כדוגמא נוספת לשימוש בפורמליזם הקוונטיזציה השניה, הפעם בהקשר מערכת ספין, נתבונן בשרשרת "XXZ" של ספין $\frac{1}{2}$ המתוארת על ידי ההמילטוניאן

$$H = -J_\perp \sum_{j=1}^{N} \left[S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y \right] - J_z \sum_{j=1}^{N} S_j^z S_{j+1}^z$$

כאשר $\vec{S}_j$ הינו אופרטור הספין $S=\frac{1}{2}$ באתר ה j בשרשרת $j=1 \dots N$ והנחנו תנאי שפה מחזוריים כלומר $\vec{S}_1 = \vec{S}_{N+1}$. רכיבי הספין על אותו אתר S_j^α $\alpha = x,y,z$ מקיימים את אלגברת יחסי החילוף המוכרת בעוד שאופרטורי ספין על אתרים שונים מתחלפים:

$$[S_j^\alpha, S_k^\beta] = i \delta_{jk} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma \qquad (\hbar = 1)$$

כאשר $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ הינו הטנזור האנטיסימטרי.

במונחי אופרטורי העלאה והורדה $S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y$ (S^+ הופך $\downarrow$ ל $\uparrow$; S^- הופך $\uparrow$ ל $\downarrow$)
ההמילטוניאן הינו

$$H = -\frac{J_\perp}{2} \sum_{j=1}^{N} \left[S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ \right] - J_z \sum_{j=1}^{N} S_j^z S_{j+1}^z$$

אם נתייחס ל S_j^z כ"קואורדינטה" $S_j^\pm$ משנים את הקואורדינטה הזו כאילו היו תנע. תחת פירוש זה ניתן להתייחס לאיבר ה $J_\perp$ כ"אנרגיה קינטית" הגורמת לפלוקטואציות קוונטיות ב S_j^z ולאיבר ה J_z כ"אנרגיה פוטנציאלית" הנוטה לסדר את הקואורדינטות S_j^z. נראה מיד כי פרשנות זו מקבלת תימוכין נוספים.

נבחן את יחסי ה<u>אנטיחילוף</u> עבור אופרטורים על אותו אתר, תוך התמקדות במקרה $S=\frac{1}{2}$:

$$\{S_j^+, S_j^-\} = 2\left(\vec{S}_j^{\,2} - S_j^{z^2}\right) = 2\left(\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{4}\right) = 1$$

$$\{S_j^+, S_j^z\} = 2\left(S_j^z - \frac{1}{2}\right) S_j^+ = 0$$

$$\{S_j^-, S_j^z\} = 2\left(S_j^z + \frac{1}{2}\right) S_j^- = 0$$

עבור $S=\frac{1}{2}$!

אלגברה זו מזכירה את הצגתה הבאה עם אופרטורי יצירה והריסה פרמיונים:

$$S_j^+ = f_j^+ \quad , \quad S_j^- = f_j \quad , \quad S_j^z = f_j^+ f_j - \frac{1}{2}$$

כאשר

$$\{f_j, f_k\} = \{f_j^+, f_k^+\} = 0 \quad , \quad \{f_j, f_k^+\} = \delta_{jk}$$

קל לבדוק שהצגה הפרמיונית משמרת את יחסי האנטי קומוטציה של ה S על אתר אחד. גם כן עבור $j \neq k$:

$$[S_j^+, S_k^z] = [f_j^+, f_k^+ f_k - \frac{1}{2}] = 0$$

$$[S_j^-, S_k^z] = [f_j, f_k^+ f_k - \frac{1}{2}] = 0$$

כנדרש. אך

$$[S_j^+, S_k^-] = [f_j^+, f_k] = f_j^+ f_k - f_k f_j^+ = 2 f_j^+ f_k \neq 0$$

הבעיה נפתרת ע"י Jordan-Wigner transformation

$$S_j^+ = f_j^+ K_j = K_j f_j^+$$

$$S_j^- = K_j f_j = f_j K_j$$

$$S_j^z = f_j^+ f_j - \frac{1}{2}$$

כאשר K_j הינו אופרטור לא-לוקלי המוגדר על ידי

$$K_j = \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} f_k^+ f_k\right] = \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \left(S_j^z+\frac{1}{2}\right)\right]$$

מכיון שלכל j,k $[f_j^+f_j, f_k^+f_k]=0$ נקבל

$$[K_j, K_k]=0$$

מכיון ש $f_j^+f_j=0,1$

$$K_j^+ = \exp\left[-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} f_k^+ f_k\right] = \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^{j-1} f_k^+ f_k\right] = K_j$$

ומאותה סיבה

$$K_j^2 = 1$$

בגלל התכונה האחרונה ברור שיחסי החילוף באתר אחר אינן מושפעות מהוספת K_j לטרנספורמציה. חילופיות אופרטורי המספר $[f_j^+f_j, f_k^+f_k]=0$ גורמת לכך שעדיין נקבל

$$[S_j^+, S_k^z] = [S_j^-, S_k^z] = 0$$

נניח ב.ה.כ. $j<k$ ונחשב את

$$S_j^+ S_k^- = f_j^+ K_j K_k f_k$$

$$= f_j^+ K_k K_j f_k$$

מכיון ש $j<k$ f_k לא מושפע ב K_j :

$$= f_j^+ K_k f_k K_j$$

בדיוק שמתמטית B-H נותן $f^+e^{i\pi f^+f}=-e^{i\pi f^+f}f^+$ ולכן

$$= -K_k f_j^+ f_k K_j$$

$$= K_k f_k f_j^+ K_j = S_k^- S_j^+ \Rightarrow [S_j^+, S_k^-]=0$$

Jordan-Wigner transformation היא דוגמא ל <u>statistical transmutation</u> : הצלחנו לבטא אופרטורי ספין (שמתחלפים בין אתרים שונים) בעזרת פרמיונים (ש אנטי-מתחלפים בין אתרים שונים).

נשתמש בטרנספורמצית J-W לרשום ביטוי שקול להמילטוניאן במונחי הפרמיונים. לצורך כך נשים לב כי:

$$S_j^+ S_{j+1}^- = f_j^+ K_j K_{j+1} f_{j+1} = f_j^+ e^{i\pi f_j^+ f_j} f_{j+1} \underset{\text{נפתח האקספוננט}}{=} f_j^+ f_{j+1}$$

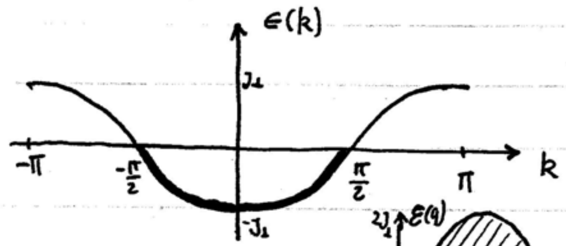
$$H = -\frac{J_\perp}{2}\sum_{j=1}^{N}\left[f_j^+ f_{j+1} + f_{j+1}^+ f_j\right] - J_z\sum_{j=1}^{N}\left(f_j^+ f_j - \frac{1}{2}\right)\left(f_{j+1}^+ f_{j+1} - \frac{1}{2}\right)$$

וכעת מקבלים פרמיונים עם שאבר ה $J_\perp$ הוא איבר האנרגיה הקינטית (hopping) של הפרמיונים ואיבר ה J_z מתאר אינטראקציה בין פרמיונים על אתרים שכנים.
התוצאה המעניינת היא שבמקרה $J_z = 0$ (מודל XY) מודל הספין שקול לפרמיונים חופשיים המדלגים בין אתרי השרשרת.
בעיה זו ניתנת לפתרון קל על ידי מעבר לרכיבי פורייה:

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k f_k e^{ikj} \qquad k = \frac{2\pi}{N}\cdot n \quad n = 1\cdots N$$

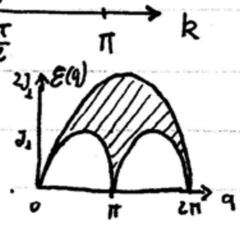
$$H_{XY} = \sum_k \epsilon(k) f_k^+ f_k \qquad \epsilon(k) = -J_\perp \cos k$$

מודל XY אינווריאנטי תחת סיבובים גלובליים לספינים של הספינים במישור xy. כל סדר מגנטי במישור ישבור את סימטרית ה $U(1)$ הרציפה הזו. מתוך משפט Mermin-Wagner אנו יודעים כי הדבר בלתי אפשרי במערכת חד-מימדית שכזו. האם יש דרך לראות זאת? התשובה חיובית.
מצב היסוד של מודל XY מתאים למצב בו כל המצבים עם אנרגיה שלילית בים פרמי מלאים כלומר ים חצי מלא עם $\frac{N}{2}$ חלקיקים בתחום $k\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right]$ ולכן:



מכיון $\langle f_j^+ f_j\rangle = \frac{1}{2}$: $\langle S_j^z\rangle = \langle f_j^+ f_j - \frac{1}{2}\rangle = 0$

מכיון $\langle f_j\rangle = \langle f_j^+\rangle = 0$: $\langle S_j^x\rangle = \langle S_j^y\rangle = 0$



המצבים המעוררים הם זוגות חלקיק - חור עם ספקטרום

קוונטיזציה של השדה האלקטרומגנטי

הראתם בתרגיל כי השדה האלקטרומגנטי, בנוכחות צמוד לצפיפות מטען ρ וצפיפות זרם $\vec{J}$, מתואר על ידי צפיפות הלגרנז'יאן

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi}\left(\vec{E}^2 - \vec{B}^2\right) - \rho\phi + \frac{1}{c}\vec{J}\cdot\vec{A}$$

כשהשדות האלקטרומגנטיים נתונים על ידי הפוטנציאלים באופן הבא:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla}\phi$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

קל לבדוק שהפעולה המתקבלת מצפיפות הלגרנז'יאן הנ"ל אינווריאנטית תחת טרנספורמציית כיול הנוצרת על ידי פונקציה $\Lambda(\vec{r},t)$:

$$\phi \to \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \quad , \quad \vec{A} \to \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$$

בתנאי שהמטענים מקיימים את משוואת הרציפות

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$$

כך שהמטען נשמר.

נוכל להשתמש בסימטרית הכיול ולבחור לעבוד בכיול מסוים. למטרות הקוונטיזציה הלא-יחסותית הכיול הנוח ביותר הוא ה Coulomb gauge (או בשמו האחר radiation gauge)

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$$

(שימו לב שהוא אינו לורנץ-אינווריאנטי)

בכיול זה חוק גאוס $\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = 4\pi\rho$ הופך למשוואת פואסון עבור ϕ :

$$\nabla^2\phi = -4\pi\rho$$

עם הפתרון

$$\phi(\vec{r},t) = \int d^3r' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\rho(\vec{r}',t)$$

הנקבע באופן ישיר על ידי צפיפות המטען באותו רגע (non-retarded).
זהו ביטוי לכך שהכיול אינו לורנץ-אינווריאנטי, למרות שהתורה כולה היא כמובן לורנץ-אינווריאנטית.

מתוך צפיפות הלגרנז'יאן נוכל למצוא את צפיפות התנע הצמודה לפוטנציאלים האלקטרומגנטיים. מכיוון ש $\frac{\partial\phi}{\partial t}$ אינו מופיע ב $\mathcal{L}$ אין ל ϕ תנע צמוד והדינמיקה שלו נקבעת באופן ישיר, כפי שראינו, על ידי המטענים.

צפיפות התנע הצמוד ל A^i $i=x,y,z$ הינה:

$$\Pi^i=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\left(\frac{\partial A^i}{\partial t}\right)}=-\frac{1}{4\pi c}E^i=\frac{1}{4\pi c}\left[\frac{1}{c}\frac{\partial A^i}{\partial t}+\partial_i\phi\right]$$

אנו נדון את המקרה ללא מקורות חיצוניים ($\rho=0$) בו, בגבול שבחרנו, ϕ מתאפס ובהתאם $\Pi^i=\frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial A^i}{\partial t}$: מיד נעבור את התורה קוונטיזציה ונמצא את יחסי החילוף בין $\hat{\vec{A}}$ ו $\hat{\vec{\Pi}}$. מכיוון ש ϕ ניתן על ידי אופרטור צפיפות המטען $\hat{\rho}$ המתחלף עם $\hat{\vec{A}}$ מסקנות הדיון להלן לא משתנות גם בנוכחות $\rho\neq0$.

ננסה להעביר את התורה קוונטיזציה קנונית פשוטה:

$$\left[\hat{A}^i(\vec{r}),\hat{\Pi}^j(\vec{r}')\right]=i\hbar\delta^{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

נתקל בקושי. אם נקח דיברגנס (ביחס ל $\vec{r}$) של המשוואה נקבל

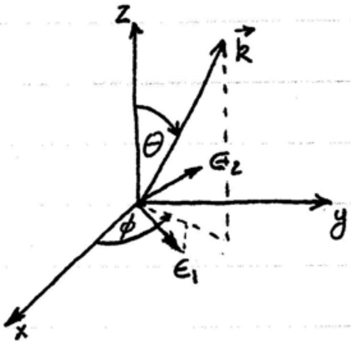
$$\left[\underbrace{\sum_i\frac{\partial}{\partial r^i}\hat{A}^i(\vec{r})}_{\text{בגבול שלנו}\ =0},\hat{\Pi}^j(\vec{r}')\right]=i\hbar\frac{\partial}{\partial r^j}\delta(\vec{r}-\vec{r}')\neq0$$

הסיבה לכך היא שניסינו להתאים לכל אחד מרכיבי $\vec{A}$ כדרגת חופש בלתי תלויה בעוד שהם אינם כאלה בגלל האילוץ $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$ המשאיר רק שני רכיבים בלתי תלויים. נפתור את הבעיה על ידי הצגת $\vec{A}$ באופן המקיים את האילוץ במפורש:

$$\vec{A}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\underset{\text{נפח}}{V}}}\sum_{\vec{k}}{}'\sum_{\lambda=1,2}\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k})\left[q_\lambda(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}+q^*_\lambda(\vec{k})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right]$$

כשדאגנו לכך שהתקבל שדה ממשי. מאותה סיבה הגבלנו את הסכימה על $\vec{k}$ לחצי מרחב בלבד (במפורש: $\sum'$ הינו סכימה על ערכי $\vec{k}$ עבורם $k_x>0$ או $k_x=0$ ו $k_y>0$ או $k_x=k_y=0$ ו $k_z>0$) כדי לספור רק על דרגות חופש בלתי תלויות - עבור $\vec{k}$ כללי ממשיות $\vec{A}$ גוררת $q^*_\lambda(\vec{k})=q_\lambda(-\vec{k})$.

התנאי $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}$ מתקיים אם וקטור הגל $\vec{k}$ ניצב לשני וקטורי הפולריזציה $\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k})$ $(\lambda=1,2)$ כלומר $\vec{k}\cdot\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k})=0$.



אם $\vec{k}$ נתון בקואורדינטות כדוריות על ידי $\vec{k} = k(\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta)$

נגדיר את וקטורי הפולריזציה הלינארית הנדרשים כמו אשר אורתוגונליים ימניים

$$\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) = (\cos\theta\cos\phi,\ \cos\theta\sin\phi,\ -\sin\theta)$$

$$\vec{\epsilon}_2(\vec{k}) = (-\sin\phi,\ \cos\phi,\ 0)$$

קל לבדוק שהם מקיימים

$$\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k})\cdot\vec{\epsilon}_{\lambda'}(\vec{k}) = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\sum_\lambda \epsilon^i_\lambda(\vec{k})\,\epsilon^j_\lambda(\vec{k}) = \delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2}$$

במונחי ה $q_\lambda(\vec{k})$ האיבר $\frac{1}{8\pi}\int d^3r\,\vec{E}^2$ בלגרנז'יאן המגדיר את סוגי הפוטון של התורה הינו

$$\int d^3r\,\frac{1}{8\pi}\vec{E}^2 = \int d^3r\,\frac{1}{8\pi c^2}\dot{\vec{A}}^2 = \frac{1}{4\pi c^2}\sum_{\vec{k}}{}'\sum_\lambda \dot{q}_\lambda(\vec{k})\,\dot{q}^*_\lambda(\vec{k})$$

כשמשתמשים בכך שהגבלת $\vec{k}$ לחצי מרחב בסכום מאפשרת רק לאיברים המעורבים ב $\dot{\vec{A}}^2$ לקיים את תנאי שימור התנע. התנע הצמוד לקואורדינטה $q_\lambda(\vec{k})$ הינו לכן

$$P_\lambda(\vec{k}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\lambda(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi c^2}\dot{q}^*_\lambda(\vec{k})$$

במונחי ה $q_\lambda(\vec{k})$ וה $P_\lambda(\vec{k})$ ההמילטוניאן הינו:

$$H = \int d^3r\,\frac{1}{8\pi}(\vec{E}^2+\vec{B}^2) = \sum_{\vec{k}}{}'\sum_\lambda\left[4\pi c^2 P^*_\lambda(\vec{k})P_\lambda(\vec{k}) + \frac{k^2}{4\pi}q^*_\lambda(\vec{k})q_\lambda(\vec{k})\right]$$

קוונטיזציה קנונית של הבעיה היא עתה מיידית:

$$[\hat{q}_\lambda(\vec{k}),\ \hat{P}_{\lambda'}(\vec{k}')] = i\hbar\,\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

$$[q_\lambda(\vec{k}),\ q_{\lambda'}(\vec{k}')] = [P_\lambda(\vec{k}),\ P_{\lambda'}(\vec{k}')] = [\hat{q}_\lambda(\vec{k}),\ \hat{q}^+_{\lambda'}(\vec{k}')] = [\hat{P}_\lambda(\vec{k}),\ \hat{P}^+_{\lambda'}(\vec{k}')] = [\hat{q}_\lambda(\vec{k}),\ \hat{P}^+_{\lambda'}(\vec{k}')] = 0$$

ההמילטוניאן

$$H=\sum_{\vec k}{}'\sum_{\lambda}\left[4\pi c^2\hat{P}^{+}_{\lambda}(\vec k)\,\hat{P}_{\lambda}(\vec k)+\frac{k^2}{4\pi}\hat{q}^{+}_{\lambda}(\vec k)\,\hat{q}_{\lambda}(\vec k)\right]$$

מתאר אוסף אוסצילטורים הרמוניים בלתי תלויים. כדי לכתוב זאת באופן מפורש נגדיר את אופרטורי הבטול ויצירה הבאים. עבור $\vec k$ בחצי המרחב עליו אנו סוכמים, $k=|\vec k|$:

$$a_\lambda(\vec k)=\sqrt{\frac{k}{8\pi\hbar c}}\left(q_\lambda(\vec k)+\frac{4\pi i c}{k}P^{+}_\lambda(\vec k)\right)\qquad a_\lambda(-\vec k)=(-1)^{\lambda+1}\sqrt{\frac{k}{8\pi\hbar c}}\left(q^{+}_\lambda(\vec k)+\frac{4\pi i c}{k}P_\lambda(\vec k)\right)$$

$$a^{+}_\lambda(\vec k)=\sqrt{\frac{k}{8\pi\hbar c}}\left(q^{+}_\lambda(\vec k)-\frac{4\pi i c}{k}P_\lambda(\vec k)\right)\qquad a^{+}_\lambda(-\vec k)=(-1)^{\lambda+1}\sqrt{\frac{k}{8\pi\hbar c}}\left(q_\lambda(\vec k)-\frac{4\pi i c}{k}P^{+}_\lambda(\vec k)\right)$$

קל לבדוק שהם ממלאים את אלגברת יחסי החילוף המוכרת:

$$[a_\lambda(\vec k),a_{\lambda'}(\vec k')]=[a^{+}_\lambda(\vec k),a^{+}_{\lambda'}(\vec k')]=0$$

$$[a_\lambda(\vec k),a^{+}_{\lambda'}(\vec k')]=\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec k,\vec k'}$$

נשתמש בטרנספורמציה ההפכה:

$$q_\lambda(\vec k)=\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k}}\left(a_\lambda(\vec k)+(-1)^{\lambda+1}a^{+}_\lambda(-\vec k)\right)$$

$$P_\lambda(\vec k)=i\sqrt{\frac{\hbar k}{8\pi c}}\left(a^{+}_\lambda(\vec k)-(-1)^{\lambda+1}a_\lambda(-k)\right)$$

לכתוב את H באמצעות ה a ו a^{+}:

$$H=\sum_{\vec k}{}'\sum_{\lambda}\Big\{4\pi c^2\frac{\hbar k}{8\pi c}\left[a_\lambda(\vec k)-(-1)^{\lambda+1}a^{+}_\lambda(-\vec k)\right]\left[a^{+}_\lambda(\vec k)-(-1)^{\lambda+1}a_\lambda(-\vec k)\right]$$

$$+\frac{k^2}{4\pi}\frac{2\pi\hbar c}{k}\left[a^{+}_\lambda(\vec k)+(-1)^{\lambda+1}a_\lambda(-\vec k)\right]\left[a_\lambda(\vec k)+(-1)^{\lambda+1}a^{+}_\lambda(-\vec k)\right]\Big\}$$

$$=\sum_{\vec k}{}'\sum_{\lambda}\frac{\hbar c k}{2}\left[a_\lambda(\vec k)a^{+}_\lambda(\vec k)+a^{+}_\lambda(\vec k)a_\lambda(\vec k)+a_\lambda(-\vec k)a^{+}_\lambda(-\vec k)+a^{+}_\lambda(-\vec k)a_\lambda(-\vec k)\right]$$

$$H = \sum_{\vec k}{}' \sum_{\lambda} \hbar c k \left[a^+_\lambda(\vec k)\, a_\lambda(\vec k) + a^+_\lambda(-\vec k)\, a_\lambda(-\vec k) + 1 \right] \Leftarrow$$

$$= \sum_{\vec k} \sum_{\lambda} \hbar \omega_k \left[a^+_\lambda(\vec k)\, a_\lambda(\vec k) + \frac{1}{2} \right]$$

כאשר הסכום האחרון הוא על כל ערכי ה $\vec k$; ועם הדיספרסיה המוכרת של האור: $\omega_k = ck$

$a_\lambda(\vec k)$ הורס ; $a^+_\lambda(\vec k)$ יוצר פוטון עם וקטור גל $\vec k$ ופולריזציה λ. במונחי אופרטורים אלה $\vec A$ נתון ע"י

$$\hat{\vec A}(\vec r) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}} \sum_{\vec k}{}' \sum_{\lambda} \vec\epsilon_\lambda(\vec k) \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left\{ \left[a_\lambda(\vec k) + (-1)^{\lambda+1} a^+_\lambda(-\vec k) \right] e^{i\vec k\vec r} + \left[a^+_\lambda(\vec k) + (-1)^{\lambda+1} a_\lambda(-\vec k) \right] e^{-i\vec k\vec r} \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}} \left\{ \sum_{\vec k}{}' \sum_{\lambda} \vec\epsilon_\lambda(\vec k) \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left[a_\lambda(\vec k) e^{i\vec k\vec r} + a^+_\lambda(\vec k) e^{-i\vec k\vec r} \right] + \sum_{-\vec k}{}' \sum_{\lambda} \vec\epsilon_\lambda(-\vec k) \frac{(-1)^{\lambda+1}}{\sqrt{\omega_k}} \left[a_\lambda(\vec k) e^{i\vec k\vec r} + a^+_\lambda(\vec k) e^{-i\vec k\vec r} \right] \right\}$$

נשתמש בעובדה ש $\vec\epsilon_1(\vec k) = \vec\epsilon_1(-\vec k)$; $\vec\epsilon_2(\vec k) = -\vec\epsilon_2(-\vec k)$ לקבל לבסוף

$$\vec A(\vec r) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}} \sum_{\vec k} \sum_{\lambda=1,2} \vec\epsilon_\lambda(\vec k) \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left[a_\lambda(\vec k) e^{i\vec k\vec r} + a^+_\lambda(\vec k) e^{-i\vec k\vec r} \right]$$

לחילופין, ניתן לתאר את $\vec A$ במונחי פוטונים בעלי פולריזציה מעגלית

$$\vec\epsilon_\pm(\vec k) = \mp\frac{1}{\sqrt2}\left[\vec\epsilon_1(\vec k) \pm i\,\epsilon_2(\vec k) \right]$$

עם אופרטורי הסולם המתאימים להם

$$a_\pm(\vec k) = \mp\frac{1}{\sqrt2}\left[a_1(\vec k) \mp i\, a_2(\vec k) \right]$$

כפי שראו בתרגול $a^+_\pm(\vec k)$ יוצר פוטון עם תנע זוויתי $\pm\hbar$ לאורך $\vec k$.

במונחיהם

$$\vec A(\vec r) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}} \sum_{\vec k} \sum_{\lambda=\pm} \frac{1}{\sqrt{\omega_k}} \left[\vec\epsilon_\lambda(\vec k)\, a_\lambda(\vec k)\, e^{i\vec k\vec r} + \vec\epsilon^{\,*}_\lambda(\vec k)\, a^+_\lambda(\vec k)\, e^{-i\vec k\vec r} \right]$$

נפנה כעת לבחינת בעיה הכוללת אינטראקציה של השדה האלקטרומגנטי עם חומר ונשתמש בתאור הקוונטי של השדה אותו כתבנו זה עתה. נתבונן באטום המימן ובאינטראקציה בין האלקטרון שבו לשדה האלקטרומגנטי:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{P}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e^2}{r} + \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_k \left[a^+_\lambda(\vec{k})\, a_\lambda(\vec{k}) + \frac{1}{2}\right]$$

שימו לב כי בבעיה זו חלקיק חומרי יחיד (האלקטרון) אותו אנו ממשיכים לתאר בפורמליזם הקוונטיזציה הראשונה אך השדה האלקטרומגנטי הקוונטי נתון במונחי אופרטורי יצירה והריסה של קוונטיזציה שניה המאפיינים את $\vec{A}$ ואת ההמילטוניאן האלקטרומגנטי.

נבוא עכשיו לחשב את קצב הדעיכה של האטום מהמצב המעורר $|2pm\rangle$ למצב היסוד $|1s\rangle$ ונשתמש לצורך כך בכלל הזהב של פרמי. בבעיה זו ההמילטוניאן הלא מופרע הינו:

$$H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_k \left[a^+_\lambda(\vec{k})\, a_\lambda(\vec{k}) + \frac{1}{2}\right]$$

וההפרעה הינה

$$\hat{V} = -\frac{e}{2mc}\left(\vec{P}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{P}\right) + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \vec{A}^2$$

נשתמש בעובדה שב-Coulomb gauge בו כתבנו את $\vec{A}$ $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$ ולכן $\vec{P}\cdot\vec{A} = \vec{A}\cdot\vec{P}$. כמו כן, נניח כי השדה האלקטרומגנטי חלש כלומר $\vec{A}$ קטן ונזניח את האיבר הריבועי ב-$\vec{A}$ ביחס לאיבר הלינארי. בפרט נניח כי במצב ההתחלתי של המערכת השדה נתון במצב היסוד שלו: $|0\rangle$. מכיון ש-$\vec{A}$ משנה את מספר הפוטונים ההתחלתי ב-± 1 (הוא לינארי ב-a^+ ו-a) המצב הסופי אליו עשויה להביא אותנו ההפרעה $\hat{V}$ יכול להכיל רק פוטון יחיד שהאנרגיה שלו נקבעת מתוך שימור האנרגיה כדלקמן:

$$\hbar\omega = E_{2pm} - E_{1s} = \frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}\left(1-\frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{8}\frac{e^2}{a_0} \qquad (\text{רדיוס Bohr})\ a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

כדי לחשב את קצב המעבר הכולל עלינו לסכם על כל מצבי השדה הסופיים: כל המצבים הכוללים פוטון אחד עם וקטור גל $k=\frac{\omega}{c}$ בכוון ובפולריזציה כלשהם. בסוף הכל נקבל לכן שקצב הדעיכה נתון על ידי

$$W_{2pm} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\substack{\vec k \\ k=\frac{\omega}{c}}}\sum_{\lambda}\left|\langle n_{\vec k,\lambda}=1|\langle 1s|\hat V|2pm\rangle|0\rangle\right|^2 \rho_{photons}(\hbar\omega)\Big|_{\hbar\omega=\frac{3}{8}\frac{e^2}{a_0}}$$

כאשר

$$\hat V = \sum_{\vec k'}\sum_{\lambda'=1,2}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}}\frac{1}{\sqrt{\omega_{k'}}}\left(\frac{-e}{mc}\right)\vec P\cdot\vec\epsilon_{\lambda'}(\vec k')e^{-i\vec k'\cdot\vec r}a^{\dagger}_{\lambda'}(\vec k')$$

מכיון שמספר המצבים הפוטונים עם פולריזציה מוגדרת ! עם גודל בתחום $[k,k+dk]$ $\vec k$ וכוון הנמצא בתוך אלמנט זוית מרחבית $d\Omega$ הינו $dN = \frac{k^2 d\Omega dk}{\frac{(2\pi)^3}{V}}$ נקבל שצפיפות המצבים הסופיים הינה

$$\rho_{photons} = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk}\frac{dk}{dE} = \frac{k^2 V d\Omega}{(2\pi)^3}\cdot\frac{1}{\hbar c} = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3}\frac{d\Omega}{\hbar c^3}$$

עלינו לחשב כעת את אלמנט המטריצה של ההפרעה בין המצב ההתחלתי והסופי. החלק הפוטוני של אלמנט המטריצה קל:

$$\langle n_{\vec k\lambda}=1|a^{\dagger}_{\lambda'}(\vec k')|0\rangle = \delta_{\vec k,\vec k'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

ובעקבותיו הסכום על $\vec k'$ ו λ' נעלמים. שימו לב כי אם במצב ההתחלתי של השדה היו N פוטונים עם וקטור גל $\vec k$ ופולריזציה λ ובמצב הסופי $N+1$ פוטונים כאלה אלמנט המטריצה הוא פרופורציוני ל $\sqrt{N}$. זו הסיבה ל stimulated emission – קצב הדעיכה ופליטת הפוטונים ע"י האטום גדל בנוכחות שדה אלקטרומגנטי בעל פוטונים הזהים לפוטון הנפלט.

החלק האלקטרוני של אלמנט המטריצה מתכונס ל:

$$\langle 1s|\vec P e^{-i\vec k\cdot\vec r}|2pm\rangle$$

שימו לב כי בביטוי שלנו $\vec r$ הינו אופרטור המקום של האלקטרון מכיון שאנו מחשבים את $\vec A$ בנקודה בה נמצא האלקטרון. אלמנט מטריצה זה ניתן לחשב בקלות ע"י החלפת האקספוננט ביחידה. תרומת האיבר הבא בפיתוח: $\vec k\cdot\vec r$ הינה מסדר גודל של מכפלת וקטור הגל של הפוטון הנפלט $k=\frac{\omega}{c}$ וגודלו האופייני של האטום a_0: אבל

$$\frac{\omega}{c}a_0 \simeq \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \simeq \frac{1}{137}$$

בנוסף, קל לבדוק ש $[H_0, \vec{r}] = -i\frac{\hbar}{m}\vec{p}$

ולכן $\langle 1s|\vec{p}|2pm\rangle = i\frac{m}{\hbar}\langle 1s|[H_0,\vec{r}]|2pm\rangle$

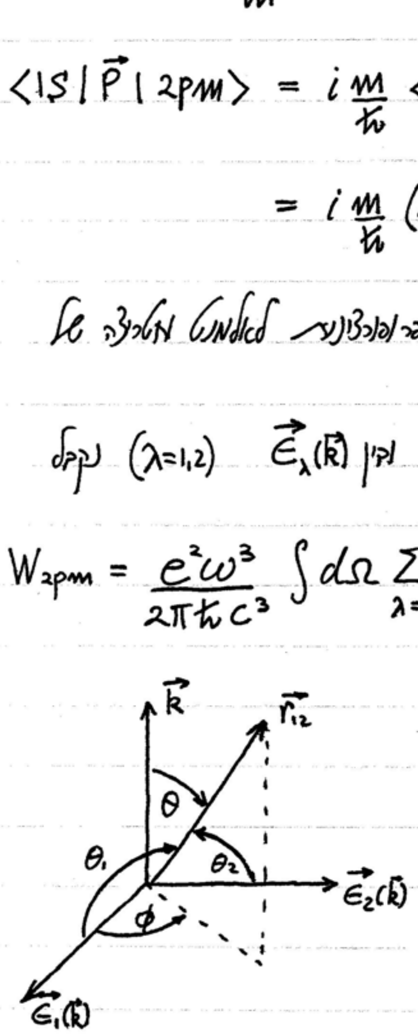
$$= i\frac{m}{\hbar}(E_{1s}-E_{2pm})\langle 1s|\vec{r}|2pm\rangle = -im\omega\langle 1s|\vec{r}|2pm\rangle$$

מסיבה זו נקראים המעברים dipole transitions : אמפליטודת המעבר פרופורציונית לאלמנט מטריצה של אופרטור הדיפול של האטום.

אם נגדיר את הוקטור $\vec{r}_{12} = \langle 1s|\vec{r}|2pm\rangle$ את הזוית θ_λ בינו ובין $\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k})$ $(\lambda=1,2)$ נקבל

$$W_{2pm} = \frac{e^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\int d\Omega\sum_{\lambda=1,2}|\vec{r}_{12}|^2\cos^2\theta_\lambda$$

נבחר את z להיות לאורך כוון $\vec{k}$ ונקבל מטריגונומטריה פשוטה:



$$\cos\theta_1 = \sin\theta\cos\phi$$
$$\cos\theta_2 = \sin\theta\sin\phi$$

נשתמש ב: $\int d\Omega\sum_{\lambda=1,2}\cos^2\theta_\lambda = 2\pi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)\sin^2\theta = \frac{8\pi}{3}$

לקבל $W_{2pm} = \frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\vec{r}_{12}|^2$

נשים לב לעובדה חשובה $|\vec{r}_{12}|$ כי $|\vec{r}_{12}|^2 = |x_{12}|^2 + |y_{12}|^2 + |z_{12}|^2$

$$= \left|\frac{-1}{\sqrt{2}}(x_{12}+iy_{12})\right|^2 + \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(x_{12}-iy_{12})\right|^2 + |z_{12}|^2 \equiv |V^1|^2 + |V^{-1}|^2 + |V^0|^2$$

$V^{\pm1}=\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm iy)$ ו- $V^{0}=z$ הם רכיבים של אופרטור וקטורי כדורי לכן אנו יכולים להשתמש במשפט Wigner Eckhart

$$\langle l_f, m_f | V^q | l_i, m_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l_i+1}} \langle l_i 1 m_i q | l_f m_f\rangle \langle f || V^q || i\rangle$$

כאשר אלמנט המטריצה המצומצם אינו תלוי ב-m.

לכן עבור המצב עם $m=1,(-1),(0)$ רק האופרטורים $V^{-1},(V^{1}),(V^{0})$ תורמים ל-$|\vec{r}_{12}|^2$ מכיון שמקדמי Clebsh-Gordan המופיעים באלמנטי המטריצה של האופרטורים האחרים מתאפסים. המשפט גם אומר לנו שמכיון ש $|\langle 111-1|00\rangle|^2=|\langle 11-11|00\rangle|^2=|\langle 1100|00\rangle|^2$ ו- $\langle f||V^q||i\rangle$ אינו תלוי ב-m, W_{2pm} אינו תלוי ב-m כלל. נוכל לכן לחשב עבור m כלשהו ונעשה זאת עבור $m=0$:

$$\langle 1s|z|2p0\rangle = 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, \frac{\sqrt{3}}{4\pi}\cos^2\theta \int_0^\infty dr\, r^2 \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot r \cdot \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{6}\, a_0^4} \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} = \frac{2^{\frac{15}{2}}}{3^5} a_0$$

$$W_{2p} = \frac{2^{17}}{3^{11}} \frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3} a_0^2 = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \alpha^2 \frac{1}{\hbar}\frac{e^2}{a_0} = 6.27\cdot 10^{8}\ \mathrm{sec}^{-1} \quad \Leftarrow$$

ולכן הרוחב האנרגטי של הרמה הינו:

$$\Gamma_{2p} = \frac{\hbar}{W_{2p}} = 0.41\cdot 10^{-6}\ eV$$

משפט Wigner-Eckhart מספק לנו selection rule כללי יותר עבור dipole transitions: מכיון שמקדמי Clebsh Gordan המופיעים באלמנטי המטריצה של V לא מתאפסים נדרוש התנאים הבאים על ערכי ה-l של המצב ההתחלתי והסופי: $|l_f-l_i|=0,1$ (מלבד $0\to 0$ אסור) ו- $|m_f-m_i|=0,1$:

ישנו עוד selection rule:

$$\langle f|\vec{r}|i\rangle = -\langle f|\Pi^{-1}\vec{r}\,\Pi|i\rangle = -\Pi_f\Pi_i\langle f|\vec{r}|i\rangle$$

כאשר Π אופרטור השיקוף במרחב. לכן רק מעברים בין מצבים עם זוגיות (parity) הפוכה מותרים ב-dipole approximation.

עד כה חישבנו את קצב הדעיכה הכללי. ניתן לשאול שאלה פרטנית יותר לגבי הסיכוי לדעיכה תוך פליטת פוטון בעל פולריזציה מוגדרת. אמפליטודת המעבר תוך פליטת פוטון עם פולריזציה λ בניצב לכיוון הפוטון $\vec{k}$ מתכונתית ל

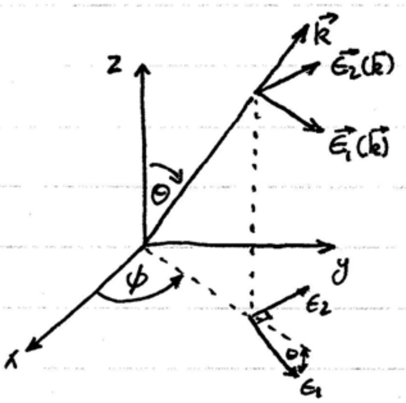
$$V_m^{\lambda=1,2} = \langle 1s | \vec{r}\,\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{k}) | 2pm \rangle$$

קל לבדוק ש

$$\langle Y_0^0 | x | Y_1^0 \rangle = \langle Y_0^0 | y | Y_1^0 \rangle = 0 \qquad \langle Y_0^0 | z | Y_1^0 \rangle = \frac{r}{\sqrt{3}}$$

$$\langle Y_0^0 | x | Y_1^{\pm1} \rangle = \mp\frac{r}{\sqrt{6}} \qquad \langle Y_0^0 | y | Y_1^{\pm1} \rangle = \frac{-ir}{\sqrt{6}} \qquad \langle Y_0^0 | z | Y_1^{\pm1} \rangle = 0$$

נגדיר ש



$$\vec{k}/k = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

$$\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta)$$

$$\vec{\epsilon}_2(\vec{k}) = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$$

ולכן

$$V_0^{\lambda_1} \propto -\frac{1}{\sqrt{3}}\sin\theta \quad , \quad V_0^{\lambda_2} = 0$$

$$V_{\pm1}^{\lambda_1} \propto \mp\frac{1}{\sqrt{6}}\cos\theta\, e^{\pm i\phi} \quad , \quad V_{\pm1}^{\lambda_2} \propto -\frac{i}{\sqrt{6}}\, e^{\pm i\phi}$$

לכן הפוטון הנפלט מהמצב עם $m=0$ מקוטב בהכרח במישור המוגדר על ידי $\vec{k}$ וציר z. קצב הדעיכה עבור מצב זה פרופורציוני ל $\sin^2\theta$: הוא מינימום עבור פוטונים הנפלטים לאורך ציר z ומקסימלי עבור פוטונים הנפלטים במישור xy. קל להבין זאת משימור תנע זוויתי. למצב עם $m=0$ תנע זוויתי $l=1$ במישור xy ולמצב הסופי s בעל תנע זוויתי 0. ניתן לרשום פוטון עם פולריזציה ϵ_1 הנע לאורך ציר z כסכום של פוטונים עם פולריזציות מעגליות הנעים באותו כיוון ולהם תנע זוויתי ±1 בכיוון z. ברור לכן שהמצב הסופי

יהיה במקרה זה בעל תנע זוויתי ±1 תוך הפרת שמור תנע זוויתי ולכן הוא אסור.

באופן דומה ניתן לבדוק את התוצאה עבור המקרים עם $m=\pm1$ לצורך כך נבחן את קצב הפליטה ממצבים אלה של פוטונים עם פולריזציה מעגלית:

$$\vec{\epsilon}_\pm(\vec{k}) = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) \pm i\,\vec{\epsilon}_2(\vec{k})\right)$$

אמפליטודת המעבר במקרים אלה פרופורציונית ל:

$$V_m^{\lambda=\pm} = \langle 1s|\,\vec{r}\cdot\vec{\epsilon}_\lambda^{\,*}(\vec{k})\,|2pm\rangle$$

ונקבל

$$V_{\pm1}^{\lambda+} \propto \frac{1}{\sqrt{12}}(1\pm\cos\theta)e^{\pm i\phi} = \frac{1}{\sqrt{3}}e^{\pm i\phi}\begin{cases}\cos^2\frac{\theta}{2}\\ \sin^2\frac{\theta}{2}\end{cases}$$

$$V_{\pm1}^{\lambda-} \propto \frac{1}{\sqrt{12}}(1\mp\cos\theta)e^{\pm i\phi} = \frac{1}{\sqrt{3}}e^{\pm i\phi}\begin{cases}\sin^2\frac{\theta}{2}\\ \cos^2\frac{\theta}{2}\end{cases}$$

אנו רואים לכן כי עבור המצב $m=1$ הסתברות גבוהה (פרופורציונית ל $\cos^4\frac{\theta}{2}$) לפליטת פוטון עם פולריזציה מעגלית + בכוון ציר z החיובי. תוצאה זו מובנת מתוך שמור תנע זוויתי שכן לפוטון עם פולריזציה מעגלית + תנע בכוון ציר z החיובי תנע זוויתי $+\hbar$ כמו למצב ההתחלתי. באופן דומה קיימת הסתברות גבוהה לפליטת פוטון מקוטב מעגלית - בכוון ציר z השלילי (פרופורציונית ל $\sin^2\frac{\theta}{2}$) מכיון שגם פוטון כזה נושא תנע זוויתי $+\hbar$ בכוון z החיובי כמו למצב ההתחלתי. התוצאות עבור פליטה מהמצב עם $m=-1$ מוסברות משיקולים דומים.