\dagger)(\hat a+\hat a^\dagger)=aa+aa^\dagger+a^\dagger a+a^\dagger a^\dagger$$

$$\to (a+a^\dagger)^4=(aa+aa^\dagger+a^\dagger a+a^\dagger a^\dagger)(aa+aa^\dagger+a^\dagger a+a^\dagger a^\dagger)$$

$$\begin{aligned}&=aaaa+aaaa^\dagger+aaa^\dagger a+\underline{aaa^\dagger a^\dagger}\\&+aa^\dagger aa+\underline{aa^\dagger aa^\dagger}+\underline{aa^\dagger a^\dagger a}+aa^\dagger a^\dagger a^\dagger\\&+a^\dagger aaa+\underline{a^\dagger aaa^\dagger}+\underline{a^\dagger aa^\dagger a}+a^\dagger aa^\dagger a^\dagger\\&+\underline{a^\dagger a^\dagger aa}+a^\dagger a^\dagger aa^\dagger+a^\dagger a^\dagger a^\dagger a+a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger\end{aligned}$$

הביטוי $\langle n|(\hat a+\hat a^\dagger)^4|n\rangle$ לא יתאפס בתנאי שיש מספר שווה של $\hat a$ ו- $\hat a^\dagger$ באיבר המסוים (מסומן ב- —)

מכיוון ש $\hat a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\;,\quad \hat a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$

נקבל

$$\langle n|aaa^\dagger a^\dagger|n\rangle=(n+1)(n+2)\;,\quad \langle n|a^\dagger aaa^\dagger|n\rangle=(n+1)n$$

$$\langle n|aa^\dagger aa^\dagger|n\rangle=(n+1)^2\;,\quad \langle n|a^\dagger aa^\dagger a|n\rangle=n^2$$

$$\langle n|aa^\dagger a^\dagger a|n\rangle=n(n+1)\;,\quad \langle n|a^\dagger a^\dagger aa|n\rangle=n(n-1)$$

$$\to E_n^{(1)}=\frac{k'}{4\beta^4}\langle n|\hat H'|n\rangle=\frac{k'}{4\beta^2}\left[(n+1)(n+2)+(n+1)^2+2n(n+1)+n^2+n(n-1)\right]$$

$$=\frac{3k'}{4\beta^2}\left[2n(n+1)+1\right]$$

האם הפתרון נכון לכל k' ולכל n ?