קוונטיזציה שניה. Second Quantization

נתבונן במערכת של N חלקיקים שווים (חסרי ספין) הנעים במרחב d מימדי. פונקצית הגל $\Psi(x_1,x_2\cdots x_N)$, $x_i\in\mathbb{R}^d$
היא האמפליטודה למציאת החלקיק הראשון ב x_1, השני ב x_2 ... ואת החלקיק ה N ב x_N.
במקרה בו N החלקיקים זהים הקונפיגורציה $(x_1 x_2\cdots x_N)$ וכל הקונפיגורציות המתקבלות ממנה על ידי פרמוטציות של החלקיקים מתארות מצב פיסיקלי זהה של המערכת. לכן צפיפות ההסתברות $|\Psi(x_1,x_2,\cdots,x_N)|^2$ חייבת להיות אינווריאנטית תחת החלפת שתי תויות המשמשות לציון החלקיקים.
כתוצאה מכך

$$\Psi(x_1\cdots x_j\cdots x_k\cdots x_N)=e^{i\theta}\,\Psi(x_1\cdots x_k\cdots x_j\cdots x_N)$$

אבל ברור שביצוע החלפה נוספת של אותו הזוג נחזור לפונקצית הגל המקורית כפולה ב $e^{2i\theta}$
ולכן בהכרח $e^{2i\theta}=1$. לתנאי זה שני פתרונות:

$\theta=0$: בוזונים: פונקצית הגל סימטרית תחת פרמוטציה של שני אינדקסים.

$\theta=\pi$: פרמיונים: פונקצית הגל אנטי-סימטרית תחת פרמוטציה של שני אינדקסים.

מסתבר כי מסקנה זו בדבר קיומם של שני סוגים בלבד של סטטיסטיקה קוונטית נכונה ב $3D$, אך הדרך הסטנדרטית שהובילה אותנו אליה מחמיצה אפשרות מעניינת הקיימת בשני מימדים. כדי לראות אפשרות זו ולהבין טוב יותר את התוצאה ב $3D$ עלינו לחזור לבסיס.
במכניקה הקוונטית אנו נדרשים לחשב את האמפליטודה שהחלקיק בו קונפיגורציה אחת מתפתחת בזמן לקונפיגורציה אחרת. בנוסח התורה לפי פיינמן הדבר נעשה על ידי סכום האמפליטודות עבור כל המסלולים האפשריים בין שתי הקונפיגורציות (אינטגרל מסלול). השאלה כמובן היא איזה משקל (אמפליטודה) אנו צריכים לתת לכל מסלול.
מכניקת הקוונטים עצמה מספקת תנאי המגביל באופן משמעותי את אפשרויות הבחירה: אנו חייבים

לקיים את התנאי שאם אנו ממשיכים מסלול α_{01} מ-t_0 ל-t_1 במסלול α_{12} מ-t_1 ל-t_2 האמפליטודה של המסלול המורכב α_{02} צריכה להיות מכפלת האמפליטודות המשויכות ל-α_{01} ו-α_{12}. כלל זה קשור באופן הדוק לאוניטריות ולוקליות של התורה כלומר לפרשנות ההסתברותית ולעקרון הסופרפוזיציה. תנאי זה מתקיים אם נבחר את האמפליטודה שאנו מצמידים למסלול α להיות פאזה $e^{i\varphi(\alpha)}$ כאשר $\varphi(\alpha)$ תלויה במסלול.

שני הפאזה φ שעלינו לבחור בנקודה זו באה ממעבר המכניקה הקלאסית. נדרוש שבגבול הקלאסי $\hbar \to 0$ המסלול שתורם לאמפליטודה המעבר הכוללת יהיה המסלול הקלאסי. בבחירה של פיינמן $\varphi(\alpha) = \frac{1}{\hbar}\int_\alpha L\,dt$ כלומר הפעולה לאורך המסלול ביחידות של $\hbar$ עונה על דרישה זו. בגבול $\hbar \to 0$ תרומות מסלולים שונים הן בעלות פאזות המשתנות מהר מאוד ממסלול למסלול ובסך הכל מתאפסות לאפס. המקרה היחיד בו אין הדבר נכון הוא עבור מסלול שהמסלולים הקרובים לו הם בעלי פעולה דומה - תרומות מסלולים אלה תורמות באופן קוהרנטי לסכום. אבל המסלול עבורו וריאצית הפעולה מתאפסת: $\delta\int L\,dt = 0$ הינו בדיוק המסלול הקלאסי. נשים לב כי מסקנה זו אינה משתנה גם אם נוסיף לפאזה קבוע כל עוד הקבוע זה זהה לכל המסלולים הקרובים זה לזה, או במילים אחרות, לכל המסלולים ביניהם ניתן לעבור באופן רציף. כפי שנראה מיד לא כל שני מסלולים קשורים באופן רציף זה לזה. כלומר מרחב המסלולים אינו קשיר: הוא מורכב ממספר חלקים שלא ניתן לעבור ביניהם באופן רציף. במקרה כזה הגבול הקלאסי לא מונע אותנו לשנות הפרש הפאזה (מעבר להבדל בפעולה $\int L\,dt$) בין שני מסלולים השייכים לשני חלקים בלתי קשירים במרחב המסלולים.

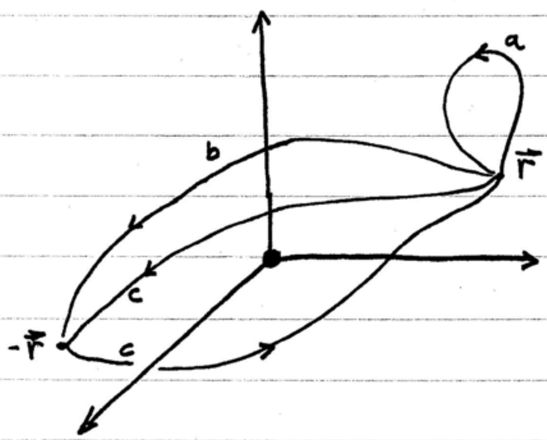
כדי להראות שמרחב המסלולים אינו קשיר נתבונן במרחב הקונפיגורציות של N חלקיקים זהים הנעים במרחב אוקלידי d ממדי R^d. כפי שכבר הזכרנו מרחב זה הינו R^{Nd}/S_N כלומר המרחב האוקלידי R^{Nd} בו אנו מזהים כל שתי נקודות שהקואורדינטות שלהן קשורות על ידי פרמוטציה השייכת לחבורת הפרמוטציות S_N של N עצמים. נוח לאפיין נקודה במרחב על ידי מתן קואורדינטות מרכז המסה: $\vec{R} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\vec{r_i}$ ו-$d(N-1)$ קואורדינטות יחסיות. מכיון ש-$\vec{R}$ אינווריאנטי תחת S_N נקבל

$$\frac{R^{Nd}}{S_N} = R^d \times r(d,N)$$

כאשר $r(d,N)$ הוא המרחב של $(N-1)d$ הקואורדינטות היחסיות.
הוא מתקבל מ-$R^{(N-1)d}$ על ידי זיהוי נקודות הקשורות זו לזו על ידי אלמנט ב-S_N.

לשם הפשטות נתבונן במקרה של שני חלקיקים $N=2$, ההחלפה לא תלוי הכוונה. במקרה זה $r(d,2)$ מתקבל מ R^d על ידי זיהוי הנקודות $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ ו $-\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$. נניח גם ששני החלקיקים לא יכולים להמצא באותה נקודה ולכן נוציא את הראשית מ $r(d,2)$. הנחה זו נכונה פרט למקרה הבוזוני אך ההנחה למקרה זה אינה משנה את המסקנה שנגיע אליה.

נבחן בתחילה את המקרה $d=3$. בפרט נתבונן במסלולים סגורים ב $r(3,2)$

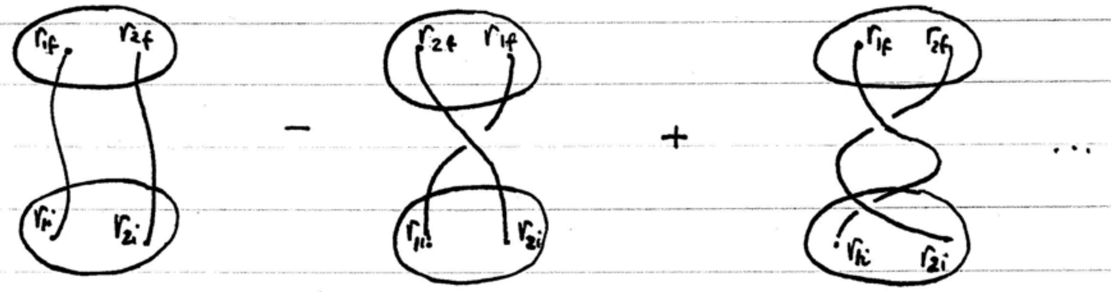


מסלול a מתאר תהליך שאינו מערב החלפה של החלקיקים

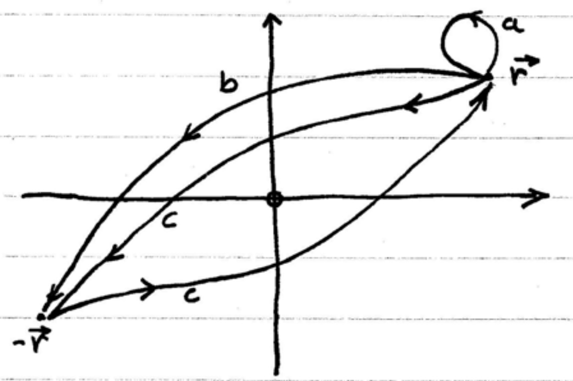
מסלול b גם הוא סגור מכיוון ש $\vec{r}$ ו $-\vec{r}$ הן אותה הנקודה. הוא מתאר תנועה בה החלקיקים מחליפים מקום.

מסלול c מתאר שני חילופים

ברור כי ניתן לעוות באופן רציף, תוך שמירת נקודת ההתחלה והסיום קבועות, את מסלול c למסלול a. מסלולים כאלה נקראים הומוטופיים ביחס לנקודות הקצה שלהם. באותה מידה ברור כי לא ניתן לעוות באופן רציף את מסלול b למסלול a. מסלול המייצג תהליך בעל 3 חילופים ניתן לייצג כהרכבה של מסלול מסוג b על מסלול מסוג c. מכיוון ש c הומוטופי למסלול הנשאר קבוע בנקודה $\vec{r}$ המסלול המורכב הומוטופי למסלול b. באופן כללי קבלנו לכן שכל מסלול ב $r(3,2)$ הומוטופי לאחת ממחלקות השקילות הבאות: מסלולים המייצגים מספר זוגי של חילופים ומסלולים המתארים מספר אי זוגי של חילופים. $r(3,2)$ כפול קשר. אם נצמיד לקבוצה הראשונה פאזה 0 הרי מכיוון שהרכבת שני מסלולים מהסוג השני הומוטופית למסלול מהקבוצה הראשונה נקבל את התנאי $e^{2i\theta}=1$, כאשר θ הפאזה שנצמיד לקבוצה השניה. כלומר $\theta=0,\pi$. כתוצאה מכך כל המסלולים באינטגרל המסלול הבוזוני הם בעלי משקל סטטיסטי 1 בעוד שבמקרה הפרמיוני מסלולים המערבים מספר זוגי של חילופים נכנסים לסכום על משקל 1 (כפול הפאזה הדינמית) ומסלולים המערבים מספר אי זוגי של חילופים נכנסים לסכום עם משקל -1. הדבר נכון רק ב3D.

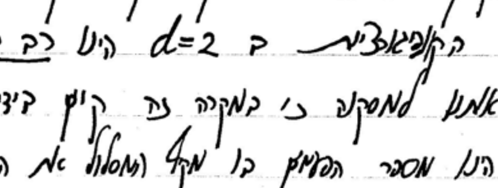


נתבונן כעת במקרה $d=2$ וב $r(2,2)$. קל לראות כי המסלולים ההומוטופיים למסלולים a, b ו c במקרה התלת מימדי הינם:

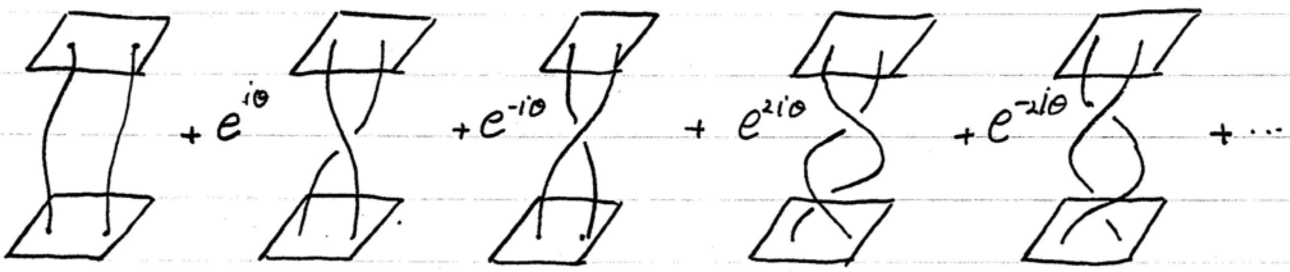


בעוד שמסלול b לא הומוטופי ל a אך במקרה זה, בניגוד למקרה התלת מימדי, גם מסלול c לא הומוטופי ל a - לא ניתן לעוות באופן רציף ל a מכיוון שהוצאנו את הראשית מהמישור

מעבר לכך, גם מסלולים המקיפים מספר שונה של חילופים אינם בהכרח הומוטופים זה לזה:

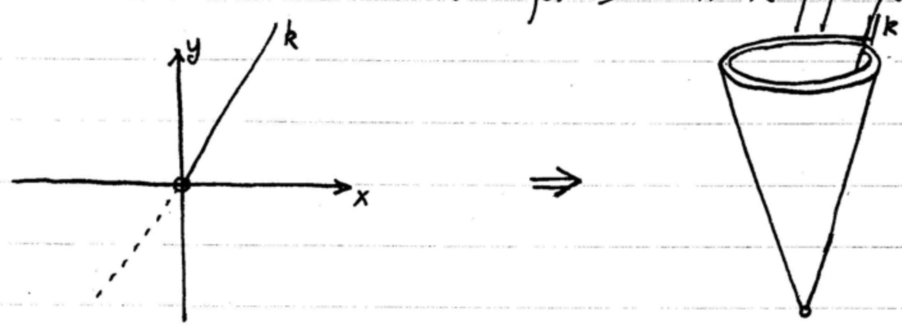


מרחב המסלולים מורכב מאינסוף מחלקות שקילות של מסלולים הומוטופיים. כל אחת ממחלקות אלה מכילה מסלולים בעלי אותו הפרש בין מספר הפעמים בו הם מקיפים את הראשית עם כיוון השעון ומספר הפעמים בו הם מקיפים את הראשית נגד כיוון השעון. מכאן הקונפיגורציה ב $d=2$ הינה <u>רב קשר</u> (multiply connected). תוצאה זו והדיון הקודם מובילים אותנו למסקנה כי במקרה זה קיים [illegible] הרלוונטי להצמיד למסלול פאזה $e^{in\theta}$ כאשר n הינו מספר הפעמים בו מקיף המסלול את הראשית (כשכיוון השעון נלקח השלילי והכיוון הנגדי כחיובי) כלומר n הינו ההפרש שמאפיין את מחלקת השקילות אליה שייך המסלול ו θ זווית כלשהי בתחום $[0,\pi]$. התוצאות $\theta=0$ ו $\theta=\pi$ מובילות לסטטיסטיקה בוזונית ופרמיונית בהתאמה. חלקיקים עם $\theta\neq0,\pi$ נקראים אניונים <u>Anyons</u>
באינטגרל המסלולים יופיעו לכן איברים מהצורה



בשני מימדים אין די בתאור הקונפיגורציה ההתחלתית והסופית כדי לקבוע את סימן התרומה. יש צורך לתאר גם את האופן בו הקונפיגורציה ההתחלתית מתפתחת בזמן לקונפיגורציה הסופית.

לדוגמא, נתבונן בפונקציית הגל של שני החלקיקים $\Psi(\vec{R},\vec{r})$, כפונקציה של $\vec{r}$ נגדיר אותה על $\Gamma(2,2)$.
בצורה כזו היא תתאר רק קונפיגורציות שונות פיזיקלית.
כפי שראינו $\Gamma(2,2)$ היא המישור המתקבל בו אנו מזהים את הנקודות $\vec{r}$ ו $-\vec{r}$. נוכל להציג גם באופן הבא: נחתוך אותו לאורך הקו k מהראשית ונקפל לחרוט כך:



בצורה זו k משמש כחתך (branch cut) לפאזה ϕ של פונקציית הגל ועלינו להגדיר כיצד היא משתנה כאשר אנו חוצים את החתך. בשני מימדים קיים בדיוק החופש לקבוע כי ϕ משתנה באופן הבא $\phi \to \phi+\theta$ כאשר $\theta \in [0,\pi]$. מצד שני אנו דורשים שΨ תהיה רציפה על $\Gamma(2,2)$. עבור מצב בעל תנע זוויתי מוגדר l הפאזה של פונקציית הגל היא $e^{il\varphi}$ כאשר φ הזווית של $\vec{r}$ עם כיוון יחוס (לדוגמא ציר x). שינוי של φ ב π (החלפת החלקיקים) בהכרח גורר חציה של החתך ולכן שינוי של הפאזה ב θ. מצד שני דרישת הרציפות מובילה ל $e^{il\varphi} = e^{i[l(\varphi+\pi)+\theta+2\pi n]}$
$\Leftarrow$ מס' שלם $+ \; l = -\frac{\theta}{\pi}$. עבור בוזונים $(\theta=0)$ התנע הזוויתי היחסי בין החלקיקים זוגי עובדה המשקפת סימטריה של פונקציית הגל המרחבית. עבור פרמיונים $(\theta=\pi)$ l אי-זוגי והפונקציה

המרחבות אי נוגעות, אך בנוסף למקרים אלה קיימת האפשרות לחלקיקים כלליים תחת תנאי ניסוי שבור. אלה הם האניונים. מסתבר כי anyons מתממשים בטבע כעירורים אלמנטריים של מערכות המציגות את אפקט הול השבר הקוונטי (fractional quantum Hall effect).

מעתה והלאה נעסוק במקרה הבוזוני והפרמיוני בלבד ונציג את השיטה הידועה בשם קוונטיזציה שניה המאפשרת לשמור באופן נח על דרישת הסימטריה מהמצב הרב-חלקיקי.

מרחב המצבים של מערכת בעלת N חלקיקים נפרש על ידי המצבים:

$$|u_{\alpha_1}\rangle \times |u_{\alpha_2}\rangle \cdots \times |u_{\alpha_N}\rangle$$

כאשר $\{|u_\alpha\rangle\}$ בסיס שלם של מצבים חד-חלקיקים אורתונורמליים.

בסיס זה של מצבים רב-חלקיקיים אינו בעל תכונות הסימטריה הנדרשות ממצבים המתארים מערכת פיסיקלית של חלקיקים זהים. נגדיר בסיס המקיים תכונות סימטריה אלה:

$$|u_{\alpha_1}, u_{\alpha_2}, \cdots u_{\alpha_N}\rangle = A \sum_{P:\ \text{פרמוטציות}} \xi^{\sigma(P)} |u_{P(\alpha_1)}\rangle \times |u_{P(\alpha_2)}\rangle \cdots |u_{P(\alpha_N)}\rangle$$

כאשר A קבוע נורמליזציה אותו נמצא מיד ו $\sigma(P)$ הינו מספר החילופים בפרמוטציה.

מכאן והלאה ההבדל בין המקרה הבוזוני והפרמיוני יכנס דרך הפרמטר ξ:

$$\xi = \begin{cases} 1 & \text{בוזונים:} \\ -1 & \text{פרמיונים:} \end{cases}$$

נראה כי למצבים שהגדרנו תכונות הסימטריה הנדרשות תחת החלפת שני חלקיקים: נתבונן במצב בו נחליף את החלקיקים ה i וה k:

$$|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_k}\cdots u_{\alpha_j}\cdots u_{\alpha_N}\rangle = A\sum_P \xi^{\sigma(P)}\,|u_{P(\alpha_1)}\rangle\times\cdots|u_{P(\alpha_k)}\rangle\cdots\times|u_{P(\alpha_j)}\rangle\cdots|u_{P(\alpha_N)}\rangle$$

לכל פרמוטציה P נגדיר פרמוטציה Q כך ש

$$Q(\alpha_j)=P(\alpha_k)$$
$$Q(\alpha_k)=P(\alpha_j)$$

ועבור $i\neq j,k$

$$Q(\alpha_i)=P(\alpha_i)$$

כלומר P ו Q נבדלות בחילוף אחד נוסף של האינדקסים אליהם P ממפה את α_j ו α_k ולכן $\sigma(Q)=\sigma(P)+1$. ברור גם כי הסכום על כל הפרמוטציות P שווה לסכום על כל הפרמוטציות Q שהוגדרו בדרך זו ולכן

$$= A\sum_Q \xi^{\sigma(Q)-1}\,|u_{Q(\alpha_1)}\rangle\cdots\times|u_{Q(\alpha_j)}\rangle\cdots\times|u_{Q(\alpha_k)}\rangle\cdots\times|u_{Q(\alpha_N)}\rangle$$

$$= \xi^{-1}\,|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_j}\cdots u_{\alpha_k}\cdots u_{\alpha_N}\rangle$$

מעתה נניח כי האינדקסים α_i מסודרים באופן מונוטוני, לדוגמא אם בחרנו כבסיס החד חלקיקי את המצבים העצמיים של האוסצילטור ההרמוני α יכולה להיות האנרגיה של הרמה. ברור גם כי בשל תכונות הסימטריה מצבים $|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N\rangle$ שאינם ממלאים זאת ניתן להביא לצורה זו בעזרת פרמוטציה מתאימה של האינדקסים ועד כדי פאזה של ± 1.

לכן מעתה נניח כי עבור בוזונים $\alpha_1\leq\alpha_2\leq\cdots\leq\alpha_N$

ועבור פרמיונים $\alpha_1<\alpha_2<\cdots<\alpha_N$

ברור כי עבור פרמיונים שוויון בין אינדקסים $\alpha_i=\alpha_j$ לא יכול להתקיים כי:

$$|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_i}\cdots u_{\alpha_j}\cdots u_{\alpha_N}\rangle = -|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_j}\cdots u_{\alpha_i}\cdots u_{\alpha_N}\rangle = -|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_i}\cdots u_{\alpha_j}\cdots u_{\alpha_N}\rangle = 0$$

נמצא את מקדם הנורמליזציה A:

$$1 = \langle u_{\alpha_1} \cdots u_{\alpha_N} | u_{\alpha_1} \cdots u_{\alpha_N} \rangle$$

$$= A^2 \sum_{P,Q} \xi^{\sigma(P)+\sigma(Q)} \left(\langle u_{P(\alpha_1)}| \cdots \langle u_{P(\alpha_N)}| \right) \left(|u_{Q(\alpha_1)}\rangle \cdots |u_{Q(\alpha_N)}\rangle \right)$$

המכפלה הפנימית אינה מתאפסת רק אם Q מסדרת את האינדקסים באותה צורה כמו P.

במקרה הפרמיוני בו כל האינדקסים שונים רק $Q=P$ ממלאת תנאי זה. מכיון שיש $N!$ פרמוטציות P אפשריות ומכיון ש $\xi^{\sigma(P)+\sigma(Q)} = \xi^{2\sigma(P)} = 1$ נקבל עבור פרמיונים

$$1 = A^2 N! \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

במקרה הבוזוני נוכל לקבל מצב בו יש יותר מחלקיק אחד במצב חד-חלקיקי מסוים $|u_\alpha\rangle$. נסמן ב n_α את מספר החלקיקים במצב זה. כעת $n_\alpha!$ הפרמוטציות Q הזהות ל P מחוץ לקבוצת האינדקסים המתאימים למצב $|u_\alpha\rangle$ תורמות. במקרה בו יש יותר מקבוצת מצבים זהה אחת נקבל (מכיון ש $\xi=1$ סימן הפרמוטציה אינו רלוונטי)

$$1 = A^2 N!\, n_1!\, n_2! \cdots$$

ולכן עבור בוזונים

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!\, n_1!\, n_2! \cdots}}$$

נשים לב כי נוסחה זו מכלה גם את המקרה הפרמיוני שעבורו, מכיון ש $n_\alpha = 0,1$, $n_\alpha! = 1$.

מהדיון הנ"ל קל לראות כי <u>מספרי האכלוס</u> n_α מאפשרים לתאר באופן חד ערכי את המצב הרב-חלקיקי ומעתה נשתמש בהצגה זו של המצבים.

אוסף המצבים $|n_1, n_2 \cdots \rangle$ עבור $\sum_\alpha n_\alpha = N = 0,1,2 \cdots \infty$ פורש את מרחב פוק <u>Fock space</u>.

מספר החלקיקים המאכלסים את המצב u_1

עד כה עסקנו במצבים. פונקצית הגל הרב-חלקיקית הינה מקדמי הפיתוח של מצבים אלה בבסיס $|x_1\rangle \times \cdots |x_N\rangle$:

$$\Psi(x_1, \cdots x_N) = \left(\langle x_N| \cdots \langle x_1|\right) |n_1 n_2 \cdots \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \sum_P \xi^{\sigma(P)} \left(\langle x_N| \cdots \langle x_1|\right)\left(|u_{P(\alpha_1)}\rangle \cdots |u_{P(\alpha_N)}\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2!}} \sum_P \xi^{\sigma(P)} u_{P(\alpha_1)}(x_1) \cdots u_{P(\alpha_N)}(x_N)$$

זוהי האמפליטודה למציאת חלקיק 1 ב x_1 ... חלקיק N ב x_N. היא מקיימת, כנדרש, את תנאי הסימטריה כי

$$\Psi\left[Q(x_1) \cdots Q(x_N)\right] = \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2!}} \sum_P \xi^{\sigma(P)} u_{P(\alpha_1)}\left[Q(x_1)\right] \cdots u_{P(\alpha_N)}\left[Q(x_N)\right]$$

לכל פרמוטציה P יש פרמוטציה P' כך ש $P=P'Q$. ברור שהסכום על P שווה לסכום על P'

$$= \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \sum_{P'} \xi^{\sigma(P')+\sigma(Q)} u_{P'[Q(\alpha_1)]}\left[Q(x_1)\right] \cdots u_{P'[Q(\alpha_N)]}\left[Q(x_N)\right]$$

$$= \xi^{\sigma(Q)} \Psi(x_1 \cdots x_N)$$

עבור פרמיונים ניתן להציג את Ψ כ

דטרמיננטת סלטר:

<u>Slater determinant:</u>

$$\Psi(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{\alpha_1}(x_1) & \cdots & u_{\alpha_1}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{\alpha_N}(x_1) & \cdots & u_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

לחילופין $\Psi(x_1 \cdots x_N)$ הינו מקדמי הפיתוח של $|n_1 n_2 \cdots\rangle$ במצבים

$$|x_1 \cdots x_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_P \xi^{\sigma(P)} \, |x_{P(1)}\rangle \times \cdots \times |x_{P(N)}\rangle$$

שימו לב לפקטור נוסף של $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ ביחס להגדרה שהצגנו קודם לכן

וזאת מכיוון ש
$$|n_1 n_2 \cdots\rangle = \int dx_1 \cdots dx_N \, \Psi(x_1 \cdots x_N) \, |x_1\rangle \times \cdots |x_N\rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P \int dx_1 \cdots dx_N \, \Psi[x_{P(1)} \cdots x_{P(N)}] \, |x_{P(1)}\rangle \times \cdots |x_{P(N)}\rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P \xi^{\sigma(P)} \int dx_1 \cdots dx_N \, \Psi(x_1 \cdots x_N) \, |x_{P(1)}\rangle \times \cdots |x_{P(N)}\rangle$$

$$= \int dx_1 \cdots dx_N \, \Psi(x_1 \cdots x_N) \, |x_1 \cdots x_N\rangle$$

אני משאיר לכם להראות כתרגיל ש
$$\langle x'_1 \cdots x'_N | x_1 \cdots x_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_P \xi^{\sigma(P)} \delta[x_1 - x'_{P(1)}] \cdots \delta[x_N - x'_{P(N)}]$$

קוונטיזציה שניה הינה דרך אלטרנטיבית להצגת מצבים רב-גופיים. העובדה שמצב כללי במרחב Fock מאופיין על ידי מספרי האכלוס שלו מצביעה על קשר עם האופן בו אפיינו מצבים של אוסצילטור הרמוני על ידי אופרטור המספר. המצב $|n_1 n_2 \cdots\rangle$ מיוצג על ידי

$$|n_1 n_2 \cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \, n_2! \cdots}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \cdots |0\rangle$$

כאשר $|0\rangle$ הינו מצב הואקום המייצג את המערכת ללא חלקיקים.

בדומה לבעיית האוסצילטור ההרמוני ה a^+ הינם אופרטורי יצירה והצמודים ההרמיטיים שלהם, ה a, אופרטורי הורדה.

כלומר לכל i :

$$a_i |0\rangle = 0$$

אופרטורים אלה ממלאים את האלגברה

$$[a_i, a_j]_{-\xi} = [a_i^+, a_j^+]_{-\xi} = 0$$

$$[a_i, a_j^+]_{-\xi} = \delta_{ij}$$

כאשר עבור בוזונים

$$[A, B]_- = AB - BA$$

ועבור פרמיונים

$$[A, B]_+ \equiv \{A, B\} = AB + BA \quad \Rightarrow \quad {a^+}^2 = a^2 = 0$$

אני משאיר לכם כתרגיל להראות ש

$$a_i^+ a_i |\cdots n_i \cdots\rangle = n_i |\cdots n_i \cdots\rangle$$

עבור בוזונים

$$\left.\begin{aligned} a_i^+ |\cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i + 1}\, |\cdots n_i + 1 \cdots\rangle \\ a_i |\cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i}\, |\cdots n_i - 1 \cdots\rangle \end{aligned}\right\}$$

עבור פרמיונים

$$\left.\begin{aligned} a_i^+ |\cdots n_i \cdots\rangle &= \begin{cases} (-1)^{n_1 + \cdots + n_{i-1}} |\cdots n_i + 1 \cdots\rangle & n_i = 0 \\ 0 & n_i = 1 \end{cases} \\ a_i |\cdots n_i \cdots\rangle &= \begin{cases} 0 & n_i = 0 \\ (-1)^{n_1 + \cdots n_{i-1}} |\cdots n_i - 1 \cdots\rangle & n_i = 1 \end{cases} \end{aligned}\right\}$$

המצבים $|x_1 \cdots x_N\rangle$ שהגדרנו קודם לכן נתונים על ידי

$$(1)\quad |x_1 \cdots x_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\psi^+(x_1)\cdots\psi^+(x_N)\,|0\rangle$$

כאשר <u>אופרטור השדה</u> מוגדר כ:

$$(2)\quad \psi(x) = \sum_k u_k(x)\,a_k$$

מהגדרה זו נובע

$$(3)\quad \int dx\, u_\ell^*(x)\psi(x) = \sum_k \int dx\, u_\ell^*(x) u_k(x)\, a_k = \sum_k \delta_{\ell k} a_k = a_\ell$$

!

$$[\psi(x),\psi(x')]_\pm = [\psi^+(x),\psi^+(x')]_\pm = 0$$

$$[\psi(x),\psi^+(x')]_\pm = \sum_{k,\ell} u_k(x)u_\ell^*(x')\,[a_k,a_\ell^+]_\pm = \sum_k u_k(x)u_k^*(x') = \delta(x-x')$$

מתוך הגדרה (1) ברור כי $\psi^+(x)$ יוצר חלקיק בנקודה x.

מהגדרה (2) נבין מקור השם קוונטיזציה שניה. בקוונטיזציה ראשונה פונקצית הגל של חלקיק בודד ניתנת לכתיבה כ $\psi(x)=\sum_k a_k u_k(x)$ כאשר $\{u_k(x)\}$ הינו בסיס שלם של פונקציות עצמיות של אופרטור כלשהו ו a_k הינם מקדמי הפיתוח. בקוונטיזציה שניה ה a_k מוחלפים ממספרים C-numbers לאופרטורים ו $\psi(x)$ הופך בהתאמה לאופרטור גם כן (ה $u_k(x)$ נשארות C-functions). בהמשך נביא סיבה מפורשת אחרת לשם של הפורמליזם.

התלות הזמנית של האופרטור $\psi(x)$ ניתנת על ידי ההתפתחות בזמן של האופרטורים a_k (תמונת הייזנברג)

$$\psi(x,t) = \sum_k u_k(x)\,a_k(t)$$

נבדוק שפורמליזם הקוונטיזציה השניה משחזר את התוצאות שקיבלנו קודם לכן

נתבונן לדוגמא ב

$$\langle x_1' x_2' | x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2!} \sum_P \xi^{\sigma(P)} \delta(x_1 - x'_{P(1)})\, \delta(x_2 - x'_{P(2)})$$

$$= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1 - x_1') \delta(x_2 - x_2') \pm \delta(x_1 - x_2') \delta(x_2 - x_1') \right]$$

ובקוונטיזציה שניה

$$\langle x_1' x_2' | x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2!} \langle 0 | \psi(x_2') \psi(x_1') \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2!} \langle 0 | \psi(x_2') \left[\delta(x_1 - x_1') \pm \psi^+(x_1) \psi(x_1') \right] \psi^+(x_2) | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2!} \left\{ \delta(x_1 - x_1') \langle 0 | \psi(x_2') \psi^+(x_2) | 0 \rangle \pm \langle 0 | \psi(x_2') \psi^+(x_1) \psi(x_1') \psi^+(x_2) | 0 \rangle \right\}$$

$$= \frac{1}{2!} \Big\{ \delta(x_1 - x_1') \Big[\delta(x_2 - x_2') \pm \langle 0 | \psi^+(x_2) \underbrace{\psi(x_2) | 0 \rangle}_{0} \Big]$$

$$\pm \langle 0 | \psi(x_2') \psi^+(x_1) \Big[\delta(x_2 - x_1') \pm \psi^+(x_2) \underbrace{\psi(x_1') \Big] | 0 \rangle}_{0} \Big\}$$

$$= \frac{1}{2!} \Big\{ \delta(x_1 - x_1') \delta(x_2 - x_2') \pm \delta(x_2 - x_1') \langle 0 | \Big[\delta(x_1 - x_2') \pm \psi^+(x_1) \underbrace{\psi(x_2') \Big] | 0 \rangle}_{0} \Big\}$$

$$= \frac{1}{2!} \left[\delta(x_1 - x_1') \delta(x_2 - x_2') \pm \delta(x_1 - x_2') \delta(x_2 - x_1') \right]$$

נבדוק מה הם $|n_1 n_2 \cdots \rangle$ במונחי $|x_1 x_2 \cdots \rangle$

$$|n_1 n_2 \cdots \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} a^+_{\alpha_1} \cdots a^+_{\alpha_N} |0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} \frac{1}{N!} \sum_P \xi^{\sigma(P)} a^+_{P(\alpha_1)} \cdots a^+_{P(\alpha_N)} |0\rangle$$

מכיון ש $[a_i^+, a_j^+]_{-\xi} = 0$

המשך (3):

$$= \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\cdots}}\frac{1}{N!}\int dx_1\cdots dx_N \sum_P \xi^{\sigma(P)} u_{P(\alpha_1)}(x_1)\cdots u_{P(\alpha_N)}(x_N)\,\psi^+(x_1)\cdots\psi^+(x_N)|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}}\int dx_1\cdots dx_N \sum_P \xi^{\sigma(P)} u_{P(\alpha_1)}(x_1)\cdots u_{P(\alpha_N)}(x_N)\,|x_1\cdots x_N\rangle$$

$$= \int dx_1\cdots dx_N\, \psi(x_1\cdots x_N)\,|x_1\cdots x_N\rangle$$

כפי שאמרנו קיבלנו.

כיצד נציג אופרטורים ב Fock space בעזרת אופרטורי יצירה וחסול?

נתבונן באופרטור חד-חלקיקי A כלומר אופרטור המעביר (משנה) מצב של חלקיק אחד בלבד. לדוגמא אופרטור התנע. בתמונת המרחב של חלקיק בודד אופרטור מסוג זה ניתן לרישום באופן הבא:

$$A=\sum_{kl}\langle u_k|A|u_l\rangle\,|u_k\rangle\langle u_l|$$ נניח ב.ה.כ $k>l$

במקרה של N חלקיקים יפעל אופרטור זה על כל אחד מהחלקיקים בנפרד. נבחן את פעולת $|u_k\rangle\langle u_l|$ על מצב רב-חלקיקי:

$$|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!\,n_1!\,n_2!\cdots}}\sum_P \xi^{\sigma(P)}\,|u_{P(\alpha_1)}\rangle\cdots|u_{P(\alpha_N)}\rangle$$

קל לראות שאם $|u_l\rangle$ אינו מופיע בין המצבים $|u_{\alpha_1}\rangle\cdots|u_{\alpha_N}\rangle$ תוצאת הפעלת האופרטור הינו מצב האפס.

אם $|u_l\rangle$ מופיע פעם אחת, לדוגמא $l=\alpha_j$, הרי בכל איבר בסכום על הפרמוטציות הנ"ל יופיע פעם אחת ויוחלף על ידי המצב $|u_k\rangle$. המצב המתקבל הינו $\sqrt{n_k+1}\,|u_{\alpha_1}\cdots u_{\alpha_j=k}\cdots u_{\alpha_N}\rangle$ כשדואגים להחזיר את מקדם הנורמליזציה מכיון שהמקדם המקורי לא משתנה בעקבות הפעלת האופרטור. נשים לב כי מכיון ש $k>l$ האינדקס $\alpha_j=k$ נמצא אחרי ההחלפה מימין לאינדקסים הגדולים ממנו בניגוד לסדר זה

הסכמנו לסדר את האינדקסים α_i בהגדרת המצבים הרב חלקיקיים. כדי להתאים את הסדר כנדרש עלינו להעביר את מקום המצב כך שיהיה משמאל לכל המצבים עם $\alpha_i < k$, כלומר בין המקום המתאים ל $\alpha=l$ בו הוא נמצא אחרי ההפעלה והמקום המתאים ל $\alpha=k$. יש לכן לחלוף עם $n_{k+1}+\cdots+n_{l-1}$ המצבים הנמצאים בדרך. החלפה זו נותנת פקטור כולל של $\xi^{n_{k+1}+\cdots+n_{l-1}}$.

אם $|u_l\rangle$ מופיע n_l פעמים הרי כשנפעיל את $|u_k\rangle\langle u_l|$ נקבל לכל פרמוטציה n_l איברים זהים מוחלף אחד מהם $|u_l\rangle$ ב $|u_k\rangle$. המצב המתקבל הינו לכן $|n_1\cdots(n_k+1)\cdots(n_l-1)\cdots\rangle$ $n_l\sqrt{\frac{(n_k+1)!}{n_k!}\frac{(n_l-1)!}{n_l!}}$ כשעוברים לנרמול. אך אין צורך לדאוג לאחר הכנסה כי מקרה זה קיים רק עבור בוזונים ($\xi=1$).

בסך הכל נקבל

$$\left(|u_k\rangle\langle u_l|\right)|n_1\cdots n_k\cdots n_l\cdots\rangle = n_l\sqrt{\frac{(n_k+1)!(n_l-1)!}{n_k!\,n_l!}}\;\xi^{n_{k+1}+\cdots+n_{l-1}}|n_1\cdots(n_k+1)\cdots(n_l-1)\cdots\rangle$$

נבדוק כי בקוונטיזציה שניה האופרטור $|u_k\rangle\langle u_l|$ מיוצג על ידי $a_k^+a_l$

נבחן את פעולתו על $|n_1\cdots n_l\cdots n_k\cdots\rangle$

$$a_k^+a_l\frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!\cdots}}(a_1^+)^{n_1}(a_2^+)^{n_2}\cdots|0\rangle$$

אם a_l^+ לא מופיע במצב המקורי נוכל לקדם את a_l עד לואקום $|0\rangle$ ולהרוס את המצב.

אם a_l^+ מופיע n_l פעמים אזי

$$a_k^+a_l\frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!\cdots}}(a_1^+)^{n_1}\cdots(a_k^+)^{n_k}\cdots(a_l^+)^{n_l}\cdots|0\rangle$$

$$= a_k^+\frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}}(a_1^+)^{n_1}\cdots(a_k^+)^{n_k}\cdots\xi^{n_1+\cdots+n_{l-1}}a_l(a_l^+)^{n_l}\cdots|0\rangle$$

כשמשתמשים ביחסי הקומוטציה (אנטי קומוטציה) לקדם את a_l עד קבוצת ה a_l^+.

עבור בוזונים קל לבדוק תוך שימוש ביחסי הקומוטציה

$$a_l(a_l^+)^{n_l} = n_l(a_l^+)^{n_l-1} + (a_l^+)^{n_l}a_l$$

עבור פרמיונים אם $n_l\neq0$ אז בהכרח $n_l=1$

$$a_la_l^+ = 1 - a_l^+a_l$$

ניתן לקדם כמו את a_l לואקום ולהרוס את המצב

נקדם כעת את a_k^+ ימינה עד לקודמת ה-$(a_k^+)^{n_k}$ בעזרת שימוש בנוסחי החילוף לקבל

$$= \frac{n_\ell}{\sqrt{n_1!\, n_2! \cdots}}\ \xi^{n_{k+1}+\cdots+n_{\ell-1}}\ (a_1^+)^{n_1}\cdots(a_k^+)^{n_k+1}\cdots(a_\ell^+)^{n_\ell-1}\cdots|0\rangle$$

$$= n_\ell \sqrt{\frac{(n_k+1)!\,(n_\ell-1)!}{n_k!\; n_\ell!}}\ \xi^{n_{k+1}+\cdots+n_{\ell-1}}\ |n_1\cdots(n_k+1)\cdots(n_\ell-1)\cdots\rangle$$

כפי שקיבלנו בקוונטיזציה ראשונה.

⇐ אופרטור חד-חלקיקי מיוצג בקוונטיזציה שניה על ידי

$$A = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|A|\beta\rangle\, a_\alpha^+ a_\beta$$

לדוגמא אופרטור התנע: בבסיס מצבי התנע

$$\langle p|\hat{P}|p'\rangle = p\,\delta_{p,p'}$$

$$\hat{P} = \sum_p p\, a_p^+ a_p$$

אם נבחר לעבוד בהצגת המקום

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

$$\hat{P} = \int dx\,dx'\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\,\Psi^+(x)\Psi(x') = -i\hbar\int dx\ \Psi^+(x)\,\partial_x\Psi(x)$$

<u>תרגיל</u>: הראו כי אופרטור צפיפות האלקטרונים נתון על ידי $\Psi^+(x)\Psi(x)$.

ההמילטוניאן טיפוסי למערכת חלקיקים חסרי אינטראקציה

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2m} + V(x_i)$$

מיוצג בקוונטיזציה שניה בהצגת המקום בצורה

$$H = \int dx\ \Psi^+(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right]\Psi(x)$$

כשהשתמשנו ב $\langle x|V(x)|x'\rangle = V(x)\,\delta(x-x')$

שים לב: בהצגה זו האופרטור H פועל על מצב כללי במרחב Fock המכיל מצבים בעלי מספר חלקיקים שונה. אם אנו מעוניינים לתאר מערכת בעלת מספר קבוע N של חלקיקים עלינו להגביל עצמנו לתת-המרחב

של המצבים בעלי N חלקיקים בדיוק. האינפורמציה על מספר החלקיקים נמצאת במצבים המייצגים את המערכת ולא בצורתם של האופרטורים.

מכיון ש
$$\langle p|V(x)|p'\rangle = \int dx\,dx' \langle p|x\rangle \langle x|V(x)|x'\rangle \langle x'|p'\rangle$$

כהתמרת פוריה של $V(x)$:
$$= \int dx\, V(x) \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i\frac{(p'-p)}{\hbar}x} = V(p'-p)$$

ההמילטוניאן בהצגת התנע יראה
$$H = \sum_{pp'} a_p^+ \left[\frac{p^2}{2m} + V(p'-p)\right] a_p$$

ניתן לבדוק באופן דומה כי אופרטורים דו-גופיים, כאלה המערבים ומשנים מצבם של שני חלקיקים, מהצורה
$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta\\ \gamma\delta}} \langle\alpha\beta|U|\gamma\delta\rangle\, |\alpha\beta\rangle\langle\gamma\delta|$$

מתוארים בקוונטיזציה שניה על ידי
$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta\\ \gamma\delta}} \langle\alpha\beta|U|\gamma\delta\rangle\, a_\beta^+ a_\alpha^+ a_\gamma a_\delta$$

כך למשל האינטראקציה הקולומבית עבור
$$\langle x'x|U|y'y\rangle = \frac{e^2}{|x-x'|}\delta(x-y)\delta(x'-y')$$

מיוצגת בקוונטיזציה שניה על ידי (בשלושה מימדים)
$$\frac{1}{2}\int d^3x\, d^3x'\, \psi^+(x)\psi^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi(x')\psi(x)$$

ואני משאיר לכם כתרגיל להראות שבהצגת התנע (בשלושה מימדים)
$$= \frac{1}{2\underset{\text{נפח}}{V}} \sum_{k,k',q} a_k^+ a_{k'+q}^+ U(q)\, a_{k'} a_{k+q} \qquad U(q) = \int d^3x\, U(x) e^{-iqx} = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

כדוגמא לשימוש בפורמליזם שפיתחנו נתבונן במצב המעורר הראשון של אטום ההליום ונטפל בדחיה החשמלית בין האלקטרונים בצורה הנכונה תוך התחשבות בסטטיסטיקה הפרמיונית שלהם.

במצב היסוד של המערכת בהעדר הדחיה החשמלית שני האלקטרונים נמצאים ברמה החד-חלקיקית הנמוכה ביותר (1s) עם ספינים הפוכים. במצב המעורר הראשון של האטום בהעדר אינטראקציה אחד האלקטרונים ממשיך להמצא ברמה התחתונה (1s) והשני נמצא ברמה השניה במצב עם תנע זוויתי 0 (2s) או תנע זוויתי 1 (2P). אנו נבחן את המקרה בו האלקטרון השני נמצא במצב 2s.

נסמן ב $a^+_{1\uparrow}, a^+_{1\downarrow}, a^+_{2\uparrow}, a^+_{2\downarrow}$ את אופרטורי היצירה לאלקטרון במצב 1s ו 2s עם רכיב ספין בכוון $\hat{z}$ $\uparrow$ או $\downarrow$. במערכת חסרת האינטראקציה המצב בו בחרנו לעסוק מנוון עם ניוון 4:

$$\left.\begin{aligned} |I\rangle &= a^+_{1\uparrow} a^+_{2\uparrow} |0\rangle \\ |II\rangle &= a^+_{1\uparrow} a^+_{2\downarrow} |0\rangle \\ |III\rangle &= a^+_{1\downarrow} a^+_{2\uparrow} |0\rangle \\ |IV\rangle &= a^+_{1\downarrow} a^+_{2\downarrow} |0\rangle \end{aligned}\right\}$$

כולם בעלי אנרגיה $E = \underset{\text{אנרגית המצב 1s}}{E_1} + \underset{\text{אנרגית המצב 2s}}{E_2}$

האינטראקציה הקולומבית בתת המרחב המנוון הינה בלשון הקוונטיזציה השניה

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l,m,n=1,2 \\ \sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow}} \underbrace{\langle k\sigma, l\sigma' | V | m\sigma\, n\sigma' \rangle}_{\langle k,l | V | m,n \rangle} a^+_{l\sigma'} a^+_{k\sigma} a_{m\sigma} a_{n\sigma'}$$

כשהשתמשנו בעובדה שהאינטראקציה הקולומבית לא תלויה ולא משנה את ספין החלקיק כלומר היא אלכסונית באינדקס הספין. לכן המצבים k ו m הם בעלי אותו ספין וכנ"ל לגבי l ו n.

אנו מעוניינים לחשב את השפעת האינטראקציה על המצבים בתת המרחב המנוון תוך שימוש בתורת ההפרעות המנוונת. לצורך כך עלינו לחשב את אלמנטי המטריצה של $\hat{V}$ בתת מרחב זה:

$$\langle 0| a_{2\tau_2'}\, a_{1\tau_1'}\, |\hat{V}|\, a^+_{1\tau_1}\, a^+_{2\tau_2} |0\rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k\ell m n = 1,2 \\ \sigma\sigma' = \uparrow,\downarrow}} \langle k, \ell | V | m, n \rangle \langle 0 | a_{2\tau_2'}\, a_{1\tau_1'}\, a^+_{\ell\sigma'}\, a^+_{k\sigma}\, a_{m\sigma}\, a_{n\sigma'}\, a^+_{1\tau_1}\, a^+_{2\tau_2} |0\rangle$$

נחשב את אלמנט המטריצה של ה a תוך התחשבות ביחסי האנטי-קומוטציה שלהם.

$$a_{m\sigma}\, a_{n\sigma'}\, a^+_{1\tau_1}\, a^+_{2\tau_2} |0\rangle = \left[- a_{m\sigma}\, a^+_{1\tau_1}\, a_{n\sigma'}\, a^+_{2\tau_2} + \delta_{n,1}\delta_{\sigma'\tau_1}\, a_{m\sigma}\, a^+_{2\tau_2} \right] |0\rangle$$

$$= \left[- \delta_{n,2}\delta_{\sigma'\tau_2}\, a_{m\sigma}\, a^+_{1\tau_1} + \delta_{n,1}\delta_{\sigma'\tau_1}\delta_{m2}\delta_{\sigma\tau_2} \right] |0\rangle$$

$$= \left[- \delta_{n2}\delta_{\sigma'\tau_2}\delta_{m1}\delta_{\sigma\tau_1} + \delta_{n,1}\delta_{\sigma'\tau_1}\delta_{m2}\delta_{\sigma\tau_2} \right] |0\rangle$$

הטקטיקה ברורה: יש לקדם את ה a ימינה לכוון הואקום $|0\rangle$ שם הם מאפסים את המצב. בדרך אנו צוברים תרומות מיחסי האנטי-חילוף. באופן דומה נקדם את ה a^+ שמאלה לברה

$$\langle 0| a_{2\tau_2'}\, a_{1\tau_1'}\, a^+_{\ell\sigma'}\, a^+_{k\sigma} = \langle 0| \left[- \delta_{\ell 2}\delta_{\sigma'\tau_2'}\delta_{k1}\delta_{\sigma\tau_1'} + \delta_{\ell 1}\delta_{\sigma'\tau_1'}\delta_{k2}\delta_{\sigma\tau_2'} \right]$$

ובסך הכל

$$= \frac{1}{2} \Big[\langle 1,2|V|1,2\rangle \delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{\tau_2\tau_2'} - \langle 1,2|V|2,1\rangle \delta_{\tau_2\tau_1'}\delta_{\tau_1\tau_2'}$$

$$- \langle 2,1|V|1,2\rangle \delta_{\tau_2\tau_1'}\delta_{\tau_1\tau_2'} + \langle 2,1|V|2,1\rangle \delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{\tau_2\tau_2'} \Big]$$

$$= I \cdot \delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{\tau_2\tau_2'} - J\, \delta_{\tau_1\tau_2'}\delta_{\tau_2\tau_1'}$$

כשהשתמשנו בהגדרה

$$I = \langle 1,2|V|1,2\rangle = \int d^3r\, d^3r'\, u_1^*(\vec{r})\, u_2^*(\vec{r}')\, \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, u_1(\vec{r})\, u_2(\vec{r}')$$

$$= \int d^3r\, d^3r'\, |u_1(\vec{r})|^2\, |u_2(\vec{r}')|^2\, \frac{e^2}{|r-r'|} = \langle 2,1|V|2,1\rangle$$

הידוע כ direct integral . זה

$$J = \langle 1,2|V|2,1\rangle = \int d^3r\, d^3r'\, u_1^*(\vec{r})\, u_2^*(\vec{r}')\, \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, u_2(\vec{r})\, u_1(\vec{r}')$$

$$= \int d^3r\, d^3r'\, u_1^*(\vec{r}')\, u_2^*(\vec{r})\, \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, u_2(\vec{r}')\, u_1(\vec{r}) = \langle 2,1|V|1,2\rangle$$

הידוע כ exchange integral. קל לראות ש $I>0$ וקל לראות שגם $J>0$.
קיבלנו לכן ש $\hat{V}$ בתת המרחב המוצע - נתונה על ידי

$$\begin{pmatrix} I-J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & -J & 0 \\ 0 & -J & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I-J \end{pmatrix}$$

לפי הצורה אנחנו מוצאים שלושה (triplet) של מצבים מנוונים עם אנרגיה $E = E_1 + E_2 + (I-J)$
כשהמצבים הינם

$$|I\rangle = a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow}^+ |0\rangle$$
$$|IV\rangle = a_{1\downarrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|II\rangle + |III\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ + a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+\right)|0\rangle$$

ומצב בודד (singlet) עם אנרגיה $E = E_1 + E_2 + (I+J)$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|II\rangle - |III\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ - a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+\right)|0\rangle$$

הסיבה לתוצאה שקיבלנו בשאלה. ב singlet החלק הספינורי של פונקציית הגל אנטיסימטרי וכדי לשמור על אנטיסימטריות כללית החלק המרחבי חייב להיות סימטרי. כתוצאה מכך שני האלקטרונים נוטים להיות בקרבה יחסית - עובדה המעלה את האנרגיה של המצב כתוצאה מהדחייה החשמלית. ניתן לראות את הסימטריה של החלק המרחבי אם נתבונן במצב ה singlet:

$$\frac{1}{2}\Big[|1\uparrow\rangle|2\downarrow\rangle - |2\downarrow\rangle|1\uparrow\rangle - |1\downarrow\rangle|2\uparrow\rangle + |2\uparrow\rangle|1\downarrow\rangle\Big]$$

ונשים לב כי הוא סימטרי תחת החלפת פונקציות הגל המרחביות $1\leftrightarrow 2$.
הליום במצב ה singlet נודע כ para helium.

לעומת זאת. החלק הספינורי של מצבי ה triplet סימטרי ולכן החלק המרחבי שלהם אנטיסימטרי. כתוצאה מכך ההסתברות למצוא את זוג האלקטרונים בקרבה יחסית קטנה וגם קטנה האנרגיה הנובעת מהדחייה החשמלית.
הליום במצב triplet נודע כ ortho helium.

חשוב לציין כי ההמילטוניאן של המערכת אינו תלוי בספין. התלות שקיבלנו עבור הספקטרום בספין נובעות מסטטיסטיקת פרמי-דיראק שהאלקטרונים מקיימים. הסבר זה לתלות רמות האנרגיה של אטום ההליום בספין התגלה על ידי הייזנברג.