חזרה על הפורמליזם הקוונטי

המצב של מערכת פיסיקלית מיוצג על ידי וקטור $|\psi\rangle$ במרחב הילברט, אך לא באופן יחיד על ידי קבוע - אותו המצב מתקבל מ $|\psi\rangle$ על ידי הכפלה בקבוע פאזה מרוכב $|\psi\rangle e^{i\alpha}$, (כאשר $|\psi\rangle$ בעל נורמה יחידה כמוגדר בהמשך).

מרחב הילברט הינו מרחב וקטורי מעל לשדה המרוכבים כך ש $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ כאשר $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ הוא וקטור במרחב המתאר מצב פיסיקלי.

למרחב הוקטורי של ה "kets" שהוגדר לעיל קיים מרחב וקטורי דואלי של "bras" שהאיברים בו הינם פונקציונלים לינאריים הפועלים על ה "kets". תוצאת הפעולה מגדירה את המכפלה הפנימית או הסקלרית בין bras ו kets: $\langle\beta|\alpha\rangle$. היא מקיימת את התנאים הבאים:

1. $\langle\beta|\alpha\rangle=\langle\alpha|\beta\rangle^*$ כאן השתמשנו בעובדה שלכל ket מתאים bra באופן הבא: אם $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle \cdots$ בסיס למרחב ה kets נגדיר את הבסיס הדואלי $\langle\alpha_1| \langle\alpha_2| \cdots$ כך ש $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$ כך ש

$$c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle \longleftrightarrow c_1^*\langle\alpha_1| + c_2^*\langle\alpha_2|$$

2. $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$ מתוך התנאי הראשון ברור כי זהו מספר ממשי המוגדר להיות ה"נורמה" בריבוע של המצב $|\alpha\rangle$. השוויון מתקיים עבור ה null ket.

במרחב הילברט פועלים אופרטורים, למשל $\hat{A}$, כך ש $\hat{A}|\psi\rangle$ הינו וקטור, בדרך כלל שונה מ $|\psi\rangle$, במרחב. לכל אופרטור $\hat{A}$ קיים אופרטור הנקרא הצמוד ההרמיטי של $\hat{A}$ ומסומן ב $\hat{A}^\dagger$ כך שלכל $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{A}^\dagger|\alpha\rangle^*$$

אופרטור נקרא הרמיטי אם $\hat{A}=\hat{A}^{+}$. כל הגדלים הפיזיקליים המדידים מתוארים על ידי אופרטורים הרמיטיים ונקראים נצפים (observables). לכל אופרטור הרמיטי $\hat{A}$ וקטורים עצמיים $|a_1\rangle, |a_2\rangle\cdots$ וערכים עצמיים $a_1, a_2\cdots$ המוגדרים על ידי $i=1,2\cdots$ $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$
באופן כללי הערכים העצמיים הינם מספרים מרוכבים אך עבור אופרטור הרמיטי קל להוכיח כי הם מספרים ממשיים וכי וקטורים עצמיים השייכים לערכים עצמיים שונים הינם אורתוגונליים:
אם $a_1\neq a_2$: $\langle a_1|a_2\rangle=0$. בתוך תת המרחב המנוון ניתן לבצע תהליך אורתוגונליזציה של Gram-Schmidt ונרמול ולקבל אוסף וקטורים עצמיים המהווה קבוצה אורתונורמלית.

אם $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ שני נצפים חילופיים: $[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0$ ניתן למצוא עבורם אוסף של וקטורים עצמיים משותפים. ההגדרה היא כי אוסף הוקטורים העצמיים המשותפים של קבוצה מקסימלית של נצפים חילופיים כובשת את מרחב הילברט - דהיינו מהווה לו בסיס. לכן אם $|a,b,c\cdots\rangle$ אוסף אורתונורמלי שלם (תמיד ניתן להביא להיות אורתונורמלי בעזרת תהליך Gram Schmidt) אזי כל וקטור $|\psi\rangle$ ניתן לפריסה כ:

$$|\psi\rangle = \sum_{a,b,c\cdots} \langle a,b,c\cdots|\psi\rangle\, |a,b,c\cdots\rangle$$

או במילים אחרות אופרטור היחידה נתון על ידי

$$\hat{I} = \sum_{a,b,c\cdots} |a,b,c\cdots\rangle\langle\cdots a,b,c|$$

<u>דוגמא:</u> חלקיק נקודתי בשלושה ממדים. הקואורדינטות של $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ מהווה קבוצת נצפים חילופיים המגדירים בסיס אורתונורמלי למרחב הילברט $|\vec{r}\rangle = |x,y,z\rangle$.
יחס האורתונורמליות המוכלל למקרה הרציף היא $\langle\vec{r}_1|\vec{r}_2\rangle = \delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$

מקדמי הפיתוח בבסיס $|\psi\rangle = \int d^3r\, \langle\vec{r}|\psi\rangle\, |\vec{r}\rangle$ מגדירים את פונקציית הגל של החלקיק: $\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle$.

הדוקטרינה הקוונטית מנבאה כי אם מערכת פיזיקלית נמצאת במצב מנורמל $|\psi\rangle$ אזי מדידת הנצפה $\hat{A}$ תגרום לה:

א. לעבור באופן חד לאחד מהמצבים העצמיים של $\hat{A}$: $|\psi\rangle \rightarrow |a\rangle$

ב. תוצאת המדידה תהיה הערך העצמי a

ג. הסתברות המעבר ל $|a\rangle$ היא $P_a = |\langle a|\psi\rangle|^2$

⇐ $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ היא הערך הממוצע של הנצפה $\hat{A}$ במצב $|\psi\rangle$.

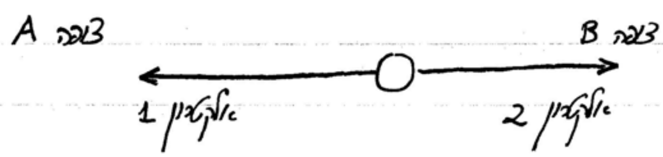
המבנה המתמטי וההנחות לגבי המדידה של תורת הקוונטים, כפי שפורטו לעיל, גורמים לקיום של קורלציות מוזרות במצבים של מערכות פיזיקליות, שעוררו דיון וויכוח מאז ראשית ימיה של התורה.
נתבונן לדוגמא במערכת של 2 אלקטרונים בעלי ספין $1/2$ שהוכנה במצב של ספין כולל 0:

$$|\text{spin singlet}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z+\rangle|z-\rangle - |z-\rangle|z+\rangle\right)$$

אלקטרון 1 אלקטרון 2

כשעוברים לתאור באמצעות הבסיס של הנצפה $\hat{S}_z$

שימו לב כי אין בסיס חד חלקיקי בו ניתן לרשום את המצב כמכפלה פשוטה $|\alpha\rangle|\beta\rangle$. זוהי דוגמא למצב שזור - "entangled state". מצבים מסוג זה ממלאים תפקיד מרכזי בנושא לבנית מחשבים קוונטיים. במצב שרשמנו מדידת S_z של האלקטרון הראשון תוליך לתוצאה + או - בהסתברות 50%. אך בהינתן תוצאת המדידה ידוע בוודאות S_z של האלקטרון השני: הוא הפוך לזה של הראשון. המעניין בקורלציה זו היא העובדה שהיא ממשיכה להתקיים גם אם שני האלקטרונים רחוקים מאוד זה מזה ומפסיקים לעבור אינטראקציה זה מזה. יתכן ותחשבו כי אין בכך מתמיה: "דומה הדבר לשק בו כדור לבן וכדור שחור. כאשר נבחר באופן עיוור כדור קיימת הסתברות של 50% למצוא אותו לבן או שחור, אך אם הכדור הראשון שהוצא שחור אנו יודעים בוודאות כי השני בשק לבן". מסתבר כי האנלוגיה הזו פשוטה מדי מכיון שהצופים באלקטרונים יכולים למדוד את S_x או את S_z.



נזכור כי

$$|X\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|Z+\rangle - |Z-\rangle\right) \quad , \quad |Z\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X+\rangle \pm |X-\rangle\right)$$

$$|\text{spin singlet}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X-\rangle|X+\rangle - |X+\rangle|X-\rangle\right)$$

ולכן:

א. אם A מודד את S_z ו-B את S_x אין קורלציה בין תוצאות המדידה.

ב. אם A מודד את S_x ו-B את S_x יש אנטי-קורלציה מלאה בין תוצאות המדידה.

ג. אם A לא מודד B מקבל תוצאות אקראיות.

נראה כי בהחלטה של A למדוד את S_z או את S_x מצבו של אלקטרון 2 משתנה כדי להבטיח את קיומן או העדרן של קורלציות עם תוצאות המדידה על אלקטרון 1. השפעה מיידית זו ממרחק הפריעה במיוחד לאיינשטיין שכתב:

"On one supposition we should, in my opinion, absolutely hold fast: the real factual situation of the system S_2 is independent of what is done with the system S_1, which is spatially separated from the former."

התנגדות זו לחוסר הלוקליות של תורת הקוונטים עמדה בבסיס מאמרו המפורסם עם פודולסקי ורוזן משנת 1935 והפריעה לו, לדעתי, הרבה יותר מאשר ההסתברותיות של תורת הקוונטים.

איינשטיין ואחרים האמינו כי הקוונטיות נובעת מכך שמספר פרמטרים "hidden variables" המתארים את המערכת הפיזיקלית אינם נקבעים על ידי המצב הקוונטי שלה. הם הסכימו כי אין אפשרות למדוד באופן סימולטני את S_x ו-S_z אך טענו כי בהינתן אוסף גדול של אלקטרונים ניתן לשייך לכל אחד את התכונה הבאה:

אם S_z נמדד התוצאה היא + בוודאות ואם S_x נמדד התוצאה היא − בוודאות.

נאמר חלקיק כזה במצב $(Z+, X-)$. קל לראות כי תחזיות תורת הקוונטים לגבי מדידת S_z ו-S_x של אלקטרון בודד מתקבלות אם מניחים מספר שווה של חלקיקים מהסוגים

$(Z+, X+)$, $(Z+, X-)$, $(Z-, X+)$, $(Z-, X-)$.

קל גם לבדוק שתחזיות תורת הקוונטים לגבי המקרה הדו-חלקיקי מתקבלות אם נניח כי האוכלוסיות הבאות מופיעות באופן שווה

אלקטרון 1	אלקטרון 2
(Z+, X+)	(Z-, X-)
(Z+, X-)	(Z-, X+)
(Z-, X+)	(Z+, X-)
(Z-, X-)	(Z+ X+)

עד 1964 ניתן היה לחשוב כי תורות מסוג זה בהן מצב שני החלקיקים קבוע מראש ואינו משתנה בעקבות מדידת אחד מהם מסוגלות לשחזר את תחזיות תורת הקוונטים תוך המנעות מהויתור על הלוקליות המובנית בה. בשנת 1964 מצא John S. Bell דוגמא נגדית.

נתבונן בבעיה הדו-אלקטרונית שלנו אך כעת נמדוד מצבת הספין לאורך 3 כיוונים שאינם אורתוגונליים בהכרח זה לזה $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. בתורות האלטרנטיביות יש לנו כעת 8 סוגי חלקיקים בהתאם לספין שלהם לאורך $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. נבחן את הבעיה הדו-חלקיקית

יחס באוכלוסיה	אלקטרון 1	אלקטרון 2
n_1	(a+, b+, c+)	המצב של אלקטרון 2
n_2	(a+, b+, c-)	הינו בעל הטלי ספין
n_3	(a+, b-, c+)	הפוכים לאורך $\vec{a}\ \vec{b}\ \vec{c}$
n_4	(a+, b-, c-)	כדי להביא מצב עם
n_5	(a-, b+, c+)	ספין 0 כולל.
n_6	(a-, b+, c-)	
n_7	(a-, b-, c+)	
n_8	(a-, b-, c-)	

$$P(a+, b+) = n_3 + n_4$$
$$P(a+, c+) = n_2 + n_4$$
$$P(c+, b+) = n_3 + n_7$$

ברור שהסיכוי למצוא אלקטרון 1 עם $a+$ ואלקטרון 2 עם $b+$:
ובאופן דומה

מכיון ש $n_i \geqslant 0$ תנאים אלה מקיימים את אי השוויון של Bell:

$$P(a+, b+) \leqslant P(a+, c+) + P(c+, b+)$$

מה לגבי הניבוי הקוונטי?

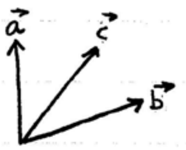
ההסתברות שצופה A ימצא את רכיב הספין $\vec{a}\cdot\vec{S}$ של אלקטרון 1 להיות חיובי היא $1/2$. אם זהו המצב אנו יודעים בוודאות כי אלקטרון 2 הינו בעל רכיב $\vec{a}\cdot\vec{S}$ שלילי. עלינו לחשב את ההסתברות שאלקטרון במצב כזה יהיה בעל רכיב חיובי של $\vec{b}\cdot\vec{S}$. התוצאה היא $\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right)$ כאשר θ_{ab} היא הזווית בין הוקטור $\vec{a}$ ו $\vec{b}$. לכן קוונטית

$$P(a+, b+) = \frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right)$$

כדי שאי שוויון Bell יתקיים צריך להתקיים

$$\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \leqslant \sin^2\left(\frac{\theta_{ac}}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_{cb}}{2}\right)$$

אך אי שוויון זה מופר באופן כללי. לדוגמא אם



$$\theta_{ac} = \theta_{cb} \equiv \theta$$
$$\theta_{ab} = 2\theta$$

אי-השוויון הופך ל $\sin^2\theta \leqslant 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$ המופר עבור $0<\theta<\frac{\pi}{2}$.

Bell הראה לכן כי קבוצה רחבה של תאוריות hidden variables לוקליות נמצאות בסתירה לתורת הקוונטים. ניסויים רבים שנערכו בעשרות השנים האחרונות הראו כי אי השוויון של Bell מופר במערכות שונות של אטומים, אלקטרונים ופוטונים וכי תוצאות הניסויים מתאימות לניבוי תורת הקוונטים. נראה לכן כי קיומן של קורלציות לא לוקליות מהסוג שהצגנו הינו תכונה יסודית של היקום שלנו.

נעצור רגע לציין במבנה המתמטי של תורת הקוונטים. נזכר כי בהינתן שני בסיסים אורתונורמליים למרחב הילברט: $\{|a_i\rangle\}$ ו $\{|b_i\rangle\}$ קיים אופרטור אוניטרי U המעביר אותנו מבסיס לבסיס:

$$|b_i\rangle = U|a_i\rangle$$

באופן מפורש $U=\sum_j |b_j\rangle\langle a_j|$ ומקיים לכן

$$U^\dagger U = UU^\dagger = 1$$

אופרטורים אוניטריים הינם חשובים מכיוון שהם גם מתארים טרנספורמציות של המרחב הפיזיקלי. לדוגמא טרנסלציה - העתקה במרחב:

$$\hat{T}(\Delta\vec{r})\,|\vec{r}\rangle = |\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle$$

נדרוש שאם $|\vec{r}\rangle$ מנורמל כך יהיה גם $|\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle$ ולכן

$$T^\dagger T = \hat{1}$$

נוכיח כעת כי לכל אופרטור אוניטרי U קיים אופרטור הרמיטי $\hat{C}$ כך ש $U=e^{i\hat{C}}$:

<u>הוכחה:</u>

נרשום

$$U = \frac{U+U^\dagger}{2} + i\,\frac{U-U^\dagger}{2i} \equiv \hat{A}+i\hat{B}$$

קל לבדוק ש $[\hat{A},\hat{B}]=0$ וש $\hat{A},\hat{B}$ הרמיטיים. ניתן לכן ללכסן באופן סימולטני:

$$\hat{A}|a,b\rangle = a|a,b\rangle \quad , \quad \hat{B}|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

ממשיים: a,b

ניתן לבדוק גם ש $\hat{A}^2+\hat{B}^2=\hat{1}$ ולכן $a^2+b^2=1$ $\Leftarrow$ ניתן לרשום $a+ib=e^{ic}$

כאשר c ממשי. נסמן $|c\rangle = |a,b\rangle$

קל לראות ש

$$U|a,b\rangle = (a+ib)|a,b\rangle = e^{ic}|c\rangle$$

ולכן $U=\sum_c e^{ic}|c\rangle\langle c|$

מצד שני נגדיר את האופרטור ההרמיטי $\hat{C}=\sum_c c\,|c\rangle\langle c|$. מאורתונורמליות ה $|c\rangle$ נובע

בקלות ש $\hat{C}^n=\sum_c c^n|c\rangle\langle c|$ ולכן

$$e^{i\hat{C}} = \sum_n \frac{i^n\hat{C}^n}{n!} = \sum_n\sum_c \frac{(ic)^n}{n!}|c\rangle\langle c| = \sum_c e^{ic}|c\rangle\langle c| = U$$

מ.ש.ל.

תוצאה זו קשורה לדרישה $\hat{T}(\Delta\vec{r}\to 0)\to\hat{1}$ מאפשרת לנו לרשום

$$\hat{T}(\Delta\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\Delta\vec{r}}$$

כאשר $\hat{\vec{P}}$ הינו וקטור של אופרטורים הרמיטיים: רכיבי התנע $\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z$.

$$\hat{\vec{r}}\,\hat{T}(\Delta\vec{r})\,|\vec{r}\rangle = (\vec{r}+\Delta\vec{r})\,|\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle$$
$$\hat{T}(\Delta\vec{r})\,\hat{\vec{r}}\,|\vec{r}\rangle = \vec{r}\,|\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle$$
$$\Rightarrow\quad [\hat{\vec{r}},\hat{T}(\Delta\vec{r})]\,|\vec{r}\rangle = \Delta\vec{r}\,|\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle$$

נפתח יחס זה לסדר ראשון ב $\Delta\vec{r}$ בגבול $\Delta\vec{r}\to 0$
נקבל מכאן ש$\vec{r}$ הינו וקטור מקום עצמי שרירותי

$$\left[\hat{\vec{r}},\ -\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\Delta\vec{r}\right] = \Delta\vec{r}$$

אם נבחר את $\Delta\vec{r}$ להיות בכיוון $r_{j=x,y,z}$
נקבל את יחסי החילוף המפורסמים

$$[\hat{r}_i,\hat{P}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

כיצד נראה אופרטור התנע בבסיס המקום?
נחשב:

$$\langle x|\,[\hat{x},\hat{P}_x]\,|x'\rangle = i\hbar\,\delta(x-x')$$
$$\parallel$$
$$\langle x|\,\hat{x}\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{x}\,|x'\rangle = (x-x')\,\langle x|\hat{P}_x|x'\rangle$$

אבל (תרגיל) $\frac{\delta(x-x')}{x-x'} = -\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$ $\Leftarrow$

$$\langle x|\hat{P}_x|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

ומכאן קל לקבל את פונקצית הגל של בסיס התנע:

$$\langle\vec{r}|\hat{\vec{P}}|\vec{P}\rangle = \int d^3r'\,\langle\vec{r}|\hat{\vec{P}}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\vec{P}\rangle = \int d^3r'\,(-i\hbar\vec{\nabla}_r\,\delta(\vec{r}-\vec{r}'))\,\langle\vec{r}'|\vec{P}\rangle$$

אינטגרציה בחלקים:

$$\vec{P}\,\langle\vec{r}|\vec{P}\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}_r\,\langle\vec{r}|\vec{P}\rangle$$

$$\langle\vec{r}|\vec{P}\rangle = N\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{r}}$$

ופתרון למשוואה דיפרנציאלית זו הינו
(תרגיל) הראו כי זהו מקדם הנרמול הנדרש.

דינמיקה קוונטית

בתמונת שרדינגר הדינמיקה של מערכת פיזיקלית מיוצגת ע"י ההתפתחות בזמן של וקטור המצב שלה בהתאם למשוואת שרדינגר:

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

כאשר $\hat{H}$ ההמילטוניאן שיכול להיות תלוי בזמן.

נגדיר את אופרטור ההתפתחות בזמן ונקבל שהוא ממלא משוואה דומה

$$|\psi,t\rangle = \mathcal{U}(t,t_0)|\psi,t_0\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\mathcal{U}(t,t_0)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\, \mathcal{U}^+(t,t_0)\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0) = \mathcal{U}^+(t,t_0)H(t)\mathcal{U}(t,t_0)$$

מהצמוד ההרמיטי שלה:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}^+(t,t_0)\cdot\mathcal{U}(t,t_0) = \mathcal{U}^+(t,t_0)H(t)\mathcal{U}(t,t_0)$$

נחסיר לקבל

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}^+(t,t_0)\mathcal{U}(t,t_0) = 0$$

מתוך תנאי ההתחלה $\mathcal{U}(t_0,t_0)=\mathcal{U}^+(t_0,t_0)=1$ נובע לכן ש $\mathcal{U}$ אוניטרי

$$\mathcal{U}^+(t,t_0)\mathcal{U}(t,t_0) = 1$$

את משוואת ההתפתחות בזמן של $\mathcal{U}$ ניתן להציג בצורה שקולה ע"י אינטגרציה בזמן מ t_0 ל t ושימוש בתנאי ההתחלה $\mathcal{U}(t_0,t_0)=1$:

$$\mathcal{U}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, H(t_1)\,\mathcal{U}(t_1,t_0)$$

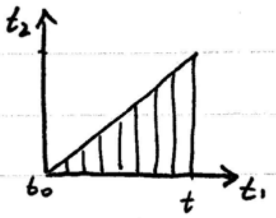
$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, H(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\, H(t_1)H(t_2)\,\mathcal{U}(t_2,t_0)$$

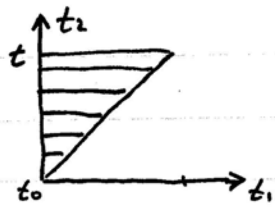
נבצע ע"י הצבה איטרטיבית

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \; H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

נוכל להציג תוצאה זו באופן קומפקטי יותר בעזרת ההגדרה הבאה. נתבונן באיבר מסדר שני

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; H(t_1)H(t_2) \overset{\text{החלפת אינדקסים}}{=} \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \; H(t_2)H(t_1)$$





נשים לב כי סדר ההמילטוניאנים באינטגרנד הוא כזה שהאופרטור המופיע משמאל מתאים לזמן המאוחר מהזמן בו נלקח האופרטור הימני. סדר האופרטורים חשוב כי באופן כללי H בזמנים שונים אינם חלופיים.

באמצעות אופרטור הסדר בזמן

$$T\left[A(t_1)B(t_2)\right] = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases}$$

נוכל לרשום לכן

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; T\left[H(t_1)H(t_2)\right] \qquad \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \; T\left[H(t_1)H(t_2)\right]$$

ונוכל לרשום את האיבר השני כ $\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \, T\left[H(t_1)H(t_2)\right]$. הכללה לסדרים גבוהים יותר מיידית ונקבל

$$\mathcal{U}(t,t_0) = T\left\{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \; H(t_1)\cdots H(t_n)\right\}$$

$$= T\left\{ \exp\left[\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 \, H(t_1)\right]\right\}$$

במקרה הפרטי בו $H(t)$ בזמנים שונים חלופיים נקבל

$$\mathcal{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1 H(t_1)}$$

ובפרט אם H לא תלוי בזמן

$$\mathcal{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$$

תמונה אחרת לתאר התפתחות בזמן היא תמונת הייזנברג בו וקטור המצב קבוע בזמן

$$|\Psi\rangle_H = |\Psi, t_0\rangle$$

והאופרטורים הם הנושאים את ההתפתחות הזמנית דרך

$$\hat{A}_H(t) = \mathcal{U}^{\dagger}(t,t_0)\,\hat{A}(t_0)\,\mathcal{U}(t,t_0)$$

כאשר $A(t_0)$ הוא האופרטור בתמונת שרדינגר

הגדרה זו טובה כי היא משמרת יחסי חילוף ואלמנטי מטריצה ובפרט ערכי תצפית:

$$[\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)] = \mathcal{U}^{\dagger}(t,t_0)\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\mathcal{U}(t,t_0) = [A,B]_H$$

$${}_H\langle\Psi|\hat{A}_H|\phi\rangle_H = \langle\Psi(t_0)|\,\mathcal{U}^{\dagger}(t,t_0)\,\hat{A}\,\mathcal{U}(t,t_0)|\phi(t_0)\rangle = \langle\Psi(t)|\,\hat{A}\,|\phi(t)\rangle$$

נגזור לפי הזמן את המשוואה המגדירה את האופרטור בתמונת הייזנברג ונשתמש במשוואת התנועה ל $\mathcal{U}$ כדי לקבל את משוואת התנועה של האופרטורים בתמונת הייזנברג:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\mathcal{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{A}\mathcal{U} + \mathcal{U}^{\dagger}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\mathcal{U} + \mathcal{U}^{\dagger}\hat{A}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\hat{H}\mathcal{U}$$

$$= \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H, \hat{H}_H\right]$$

בשונה במקרה הכללי כיוון שלאופרטור $\hat{A}$ יכולה להיות תלות זמנית מפורשת בתמונת שרדינגר
וכי $\hat{H} \neq \hat{H}_H = \mathcal{U}^{\dagger}\hat{H}\mathcal{U}$ במקרה בו $\hat{H}(t)$ בזמנים שונים אינם חלופיים.

נרצה לטפל כעת במספר מצבים בהם ההמילטוניאן תלוי בזמן. כאשר החלק התלוי בזמן חלש ניתן לטפל בו בתורת ההפרעות התלויה בזמן עליה כבר נפגשנו בקורס הבסיסי במכניקה הקוונטית. אולם נרצה כעת לערוך מספר גבולות בהם ניתן לפתור (במקרה) את הבעיה ללא התייחסות לגודל ההפרעה – תנאים אחרים יופיעו במקום תנאי זה.

Sudden Approximation

נניח כי ההמילטוניאן משתנה בזמן מערך (אופרטור) התחלתי ב $t=0$ לערך סופי ב $t=\tau$.
טבעי להניח כי אם השינוי מהיר מאוד, כלומר τ קטן מאוד, מצבו ההתחלתי של המערכת $|\psi_0\rangle \equiv |\psi(t=0)\rangle$ לא יספיק להשתנות בזמן נתון ונוכל לקרב $|\psi(t=\tau)\rangle = |\psi_0\rangle$

באיזה תנאי קירוב זה מוצדק? נעבור למשוואת התנועה של $\mathcal{U}$ ונציגה במונחי $s=\frac{t}{\tau}$

$$\mathcal{U}(s) = 1 - \frac{i}{\hbar}\tau\int_0^1 ds_1\, H(s_1)\,\mathcal{U}(s)$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\tau\int_0^1 ds_1\, H(s_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\tau^2\int_0^1 ds_1\int_0^{s_1} ds_2\, H(s_1)H(s_2) + O(\tau^3)$$

שים לב כי קשה באמת לומר כי אנו דורשים ש H יהיה "קטן" אלא τH.
כעת נחשב מהי האמפליטודה ש $|\psi(t=\tau)\rangle$ שונה מ $|\psi_0\rangle$. כלומר נחשב את

$$A = \langle\psi_0|\mathcal{U}^{+}(\tau,0)\,\mathcal{U}(\tau,0)|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|\mathcal{U}^{+}(\tau,0)|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\mathcal{U}(\tau,0)|\psi_0\rangle$$

נשתמש בפיתוח עד סדר שני ב τH של $\mathcal{U}$

$$\mathcal{U} = 1 - \frac{i}{\hbar}\tau\bar{H} + \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^2\int_0^1 ds_1\int_0^{s_1} ds_2\, H(s_1)H(s_2)$$

כאשר $\bar{H} = \int_0^1 ds\, H(s)$.
נמצא כי עד סדר שני ב τ

$$A' = \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^2 \left[\langle \psi_0 | \bar{H}^2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \bar{H} | \psi_0 \rangle^2 \right] \equiv \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^2 (\Delta \bar{H})^2 + O(\tau^3) \Leftarrow$$

הקירוב תקף לכן אם $A \ll 1$ כלומר $\tau \ll \frac{\hbar}{\Delta \bar{H}}$.

התנאי שקיבלנו אינו אלא צורה מיוחדת של עקרון אי-הוודאות זמן-אנרגיה. ההתפתחות בזמן של המערכת בקטע הזמן $[0,\tau]$ נקבעת בקירוב על ידי $\bar{H}$ - ההמילטוניאן הממוצע בפרק זמן זה. עקרון אי-הוודאות טוען כי המערכת אינה יכולה לשנות את מצבה באופן משמעותי בפרק זמן הקצר מ $\hbar/\Delta\bar{H}$, בהתאם לתוצאה שקיבלנו דהיינו: הפונקציה המתארת של בור פוטנציאל

נעבור כעת לגבול ההפוך בו השינוי בזמן של ההמילטוניאן איטי מאוד.

Adiabatic Approximation

אנו מעוניינים לפתור את משוואת שרדינגר התלויה בזמן $H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$

נגדיר את הבסיס האדיאבטי בזמן t מסוים כפונקציות העצמיות של H בזמן זה:

$$(1) \quad H(t)|\phi_n(t)\rangle = E_n(t)|\phi_n(t)\rangle$$

שים לב שמכיון ש $|\phi_n(t)\rangle$ הינם וקטורים עצמיים של $H(t)$ הם מהווים קבוצה אורתונורמלית שלמה. כלומר

$$\langle \phi_n(t) | \phi_m(t) \rangle = \delta_{nm}$$

הבסיס האדיאבטי משתנה מרגע לרגע, ונקבע בכל זמן t על ידי (1).

ניתן לפרוש וקטור מצב כללי התלוי בזמן בבסיס זה:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')} |\phi_n(t)\rangle$$

נציב במשוואת שרדינגר התלויה בזמן לקבל

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')} |\phi_n\rangle + C_n\left(\frac{-i}{\hbar}\right) E_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')} |\phi_n\rangle + C_n e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^{t'} dt' E_n(t')} |\dot{\phi}_n\rangle$$

$$= \sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')} E_n(t) |\phi_n\rangle$$

נכפיל ב $\langle\phi_k|$ לקבל

$$\dot{C}_k = -\sum_n C_n \langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'[E_k(t')-E_n(t')]}$$

מהו $\langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle$? ראשית נשים לב שמכיון ש $\langle\phi_k|\phi_n\rangle=\delta_{kn}$ נגזור על ידי גזירה בזמן ש

$$(2)\quad \langle\dot{\phi}_k|\phi_n\rangle = -\langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle$$

שנית נגזור בזמן את הקשר $\langle\phi_k(t)|H(t)|\phi_n(t)\rangle = 0$ עבור $k\neq n$ למצוא

$$E_n(t)\langle\dot{\phi}_k|\phi_n\rangle + \langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial t}|\phi_n\rangle + E_k(t)\langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle = 0$$

תוך שימוש ב (2)

$$(3)\quad \langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle = \frac{\langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial t}|\phi_n\rangle}{E_n(t)-E_k(t)}$$

$$\Leftarrow \quad (4)\quad \dot{C}_k = -C_k\langle\phi_k|\dot{\phi}_k\rangle - \sum_{n\neq k} C_n \frac{\langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial t}|\phi_n\rangle}{E_n(t)-E_k(t)} e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'[E_k(t')-E_n(t')]}$$

נניח כי ב $t=0$ $C_n(0)=\delta_{nj}$ כלומר המערכת נמצאת ב $|\phi_j(0)\rangle$ ונפתור את (3)

באופן איטרטיבי: נרשום $C_n(t) = \delta_{nj} + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \cdots$

ונציב ב (4) לקבל בסדר הנמוך ביותר

$$\dot{C}_k=\frac{\langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial t}|\phi_j\rangle}{E_k(t)-E_j(t)}\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\left[E_k(t')-E_j(t')\right]}$$ עבור $k\neq j$

$$C_k(t)=\int_0^t dt'\,\frac{\langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial t'}|\phi_j\rangle}{E_k(t')-E_j(t')}\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^{t'}dt''\left[E_k(t'')-E_j(t'')\right]}$$

אם נניח כי ההמילטוניאן תלוי בזמן דרך פרמטר $\alpha(t)$ $H(\alpha(t))$ נוכל לרשום

$$C_k(\alpha)=\int_{\alpha_0}^{\alpha}d\alpha'\,\frac{\langle\phi_k|\frac{\partial H}{\partial\alpha}|\phi_j\rangle}{E_k(\alpha')-E_j(\alpha')}\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{\alpha_0}^{\alpha'}d\alpha''\frac{E_k(\alpha'')-E_j(\alpha'')}{\dot{\alpha}''}}$$

אנו רואים לכן כי בגבול האדיאבטי $\dot{\alpha}\to 0$ הפאזה המופיעה באינטגרנד משתנה מהר מאוד וגורמת לכן לאינטגרל כולו ולכן ל $C_{k\neq j}$ להיות קטן. כתוצאה מכך בגבול זה המערכת תשאר במצב האדיאבטי ϕ_j בו היא נמצאה ב $t=0$ (שימו לב כי מצב המערכת משתנה בזמן מכיון ש $\phi_j(t)$ משתנה בזמן) - זהו <u>המשפט האדיאבטי</u>. לנוסח והוכחה פורמליים של המשפט ראו את הספר של Messiah. כאן נגיע לתנאי התקפות של המשפט מתוך ההערכה הבאה:
כדי ש $C_k\ll 1$ נרצה שהפאזה באינטגרנד תשתנה באופן משמעותי תוך שינוי קטן ב α'. במצב כזה תרומות המתאימות ל α' שונים באינטגרל יבואו עם פאזות שונות מאוד זו מזו ויתמצעו לערך קטן. נדרוש לכן ש

$$\Delta\alpha\cdot\frac{d}{d\alpha'}\frac{1}{\hbar}\int_{\alpha_0}^{\alpha'}d\alpha''\,\frac{E_k(\alpha'')-E_j(\alpha'')}{\dot{\alpha}''}\gg 2\pi$$

כאשר $\Delta\alpha=\alpha-\alpha_0$

$\Leftarrow$ התנאי לתקפות הקרוב האדיאבטי הינו

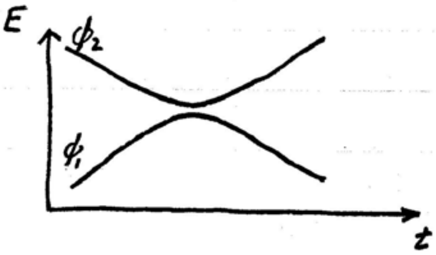
$$\frac{\dot{\alpha}}{\Delta\alpha}\ll\omega_{kj}$$

כאשר $\omega_{kj}=\frac{1}{\hbar}(E_k-E_j)$

או אם נקרב $\dot{\alpha}=\frac{\Delta\alpha}{\tau}$

$$\omega_{kj}\tau\gg 1$$

כאשר τ משך הזמן בו ההמילטוניאן משתנה



שימו לב כי הקרוב האדיאבטי נשבר כאשר שתי רמות אדיאבטיות קרובות באנרגיה. בסביבת נקודה שכזו נוכל לקבל מעברים מ ϕ_1 ל ϕ_2 לדוגמא בהם נדון בהמשך.

המשפט האדיאבטי מבטיח כי בגבול האדיאבטי המערכת תעקוב אחר הרמה האדיאבטית $|\phi_n(t)\rangle$ בה נמצאה בראשית פרק השינוי של ההמילטוניאן. בפרט, אם בסוף פרק השינוי ההמילטוניאן חוזר לערכו ההתחלתי המערכת תחזור ל $|\phi_n(t=0)\rangle$. יחד עם זאת המצב הסופי יכול להיות שונה בפאזה מהמצב ההתחלתי. פגשנו כבר מרכיב אחד בפאזה זו. זהו הפקטור המוכר $e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')}$. נראה עם זאת כי בתהליכים אדיאבטיים עלולה להופיע פאזה נוספת "גיאומטרית". ראה ה.

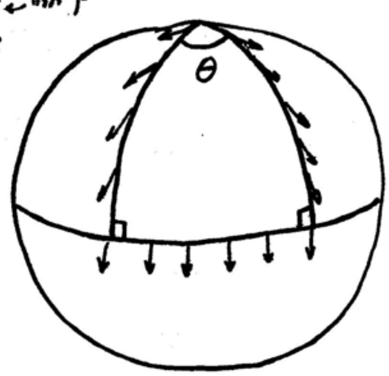
Berry's Phase

Proc. R. Soc. Lond. A 392, 45 (1984)

פאזות גיאומטריות מופיעות בהקשרים שונים בפיזיקה. נתבונן לדוגמא במטוטלת הנמצאת בקוטב הצפוני ומתנודדת לאורך המישור המוגדר על ידי מרכז כדור הארץ וקו האורך העובר דרך ירושלים. נתעלם מסיבוב כדור הארץ ונסיע את המטוטלת באופן אדיאבטי לאורך קו אורך זה עד קו המשווה. משם נמשיך "מבלי לסובב את המטוטלת" לאורך קו המשווה מזרחה למשך נניח 30° ונעלה צפונה שוב לאורך קו האורך המגיע לקוטב הצפוני. נמצא כי מישור התנודה של המטוטלת בסוף הדרך נמצא בזווית של 30° ביחס למישור התנודה המקורי. - דוגמא ל parallel transport של וקטור

$\dot{\vec v} = \vec\Omega \times \vec v$ ← צ' מזה

$\vec\Omega = \dot{\vec r} \times \vec v$



ניתוח של הבעיה מוביל למסקנה כי זווית סיבוב המישור נתונה על ידי הזווית המרחבית של המסלול ביחס למרכז כדור הארץ. nonholonomy.

מסתבר כי בתהליכים אדיאבטיים קוונטים מופיעה פאזה דומה שהתגלתה על ידי Michael Berry.

נניח כי H בוקטור של פרמטרים $\hat{H}(\vec{R}(t))$ נעסוק פה במקרה בו $\vec{R}$ הינו וקטור תלת-מימדי. עם רמות אדיאבטיות

$$\hat{H}(\vec{R})|\phi_n(\vec{R})\rangle = E_n(\vec{R})|\phi_n(\vec{R})\rangle$$

נניח כי המערכת נמצאת ב $|\phi_n(\vec{R}(t=0))\rangle$ ב $t=0$, וכי $\vec{R}$ משתנה אדיאבטית. מהמשפט האדיאבטי אנו יודעים לכן שמצב המערכת בזמן t נתון על ידי

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\vec R(t'))} e^{i\gamma_n(t)} |\phi_n(\vec R(t))\rangle$$

γ_n הוא הפאזה הגאומטרית של ברי. נראה כי גם אם $\vec R(\tau)=R(0)$ $\quad \gamma_n(\tau)\neq\gamma_n(0)$.
נציב את $|\psi\rangle$ במשוואת שרדינגר לקבל

$$\left[E_n(\vec R(t)) - \hbar\dot\gamma_n\right] e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\vec R(t'))} e^{i\gamma_n(t)} |\phi_n(\vec R(t))\rangle + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\vec R(t'))} e^{i\gamma_n(t)} \dot{\vec R}\,\vec\nabla_R |\phi_n(\vec R(t))\rangle$$
$$= E_n(\vec R(t)) e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\vec R(t'))} e^{i\gamma_n(t)} |\phi_n(\vec R(t))\rangle$$

$\Leftarrow$ לאחר הכפלה ב $\langle\phi_n|$ נקבל

$$\dot\gamma_n = i\dot{\vec R}\cdot\langle\phi_n(\vec R(t))|\vec\nabla_R|\phi_n(\vec R(t))\rangle$$

משוואה (2) מראה כי $\langle\phi_n|\vec\nabla_R|\phi_n\rangle$ מדומה ולכן γ_n ממשי.
נניח כי $\vec R(t)$ משתנה לאורך מסלול סגור C במרחב הפרמטרים. הפאזה הגאומטרית בסוף המסלול הינה (נניח $\gamma_n(0)=0$)

$$\gamma_n(C) = i\oint_C d\vec R\cdot\langle\phi_n(\vec R)|\vec\nabla_R|\phi_n(\vec R)\rangle$$

$$= -\mathrm{Im}\iint_C d\vec S\cdot\vec\nabla_R\times\langle\phi_n|\vec\nabla_R\phi_n\rangle$$ נשתמש במשפט Stokes

$$= -\mathrm{Im}\iint_C d\vec S\,\langle\vec\nabla_R\phi_n|\times|\vec\nabla_R\phi_n\rangle$$

$$= -\mathrm{Im}\iint_C d\vec S\sum_{m\neq n}\langle\vec\nabla_R\phi_n|\phi_m\rangle\times\langle\phi_m|\vec\nabla_R\phi_n\rangle$$

כשהשתמשנו בעובדה ש $\langle\vec\nabla_R\phi_n|\phi_n\rangle$ מדומה במעבר האחרון.
שימו לב כי $\gamma_n(C)$ מוגדר כשטף של curl של גרדיאנט ולכן ניתן לחשוב (בטעות) כי הוא מתאפס. למעשה ϕ_n יכולה להיות מוגדרת רק עבור חלק של $\vec R$! על $\langle\phi_n|\nabla\phi_n\rangle$ סינגולריות שגורמות ל $\gamma\neq0$. $\underset{\vec a(\vec R)}{\underset{\equiv}{-\mathrm{Im}\langle\phi|\vec\nabla\phi\rangle}}$ ממלא תפקיד של "וקטור פוטנציאל" ו γ הוא השטף של השדה "המגנטי" הנוצר ממנו.

מתוך (3) נקבל עבור $n \neq m$
$$\langle \phi_m | \vec{\nabla}_R | \phi_n \rangle = \frac{\langle \phi_m | \vec{\nabla}_R \hat{H} | \phi_n \rangle}{E_n - E_m}$$

ולכן
$$\gamma_n(C) = \iint_C d\vec{S} \cdot \vec{b}_n(\vec{R})$$

כאשר "השדה המגנטי" הכולל במרחב הפרמטרים $\vec{R}$ נתון ע"י

$$\vec{b}_n(\vec{R}) = -\mathrm{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_n | \vec{\nabla}_R \hat{H} | \phi_m \rangle \times \langle \phi_m | \vec{\nabla}_R \hat{H} | \phi_n \rangle}{(E_m - E_n)^2}$$

אנו רואים כי אם המסלול C עובר בקרבת נקודה $\vec{R}^*$ בה המצב ϕ_n מנוון אזי $\vec{b}_n(\vec{R})$ ולכן גם $\gamma_n(C)$ נשלטים על ידי האיברים בסכום המתאימים למצבים המנוונים עם ϕ_n. נתבונן במקרה השכיח ביותר בו שתי רמות מנוונות ב $\vec{R}^*$. נסמן ב ϕ_1 ו ϕ_2 ונניח $E_2(\vec{R}) \geq E_1(\vec{R})$.
ליד $\vec{R}^*$ נוכל לפתח את $\hat{H}(\vec{R})$ לסדר ראשון ב $\vec{R}-\vec{R}^*$ ולקבל

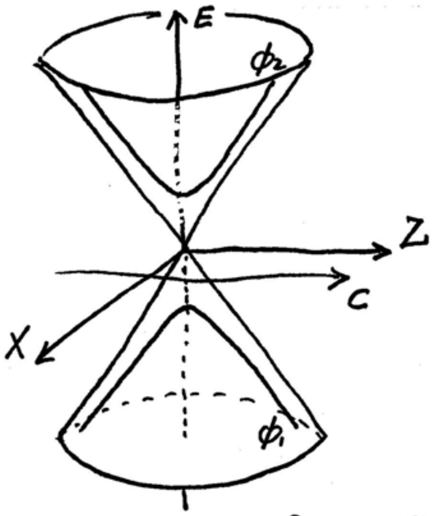
$$\vec{b}_1(\vec{R}) = -\mathrm{Im} \frac{\langle \phi_1 | \vec{\nabla}_R \hat{H}(\vec{R}^*) | \phi_2 \rangle \times \langle \phi_2 | \vec{\nabla}_R \hat{H}(\vec{R}^*) | \phi_1 \rangle}{[E_2(\vec{R}) - E_1(\vec{R})]^2}$$

נקבל ש $\vec{b}_2(\vec{R}) = -\vec{b}_1(\vec{R})$ ולכן $\gamma_2(C) = -\gamma_1(C)$.
בלי הגבלת הכלליות נקח $E_1(\vec{R}^*) = E_2(\vec{R}^*) = 0$ ו $\vec{R}^* = 0$. $\hat{H}(\vec{R})$ הוא לכן מטריצה 2×2 ומההנחה הראשונה נובע כי היא חסרת trace. ניתן לרשום אותה לכן כקומבינציה ליניארית של מטריצות פאולי:

$$\hat{H}(\vec{R}) = X\hat{\sigma}_x + Y\hat{\sigma}_y + Z\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} Z & X-iY \\ X+iY & -Z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow E_2(\vec{R}) = -E_1(\vec{R}) = (X^2+Y^2+Z^2)^{1/2} = |\vec{R}| \equiv R$$

שימו לב, אגב, כי עבור המקרה ההרמיטי הכללי יש לכוון שלושה פרמטרים כדי להגיע לניוון מקרי.



בבעיות סימטריות יש לעתים מספר קטן יותר של פרמטרים כדי להשיג ניוון. לדוגמא אם ידוע כי ההמילטוניאן ממשי $Y=0$ ונותר לכוון רק שני פרמטרים X ו-Z.

בפרמטריזציה שבחרנו ברור ש $\phi_1(\vec{R})$ ו $\phi_2(\vec{R})$ הן מצבי הספין $|-\rangle$ ו $|+\rangle$ בהטלה של ספין $1/2$ בכוון $\vec{R}$.
נבוא לחשב כעת את $\vec{b}_1$. ניתן לעשות זאת על ידי שימוש בפונקציות הגל המפורשות של המצבים $|-\rangle$ ו $|+\rangle$ בכוון $\vec{R}$. - תרגיל.
לחלופין ניתן לפשט את הבעיה ע"י שימוש באינואריאנטיות של הוקטור תחת סיבוב $\vec{R}$. נסובב את מערכת הצירים כך שציר z יהיה בכוון $\vec{R}$. במערכת זו ϕ_1 ו ϕ_2 הינם הוקטורים העצמיים $|-\rangle$ ו $|+\rangle$ של $\hat{\sigma}_z$ ונקבל, במערכת המסובבת

$$b_{1,x'} = -\mathrm{Im}\left\{ \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle - \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle \right\} / (2R)^2 = 0$$

$$b_{1,y'} = -\mathrm{Im}\left\{ \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle - \langle -|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle \right\} / (2R)^2 = 0$$

$$b_{1,z'} = -\mathrm{Im}\left\{ \langle -|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle - \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle \right\} / (2R)^2 = \frac{1}{2R^2}$$

ואם נסובב חזרה למערכת הצירים המקורית נקבל

$$\vec{b}_1(\vec{R}) = \frac{\vec{R}}{2R^3}$$

קבלנו לכן ש $\gamma_1(C)$ הינה השטף דרך המסלול C של שדה מגנטי של מונופול בחוזק $\frac{1}{2}$ הנמצא בנקודת הניוון במרחב הפרמטרים. שטף זה הינו חוזק המונופול כפול הזוית המרחבית אותה פורש C, $\Omega(C)$, כלומר

$$e^{i\gamma_{1,2}(C)} = e^{\pm\frac{i}{2}\Omega(C)}$$

ניוונים פועלים לכן כמקורות שדה במרחב הפרמטרים.

שימו לב כי איבר הפאזה אינו תלוי בפרטי המסלול הנבחר על ידי C ושבכלל אנו מחשבים את השטח.
כמו כן מכיוון שפאזות שונות יכולות להיבדל רק ל $\Omega(C)$ הנבדלות זו מזו ב 4π.

<u>דוגמאות</u>: <u>ספין $1/2$ בשדה מגנטי תלוי בזמן</u>.

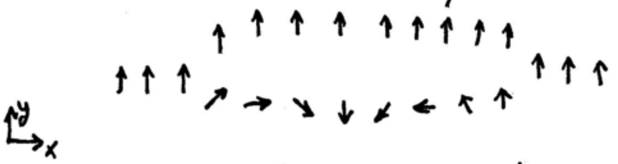
$$\hat{H} = -\vec{B}(t)\cdot\vec{S} = -\frac{\vec{B}}{2}\cdot\vec{\hat{\sigma}}$$

מקרה זה הוא המקרה שניתחנו תחת הנ"ל: $\vec{R} = \frac{\vec{B}}{2}$:

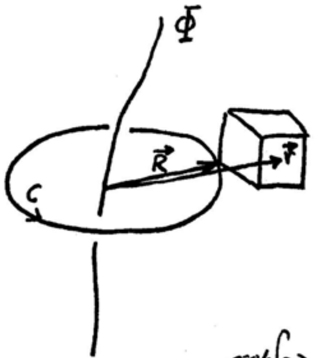
$$\left.\begin{array}{l} E_{1,2}(\vec{B}) = \mp\frac{B}{2} \\ \vec{\nabla}_B \hat{H} = -\frac{1}{2}\vec{\hat{\sigma}} \end{array}\right\} \Rightarrow \vec{b}_{12}(\vec{B}) = \pm\frac{\vec{B}}{2B^3}$$

התוצאה שקיבלנו $e^{i\gamma_{12}(C)} = e^{\pm\frac{i}{2}\Omega(C)}$ אומרת שאם נסובב את השדה המגנטי סיבוב שלם, לדוגמא במישור x-y, הספין יאסוף פאזה גאומטרית של $e^{\pm\frac{i}{2}\cdot 2\pi} = -1$.
ניתן לגלות את הפאזה הזו בעזרת הניסוי הבא: שולחים אלומה של אלקטרונים שהספין שלהם מקוטב על ידי שדה מגנטי בכוון y ומפצלים אותה לשתי אלומות. האחת ממשיכה לנוע בשדה מגנטי בכוון y והשניה בשדה מגנטי המסתובב לאט במישור x-y סיבוב מלא.
מאחדים את שתי האלומות ומודדים את תבנית ההתאבכות שלהם.

השדה המגנטי:



אם המסלולים היו באורך שווה הזמן המהלך של כל אלומה עד נקודת המפגש שווה ומכיוון שהאלקטרונים בשתי האלומות נמצאים בכל רגע במצב היסודי עם אנרגיה אדיאבטית $-\frac{B}{2}$ הפאזות הדינמיות שהם צוברים $e^{-\frac{i}{\hbar}\int^t dt' E(t')}$ שוות. בניגוד לכך הפאזה הגאומטרית שצוברות שתי האלומות שונה: האחת צוברת $e^{i\cdot 0}=1$ והשניה $e^{\frac{i}{2}\cdot 2\pi}=-1$. כתוצאה מכך תתקיים התאבכות הורסת בין שתי האלומות בנקודת המפגש (באופן אידאלי לא נגלה ספינים אחרת).



אפקט Aharonov-Bohm

נניח כי יש לנו חלקיק בעל מטען q המוגבל לנוע בתוך קופסא אטומה, הנמצאת בנקודה $\vec R$. הקופסה נמצאת ליד אך לא על קו שטף מגנטי בעל שטף Φ. מכיוון שהשדה המגנטי מתאפס בתוך הקופסה הדינמיקה הקלאסית של החלקיק אינה מושפעת מהמצאות קו השטף. קוונטית אין הדבר כך ולהמצאות של וקטור פוטנציאל $\vec A(\vec R)$ המקיים $\oint_c \vec A(\vec R)\cdot d\vec R$ יש השלכות מדידות. נראה כיצד.

בהעדר של קו השטף ($\vec A=0$) ההמילטוניאן של החלקיק תלוי במקומו $\hat{\vec r}$ ובתנע שלו $\hat{\vec p}$ בצורה $\hat H = H(\hat{\vec p}, \hat{\vec r}-\vec R)$ עם פונקציות עצמיות $\Psi_n(\vec r-\vec R)$ ואנרגיות E_n שאינן תלויות ב $\vec R$.

בנוכחות וקטור פוטנציאל המצבים $|\phi_n(\vec R)\rangle$ מקיימים

$$H\left(\vec p-\frac{q}{c}\vec A(\vec r),\ \vec r-\vec R\right)|\phi_n(\vec R)\rangle = E_n|\phi_n(\vec R)\rangle$$

קל לראות שהפתרונות למשוואה זו הינם

$$\langle \vec r|\phi_n(\vec R)\rangle = e^{\frac{iq}{c\hbar}\int_{\vec R}^{\vec r} d\vec r'\cdot\vec A(\vec r')}\,\Psi_n(\vec r-\vec R)$$

פתרונות אלה חד-ערכיים מכיוון שבתוך התיבה $\oint \vec A\cdot d\vec l=0$.

נסיע את התיבה מסביב לקו השטף ונחשב את הפאזה הגאומטרית. לשם כך אנו זקוקים ל

$$\vec{\mathcal{A}}(\vec R) = -\mathrm{Im}\langle\phi_n(\vec R)|\vec\nabla_R\phi_n(\vec R)\rangle = -\mathrm{Im}\int d^3r\,\Psi_n^*(\vec r-\vec R)\left[-\frac{iq}{c\hbar}\vec A(\vec R)\Psi_n(\vec r-\vec R)+\vec\nabla_R\Psi_n(\vec r-\vec R)\right] = \frac{q}{c\hbar}\vec A(\vec R)$$

כשהשתמשנו ב $\int_X^{X+L_x} dx\,\Psi_n^*(x-X)\nabla_X\Psi_n(x-X) = \int^{L_x} dx\,\Psi_n^*(x)\nabla_X\Psi_n(x) = 0$ וכו'. קיבלנו לכן כי במקרה הנ"ל וקטור הפוטנציאל ה"גאומטרי" הינו וקטור הפוטנציאל הפיסיקלי ומכאן היא

$$\gamma_n(c) = \frac{q}{c\hbar}\oint_c \vec A(\vec R)\,d\vec R = \frac{q}{c\hbar}\Phi$$

פאזה זו ניתנת למדידה ע"י ניסוי התאבכות בין חלקיקים המוסעים מסביב לקו השטף מחלקיקים הנמצאים בקופסה נייחת.

הקירוב האדיאבטי שימושי גם במערכות המורכבות דרגות חופש "איטיות" ו"מהירות" בהקשר זה הנו נעזר ב:

Born - Oppenheimer Approximation

נניח כי ההמילטוניאן של המערכת ניתן לכתיבה כ:

$$H(\hat{P},\hat{R},\hat{p},\hat{r}) = H_0(\hat{P},\hat{R}) + h(\hat{p},\hat{r},\hat{R})$$

כאשר $\hat{P},\hat{R}$ דרגות החופש והתנועה ה"איטית"

$\hat{p},\hat{r}$! " ה"מהירה"

אנו מתכוונים לכך שדרגות החופש האיטיות משתנות על פני סקלת זמן ארוכה הרבה יותר מאלו בהן משתנות דרגות החופש המהירות. לדוגמא, תנועה במולקולות מים. מכיון שהגרעינים כבדים בהרבה מהאלקטרונים השינוים אותם נוכל לצפות את הקואורדינטות והתנועה שלהם כ"איטיים" ואלו של האלקטרונים כ"מהירים". שימו לב כי ההמילטוניאן אינו תלוי מפורשות בזמן.

נמצא תחילה את הרמות האדיאבטיות של דרגות החופש המהירות. כלומר, נלכסן את $h(p,r,R)$ עבור קונפיגורציה נתונה של דרגות החופש האיטיות:

$$h(p,r,R)\,\phi_n(r;R) = \mathcal{E}_n(R)\,\phi_n(r;R)$$

נניח כי דרגות החופש האיטיות משתנות לאט מספיק כך שדרגות החופש המהירות ממלאות את המשפט האדיאבטי, דהיינו אם המערכת המהירה מתחילה ממצב אדיאבטי $\phi_n(r,R)$ היא תשאר בו בהלוך הזמן (למרות שמצב זה משתנה מרגע לרגע מכיון שהקונפיגורציה של ה R משתנה). תחת הנחה זו נוכל לקרב את פונקצית הגל הכללית של המערכת על ידי

$$\Psi(r,R) = \xi_n(R)\,\phi_n(r;R)$$

ונחפש את האנרגיות העצמיות של H על ידי הצבת הנחה זו במשוואת שרדינגר שאינה תלויה בזמן לקבל

$$\left[H_0(P,R) + \mathcal{E}_n(R)\right]\xi_n(R)\,\phi_n(r;R) = E\,\xi_n(R)\,\phi_n(r;R)$$

נטיל את המשוואה על $\langle\phi_n(r;R)|$:

$$\left[\langle\phi_n(r;R)|H_0(P,R)|\phi_n(r;R)\rangle+\mathcal{E}_n(R)\right]\xi_n(R)=E\,\xi_n(R)$$

במקרה השכיח נניח $H_0(P,R)=-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_R^2+V(R)$

$$\langle\phi_n|H_0|\phi_n\rangle\xi_n=\langle\phi_n(R)|-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_R^2|\phi_n(R)\rangle\,\xi_n(R)+V(R)\xi_n(R)$$

אבל

$$\langle\phi_n|\nabla_R^2|\phi_n\rangle\xi_n=\underbrace{\langle\phi_n|\nabla_R^2\phi_n\rangle}\xi_n+2\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R\phi_n\rangle\cdot\vec{\nabla}_R\xi_n+\nabla_R^2\xi_n$$

$$\sum_k\langle\phi_n|\nabla_R|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\nabla_R|\phi_n\rangle=\sum_k\langle\phi_n|\nabla_R\phi_k\rangle\langle\phi_k|\nabla_R\phi_n\rangle+\nabla_R\langle\phi_n|\nabla_R\phi_n\rangle$$

$$\Leftarrow\quad=\left[\vec{\nabla}_R+\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R\phi_n\rangle\right]^2\xi_n+\sum_{k\neq n}\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R\phi_k\rangle\langle\phi_k|\vec{\nabla}_R\phi_n\rangle\,\xi_n$$

נגדיר

$$\vec{a}_n(R)=i\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R\phi_n\rangle$$

נזכור ש $\langle\phi_n|\nabla\phi_n\rangle$ מדומה ולכן $\vec{a}$ ממשי

$$\varphi_n(R)=\frac{-\hbar^2}{2M}\sum_{k\neq n}\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R\phi_k\rangle\langle\phi_k|\vec{\nabla}_R\phi_n\rangle$$

$$=\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{k\neq n}\frac{|\langle\phi_n|\vec{\nabla}_R h|\phi_k\rangle|^2}{(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_k)^2}$$

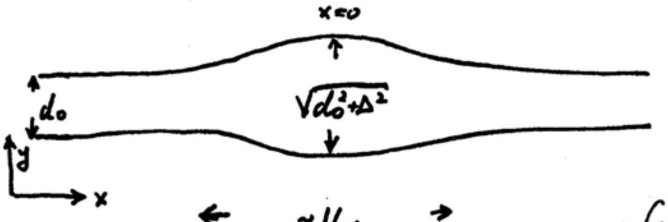
נשתמש ב: $\langle\phi_n|\nabla\phi_k\rangle=\frac{\langle\phi_n|\nabla h|\phi_k\rangle}{\mathcal{E}_k-\mathcal{E}_n}$

בסיכום נקבל ש $\xi_n(R)$ מקיים את המשוואה הבאה:

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2M}\left[-i\vec{\nabla}_R-\vec{a}(R)\right]^2+\mathcal{E}_n(R)+\varphi_n(R)+V(R)\right\}\xi_n(R)=E\,\xi_n(R)$$

קיבלנו לכן שדרגות החופש האיטיות נעות בפוטנציאל אפקטיבי $\mathcal{E}_n+\varphi_n+V$ ונתונות להשפעת וקטור פוטנציאל $\vec{a}$ הנקבע על ידי הדינמיקה של דרגות החופש המהירות. $\vec{a}$ מתאפס כשניתן לבחור ϕ_n ממשיים. φ_n משרה תיקון מסדר m/M.

<u>דוגמא</u>: תנועת חלקיק הנע בתעלה בעלת קירות אינסופיים ובעלת רוחב משתנה:



$$d^2(x) = d_0^2 + \frac{\Delta^2}{\cosh^2 \alpha x}$$

כאשר α קטן - כלומר השינוי ברוחב התעלה איטי.
במצב זה פונקצית הגל צפויה להשתנות לאט כפונקציה של X
בניגוד לשינוי כפונקציה של y (אלא אם כן האנרגיה הקינטית הקשורה לתנועה בציר X דומה לזו הקשורה בציר y - שאז כל זה לא המצב). נתייחס לכן לX כאל קואורדינטה איטית ולy כמהירה.
נרשום

$$\Psi(x,y) = \xi_n(X)\, \phi_n(y, X)$$

כאשר $\phi_n(y;X)$ מקיים את המשוואה

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \phi_n}{\partial y^2} = \varepsilon_n \phi_n$$

עם תנאי השפה $\phi_n\left(y = \pm\frac{1}{2} d(x)\right) = 0$.

$$\varepsilon_n(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{d(x)}\right)^2$$

ברור כי במקרה שלפנינו האנרגיות האיטיות הינן
הפונקציות האיטיות הינן הסינוסים והקוסינוסים המוכרים.
נכון כעת את המשוואה לקואורדינטה האיטית X. קל לראות שמכיון שהפונקציות האיטיות ממשיות $a(x)=0$. כאן כן קל לראות ש $\frac{\partial}{\partial X} h \propto \delta\left(y \pm \frac{d(x)}{2}\right)$ מכיון ש

$$h(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \begin{cases} 0 & |y| < \frac{d(x)}{2} \\ \infty & \text{אחרת} \end{cases}$$

ומכיון שהפונקציות האיטיות מתאפסות ב $y = \pm\frac{d(x)}{2}$ גם $\varphi_n(x) = 0$.

$$\Leftarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \xi_n}{\partial X^2} + \frac{\hbar^2}{2m}(\pi n)^2 \frac{1}{d_0^2 + \frac{\Delta^2}{\cosh^2 \alpha x}}\xi_n = E\xi_n$$

שאז $d_0 \gg \Delta$ ונקבל

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \xi_n}{\partial X^2} - \frac{U_0}{\cosh^2 \alpha x}\xi_n = \left[E - \frac{\hbar^2 (\pi n)^2}{2m d_0^2}\right]\xi_n$$

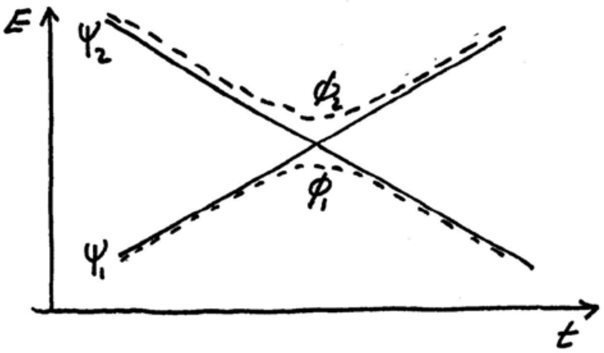
כאשר $U_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\pi n \Delta)^2}{d_0^4}$. ξ_n נע לכן בהשפעת בור פוטנציאל אפקטיבי. בפוטנציאל זה היא משוואת שרדינגר הניתנת לפתרון אנליטי - ראו Landau Lif CH. III. יש בו תמיד לפחות מצב קשור אחד (בנוסף כמובן לאינסוף מצבי פיזור מעל לבור). אנרגית המצב הקשור הנמוך:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{d_0}\right)^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m}\left[\sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}} - 1\right]^2$$

ראינו כי הקירוב האדיאבטי נשבר ליד ניוון או כמעט ניוון של הרמות האדיאבטיות. בסביבת נקודות אלה נוכל לקבל מעבר בין הרמות האדיאבטיות. ננסה לחשב כאן את הסתברות המעבר:

[לפי C. Wittig J. Phys Chem B 109 8428 (2005)]

Landau - Zener Transitions



נתמקד בסביבת ה avoided crossing point בה ההמילטוניאן ניתן לכתיבה בתת-המרחב של הרמות ה<u>דיאבטיות</u> בצורה הבאה:

$$\hat{H}(t) = \varepsilon_1(t)|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + \varepsilon_2(t)|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + H_{12}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2| + H_{12}^*|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1|$$

הרמות הדיאבטיות Ψ_1, Ψ_2 הינן הרמות שהיו חוצות בנקודת חיתוך אמיתית ללא החלק בהמילטוניאן המעורב בינהן: H_{12}. במודל הפשוט שנתאר נניח כי חלק זה קבוע בזמן.
הרמות האדיאבטיות ϕ_1, ϕ_2 הינן הפונקציות העצמיות של $\hat{H}$ בזמן נתון. האנרגיות האדיאבטיות הקשורות אליהן הן פתרונות המשוואה הריבועית

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1(t)-E & H_{12} \\ H_{12}^* & \varepsilon_2(t)-E \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{2} \mp \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2 + 4|H_{12}|^2}$$

$\Rightarrow$

משמאל ל ACP $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$

$$E_1 \simeq \varepsilon_1 - \frac{|H_{12}|^2}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}$$
$$E_2 \simeq \varepsilon_2 + \frac{|H_{12}|^2}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}$$

מימין ל ACP $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$

$$E_1 \simeq \varepsilon_2 - \frac{|H_{12}|^2}{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)^2}$$
$$E_2 \simeq \varepsilon_1 + \frac{|H_{12}|^2}{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)^2}$$

הרמות האדיאבטיות מחליפות "אופי" כשהמערכת חולפת דרך ה ACP.

דוגמא לתרגיל הנ"ל: ספין 1/2 בשדה מגנטי תלוי בזמן בכיוון z ושדה מגנטי קבוע בכיוון x:
B_z מתחיל בכיוון $+\hat{z}$ קטן ל 0 וממשיך עד ל $-\hat{z}$.

$$\hat{H}(t) = -B_z(t)\hat{S}_z - B_x\hat{S}_x$$

במקרה זה הרמות הדיאבטיות הינן הפונקציות העצמיות של $\hat{S}_z$:

$$|\psi_1\rangle = |\uparrow\rangle \quad , \quad |\psi_2\rangle = |\downarrow\rangle$$

$$\hat{H}(t) = -B_z(t)|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + B_z(t)|\downarrow\rangle\langle\downarrow| - B_x|\uparrow\rangle\langle\downarrow| - B_x|\downarrow\rangle\langle\uparrow|$$!

נוכל לכתוב את המצב המדויק של המערכת בבסיס הדיאבטי:

$$|\psi(t)\rangle = A_1(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,\mathcal{E}_1(t')}|\psi_1\rangle + A_2(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\,\mathcal{E}_2(t')}|\psi_2\rangle$$

אנו מעוניינים לענות על השאלה הבאה: נניח כי המערכת נמצאת במצב הדיאבטי $|\psi_1\rangle$ ב $t=-\infty$ (שם הוא זהה למצב האדיאבטי $|\phi_1(t=-\infty)\rangle$), כלומר $A_1(t=-\infty)=1$. מה ההסתברות למצוא את המערכת באותו מצב דיאבטי ב $t=\infty$. הסתברות זו היא ההסתברות למעבר Landau-Zener בין הרמות האדיאבטיות ϕ_1 ו ϕ_2.

נציב את $|\psi(t)\rangle$ במשוואת שרדינגר התלויה בזמן $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ ונטיל על $\langle\psi_1|$ ו $\langle\psi_2|$ לקבל:

$$(1) \quad \dot{A}_1 = -i\frac{H_{12}}{\hbar}\,e^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'[\mathcal{E}_1(t')-\mathcal{E}_2(t')]}A_2$$

$$(2) \quad \dot{A}_2 = -i\frac{H_{12}^*}{\hbar}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'[\mathcal{E}_1(t')-\mathcal{E}_2(t')]}A_1$$

נגזור את המשוואה הראשונה פעם נוספת בזמן ונשתמש במשוואות ל $\dot{A}_1$ ו $\dot{A}_2$ כדי לרשום אותה כ:

$$\ddot{A}_1 - \frac{i}{\hbar}[\mathcal{E}_1(t)-\mathcal{E}_2(t)]\dot{A}_1 + \frac{|H_{12}|^2}{\hbar^2}A_1 = 0$$

בלי הגבלת הכלליות נניח כי הרמות הדיאבטיות מצטלבות עבור $t=0$ וכי $\mathcal{E}_1(0)=\mathcal{E}_2(0)$

וליד נקודת המפגש נקבל $\mathcal{E}_1(t)=S_1t \;;\; \mathcal{E}_2(t)=S_2t \Rightarrow \mathcal{E}_1(t)-\mathcal{E}_2(t)=(S_1-S_2)t\equiv\alpha t$

נגדיר את התדירות האופיינית $\omega = \frac{|H_{12}|}{\hbar}$

זוהי תדירות Rabi בה המערכת מתנדנדת בין המצבים הדיאבטיים בנקודת הצומת.

ואת הזמן האופייני בו חולפת המערכת ליד הצומת הדיאבטי $\tau = \frac{|H_{12}|}{\alpha}$.

במונחי ω ו-τ נקבל:

$$(3) \quad \ddot{A}_1 - i\frac{\omega}{\tau} t \dot{A}_1 + \omega^2 A_1 = 0$$

נבחן תחילה בגבול $H_{12} \to 0$ (כשנשאר השדה ומהירות α קבועים). ברור כי בגבול זה המערכת תישאר בקירוב טוב על הדיאבטה $|\psi_1\rangle$, כלומר $A_1 \simeq 1$ לכל זמן. נשתמש בקירוב זה במשוואה (2) למצוא

$$A_2^f = A_2(t\to\infty) \propto \int_{-\infty}^{\infty} -i\frac{H_{12}^*}{\hbar} e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' t'} dt$$

$$= -i\frac{H_{12}^*}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-\frac{i\alpha}{2\hbar}t^2 + i\phi}$$

כשמשתמשים ב $A_2(t=-\infty)=0$ ומאפסים את ϕ ומבצעים את האינטגרל המתקבל מהגבול ומחשבים את האינטגרל הגאוסיאני בשורה השנייה. האינטגרל הנ"ל הינו גאוסי עם התוצאה

$$= -i\frac{H_{12}^*}{\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{i\alpha}}\, e^{i\phi} = H_{12}^*\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\alpha}}\, e^{i(\phi - \frac{3\pi}{4})}$$

$\Leftarrow$ ההסתברות למעבר 1-2 היא בגבול זה:

$$P_{1\to2} = 1 - |A_2^f|^2 = 1 - 2\pi\frac{|H_{12}|^2}{\hbar\alpha} = 1 - 2\pi\omega\tau$$

נעבור כעת לטפל במקרה הכללי ונחלק את משוואה (3) ב- $-i\frac{\omega}{\tau}tA_1$. ברור כי חלוקה זו בעייתית ב $t=0$ אך קל לראות כי אם נחלק ב $-i\frac{\omega}{\tau}(t-i\varepsilon)A_1$ כאשר $\varepsilon\to0$ אינפיניטסימלי המשוואה שנקבל תישאר בסביבת $t=0$ על ידי האיברים המתקבלים מהאיבר הראשון והשלישי ב(3) משתנה לכן את (3) בקירוב זה.

$$\Leftarrow \quad \frac{\dot{A}_1}{A} = -i\frac{\omega\tau}{t-i\varepsilon} - i\frac{\tau}{\omega}\frac{\ddot{A}_1}{A_1}\frac{1}{t-i\varepsilon}$$

נעביר המשוואה אינטגרציה מ $t=-\infty$ ל $t=\infty$

$$\Big|_{-\infty}^{\infty}\ln A_1(t) = -i\omega\tau\,\Big|_{-\infty}^{\infty}\ln(t-i\varepsilon) - \frac{i\tau}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,\frac{\ddot{A}_1}{A_1}\frac{1}{t-i\varepsilon}$$

נשתמש בכך כי $A_1(-\infty)=1$

$$\Big|_{-\infty}^{\infty}\ln(t-i\varepsilon) = 0-(-i\pi) = i\pi$$

$$(4)\quad \ln A_1^f = \pi\omega\tau - \frac{i\tau}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,\frac{\ddot{A}_1}{A_1}\frac{1}{t-i\varepsilon}$$

לצורך חישוב האינטגרל האחרון נשים לב שכדי שמשוואה (3) תתקיים בגבול $t\to\pm\infty$ האיבר האחרון יחד חייב לבטל את האיבר השני כלומר $\dot{A}_1(t\to\pm\infty) = -i\omega\tau\,\frac{A_1(t\to\pm\infty)}{t}$ ולכן $\ddot{A}_1(t\to\pm\infty) \sim \frac{1}{t^2}A_1(t\to\pm\infty)$, אחרת זה מבטל תרומות מסדרים גבוהים יותר בפיתוח $A_1 = A_1^f + \frac{a_1}{t} + \frac{a_2}{t^2} + \cdots$. לכן $\frac{\ddot{A}_1}{A_1} \sim \frac{1}{t^2}$ עבור $|t|\to\infty$ על הציר הממשי. נשים לב גם כי גם אם A_1 מכיל איבר פאזה התלוי בזמן תלות זו לא מופיעה ב $\dot{A}_1/A_1$ ו $\ddot{A}_1/A_1$. לדוגמא אם $A_1 = g(t)e^{f(t)}$ $\dot{A}_1/A_1 = \dot{g}/g + \dot{f}$

זה חשוב כי אנו מעוניינים בהמשכה האנליטית של $\frac{\ddot{A}_1}{A_1}$ למישור המרוכב (אחר הפאזה יכול להפוך לאקספוננט ממש). נקבל לכן שההמשכה האנליטית של $\frac{\ddot{A}_1}{A_1}$ צריכה להתנהג כ t^{-2} עבור $|t|\to\infty$.

נוכל לחשב לכן את האינטגרל המבוקש ע"י שימוש במשפט השארית לאורך המסלול בהתחשב לכך שהתרומה של האינטגרל על הקשת מתאפסת בגבול $|t|\to\infty$ והאינטגרל המבוקש יהיה $2\pi i$ כפול השארית בראשית שהיא $\ddot{A}_1/A_1(0) = -\omega^2$ מתוך (3) ולכן האיבר האחרון ב(4) שווה ל $-2\pi\omega\tau$.

לחילופין אם נבחר לחשב את האינטגרל לאורך המסלול לא נקיף את הקוטב התרומה מהקשת עדיין מתאפסת ונקבל לכן 0.

בסך הכל נקבל מ (4) $A_1^f = e^{\mp\pi\omega\tau}$, כשהסימן העליון מתאים לדרך החישוב הראשונה והתחתון לשניה. מתוך השוואה למקרה הגבולי שחישבנו ברור שיש לבחור בדרך הראשונה ונקבל את נוסחת Landau Zener

$$P_{1\to2} = |A_1^f|^2 = e^{-2\pi\omega\tau}$$

ניתן לראות כי בגבול האדיאבטי $\omega\tau\gg1$ ההסתברות למעבר קטנה אקספוננציאלית. המקור לכך הוא בשינוי המהיר של הפאזה באינטגרל המגדיר את מקדמי הפיתוח C_k בדיון על הקירוב האדיאבטי.

נסיים פרק זה בבחינת האופן בו דועך מצב קוונטי הקשור לרצף. נעשה זאת במסגרת קירוב הנקרא
Wigner - Weiskopf Approximation

נתבונן במצבים העצמיים של ההמילטוניאן H_0. נניח כי יש רצף של מצבים כאלה ψ_ν עם אנרגיות E_ν.
נתמקד במצב אחד ψ_0 עם אנרגיה E_0. זו יכולה להיות רמה מבודדת או חלק מהרצף. נניח כי
הדינמיקה של המערכת נקבעת על ידי ההמילטוניאן (שאינו תלוי בזמן) $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$.
נניח כי המערכת נמצאת ב ψ_0 ב $t=0$ ונרצה לחשב את ההתפתחות בזמן שלה, כלומר את
הסיכוי למצוא את המערכת ב ψ_0 בזמן מאוחר יותר.

נפתח

$$|\psi(t)\rangle = C_0(t)|\psi_0\rangle + \sum_\nu C_\nu(t)|\psi_\nu\rangle$$

נציב במשוואת שרדינגר התלויה בזמן ונטיל אותה על $\langle\psi_0|$ ו $\langle\psi_\mu|$:

$$i\hbar\dot{C}_0 = (E_0+V_{00})C_0 + \sum_\nu V_{0\nu}C_\nu$$

$$i\hbar\dot{C}_\mu = (E_\mu+V_{\mu\mu})C_\mu + V_{\mu 0}C_0 + \sum_{\nu\neq\mu} V_{\mu\nu}C_\nu \qquad V_{\mu\nu} = \langle\psi_\mu|\hat{V}|\psi_\nu\rangle$$

בקירוב Wigner-Weiskopf נזניח את האינטראקציה בין מצבים שונים ברצף, כלומר $V_{\mu\nu}=0$.

אנו רוצים לפתור את מערכת המשוואות הדיפרנציאליות הנ"ל תחת תנאי ההתחלה $C_0(0)=1$, $C_\mu(0)=0$
נעשה זאת על ידי העברת המערכת טרנספורם לפלס המוגדר כ:

$$b(s) = \int_0^\infty dt\, c(t)\, e^{-st}$$

והטרנספורם ההפוך

$$c(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty} ds\, b(s)\, e^{st}$$

כאשר $t\geq 0$ ו $b(s)$ אנליטית עבור $Re(s)>\varepsilon$

הסיבה לשימוש בטרנספורם זה היא העובדה שהוא מערב את תנאי ההתחלה מכיון ש

$$\int_0^\infty \frac{dc}{dt} e^{-st} dt = \Big| _0^\infty c(t) e^{-st} + s\int_0^\infty dt\, c(t) e^{-st} = -c(0) + s\, b(s)$$

המשוואות לאחר הטרנספורם

$$(i\hbar s - E_0 - V_{00})\, b_0(s) - i\hbar \cdot \underset{c(0)}{1} = \sum_\mu V_{0\mu}\, b_\mu(s)$$

$$(i\hbar s - E_\mu - V_{\mu\mu})\, b_\mu(s) = V_{\mu 0}\, b_0(s)$$

$\Leftarrow$

$$b_\mu(s) = \frac{V_{\mu 0}}{i\hbar s - (E_\mu + V_{\mu\mu})}\, b_0(s)$$

$$b_0(s) = \frac{i\hbar}{i\hbar s - (E_0 + V_{00}) - \sum_\mu \frac{|V_{0\mu}|^2}{i\hbar s - (E_\mu + V_{\mu\mu})}} = \frac{i\hbar}{i\hbar s - (E_0 + V_{00}) - \int dE_\mu\, \rho(E_\mu) \frac{|V_{0\mu}|^2}{i\hbar s - (E_\mu + V_{\mu\mu})}}$$

כשעוברים לאינטגרל על אנרגיות מצבי הרצף בעזרת צפיפות המצבים שלהם.
לצורך ביצוע ההמשך האנליטי של $b_0(s)$ נבדוק את המכנה שלו:

$$i\hbar\, \mathrm{Re}\, s - (E_0 + V_{00} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s) + \sum_\mu \frac{|V_{0\mu}|^2}{(E_\mu + V_{\mu\mu} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s) - i\hbar\, \mathrm{Re}\, s} =$$

$$-(E_0 + V_{00} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s) + \sum_\mu \frac{|V_{0\mu}|^2 (E_\mu + V_{\mu\mu} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s)}{(E_\mu + V_{\mu\mu} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s)^2 + (\hbar\, \mathrm{Re}\, s)^2} + i\hbar\, \mathrm{Re}\, s \left[1 + \sum_\mu \frac{|V_{0\mu}|^2}{(E_\mu + V_{\mu\mu} + \hbar\, \mathrm{Im}\, s)^2 + (\hbar\, \mathrm{Re}\, s)^2}\right]$$

ניתן לראות כי החלק המדומה של המכנה יכול להתאפס רק אם $\mathrm{Re}\, s = 0$. מכאן שהמכנה יכול להתאפס רק על ציר s המדומה $\Leftarrow$ הסינגולריות של $b_0(s)$ נמצאות על ציר המדומה. לצורך חישוב $b_0(t)$ בעזרת הטרנספורם ההפוך נבחר לכן מסלול העובר $\varepsilon/\hbar$ אינפיניטסימלי מימין לציר המדומה (או בגלל המישור השמאלי שבו הטרנספורם יכול להתבדר ויש להמשיכו אנליטית)

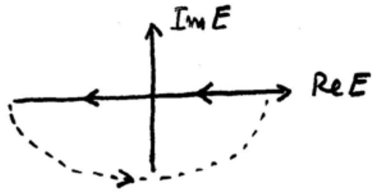
נמשיך את האינטגרל בטרנספורם ההפוך בעזרת משפט השארית. לשם כך נסגור את מסלול האינטגרציה בעזרת הקשת עד $\mathrm{Re}\, s \to -\infty$. האינטגרל על הקשת יתאפס בגלל הפקטור e^{st} באינטגרנד (כשנזכור $t>0$).

נשנה את משתנה האינטגרציה
לקבל

$$E = i(\hbar s - \varepsilon)$$

$$C_0(t) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{2\pi i} \int_C dE \, \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{E + i\varepsilon - (E_0 + V_{00}) - \int_{-\infty}^{\infty} dE_\mu \, \rho(E_\mu) \frac{|V_{0\mu}|^2}{E + i\varepsilon - (E_\mu + V_{\mu\mu})}}$$

כשמסלול האינטגרציה הינו כך



ננסה להוכיח כעת את הזהות השימושית הבאה:
עבור פונקציה אנליטית $f(x)$ ו a באינטרוול $[b,c]$ מתקיים

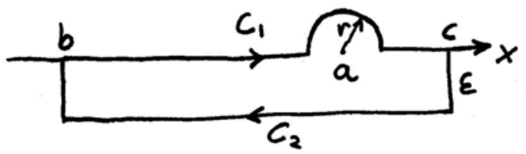
$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_b^c dx \, \frac{f(x)}{x - a \pm i\varepsilon} = P\int_b^c dx \, \frac{f(x)}{x-a} \mp i\pi f(a)$$

כאשר ה principal value של אינטגרל מוגדר כ:

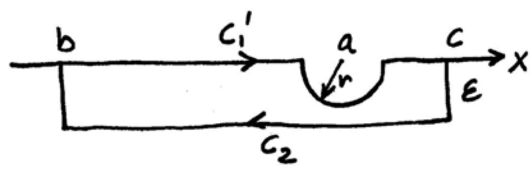
$$P\int_b^c \frac{f(x)}{x-a} dx = \lim_{r \to 0} \int_b^{a-r} \frac{f(x)}{x-a} dx + \lim_{r \to 0} \int_{a+r}^{c} \frac{f(x)}{x-a} dx$$

לצורך ההוכחה נתבונן בשני מסלולי האינטגרציה הבאים

A:



B:



בגבול $\varepsilon \to 0$ נוכל להזניח את התרומות הבאות מהקטעים המאונכים לציר X. נשתמש במשפט השארית
לקבל

$$A:\quad \int_{C_1} dx\,\frac{f(x)}{x-a} + \int_{C_2} dx\,\frac{f(x)}{x-a} = \int_{C_1} dx\,\frac{f(x)}{x-a} + \int_c^b dx\,\frac{f(x-i\varepsilon)}{x-a-i\varepsilon} = -2\pi i\, f(a)$$

$$B:\quad \int_{C_1'} dx\,\frac{f(x)}{x-a} + \int_{C_2} dx\,\frac{f(x)}{x-a} = \int_{C_1'} dx\,\frac{f(x)}{x-a} + \int_c^b dx\,\frac{f(x-i\varepsilon)}{x-a-i\varepsilon} = 0$$

נשים לב ש

$$\int_{C_1} dx\,\frac{f(x)}{x-a} + \int_{C_1'} dx\,\frac{f(x)}{x-a} = 2P\int_b^c dx\,\frac{f(x)}{x-a}$$

כאשר מבין שהתרומות מהאינטגרציה על הקשתות מבטלות זו את זו:

$$A:\quad \int_\pi^0 d\theta\cdot r\,\frac{f(a)}{r(\cos\theta + i\sin\theta)} = f(a)\int_\pi^0 d\theta\,(\cos\theta - i\sin\theta)$$

$$B:\quad \int_\pi^0 d\theta\, r\,\frac{f(a)}{r(\cos\theta - i\sin\theta)} = f(a)\int_\pi^0 d\theta\,(\cos\theta + i\sin\theta)$$

$$+\Big\}\quad 2f(a)\int_\pi^a d\theta\,\cos\theta = 0$$

נחבר את התוצאות לאינטגרציה על A ו B לקבל אחרי חלוקה ב 2

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_b^c dx\,\frac{f(x)}{x-a-i\varepsilon} = P\int_b^c dx\,\frac{f(x)}{x-a} + i\pi f(a)$$

נקבל לכן

$$C_0(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_c dE\,\frac{e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}{E - \left[E_0 + V_{00} + P\int_{-\infty}^{\infty} dE_\mu\,\frac{\rho(E_\mu)|V_{0\mu}|^2}{E-(E_\mu+V_{\mu\mu})}\right] + i\pi|V_{0\mu}|^2\rho(E_\mu)\Big|_{E_\mu = E - V_{\mu\mu}}}$$

נמצא את מיקום הקוטב של האינטגרנד על ידי השוואת המכנה לאפס ופתרון המשוואה עד סדר שני ב V. נמצא כי עד סדר שני הקוטב נמצא ?

$$E = E_0 + \Delta E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$$

כאשר

$$\Delta E_0 = V_{00} + P\int_{-\infty}^{\infty} dE_\mu\,\frac{\rho(E_\mu)|V_{0\mu}|^2}{E-E_\mu}$$

$$\Gamma = 2\pi\,|V_{0\mu}|^2\rho(E_\mu)\Big|_{E_\mu=E_0}$$

קל לראות כי זהו התיקון לאנרגיה E_0 עד סדר שני ב V המתקבל מתורת ההפרעות שאינה תלויה בזמן

ולכן $C_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+\Delta E_0)t - \frac{\Gamma}{2\hbar}t}$

דעיכת המצב נתונה על ידי $|C_0(t)|^2 = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t} \equiv e^{-t/\tau}$

כאשר $\tau = \hbar/\Gamma$ הוא זמן החיים שלו.

Γ נקרא הרוחב האנרגטי של הרמה. כדי לראות מדוע נשוב למשוואה עבור $C_\mu(t)$:

$$i\hbar \dot{C}_\mu = (E_\mu + V_{\mu\mu}) C_\mu + V_{\mu 0} C_0$$

קל לראות שהפתרון למשוואה המקיים את תנאי ההתחלה $C_\mu(0)=0$ הינו

$$C_\mu(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\mu+V_{\mu\mu})t} \int_0^t dt' \, \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_\mu+V_{\mu\mu})t'}}{i\hbar} V_{\mu 0} C_0(t')$$

$$= -V_{0\mu} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\mu+V_{\mu\mu})t} \left. \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_\mu+V_{\mu\mu}-E_0-\Delta E_0+i\frac{\Gamma}{2})t'}}{E_\mu+V_{\mu\mu}-E_0-\Delta E_0+\frac{i\Gamma}{2}} \right|_0^t$$

$$= V_{\mu 0} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\mu+V_{\mu\mu})t} - e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0+\Delta E_0)-\frac{\Gamma}{2\hbar}t}}{E_\mu+V_{\mu\mu}-E_0-\Delta E_0+i\frac{\Gamma}{2}}$$

עבור $t \gg \tau$ נוכל להזניח את האקספוננט השני ונקבל

$$|C_\mu(t)|^2 \to \frac{|V_{0\mu}|^2}{\left[(E_\mu+\Delta E_\mu)-(E_0+\Delta E_0)\right]^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

כאשר $\Delta E_\mu = V_{\mu\mu}$

הסיכוי למצוא לכן את המערכת במצב עם אנרגיה $E_\mu+\Delta E_\mu$ הוא לורנציאן סביב $E_0+\Delta E_0$ עם full width at half maximum בגודל Γ