

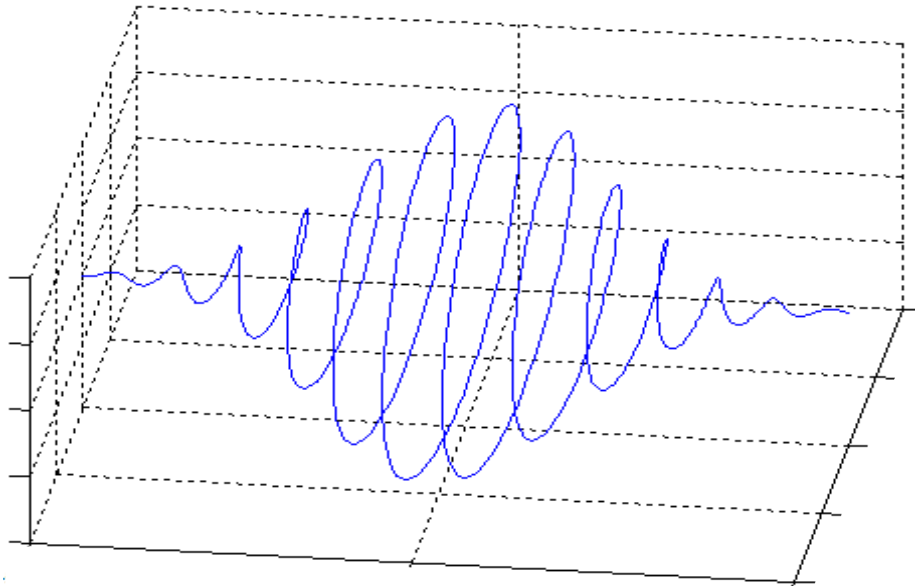


בית הספר הגבוה לטכנולוגיה בירושלים
Jerusalem College of Technology

יסודות תורת הקוונטים

פרופ' יעקב פרידמן

19/08/2009



© כל הזכויות שמורות

בית הספר הגבוה לטכנולוגיה בירושלים

מבוא

ספר זה מבוסס על הרצאות בקורס שנתי "תיאוריית הקוונטים" שניתן על ידי המחבר לתלמידי החוג לפיזיקה שימושית – אלקטרו-אופטיקה בבית הספר הגבוה לטכנולוגיה בירושלים, מכון טל בשנים 2002-2009. ברצוני להודות לתלמידות שרשמו את ההרצאות. רשימות אלו מהוות את הבסיס לספר זה.
הספר מבוסס על הספרים:

1. A. Sudberry, Quantum Mechanics and the Particles of Nature. Cambridge University Press, 1986
2. R Shankar, Principles of quantum mechanics, New York : Plenum Press, 1994
3. J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison – Wesley, Rev.Ed. 1994
4. R. Liboff, Introductory Quantum Mechanics, Holden Day, 1980

כאשר חלק מהנושאים מוצגים בצורה חדשה.

מבנה הספר:

פרק 1 עוסק בשוני בין תופעות קלאסיות וקוונטיות עם דגש על ההבנה של הצורך בשינוי המודל של פיזיקה קלאסית עבור תופעות מיקרוסקופיות. מוצגת סקירה של הדואליות חלקיק-גל. מוסבר כיצד ניתן לקבל תיאור של קרינת גוף שחור מההנחה של בדידות ערכי האנרגיה. מתואר ניסוי שטרן-גרלך, שמלמד על דיסקרטיות של רכיב המומנט המגנטי של האלקטרון, והשפעת המדידה על המצב של מערכת קוונטית. מוסברים פרדוקס איינשטיין-פודולסקי-רוזן ואי-שוויון בל וכיצד ניתן ללמוד מכך שלא קיימים בו זמנית שני רכיבים של מומנט מגנטי של חלקיק.

פרק 2 עוסק בביסוס של המודל הקוונטי הסטטי. משתמשים בקיטוב האור כדי להדגים את הייחודיות של תיאור מצב של מערכת מקרוסקופית כמו פוטון. לומדים על המקבילות והשוני בין התיאורים של קיטוב פוטון ומומנט מגנטי של האלקטרון. מכאן מגיעים להנחת היסוד הראשונה של המכאניקה הקוונטית שעוסקת בתיאור מצב במערכת קוונטית. על ידי ניתוח של השוני בין גודל פיסיקאלי בפיסיקה קלאסית ובין גודל דומה עבור מערכת קוונטית מגיעים להנחת היסוד השנייה של המכאניקה הקוונטית העוסקת בתיאור של גודל פיזיקאלי קוונטי ותהליך מדידתו. מדגימים הנחה זו על תיאור של רכיב של המומנט המגנטי של אלקטרון. ניסוי לבדיקת תכונת גליות של אלקטרון מוביל לתיאור מצב החלקיק לפי מיקום ותנע ודוגמאות של פונקציות גל. ממשיכים עם הגדרה של אופרטורי מיקום ותנע. עוברים לתכונות הסתברותיות של גדלים מדידים. מפתחים נוסחאות עבור תוחלת ושונות של משתנה דינאמי, מפתחים תנאי לגדלים פיזיקליים הנמדדים יחדיו ומוכיחים את עקרון אי הוודאות המוכלל.

פרק 3 עוסק בדינאמיקה קוונטית. מתחילים בגישת שרדינגר לתיאור דינאמיקה של מצב מערכת קוונטית. מקבלים את משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים ומשוואת שרדינגר התלויה בזמן. מכך מפתחים נוסחה לשינוי בזמן של התוחלת של משתנה דינאמי. עוברים לתיאור הייזנברג של

דינאמיקה קוונטית ומוכיחים את משפט ארנפסט. משלימים את הפרק על ידי שיטת פיינמן של דינאמיקה קוונטית. היות ושיטה זו מבוססת על שיטת לגרנג' במכאניקה קלאסית, מובאים עיקרי שיטה זו. לאחר תיאור שיטת פיינמן בודקים את הגבול הקלאסי שלה. מראים שעבור חלקיק בשדה משמר השיטה מובילה למשוואת שרדינגר. מסיימים את הפרק עם חישוב הפרופוגטור של פיינמן עבור שדה בעל פוטנציאל פולינומיאלי מסדר שני.

פרק 4 עוסק בבעיות חד מימדיות, פוטנציאלים קבועים בקטעים. מתחילים מהגדרת זרם הסתברות ועוברים לתיאור מצבים יציבים בבור פוטנציאלי חד מימדי אינסופי. מחשבים את מקדמי ההעברה וההחזרה עבור: מדרגת פוטנציאל, מחסום פוטנציאל ובור מרובע סופי. מסיימים את הפרק בתיאור גרביטציה במכאניקה הקוונטית.

פרק 5 עוסק בניתוח של מתנד הרמוני קוונטי. מתחילים מניתוח של מצבים יציבים של מתנד הרמוני קוונטי חד-מימדי לפי שיטת שרדינגר, ובעזרתו מקבלים תיאור מצבים יציבים של מתנד הרמוני תלת מימדי. מפתחים הצגה מטריציונית של אופרטורי מיקום ותנע בבסיס שמתקבל עבור מתנד הרמוני ורואים שהאופרטורים מיוצגים על ידי מטריצות הייזנברג. הצגה מטריציונית זו מביאה אותנו להגדרה של אופרטורי a, a^* שבעזרתם מבצעים ניתוח אלגברי של מתנד הרמוני. מסיימים עם תרגילים על מתנד הרמוני.

פרק 6 עוסק בשיטת WKB של קירוב סמי-קלאסי לפתרון משוואת שרדינגר במימד 1. הפעלת שיטה זו עבור בור פוטנציאל מביאה לקוונט יזמיה בוהר-זומרפלד.

פרק 7 עוסק בתיאור סימטריה במכאניקה קוונטית על ידי הגדרת: פעולות על מרחב המצבים, יוצר פעולה והקשר בניהם. מגדירים את פעולת הסיבוב ואת יוצר פעולת הסיבוב. מסבירים איך סימטריה מביאה לחוקי שימור. מסיימים בתיאור מערכות משולבות של חלקיקים זהים.

פרק 8 עוסק בתיאור תנע זוויתי במכאניקה קוונטית. מתחילים מניתוח אלגברי של התנע הזוויתי. מפתחים הצגה מטריציונית של אופרטורי התנע הזוויתי עבור כל ספין אפשרי. מתארים את התנע הזוויתי של זוג חלקיקים וחישוב מקדמי קלבש-גורדון עבורם. מפתחים תיאור של מומנט מגנטי ותנע זוויתי של מטען ומוצאים מצבים עצמיים של תנע זוויתי מסלולי.

פרק 9 עוסק בתיאור מבנה אטום מימן. פותרים את משוואת שרדינגר לתיאור מצבים יציבים של אטום מימן ומסבירים כיצד ניתן ללמוד מכך על מבנה אטום כללי.

פרק 10 עוסק בתורת הפרעות. מתחילים בהפרעה במצבים יציבים - מקרה חסר ניוון ומקרה בעל ניוון.

עוברים לתורת הפרעות התלויות בזמן וחישובי הסתברות מעבר מרמה לרמה בהשפעת הפרעה. מסיימים בהפרעה מחזורית וכלל הזהב של Fermi.

תוכן העניינים

1	פרק 1: שוני בין תופעות קלאסיות וקוונטיות
1	1.1. הקדמה
1	1.2. דואליות חלקיק – גל
1	1.2.1. התאבכות אלקטרונים
2	1.2.1. האפקט הפוטו-אלקטרי
3	1.3. קרינת גוף שחור-בדידות ארכי אנרגיה
9	1.4. ניסוי שטרן – גרלך והשפעת המדידה.
13	1.5. פרדוקס EPR (איינשטיין, פודולסקי, רוזן) ואי שוויון בל
16	פרק 2: ביסוס מודל הקוונטי
16	2.1. קיטוב האור
24	2.2. הנחות יסוד (אקסיומות) של תורת הקוונטים
24	2.2.1. מרחב המצבים
	במקרה הקלאסי.
	במקרה הקוונטי.
	הנחת יסוד ראשונה.
	דוגמאות למרחבי מצבים במערכת קוונטית:
	דוגמא 1: קיטוב פוטון.
	דוגמא 2: מומנט מגנטי של אלקטרון.
27	2.2.2. משתנים דינמיים - גדלים ניתנים לצפייה (מדידה)
	הנחת יסוד שנייה.
29	2.3. אופרטור המיצג מומנט מגנטי של אלקטרון
	2.3.1. אופרטור המיצג רכיב z של מומנט מגנטי
	של אלקטרון
	2.3.2. אופרטור המיצג רכיב כלשהו
36	2.4. ניסוי לבדיקת תכונת גליות של אלקטרון
38	2.5. הצגה לפי מיקום ותנע
	תיאור מצב לפי מיקום ותנע של חלקיק (תכונות חיצוניות)
	מדידה של מיקום הקשר בין התנע ואורך גל

43	2.6 דוגמאות של פונקציות גל
	א. חבילת גלים
	ב. מרחב המצבים של מתנד הרמוני
47	2.7 אופרטורי מיקום ותנע
50	2.8 תוחלת ושונות של משתנה דינאמי
52	2.9 גדלים פיזיקליים נמדדים יחדיו (קומפטיבליים)
55	2.10 עקרון אי הוודאות המוכלל
58	פרק 3 – דינאמיקה קוונטית
58	3.1 פיתוח משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים
	דוגמא 1 : מצב יציב של חלקיק חופשי
	דוגמא 2 : משוואת שרדינגר למצב יציב של חלקיק בשדה משמר
62	3.2 משוואת שרדינגר התלויה בזמן.
	דוגמא 1 משוואת שרדינגר עבור חלקיק בודד בשדה משמר :
	דוגמא 2 משוואת שרדינגר עבור מספר חלקיקים בשדה משמר
65	3.3 אופרטור התפתחות בזמן.
72	3.4 שינוי בזמן התוחלת של משתנה דינאמי
75	3.5 הצגת הייזנברג
77	3.6 משפט ארנפסט
80	3.7 שיטת פיינמן לדינאמיקה הקוונטית
	3.7.1 שיטת לגרנג' במכאניקה קלאסית
	3.7.2 הפרופוגטור של פיינמן
84	3.8 פיתוח משוואת שרדינגר בגישת פיינמן
	3.9 חישוב פרופגטור של פיינמן בשדה
88	בעל פוטנציאל $V = a + bx + cx^2 + dx + exi$
92	פרק 4 : בעיות חד-מימדיות, פוטנציאלים קבועים בקטעים.
92	4.1 זרם הסתברות
94	4.2 בור פוטנציאל חד מימדי אינסופי
95	4.3 מדרגת פוטנציאל
99	4.4 מחסום פוטנציאל-מינהור
102	4.5 בור מרובע סופי
103	4.6 גרביטציה במכאניקה הקוונטית

105	פרק 5- מתנד הרמוני קוונטי
105	5.1 מצבים יציבים של מתנד הרמוני - שיטת שרדינגר
	5.1.1 מצבים יציבים של מתנד הרמוני קוונטי חד-מימדי
	5.1.2 מתנד הרמוני תלת מימדי
111	5.2 הצגה מטריציונית של אופרטורי מיקום ותנע בבסיס של מתנד הרמוני. מטריצות הייזנברג.
113	5.3 ניתוח אלגברי של מתנד הרמוני
	5.3.1 אופרטורי a, a^*
	5.3.2 רמות אנרגיה במתנד הרמוני
	5.3.3 הצגה מטריציונית של אופרטור a בבסיס מצבים יציבים של מתנד הרמוני
118	5.4 תרגילים על מתנד הרמוני
126	פרק 6: קירוב סמי – קלאסי בשיטת WKB
126	6.1 קירוב מסדר ראשון – מצבים יציבים (מימד 1)
129	6.2 בור פוטנציאל – פתרון WKB
134	פרק 7: סימטריה במכניקה קוונטית
134	7.1 פעולות על מרחב המצבים
136	7.2 יוצר פעולה
137	7.3 הקשר בין היוצר והפעולה
138	7.4 פעולת הסיבוב ויוצר של פעולת הסיבוב
140	7.5 חוקי שימור
143	7.6 מערכות משולבות של חלקיקים זהים
146	פרק 8: תנע זוויתי
146	8.1 יחסי חילוף בין רכיבי התנע הזוויתי
147	8.2 ניתוח אלגברי של התנע הזוויתי
	8.2.1 משתנים נמדדים יחדיו בתנע הזוויתי
	8.2.2 אופרטורים J_{\pm} .
	8.2.3 ערכים אפשריים עבור J^2 ו- J_3 .
	8.2.4 סיכום של התנע הזוויתי המוכלל

	8.3 הצגה מטריציאית של אופרטורי התנע הזוויתי
153	בבסיס מצבים של $ j, m\rangle$
156	8.4 התנע הזוויתי של זוג חלקיקים.
	8.4.1 תיאור מצב של שני חלקיקים שונים
	8.4.2 פעולה ויוצר הפעולה על מרחב מצבים משולבים
	8.4.3 מקרה כללי
164	8.5 מומנט מגנטי ותנע זוויתי של מטען
166	8.6 תנע זוויתי מסלולי
	פרק 9: מבנה אטום מימן
176	9.1 תיאור מצב אטום מימן. פירוק ההמילטוניאן
179	9.2 קבלת משוואה רדיאלית
181	9.3 פתרון של משוואה רדיאלית
184	9.4 פולינומי לגר תיאור מצבים יציבים של אטום מימן
190	9.5 תיאום מודל אטום מימן למציאות
191	9.6 מבנה אטום כללי
	פרק 10: תורת הפרעות
194	10.1 הפרעה במצבים יציבים - מקרה של אי ניוון
195	10.2 הפרעה במצבים יציבים - מקרה של ניוון
206	10.3 תורת הפרעות תלויות בזמן
208	10.4 הסתברות מעבר מרמה לרמה בהשפעה של הפרעה
211	10.5 הפרעה מחזורית, כלל הזהב של Fermi
213	דף נוסחאות

פרק 1: שוני בין תופעות קלאסיות וקוונטיות

1.1 הקדמה

תיאורית הקוונטים היא תיאוריה פיסיקלית המשמשת כמודל שבאמצעותו מתארים תופעות ברמה מיקרוסקופית. למעשה תיאורית הקוונטים נכונה גם ברמה המקרוסקופית אך אז הפיסיקה הקלאסית נותנת תוצאות המתאימות בדיוק רב לתוצאות הניסיוניות ואין צורך בתיאוריה חדשה שתתאר אותן. לכן הפיסיקה הקלאסית היא מעין צורה גבולית של הפיסיקה הקוונטית ברמה המקרוסקופית, בדיוק כשם שהיא מהווה גבול של תורת היחסות במהירויות הקטנות בהרבה ממהירות האור. הצורך בפיתוח תיאוריה זו נוצר בעקבות מספר ניסויים ותופעות שסתרו את הפיסיקה הקלאסית או שלא ניתן היה לספק להם הסבר באמצעותה. בפרק זה נתאר מספר ניסויים כאלו שמראים את הצורך במהפכה המחשבתית הטמונה בתיאורית הקוונטים. ניסויים אלו מצביעים על הבדלים יסודיים בין התופעות הקלאסיות שהיו ידועות עד תחילת המאה העשרים לבין התופעות הקוונטיות שהתגלו באותה עת, והם חוזרים על עצמם לאורך כל הקורס הנלמד.

1.2 דואליות חלקיק - גל

לפני פיתוח תיאורית הקוונטים ידעו הפיסיקאים על שתי מציאויות שונות בתכלית של חלקיקים וגלים. ההבדל המהותי ביניהן הוא שחלקיק נמצא בכל רגע נתון במקום מוגדר במרחב ואילו גל יכול נמצא בתחום, ז"א בכמה מקומות בו זמנית. באותה עת אלקטרונים נתפסו כחלקיקים והאור כגל, אולם שני הניסויים המתוארים להלן מצביעים על כך שלעיתים ניתן להבחין באופי גלי של אלקטרונים ובאופי חלקיקי של האור המורכב מפוטונים.

1.2.1 התאבכות אלקטרונים

ניסוי זה דומה במהותו לניסוי שני הסדקים של יאנג אלא שאת אלומת האור מחליפה אלומת אלקטרונים, ואת הלוח בעל שני הסדקים המרוחקים במרחק שהוא בסדר גודל של אורך גלי האור מחליף חומר מוצק שגודל האטומים שלו והמרחק ביניהם הוא בסדר גודל של אורך הגל של הגלים הקשורים בתנועתם של אלקטרונים, על פי הנוסחה של דה-ברויל (de Broglie). האלקטרונים הפוגעים בחומר המוצק ממשיכים לעבר מסך המצופה חומר זרחני כך שבנקודת פגיעת האלקטרון המסך זוהר.

אם מתבוננים במסך, רואים שכל אלקטרון בודד שעבר דרך ה"סדקים" גורם לפליטת אור בנקודה אחת ויחידה על המסך. מכאן אפשר להסיק שהאלקטרון אכן פגע במסך בנקודה זו. אולם לא כל האלקטרונים פוגעים באותה נקודה, אלא אלקטרונים שונים גורמים לפליטת אור בנקודות שונות, וכאשר בודקים את ההתפלגות הסטטיסטית של פגיעות

האלקטרוניים מוצאים שהיא מתנהגת בדיוק כמו גרף התפלגות עוצמת האור בניסוי של התאבכות האור. במילים אחרות, ההתפלגות הסטטיסטית של פגיעות האלקטרוניים במסך היא בעלת צורה של פסי התאבכות, והחישוב המתמטי מראה שמרחקי הפסים זה מזה מתאימים לאורך הגל שדה-ברויל חישב עבור האלקטרוניים. מכאן שכל אלקטרון פוגע במסך כחלקיק, כלומר בנקודה אחת ויחידה, אבל ההתפלגות הסטטיסטית של מעבר אלקטרוניים רבים מתנהגת כמו גל, שעבר בבת אחת דרך שני הסדקים. יוצא איפה שכאשר מתייחסים לאלקטרוניים בודדים ניכר האופי החלקיקי שלהם ואילו כאשר מסתכלים על מספר רב של אלקטרוניים מתגלה אופיים הגלי. כדאי לציין כאן שבדיוק באותה צורה מתנהגים פוטונים, ז.א. גלי האור.

נשאלת אכן השאלה מדוע את תכונות הגליות קל יחסית לראות בתחום האופטיקה וקשה כל כך לראותם בתופעות של מכאניקה?

התשובה על כך טמונה בהבדל היסודי שבין החלקיקים המשמשים בתופעות מכניות לבין החלקיקים המשמשים האופטיקה -- פוטונים. החלקיקים בטבע מחולקים לשני סוגים: הסוג הראשון הוא חלקיקים הנקראים פרמיונים – כגון אלקטרוניים, פרוטונים, נייטרונים וכו' והסוג השני הוא חלקיקים הנקראים בוזונים – כגון פוטונים. אחד ההבדלים העקרוניים בין שני הסוגים הוא שפרמיונים מתנהגים לפי עיקרון האיסור של Pauli ולכן הם שואפים להיות שונים ואילו בוזונים שואפים לאחידות (דוגמא לאחידות הבוזונים היא קיטוב אור של אלומה שהוא למעשה הקיטוב של כל הפוטונים המרכיבים אותה). לכן, באופן כללי, קל יותר ללמוד על רמת המיקרו מניסויים בתחום האופטיקה משום שמספר רב של הבוזונים הזהים מעלה את רמת המיקרו לרמת המאקרו, בעוד שבתחום המכניקה כדי ללמוד על רמת המיקרו יש לבצע מדידות מיקרוסקופיות שכלי המדידה שברשותנו אינם מאפשרים זאת בדרך כלל או לבדוק את הפרמיונים "אחד לאחר השני" באלומה.

1.2.2 האפקט הפוטו-אלקטרי

אור הפוגע במשטח מתכת עשוי לגרום לפליטת אלקטרוניים מהמתכת – תופעה המכונה אפקט פוטו-אלקטרי. לפי הפיסיקה הקלאסית, אור בעל עוצמה גבוהה צריך היה לגרום לפליטת אלקטרוניים מן החומר ללא קשר ישיר לתדירותו. בנוסף, הפיסיקה הקלאסית חזתה שהאנרגיה הקינטית המקסימאלית של אלקטרון הנפלט מן המתכת תגדל ביחד עם הגדלת עוצמת האור הפוגע. בפועל, כאשר חזרו על הניסוי בעוצמות אור שונות, תדירויות אור שונות ומתכות שונות גילו שלוש עובדות העומדות בסתירה מוחלטת לתחזיות הפיסיקה הקלאסית:

1. אלקטרוניים נפלטים מן המתכת רק אם תדירות האור הפוגע עולה על תדירות מסוימת המכונה בשם תדירות סף. תדירות הסף תלויה במתכת שממנה עשויה האלקטרודה המוארת.

2. כאשר תדירות האור עולה על תדירות הסף, אז מספר האלקטרונים הנפלטים מהמתכת פרופורציונאלי לעוצמת האור.

3. האנרגיה הקינטית המקסימלית של אלקטרון הנפלט מהמתכת היא פונקציה ליניארית של התדירות ואינה תלויה כלל בעוצמת האור.

התוצאות הניסיוניות שתוארו לעיל אינן מתיישבות עם התיאוריה הקלאסית אך מוסברות היטב על ידי מודל שהציע איינשטיין. לפי מודל זה אור בתדירות ν מתנהג, באינטראקציה עם חומר, כאילו היה זרם של חלקיקים, או קוונטים של אנרגיה הנקראים פוטונים, שהאנרגיה של כל אחד מהם היא $h\nu$. כאשר אור פוגע במתכת יתכן מעבר אנרגיה ממנו אל האלקטרונים שבמתכת, אולם כל אלקטרון יכול לבלוע קוונט שלם של אנרגיה. בעוצמות אור רגילות ההסתברות לכך ששני קוונטים ייבלעו בבת אחת על ידי אלקטרון אחד היא קטנה מאד, ועל כן האנרגיה שאלקטרון יכול לקבל ברגע מסוים מאור בתדירות ν היא 0 או $h\nu$. כאשר אלקטרון חופשי במתכת בולע קוונט של אור, גדלה האנרגיה שלו, והוא עשוי לצאת מן המתכת בהתאם לפונקציה העבודה של המתכת - ϕ . האנרגיה הקינטית המקסימלית של אלקטרון הנפלט מן המתכת שווה לאנרגיה של קוונט אנרגיה פחות פונקציה העבודה:

$$E_{\max} = h\nu - \phi \quad (1.1)$$

משוואה זו מסבירה את עובדה 3 לעיל. כאשר $h\nu < \phi$ אלקטרונים לא ייפלטו כלל מן המתכת ובכך מוסברת עובדה 1 לעיל. ההנחה של קוונט של אנרגיה שנבלע מסוגל להוציא מן המתכת אלקטרון אחד בלבד מסבירה את עובדה 2.

1.3 קרינת גוף שחור-בדידות ארכי אנרגיה

גוף שחור מוגדר כגוף הבולע את כל הקרינה הנופלת עליו ואינו מחזיר אף חלק ממנה. חלל סגור או תנור שבו חור קטן מתנהג כגוף שחור משום שקרינה שחודרת מבחוץ דרך החור מוחזרת פעמים רבות מן הדפנות ונבלעת תוך כדי כך בשלמות, גם אם הדפנות אינן בולעות מושלמות. הקרינה האלקטרומגנטית הנפלטת מתנור כזה מכונה בשם קרינת גוף שחור. הגוף השחור עשוי כך שהקרינה שבתוך החלל נמצאת בשיווי משקל תרמודינמי עם הדפנות. לכן הרכבה הספקטראלי וההספק הכללי שלה אינם תלויים כלל בצורת התנור ובחומר ממנו הוא עשוי, אלא בטמפרטורה שלו בלבד.

את המנגנון שבאמצעותו נוצרת הקרינה אפשר להסביר באופן הבא, ידוע לנו שהיונים או האטומים במוצק מתנדודים כמתנדים הרמוניים. באופטיקה הקלאסית גם את תנועת האלקטרונים מתארים באותה צורה. מכיוון שתנודה זו כרוכה בהאצה של מטענים (תנועת יונים או קיטוב מולקולות במידה זו או אחרת), יוצא כי לפי חוקי האלקטרודינמיקה עשוי

המתנד ההרמוני הזה לפלוט קרינה אלקטרומגנטית שתדירותה שווה לתדירות תנודתו, וזה מקורה של קרינת הגוף השחור.

במצב של שיווי משקל תרמודינמי מתקיימים שני דברים בו זמנית: ראשית, האנרגיה הממוצעת של מתנד הרמוני חד-מימדי שווה ל- kT (קבוע בולצמן), תוצאה המתקבלת על פי הפיסיקה הקלאסית, וניתן לחשב על פיה את האנרגיה הממוצעת שפולט המתנד ביחידת זמן. שנית, לפי האופטיקה, הרי האנרגיה הנפלטת זוהי האנרגיה המפוזרת ע"י המתנד. במצב שיווי משקל האנרגיה הנפלטת שווה בדיוק לאנרגית הקרינה הפוגעת במתנד ומפוזרת על ידו.

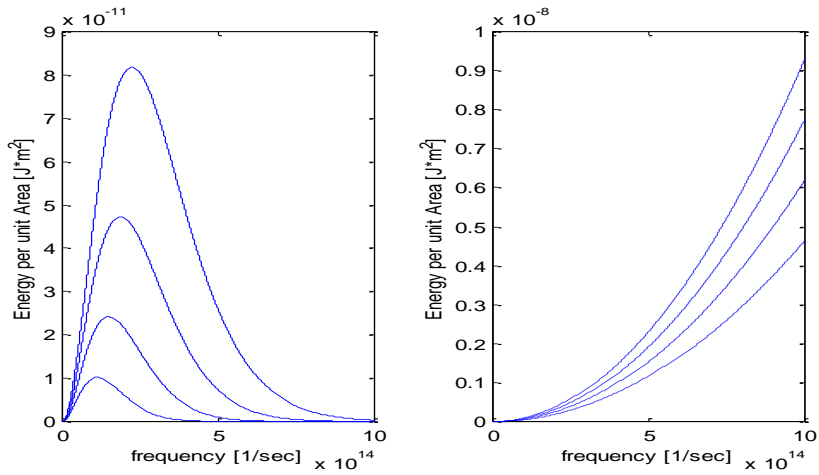
אם משווים את האנרגיה שפולט המתנד ביחידת זמן לאנרגית הקרינה הפוגעת בו ומפוזרת על ידו ביחידת זמן ניתן לקבל את עוצמת האור (אנרגית הקרינה העוברת יחידת שטח ביחידת זמן) בתווך התדרים $d\omega$, (נסמן אותה $I(\omega)d\omega$):

$$I(\omega)d\omega = \frac{\omega^2 \langle E \rangle}{3\pi^2 c^2} d\omega \quad (1.2)$$

במשוואה (1.2) $\langle E \rangle$ היא האנרגיה של המתנד ההרמוני. כאשר נציב, כאמור לעיל, $\langle E \rangle = kT$ בנוסחה זו, נקבל:

$$I(\omega)d\omega = \frac{\omega^2 kT}{3\pi^2 c^2} d\omega \quad (1.3)$$

ניתן לראות ממשוואה זו שצפיפות האנרגיה ליחידת תדר $I(\omega)$ מתנהגת כפונקציה ריבועית של התדר ω . לכן, העוצמה הכוללת של האור בחלל הסגור, המתקבלת על ידי אינטגרל של $I(\omega)$ על פני כל התדרים (השטח שתחת העקומות המקווקוות באיור 1.1), היא אינסופית. כמובן שתוצאה זו איננה מתקבלת על הדעת ובנוסף היא איננה עולה בקנה אחד עם עקומות הפליטה הספקטראלית של הגוף השחור שהתקבלו באופן ניסיוני בטמפרטורות שונות (העקומות המלאות באיור 1.1).

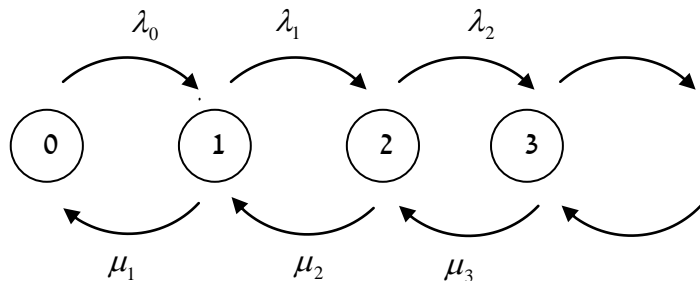


איור 1.1 – התפלגות ספקטראלית של האנרגיה ליחידת שטח בגוף שחור עבור טמפרטורת שונות. האיור מימין מתאר את התוצאה על פי הפיסיקה הקלאסית והאיור משמאל את התוצאה הניסיונית.

פלאנק (Planck) חקר את נושא פליטת הגוף השחור. תחילה הוא קיבל ביטוי ל- $I(\omega)$ שתואם את התוצאות הניסיוניות, ולאחר מכן הוא ניסה לפתח את אותו ביטוי מתוך שיקולים תיאורטיים תוך התבססות על הנחה יוצאת דופן. ההנחה הייתה שהאנרגיה של מתנד הרמוני המתנדד בתדירות ω איננה יכולה להיות כל אנרגיה שהיא אלא היא בעלת ערכים בדידים השווים לכפולות שלמות של $\hbar\omega$, זאת אמרת

$$E_0 = 0, \quad E_1 = \hbar\omega, \quad E_2 = 2\hbar\omega, \quad E_3 = 3\hbar\omega, \dots$$

כעת נפתח על פי ההנחה זו ועל פי רעיונות משרשראות מרקוב את הביטוי המתאר את האנרגיה הממוצעת של מתנד הרמוני במצב של שיווי משקל. כל מתנד הרמוני נמצא ברמת אנרגיה מסוימת מרמות הדיסקרטיות אפשריות. בעזרת שרשרת מרקוב נתאר את המצבים של המתנד ומעברים בין המצבים.



נסמן את מספר מתנדים ברמת היסוד בזמן t עי"י $N_0(t)$, ברמה 1 עי"י $N_1(t)$, ברמה 2 עי"י $N_2(t)$ וכו'.

כדי להגיע למצב של שיווי משקל ישנם שני תהליכים:

א. העלאת רמה על ידי קבלת אנרגיה.

נניח מתנד שהיה ברמה 0 קיבל אנרגיה מפוטון שפגע בו ועלה לרמה 1.

λ - קצב העברה מרמה לרמה, ז"א בזמן קטן Δt - יעברו מרמה-0 לרמה-1 $N_0 \lambda_0 \Delta t$ אטומים.

ניתן להניח שההסתברות לקפוץ 2 רמות קטנה מההסתברות לקפוץ רמה אחת ולכן קפיצה לשתי רמות תעשה בשני שלבים רמה אחת בכל פעם.

ב. ירידה ברמה.

כל מתנד ברמה גבוהה מרמה 0 יכול לרדת ברמה ולפלוט פוטון, קצב הירידה ברמה מסומן באות μ .

כמות החלקיקים ברמה 0 בזמן $t + \Delta t$ שווה לכמות החלקיקים בזמן t פלוס כמות

החלקיקים שהצטרפו מרמה 1 לרמה 0 בזמן Δt פחות כמות החלקיקים שעזבו מרמה 0

לרמה 1 בזמן Δt .

לכן

$$N_0(t + \Delta t) = N_0(t) + N_1(t)\mu_1\Delta t - N_0(t)\lambda_0\Delta t$$

$$\frac{N_0(t + \Delta t) - N_0(t)}{\Delta t} = N_1(t)\mu_1 - N_0(t)\lambda_0 = \frac{dN_0(t)}{dt} \quad \text{ו}$$

במצב שיווי משקל כמות החלקיקים בכל מצב לא תלויה בזמן, כלומר:

$$\frac{dN_0}{dt} = 0 \Rightarrow N_1\mu_1 - N_0\lambda_0 = 0$$

$$N_1 = N_0 \frac{\lambda_0}{\mu_1} \quad \text{לכן:}$$

באופן דומה לרמה 1 נקבל:

$$N_1(t + \Delta t) = N_1(t) + N_0(t)\lambda_0\Delta t + N_2(t)\mu_2\Delta t - N_1(t)\mu_1\Delta t - N_1(t)\lambda_1\Delta t$$

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = N_0(t)\lambda_0 + N_2(t)\mu_2 - N_1(t)\mu_1 - N_1(t)\lambda_1$$

משקל:

שיווי

בתנאי

$$N_0\lambda_0 + N_2\mu_2 = N_1\mu_1 + N_1\lambda_1$$

$$N_1\mu_1 = N_0\lambda_0$$

והרי קודם מצאנו:

$$N_2 = N_1 \frac{\lambda_1}{\mu_2} = N_0 \frac{\lambda_0}{\mu_1} \frac{\lambda_1}{\mu_2} \quad \text{לכן:}$$

מניחים כי הפרשי האנרגיה בין הרמות שווים ולכן ניתן להניח כי $\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ וכן

$$A_2 = A_0 \alpha^2, A_1 = A_0 \alpha \quad \Leftarrow \quad \frac{\lambda}{\mu} = \alpha : \text{נגדיר} . \mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu$$

$$N_n = N_0 \alpha^n \quad \text{בצורה דומה נקבל עבור כל } n$$

מזה מקבלים שמספר מתנדים במערכת שווה ל-

$$N_{tot} = N_0 + N_1 + N_2 + \dots = N_0 + N_0 \alpha + N_0 \alpha^2 + \dots = N_0 \frac{1}{1-\alpha}$$

על מנת שהטור יתכנס מוכרח ש $\alpha < 1$ - וניתן לכתוב $\alpha = e^{-\beta}$ עבור $\beta > 0$.

כמו כן נפתח ביטוי של האנרגיה הכוללת של המערכת:

$$\begin{aligned} E_{tot} &= E_0 \cdot N_0 + E_1 \cdot N_1 + E_2 \cdot N_2 + \dots = 0 \cdot N_0 + \hbar\omega \cdot N_0 \alpha + 2\hbar\omega \cdot N_0 \alpha^2 + \dots = \\ &= N_0 \hbar\omega (0 + \alpha + 2\alpha^2 + 3\alpha^3 + \dots) = N_0 \hbar\omega \cdot \alpha (1 + 2\alpha + 3\alpha^2 + \dots) = N_0 \hbar\omega \cdot \alpha \cdot \frac{d}{d\alpha} (\alpha + \alpha^2 + \alpha^3 + \dots) \\ &= N_0 \hbar\omega \cdot \alpha \cdot \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\alpha}{1-\alpha} \right) = N_0 \hbar\omega \cdot \alpha \cdot \frac{1}{(1-\alpha)^2} \end{aligned}$$

לכן האנרגיה הממוצעת של מתנד היא:

(1.4)

$$\langle E \rangle = \frac{E_{tot}}{N_{tot}} = \frac{N_0 \hbar\omega \alpha (1-\alpha)}{N_0 (1-\alpha)^2} = \frac{\hbar\omega}{\alpha^{-1} - 1} = \frac{\hbar\omega}{e^\beta - 1}$$

כדי למצוא את β נשווה לגבול הקלאסי, שמתאים ל $\alpha \leftarrow 1$ או $\beta \leftarrow 0$:

$$\text{במקרה זה אפשר להחליף } e^\beta \approx 1 + \beta \quad \Leftarrow \quad \langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{\beta} = kT \quad \text{לכן } \beta = \frac{\hbar\omega}{kT} \text{ ואנרגיה}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad \text{הממוצעת לפי (1.4) היא}$$

נציב $\langle E \rangle$ בנוסחה (1.2). ונקבל:

$$I(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{3\pi^2 c^2 \left(e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1 \right)} \quad (1.5)$$

נוסחה (1.5) תואמת את הגרף הניסיוני המתאר פליטת גוף שחור (איור 1.1 משמאל). עבור

$$I(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{3\pi^2 c^2} e^{-\frac{\hbar \omega}{kT}} \rightarrow 0 \quad \text{ועבור } \omega \gg 1 \text{ גדולים} \quad I(\omega) = \frac{kT \omega^2}{3\pi^2 c^2} \quad \omega \ll 1 \text{ קטנים נקבל}$$

קרינת גוף שחור אז מראה על בדידות רמות אנרגיה של מתנד הרמוני.

ידוע מזמן שספקטרום של כל חומר כימי בנוי מקוים בדידים. זה מראה שאנרגיה בנפלטת מחומר או נקלטת על ידו מתאימה לאנרגיות בדידות. זה מעיד שאטומים של החומר נמצאים ברמות אנרגיה בדידות.

תרגיל (שרשראות מרקוב): מדפסת של רשת מחשבים מתבקשת להדפיס בממוצע 3 עבודות בשעה באופן אקראי. זמן הדפסה הממוצע הוא 10 דקות.

(1) מה הסתברות שיהיה תור להדפסה?

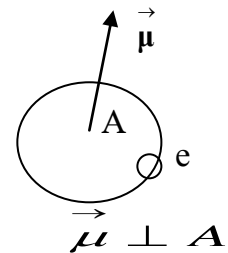
(2) מה הסתברות שיצטרכו לחכות יותר מ-10 דקות להתחלת הדפסה?

1.4 ניסוי שטרן – גרלך והשפעת המדידה

ניסוי זה ערער את כל ההבנה של הפיסיקה וממנו נבנה המודל הקוונטי. שטרן וגרלך רצו לבדוק האם מומנט מגנטי (קוונטי) של אטום מתנהג כפי שהוא צריך להתנהג לפי התיאוריה הקלאסית. הם לקחו אטומים של כסף וחממו אותם בטמפרטורות גבוהות וקבלו זרימת אטומים של כסף. לאטום כסף ישנו אלקטרון אחד ברמה האחרונה. לכן אטומים של כסף מתנהגים כמו אלקטרון מסביב לגרעין כך שאם נצליח למדוד מהו המומנט מגנטי של אטום הכסף נוכל להשוות למומנט מגנטי של אלקטרון. כאשר האלקטרון מסתובב במעגל נוצר זרם חשמלי וכתוצאה מכך נוצר מומנט מגנטי שמאונך למשטח המעגל וניתן למדידה.

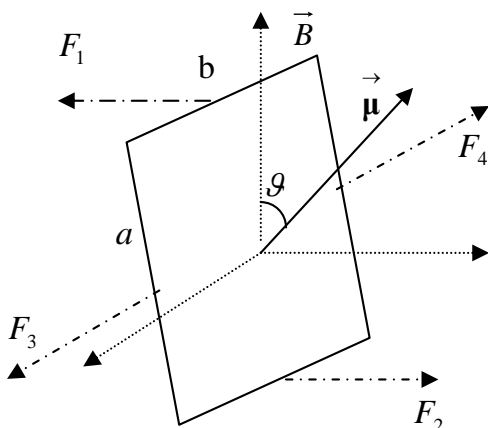
- $\vec{\mu}$ מומנט מגנטי של e בכריכה.
- I הזרם. ניתן למדידה לפי מהירות סיבוב ה- e
- A השטח שבשפתו יש זרימה חשמלית.

$$\mu = IA$$



כדי לחשב את גודל המומנט המגנטי של אטום בודד נוסף שדה מגנטי \vec{B} חיצוני ונסמן ב- θ את הזווית בין \vec{B} ו- $\vec{\mu}$, זה יוצר קשר בין שני השדות. מומנט מגנטי תלוי בשטח הזרימה של הכריכה ולא בצורתה. לכן אנו ניקח מרובע עם צלע באורך b בכיוון של $\vec{B} \times \vec{\mu}$ וצלע a .

הכוח שמפעיל שדה מגנטי \vec{B} על קטע \vec{b} עם זרם I שווה:



$\vec{F} = I\vec{B} \times \vec{b}$. הכוח מאונך תמיד לזרם ולשדה המגנטי. כוחות F_3, F_4 על קטעים באורך a שווים בגודל, פועלים על קו משותף בכיוונים הפוכים ולכן מתבטלים. אבל כוחות F_1, F_2 על קטעים באורך b שווים בגודל, הפוכים בכיוון ופועלים על קווים מקבילים. גודל כוחות אלו

$|F_1| = |F_2| = IbB$ והזרוע של מומנט הכוח שווה-

לכן, גודל המומנט של כוחות אלו יהיה: $\frac{a}{2} \sin \vartheta$

$$\tau = 2|\mathbf{F}| \frac{a}{2} \sin \vartheta = IBba \sin \vartheta = IBA \sin \vartheta = \mu B \sin \vartheta$$

מכאן שהמומנט שווה: $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \mathbf{B}$

כמו שפוטנציאל/עבודה עבור תנועה קווית - $du = F \cdot dr$, ובמקרה של תנועה סיבובית-

, כאשר $d\vartheta$ - זווית סיבוב הפיתול. $du = \vec{\tau} \cdot d\vartheta$

לכן פוטנציאל של שדה B על אטום מוגדר

$$du = \vec{\tau} \cdot d\vartheta = \mu B \sin \vartheta \cdot d\vartheta = -d(\mu B \cos \vartheta)$$

$$u = \int du = -\mu B \cos \vartheta = -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}$$

וכן הכוח ששדה מפעיל על אטום $\mathbf{F} = -\nabla u$

לכן, על מנת למדוד את המומנט מגנטי של אטום הכסף ניצור שדה מגנטי לא אחיד ונקבל כוח שיהיה תלוי בפוטנציאל.

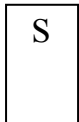
על מנת ליצור שדה מגנטי לא אחיד - לוקחים שני מגנטים שאחד שפתו רחבה ושני שפתו צרה (חוד), בניהם נוצר שדה מגנטי $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z) = (0, 0, B_z)$ לא אחיד בכיוון ציר z ,

בכיוון ציר x ו- ציר y השדה אחיד. לכן $\nabla \mathbf{B} = (0, 0, \frac{\partial B_z}{\partial z})$, כאשר $\frac{\partial B_z}{\partial z} = const$ ומכאן-

$$\mathbf{F} = -\nabla u = \nabla(\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}) = (0, 0, \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}) = (0, 0, \mu \frac{\partial B_z}{\partial z} \cos \vartheta)$$



הכוח שפועל על האטום הוא רק בכיוון ציר z ולכן הוא מושך את אטומי הכסף לציר z .



הניסוי: נחמם תנור שבתוכו אטומי כסף לטמפר" גבוהה, ודרך סדק צר בכיוון y נקבל

זרימה של אטומי כסף שיעברו דרך השדה המגנטי שנוצר על ידי שני המגנטים

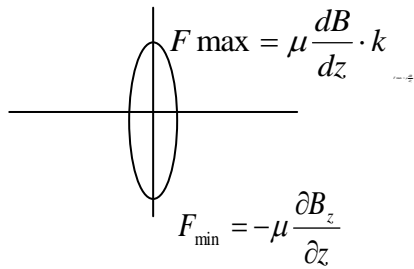
(מלמעלה), כתוצאה מכך פועלים עליהם כוחות רק בכיוון ציר z .

הכוחות יהיו לכיוון החיובי או השלילי לפי סימן של $\cos \vartheta$.

כאשר $\cos \vartheta = 1$ נקבל כוח מקסימאלי- בכיוון רכיב z החיובי של השדה המגנטי.

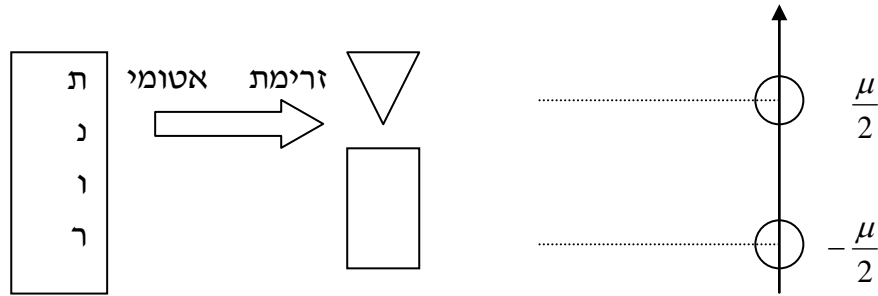
כאשר $\cos \vartheta = -1$ נקבל כוח מינימאלי- בכיוון רכיב z השלילי של השדה המגנטי.

כאשר $\cos \theta = 0$ לא נקבל כוח. המומנט המגנטי מאונך לרכיב z של השדה המגנטי. ציפו שתוצאות הניסוי יהיו שהכסף יתפשט לאורך ציר z -באופן רציף, באמצע יהיה ריכוז גדול של אטומי כסף (כל מי שלא פעל עליו כוח ימשיך ישר) ובצדדים



ריכוז פחות גדול. הגרף הצפוי:

מה שהתקבל בפועל היה:



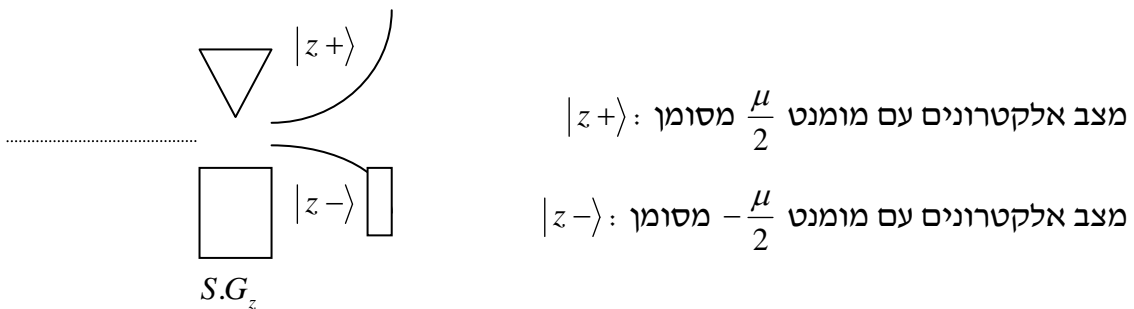
התוצאה-רכיב z של מומנט מגנטי של כסף יכול לקבל רק שני ערכים בדידים בלבד:

$$\mu_z = -\frac{\mu}{2} \quad \text{ו} \quad \mu_z = +\frac{\mu}{2}$$

כאשר μ מתאים למומנט מגנטי קלאסי – ספין של אלקטרון. התוצאות שהתקבלו שוות בערכן למחצית מערך מומנט תנע מקסימאלי ומינימאלי במקרה הקלאסי, וכן לא התקבל מצב שמאפשר שמומנט מגנטי אנך לרכיב שדה מגנטי.

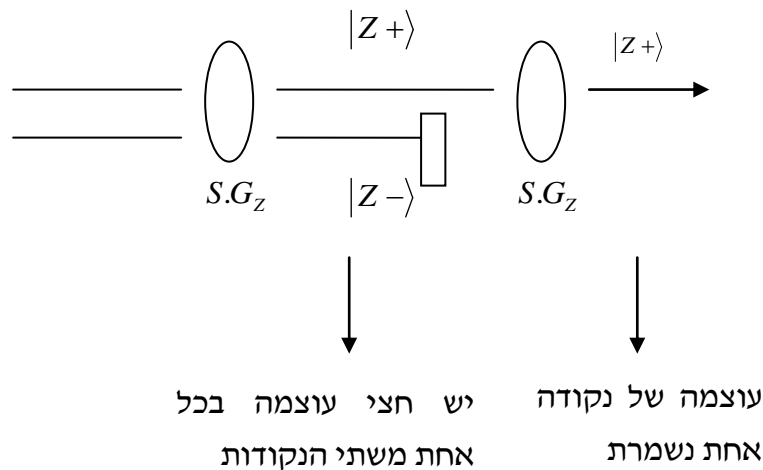
ניסוי בדיקה 1:

בודקים האם מה שהתקבל, באמת מאפיין תכונה של חלקיקים: לוקחים מכשיר S.G מכון על ציר z כך שהאלומה שעוברת דרכו מתפצלת בכיוון ציר z לשלילי ולחיובי.



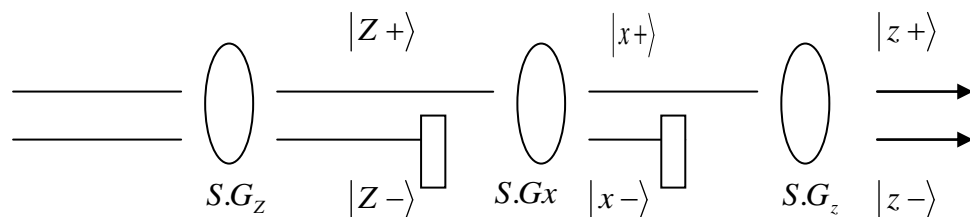
חוסמים את האלקטרונים במצב השלילי ובודקים רק את אלו שבמצב החיובי.

מעבירים אותם במערכת זהה נוספת ואם הם נשארים חיוביים סימן שתמיד הם חיוביים והתכונה חוזרת על עצמה. (כלומר זוהי תכונה של אלקטרון ולא כתוצאה מהסביבה או המכשיר)



ניסוי בדיקה 2 :

מעבירים אלומה של אלקטרונים דרך 3 מתקנים של S.G. הראשון על ציר z, השני על ציר x, והשלישי שוב על ציר z. בצורה הבאה :



מה שהתקבל הוא שאחרי ציר x האלומה התפצלה לשניים 50% לכל צד של הציר, וכשחזרנו ומדדנו על ציר z שוב התפצלה האלומה – כאילו נשכח המידע הקודם – שהאלומה הופרדה כבר לפי z במכשיר הראשון.

כלומר על פי תורת הקוונטים לא ניתן לקבל מידע על ולמדוד שני רכיבים בו זמנית. אבל איינשטיין לא הסכים לזה, וטען רק שניסויים מראים שלא ניתן למדוד באופן ישיר שני רכיבים אבל אולי ניתן לקבל מידע על שני רכיבים באופן עקיף.

1.5 פרדוקס EPR (איינשטיין, פודולסקי, רוזן) ואי שוויון בל

איינשטיין פודולסקי ורוזן טענו כי ניתן לקבל מידע על שני רכיבים בו זמנית בצורה עקיפה.

$$\tau = 2|\mathbf{F}| \frac{a}{2} \sin \vartheta = IBba \sin \vartheta = IBA \sin \vartheta = \mu B \sin \vartheta \quad \text{ז. א. שני רכיבים כאלו קיימים.}$$

כיצד?

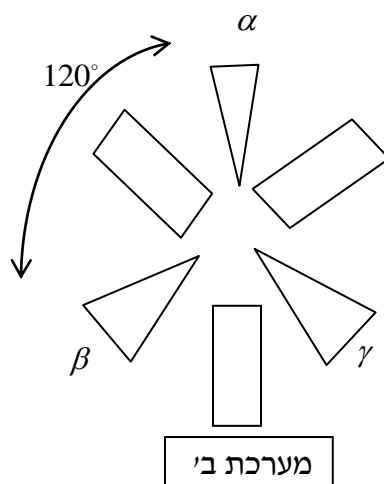
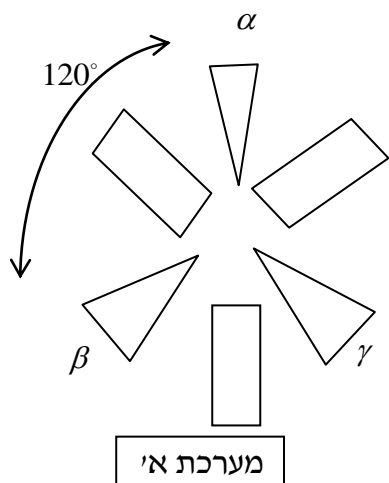
לעיתים חלקיקים יוצרים מערכות סגורות לדוגמה שני אלקטרונים. ישנו מקרה שבו המומנטים המגנטיים שלהם הפוכים ואז הם יוצרים זוג שסה"כ המומנט המגנטי במערכת שווה 0 (singlet).

לוקחים את המקרה הנ"ל ומכניסים אותו לשדה מגנטי חזק מאוד שמפצל אותם בלי לפגוע במומנט המגנטי הקודם שלהם. את שני האלקטרונים הנ"ל מעבירים כל אחד בנפרד דרך מכשיר $S.G_z$ ורואים שהם מתנהגים הפוך האחד מן השני (אם רכיב z של אחד למעלה, רכיב z של השני למטה וכו'). ולכן ניתן למדוד בכל אחד מהם רכיב אחד ולהשיק מהתוצאה לחלקיק השני וכך בעצם הרווחנו מידע על שני רכיבים בו זמנית. לדוג':
לחלקיק 1 נמדוד רכיב x ונלמד ממנו על רכיב x של חלקיק 2.
לחלקיק 2 נמדוד רכיב z ונלמד ממנו על רכיב z של חלקיק 1.

לכן טען איינשטיין כי הטענה שלא ניתן לקבל מידע על שני רכיבים בו זמנית מוטעית. (יותר מאוחר זה הסתבר כלא נכון).

לוקחים שלושה מכשירים של $S.G$ בהפרשי זווית של 120 מעלות, וכל פעם מפעילים רק זוג אחד באופן אקראי. במרחק מספיק כדי שלא תהיה השפעה, מניחים מערכת נוספת, זהה.

מקרינים אלומה של זוגות singlets שהופרדו, וכל חלקיק נכנס למערכת אחרת. נניח חלקיק 1 עובר דרך מערכת א' וחלקיק 2 דרך מערכת ב'



המערכת נראית כך :

בכל פעם בכל מערכת יימדד רכיב יחיד של החלקיק מה singlet באחת משלושת המדידות α , β או γ .

אם במערכת א' מודדים רכיב של α עבור חלקיק 1 מהsinglet, אזי במערכת ב' מודדים רכיב של β או γ של חלקיק 2 מהsinglet.

במידה ונמדוד רכיב α של חלקיק 1 במערכת א' ובמידת התוצאה תהיה $\alpha +$ ו במערכת ב' נמדוד רכיב β של בן זוג מה singlet ונקבל תוצאה של $\beta -$. מזה נוכל להסיק מסקנה ששני רכיבים של חלקיק 1 הם $\alpha +$ ו $\beta +$. במקרה זה נאמר שבניסוי יתקבל "ניגוד תוצאה" - כלומר תוצאה חיובית במערכת א' ושלילית במערכת ב'. עבור חלקיק 1 זה אומר שלשני רכיבים יש סימן זהה. חוזרים על ניסוי מספר רב של פעמים עם הסתברות שווה עבור כל רכיב בכל מערכת. בודקים הסתברות "ניגוד תוצאה":

יכולים להיות 6 סוגי ניסויים שונים על ידי בחירת רכיב מסוים בכל אחת מהמערכות. 6 סוגים הם:

1. (α, β) , 2. (α, γ) , 3. (β, α) , 4. (β, γ) , 5. (γ, α) , 6. (γ, β)

אנו חוזרים על כל סוג ניסוי באופן אקראי עם הסתברות שווה:

α	β	γ	הסתברות
+	+	+	1
+	+	-	1/3
+	-	+	1/3
+	-	-	1/3
-	+	+	1/3
-	+	-	1/3
-	-	+	1/3
-	-	-	1

בנה טבלה שבעזרתה נוכל להעריך הסתברות ל"ניגוד תוצאה". בטבלה זו מתוארים כל אפשרויות ל-3 רכיבים אפשריים של מומנט המגנטי של חלקיק הראשון. עבור כל אפשרות חישבנו הסתברות מותנית ל"ניגוד תוצאה".

נסביר למשל את השורה 2 של הטבלה: שורה זאת מתאימה למקרה כאשר לחלקיק 1

הרכיב α הוא $\alpha +$,

הרכיב β הוא $\beta >$

והרכיב γ הוא $\gamma >$.

בניסוי מסוג 1 נקבל תוצאה + במערכת א' המתאימה למצב $\alpha >$ של חלקיק ראשון ותוצאה במערכת ב' תהיה – המתאימה ל $\beta >$ עבור חלקיק 2 שזה שקול ל $\beta >$ עבור חלקיק 1. אנו נאמר שבמקרה זה יתקבל "ניגוד תוצאה". גם בניסוי מסוג 3 יתקבל "ניגוד תוצאה". בשאר 4 הניסויים לא תתקבל "ניגוד תוצאה". היות והפעלנו כל סוג של ניסוי עם הסתברות $1/6$, לכן ההסתברות ל"ניגוד תוצאה" יהיה 2 מתוך 6 ששווה $1/3$.

מטבלה רואים שההסתברות מותנית ל"ניגוד תוצאה" גדולה או שווה ל $1/3$ בכל אחד מהמקרים (שורות בטבלה). לפי ההנחה של איינשטיין (EPR) נוכל לדעת 2 רכיבים עבור כל חלקיק, כיוון שהזוג היה singlet. לכן לפי הנחה זו ההסתברות ל"ניגוד תוצאה" גדולה או שווה ל $1/3$.

ביצעו ניסוי זה בפועל ויצא שההסתברות לניגוד תוצאה היא: $1/4$. והרי $1/3 > 1/4$. כלומר השיקול שעליו הסתמך איינשטיין לא נכון, אם אחד היה מעיד על השני היינו צריכים לקבל תוצאה גדולה משליש.

מסקנה : תורת הקוונטים צודקת, לא קיימים שני רכיבים של מומנט מגנטי של חלקיק בו זמנית.

פרק 2: ביסוס מודל הקוונטי

בפרק זה אנו נבסס את המודל עבור מכאניקה קוונטית. אנו נתחיל מקיטוב האור שמהווה מצד אחד מודל קלאסי עבור אלומה קוהרנטית של אור ומצד שני מהווה מודל למצב פנימי של כל פוטון באלומה. דוגמה זו מספקת הסבר לשימוש במספרים מרוכבים במודל הקוונטי.

2.1 קיטוב האור

האור הוא גל אלקטרומגנטי אבל כיוון שהשדה המגנטי והחשמלי מאונכים אחד לשני מספיק לתאר את מצב השדה החשמלי וממנו להסיק למצב השדה המגנטי.

אור העובר דרך גביש מקבל קיטוב.

יש גבישים בעלי ציר קיטוב המאפשרים מעבר רק של רכיבי האור שהשדה החשמלי שלהם מתנוודד בכיוון ציר הקיטוב.

הגל מתקדם בכיוון y ויש לו שני רכיבים על ציר x ועל ציר z .

$$E_x = A_x \cos(\omega t - ky + \delta_x) \quad \text{רכיב X של שדה חשמלי}$$

$$E_z = A_z \cos(\omega t - ky + \delta_z) \quad \text{רכיב Z של שדה חשמלי}$$

$$\varphi_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{המצב לאחר העברת גביש מקטב בכיוון X}$$

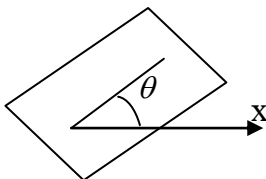
$$\varphi_x : A_z = 0$$

$$\varphi_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{המצב לאחר העברת גביש מקטב בכיוון Z}$$

$$\varphi_z : A_x = 0$$

$$\varphi_\theta = \cos \theta \varphi_x + \sin \theta \varphi_z \quad \text{אם יש גביש מקטב בכיוון } \theta \text{ כלשהיא עם ציר X:}$$

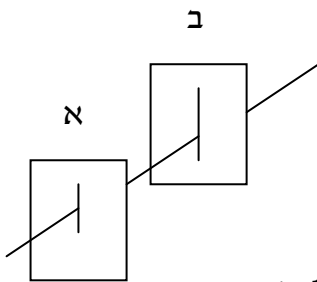
(כך שאם $\theta = 0$ נקבל φ_x וכו')



במקרים הנ"ל הקיטוב נקרא קיטוב מישורי והוא נכון כל זמן ש δ_x ו- δ_z שווים.
 זאת אומרת שאין הפרש פאזה בין E_x ו- E_z .

φ_x ו- φ_z נקראים מצבים בסיסיים, כמו וקטורי הבסיס לתיאור מצב של קיטוב.

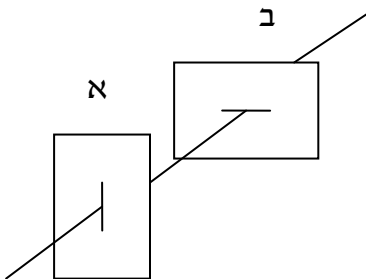
- השוני בעוצמות והסתברות המעבר מקיטוב לקיטוב אנלוגיות זו לזו. כאשר מדברים על אלומה מדברים על ירידה בעוצמה במעבר בין מקטב למקטב, בעוד שכאשר מדברים על פוטון בודד מדברים על הסתברות מעבר בין מקטב למקטב.
- לפי חוק מלוס הסתברות המעבר של פוטון בודד מקוטב דרך מקטב שנימצא בזווית כלשהי לכיוון קיטוב הפוטון שווה לריבוע הערך המוחלט של המכפלה הסקלרית שלהם (המצב שלפני המקטב למצב אחרי המקטב).



▪ מקרה ראשון:

נעביר את האור דרך:

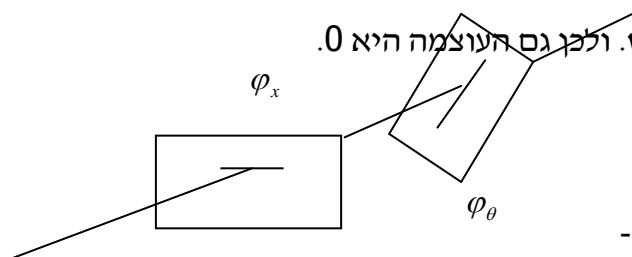
=> העוצמה לפני ואחרי ב' שווה. (כיוון שההסתברות היא 100%)



▪ מקרה שני:

נעביר את האור דרך:

=> במצב זה ההסתברות לעבור את ב' היא אפס. ולכן גם העוצמה היא 0.



▪ מקרה שלישי:

נעביר את האור דרך :

הסתברות המעבר לפוטון (בין 2 מקטבים), וכן מצב העוצמה מ φ_x ל- φ_θ \Leftarrow

$$\cos^2 \theta \quad \text{שווה לפי חוק מלוס}$$

נתאר את המקרים בצורה וקטורית :

$$\varphi_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \varphi_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$$
$$|\langle \varphi_\theta | \varphi_x \rangle|^2 = \cos^2 \theta, \quad |\langle \varphi_\theta | \varphi_z \rangle|^2 = \sin^2 \theta$$

ניתן לראות שהסכום של שניהם נותן 1.

מקטב מישורי

יוצרים מערך של רשת מוליכים בכיוון אחד. לוקחים פלסטיק ומותחים אותו, בגלל שהמולקולות ארוכות הן מתיישבות לפי המתיחה. אח"כ טובלים בחומר מוליך שממלא את החורים- הקווים.

כאשר אור פוגע : אם כיוון התנודות של הגל הוא בכיוון המוליך (\uparrow) הוא מזיז אלקטרונים נתקע ברשת ולא עובר. (זרם מלמעלה וזרם מלמטה שנגרמו עקב פגיעת פוטונים יתאפסו והאור יבלע) אם כיוון התנודות הוא אנכי למוליך (\rightarrow) האור עובר. (שכן אלקטרונים שיצאו מפגיעת הפוטון לא יכולים לנוע בכיוון פגיעת האור כיוון שבין מוליך למוליך יש מבודד) ולכן הציר האופטי של המקטב הוא : \Rightarrow כי הוא מעביר אור רק בכיוון זה. כך שלמעשה תמיד יעבור רכיב אחד שכן השני מאונך לו.

קיטוב מעגלי

גל אור מתקדם בכיוון y ויש לו שני רכיבים בכיוון מאונך לכיוון ההתקדמות :

$$E_x = A_x \cos(\omega t - ky + \delta_x)$$
$$E_z = A_z \cos(\omega t - ky + \delta_z)$$

* כאשר $\delta_x = \delta_z$ מדובר בקיטוב מישורי (ועל כך דיברנו קודם).

* כאשר $A_x = A_z$ ו $\delta_x = \delta_z + \frac{\pi}{2}$ מדובר בקיטוב מעגלי ימני .

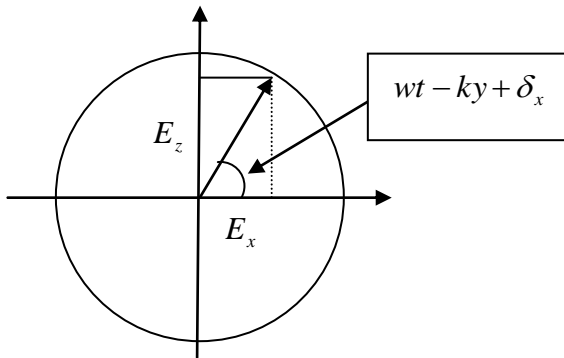
* כאשר $A_x = A_z$ ו $\delta_x = \delta_z - \frac{\pi}{2}$ מדובר בקיטוב מעגלי שמאלי.

$$E_z = A_x \cos\left(wt - ky + \delta_x - \frac{\pi}{2}\right) = A_x \sin(wt - ky + \delta_x)$$

$$E_x^2 + E_z^2 = A_x^2$$

משוואת המעגל :

ומכאן שרדיוס המעגל : A_x



אחרי שהאור עובר במקטב זה, השדה שלו מסתובב באופן מעגלי. כלומר ההתקדמות על ציר y היא בצורה בורגית – קדימה בתנועה מעגלית.

כיצד בנויה המערכת?

המערכת בנויה ממקטב מישורי בזווית 45° עם ציר x , כדי לפצל את עוצמת האור ל 50% בכיוון אחד ול 50% בכיוון שני, $\cos^2 45^\circ = 1/2$, כך שתהיה אותה אמפליטודה ונקבל מעגל ולא אליפסה.

הגביש (שאחרי המקטב המישורי) משנה פאזה בכיוון ציר x ברבע אורך גל זאת אומרת אור בעל שדה בכיוון x שעובר דרך הגביש יוצא עם פאזה מוזזת ברבע אורך גל.

במשך הזמן וקטור השדה החשמלי משנה כיוון בגלל שהגודל היחיד שאינו קבוע הוא wt (הולך וגדל), כך שקצה הווקטור מצייר במישור xz מעגל.

כל הפוטונים שמסתובבים בכיוון אחד אחרי המקטב יכולים לשובב דף קל, שכן הם מעבירים לדף תנע סיבובי.

[כאשר יש הפרשי פאזה הכי טוב לתאר במספרים מרוכבים. (הזזה ב- 90 מעלות זה כמו להכפיל ב- i)

זה מסביר למה הקוונטים משתמשים במספרים מרוכבים – וזהו למעשה קיטוב מעגלי] לפוטון מספר תכונות : כיוון התקדמות, אורך גל, קיטוב וכו'

תאור קיטוב הפוטון נעשה על ידי וקטור ג'ינס.

וקטור ג'ינס

$$J = \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix}$$

וקטור ג'ינס מתאר כיוון אמפליטודה של חלקיק והפרש פאזה.

את הווקטור הנ"ל מנרמלים כי אין משמעות לגודל של אמפליטודה כי זה פוטון בודד

ואמפליטודה זה מספר פוטונים. מניחים ש- $A_x^2 + A_z^2 = 1$

אם נכפיל את הווקטור הזה בפאזה קבלנו תאור של מצב מקורי בדיוק.

כיוון שהפרש הפאזה נשמר (הזזה תלויה בראשית הצירים בלבד ואיננה תכונה של הפוטון)

גם הכפלה בקבוע לא משנה מצב.

$$e^{i\varphi} \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x e^{i(\delta_x+\varphi)} \\ A_z e^{i(\delta_z+\varphi)} \end{pmatrix}$$

▪ מצב קיטוב ימני :

$A_x = A_z$ והרי גם : $A_x^2 + A_z^2 = 1 \Leftrightarrow A_x = A_z = \frac{1}{\sqrt{2}}$ נקבל :

$$|R\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix}$$

כלל : $e^{i\frac{\pi}{2}} = i$

והרי גם מותר להכפיל בקבוע i לכן נקבל מצבים זהים פיזיקאלית :

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \cong \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix}$$

▪ מצב קיטוב שמאלי :

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

▪ קיטוב מישורי :

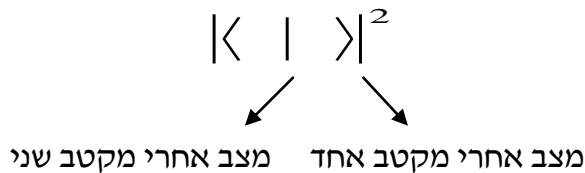
קיטוב מישורי בכיוון X- $|\varphi_x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

קיטוב מישורי בכיוון Z- $|\varphi_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

קיטוב מישורי בכיוון זווית θ עם ציר X- $|\varphi_\theta\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$

חוק מלוס

אם זווית θ בין שני מקטבים אזי העוצמה יורדת פי $\cos^2 \theta$ (מכפלה סקאלרית בין שני כיוונים בריבוע).
זוהי הסתברות מעבר עבור פוטון בודד.



הגדרה של מכפלה פנימית:

עבור הוקטורים $(v_1, v_2), (w_1, w_2)$ המכפלה הפנימית -

$$\langle (v_1, v_2) | (w_1, w_2) \rangle = v_1^* w_1 + v_2^* w_2$$

כאשר v_j^* מסמן מספר צמוד מרוכב $(x + iy)^* = x - iy$ של כל ערך v_j בווקטור.

תרגילים:

1) מה ההסתברות לקבל ממצב φ_x את מצב $|R\rangle$?

$$|\langle R | \varphi_x \rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} i \cdot 0 \right|^2 = \frac{1}{2}$$

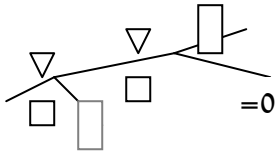
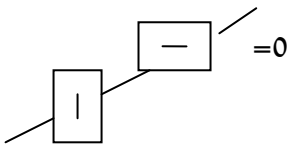
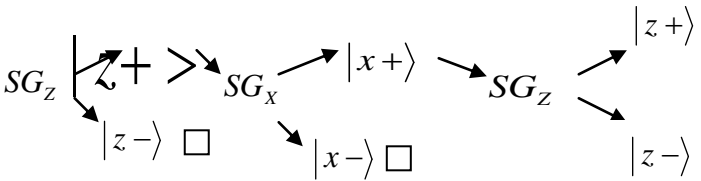
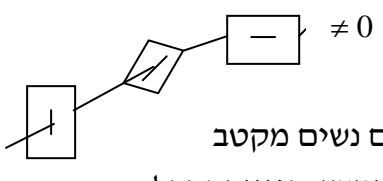
מה ההסתברות לקבל ממצב $|R\rangle$ את מצב $|L\rangle$?

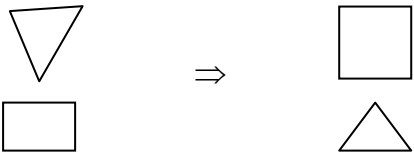
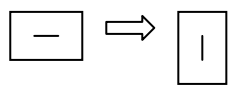
$$|\langle L | R \rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \middle| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} i \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot i \right|^2 = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)^2 = 0$$

נסכם סעיף זה ע"י תיאור ההקבלה בין תיאור של קיטוב פוטון ומומנט המגנטי של אלקטרון. מהקבלה זו אנו יכולים ללמוד מתיאור אחד על משנהו. למשל, נוכל להבין למה

$$\text{בניסוי EPR מסעיף 1.5 קיבלנו את הסתברות } \frac{1}{4}.$$

הקבלה בין קיטוב פוטון למומנט מגנטי של אלקטרון.

מומנט מגנטי	קיטוב	
תכונה מרחבית פנימית של חלקיק	תכונה מרחבית פנימית של חלקיק	
מכשיר S.G שטרן גרלך	מקטב	מכשיר המדידה
$ z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\varphi_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \varphi_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	בסיס של המרחב מצבים
		שימור התכונה
עבור סיבוב מכשיר SG ב $2\theta = 90^\circ$ $ x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ עבור סיבוב מכשיר SG ב $2\theta = -90^\circ$ $ x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$	עבור זווית קיטוב $\theta = 45^\circ$ $\begin{pmatrix} \cos 45^\circ \\ \sin 45^\circ \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = x+\rangle$ עבור זווית $\theta = -45^\circ$ $\begin{pmatrix} \cos(-45^\circ) \\ \sin(-45^\circ) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow x-\rangle$	וקטורים $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
	 אם נשים מקטב באמצע, בזווית נקבל אור.	"אי שימור" התכונה

<p>תיאור של רכיב y: $y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ היחיד שנותן הסתברות</p>	<p>מצבי קיטוב מעגלי (כיוון שיש הזזה בפאזה) $L\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, R\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$</p>	<p>צורך במספרים מרוכבים.</p>
<p>כדי לקבל ניגוד צריך לסובב ב- $2\theta = 180^\circ$ מעלות: $Z+\rangle \Rightarrow Z-\rangle \Rightarrow 180^\circ$</p> 	<p>כדי לקבל ניגוד צריך לסובב ב- $\theta = 90^\circ$ מעלות: </p>	<p>הבדל: הסתברות מעבר שווה 0</p>
<p>EPR : $2\theta = 120^\circ \leftarrow$ הסתברות $\frac{1}{4}$</p>	<p>$\cos^2 60 = \frac{1}{4} \leftarrow \theta = 60^\circ$</p>	<p>דוגמא</p>

2.2 הנחות יסוד (אקסיומות) של תורת הקוונטים

2.2.1 מרחב המצבים

ההגדרה של מצב מערכת צריכה להיות דומה בקלאסי ובקוונטי, אבל תיאור המערכת שונה.

במקרה הקלאסי:

לכל מערכת יש מספר פרמטרים מינימאלי שמתארים את מצב המערכת שניתן לראות ולמדוד בזמן מסוים, המספיקים כדי לנבא את העתיד, בעזרת חוקים. כמות הפרמטרים מגדירה את דרגת החופש של המערכת.

דוגמאות:

* אם רוצים לתאר תנועת כדור קטן במרחב, צריך לדעת את מקומו ומהירותו.

דרגת חופש: 6. $(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$

ניתן להוסיף אנרגיה כפרמטר – אבל אין בזה צורך כדי לנבא הלאה. משתמשים במספר הפרמטרים המינימאלי.

* תנועה על מוט (x, \dot{x}) דרגת חופש: 2.

* תנועה של מוט במרחב: $(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, \varphi, \dot{\varphi}, \theta, \dot{\theta})$, כאשר 6 השמאליות מתארות את מרכז הכובד, ו-4 הימניות אלו קואורדינאטות כדוריות לתנועה סיבובית במרחב. ישנה דרך אחרת להגדיר: לפי 2 קצוות אבל לפי אילוץ של אורך החוט.

במקרה הקוונטי:

הנחת יסוד ראשונה:

במכניקה הקוונטית מצב מערכת מתואר על ידי וקטור-מצב, המקרא וקטור Ket, במרחב וקטורי מעל מספרים מרוכבים בעל מכפלה פנימית. כאשר וקטור-מצב $|\psi\rangle$ ווקטור $k|\psi\rangle$ (k מספר מרוכב או ממשי) מתארים אותו מצב. ז.א. הכפלה בקבוע ממשי או מרוכב לא משנה את המצב המערכת.

אם מערכת הייתה במצב המתואר על ידי וקטור-מצב $|\psi\rangle$ אזי ההסתברות למצוא אותה

$$\frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{|\varphi|^2 \cdot |\psi|^2}$$

במצב כלשהוא אחר $|\varphi\rangle$, תהיה שווה ל-1.

דוגמאות למרחבי מצבים במערכת קוונטית:

דוגמא 1: מצב קיטוב פוטון:

פוטון מתקדם בכיוון y . ואורך הגל שלו קבוע.

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix} : \text{קייטוב פוטון מתואר על ידי וקטור גוניס (*לא מנורמל):}$$

אנו מתארים את מצב הקייטוב על ידי זוג מספרים מרוכבים $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ השייכים למרחב C^2 -מרחב של זוגות מספרים מרוכבים, שהוא מרחב ליניארי מעל מספרים מרוכבים. מכפלה פנימית מוגדרת ע"י

$$\left\langle \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \right\rangle = c_1^* d_1 + c_2^* d_2$$

כאשר c_1^* מסמל את הצמוד המרוכב של המספר המרוכב c_1 .

• הכפלה בקבוע ממשי k :
העוצמה של האלומה גדלה, אך המצב של חלקיק בודד לא ישתנה.

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} kc_1 \\ kc_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} kA_x e^{i\delta_x} \\ kA_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix}$$

• הכפלה במספר מרוכב $k = e^{i\theta}$ באורך של 1:
מתארת הזזה של הראשית בכיוון ההתקדמות. זה לא משפיע על מצב הקייטוב של הפוטון.

$$e^{i\theta} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x e^{i(\delta_x + \theta)} \\ A_z e^{i(\delta_z + \theta)} \end{pmatrix}$$

• עבור קייטוב מישורי: $\delta_x = \delta_z$ לפי חוק מלוס
הסתברות המעבר בין מקטובים בכיוונים שונים כאשר θ היא הזווית בין המקטובים שווה לזווית בין וקטור-מצב אחרי מקטב ראשון $|\psi\rangle$ ווקטור-מצב של פוטון אחרי מקטב שני- $|\varphi\rangle$ לפי חוק מלוס תהיה:

$$\frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{|\varphi|^2 |\psi|^2} = \frac{(|\varphi| |\psi| \cos \theta)^2}{|\varphi|^2 |\psi|^2} = \cos^2 \theta$$

הסתברות זו שווה להסתברות מעבר לפי הנחת היסוד הראשונה.

דוגמא 2: מצב של מומנט מגנטי של אלקטרון:

$|z-\rangle, |z+\rangle$ מצבים בסיסיים. וכל מצב אחר $|\varphi\rangle$ הוא צרוף שלהם.

$$|\varphi\rangle = c_1|z+\rangle + c_2|z-\rangle \quad |\psi\rangle = c_1|z+\rangle + c_2|z-\rangle$$

כדי להגדיר מצב $|y+\rangle$ צריך להרשות ש c_1, c_2 יהיו גם מספרים מרוכבים.

אם כך, גם פה יש מרחב ליניארי של מספרים מרוכבים.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &\leftarrow |z+\rangle, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \leftarrow |z-\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} &\leftarrow |x+\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \leftarrow |y+\rangle \end{aligned}$$

הכפלה בקבוע ובפאזה לא משנה מצב, ומתקיימת מכפלה פנימית. כמו עבור קיטוב. המצב

$|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ שקול ל- $\begin{pmatrix} 5 \\ 0 \end{pmatrix}$. לגבי חלקיק בודד הכפלה בקבוע לא משנה. אם מכפילים

בפאזה (מספר מרוכב) למשל $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ שקול ל- $\begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix}$ כלומר נקבל הסתברות זהה, שכן הפרשי

הפאזה קבועים גם לאחר הכפלה בקבוע.

לדוגמה נחשב הסתברות מעבר ממצב התחלתי $|y+\rangle$ למצב $|y-\rangle$. נזכיר שבמכפלה

פנימית צריך לעשות הצמדה על האבר השמאלי. נבדוק נרמול:

$$||y+\rangle|^2 = \langle y+|y+\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{2}(1 \cdot 1 + (-i) \cdot (i)) = \frac{2}{2} = 1$$

דומה

$||y-\rangle| = 1$. לכן הסתברות מעבר היא:

$$|\langle y-|y+\rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2}(1 \cdot 1 + i \cdot i) = 0$$

כמו שהיה צריך להיות, הסתברות מעבר מ- $|y+\rangle$ ל- $|y-\rangle$ היא 0.

דוגמא 3: מצב מיקום של חלקיק- פונקצית גל, ומצב של תנע. – בהמשך...

2.2.2 משתנים דינמיים - גדלים ניתנים לצפייה (מדידה)

גדלים פיזיקליים שניתן למדוד ביחס למערכת.

הבדלים :

א. במכניקה הקלאסית גודל פיזיקאלי יכול לקבל כל ערך בקבוצה רציפה, מכניקה הקוונטית גדלים פיזיקאליים מקבלים גם ערכים בדידים, דיסקרטיים.

ב. במכניקה הקלאסית ניתן למדוד כל דבר מבלי לשנות את מצב המערכת (או לפחות לגרום שההשפעה תהיה זניחה). במכניקה הקוונטית מצב המערכת משתנה במדידה.

אנו רוצים לבנות גודל מתמטי שיתאים לגודל פיזיקלי שייצג את השוני הנ"ל.

A מסמל גודל פיזיקלי

(המסקנה סופית שאליה חותרים : גודל פיזיקלי צריך לתאר על ידי אופרטור צמוד לעצמו מעל מרחב המצבים)

• נסמן את אוסף הערכים ש-A מקבל : $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ שיכול להיות סופי או אינסופי.

דוגמא : S_z -רכיב של מומנט מגנטי של אלקטרון, המקבל 2 ערכים : $\alpha_1 = \frac{\mu}{2}, \alpha_2 = -\frac{\mu}{2}$

• תהליך המדידה בנוי מפילטרים שבוחרים חלקיקים במצבים שמתאימים לערכים מסוימים של A.

P_1 פילטר שבוחר חלקיקים שיקבלו בוודאות ערך α_1 במדידה של A .

P_2 פילטר שבוחר חלקיקים שיקבלו בוודאות ערך α_2 במדידה של A וכו'...

זאת אומרת עבור כל ערך של A , α_j , יהיה מתאים פילטר P_j .

תכונות הפילטרים :

* כל פילטר הוא העתקה המעתיקה מצבים שנכנסים לפילטר למצבים היוצאים.

המצבים היוצאים הם בעלי תכונה מסוימת. אחרי הפעלת פילטר P_j לחלקיקים יש ערך

α_j לכן הפעלה שנייה של הפילטר לא תשפיע עליהם.

$$\Rightarrow P_j^2 = P_j$$

P_j -הטלה ממרחב המצבים על מצבים בעלי ערך α_j . אופרטור שהריבוע שלו שווה לעצמו

נקרא הטלה.

*נניח P_{j_1}, P_{j_2} שני פילטרים שמתאימים לערכים שונים $j_1 \neq j_2$. נעביר את כל החלקיקים דרך P_{j_1} ולכולם תהיה תכונה α_{j_1} ולכן הפלטר P_{j_2} , יחסום את כל החלקיקים $\Rightarrow P_{j_2} \cdot P_{j_1} = 0$

P_j -היטלים על תתי מרחבים אורתוגונאליים.

A – גודל פיזיקלי שאותו מודדים. \hat{A} – אופרטור שמתאים לגודל פיזיקלי סכום פורמלי.

$$\Rightarrow \hat{A} = \sum \alpha_j P_j$$

α_j – ערכים שמתאימים לגודל פיזיקלי A , P_j – היטל המתאים לערך α_j .

הנחת יסוד שנייה:

בתיאורית הקוונטים לכל גודל פיזיקלי מתאים אופרטור צמוד לעצמו (הפועל על מרחב המצבים), כאשר:

- (1) הערכים העצמיים של אופרטור הם הערכים שהגודל הפיזיקאלי יכול לקבל.
- (2) הוקטורים העצמיים של אופרטור המתאימים לערך עצמי α מתארים מצבים בהם הערך α מתקבל בוודאות במדידה של הגודל הפיזיקאלי.
- (3) נסמן ב- P היטל על הוקטורים העצמיים המתאימים לערך α . אם המערכת לפני המדידה היתה במצב ψ ואם במדידה הקבל הערך α , אזי המצב אחרי המדידה יהיה

$$P\psi \text{ וההסתברות שבמדידה נקבל הערך } \alpha \text{ היא } \frac{|P\psi|^2}{|\psi|^2}.$$

\hat{A} צמוד לעצמו אם מתקיים $\langle A\bar{u} | \bar{v} \rangle = \langle \bar{u} | A\bar{v} \rangle$ עבור \bar{u}, \bar{v} וקטורים כלשהם. על הבסיס של הוקטורים העצמיים האופרטור פועל כמו הכפלה בקבוע ולא משנה כיוון.

2.3 אופרטור המיצג מומנט מגנטי של אלקטרון

2.3.1 אופרטור המיצג רכיב z של מומנט מגנטי של אלקטרון

בסעיף זה אנו נדגים את הנחות היסוד של תורת הקוונטים עבור מומנט מגנטי של האלקטרון. ראשית, אנו נמצא את האופרטור המתאר את רכיב z של המומנט המגנטי (גודל פיזיקאלי) של האלקטרון. נסמן ע"י S_z את רכיב z של המומנט המגנטי.

$$\alpha_1 = \frac{\mu}{2}, \alpha_2 = -\frac{\mu}{2} \quad \text{הערכים ש-} S_z \text{ מקבל:}$$

אם נבחר בסיס $|z+\rangle, |z-\rangle$, המצב של מומנט מגנטי של אלקטרון מתואר על ידי

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \text{כאשר } c_1, c_2 \text{ מספרים מרוכבים ו-} \vec{c} = c_1|z+\rangle + c_2|z-\rangle$$

$$\text{למשל: } |z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

היטל המתאים ל $\alpha_1 = \frac{\mu}{2}$, זהו היטל על מצב $|z+\rangle$ שבו מתקבל הערך $\frac{\mu}{2}$ בוודאות:

$$P_{|z+\rangle} \vec{c} = \frac{\langle z+|\vec{c}\rangle}{\langle z+|z+\rangle} |z+\rangle = \langle z+|\vec{c}\rangle |z+\rangle = |z+\rangle \langle z+|\vec{c}\rangle$$

אם יש לנו וקטור $\vec{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$ נסמן וקטור צמוד $\vec{d}^* = (d_1^* \quad d_2^*)$ ו.א.הופכים עמודות

לשורות ולוקחים מספר צמוד של כל ערך בווקטור. לפי הגדרה של מכפלה פנימית:

$$\vec{d}^* \cdot \vec{c} = (d_1^*, d_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = d_1^* \cdot c_1 + d_2^* \cdot c_2 = \langle \vec{d} | \vec{c} \rangle$$

בגלל קשר זה וקטור הצמוד נקרא וקטור Bra ומסומן: $\vec{d}^* = \langle \vec{d} |$

ניתן לכתוב את ההיטל כ $\vec{c} \cdot (\vec{z} +)^* = (\vec{z} +) \cdot \vec{c}$ וזו אפשר לכתוב את אופרטור ההיטל

כ:

$$P_{|z+\rangle} = |z+\rangle \langle z+| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (1 \quad 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

היטל המתאים ל $\alpha_2 = -\frac{\mu}{2}$ על מצב $|z-\rangle$

$$P_{|z-\rangle} = |z-\rangle \langle z-| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \quad 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

לסיכום: אופרטור המיצג את לגודל פיזיקלי \hat{S}_z שווה:

$$\hat{S}_z = \frac{\mu}{2} P_{|z+\rangle} + \left(-\frac{\mu}{2}\right) P_{|z-\rangle} = \begin{pmatrix} \frac{\mu}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mu}{2} \end{pmatrix} = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2$$

אופרטור לינארי

המתאים לגודל פיזיקלי \hat{S}_z

נבדוק שהאופרטור \hat{S}_z מקיים את הנחת היסוד השנייה:

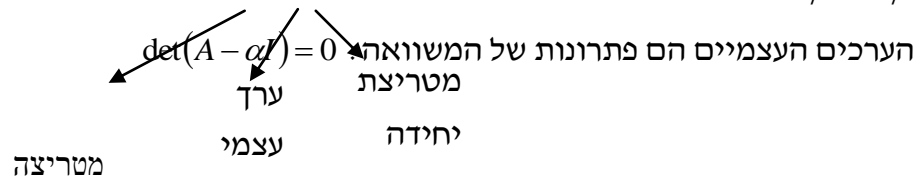
$$\langle \hat{S}_z \vec{u} | \vec{v} \rangle = \langle \vec{u} | \hat{S}_z \vec{v} \rangle \quad \text{*נבדוק שאופרטור זה צמוד לעצמו:}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \right\rangle &= \frac{\mu}{2} \left\langle \begin{pmatrix} u_1 \\ -u_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{2} (u_1^* v_1 - u_2^* v_2) \\ \left\langle \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \middle| \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \right\rangle &= \frac{\mu}{2} \left\langle \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} v_1 \\ -v_2 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{2} (u_1^* v_1 - u_2^* v_2) \end{aligned}$$

*נבדוק ש $\frac{\mu}{2}$ ו- $-\frac{\mu}{2}$ הם הערכים העצמיים של \hat{S}_z :

נזכיר שמספר α הוא ערך עצמי של אופרטור A אם שיש פתרון $\psi \neq 0$ למשוואה

$$A\psi = \alpha\psi$$



עבור אופרטור \hat{S}_z זה אומר

$$(1) \det \begin{pmatrix} \frac{\mu}{2} - \alpha & 0 \\ 0 & -\frac{\mu}{2} - \alpha \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\mu}{2} - \alpha \right) \left(-\frac{\mu}{2} - \alpha \right) = 0 \Rightarrow \alpha^2 - \left(\frac{\mu}{2} \right)^2 = 0$$

$$\Rightarrow \alpha_1 = \frac{\mu}{2}, \alpha_2 = -\frac{\mu}{2}$$

אלו הערכים העצמיים של \hat{S}_z לפי תכונה ראשונה של הנחת יסוד השנייה.

נראה שווקטור עצמי המתאים ל $\alpha_1 = \frac{\mu}{2}$ שקול למצב $|z+\rangle$ והמתאים ל $\alpha_2 = -\frac{\mu}{2}$

שקול למצב $|z-\rangle$ כמו שצריך להיות לפי תכונה שנייה של הנחת יסוד השנייה.

וקטורים עצמיים מוצאים על ידי הצבת מצב $\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ כלשהו והערך העצמי במשוואה

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\mu}{2} - \frac{\mu}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\mu}{2} - \frac{\mu}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad . A\psi = \alpha\psi$$

$$\begin{cases} 0=0 \\ -\mu c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow c_2 = 0$$

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = c_1 |z+\rangle \quad \text{לכן}$$

מתאים ל $|z+\rangle$, כי אמרנו שהכפלה בקבוע מתארת אותו מצב פיזיקלי.

עבור α_2 נקבל:

$$\begin{pmatrix} \frac{\mu}{2} + \frac{\mu}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\mu}{2} + \frac{\mu}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\left. \begin{matrix} \mu c_1 = 0 \Rightarrow c_1 = 0 \\ 0 = 0 \end{matrix} \right\} \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_2 |z-\rangle$$

מצב מתאים ל $|z-\rangle$.

נבדוק כעת את תכונה שלישית של הנחת יסוד השנייה.

עבור $\frac{\mu}{2}$: עבור וקטור-מצב כללי $\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ נקבל

$$P_{|z+\rangle} \psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{matrix} |P_{|z+\rangle} \psi|^2 = |c_1|^2 \\ |\psi|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 \end{matrix} \right\} \quad \text{לכן, הסתברות לקבל את התוצאה } \frac{\mu}{2} \text{ על מצב } \psi \text{ שווה ל-} \quad p_1 = \frac{|c_1|^2}{|c_1|^2 + |c_2|^2} \quad - 39 -$$

זהו מספר ממשי, הערך המוחלט שלו קטן מ-1 ולפי הנחת יסוד הראשונה שווה להסתברות מעבר ממצב ψ למצב $|z+\rangle$. כמו כן ההסתברות זו שווה להסתברות לקבל ערך $\frac{\mu}{2}$ במדידה של \hat{S}_z על מצב ψ .

$$p_2 = \frac{|c_2|^2}{|c_2|^2 + |c_1|^2} - \frac{\mu}{2} \text{ על מצב } \psi \text{ שווה ל-}$$

ושווה להסתברות מעבר ממצב ψ למצב $|z-\rangle$ לפי הנחת יסוד הראשונה.

$$p_1 + p_2 = 1 \text{ ניתן לראות ש-}$$

$$S_y = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ תרגיל לבית: הראה כי}$$

2.3.2 אופרטור המיצג רכיב כלשהו של מומנט מגנטי של אלקטרון

עבור כיוון $\vec{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ כאשר $|\vec{a}| = 1$, נגדיר את האופרטור המתאר את הרכיב של מומנט מגנטי בכיוון $\vec{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ ע"י

$$\begin{aligned} \hat{S}_a &= \alpha_1 \hat{S}_x + \alpha_2 \hat{S}_y + \alpha_3 \hat{S}_z = \frac{\mu}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 \\ \alpha_1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha_2 \\ i\alpha_2 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha_3 & 0 \\ 0 & -\alpha_3 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} \alpha_3 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & -\alpha_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

אופרטור זה צמוד לעצמו כי באלכסון יש מספרים ממשיים והשיקוף ביחס לאלכסון הוא הצמוד של הצד השני.

-אנו נמצא את הערכים שמתקבלים במדידה גודל זה ותאור המצבים אחרי המדידה.

נעבור לקורדינטות כדוריות :

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \cos \varphi \sin \theta \\ \alpha_2 &= \sin \varphi \sin \theta \\ \alpha_3 &= \cos \theta\end{aligned}$$

בקוארדינטות אילו

$$\Rightarrow \hat{S}_\alpha = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) & -\cos \theta \end{pmatrix} = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

← מהם הערכים העצמיים של המטריצה זו? (באופן אינטואיטיבי: $\pm \frac{\mu}{2}$)

הערכים העצמיים מתקבלים ממשוואה: $\det(\hat{S}_\alpha - \alpha I) = 0$

$$\det \begin{pmatrix} \cos \theta - \frac{2\alpha}{\mu} & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta - \frac{2\alpha}{\mu} \end{pmatrix} = 0$$

$$-\cos^2 \theta + \frac{4\alpha^2}{\mu^2} - \sin^2 \theta = 0, \Rightarrow \frac{4\alpha^2}{\mu^2} = 1, \Rightarrow \alpha = \pm \frac{\mu}{2}$$

מכאן גם \hat{S}_α יכול לקבל שני ערכים $\pm \frac{\mu}{2}$.

נמצא כעת את המצבים המתאימים לערכים אלו. עבור הערך $\frac{\mu}{2}$

נציב $\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ במשוואה $\hat{S}_\alpha \psi = \lambda \psi$ ונקבל:

$$\begin{pmatrix} (\cos \theta - 1) & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0,$$

(i) $(\cos \theta - 1)c_1 + \sin \theta e^{-i\varphi} c_2 = 0$, (ii) $\sin \theta e^{i\varphi} c_1 - (1 + \cos \theta)c_2 = 0$

(i) $\sin \theta e^{-i\varphi} c_2 = (1 - \cos \theta)c_1$



$$2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} c_2 = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} c_1$$

נכפיל את המשוואה ב- $e^{i\frac{\varphi}{2}}$ ונקבל

$$\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} c_2 = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} c_1$$

$$c_1 = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad c_2 = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}}$$

לכן קיים פתרון

זאת אמרת, המצב המתאים לערך $\frac{\mu}{2}$ במדידה של \hat{S}_α שווה ל-

$$|\alpha+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} = 1$$

ניתן לראות שמצב זה מנורמל כי:

חישוב דומה עבור $\lambda = -\frac{\mu}{2}$ נותן:

$$|\alpha-\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \left(-\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \left(-\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

זה מסביר למה וקטור-מצב (שחשוב לחישוב הסתברות מעבר) של מומנט מגנטי בכיוונים שונים תלוי בחצי הזווית בין הכיוונים.

אפשר לקחת כל מצב $|z+\rangle$ (למשל) ולראות לפי התנאים של θ, φ שמקבלים את הווקטור המתאים.

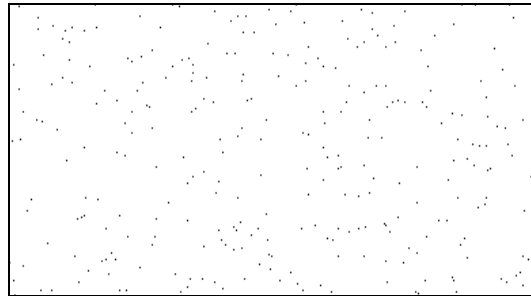
לדוגמא: עבור $|y+\rangle \Leftarrow \theta = 90^\circ, \varphi = 90^\circ$

$$\begin{pmatrix} \cos 45^\circ e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ \sin 45^\circ e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = |y+\rangle$$

2.4 ניסוי לבדיקת תכונת גליות של אלקטרון

מטרת הניסוי היא להראות כי לאלקטרונים ישנן תכונות של גל.

ראינו אלומת אלקטרונים יצרת את תמונת העקיפה בדומה לתמונה דומה עבור מאלומת אור קוהרנטית. תמונת עקיפה מתקבלת ממכשולים בסדר גודל של אורך גל של אלומה. היות ואורך גל אלקטרון קטן מאוד, לכן העוצמה של התמונה תהיה קטנה מאוד, ובלתי ניתנת לצפייה. על מנת להגביר את עוצמת התמונה, מעבירים גל הומוגני דרך משטח שיש בו מכשולים בצורה אקראית לאורך המשטח. תמונת העקיפה המתקבלת הינה תמונת עקיפה מוגברת המתאימה למכשול בודד. הסבר לכך יובא בהמשך.



משטח עם נקודות אקראיות

בוצעו שני ניסויים :

ניסוי 1

*מפזרים אבקת שרף (שכל שגרעיניה עגולים ובעלי קוטר אחיד) על זכוכית בצורה אקראית

כאשר מקרינים על המשטח אלומת לייזר קוהרנטית בעלת אורך גל קרוב לקוטר הגרגיר, רואים שמתקבלת תמונת עקיפה מחוזקת של גרעין אחד.

ניסוי 2

*מפזרים אבקת פחם (גרגיריה עגולים וקטנים מאוד) על משטח זכוכית בצורה אקראית, מקרינים על המשטח אלומת אלקטרונים ומתקבלת תמונת עקיפה מחוזקת של גרגיר יחיד

עבור גרעין יחיד:

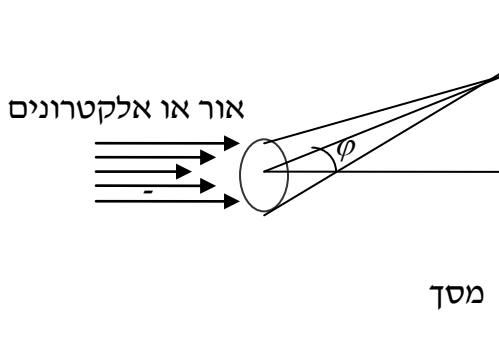
נוסחת העקיפה:

$$2d \cos \varphi = m\lambda$$

הזווית למסך עד מקסימום ראשון - φ

אורך λ

הגל-קוטר הגרעין- d



עבור כמה גרעינים:

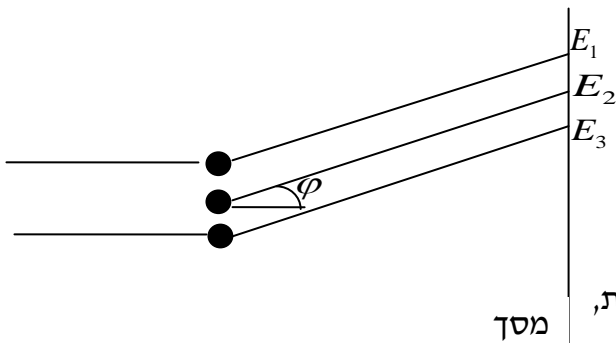
כיוון שכל הגרעינים באותו גודל והמרחק למסך גדול הרי שזווית φ קבועה.

נסמן את אמפליטודות הגלים ע"י

$$E_1 = A_1 e^{i\varphi_1}$$

$$E_2 = A_2 e^{i\varphi_2}$$

$$E_3 = A_3 e^{i\varphi_3}$$



קוטר טבעת העקיפה גדול לעומת רוחב האלומה הנכנסת,

ולכן כל הקרניים מגיעות לטבעת אחת.

העוצמות מתחברות כסכום מספרים מרוכבים. לכן עוצמת

הגל השקול של זוג קרניים שווה לפי משפט הקוסינוסים:

$$|A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}| = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 2|A_1||A_2| \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$$

כאשר פיזור הגרעינים אקראי אזי הקוסינוס בסכום על כל קרניים יתבטל.

ואז סך הכול העוצמה:

$$|\sum A_j e^{i\varphi_j}| = \sum |A_j|^2 \approx n |A_j|^2$$

מסקנה:

עקיפה על ידי גרגירים מפוזרים אקראית היא כמו עקיפה של גרגיר אחד מוגברת פי n

(ששווה למספר הגרגירים).

$$\Rightarrow d = \frac{m\lambda}{2 \cos \varphi}$$

נוכל למצוא את קוטר הגרגיר על ידי המשוואה:

בגלל ש φ קטן מאוד ניתן לומר כי $\cos \varphi \approx 1$, וכן $m=1$ (סדר ראשון).

*לדוגמא באור ירוק: $\lambda = 0.5 * 10^{-6} m$

נקבל: $d = 0.25 * 10^{-6} m$

*עבור אלקטרונים: $\lambda = 0.02 * 10^{-9} m$

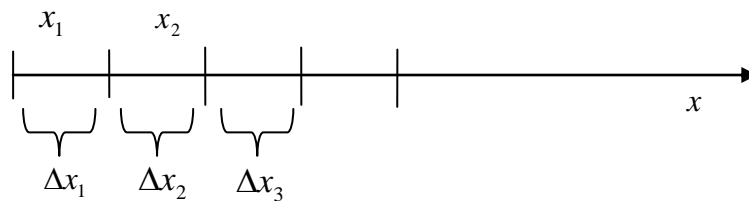
נקבל: $d = 0.01 * 10^{-9} m$

2.5 הצגה לפי מיקום ותנע

תיאור מצב לפי מיקום ותנע של חלקיק (תכונות חיצוניות)

מדידה של מיקום:

מיקום מוגדר בדרך כלל על ידי 3 רכיבים (xyz) . אנו נדבר רק על רכיב אחד שניתן למדידה - רכיב x של מיקום. בנוסף לכך, רכיב x יכול לקבל ערכים רציפים, אך אנו נתייחס אליו כאל אוסף של הרבה ערכים בדידים. נחלק את ציר x לקטעים:



כל x מייצג את הקטע שלו.

- נסמן ב $|x_j\rangle$ מצב חלקיק כאשר הרכיב x של מקומו נמצא בקטע Δx_j .

- ההסתברות שחלקיק נמצא ב $|x_1\rangle$ וב $|x_2\rangle$ היא אפס. על כן המצבים אורתוגונאליים.

כלומר באופן כללי: $\langle x_j | x_k \rangle = 0$ כאשר $j \neq k$

- מצב כללי נתאר כצרוף ליניארי:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} c_j |x_j\rangle$$

$|c_j|^2$ זה ההסתברות שרכיב x של החלקיק נמצא בקטע Δx_j כאשר החלקיק במצב $|\psi\rangle$.
 ברור ש $\sum_j |c_j|^2 = 1$.

$\psi(x_j) = \frac{c_j}{\sqrt{|\Delta x_j|}}$ בכדי לעבור למקרה רציף נדרוש לעבור לגבול $\Delta x_j \rightarrow 0$. לכן נגדיר
 עם ההגדרה הזו ההסתברות שרכיב x של חלקיק יהיה בקטע Δx_j שווה ל-

$$|c_j|^2 = \left(\psi(x_j) \sqrt{|\Delta x_j|} \right)^2 = |\psi(x_j)|^2 \Delta x_j \Rightarrow \sum_j |c_j|^2 = \sum_j |\psi(x_j)|^2 \Delta x_j = 1$$



צפיפות
הסתברות

כעת נעבור לגבול כאשר $|\Delta x_j| \rightarrow 0$ ונקבל:

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi(x) |x\rangle := |\psi(x)\rangle$$

כאשר הסתברות שחלקיק ימצא בקטע $(x, x + \Delta x)$ היא: $|\psi(x)|^2 \Delta x$

לכן $|\psi(x)|^2$ היא צפיפות התפלגות המיקום של החלקיק ומתקיים $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

$\psi(x)$ נקראת פונקציית גל, מתארת את מצב המיקום של החלקיק. פונקציה זאת שייכת

למרחב $L^2(R)$ שמוגדר על ידי: $L^2(R) = \{ \psi(x) \mid \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty \}$

שזהו מרחב הפונקציות שאינטגרל של הערך המוחלט שלהם בריבוע בכל התחום הוא מספר סופי ולא דווקא 1.

בשלב זה פונקציית הגל $\psi(x)$ נתנה לנו את ההסתברות למצוא חלקיק בקטע מסוים.
 אם I קטע על ציר x אזי ההסתברות שרכיב x של חלקיק יהיה בקטע I היא:

$$\int_I |\psi(x)|^2 dx$$

*למה $\psi(x)$ (או c_j) מספרים מרוכבים? למה לא לתאר את המיקום בעזרת התפלגות פשוטה ממשית?

- ראינו בניסוי עם הקרנת אלומת אלקטרונים על משטח כי האלקטרון בעל תכונות גליות, (אחרת אם הוא לא היה גלי היינו צריכים לקבל חיבור פשוט של הסתברויות) ולכן יש התאבכות, כלומר יש מצבים שסכום ההסתברויות ייתן אפס. את זה אי אפשר לקבל על ידי מספרים ממשיים לכן צריך מספרים מרוכבים כדי לתאר את המצב.

- ממכאניקה הקלאסית יודעים שמצב של חלקיק ניתן לתאר על ידי מיקום ותנע, כלומר $|\psi(x)|^2$ לא מספיק כיוון שהוא מתאר רק מיקום וחסר מידע על תנע, לכן יש צורך במספרים מרוכבים והמידע על התנע יהיה בפאזה.

הקשר בין התנע ואורך גל

בניסוי על עקיפה של אלקטרון בעצם הרווחנו לא רק עקיפה אלא יכולנו למדוד את אורך הגל של האלקטרון. (התאבכות בונה) $2d \cos \varphi = m\lambda$

זה מאפשר לנו למצוא את k , קבוע הגל ע"י הנוסחה הידועה $k = 2\pi/\lambda$. חיפשו את הקשר בין התנע של אלקטרון וקבוע הגל k , ומצאו כי היחס p/k הינו \hbar נוסחה זו ניתן לקבל גם משיקולים מתורת היחסות:

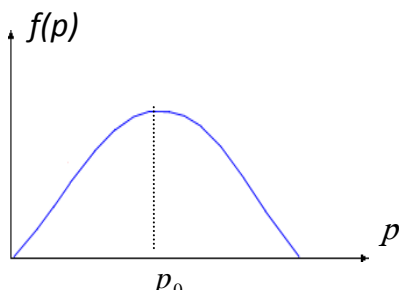
לפי נוסחת פלאנק: $E = \hbar\omega$, בתורת היחסות (E, \vec{p}) מתנהגים כמו $(\hbar\omega, \hbar\vec{k})$ או $(\hbar\omega, \hbar\vec{k})$. לכן אם w מתאים ל- E אזי \vec{k} מתאים ל- \vec{p} נקבל: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

אם לחלקיק במימד 1 התנע ידוע באופן ודאי ושווה ל- p אזי גם k ודאי, ואז מתקבלת הפונקציה: $\psi(x) = e^{ikx}$ - מצב בסיסי של תנע. אבל יש בעיה כיוון ש-

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \infty$$

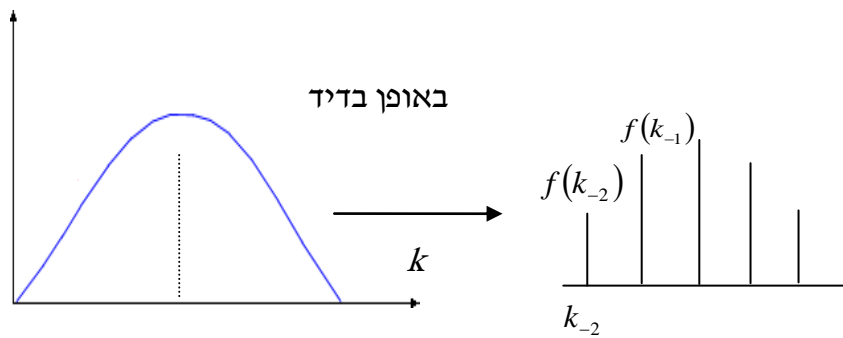
כלומר פונקציה גל זו לא תקיים את התנאי שאינטגרל זה צריך להיות סופי. מה שזה אומר שבמימד 1 אי אפשר ליצור חלקיק עם תנע מדויק. תמיד יהיה פיזור של ערך התנע.

התפלגות התנע:



תנע ממוצע של אלומה.

נעבור לקבוע הגל k



עבור קירוב בדיד פונקצית גל תהיה

$$\psi(x) \approx \sqrt{f(k_{-2})}e^{ik_{-2}x} + \sqrt{f(k_{-1})}e^{ik_{-1}x} + \sqrt{f(k_0)}e^{ik_0x} + \sqrt{f(k_1)}e^{ik_1x} + \sqrt{f(k_2)}e^{ik_2x}$$

$$\psi(x) = \int_{k=-\infty}^{\infty} \sqrt{f(k)}e^{ikx} dx \quad \text{עבור מקרה רציף נקבל}$$

המצב התקבל מצירוף של מצבים בסיסיים של התנע הזוויתי כפול מקדמים, כאשר ערך מוחלט של המקדמים שווה לשורש צפיפות ההסתברות למצבים אלו. נסמן ב $\tilde{\psi}(k)$ את טרנספורם פורייה של הפונקציה $\psi(x)$, אזי $\tilde{\psi}(k) = F\psi(x)$.

$$f(k) = |\tilde{\psi}(k)|^2 \iff \tilde{\psi}(k) = \sqrt{f(k)}$$

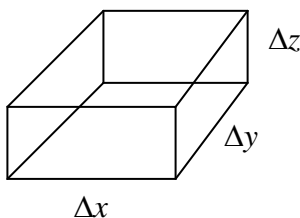
סיכום של הצגת מצב לפי מיקום

נעבור למקרה של תלת-מימדי של המרחב. במקרה זה מצב של מיקום חלקיק מתואר על ידי פונקציה $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$ הנקראת פונקצית גל, בעלת ערכים מרוכבים.

כאשר $|\psi(\vec{r})|^2$ - צפיפות המיקום של החלקיק.

זאת אומרת ההסתברות למצוא את החלקיק בתיבה $[x, x + \Delta x], [y, y + \Delta y], [z, z + \Delta z]$

שווה ל- $|\psi(x, y, z)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$



$$L^2(R^3) = \left\{ \psi : \iiint_{R^3} |\psi|^2 dr < \infty \right\}$$



האינטגרל של הפונקציה בריבוע על כל המרחב - סופי

הגדרה של מרחב מצבים לפי מיקום

מרחב המצבים לפי מיקום S כולל פונקציות רציפות וגזירות $\psi(\vec{r}) \in L^2(R^3)$ כך שגם

$$(2.5.1) \quad x^m y^n z^l \psi, \frac{\partial^{m+n+l} \psi}{\partial x^m \partial y^n \partial z^l} \in L^2(R^3)$$

התנע קשור לאורך גל $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. מידע על התנע הינו אם כן גם מידע על \vec{k} . טרנספורם פורייה של $\psi(\vec{r})$ המוגר

$$\tilde{\psi}(k_1, k_2, k_3) = F\psi(x, y, z) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \iiint_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z) e^{-i(k_1 x + k_2 y + k_3 z)} dx dy dz$$

מגדיר צפיפות התפלגות של \vec{k} (תנע עד כדי קבוע) על ידי $|\tilde{\psi}(\vec{k})|^2$.

גם המיקום וגם התנע הם תמיד הסתברותיים.

2.6 דוגמאות של פונקציות גל

א. חבילת גלים

נניח שההתפלגות של התנע p נורמאלית עם ממוצע p_0 . זאת אמרת, $f(k)$ שווה לפונקציה גאוסיאן עם ממוצע $k_0 = p_0 \hbar^{-1}$ וסטיית התקן σ . לכן


$$(2.6.1) \quad \tilde{\psi}(k) = \sqrt{f(k)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma^2}}$$

נחפש פונקציה גל שתקיים שהתפלגות זו של התנע

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma^2}} dk = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{2\pi} \sqrt{\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k^2 - 2kk_0 + k_0^2 - 4ikx\sigma^2}{4\sigma^2}} dk. \end{aligned}$$

נחשב את המונה של אכספוננט :

$$k^2 - 2kk_0 + k_0^2 - 4i\sigma^2 kx = (k - k_0 - 2i\sigma^2 x)^2 - 4i\sigma^2 k_0 x + 4\sigma^4 x^2$$



 קבועים שאפשר להוציא

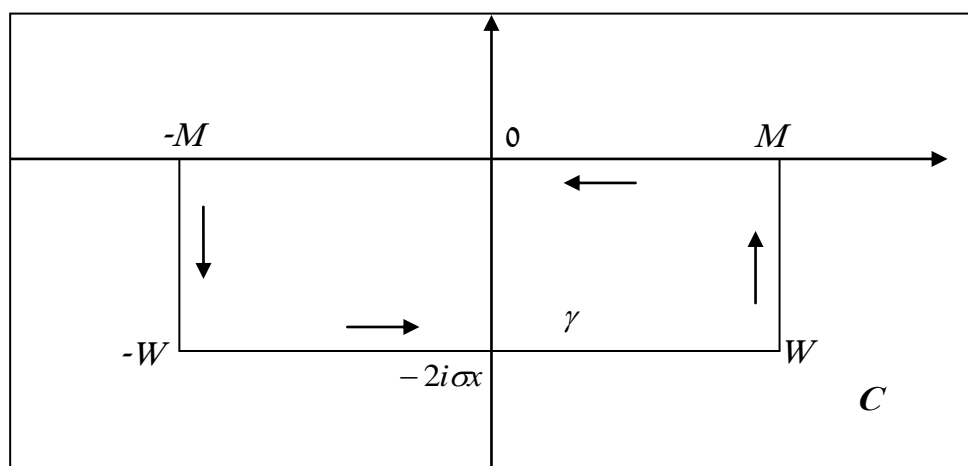
$$(2.6.2) \quad \psi(x) = \frac{e^{ik_0 x} e^{-\sigma^2 x^2}}{\sqrt{2\pi} \sqrt{2\pi} \sqrt{\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0-2i\sigma x)^2}{4\sigma^2}} dk \quad \text{לכן}$$

בכדי לחשב את האינטגרל ב-(2.6.2) מקשרים הביטוי מתחת האינטגרל עם גאוסיאן

$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{2\sigma}} e^{-\frac{(z-k_0)^2}{2(\sqrt{2\sigma})^2}} \quad \text{אם נגדיר} \quad g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{2\sigma}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\sqrt{2\sigma})^2}}$$

עבור מספר מרוכב z כלשהו אזי $g(z)$ פונקציה אנליטית ב- z . לפי משפט קושי, כאשר

$$\oint_{\gamma} g(z) dz = 0 \quad \text{אם נבחר } \gamma \text{ כמו באיור}$$



איור 2.6.1

אזי נקבל :

$$\int_{-W}^W e^{-\frac{(k-k_0-2i\alpha)^2}{4\sigma^2}} dk = -\int_M^{-M} e^{-\frac{(z-k_0)^2}{4\sigma^2}} dz = \int_{-M}^M e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma^2}} dk$$

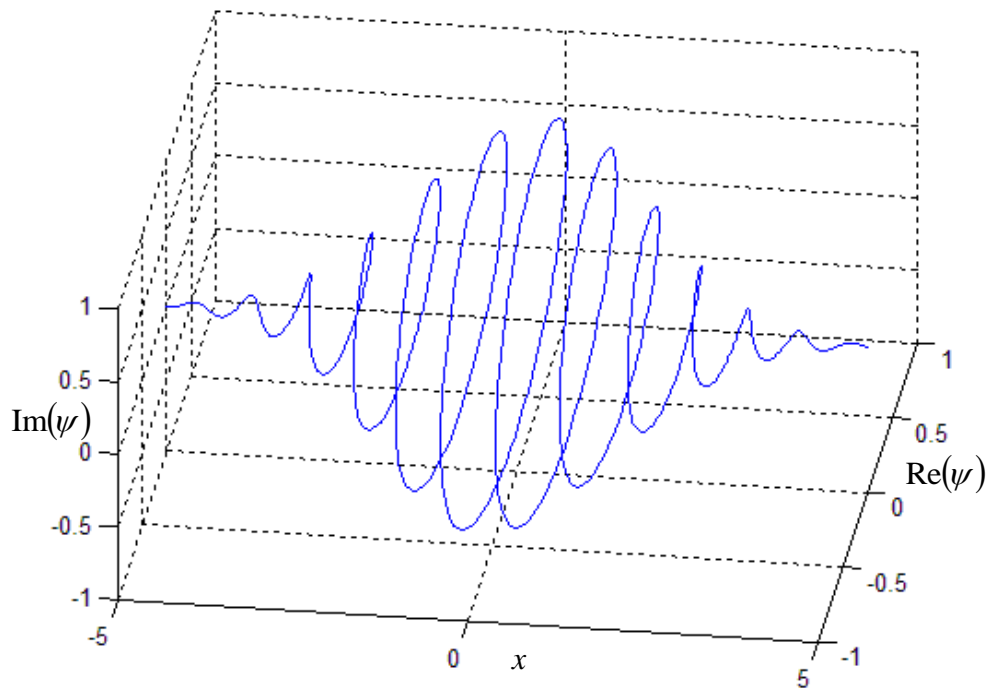
לכן כאשר $M \leftarrow \infty$ נקבל:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0-2i\alpha)^2}{4\sigma^2}} dk = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma^2}} dk = \sqrt{2\pi} \sqrt{2}\sigma$$

והצבה ב (2.6.2) נותנת

$$(2.6.3) \quad \psi(x) = \frac{\sqrt{2}\sigma}{\sqrt[4]{2\pi}} e^{-\sigma^2 x^2} e^{ik_0 x}$$

זאת אמרת, פונקצית גל $\psi(x)$ מורכבת מגאוסיאן $e^{-\sigma^2 x^2}$ וגל פשוט $e^{ik_0 x}$ עם קבוע גל k_0 ,
ראה איור 2.6.2.



איור 2.6.2 פונקצית גל $\psi(x)$

משוואה (2.6.3) מראה שהתפלגות לפי המיקום $|\psi(x)|^2 = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} e^{-2\sigma^2 x^2}$ תהיה התפלגות

נורמלית $N\left(0, \frac{1}{2\sigma}\right)$ עם סטיית התקן $\frac{1}{2\sigma}$. לכן אי-ודאות במדידת המיקום Δx ששווה

$$\Delta x = \frac{1}{2\sigma}$$

לסטיית התקן תהיה

ממשוואה (2.6.1) נובע שהאי-ודאות ב- k הוא $\Delta k = \sigma$. מזה מקבלים $\Delta p = \hbar \Delta k = \hbar \sigma$.

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

לכן עבור חבילת גלים נקבל

שנותן את אי הודאות הקטנה ביותר באי-ודאות של האייזנברג.

ב. מרחב המצבים של מתנד הרמוני

על מנת להגדיר את המצבים של מתנד הרמוני אנו נחזור על מספר עובדות על פולינומי הרמית. פולינומי הרמית ניתן להגדיר ע"י נוסחת רודריגס

$$(2.6.4) \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

$$(2.6.5) \quad xH_n(x) = nH_{n-1}(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x) \quad \text{ידוע כי}$$

$$(2.6.6) \quad H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

$$(2.6.7) \quad \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2} dx = \delta_{mn} 2^n n! \sqrt{\pi} \quad -1$$

כאשר δ_{mn} מסמל דלתה של קרונקר.

מ-(2.6.7) נובע שעבור כל מספר טבעי n הפונקציה

$$(2.6.8) \quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) e^{-x^2/2}$$

שייכת למרחב $L^2(-\infty, \infty)$ וסידרה של פונקציות אלו הם סידרה אורתונורמלית במרחב זה.

נגדיר מרחב מצבים של מתנד הרמוני S כמרחב הצירופים סופיים של פונקציות

$$(2.6.9) \quad \psi_{mnl}(x, y, z) = \psi_m(x)\psi_n(y)\psi_l(z)$$

ברור שכל איברים של S שייכים ל- $L^2(\mathbb{R}^3)$. מנוסחאות (2.6.5), (2.6.6) שגם התנאי (2.5.1) בהגדרה מתקיים.

2.7 אופרטורי מיקום ותנע

בסעיף זה מרחב מצבים S יהיה אוסף פונקציות גל המתארות את מיקום ותנע של מערכת.

מיקום ותנע מיוצגים על ידי אופרטורים צמודים לעצמם על S .

אופרטור המיקום

נסמן ע"י \hat{x} את האופרטור המייצג את רכיב x של מיקום. התוצאות האפשריות לרכיב x של מיקום הן כל המספרים הממשיים.

אם נסמן את המצב $|x_0, y_0, z_0\rangle = \psi$ אם החלקיק נמצא בנקודה (x_0, y_0, z_0) בוודאות גבוהה,

במקרה זה תוצאת המדידה של רכיב x של מיקום תהיה x_0 . זאת אומרת $|x_0, y_0, z_0\rangle$

הוא וקטור עצמי של אופרטור \hat{x} המתאים לערך x_0 . לכן $\hat{x}|x_0, y_0, z_0\rangle = x_0|x_0, y_0, z_0\rangle$

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z) = \sum_{xyz} \psi(x, y, z) |x, y, z\rangle$$

\downarrow \downarrow \downarrow
 מצב מקדמים וקטורי בסיס

לפי הגדרה של פונקציות גל :

$$\hat{x}\psi(x, y, z) = \sum_x \psi(x, y, z) \hat{x}|x, y, z\rangle = \sum_x \psi(x, y, z) x|x, y, z\rangle$$

מכאן

$$\Rightarrow \hat{x}\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

-ו

לכן

- אופרטור המייצג את רכיב x של מיקום זהו אופרטור הכפלה ב- x

$$\hat{x}\psi(\vec{r}) = x\psi(\vec{r})$$

היות וצמוד של אופרטור הכפלה בפונקציה שווה לאופרטור הכפלה בפונקציה צמודה ו x פונקציה ממשית, לכן אופרטור \hat{x} צמוד לעצמו.

בצורה דומה

• אופרטור \hat{y} המייצג את רכיב y של המיקום מוגדר ע"י $\hat{y}\psi(\vec{r}) = y\psi(\vec{r})$

• ואופרטור \hat{z} המייצג את רכיב z של המיקום מוגדר ע"י $\hat{z}\psi(\vec{r}) = z\psi(\vec{r})$

אופרטור התנע

נסמן ב- \hat{p}_x את האופרטור המייצג את הרכיב x של התנע. אם עבור מצב כלשהו, רכיב x של התנע ודאי ושווה ל- p_0 אזי פונקציה גל המתארת מצב זה היא $\psi(\vec{r}) = e^{ik_0x} f(y, z)$, כאשר $p_0 = \hbar k_0$, שזה פונקציה גל פשוט שמתאים לה ערך k_0 . מצב זה וקטור עצמי, של האופרטור \hat{p}_x המתאים לערך עצמי p_0 .

$$\hat{p}_x e^{ik_0x} f(y, z) = p_0 e^{ik_0x} f(y, z) \quad \text{לכן}$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial e^{ik_0x} f(y, z)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} ik_0 \psi = p_0 \psi \quad \text{היות ו-}$$

לכן אפשר לומר שאופרטור- : $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ על מצב ψ הנ"ל.

$$\text{למשל: } \hat{p}_x e^{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle}$$

איך \hat{p}_x פועל על פונקציה $\psi(\vec{r})$ כלשהי? עבור ψ כללי ניתן לפרק את ψ על פי פורייה:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \iiint \tilde{\psi}(\vec{k}) e^{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle} d\vec{k}$$

$$\hat{p}_x \psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \iiint \tilde{\psi}(\vec{k}) \hat{p}_x e^{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle} d\vec{k} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \iiint \tilde{\psi}(\vec{k}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{\langle \vec{k} | \vec{r} \rangle} d\vec{k} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) \quad \text{ואז:}$$

לכן, אופרטור המייצג את רכיב x של התנע מוגדר על ידי :

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

ידוע כי הצמוד של אופרטור גזירה $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^* = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$ ואינו צמוד לעצמו, אבל

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

אופרטור צמוד לעצמו.

באופן דומה:

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

תרגיל:

מצא את האופרטור המייצג אנרגיה קינטית של חלקיק:

$$E = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}\right)^2}{2m}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

↓

לפלסיאן

תרגיל:

עבור $\psi(x, y, z) = \left(\frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}}\right)^3 e^{-(\sigma_x^2 x^2 + \sigma_y^2 y^2 + \sigma_z^2 z^2)} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$ חשב את \hat{p}_x, \hat{y} על ψ .

2.8 תוחלת ושונות של משתנה דינאמי

תוחלת

תוחלת- ארך ממוצע של משתנה דינאמי A על מצב $|\psi\rangle$ שווה ל $\sum_j \alpha_j p_j$, כאשר α_j - ערכים שיכולים להתקבל במדידה ו- $p_j(\psi)$ - ההסתברות שהתוצאה α_j תתקבל במדידה.

$$\langle A \rangle = \sum_j \alpha_j p_j(\psi) \quad \text{ז. א. סימון לתוחלת: } \langle A \rangle$$

ראינו שאופרטור \hat{A} המייצג משתנה דינאמי A ניתן לכתוב כ $\hat{A} = \sum_j \alpha_j P_j$ כאשר α_j הם ערכים שמשתנה דינאמי A יכול לקבל ו P_j - פילטר שמעביר כל מצב למצב שעבורו A מקבל את הערך α_j . לפי הנחת היסוד השנייה ההסתברות לקבל את התוצאה α_j במדידה

$$\frac{\|P_j \psi\|^2}{\|\psi\|^2} = p_j(\psi) \quad \text{של } A \text{ שווה ל}$$

היות P_j צמוד לעצמו ו $P_j^2 = P_j$, לכן

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_j \alpha_j \frac{\|P_j \psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{1}{\|\psi\|^2} \sum_j \alpha_j \langle P_j \psi | P_j \psi \rangle = \frac{1}{\|\psi\|^2} \sum_j \alpha_j \langle \psi | P_j P_j \psi \rangle = \frac{1}{\|\psi\|^2} \sum_j \alpha_j \langle \psi | P_j \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\|\psi\|^2} \sum_j \langle \psi | \alpha_j P_j \psi \rangle = \frac{1}{\|\psi\|^2} \left\langle \psi \left| \sum_j \alpha_j P_j \psi \right. \right\rangle = \frac{1}{\|\psi\|^2} \left\langle \psi \left| \hat{A} \psi \right. \right\rangle \end{aligned}$$

מכאן נקבל נוסחה שתוחלת של משתנה דינאמי A על מצב $|\psi\rangle$ שווה

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle}{\|\psi\|^2}$$

אם ψ מנורמל אזי:

$$(2.8.1) \quad \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle$$

דוגמא:

1. יהי S_x - רכיב x של מומנט מגנטי ונתון שמצב האלקטרון $|z+\rangle = |\psi\rangle$. מצא את $\langle S_x \rangle$ - ערך הממוצע במדיאה של רכיב x של מומנט מגנטי עבור אלומה במצב $|z+\rangle$.

תשובה:

וקטור בסיס $|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ אורכו מנורמל - 1. לכן

$$\langle S_x \rangle = \langle \psi | \hat{S}_x \psi \rangle = \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \left| \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{2} \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \left| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = 0$$

הסבר לפי שיקולים אחרים: $\frac{\mu}{2} \cdot 0.5 + \left(-\frac{\mu}{2}\right) \cdot 0.5 = 0$

חצי חלקיקים יקבלו את הערך $\frac{\mu}{2}$ וחצי יקבלו $-\frac{\mu}{2}$.

2. מצא את $\langle S_x \rangle$ על מצב $|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

חישוב:

$$\langle S_x \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \left| \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{4} \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{4} \cdot 2 = \frac{\mu}{2}$$

היות S_x מקבל תמיד ערך $\frac{\mu}{2}$ על מצב $|x+\rangle$ גם הממוצע יהיה $\frac{\mu}{2}$.

3. מצא את $\langle S_x \rangle$ על $|y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

חישוב:

$$\langle S_x \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \left| \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{4} \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \left| \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{\mu}{4} (1 \cdot i + (-i) \cdot 1) = 0$$

כצפוי.

שונות

בגדלים פיזיקליים צריך לדעת לא רק את הממוצע אלא גם את הפיזור, וזה קשור לעניין האי ודאות.

לפי נוסחה ידוע מהסתברות השונות שווה

$$(2.8.2) \quad \Delta A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

בתורת הקוונטים לפי (2.8.1) השונות במדידה של גודל A על מצב ψ ניתן לחשב ע"י

$$\Delta A^2 = \frac{1}{\|\psi\|^2} \langle \psi | \hat{A}^2 \psi \rangle - \left(\frac{1}{\|\psi\|^2} \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \right)^2$$

2.9 גדלים פיזיקליים נמדדים יחדיו (קומפטיבליים)

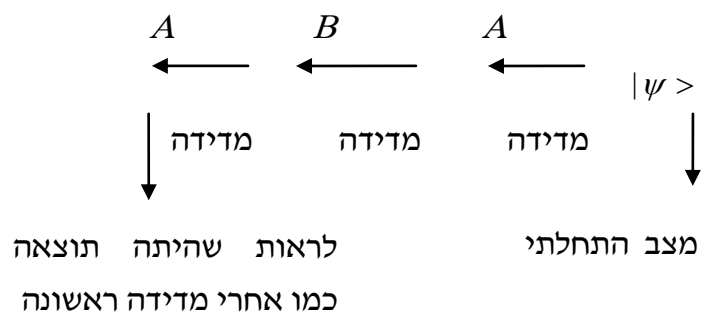
הגדרה: אנו נאמר שגודל פיזיקלי B נמדד יחדיו עם A אם המדידה של B לא משנה את תוצאות המדידה של A .

לדוגמא שני רכיבים שונים של מומנט מגנטי לא מקיימים זאת. לדוגמא אופרטורים המיצגים 4 מספרים קוונטיים של אטום מקיימים זאת.

טענה: B נמדד יחדיו עם A אם ורק אם $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ כאשר $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

מסקנה: אם B נמדד יחדיו עם A אזי A נמדד יחדיו עם B .

נניח ש B נמדד יחדיו עם A . כדי לוודא זאת צריך לבצע מספר מדידות:



נכתוב את אופרטור \hat{A} כ- $\hat{A} = \sum_j \alpha_j P_j$. אם במדידה ראשונה קבלנו ערך α_{j_0} (מסוים),

המצב אחרי המדידה זו לפי המנחת היסוד השניה יהיה: $P_{j_0}|\psi\rangle$.

נכתוב את אופרטור \hat{B} כ- $\hat{B} = \sum_k \beta_k Q_k$. אם במדידה שניה קיבלנו תוצאה β_{k_0} , המצב

אחרי המדידה שנייה יהיה $Q_{k_0}(P_{j_0}|\psi\rangle)$.

היות והנחנו ש B נמדד יחדיו עם A , אם נמדוד A על המצב החדש , נקבל בוודאות

זאת אומרת :

$$P_{j_0}(Q_{k_0}P_{j_0}|\psi\rangle) = Q_{k_0}P_{j_0}|\psi\rangle$$

לכן

$$\Rightarrow (1) \quad P_{j_0}Q_{k_0}P_{j_0} = Q_{k_0}P_{j_0}$$

והאופרטורים צריכים לקיים את התנאי (1), בשביל קומפטיביליות.

אם ניקח את הצמוד משני הצדדים של (1) שזה כרוך בלקיחת הצמוד של כל אחד מהאופרטורים והחלפת סדר בכפל. היות וכל אופרטורים צמודים לעצמם נקבל :

$$\left. \begin{aligned} (P_{j_0}Q_{k_0}P_{j_0})^* &= P_{j_0}Q_{k_0}P_{j_0} \\ (Q_{k_0}P_{j_0})^* &= P_{j_0}Q_{k_0} \end{aligned} \right\} \Rightarrow (2) \quad P_{j_0}Q_{k_0}P_{j_0} = P_{j_0}Q_{k_0}$$

$$(3) \quad Q_{k_0}P_{j_0} = P_{j_0}Q_{k_0} \quad \text{מתוך (1) ו-(2) נקבל:}$$

$$\hat{A}\hat{B} = \left(\sum_j \alpha_j P_j \right) \left(\sum_k \beta_k Q_k \right) = \sum_{j,k} \alpha_j \beta_k P_j Q_k \quad \text{היות ו}$$

$$\hat{B}\hat{A} = \left(\sum_k \beta_k Q_k \right) \left(\sum_j \alpha_j P_j \right) = \sum_{j,k} \beta_k \alpha_j Q_k P_j$$

מ- (3) מקבלים שהסדר בכפל של Q, P לא משנה

$$\cdot [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad \text{לכן:}$$

זה מוכיח כיוון אחד של טענה

. על מנת להוכיח כיוון השני אנו צריכים להראות שאם עבור שני גדלים A ו B מתקיים

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{אזי גדלים אלו נמדדים יחדיו זאת אמרת ההיטלים שלהם מקיימים (1). אנו}$$

נראה קודם שמתקיים (3) ואחר כך נראה שמזה נובעה (1). הוכחה מבוססת על טענה הבאה:

$$\text{טענה: אם אופרטורים } \hat{A} = \sum_j \alpha_j P_j \text{ ו } \hat{B} = \sum_k \beta_k Q_k \text{ מקיימים את בתנאי: } [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

אזי

$$(3) \quad Q_k P_j = P_j Q_k$$

נוכיח את הטענה במספר שלבים.

$$(א) \quad \text{אם } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \text{ אזי גם } [\hat{A}^2, \hat{B}] = 0 \quad : \quad \hat{A}^2 \hat{B} = \hat{A} \hat{A} \hat{B} = \hat{A} \hat{B} \hat{A} = \hat{B} \hat{A} \hat{A} = \hat{B} \hat{A}^2$$

$$(ב) \quad \text{אם } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \text{ אזי גם } [\hat{A}^n, \hat{B}] = 0$$

הוכחה באינדוקציה על n . מניחים ש עבור $n-1$ הטענה נכונה, ז.א. $[\hat{A}^{n-1}, \hat{B}] = 0$. אזי

$$\hat{A}^n \hat{B} = \hat{A} \hat{A}^{n-1} \hat{B} = \hat{A} \hat{B} \hat{A}^{n-1} = \hat{B} \hat{A} \hat{A}^{n-1} = \hat{B} \hat{A}^n$$

$$(ג) \quad \text{נגדיר פולינום של אופרטור ע"י: } p_n(\hat{A}) = a_n \hat{A}^n + a_{n-1} \hat{A}^{n-1} + \dots + a_1 \hat{A} + a_0 I$$

$$\text{מ (ב) מקבלים: שאם } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \text{ אזי גם } : [p_n(\hat{A}), \hat{B}] = 0$$

(ד) עבור פונקציה $f: R \rightarrow R$ כלשהי ואופרטור $\hat{A} = \sum_j \alpha_j P_j$ נגדיר קודם את $f(\hat{A})$ על ידי

$$f(\hat{A}) = \sum_j f(\alpha_j) P_j$$

הגדרה זו מתאימה לפעולת כפל אופרטור. למשל, עבור $f(x) = x^2$ היות כי $P_j P_k = 0$ כאשר $j \neq k$ ו $P_j^2 = P_j$, נקבל:

$$\hat{A}^2 = f(\hat{A}) = \hat{A} \hat{A} = \left(\sum_j \alpha_j P_j \right) \left(\sum_i \alpha_i P_i \right) = \sum_j \alpha_j^2 P_j$$

היות וכל פונקציה אפשר לקרב על ידי פולינומים, לכן כמו ב- (ג).

$$\text{אם } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \text{ אזי גם } : [f(\hat{A}), \hat{B}] = 0$$

אם נבחר f כך ש $f(\alpha_j) = 1$ ו $f(\alpha_k) = 0$ עבור $j \neq k$ אזי $f(\hat{A}) = P_j$. לכן

$$\text{אם } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \text{ אזי גם } : [P_j, \hat{B}] = 0$$

ע"י שימוש ברעיון זה עבור B נקבל גם $[P_j, Q_k] = 0$, ומתקיים (3) עבור שני גדלים A ו

B .

זה מוכח את הטענה

נכפיל את $P_j Q_k = Q_k P_j$ (3) ב- P_j מימין ונקבל.

$$\Rightarrow P_j Q_k P_j = Q_k P_j P_j = Q_k P_j$$

לכן (3) \Leftarrow ל-(1).

2.10 עקרון אי הוודאות המוכלל :

ניסוח העיקרון: אם A ו- B גדלים פיזיקאליים המיוצגים על ידי אופרטורים \hat{A} ו- \hat{B} -

$$(2.10.1) \quad \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad |\psi\rangle - \text{מצב מערכת, אזי:}$$

כאשר $\Delta A, \Delta B$ מסמל סטיית תקן של הפיזור במדידה של A ו- B על מערכת במצב $|\psi\rangle$

הארה: כשרוצים לקחת תוחלת אז צריך להשתמש בגדלים שמיוצגים באופרטורים

$$\text{צמודים לעצמם. היות } [\hat{A}, \hat{B}]^* = (\hat{A}\hat{B})^* - (\hat{B}\hat{A})^* = \hat{B}^* \hat{A}^* - \hat{A}^* \hat{B}^* = -[\hat{A}, \hat{B}] \text{ רק}$$

$$\text{יהיה צמוד לעצמו. } (i[\hat{A}, \hat{B}])^* = -i[\hat{A}, \hat{B}]^* = i[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle : \text{ לפי ההגדרה של תוחלת:}$$

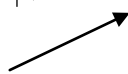
$$\text{והשוויות מוגדרת } (\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle$$

הוכחת עקרון

על מנת להוכיח את עקרון אי הוודאות, נגדיר משתנים חדשים:

$$\hat{A}_1 = \hat{A} - \langle A \rangle, \hat{B}_1 = \hat{B} - \langle B \rangle \text{ אזי } (\Delta A)^2 = \langle A_1^2 \rangle, (\Delta B)^2 = \langle B_1^2 \rangle$$

$$0 \leq \langle (\hat{A}_1 + is\hat{B}_1) | (\hat{A}_1 + is\hat{B}_1) \rangle = \langle (\hat{A}_1 + is\hat{B}_1) | (\hat{A}_1 + is\hat{B}_1) \rangle$$



נעביר לאגף הזה וניקח את הצמוד.

$$\begin{aligned}
&= \langle \psi | (\hat{A}_1 - is\hat{B}_1)(\hat{A}_1 + is\hat{B}_1) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A}_1^2 + is(\hat{A}_1\hat{B}_1 - \hat{B}_1\hat{A}_1) + s^2\hat{B}_1^2) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \hat{A}_1^2 | \psi \rangle + s \langle \psi | i[\hat{A}_1, \hat{B}_1] | \psi \rangle + s^2 \langle \psi | \hat{B}_1^2 | \psi \rangle \\
&\quad \uparrow \qquad \qquad \uparrow \qquad \qquad \uparrow \\
&\quad (\Delta A)^2 \qquad \langle i[A_1, B_1] \rangle \qquad (\Delta B)^2
\end{aligned}$$

הביטוי ריבועי זה תמיד גדול או שווה לאפס: $(\Delta A)^2 + s \langle i[A_1, B_1] \rangle + s^2 (\Delta B)^2 \geq 0$

לכן: $\Delta = \langle i[A_1, B_1] \rangle^2 - 4(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \leq 0$. נעביר אגפים ועבור שורש של ריבוע לוקחים

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle i[A_1, B_1] \rangle| \quad \text{את הערך המוחלט ונקבל:}$$

נשאר להוכיח שאפשר לקחת במקום A_1, B_1 את A, B .

$$A_1 B_1 = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) = AB - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$B_1 A_1 = (B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle) = BA - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$A_1 B_1 - B_1 A_1 = AB - BA \Rightarrow [A_1, B_1] = [A, B]$$

מ.ש.ל

נראה עבור מקרה פרטי: עקרון אי הוודאות של הייזנברג: $\hat{A} = \hat{x}$

כאשר: $\hat{B} = \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

על מנת לחשב את $[A, B]$ נפעיל אופרטור זה על מצב מנורמל ψ :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = \hat{x} \hat{p}_x \psi - \hat{p}_x \hat{x} \psi = x \frac{\hbar}{i} \psi' - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial (x\psi)}{\partial x} = x \frac{\hbar}{i} \psi' - \frac{\hbar}{i} \psi - x \frac{\hbar}{i} \psi' = -\frac{\hbar}{i} \psi$$

נמצא את התוחלת :

$$\langle i[\hat{x}, \hat{p}_x] \rangle = \left\langle \psi \left| i \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \psi \right. \right\rangle = -\hbar \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_{=1} = \hbar$$

לפי עקרון אי הוודאות המוכלל :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle i \left[A_1, B_1 \right] \right\rangle \right|$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar$$

הנקרא האי-ודאות של הייזנברג.

פרק 3 – דינמיקה קוונטית

פרק זה עוסק בתיאור של התפתחות בזמן של מערכת קוונטית

3.1 פיתוח משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים

נוסחת פלאנק :

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar\omega$$

כאשר: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $\omega = 2\pi\nu$

אם האנרגיה של המערכת ודאית E אזי ω ידועה וקבועה.

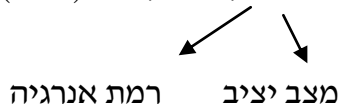
זאת אומרת אם מצב המערכת בזמן $t = 0$ היה $|\psi(0)\rangle$ או $\psi(x, y, z, 0)$

$$(3.1.1) \quad \psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z, 0)e^{-i\omega t}$$

היות ו- $\psi(x, y, z, t)$ מתקבל על ידי הכפלה של מצב $\psi(x, y, z, 0)$ בקבוע $e^{-i\omega t}$ (ביחס ל- (x, y, z)) וכיוון שהכפלה בקבוע לא משנה את המצב, לכן עבור כל t נתון, מתקבל מצב זהה. מצב $\psi(x, y, z, t)$ נקרא **מצב יציב** אם הוא אינו משתנה עם הזמן. על כן מצב, עבורו אנרגיה ודאית וקבועה יהיה מצב יציב. מכאן תקבל משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים הנקראת גם משוואת שרדינגר בלתי תלויה בזמן.

נסמן את אופרטור המתאר את אנרגיית המערכת ע"י \hat{H} . על פי הנחת יסוד שנייה מצב עבורו אנרגיה ודאית וקבועה יהיה וקטור עצמי של \hat{H} המתאים לערך עצמי E . לכן, מצב יציב הוא וקטור עצמי של \hat{H} .

$$(3.1.2) \quad \hat{H}\psi = E\psi \quad \Leftarrow \quad \text{כלומר משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים:}$$



איך מוצאים את אופרטור האנרגיה \hat{H} עבור מערכת קוונטית?

כאשר למערכת קוונטית ישנה מערכת קלאסית דומה והאנרגיה שלה מיוצגת על ידי המילטוניאן קלסי $H(q, p)$ שהוא פונקציה של מיקום ותנע, המילטוניאן קוונטי \hat{H} מתקבל מהמילטוניאן קלסי ע"י החלפה בו של משתני מיקום ותנע באופרטורי מיקום ותנע: ז.א.

$$\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p})$$

למשל: כאשר: $q = (x, y, z)$, $p = (p_x, p_y, p_z)$ והמילטוניאן קלסי $H(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$,

$$\hat{H} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \quad \text{המילטוניאן הקוונטי יהיה:}$$

דוגמא 1: מצב יציב של חלקיק חופשי

עבור חלקיק חופשי, כיון שלא פועלים עליו כוחות אין לו אנרגיה פוטנציאלית ואנרגיה שווה לאנרגיה קינטית. לכן המילטוניאן קלסי שווה

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E_k = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

ההמילטוניאן הקוונטי יהיה:

$$\hat{H} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}\right)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

כאשר ∇^2 מסמן את לפלסיאן.

משוואה למצבים יציבים:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

קבלנו משוואה דיפרנציאלית מסדר שני.

נבצע הפרדת משתנים: $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$

$$\nabla^2 \psi = -k^2 \psi \quad \Leftarrow \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{נגדיר:}$$

נציב במשוואה ונקבל:

$$X''YZ + XY''Z + XYZ'' = -k^2 XYZ$$

או $\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} = -k^2$. נסמן $\frac{X''}{X} = a, \frac{Y''}{Y} = b, \frac{Z''}{Z} = c$ אזי $a + b + c = -k^2$.

נפתור עבור X : $X'' = aX \rightarrow \frac{X''}{X} = a$

• אם $a > 0$

$$X(x) = c_1 e^{\sqrt{ax}} + c_2 e^{-\sqrt{ax}}$$

עבור $x \rightarrow \infty$ נקבל $X(x) \rightarrow \infty$ הפונקציה הזו לא חסומה, אנו

דרשנו $\int |\psi(x)|^2 < \infty$ שצפיפות התפלגות של מיקום תהיה קטנה מאינסוף ולכן

פונקציה זו לא יכולה להיות צפיפות התפלגות.

• אם $a = 0$

$$X(x) = c_1 + c_2 x$$

הפתרון חסום רק עבור $c_2 = 0$ (אחרת $x \rightarrow \infty \Leftarrow X(x) \rightarrow \infty$) ולכן $X(x) = c_1$

הפתרון מוגדר עד כדי קבוע: $X(x) = 1$

• אם $a < 0$ $a = -k_1^2$ נסמן: לכן הפתרון

$$X(x) = c_1 e^{ik_1 x} + c_2 e^{-ik_1 x}$$

• מכאן נובע שצורה כללית של פתרון עבור $X(x)$ הוא: $X(x) = e^{ik_1 x}$

באותו אופן ניתן למצוא ש:

$$Y(y) = e^{ik_2 y}, \quad Z(z) = e^{ik_3 z}$$

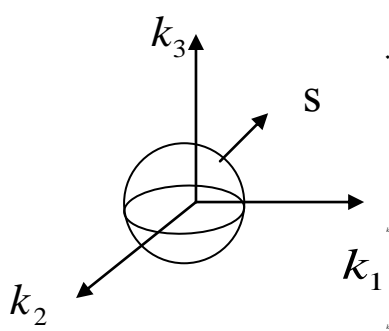
פתרון של משוואת שרדינגר עבור חלקיק חפשי יציב בעל אנרגיה E יהיה צירוף ליניארי של פתרונות הניתנות להפרדה מהצורה

$$\psi_{k_1 k_2 k_3}(x, y, z) = e^{ik_1 x} e^{ik_2 y} e^{ik_3 z} = e^{i(k_1 x + k_2 y + k_3 z)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

כאשר $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ ונתקיים $|\mathbf{k}|^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

תנאי על \mathbf{k} אומר שהוא נמצא על פני כדור S בעל רדיוס קבוע $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. ולכן, פתרון משוואת שרדינגר עבור מצב יציב של חלקיק חופשי יהיה.

$$\psi(x, y, z) = \sum_{k_1, k_2, k_3} c_{k_1, k_2, k_3} \psi_{k_1, k_2, k_3}(x, y, z) = \iint_S c_{k_1, k_2, k_3} \psi_{k_1, k_2, k_3} ds = \iint_S c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} ds$$



זהו אינטגרל דו מימדי על פני כדור S בעל רדיוס קבוע $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. כיוון שפני הכדור רציף זהו אינטגרל ולא סיגמה.

הבעיה היא למצוא פונקציה $c_{\mathbf{k}}$, כאשר \mathbf{k} שייך לפני כדור, עבורה $\psi(x, y, z) \in L^2(\mathbb{R}^3)$.

דוגמא 2 : משוואת שרדינגר למצב יציב של חלקיק בשדה משמר
נניח ששדה המשמר נוגדר על ידי פוטנציאל $V(x, y, z)$. אזי

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x, y, z) = E_k + E_p$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$$

נבדוק שמתקיים: $V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})\psi = V(x, y, z)\psi$? נראה שאופרטור הפוטנציאל שווה לאופרטור הכפלה בפונקצית הפוטנציאל.

ניקח מקרה פרטי \Leftarrow מתנד הרמוני.

$$V(x, y, z) = -\frac{1}{2}(k_1 x^2 + k_1 y^2 + k_1 z^2)$$

נפעיל את האופרטור על מצב ψ :

$$\begin{aligned}
\hat{V}\psi &= -\frac{1}{2}(k_1\hat{x}^2 + k_1\hat{y}^2 + k_1\hat{z}^2)\psi \\
&= -\frac{1}{2}k_1\hat{x}^2\psi - \frac{1}{2}k_2\hat{y}^2\psi - \frac{1}{2}k_3\hat{z}^2\psi \\
&= -\frac{1}{2}k_1\hat{x}(x\psi) - \frac{1}{2}k_2\hat{y}(y\psi) - \frac{1}{2}k_3\hat{z}(z\psi) \\
&= -\frac{1}{2}k_1x^2\psi - \frac{1}{2}k_2y^2\psi - \frac{1}{2}k_3z^2\psi \\
\Rightarrow -\frac{1}{2}(k_1\hat{x}^2 + k_1\hat{y}^2 + k_1\hat{z}^2)\psi &= V(x, y, z)\psi
\end{aligned}$$

מש"ל.

אופרטור הכפלה ב- $V(x, y, z)$

אפשר לומר באופן כללי עבור פונקציה

$$\hat{x}^{n_1} \hat{y}^{n_2} \hat{z}^{n_3} \psi = x^{n_1} y^{n_2} z^{n_3} \psi$$

לכן משוואת שרדינגר של חלקיק בשדה בעל פוטנציאל $V(x, y, z)$ עבור מצב יציב:

$$(3.1.3) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, y, z)\psi = E\psi$$

3.2 משוואת שרדינגר התלויה בזמן.

נניח ש- $\psi(x, y, z, 0)$ הוא מצב לא יציב של המערכת, כלומר האנרגיה לא ודאית.

נסמן ב- E_n אוסף אנרגיות אפשריות.

נפרק את $\psi(x, y, z, 0)$ לפי מצבים יציבים - אוסף של וקטורים עצמיים:

$$\psi(x, y, z, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x, y, z, 0)$$

כאשר $\psi_n(x, y, z, 0)$ ווקטור עצמי של \hat{H} המתאים לערך E_n .

ולפי הנוסחה (3.1.1) של שינוי בזמן של מצבים יציבים ψ_n :

$$\psi_n(x, y, z, t) = \psi_n(x, y, z, 0)e^{-i\omega_n t} = \psi_n(x, y, z, 0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\downarrow$$

$$E_n = \hbar\omega_n$$

נניח שההתפתחות בזמן היא לינארית (מקבלים אותו צרוף לינארי עבור זמן t כלשהוא).
לכן:

$$(3.2.1) \quad \psi(x, y, z, t) = \sum_n c_n \psi_n(x, y, z, t) = \sum_n c_n \psi_n(x, y, z, 0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

נגזור לפי t על מנת לתאר את השינוי בזמן:

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = -i\frac{E_n}{\hbar}\psi_n$$

$$\frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = \sum_n c_n \left(\frac{-i}{\hbar}\right) E_n \psi_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n E_n \psi_n = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi$$

ולכן משוואת שרדינגר התלויה בזמן:

$$(3.2.2) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

דוגמאות למשוואת שרדינגר תלויה בזמן:

(1) משוואת שרדינגר עבור חלקיק בודד בשדה משמר:

במשוואה זו: $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ מצב לא יציב.

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

ומשוואת שרדינגר תלויה בזמן היא:

$$(3.2.3) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi$$

(2) משוואת שרדינגר עבור מספר חלקיקים בשדה משמר

k חלקיקים בעלי מסות m_1, m_2, \dots, m_k , נסמן מיקום של כל חלקיק על ידי $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k$ מניחים שאנרגיה פוטנציאלית של כל מערכת חלקיקים היא פונקציה של מיקום $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k)$

במקרה זה ידוע המלטוניאן הקלאסי :

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_k) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \dots + \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k)$$

הפונקציה גל תהיה $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, t)$ ואופרטור של האנרגיה :

$$(3.2.4) \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \dots - \frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_k^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k)$$

כאשר $\nabla_j^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2}$ עבור $1 \leq j \leq k$ ו- x_j מסמל קורדינטה x של חלקיק j .

משוואת שרדינגר תלויה בזמן היא :

$$(3.2.5) \quad i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, t)$$

כאשר \hat{H} מוגדר ע"י (3.2.4).

תהליך קוונטיזציה :

הפיכת גודל קלאסי לאופרטור המתאים לגודל הקוונטי. תהליך זה ניתן לעשות רק על גדלים שיש להם דימוי קלאסי. גודל קלאסי ניתן לרשום כפונקציה $a(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, (של מיקום ותנע)

\mathbf{p}, \mathbf{r} מתארים את מצב המערכת ולפי זה ניתן לחשב מה יקרה בעתיד.

אופרטור המתאים לגודל קוונטי זה מסומן ע"י \hat{a} ומוגדר ע"י $\hat{a} = a(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$.

ישנה בעיה : כאשר בפונקציה $a(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ יש כפל של r ו- p . למשל, אם $a = p_x x = x p_x$,

עבור מספרים : $p_x x = x p_x$ אבל עבור אופרטורים קוונטיים : $\hat{x} \hat{p}_x \neq \hat{p}_x \hat{x}$.

לכן ישנו תהליך קוונטיזציה של וויל (Weil) שאומר: לגודל קלאסי $x p_x$, מתאימים

אופרטור

$$\frac{\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}}{2}$$

שהוא ממוצע של שני אופנים להגדרת הכפל. יתרון לקוונטיזציה זו ש- \hat{a}

יהיה

אופרטור צמוד לעצמו (כיוון שצמוד של כפל הופך סדר ולכן נשאר באותו ביטוי).

3.3 אופרטור התפתחות בזמן.

נניח שיש מערכת קוונטית עם מרחב מצבים S ונניח שהמילטוניאן של המערכת \hat{H} לא תלוי בזמן.

אם מצב המערכת בזמן 0 היה $\psi(\bar{r}, 0)$ לפי משוואת שרדינגר יודעים גם את המצב $\psi(\bar{r}, t)$ של המערכת בזמן t .

הגדרה: אופרטור התפתחות בזמן $U(t)$ הוא אופרטור לינארי המתאים עבור כל מצב

$$\psi(\mathbf{r}, 0)$$

את המצב $\psi(\mathbf{r}, t)$.

$$\Rightarrow U(t)\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r}, t)$$



המצב זמן $t \Rightarrow$ הפעלת האופרטור על המצב בזמן 0

נצמא נוסחה לחישוב אופרטור התפתחות בזמן במקרה שישנו בסיס אורתוגונאלי במרחב מצבים S של וקטורים עצמיים $\psi_j(\mathbf{r}, 0)$ של ההמילטוניאן \hat{H} של המערכת המתאימים

לערכים עצמיים E_j . נניח שוקטורים עצמיים מנורמלים כלומר $\langle \psi_j(\mathbf{r}, 0) | \psi_j(\mathbf{r}, 0) \rangle = 1$.

נפרק את המצב ההתחלתי $\psi(\mathbf{r}, 0)$ לפי וקטורי הבסיס $\psi_j(\mathbf{r}, 0)$ לפי $\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_j c_j \psi_j(\mathbf{r}, 0)$.

נוסחת פוריה, מקדמי הפרוק c_j של ψ ניתן לחשב לפי $c_j = \langle \psi_j(\mathbf{r}, 0) | \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle$.

לפי הנוסחה (3.2.1), שהוכחנו קודם :

$$(3.3.1) \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_j c_j e^{-\frac{E_j t}{\hbar}} \psi_j(\mathbf{r}, 0) = \sum_j c_j e^{\frac{E_j t}{\hbar}} \psi_j(\mathbf{r}, 0) = \sum_j \psi_j(\mathbf{r}, 0) e^{\frac{E_j t}{\hbar}} \langle \psi_j(\mathbf{r}, 0) | \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle$$

נגדיר מטריצה $W = (\langle \psi_1 |, \langle \psi_2 |, \dots, \langle \psi_j | \dots)$, שעמודותיה הם וקטורי (Ket) של הבסיס, אזי שורותיה של מטריצה הצמודה ל W יהיו וקטורי (Bra) של הבסיס :

$$W^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \vdots \\ \psi_j^* \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \\ \langle \psi_2 | \\ \vdots \\ \langle \psi_j | \\ \vdots \end{pmatrix}$$

בהגדרות הנ"ל ניתן לכתוב את (3.3.1) כ :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = W \text{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{\hbar}} \right) W^* \psi(\mathbf{r}, 0)$$

$$\text{כאשר } \text{diag}(\alpha_j) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_j \end{pmatrix}$$

שכל אבריה מלבד האלכסון הראשי שווים 0.

הוכחה

$$W^* \psi(\mathbf{r}, 0) = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \vdots \\ \psi_j^* \\ \vdots \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, 0) = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \\ \langle \psi_2 | \\ \vdots \\ \langle \psi_j | \\ \vdots \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, 0) = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \psi \rangle \\ \langle \psi_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \psi_j | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

↓
↓

מוגדרת
מקדמי פרוק

לפי וקטורים
עצמיים

לכן

$$\text{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \right) W^* \psi(\mathbf{r}, 0) = \text{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \right) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} \\ c_2 e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} \\ \vdots \\ c_j e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

-1

$$W \text{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \right) W^* \psi(\mathbf{r}, 0) = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j \dots] \begin{pmatrix} c_1 e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} \\ c_2 e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} \\ \vdots \\ c_j e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \\ \vdots \end{pmatrix} = c_1 e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} \psi_1 + c_2 e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} \psi_2 + \dots + c_j e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \psi_j = \psi(\mathbf{r}, t)$$

מ.ש.ל.

ולכן אופרטור התפתחות בזמן $U(t)$ שווה :

$$(3.3.2) \quad U(t) = W \text{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \right) W^*$$

דרך שנייה לחישוב אופרטור התפתחות בזמן $U(t)$ היא על ידי שימוש שפתרון של משוואה

$$\psi(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = \psi(\mathbf{r}, 0) \quad \text{עם תנאי התחלה} \quad \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \psi(\mathbf{r}, t)$$

כ-

לכתוב

ניתן

$$(3.3.3) \quad \psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{t}{i\hbar} \hat{H}} \psi(\mathbf{r}, 0)$$

$$e^{\frac{t}{i\hbar} \hat{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{i\hbar} \right)^n \hat{H}^n$$

כאשר אקספוננט של המילטוניאן מוגדר לפי טור טיילור

נוכיח זה

הוכחה

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^n \hat{H}^n \psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} n \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^{n-1} \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^n \psi(\mathbf{r}, 0) =$$

$$\frac{\hat{H}}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^{n-1} \hat{H}^{n-1} \psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^n \hat{H}^n \psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \psi(\mathbf{r}, t)$$

זה מוכיח ש $\psi(\mathbf{r}, t)$ מקיים משוואת שרדינגר (3.2.2) $\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \psi(t)$. ברור שכאשר $t = 0$ מתקיים $\psi(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = \psi(\mathbf{r}, 0)$.

(3.3.4) $U(t) = e^{\frac{t}{i\hbar} \hat{H}}$ מכאן מקבלים שאופרטור התפתחות בזמן שווה

ניתן להגדיר את אופרטור התפתחות בזמן לא רק מ- $t = 0$, אלא גם עבור זמן התחלתי כלשהוא $t = t_0$. במקרה זה המצב בזמן t יהיה מוגדר ע"י:

$$(3.3.5) \quad \psi(t) = U(t, t_0) \psi(t_0)$$

ואופרטור $U(t, t_0)$ יקרא אופרטור התפתחות מ- t_0 ל- t . אופרטור התפתחות בזמן מקיים תמיד את התנאי:

$$(3.3.6) \quad U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$$

תרגיל 1

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 6 & 2i \\ -2i & 9 \end{pmatrix}$$

עבור מערכת קוונטית, המילטוניאן ניתן על ידי:

- מצא את המצבים היציבים של המערכת
- אם המערכת היתה בזמן $t = 0$ במצב $\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ מה יהיה מצבה בזמן $t > 0$?
- מצא את אופרטור ההתפתחות בזמן של המערכת.
- מצא עבור אילו זמנים המערכת תחזור למצב ההתחלתי.

פתרון

א. נמצא ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים. הווקטורים העצמיים הם המצבים היציבים של המערכת.

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 6 - \lambda & 2i \\ -2i & 9 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(6 - \lambda)(9 - \lambda) - 4 = \lambda^2 - 15\lambda + 50 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{15 \pm \sqrt{225 - 200}}{2} \rightarrow \lambda_1 = 5 \quad \lambda_2 = 10$$

$\lambda_1 = 5$ עבור

$$\begin{pmatrix} 1 & 2i \\ -2i & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$a + 2ib = 0$$

$$\left. \begin{matrix} b = 1 \\ a = -2i \end{matrix} \right\} \rightarrow \psi_1 = \begin{pmatrix} -2i \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2i \\ 1 \end{pmatrix} : \text{מצב יציב מנורמל ראשון יהיה}$$

$\lambda_2 = 10$ עבור

$$\begin{pmatrix} -4 & 2i \\ -2i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$-2ia - b = 0$$

$$\rightarrow \psi_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2i \end{pmatrix}$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2i \end{pmatrix} : \text{מצב יציב מנורמל שני יהיה}$$

ב. נמצא את אופרטור ההתפתחות של המערכת מצב המערכת בזמן $t > 0$.

$$W = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -2i & 1 \\ 1 & -2i \end{pmatrix} \quad W^* = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2i & 1 \\ 1 & 2i \end{pmatrix}$$

לפי (3.3.2)

$$\psi(t) = W \operatorname{diag} \left(e^{\frac{t\lambda}{i\hbar}} \right) W^* \psi(0) = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2i & 1 \\ 1 & -2i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\frac{5t}{i\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{10t}{i\hbar}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i & 1 \\ 1 & 2i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2ie^{\frac{5t}{i\hbar}} & e^{\frac{10t}{i\hbar}} \\ e^{\frac{5t}{i\hbar}} & -2ie^{\frac{10t}{i\hbar}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i & 1 \\ 1 & 2i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \underbrace{\begin{pmatrix} 4e^{\frac{5t}{i\hbar}} + e^{\frac{10t}{i\hbar}} & -2ie^{\frac{5t}{i\hbar}} + 2ie^{\frac{10t}{i\hbar}} \\ 2ie^{\frac{5t}{i\hbar}} - 2ie^{\frac{10t}{i\hbar}} & e^{\frac{5t}{i\hbar}} + 4e^{\frac{10t}{i\hbar}} \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

אופרטור ההתפתחות $U(t)$

מוציאים החוצה $e^{\frac{7.5t}{i\hbar}}$, ואז מקבלים אותו מקדם ל- t בכל רכיב.

$$\psi(t) = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4e^{\frac{5t}{i\hbar}} + e^{\frac{10t}{i\hbar}} \\ 2ie^{\frac{5t}{i\hbar}} - 2ie^{\frac{10t}{i\hbar}} \end{pmatrix} = \frac{1}{5} e^{\frac{7.5t}{i\hbar}} \begin{pmatrix} 4e^{\frac{-2.5t}{i\hbar}} + e^{\frac{2.5t}{i\hbar}} \\ 2ie^{\frac{-2.5t}{i\hbar}} - 2ie^{\frac{2.5t}{i\hbar}} \end{pmatrix}$$

ניתן לבטל אבר זה משום שמצבים מוגדרים עד כדי קבוע.

נהפוך ל \cos , \sin . עבור $\alpha = \frac{2.5t}{\hbar}$: $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$. $e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$. לכן

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} 4(\cos \alpha + i \sin \alpha) + \cos \alpha - i \sin \alpha \\ 2i(\cos \alpha + i \sin \alpha) - 2i(\cos \alpha - i \sin \alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \cos \frac{2.5t}{\hbar} + 3i \sin \frac{2.5t}{\hbar} \\ -4 \sin \frac{2.5t}{\hbar} \end{pmatrix}$$

ד. נמצא עבור אילו זמנים המערכת תחזור למצב ההתחלתי שלה.

פונקציות \cos , \sin הן פונקציות מחזוריות, לכן $\psi(t) = \psi(0)$ כאשר $\frac{2.5t}{\hbar} = 2n\pi$ או

$$t = \frac{2n\pi\hbar}{2.5}$$

תרגיל 2

$$\hat{H} = \alpha\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

עבור מערכת קוונטית, המילטוניאן ניתן על ידי:

מצא את אופרטור ההתפתחות בזמן של המערכת.

פתרון

בבעיה זו נשתמש בנוסחה (3.3.4) $U(t) = e^{\frac{t}{i\hbar} \hat{H}}$ עבור אופרטור ההתפתחות בזמן, כאשר

נסמן את מטריצה $B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ואז $\hat{H} = \alpha\hbar B$. נציב זה

בנוסחאות:

$$: B^n \text{ נחשב } U(t) = e^{\frac{t}{i\hbar}\hat{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^n \hat{H}^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{i\hbar}\right)^n (\alpha\hbar B)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha t)^n}{n!} B^n$$

$$B^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} := I,$$

$$B^3 = B^2 B = IB = B,$$

$$B^4 = B^3 B = BB = B^2 = I,$$

$$B^5 = B^4 B = IB = B, \dots$$

לכן, על ידי כתיבה מפורשת של הסכום נקבל:

$$\begin{aligned} U(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha t)^n}{n!} B^n = I - i\alpha t B + \frac{(-i\alpha t)^2}{2!} I + \frac{(-i\alpha t)^3}{3!} B + \frac{(-i\alpha t)^4}{4!} I + \frac{(-i\alpha t)^5}{5!} B \dots \\ &= I - i\alpha t B - \frac{(\alpha t)^2}{2!} I + \frac{(\alpha t)^3}{3!} iB + \frac{(\alpha t)^4}{4!} I - \frac{(\alpha t)^5}{5!} iB \dots \\ &= \left(1 - \frac{(\alpha t)^2}{2!} + \frac{(\alpha t)^4}{4!} + \dots\right) I + \left(-\alpha t + \frac{(\alpha t)^3}{3!} - \frac{(\alpha t)^5}{5!} + \dots\right) iB = \cos(\alpha t) I - \sin(\alpha t) iB \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha t) & -i \sin(\alpha t) \\ -i \sin(\alpha t) & \cos(\alpha t) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

באופן כללי:

עבור מצבים יציבים בעלי ערכים עצמיים (רמות אנרגיה) E_1, E_2 , ניקח α כך ש:

$$\alpha = \frac{(E_2 - E_1)t}{2\hbar}$$

אם המערכת בזמן $t=0$ היתה במצב $\psi(0) = c_1\psi_{E_1} + c_2\psi_{E_2}$, כאשר ψ_{E_1}, ψ_{E_2} הינם המצבים היציבים, אזי בזמן t המערכת תהיה במצב:

$$\psi(t) = c_1 e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + c_2 e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} = e^{\frac{E_1 + E_2}{2} \frac{t}{i\hbar}} \left(c_1 e^{\frac{E_1 - E_2}{2} \frac{t}{i\hbar}} + c_2 e^{\frac{E_2 - E_1}{2} \frac{t}{i\hbar}} \right) \approx c_1 e^{-i\alpha} + c_2 e^{i\alpha}$$

תשובה מחזורית עם מחזור T :

$$T = \frac{4\pi\hbar}{E_2 - E_1}$$

$$\leftarrow \text{או} \quad \frac{E_2 - E_1}{2\hbar} T = 2\pi$$

3.4 שינוי בזמן התוחלת של משתנה דינאמי

נתונה מערכת קוונטית עם המילטוניאן \hat{H} , A משתנה דינאמי (גודל פיזיקאלי) ו- $\psi(\vec{r}, t)$ מצב המערכת בזמן t .

נסמן כ- $\langle A \rangle$ את תוחלת של A על $\psi(\vec{r}, t)$. נרצה למצוא את $\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t}$ - שינויי התוחלת בזמן.

טענה

השינוי בזמן של התוחלת של משתנה דינאמי A פרפורציוני לתוחלת הקומוטטור של ההמילטוניאן ואופרטור \hat{A} . כלומר

$$(3.4.1) \quad \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

הוכחה

לפי הנוסחה עבור תוחלת

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} \psi(\vec{r}, t) \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \middle| \hat{A} \psi(\vec{r}, t) \right\rangle + \left\langle \psi(\vec{r}, t) \middle| \hat{A} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \right\rangle \\ & \text{ממשוואת שרדינגר התלויה בזמן} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \end{aligned}$$

לכן

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \middle| \hat{A} \psi(\vec{r}, t) \right\rangle + \left\langle \psi(\vec{r}, t) \middle| \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \right\rangle$$

נוציא את הקבועים (מהאיבר שמאלי של מכפלה פנימית קבוע יוצא עם הצמדה)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \left[- \langle \hat{H} \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} \psi(\vec{r}, t) \rangle + \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \rangle \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[- \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{H} \hat{A} | \psi(\vec{r}, t) \rangle + \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} \hat{H} | \psi(\vec{r}, t) \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A} | \psi(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(\vec{r}, t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \end{aligned}$$

מסקנה:

אם A מדיד יחדיו עם H אזי $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, ולכן התוחלת של A - $\langle A \rangle$ קבועה.

דוגמאות

1. אם $\hat{A} = \hat{H}$ אזי התוחלת של \hat{H} (כלומר אנרגיה ממוצעת) לא משתנה וזה מתאים לחוק שימור אנרגיה.

2. עבור חלקיק חופשי $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ מתקיים

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow \hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p} = \frac{\hat{p}\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^2\hat{p}}{2m} = 0$$

ולכן $\langle p \rangle$ לא משתנה וזה מתאים לחוק שימור התנע – תנע ממוצע לא משתנה.

תרגיל:

מצא את התוחלת של $\langle A \rangle$ במקרה כללי – עבור מצב לא יציב. נפרק מצב התחלתי לסכום של מצבים יציבים שפורשים בסיס: $\psi(\vec{r}, 0) = \sum_j c_j \psi_j(\vec{r}, 0)$. אזי לפי הנוסחה (3.2.1),

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_j c_j \psi_j(\vec{r}, t) = \sum_j c_j e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \psi_j(\vec{r}, 0)$$

$$\langle A \rangle = \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} | \psi(\vec{r}, t) \rangle = \left\langle \sum_j c_j e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \psi_j(\vec{r}, 0) \middle| \hat{A} \middle| \sum_k c_k e^{\frac{E_k t}{i\hbar}} \psi_k(\vec{r}, 0) \right\rangle$$

על מנת לקבל את כל הצירופים לוקחים אינדקס נוסף. אומנם המצבים אורתוגונאליים אבל אופרטור \hat{A} שפועל עליהם יכול להעבירם ממצב אחד לאחר.

$$\langle A \rangle = \sum_{j,k} c_j^* c_k e^{-\frac{E_j t}{i\hbar}} e^{\frac{E_k t}{i\hbar}} \langle \psi_j(\vec{r}, 0) | \hat{A} | \psi_k(\vec{r}, 0) \rangle = \sum_{j,k} c_j^* c_k e^{\frac{(E_k - E_j)t}{i\hbar}} \langle \psi_j(\vec{r}, 0) | \hat{A} | \psi_k(\vec{r}, 0) \rangle$$

אם נסמן תדר של בוהר $w_{j,k} = \left(\frac{E_j - E_k}{\hbar} \right)$, אזי התוחלת מבצעת תנודות עם תדירות זו:

$$\langle A \rangle = \sum_{j,k} a_{jk} e^{i w_{j,k} t}$$

3.5 שיטת הייזנברג לדינאמיקה קוונטית

השוני בין שיטת שרדינגר לבין שיטת הייזנברג הוא :

שיטת שרדינגר : מצב המערכת משתנה עם הזמן והאופרטור שמייצג גדלים פיזיקאליים קבוע בזמן.

שיטת הייזנברג: האופרטורים שמייצגים גדלים פיזיקאליים משתנים בזמן ומצב המערכת קבוע.

שתי ההצגות בדרך כלל מביאות לאותן תוצאות אלא שלעיתים קל יותר לפתור באחת מהן. ישנם מקרים שלא ניתן להפעיל את שיטת שרדינגר כי מקבלים אינסוף, אבל ניתן לקבל תוצאות בשיטת הייזנברג.

לפי שיטת שרדינגר ראינו :

$$\langle A \rangle = \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} | \psi(\vec{r}, t) \rangle = \left\langle e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \psi(\vec{r}, 0) | \hat{A} | e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \psi(\vec{r}, 0) \right\rangle$$

נעביר את החלקים שתלויים בזמן אל האופרטור (הגודל הפיזיקאלי) :

$$= \left\langle \psi(\vec{r}, 0) | e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} | \psi(\vec{r}, 0) \right\rangle$$

זה מביא אותנו להצגה לפי שיטת הייזנברג :

נסמן $A^{(H)}$ - גודל פיזיקאלי התלוי בזמן. אזי הקשר בין הייזנברג ושרדינגר

$$(3.5.1) \quad A^{(H)} = e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} = U^*(t) \hat{A} U(t)$$

עבור הייזנברג – אופרטור המייצג גודל פיזיקאלי משתנה בזמן. לכן, משוואת דינאמיקה

בהצגה זו מתקבלת על ידי גזירה של גודל זה (נשתמש ש \hat{A} קבוע בזמן) :

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

למה אפשר להעביר את \hat{H} לסוף ?

$$\hat{H}e^{\alpha\hat{H}} = \hat{H} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{H})^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k \hat{H}^{k+1}}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{H})^k}{k!} \hat{H} = e^{\alpha\hat{H}} \hat{H}$$

$$(3.5.2) \quad i\hbar \frac{\partial A^{(H)}(t)}{\partial t} = [A^{(H)}(t), \hat{H}]$$

ולסיכום משוואת הדינאמיקה לפי הייזנברג:

לכל משוואה דיפרנציאלית מסדר ראשון צריך להוסיף תנאי התחלה: $A^{(H)}(0)$

תרגיל 1:

מה ניתן לומר על גודל פיסיקאלי A במערכת כאשר $[\hat{A}, \hat{H}] = [A^{(H)}(0), \hat{H}] = 0$? (3.5.3)
 כלומר: כיצד ישתנה אופרטור של גודל פיזיקאלי עם הזמן אם נתון שבזמן $t=0$ הוא מתחלף עם ההמילטוניאן.

פיתרון

היות ש-

$$[A^{(H)}(t), \hat{H}] = \left[e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}}, \hat{H} \right] = e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{H} - \hat{H} e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} = e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} [\hat{A}, \hat{H}] e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} = 0$$

$$, i\hbar \frac{\partial A^{(H)}(t)}{\partial t} = [A^{(H)}(t), \hat{H}] = 0 \quad \text{לפי משוואת הייזנברג}$$

לכן $A^{(H)}(t) = A^{(H)}(0)$ בלתי תלוי בזמן ו- $A^{(H)}(t) = A^{(H)}(0)$.

מסקנה: גודל פיסיקאלי A המקיים (3.5.3) אינו משתנה עם הזמן.

לדוגמא:

עבור חלקיק חופשי עם $\hat{A} = \hat{p}_x$ ראינו - $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ ו- $[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0$. ולכן $\hat{p}_x^{(H)} = \hat{p}_x$.

מסקנה: עבור חלקיק חופשי אופרטור שמייצג רכיב תנע קבוע בזמן. לכן גם כל גודל שקשור לתנע כמו תוחלת של תנע או שינוי של תנע לא ישתנה בזמן.

תרגיל 2:

מצא את אופרטור מיקום $\hat{x}^{(H)}$ בהצגת הייזנברג עבור חלקיק חופשי.

פיתרון

נשתמש במשוואת הדינאמיקה לפי הייזנברג (3.5.2) ו-(3.51). היות ואופרטור התפתחות

$U(t)$ הוא פונקציה של \hat{H} , $U(t)$ מתחלף עם \hat{H} . לכן

$$\begin{aligned} [\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] &= [\hat{x}^{(H)} \hat{H} - \hat{H} \hat{x}^{(H)}] = (U(t) * \hat{x} U(t) \hat{H} - \hat{H} U(t) * \hat{x} U(t)) \\ &= U(t) * [\hat{x} \hat{H} - \hat{H} \hat{x}] U(t) = U(t) * [\hat{x}, \hat{H}] U(t) \end{aligned}$$

עבור חלקיק חופשי $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. נחשב:

$$[\hat{x}, \hat{H}] \psi = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} x \psi'' + \frac{\hbar^2}{2m} (x \psi)'' = \frac{\hbar^2}{m} \psi' = \frac{i\hbar}{m} \frac{d}{dx} \psi = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \psi$$

לכן $[\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$. מתרגיל קודם במקרה זה $[\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x$ ומשוואת הייזנברג

היא

$$i\hbar \frac{\partial \hat{x}^{(H)}(t)}{\partial t} = [\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \quad \text{או} \quad \frac{\partial \hat{x}^{(H)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{m} \hat{p}_x$$

$$\hat{x}^{(H)}(t) = e^{\frac{t}{m} \hat{p}_x} \hat{x}^{(H)}(0) = e^{\frac{t}{m} \hat{p}_x} \hat{x}$$

3.6 משפט ארנפסט

משפט ארנפסט נותן נוסחה לשינוי התוחלת של משתנה דינאמי עם הזמן לפי הצגת שרדינגר, עבור חלקיק בשדה משמר.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

עבור המקרה שלנו- חלקיק בשדה משמר:

אנרגיה פוטנציאלית אנרגיה קינטית

טענה 1: עבור חלקיק בשדה משמר מתקיים

$$(3.6.1) \quad \frac{\partial \hat{x}^{(H)}(t)}{\partial t} = \frac{p_x^{(H)}}{m}$$

הוכחה: שלב אי - חישוב של $[\hat{x}, \hat{H}]$ של רכיב x של מיקום המיוצג ע"י $\hat{A} = \hat{x}$

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{H}]\psi &= \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right] \psi = x \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V(r)\psi \right] \\ &- \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) x\psi + V(r)x\psi \right] = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + xV(r)\psi + \\ &\quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (x\psi)}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (x\psi)}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (x\psi)}{\partial z^2} - V(r)x\psi = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \\ &\frac{-\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2\partial \psi}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{aligned}$$

שלב ב' - לפי (3.5.1):

$$\begin{aligned} [\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] &= [\hat{x}^{(H)}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}^{(H)}] = (U(t)^* \hat{x}U(t)\hat{H} - \hat{H}U(t)^* \hat{x}U(t)) \\ &= U(t)^* [\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}]U(t) = U(t)^* [\hat{x}, \hat{H}]U(t) = U(t)^* \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} U(t) = U(t)^* \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x U(t) = \frac{i\hbar}{m} p_x^{(H)} \end{aligned}$$

שלב ג' - נציב את התוצאות ב-(3.5.2):

$$\frac{\partial \hat{x}^{(H)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}^{(H)}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \frac{i\hbar}{m} p_x^{(H)} = \frac{p_x^{(H)}}{m}$$

מ.ש.ל

כלומר המיקום הממוצע של חלקיק משתנה במשך הזמן כמו

$$\frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$$

היות ש- $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ו- $p_x = mv_x$, נקבל:

$$(3.6.2) \quad \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle = \langle v_x \rangle$$

זה מקביל במכאניקה קלאסית ל- $\frac{dx}{dt} = v_x$ אבל בקוונטים אין מושג של מהירות, כיוון שמדברים על גלים ולא על חלקיקים ולכן מדברים על מיקום הממוצע ומהירות ממוצעת.

טענה 2: עבור חלקיק בשדה משמר מתקיים (3.6.3) $\frac{dp_x^{(H)}}{dt} = F_x^{(H)}$

כאשר $F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$ ו- $F_x^{(H)}$ אופרטור הייזנברג המתאים ל- F_x .

הוכחה:

תחילה נמצא את הקומוטטור: (נשתמש ב- $\hat{p}_x \hat{p}_y = \hat{p}_y \hat{p}_x$) $[\hat{p}_x \hat{p}_y = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} = \hat{p}_x \hat{p}_y$

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{H}] \psi &= \hat{p}_x \hat{H} \psi - \hat{H} \hat{p}_x \psi = \\ &= \hat{p}_x \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} \psi + \hat{p}_x V(r) \psi - \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} \hat{p}_x \psi - V(r) \hat{p}_x \psi = \\ &= \left(\frac{\hat{p}_x^3 + \hat{p}_x \hat{p}_y^2 + \hat{p}_x \hat{p}_z^2 - \hat{p}_x^3 - \hat{p}_y^2 \hat{p}_x - \hat{p}_z^2 \hat{p}_x}{2m} \right) \psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (V(r) \psi) - V(r) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi + \frac{\hbar}{i} V(r) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} V(r) \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi = -\frac{\hbar}{i} F_x \psi = i \hbar F_x \psi \end{aligned}$$

לפי (3.5.1):

$$\begin{aligned} [p_x^{(H)}, \hat{H}] &= [p_x^{(H)} \hat{H} - \hat{H} p_x^{(H)}] = (U(t) * \hat{p}_x U(t) \hat{H} - \hat{H} U(t) * \hat{p}_x U(t)) \\ &= U(t) * [\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x] U(t) = U(t) * [\hat{p}_x, \hat{H}] U(t) = i \hbar F_x^{(H)} \end{aligned}$$

נציב את התוצאות ב-(3.5.2):

$$\frac{\partial p_x^{(H)}}{\partial t} = \frac{1}{i \hbar} [p_x^{(H)}, \hat{H}] = \frac{1}{i \hbar} i \hbar F_x^{(H)} = F_x^{(H)}$$

מ.ש.ל

תוצאה דומה נכונה גם עבור רכיבים y, z של התנע. לכן באופן כללי ניתן לכתוב:

$$(3.6.4) \quad \frac{dp^{(H)}}{dt} = F^{(H)}$$

למעשה מקבלים את החוק השני של ניוטון: $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \langle F \rangle$ ועבור ערך מרכז של

$$(3.6.5) \quad m \frac{d^2 \langle r \rangle}{dt^2} = \langle F \rangle \quad \text{מיקום החלקיק בעזרת (3.6.2) נקבל}$$

3.7 שיטת פיינמן לדינאמיקה הקוונטית

3.7.1 שיטת לגרנג' במכאניקה קלאסית

הפיזיקה צריכה לתאר את התפתחות המערכות בזמן, כלומר מסלולי התפתחות של מצבי המערכות.

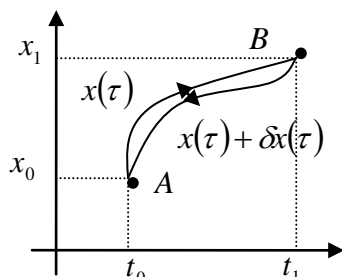
אחד הרעיונות הוא עקרון המילטון לתאר התפתחות לפי מסלולים קצרים ביותר, כאשר אורך המסלול מחושב לפי פונקציה מסוימת. במכאניקה אנליטית משוואת לגרנז' מתארת התפתחות מערכת לפי המסלולים קצרים ביותר לפי פונקצית לגרנז'.

דוגמא: בעיה חד מימדית.

מצב המערכת מתואר על ידי מספר ממשי x . מהו מסלול התפתחות של המערכת בזמן, אם בזמן t_0 מצב המערכת היה x_0 , וידוע כי בזמן t_1 נתון המערכת נמצאת במצב x_1 מסוים?

נסמן את מסלול התפתחות המערכת ע"י $x(\tau)$. מניחים שקיימת פונקציה $L(\dot{x}, x)$, הנקראת **לגרנג'יאן** של המערכת, כך שביטוי:

$$(3.7.1) \quad S(x(\tau)) = \int_{t_0}^t L(\dot{x}(\tau), x(\tau)) d\tau$$



הנקרא **פעולה**, תהיה מינימאלית על מסלול המערכת.

כאשר יש כוחות על המערכת- הקו הישר שמהווה את המרחק הכי קצר בין 2 נקודות מתעקם ולכן מסלול מינימאלי עבור המערכת הוא קו עקום. השיטה הזו טובה יותר במערכת עם אילוצים.

לשיטה זו יש הכללה לתורת הקוונטים.

מגדירים פונקציה מספרית $L(\dot{x}(t), x(t))$ שנותנת משקל עבור כל נקודה במצב המערכת.

לדוגמא: כאשר יש כוח גרביטציה הפונקציה המספרית המתארת את המסלול הקצר ביותר היא פרבולה.

אם ניקח מסלול חדש $x(t) + \delta x(t)$ שמתחיל ומסתיים באותה נקודה כמו המסלול המקורי במרחק $\delta x(t)$ מהמסלול הקודם, אזי התנאי עבור מינימאליות של פעולה $S(x(t))$ על המסלול $x(t)$:

$$|S(x(t) + \delta x(t)) - S(x(t))| < |\delta x(t)|$$

זה אומר שפעולה על מסלולים קרובים למסלול שלנו שווה בערך לפעולה על המסלול או:

$$\frac{\partial S}{\partial \delta} = 0$$

נמצא את השוני בפעולה במסלולים קרובים:

$$S(x(t) + \delta x(t)) - S(x, t) = \int_{t_0}^t [L(\dot{x}(t) + \delta \dot{x}(t), x(t) + \delta x(t)) - L(\dot{x}(t), x(t))] dt$$

לפי פירוק טיילור:

$$L(\dot{x}(t) + \delta \dot{x}(t), x(t) + \delta x(t)) = L(\dot{x}(t), x(t)) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}(t), x(t)) \delta \dot{x}(t) + \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}(t), x(t)) \delta x(t)$$

לכן:

$$S(x(t) + \delta x(t)) - S(x, t) = \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}(t), x(t)) \underbrace{\delta \dot{x}(t)}_{\frac{d}{dt} \delta x(t)} dt + \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}(t), x(t)) \delta x(t) dt =$$

אינטגרציה לפי חלקים

$$= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}(t), x(t)) \delta x(t) \Big|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}(t), x(t)) \delta x(t) dt + \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}(t), x(t)) \delta x(t) dt$$

האיבר הראשון בקצוות הוא אפס כי שינינו את הפונקציה אבל הקצוות לא

$$\delta x(t_0) = \delta x(t_1) = 0$$

↓
A ↓
B

לכן:

$$S(x(t) + \delta x(t)) - S(x, t) = \int_{t_0}^t \left[-\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}(t), x(t)) + \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}(t), x(t)) \right] \delta x(t) dt$$

אנחנו רוצים שהאינטגרל יהיה מסדר קטן מ- $\delta x(t)$ עבור כל $\delta x(t)$. זה יכול להיות רק אם

הביטוי בסוגריים המרובעות מתחת לאינטגרל יתאפס. וזה נותן את המשוואה:

$$(3.7.2) \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}, x) - \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}, x) = 0$$

הנקראת **משוואת לגרנז'.**

הראנו שפונקציה שמקיימת את המסלול הקצר ביותר מקיימת את משוואת לגרנז'.

נמצא נוסחא עבור L :

על מסלול קלאסי של חלקיק בעל מסה m בשדה כוח בעל פוטנציאל $V(x)$ מתקיים חוק

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x}) + \frac{\partial V(x)}{\partial x} = 0 \quad \text{שניתן לכתוב כ-} \quad \frac{d}{dt}(m\dot{x}) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

ניוטון :
 נשווה את שתי המשוואות :

החלק עם נגזרת לפי t נותן :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}, x) = m\dot{x} \quad \rightarrow \quad L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \underbrace{f(x)}_{\text{קבוע אנטגרציה}}$$

והחלק ללא נגזרת לפי t נותן :

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

לכן $f(x) = -V(x)$. ולסיכום, הלגרנגיאן של מערכת קלאסית בשדה משמר שווה :

$$(3.7.3) \quad L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) = \text{אנרגיה קינטית} - \text{אנרגיה פוטנציאלית}$$

3.7.2 הפרופוגטור של פיינמן

מצב של מערכת קוונטית מתואר ע"י וקטור-מצב במרחב המצבים. אנו מניחים שהתפתחות בזמן ניתנת באמצעות העתקה ליניארית. העתקה ליניארית על וקטורים מתוארת ע"י הכפלה במטריצה או (כאשר המרחב המצבים הוא מרחב פונקציות) על ידי אופרטור אינטגרלי. לכן נניח שהתפתחות מערכת קוונטית $\psi(\mathbf{r}, t) = U(t, t_0)\psi(\mathbf{r}, 0)$, המתוארת בעזרת אופרטור התפתחות $U(t, t_0)$ ניתן לכתוב :

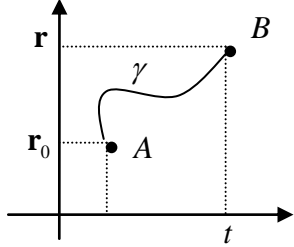
$$(3.7.4) \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \iiint K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) \psi(\mathbf{r}_0, t_0) d\mathbf{r}_0$$

פרופוגטור של פיינמן

הגרעין $K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0)$ מתחת לאינטגרל נקרא פרופוגטור של פיינמן ונותן הסתברות מעבר של המערכת ממצב \mathbf{r}_0 בזמן t_0 למצב \mathbf{r} בזמן t . בשיטת שרדינגר ניתן למצוא פתרון אנליטי עבור הפרופוגטור של פיינמן רק עבור מתנד הרמוני ואטום מימן. בשאר המקרים משתמשים באמצעות שיטתו של פיינמן של אינטגרלים מסלוליים Path integral.

המרשם של פיינמן לחישוב של פרופוגטור בעזרת אינטגרלים מסלוליים:

1. הגדר מסלול $\gamma(\tau)$ המחבר את נקודה $A = (\mathbf{r}_0, t_0)$ לנקודה $B = (\mathbf{r}, t)$ נסמן אוסף כל



מסלולים כאלו Γ ו- $d\gamma$ מסמל מידה על כל המסלולים.

2. חשב פעולה קלאסית $S(\gamma(\tau))$ על המסלול

3. חשב את הפרופוגטור של פיינמן לפי:

$$(3.7.5) \quad K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \int_{\gamma \in \Gamma} e^{i \frac{S(\gamma)}{\hbar}} d\gamma$$

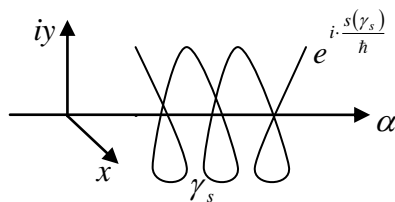
פיינמן גם הניח "חוק דמוקרטי" לבחירת המידה $d\gamma$ על המסלולים: לכל מסלול משקל שווה.

מתמטית לא ניתן להגדיר במדויק מידה על כל מסלולים משום שהאוסף של מסלולים הוא בעל מימד אינסופי.

גבול קלאסי

המימדים במערכות פיסיקאליות קלאסיות הרבה יותר גדולים. לכן $S \gg \hbar$. אנו נראה שבתנאי זה לנוסחת פיינמן (3.7.5) יש מעבר טוב מקוונטי לקלאסי.

יהי γ_0 - מסלול לא קלאסי, זאת אומרת פעולה $S(\gamma_0)$ לא מינימאלית. אם נבחר אוסף רציף של מסלולים $\gamma_s(\tau) = \gamma_0 + \alpha \delta\gamma(\tau)$ מסופררים לפי פרמטר α קרובים למסלול γ_0 . אזי היות ו- S מספר גדול $S(\gamma_s(\tau))$ יהיה שונה מהותית מ- $S(\gamma_0)$.



לכן $e^{i \frac{S(\gamma_s)}{\hbar}}$ יהיה ספירלה צפופה ככל שהפאזה

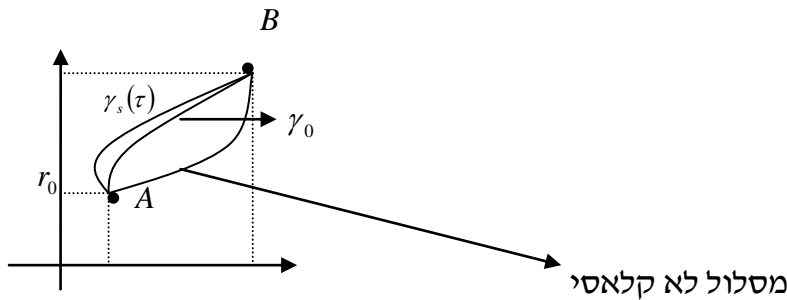
משתנה יותר מהר, כמו שרואים בציור. לכן

האינטגרל ב- (3.7.5) על מסלולים $\gamma_s(\tau)$

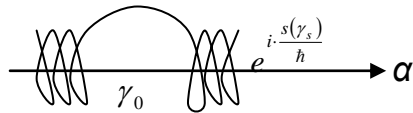
יהיה קרוב לאפס כיוון שרוב המסלולים מבטלים

אחד את השני. לכן, הסתברות למסלול γ_0 כזה שואף לאפס.

אבל אם γ_0 - מסלול קלאסי הפעולה $S(\gamma_s(\tau)) \approx S(\gamma)$. לכן האינטגרל ב- (3.7.5) על מסלולים $\gamma(\tau)$ יהיה שונה מאפס, אין חיסול באינטגרל מסלולי ורק עבור מסלול זה ההסתברות שונה מ-0.



אך ככל שמתרחקים מהמסלול הקלאסי ה- S משתנה באופן משמעותי ולכן הספירלה מאוד צפופה והאינטגרל על כל המסלולים האלו מחסלים אחד את השני.



במקרה הקוונטי מדובר בפעולה S בסדר גודל של \hbar ולכן אין שינוי גדול בפאזה עבור מסלולים שונים, וכל המסלולים תורמים.

3.8 פיתוח משוואת שרדינגר בגישת פיינמן

אם נגיע למשוואת שרדינגר מתוך משוואת פיינמן ניתן לראות שהגישה של פיינמן תואמת את הגישה של שרדינגר, שהוכיחה את עצמה.

נבצע את החישובים במימד אחד. מ (3.7.4) -

$$(3.8.1) \quad \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t | x_0, t_0) \psi(x_0, t_0) dx_0$$

כאשר מ- (3.7.5)

$$(3.8.2) \quad K(x, t | x_0, t_0) = \int_{\gamma(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\gamma)} d\gamma, \quad S(\gamma) = \int_{t_0}^t L(\dot{\gamma}(t), \gamma(t)) dt$$

האינטגרל הוא על כל המסלולים $\gamma(t)$, מסלולים המחברים את נקודה (\mathbf{r}_0, t_0) לנקודה (\mathbf{r}, t) - מידה על כל מסלולים.

על מנת לפתח את משוואת שרדינגר נמצא את הקשר בין $\psi(x, t)$ ו- $\psi(\tilde{x}, t + \varepsilon)$ עבור $0 < \varepsilon \ll 1$.

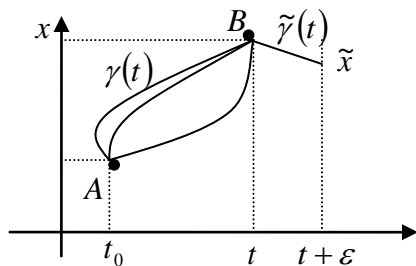
$$(3.8.3) \quad \psi(\tilde{x}, t + \varepsilon) = \int K(\tilde{x}, t + \varepsilon | x, t) \psi(x, t) dx$$

מנוסחה (3.8.1) נובע ש-

$$(3.8.4) \quad K(\tilde{x}, t + \varepsilon | x, t) = \int_{\gamma(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\tilde{\gamma})} d\tilde{\gamma}$$

כאשר

היות ו- $\varepsilon \ll 1$ קטן מאוד אנו יכולים להניח שהמסלול $\tilde{\gamma}(t)$ מ- (x, t) ל- $(\tilde{x}, t + \varepsilon)$ הוא קו ישר.



מניחים שמדובר בהתפתחות בשדה משמר

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x)$$

שהלגרנגיאה שלו

בקטע $[t, t + \varepsilon]$ המהירות = שיפוע הישר $\gamma(t)$ הוא $\dot{x} = \frac{\tilde{x} - x}{\varepsilon}$ וניתן לקחת את

$$L(\tilde{\gamma}) = \frac{m}{2} \left(\frac{\tilde{x} - x}{\varepsilon} \right)^2 - V\left(\frac{x + \tilde{x}}{2} \right)$$

לכן: הפוטנציאל עבור הנקודה המרכזית בקטע $[x, \tilde{x}]$.

נגדיר משתנה חדש: $\eta = x - \tilde{x}$

$$L = \frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2} - V\left(\tilde{x} + \frac{\eta}{2} \right)$$

במשתנה זה הלגרנגיאה שווה:

$$S(\tilde{\gamma}) = \int_t^{t+\varepsilon} \left[\frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2} - V\left(\tilde{x} + \frac{\eta}{2} \right) \right] dt = \frac{m\eta^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V\left(\tilde{x} + \frac{\eta}{2} \right)$$

לכן מ-(3.8.2) נקבל:

נחשב את הפרופגטור בקטע $[t, t + \varepsilon]$ לפי (3.8.4) ובהתחשב שבמקרה זה כל המסלולים קרובים לקטע ישר-

$$(3.8.5) \quad K(\tilde{x}, t + \varepsilon | x, t) = \int_{\gamma(t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\tilde{\gamma})} d\tilde{\gamma} = \underbrace{\frac{1}{A}}_{\substack{\text{גורם} \\ \text{נרמול}}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m\eta^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V\left(\tilde{x} + \frac{\eta}{2} \right) \right)}$$

כאשר המידה על כל המסלולים הקרובים למסלול ישר מגדירה את הקבוע A-

נבטא את $\psi(\tilde{x}, t + \varepsilon)$ לפי \tilde{x} ו- η

$$(3.8.6) \quad \psi(\tilde{x}, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x} + \frac{\eta}{2})} \psi(\tilde{x} + \eta) d\eta$$

על מנת לקבל את משוואת שרדינגר אנו נמצא קירוב של משוואה (3.8.6), כאשר $\varepsilon \rightarrow 0$.

היות והאינטגרל על אקספוננטה $e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}}$ כשהפאזה משתנה משמעותית שווה לאפס. היות והאקספוננטה פרבולה השינוי שלה קטן רק כאשר η באזור אפס, רק אז יש תרומה משמעותית לאינטגרל. אנו נניח שהפאזה באקספוננטה קטנה מ-1

$$\frac{m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon} < 1 \quad \text{כלומר} \quad \rightarrow |\eta| < \sqrt{\frac{2 \hbar \varepsilon}{m}} \approx \sqrt{\varepsilon}$$

בכדי לפתור את האינטגרל נפתח טור טיילור סביב $\varepsilon = 0$ עד סדר ראשון ב- ε . כיוון ש- η קטן ניתן לקחת פיתוח טיילור סביב $\eta = 0$ עד η^2 (כיוון ש- η בסדר גודל של $\sqrt{\varepsilon}$).

מ-(3.8.6) נקבל:

$$(3.8.7) \quad \psi(\tilde{x}, t) + \frac{\partial \psi}{\partial t} \varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x})} \left[\psi(\tilde{x}, t) + \frac{\partial \psi}{\partial x} \eta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \eta^2 \right] d\eta$$

את הערך של A מוצאים כאשר עוברים לגבול $\eta \rightarrow 0, \varepsilon \rightarrow 0$. היות ו- η^2 / ε אינו שואף ל-0 נקבל:

$$\psi(\tilde{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \psi(\tilde{x}, t) d\eta = \psi(\tilde{x}, t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} d\eta$$

$$(3.8.8) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} d\eta = 1 \quad \text{על מנת שהשוויון יתקיים - נדרש:}$$

הביטוי מתחת האינטגרל דומה לגאוסיאן $e^{\frac{-\eta^2}{2\sigma^2}} = e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}}$ עם שונות מרוכבת $\sigma^2 = \frac{i \hbar \varepsilon}{m}$.

למעשה האינטגרל הזה באמת לא מתכנס וצריך לקחת אינטגרל בתוך קטע $[-m, m]$ כאשר $m \rightarrow \infty$.

$$e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x})} = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x}) \quad : \quad e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x})}$$

פירוק טיילור עבור

נציב זאת במשוואה (3.8.7) ונשתמש באיברים מסדר גודל גדולים או שווים ל ε או η^2 .

למשל, את האיברים $\int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x}) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \eta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \eta^2 \right) \right] d\eta$ לא צריך לקחת בחשבון משום

שיש הכפלה של ε ב- η שזה קטן יותר ממה שאנו צריכים. מההצבה נקבל-

$$\psi(\tilde{x}, t) + \frac{\partial \psi}{\partial t} \varepsilon = \psi(\tilde{x}, t) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\tilde{x}) \psi(\tilde{x}, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} d\eta}_{=1} + \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \eta d\eta}_{\text{א-נוני=0}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \eta^2 d\eta$$

האינטגרל $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{\frac{i m \eta^2}{\hbar 2 \varepsilon}} \eta^2 d\eta$ שווה לשונות של "הגאוסיאן" מ (3.8.8) ששווה ל-

$\sigma^2 = \frac{i\hbar\varepsilon}{m}$. לאחר צמצום ב- $\psi(\tilde{x}, t)$, חילוק המשוואה ב- ε ולקיחת גבול $\eta \rightarrow 0$ שנותן

$\tilde{x} \rightarrow x$ נקבל:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V(x) \psi(x, t) + \frac{1}{2} \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi$$

קיבלנו את משוואת שרדינגר עבור התפתחות בזמן.

שיטת פיינמן איננה נותנת פתרון עבור מקרים קוונטיים שאין להם דימוי קלאסי. אך בשיטה זו יותר פשוט לנחש את הלגראנזיאן מאשר ההמילטוניאן ולכן שיטה זו יותר נפוצה משיטת משרדינגר.

3.9 חישוב פרופגטור של פיינמן בשדה בעל פוטנציאל $V = a + bx + cx^2 + dx + ex\dot{x}$

נמצא כעת פרופגטור של פיינמן עבור חלקיק קוונטי בשדה משמר בעל פוטנציאל $V = a + bx + cx^2 + dx + ex\dot{x}$. פתרון זה כולל חלקיק חופשי, שדה קבוע, מתנד הרמוני ומקרים אחרים.

נפרק את המסלול $\gamma(\tau)$ המחבר את נקודה $A = (\mathbf{r}_0, t_0)$ לנקודה $B = (\mathbf{r}, t)$ בצורה

$$(3.9.1) \quad \gamma(\tau) = x_c(\tau) + y(\tau)$$

כאשר $x_c(\tau)$ מסמן מסלול הקלאסי בין נקודות $A = (\mathbf{r}_0, t_0)$ ו- $B = (\mathbf{r}, t)$ ו- $y(\tau)$ מסלול

כלשהוא המקיים $y(t_0) = y(t) = 0$.

לפי ההגדרה של לגרנגייאן (10.1.3), הלגרנגייאן של חלקיק בשדה משמר יהיה

$$(3.9.2) \quad L(\gamma(\tau), \dot{\gamma}(\tau)) = L(x_c(\tau) + y(\tau), \dot{x}_c(\tau) + \dot{y}(\tau)) = \frac{m(\dot{x}_c(\tau) + \dot{y}(\tau))^2}{2} - a - b(x_c(\tau) + y(\tau)) - c(x_c(\tau) + y(\tau))^2 - d(\dot{x}_c(\tau) + \dot{y}(\tau)) - e(x_c(\tau) + y(\tau))(\dot{x}_c(\tau) + \dot{y}(\tau)) =$$

ע"י פתיחה וכינוס איברים נקבל:

$$L(x_c(\tau), \dot{x}_c(\tau)) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{y} + \frac{\partial L}{\partial x} y + \frac{m\dot{y}(\tau)^2}{2} - cy(\tau)^2 - ey(\tau)\dot{y}(\tau)$$

לכן הפעולה תהיה

$$S(\gamma(\tau)) = \int_{t_0}^t L(\gamma(\tau), \dot{\gamma}(\tau)) d\tau = \int_{t_0}^t L(x_c(\tau), \dot{x}_c(\tau)) d\tau + \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{y}(\tau) + \frac{\partial L}{\partial x} y(\tau) \right) d\tau + \int_{t_0}^t \left(\frac{m\dot{y}(\tau)^2}{2} - cy(\tau)^2 - ey(\tau)\dot{y}(\tau) \right) d\tau$$

לפי משוואת לגרנגי (3.7.2) האינטגרל השני מתאפס. בנוסף התנאי $y(t_0) = y(t) = 0$ מאפס את הגורם השני באינטגרל האחרון.

$$\text{לכן } S(\gamma(\tau)) = S(x_c(\tau)) + \int_{t_0}^t \left(\frac{m\dot{y}(\tau)^2}{2} - cy(\tau)^2 - ey(\tau)\dot{y}(\tau) \right) d\tau$$

לפי נוסחה (3.7.5) פרופגטור של פיינמן יהיה:

$$K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \int_{\gamma \in \Gamma} e^{i \frac{s(\gamma)}{\hbar}} d\gamma = e^{i \frac{s(x_c)}{\hbar}} \int_{\gamma \in \Gamma} \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left(\frac{m\dot{y}(\tau)^2}{2} - cy(\tau)^2 - ey(\tau)\dot{y}(\tau) \right) d\tau dy$$

$$(3.9.3) \quad A(t) = \int_{\gamma \in \Gamma} \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \left(\frac{m\dot{y}(\tau)^2}{2} - cy(\tau)^2 - ey(\tau)\dot{y}(\tau) \right) d\tau dy : \text{ אם נסמן}$$

אזי

$$(3.9.4) \quad K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = e^{i \frac{s(x_c)}{\hbar}} A(t)$$

כדי למצוא את $A(t)$ נשתמש ב-(3.7.4) לחשב את $\psi(x, t)$ לפי $\psi(x_0, t_0)$ מנורמל נתון ובדיקת תנאי נרמול של $\psi(x, t)$.

ננסה ראשית $\psi(x_0, t_0) = \delta(x_0 - a)$ עבור מספר a כלשהו. לפי (3.7.4) ו-(3.9.4) נקבל

$$\psi(x, t) = K(x, t | a, t_0) = e^{i \frac{s(x_c)}{\hbar}} A(t)$$

נחשב נרמול של $\psi(x, t)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = A(t)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = A(t)^2 \infty = 1 \Rightarrow A(t) = 0$$

זה לא עובד. המצב התחלתי $\psi(x_0, t_0) = \delta(x_0 - a)$ הוא לא מצב אמיתי בתורת הקוונטים, מצב זה הוא גבול של מצבים אמיתיים. בהרבה בעיות ניתן לעבור לגבול ולהשתמש בתוצאות גם למצבים גבוליים. אבל בשיטת פיינמן זה לא עובד. לכן חייבים לבחור מצב

התחלתי $\psi(x_0, t_0)$ מצב אמיתי מנורמל כמו למשל $\psi(x_0, t_0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{(x_0-a)^2}{4\sigma^2}}$ לפי (3.7.4) ו-

(3.9.4) לחשב את $\psi(x,t)$ ומנירמול

$$(3.9.5) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = A(t)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{s(x_0)}{\hbar}} \psi(x_0, t_0) dx_0 \right|^2 dx = 1$$

נקבל את הערך של $A(t)$.

דוגמה חלקיק חופשי $V = 0$

מסלול קלאסי המחבר את נקודה $A = (x_0, t_0)$ לנקודה $B = (x, t)$ הוא

$$L(x_c(\tau), \dot{x}_c(\tau)) = \frac{m\dot{x}_c(\tau)^2}{2} = \frac{m}{2} \left(\frac{x-x_0}{t-t_0} \right)^2 \quad \text{לכן } x_c(\tau) = x_0 + \frac{x-x_0}{t-t_0}(\tau-t_0)$$

$$S(x_c(\tau)) = \int_{t_0}^t L(x_c(\tau), \dot{x}_c(\tau)) d\tau = \frac{m}{2} \frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}$$

לפי (10.4.4) פרופגטור של פיינמן במקרה זה יהיה:

$$(3.9.6) \quad K(x, t | x_0, t_0) = A(t) e^{i\frac{m(x-x_0)^2}{\hbar 2(t-t_0)}} = A(t) e^{ib(x-x_0)^2}$$

$$b = \frac{m}{\hbar 2(t-t_0)} \quad \text{כאשר } b \text{ מסמן}$$

על מנת למצוא את $A(t)$ נחשב $\psi(x,t)$ כאשר $\psi(x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x_0-a)^2}{4\sigma^2}}$ מצב מנורמל.

לפי (3.7.4) ו-(3.9.6) -

$$\psi(x,t) = A(t) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{s(x_0)}{\hbar}} \psi(x_0, t_0) dx_0 = A(t) \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{b(x-x_0)^2}{\hbar}} e^{-\frac{(x_0-a)^2}{4\sigma^2}} dx_0$$

על מנת לחשב אינטגרל אחרון נציב $y = \frac{(x_0 - a)}{2\sigma}$ ונשתמש בנוסחה מפונקציות מרוכבות

$$(3.9.7) \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \alpha \in C, \quad \operatorname{Re} \alpha \geq 0$$

חישוב זה נותן

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \cdot b(x-x_0)^2} e^{-\frac{(x_0-a)^2}{4\sigma^2}} dx_0 &= 2\sigma \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \cdot b(x-a-2\sigma y)^2} e^{-y^2} dy \\ &= 2\sigma \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-y^2 + ib4\sigma^2 y^2 - 4ib\sigma y(x-a) + ib(x-a)^2\right) dy \\ &= 2\sigma e^{ib(x-a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(- (1-ib4\sigma^2) \left(y - \frac{4ib\sigma(x-a)}{1-ib4\sigma^2} y\right)\right) dy \\ &= 2\sigma e^{ib(x-a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(- (1-ib4\sigma^2) \left(y - \frac{2ib\sigma(x-a)}{1-ib4\sigma^2}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{4b^2\sigma^2(x-a)^2}{1-ib4\sigma^2}\right) dy \\ &= 2\sigma e^{ib(x-a)^2} \exp\left(-\frac{4b^2\sigma^2(x-a)^2}{1-ib4\sigma^2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{1-ib4\sigma^2}} \end{aligned}$$

לכן

$$|\psi(x, t)| = |A(t)| \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\sigma}} 2\sigma \exp\left(-\operatorname{Re}\left(\frac{4b^2\sigma^2(x-a)^2}{1+16b^2\sigma^4}\right)\right) \sqrt{\frac{\pi}{\sqrt{1+16b^2\sigma^4}}}$$

-1

$$|\psi(x, t)|^2 = |A(t)|^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} 4\sigma^2 \exp\left(-\frac{8b^2\sigma^2(x-a)^2}{1+16b^2\sigma^4}\right) \frac{\pi}{\sqrt{1+16b^2\sigma^4}}$$

מכאן

$$.1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = |A(t)|^2 \frac{4\sigma}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi(1+16b^2\sigma^4)}{8b^2\sigma^2}} \frac{\pi}{\sqrt{1+16b^2\sigma^4}} = |A(t)|^2 \frac{\pi}{b}$$

לכן

$$(3.9.8) \quad |A(t)| = \sqrt{\frac{b}{\pi}} = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\pi(t-t_0)}}$$

לפי (10.4.4) הפרופוגטור של חלקיק חופשי יהיה

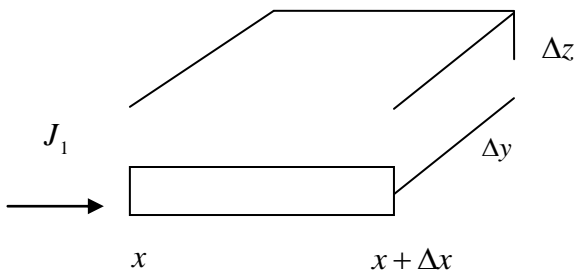
$$(3.9.9) \quad K(x, t | x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi(t-t_0)}} e^{i \cdot \frac{m(x-x_0)^2}{\hbar 2(t-t_0)}}$$

תרגיל בית. חשב את הפרופוגטור עבור שדה קבוע.

פרק 4 : בעיות חד ממידיות, פוטנציאלים קבועים בקטעים.

4.1 זרם הסתברות

כשמצב תלוי בזמן, ההסתברות למצאו במקום מסוים משתנה. כדי להגדיר את זרם ההסתברות עבור חלקיק במצב $|\psi\rangle$ נתאר אותו על ידי זרם באלומת חלקיקים שכולם נמצאים במצב $|\psi\rangle$. עבור אלומה ניתן לתת ל- $|\psi(x)|^2$ משמעות של צפיפות חלקיקים באלומה בנקודה x . נניח שאלומת חלקיקים מתקדמת בכיוון החיובי של ציר x . J_1 - זרימה של חלקיקים בכיוון x ביחידת שטח.



$J_1 dydz$ - כמות החלקיקים העוברת דרך המלבן $\Delta y \Delta z$ ביחידת זמן.

נחשב שינוי כמות החלקיקים בתיבה בזמן מ- t עד $t + \Delta t$

$$J_1(x) \Delta y \Delta z \Delta t - J_1(x + \Delta x) \Delta y \Delta z \Delta t = - \frac{\partial J_1}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$$

↓
↓
↓

נכנס
יוצא
לפי הודרה

ניתן לחשב זאת גם על פי צפיפות החלקיקים.

$$\underbrace{\rho(t+\Delta t)\Delta x\Delta y\Delta z}_{\text{כמות החלקיקים בהחלה}} - \underbrace{\rho(t)\Delta x\Delta y\Delta z}_{\text{כמות החלקיקים בסוף}} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x\Delta y\Delta z \Delta t$$

גודל התיבה

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J_1}{\partial x} \rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_1}{\partial x} = 0} \quad \text{משוואת הרציפות}$$

אם יש זרימה בכל המימדים, כלומר $J(x, y, z)$, אזי עבור זרימה כללית:

$$J = J_1 dydz + J_2 dzdx + J_3 dxdy$$

כשגוזרים, גוזרים לפי המשתנה החסר ואז משוואת הרציפות:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \quad \text{או} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_1}{\partial x} + \frac{\partial J_2}{\partial y} + \frac{\partial J_3}{\partial z} = 0$$

div

ניתן לתת לזה משמעות גם עבור חלקיק בודד:

עבור חלקיק בודד: $\rho = |\psi|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$ צפיפות הסתברות המיקום. לכן

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| \frac{\partial}{\partial t} \psi \right\rangle$$

לפי משוואת שרדינגר:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi$$

ממשוואת רציפות:

$$\nabla \cdot J = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \overline{(\hat{H}\psi)} - \frac{1}{i\hbar} (\hat{H}\psi)_{\overline{}} = \frac{1}{i\hbar} \left[\overline{\hat{H}\psi} \cdot \psi - (\hat{H}\psi)_{\overline{}} \right]$$

צמוד מרוכב של אופרטור לינארי צמוד לעצמו שווה להפעלת האופרטור על הצמוד:

$$\nabla \cdot J = -\frac{1}{i\hbar} \overline{(\hat{H}\psi)} - \frac{1}{i\hbar} (\hat{H}\psi)_{\overline{}} = \frac{1}{i\hbar} \left[\overline{(\hat{H}\psi)} - (\hat{H}\psi)_{\overline{}} \right]$$

נניח שחלקיק נמצא בשדה משמר, זאת אומרת:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

נציב את זה במקום \hat{H} :

$$\nabla \cdot J = \frac{1}{i\hbar} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \bar{\psi} \right) \psi + V(r) \bar{\psi} \psi - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) \bar{\psi} - V(r) \psi \bar{\psi} \right] = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla^2 \psi) \bar{\psi} - (\nabla^2 \bar{\psi}) \psi]$$

היות

$$\nabla \cdot ((\nabla \psi) \bar{\psi}) = (\nabla^2 \psi) \bar{\psi} + (\nabla \psi) \cdot (\nabla \bar{\psi})$$

נקבל

$$(\nabla^2 \psi) \bar{\psi} - (\nabla^2 \bar{\psi}) \psi = (\nabla^2 \psi) \bar{\psi} + (\nabla \psi) \cdot (\nabla \bar{\psi}) - (\nabla^2 \bar{\psi}) \psi - (\nabla \bar{\psi}) \cdot (\nabla \psi) = \nabla \cdot [(\nabla \psi) \bar{\psi} - (\nabla \bar{\psi}) \psi]$$

מכאן :

$$(4.1.1) \quad J = \frac{\hbar}{2im} [(\nabla \psi) \bar{\psi} - (\nabla \bar{\psi}) \psi]$$

תרגיל:

אלומת חלקיקים מתוארת על ידי : $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-wt)}$, כאשר $|\psi|^2$ מתאר את צפיפות כמות החלקיקים, מצא את J .

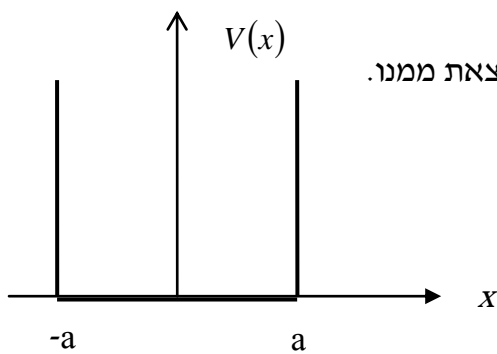
$$\begin{aligned} J &= \frac{\hbar}{2im} [(\nabla \psi) \bar{\psi} - (\nabla \bar{\psi}) \psi] = \frac{\hbar}{2im} \left[\frac{\partial}{\partial x} (Ae^{i(kx-wt)}) \bar{A}e^{-i(kx-wt)} - \frac{\partial}{\partial x} (\bar{A}e^{-i(kx-wt)}) Ae^{i(kx-wt)} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2im} (Aike^{i(kx-wt)} \bar{A}e^{-i(kx-wt)} + \bar{A}ike^{-i(kx-wt)} Ae^{i(kx-wt)}) = \frac{\hbar}{2im} (ikA\bar{A} + ik\bar{A}A) \\ &= \frac{\hbar}{2im} (ik|A|^2 + ik|A|^2) = \frac{\hbar}{m} (k|A|^2) \end{aligned}$$

לכן :

$$(4.1.2) \quad J = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

כלומר זרם הסתברות (צפיפות זרם ליחידת זמן ושטח) עבור חבילת גלים פשוטה תלוי ב: אורך גל $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$, בעוצמת אלומה מקורית $(|A|^2)$ ובמסה של החלקיק, לפאזה אין משמעות.

4.2 בור פוטנציאליים אינסופי, חד מימדי



החלקיק יכול להיות בקטע מסוים (בבור) ולא יכול לצאת ממנו.

בור פוטנציאלי ←

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a \leq x \leq a \\ \infty & \text{אחרת} \end{cases}$$

פוטנציאלי

ל

נמצא מהם המצבים היציבים במערכת זו:

בקטע $[-a, a]$ משוואת שרדינגר בלתי תלויה בזמן: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$ שווה ל-

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

מחוץ לקטע $[-a, a]$, $|\psi(x)|^2 = 0$,

ההסתברות למצוא את החלקיק מחוץ לבור $\psi(x) = 0$

נניח $\psi(x)$ רציפה זאת אומרת: (1) $\psi(-a) = 0$ (2) $\psi(a) = 0$

עבור $E < 0$: בקטע $[-a, a]$ $\psi(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx}$ עבור $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$, ומתנאי רציפות:

$$\left. \begin{aligned} \psi(a) = 0 &\rightarrow C_1 e^{ka} + C_2 e^{-ka} = 0 \\ \psi(-a) = 0 &\rightarrow C_1 e^{-ka} + C_2 e^{ka} = 0 \end{aligned} \right\} \det = e^{2ka} - e^{-2ka} \neq 0$$

$$C_1 = C_2 = 0 \quad \leftarrow$$

עבור $E = 0$:

$$\left. \begin{aligned} \psi'' = 0 &\rightarrow \psi(x) = C_1 x + C_2 \\ \psi(a) = 0 &\rightarrow C_1 a + C_2 = 0 \\ \psi(-a) = 0 &\rightarrow -C_1 a + C_2 = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_1 = C_2 = 0$$

עבור $E > 0$ בקטע $[-a, a]$

$\psi(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx)$ עבור $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, ומתנאי רציפות:

$$\psi(a) = C_1 \sin(ka) + C_2 \cos(ka) = 0, \quad \psi(-a) = -C_1 \sin(ka) + C_2 \cos(ka) = 0$$

לכן ישנן שתי אפשרויות:

$c_2 = 0, c_1 \neq 0$ \downarrow $c_1 \sin(ka) = 0$ $\rightarrow \sin(ka) = 0$ $ka = \pi n$ $k_1 = \frac{\pi 2n}{2a}$ $\psi_{2n} = \sin\left(\frac{\pi 2n}{2a} x\right)$	$c_1 = 0, c_2 \neq 0$ \downarrow $c_2 \cos(ka) = 0$ $\rightarrow \cos(ka) = 0$ $ka = \frac{\pi}{2} + \pi n = \pi \left(\frac{2n+1}{2}\right)$ $k_2 = \frac{\pi(2n+1)}{2a}$ $\psi_{2n+1} = \cos\left(\frac{\pi(2n+1)}{2a} x\right)$
--	--

מכאן, עבור שני המקרים $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\pi n}{2a}$ עבור מספר שלם אי-שלילי n . לכן

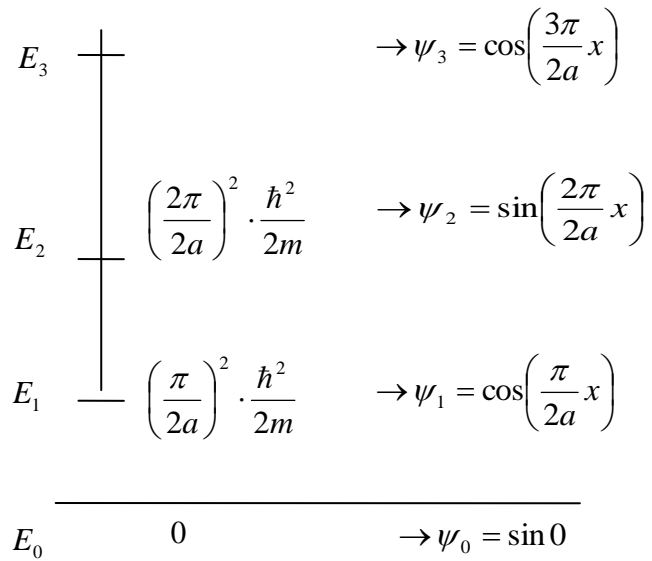
$$(4.2.1) \quad E_n = \left(\frac{\pi n}{2a}\right)^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$$

כאשר $2a$ מסמל את רוחב הבור.

רמות אנרגיה

מצבים יציבים בבור

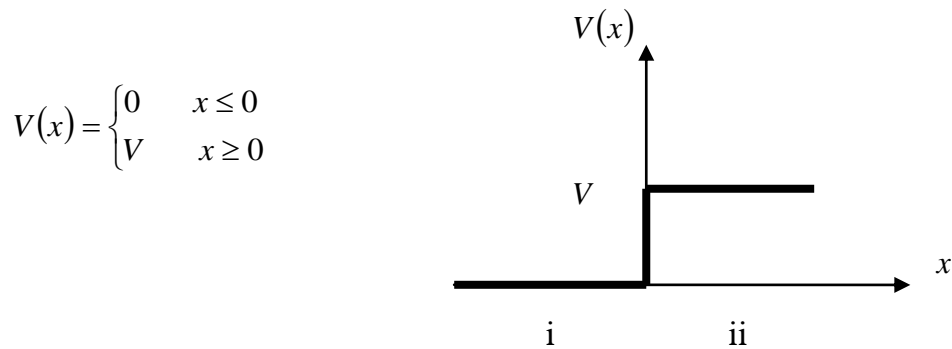
$$- 103 - \left(\frac{3\pi}{2a}\right)^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$$



מצבים יציבים עבור n זוגי הם \sin ועבור n אי-זוגי הם \cos , כאשר אנרגיות פרופורציוניות ל n^2 .

3.4 מדרגת פוטנציאל

האנרגיה הפוטנציאלית בצורת מדרגה.



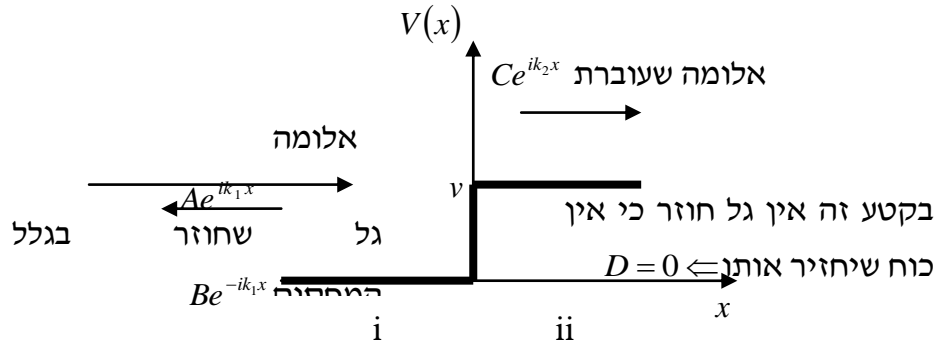
מקרה א' $0 < V < E$ (אנרגיית החלקיקים גדולה מהאנרגיה הפוטנציאלית של

מדרגה)

פתרונות הקטעים לפי התרגיל הקודם (פתרון של משוואת שרדינגר)

$$\begin{aligned}
 i \quad x \leq 0 \quad \psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & k_1 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\
 ii \quad x \geq 0 \quad \psi_2(x) &= Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & k_2 &= \frac{\sqrt{(E-V)2m}}{\hbar}
 \end{aligned}$$

לפי הפתרון: ישנם 2 גלים: גל שמתקדם בכיוון ציר x וגל שחוזר.



תנאי שפה

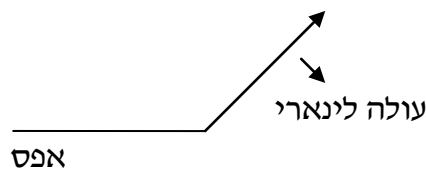
משוואת שרדינגר מחייבת שפונקציית $\psi(x)$ תהיה רציפה ובעלת נגזרת רציפה.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi \quad \text{בצורה הכוללת:}$$

$$\psi'' = -\frac{\hbar^2}{2m}(E-V)\psi \quad \text{נבודד את } \psi'' :$$

מאחר ו- ψ'' תלויה ב- $V(x)$ שאינה רציפה אזי היא אינה רציפה, אבל האינטגרל שלה ψ'

הינה פונקציה רציפה:



אם כן שני תנאי שפה:

$$(1) \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$(2) \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

נציב את תנאי השפה בפתרון

$$\psi_1(0) = Ae^{ik_1 \cdot 0} + Be^{-ik_1 \cdot 0} = A + B$$

$$\psi_2(0) = Ce^{ik_1 \cdot 0} + De^{-ik_1 \cdot 0} = C + D = C$$

$$(1) \rightarrow A + B = C$$

$$(2) ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C$$

$$ik_1 A - ik_1 B = ik_2 (A + B)$$

$$(k_1 - k_2)A = (k_1 + k_2)B$$

נציב (1) ב-(2)

נצמצם ב-i

וממשוואה (1):

$$B = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) A \quad \text{לכן}$$

$$C = A + B = \left(1 + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) A = \frac{2k_1 A}{k_1 + k_2}$$

מקדם החזרה של זרימה

מקדם חזרה מוגדר אל ידי:

$$R = \frac{\text{זרימה של גל מוחזר}}{\text{זרימה של גל נכנס}}$$

נשתמש בנוסחה (4.1.2) שמצאנו לזרימת אלומת גלים פשוטה:

$$R = \frac{\frac{\hbar k_1}{2m} |B|^2}{\frac{\hbar k_1}{2m} |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \frac{|A|^2}{|A|^2} = \left| \frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1} \right|^2$$

מקדם העברה של זרימה

מקדם העברה מוגדר על ידי:

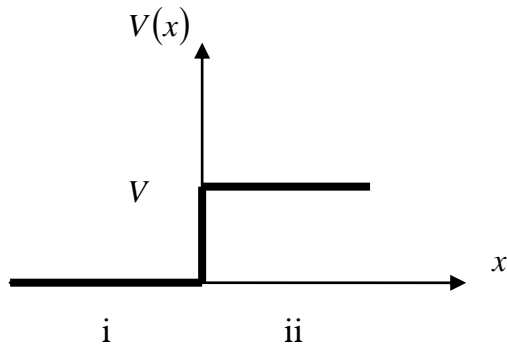
$$T = \frac{\text{זרימה של גל שעבר}}{\text{זרימה של גל נכנס}}$$

לכן:

$$T = \frac{\frac{\hbar k_2}{2m} |C|^2}{\frac{\hbar k_1}{2m} |A|^2} = \frac{\frac{k_2}{k_1} \left| \frac{2k_1}{1 + k_2/k_1} \right|^2 |A|^2}{|A|^2} = \frac{k_2 (2k_1)^2}{k_1 (1 + k_2/k_1)^2}$$

← מקדם ההחזרה של הזרימה + מקדם

על ידי בדיקה ניתן לראות ש-
ההעברה של הזרימה = 1.



מקרה ב' $0 < E < V$

חלק i:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \leftarrow \begin{cases} V = 0 \\ E > 0 \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

התחום הראשון לא השתנה.

חלק ii:

התחום השני: מבחינה קלאסית זה בלתי אפשרי שחלקיק יעבור את מחסום הפוטנציאל כי האנרגיה שלו נמוכה מהאנרגיה הפוטנציאלית.

$$E_k = E - E_p$$

$$E_p > E \quad \text{וקרי} \downarrow$$

$$E_k < 0$$

זה לא הגיוני, הרי תמיד $E_k > 0$. אבל במערכת קוונטית ישנו פתרון למשוואת שרדינגר

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi$$

$$\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$$

$$|Ce^{k_2x}|^2 \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \infty$$

$$C = 0$$

צפיפות הסתברות זה מספר סופי ולכן מוכרח ←

נמצא תנאי שפה :

$$\begin{aligned} (1) \quad \psi_1(0) &= \psi_2(0) \Rightarrow A + B = D \\ (2) \quad \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \Rightarrow ik_1A - ik_1B = k_2D \\ &\rightarrow ik_1A - ik_1B = -k_2A - k_2B \\ &\rightarrow (ik_1 + k_2)A = (ik_1 - k_2)B \end{aligned}$$

$$B = \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} A$$

$$R = \frac{\text{זרימה של גל מוחזר}}{\text{זרימה של גל נכנס}} = \frac{\frac{\hbar k_1}{2m} |B|^2}{\frac{\hbar k_1}{2m} |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} \right|^2 = \frac{k_2^2 + k_1^2}{k_2^2 + k_1^2} = 1$$

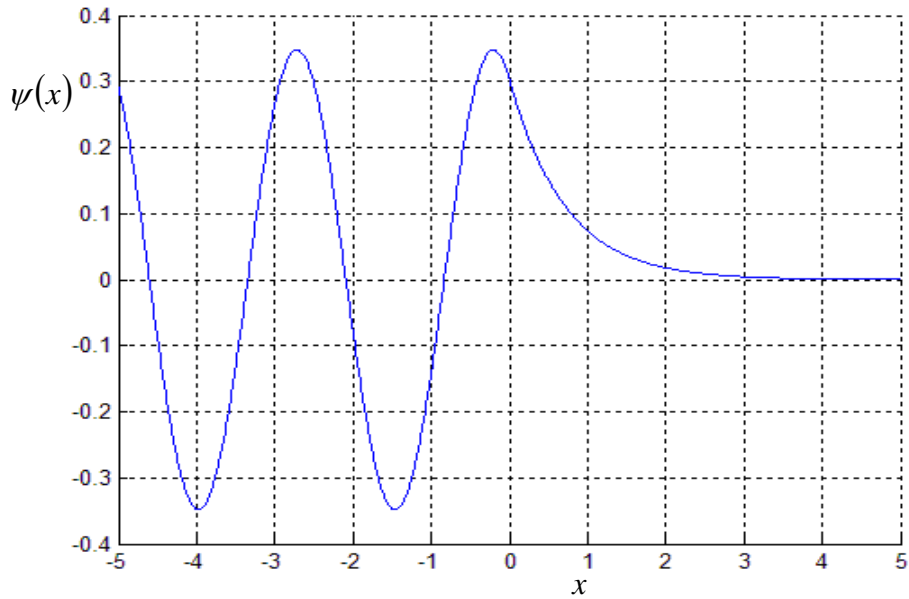
לפי זה מוכרח ש: $T = 0$ (כיוון ש- $R + T = 1$)

נחפש מקדם העברה של הזרימה :

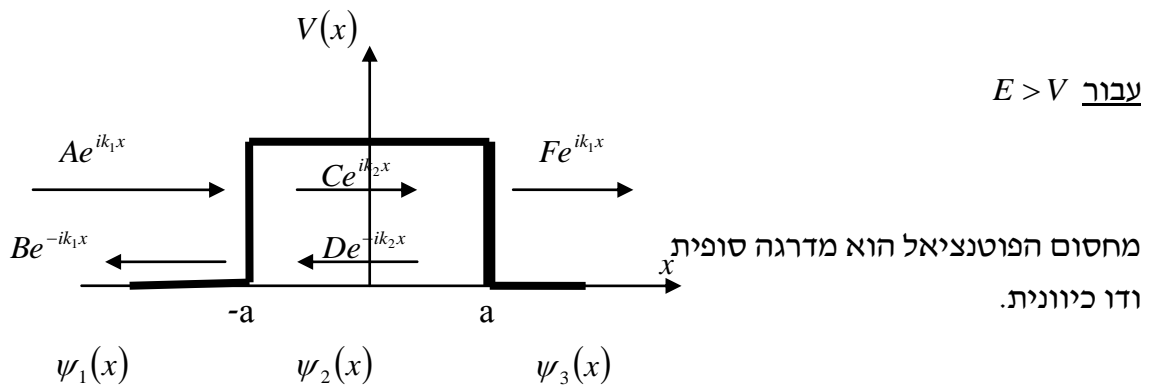
$$D = A + \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} A = \frac{2ik_1}{ik_1 - k_2} A \rightarrow \text{לא אפס}$$

הסיבה לסתירה בתוצאות: הזרימה שמתאימה לגל De^{-k_2x} אכן שווה ל-0,

ולכן $T = 0$ למרות ש- $D \neq 0$. החלקיקים שנכנסים לתחום חוזרים ויוצאים בסופו של דבר. באיור רואים את צורה של פונקצית גל למקרא זה.



4.4 מחסום פוטנציאל- מינהור



$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

$$x \leq -a, \quad V(x) = 0 \quad E > 0$$

$$-a \leq x \leq a, \quad V(x) = V \quad E > 0 \quad V < E$$

$$a \leq x, \quad V(x) = 0 \quad E > 0$$

נדרוש רציפות בפונקציות ψ ובנגזרות הראשונות שלהן.

רציפות ב- a :

$$(1) \psi_2(a) = \psi_3(a),$$

$$(2) \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

$$(1) Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Fe^{ik_1a}$$

$$(2) ik_2Ce^{ik_2a} - ik_2De^{-ik_2a} = ik_1Fe^{ik_1a} \quad / : ik_1$$

$$\rightarrow (2)' Ce^{ik_2a} - De^{-ik_2a} = \frac{k_1}{k_2} Fe^{ik_1a}$$

$$(3) = (1) + (2)' \quad 2C = \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{i(k_1-k_2)a}$$

$$(4) = (1) - (2)' \quad 2D = \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{i(k_1+k_2)a}$$

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \quad \underline{\text{רציפות ב-} -a}$$

$$(5) Ae^{-ik_1a} + Be^{ik_1x} = Ce^{-ik_2a} + De^{ik_2a}$$

$$(6) ik_1Ae^{-ik_1a} - ik_1Be^{ik_1a} = ik_2Ce^{-ik_2a} - ik_2De^{ik_2a} \quad / : ik_1$$

$$(6)' Ae^{-ik_1a} - Be^{ik_1a} = \frac{k_2}{k_1} Ce^{-ik_2a} - \frac{k_2}{k_1} De^{ik_2a}$$

$$(5) + (6)' \quad 2A = \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) Ce^{-i(k_2-k_1)a} + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) De^{-i(k_2+k_1)a}$$

מציבים (3)

מציבים (4)

$$2A = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{2i(k_1-k_2)a} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) Fe^{2i(k_1+k_2)a}$$

לכן מקדם העברה יהיה

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T} &= \frac{|A|^2}{|F|^2} = \left(\frac{1}{4}\right)^2 \left| \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{2i(k_1 - k_2)a} + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{2i(k_1 + k_2)a} \right|^2 \\
&= \frac{1}{16} \left| e^{2ik_1a} \left[\left(2 + \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)\right) e^{-2ik_2a} + \left(2 - \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)\right) e^{2ik_2a} \right] \right|^2 \\
&= \frac{1}{16} \left| 4 \cos(2k_2a) + 2i \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right) \sin(2k_2a) \right|^2 \\
&= \cos^2(2k_2a) + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2(2k_2a) \\
&= \cos^2(2k_2a) + \sin^2(2k_2a) - \sin^2(2k_2a) + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2(2k_2a) \\
&= 1 + \left[\frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 - 1 \right] \sin^2(2k_2a) = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2(2k_2a)
\end{aligned}$$

היותו: $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$, $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, לכן $\frac{k_1}{k_2} = \sqrt{\frac{E}{E-V}}$

$$\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 = \frac{E-V}{E} - 2 - \frac{E}{E-V} = \frac{V^2}{E(E-V)}$$

לסיכום:

עבור $V < E$:

$$(4.4.1) \quad \frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(E-V)} \sin^2(2k_2a)$$

עבור $V > E$:

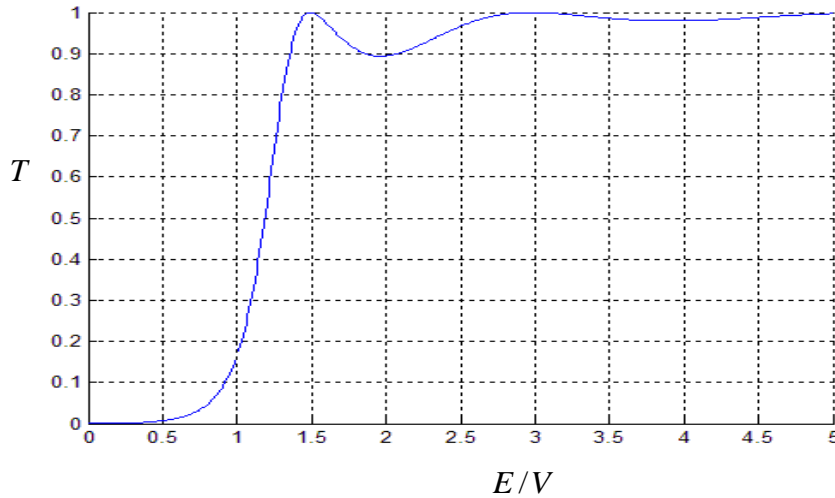
כיוון ש k_2 מרוכב לוקחים \sinh וערך מוחלט של k_2 :

$$\sin(\alpha) = \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i}, \quad \sinh(\alpha) = \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{2} \rightarrow \sin(i\alpha) = i \sinh(\alpha)$$

ונקבל:

$$(4.4.2) \quad \frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(V-E)} \sinh^2(2|k_2|a)$$

כיצד יראה הגרף של מקדם ההעברה עבור מחסום פוטנציאלי?



אנו ציירנו את מקדם ההעברה T כפונקציה של E/V .

מתי המחסום יהיה שקוף? כלומר אין בליעה או החזרה - $T = 1$?

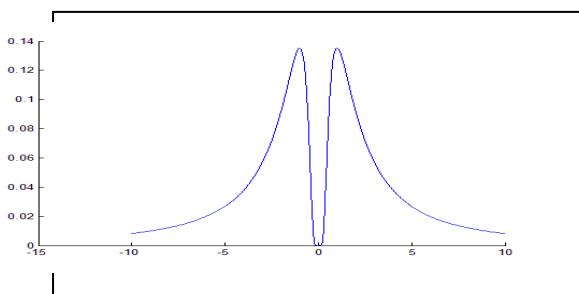
כאשר : $\sin = 0 \rightarrow 2k_2 a = \pi n \rightarrow k_2 = \frac{\pi n}{2a} \rightarrow \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \frac{\pi n}{2a}$

כלומר עבור n מסוים נקבל שהמחסום יעביר בלי להנחית עוצמה - יהיה שקוף עבור אורכי גל מסוימים.

למשל עבור $n=1$ $\leftarrow 2k_2 a = \pi$ $2a = \frac{\pi}{k_2} = \frac{2\pi}{2k_2} = \frac{1}{2} \lambda_2$

קיבלנו שקיפות עבור אורך גל כתלות באורך המחסום. כאשר רוחב המחסום $2a$ שווה לחצי אורך גל במחסום הוא יהיה שקוף עבור גל זה, אבל אם נעלה את האנרגיה, המחסום שוב יפסיק להיות שקוף.

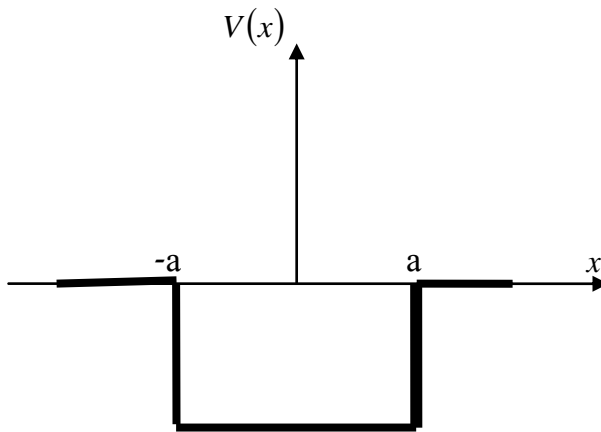
בקלאסי- כאשר יש מחסום שגבוה מהאנרגיה, $V > E$, אין העברה. במכניקת הקוונטים יש מעבר, והוא נקרא תופעת המינהור.



קרוב ראשוני להתפרקות גרעין.

הגרף המצורף הוא פוטנציאל של פרוטונים בגרעין. בתחום קטן (כמה פרמי) הכוח הגרעיני שמרגיש פרוטון גדול מכוח הדחייה החשמלי. נסתכל על זה כאילו יש לפרוטון מחסום פוטנציאל. התפרקות הגרעין תלויה ברוחב וגובה המחסום. ככל שהגרעין יותר גדול, המחסום נהיה יותר צר ונמוך ולכן מקדם ההעברה גדל. ככל שמקדם ההעברה יותר גדול, ההתפרקות גדלה, ואורך החיים קטן.

4.5. בור מרובע סופי



באזור הבור ישנו רק מקרה אחד - $E > V$

ולכן אפשר להשתמש בנוסחא הקודמת רק במקום $-|V| \leftarrow V$ כלומר מקדם ההעברה של בור סופי:

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(E+|V|)} \sin^2(2k_2 a)$$

תופעה זו מופיעה בפיזיקה בשם: תופעת רמסאוור.

רמסאוור לקח גזים אצילים והעביר דרכם אלומת אלקטרונים. האלקטרונים שעוברים רואים את הגרעין כבור פוטנציאל.

הפרוטונים שבגרעין מושכים את האלקטרונים אליהם (האלקטרונים ששיכים לגרעין הגז האציל רחוקים והשפעת דחייתם זניחה לעומת המשיכה לפרוטונים).

כתוצאה מכך יש פיזור לפי מקדם ההעברה- יש אלקטרונים שעוברים את המחסום והשאר מתפזרים, כלומר עוצמת האלומה לאחר הבור קטנה מאשר לפניו.

אם מעלים את האנרגיה של האלומה אזי עבור רמת אנרגיה מסוימת כל האלקטרונים עוברים כלומר, $T = 1$. אם ממשיכים ומעלים את רמת האנרגיה מגלים שמקדם

ההעברה קטן, כלומר יש פיזור, האנרגיה הסופית יורדת.

למעשה מקבלים עקומה שכבר קיבלנו עבור T בסוף סעיף 4.4 עבור מחסום פוטנציאל.

בעזרת תופעה זו ניתן ללמוד על רוחב הבור של גז אציל, כלומר רוחב הגרעין שלו.

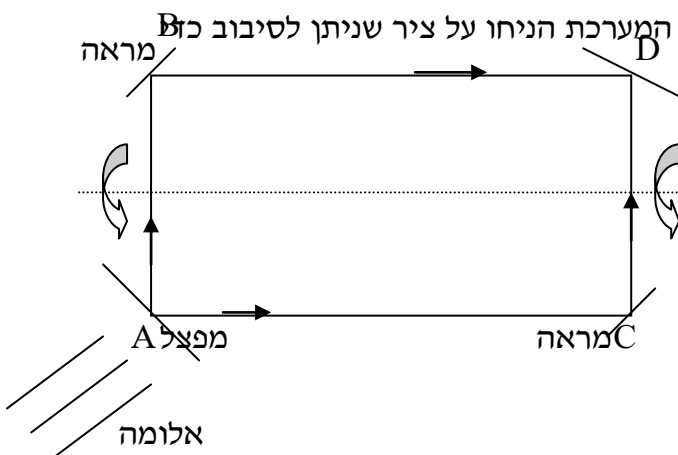
4.6 גרביטציה במכאניקה הקוונטית

באמצעות הגרביטציה ניתן להדגים את השוני בין המכאניקה הקוונטית והקלאסית:

- תאוצת הגרביטציה בקוונטים תלויה במסה.

- לפי משוואת שרדינגר התנועה תלויה בפוטנציאל ולא בכוח.

כיוון שכוח גרביטציוני של חלקיקים קטן פי 10^{39} מהכוח החשמלי, חשבו בהתחלה שהוא לא שייך בתיאוריה הקוונטית. אולם בשנת 1975 מצאו שלשה מדענים (קוללה, אובראוזר וורנר) דרך ניסויית למדוד את הגרביטציה. הם לקחו חלקיקים ניטרליים- ניטרונים (על מנת שלא תהיה השפעה חשמלית), ויצרו אלומה קוהרנטית. את האלומה הם הכניסו למכשיר שפיצל אותה לשניים, וקיבלו על המסך תמונת התאבכות. (מסדרים את המראות



והמפצל כך שהקרניים יגיעו באותה פאזה). את המערכת הניחו על ציר שניתן לסיבוב כזו שניתן יהיה ליצור מצבים שונים.

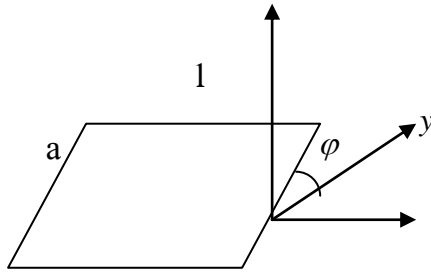
כאשר המערכת מאונכת למשור הדף יש הבדלי פוטנציאל (לפי גובה), בעוד שכאשר היא שטוחה אין הבדלי פוטנציאל.

$$V(r) = mgz$$

$$F = -\nabla V = (0, 0, -mg)$$

קטעים CD , AB שווים באורך ובפוטנציאל בכל מצב.

קטעים AC, BD שווים באורך אך שונים בפוטנציאל כאשר הגובה שונה ולכן זה תלוי במצב המערכת. נסמן אורך הצלע - a ו φ - הזווית שבין המשטח לציר y .



משוואת שרדינגר עבור AC

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} - mg \frac{a}{2} \sin \varphi \psi_1 = E \psi_1$$

משוואת שרדינגר עבור BD

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + mg \frac{a}{2} \sin \varphi \psi_2 = E \psi_2$$

אם כן הפתרונות לפי הפרדת משתנים הם:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} k_1^2 - mg \frac{a}{2} \sin \varphi = E \rightarrow k_1 = \frac{\sqrt{2m \left(E + mg \frac{a}{2} \sin \varphi \right)}}{\hbar}$$

-1

$$\psi_2(x) = e^{ik_2 x} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 + mg \frac{a}{2} \sin \varphi = E \rightarrow k_2 = \frac{\sqrt{2m \left(E - mg \frac{a}{2} \sin \varphi \right)}}{\hbar}$$

על המסך מתקבלת תמונת התאבכות (מה שלא היה אמור לקרות לפי הפיזיקה הקלאסית), כיוון שיש הפרשי פוטנציאל התלויים בהפרשי φ , (מכיוון ש $k_1 \neq k_2$).

כאשר $\varphi = 0$ אין הפרשי פאזה $k_1 = k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ולכן גם לא תהיה התאבכות.

מסקנות:

- יש השפעה של הפוטנציאל ולא של הכוח הגרביטציה על התקדמות החלקיק היות ובשני הקטעים AC ו - BD הכוח הגרביטציוני היה אפס.
- ניתן לראות ש- m מופיע בנוסחה. לכן, בתורת הקוונטים ישנה השפעה של המסה על תנועת חלקיק בשונה ממכאניקה קלאסית והיחסות כללית שבהם תנועת גוף בהשפעת כוח גרביטציה איננה תלויה במסת הגוף.

פרק 5 - מתנד הרמוני קוונטי

(מתנד הרמוני חד מימדי – פתרון שרדינגר)

במערכת יציבה יש לפוטנציאל נקודת מינימום, עבורה החלקיקים מוחזקים בסביבת הנקודה.

בנק' מינימום x_0 כזו מתקיים:

$$U'(x_0) = 0$$

$$U(x) \approx a(x - x_0)^2 \quad \text{--- (האבר הראשון בטור טיילור)}$$

פיתוח כל פונקציה לפי טור טיילור שיש לה נקודת מינימום מתחיל מהאבר הריבועי, את כל שאר האברים מזניחים.

הגדרת מתנד הרמוני: (מערכת יציבה)

$$f = k(x - x_0) \quad x_0 = 0$$

הכוח שפועל:

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

והאנרגיה הפוטנציאלית:

5.1 מצבים יציבים של מתנד הרמוני - שיטת שרדינגר

5.1.1 מצבים יציבים של מתנד הרמוני קוונטי חד-מימדי

ניסוח הבעיה:

פתור את משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים של מתנד הרמוני קוונטי במימד אחד. אנו

$$(5.1.1) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E \psi \quad \text{מחפשים פתרון של משוואה:}$$

$$(5.1.2) \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty \quad \text{כאשר } \psi(x) \text{ מקיימת:}$$

פתרון

נחלק את המשוואה (5.1.1) במקדם של ψ'' ונקבל:

$$\psi'' - \frac{mk}{\hbar^2} x^2 \psi + \frac{E2m}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$(5.1.3) \quad \frac{mk}{\hbar^2} = \alpha^2, \quad \frac{E2m}{\hbar^2} = \lambda$$

בסימון זה:

$$\psi'' + (\lambda - \alpha^2 x^2) \psi = 0$$

אם במקום x נציב ביטוי עם $y = \sqrt{\alpha} x$. במשתנה זה:

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x} = \sqrt{\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \alpha \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}$$

נעבור למשוואה עם y :

$$\alpha \psi''(y) + (\lambda - \alpha y^2) \psi(y) = 0$$

$$(5.1.4) \quad \psi''(y) + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - y^2 \right) \psi(y) = 0$$

מכיוון שהפתרון האמיתי הוא טור חזקות וקשה עבורו לבדוק את התנאי (5.1.2) אזי נמצא פתרון מקורב של הבעיה ונבדוק עד כמה הוא שונה מהפתרון הסופי.

הקירוב: $y \rightarrow \infty$ ואז אפשר להזניח את הקבוע $\frac{\lambda}{\alpha}$ ולכן נרשום:

$$\tilde{\psi}''(y) - y^2 \tilde{\psi}(y) = 0$$

נבדוק ש $\tilde{\psi}(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$ פיתרון מקורב למשוואה זו. היות ו-:

$$\tilde{\psi}'(y) = -y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

נקבל:

$$\tilde{\psi}''(y) = -e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} = (y^2 - 1) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

כאשר y שואף לאינסוף, ניתן להזניח את 1 בהשוואה ל y^2 . לכן $\tilde{\psi}''(y) \approx y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$.

הפיתרון האמיתי יהיה $\tilde{\psi}$ כפול פונקציה שמתקבלת ע"י חלוקה של $\psi(y)$ ב $\tilde{\psi}(y)$ (ששונה מאפס עבור כל y). זאת אומרת,

$$\psi(y) = \tilde{\psi}(y)f(y) = e^{\frac{-y^2}{2}} f(y)$$

אם הפונקציה $f(y)$ לא תישאר חזק לאינסוף, היות ה- \exp שואף לאפס מאוד חזק, נקבל פונקציה שמקיימת (5.1.2).

$$\psi'(y) = -ye^{\frac{-y^2}{2}} f(y) + e^{\frac{-y^2}{2}} f'(y)$$

$$\psi''(y) = -e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) + y^2 e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) - ye^{\frac{-y^2}{2}} f'(y) - ye^{\frac{-y^2}{2}} f'(y) + e^{\frac{-y^2}{2}} f''(y)$$

נציב זה במשוואה (5.1.4) :

$$-e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) + y^2 e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) - 2ye^{\frac{-y^2}{2}} f'(y) + e^{\frac{-y^2}{2}} f''(y) + \frac{\lambda}{\alpha} e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) - y^2 e^{\frac{-y^2}{2}} f(y) = 0$$

נוציא גורם משותף שלא שווה אפס. אחרי הצמצום נקבל .

$$(5.1.5) \quad f''(y) - 2yf'(y) + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)f(y) = 0$$

נפתור לפי טורי חזקות :

$$f(y) = \sum a_n y^n$$

$$f'(y) = \sum a_n n y^{n-1}$$

$$f''(y) = \sum a_n n(n-1) y^{n-2}$$

נציב במשוואה :

$$\sum a_n n(n-1) y^{n-2} - 2y \sum a_n n y^{n-1} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) \sum a_n y^n = 0$$

ע"י החלפה של $n-2$ ב- n בסכום ראשון נקבל :

$$\sum a_{n+2} (n+2)(n+1) y^n - 2 \sum a_n n y^n + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) \sum a_n y^n = 0$$

נשווה מקדמים של y^n

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) - 2a_n n + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)a_n = 0$$

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) = a_n \left(2n - \frac{\lambda}{\alpha} + 1\right)$$

$$(5.1.6) \quad a_{n+2} = a_n \frac{\left(2n - \frac{\lambda}{\alpha} + 1\right)}{(n+2)(n+1)}$$

יש אפשרות שבשלב מסויים a_n יתאפס, ואז נקבל פתרון פולינומיאלי. זה יקרא כאשר:

$$(5.1.7) \quad 2n - \frac{\lambda}{\alpha} + 1 = 0$$

עבור n כלשהו. במקרא זה הפתרון (פולינום) $\psi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$ הוא פתרון אפשרי, $\psi(y)$ ישאף חזק לאפס, כאשר y שואף ל- ∞ . לכן תנאי (5.1.2) יתקיים.

אם התנאי (5.1.7) לא מתקיים, הפתרון הוא טור אינסופי ובמקרה הזה ניתן לראות

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 = \infty$$

נעריך מה קורה ל a_{n+2} עבור $n \rightarrow \infty$. מ (5.1.6) נקבל

$$a_{n+2} \approx \frac{2n}{n^2} a_n = \frac{2}{n} a_n$$

יש פונקציה דומה שנותנת אותו יחס, בערך על a_{n+2} :

$$g(y) = e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y^2)^n}{n!} = \sum \frac{y^{2n}}{n!} = \sum b_n y^n$$

עבור מקדמים של $g(y)$ מתקיים:

$$b_{2n} = \frac{1}{n!}, \quad b_{2n+2} = \frac{1}{(n+1)!} \Rightarrow b_{2n+2} = \frac{b_{2n}}{(n+1)}$$

נסמן $2n = m$ ואז:

$$b_{m+2} = \frac{b_m}{\frac{m}{2} + 1} \approx \frac{2b_m}{m}$$

קיבלנו אותו יחס רקורסיה כמו ל- $f(y)$. לכן ניתן לומר:

$$f(y) \approx e^{y^2} \rightarrow \psi(y) \approx e^{y^2} e^{-\frac{y^2}{2}} = e^{\frac{y^2}{2}}$$

ו- $\psi(y)$ כזה עבור $y \rightarrow \infty$ שואף לאינסוף וזה לא מתאים לתנאי שלנו $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 < \infty$

לכן צריך לומר שהתנאי (5.1.7) צריך להתקיים. לכן:

$$2n - \frac{\lambda}{\alpha} + 1 = 0, \Rightarrow \frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1, \Rightarrow \lambda = (2n + 1)\alpha$$

נציב מ (5.1.3)

$$\alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

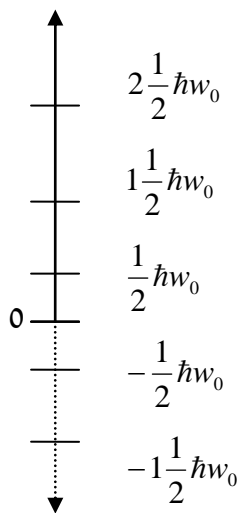
$$\frac{2mE}{\hbar^2} = (2n + 1) \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

$$E_n = \frac{2n + 1}{2} \hbar \frac{\sqrt{mk}}{m} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar$$

נסמן $w_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ונקבל:

$$(5.1.7) \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) w_0 \hbar$$

זוהי הנוסחה לרמות האנרגיה הבדידות במתנד הרמוני :



קיבלנו ציר אנרגיות אפשריות. שים לב שהפרש בין כל שתי רמות הוא מספר של $\hbar w_0$.

ניתן לראות שאין רמת אנרגיה שבה $E = 0$.

בעצם, לכאורה, מה זה משנה אם יש $1/2$ או לא?

ניתן לגלותו במצבים מסוימים.

לדוגמא: כשחלקיק פוגש אנטי חלקיק (למשל פוזיטרון),

שסולם האנרגיה שלהם הפוך, אזי המסה הופכת להיות אנרגיה.

כדי למצוא את המצב היציב $\psi_n(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} f(y)$ המתאים לאנרגיה E_n , נציב מ- (5.1.7),
 במשוואה (5.1.5) ונקבל: $\left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) = 2n$

$$f''(y) - 2y f'(y) + 2n f(y)$$

זו משוואת הרמית.

הפתרון	של	משוואה	זו	היא	פולינומי	הרמית
	$f(y) = H_n(y)$					
נחזור	למשתנה	x	ואז	הפתרון	הכללי	הוא:

$$(5.1.8) \quad \psi_n(y) = A_n H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

טענה:

אם נגדיר:

$$(5.1.9) \quad A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}$$

אזי $\psi_n(x)$, המוגדרים לפי (5.1.9) יהיו מצבים מנורמלים: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$

ואורתוגונליים אחד לשני: $\langle \psi_n(x) | \psi_m(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx = 0, \quad n \neq m$

הוכחה

ידוע כי פולינומי הרמית הם סדרה אורתוגונלית ביחס למכפלה פנימית:

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f g e^{-y^2} dy$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = \delta_m^n 2^n n! \sqrt{\pi}$$

ומקיימים

נבדוק קודם את הנרמול של $\psi_n(x)$ המוגדרות ע"י (5.1.9):

$$|\psi_n|^2 = \langle \psi_n | \psi_n \rangle = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2} dx$$

נעבור ל- $y = \sqrt{\alpha} x$ ונקבל:

$$|\psi_n|^2 = A_n^2 \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(y) e^{-y^2} dy = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} 2^n n! = 1$$

אורתוגונליות הפונקציות $\psi_n(x)$ נובעת מ-:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx = A_n A_m \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\sqrt{\alpha} x) H_m(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2} dx = \frac{A_n A_m}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(y) H_m(y) e^{-y^2} dy = 0,$$

עבור $n \neq m$.

5.1.2 מתנד הרמוני תלת מימדי

פתרון בעיה של מצבים יציבים של מתנד הרמוני תלת מימדי הופך לבעיה חד מימדית כשפותרים בשיטת הפרדת משתנים.

$V(x, y, z)$ - האנרגיה הפוטנציאלית של מתנד הרמוני תלת מימדי:

$$V(x, y, z) = \frac{k_1 x^2 + k_2 y^2 + k_3 z^2}{2}$$

לכן, משוואת שרדינגר עבור מצבים יציבים של מתנד הרמוני תלת מימדי תהיה:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + \frac{1}{2} (k_1 x^2 + k_2 y^2 + k_3 z^2) \psi = E \psi$$

נבצע הפרדת משתנים $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$

נציב במשוואה ונחלק ב- XYZ .

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} \right] + \frac{k_1 x^2}{2} + \frac{k_2 y^2}{2} + \frac{k_3 z^2}{2} = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''}{X} + \frac{k_1 x^2}{2} = e_1$$

עבור $X(x)$ מקבלים משוואה של מתנד הרמוני חד-מימדי

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' + \frac{1}{2} k_1 x^2 X = e_1 X$$

שעבורה מצאנו פתרון (5.1.9):

$$X_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{\alpha_1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1} (n_1)!}} H_{n_1}(\sqrt{\alpha_1} x) e^{-\frac{\alpha_1 x^2}{2}}$$

כאשר

$$e_1 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \hbar w_1, \quad w_1 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}, \quad \alpha_1 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

בצורה דומה נקבל

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Y'' + \frac{1}{2} k_2 y^2 Y = e_2 Y, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} Z'' + \frac{1}{2} k_3 z^2 Z = e_3 Z$$

לכן, רמות אנרגיה של מתנד הרמוני תלת מימדי יהיו

$$E = e_1 + e_2 + e_3 = \hbar \left[\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) w_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) w_2 + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right) w_3 \right]$$

והמצבים היציבים יהיו:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{\pi^3}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3} (n_1)! (n_2)! (n_3)!}} H_{n_1}(\sqrt{\alpha_1} x) H_{n_2}(\sqrt{\alpha_2} y) H_{n_3}(\sqrt{\alpha_3} z) e^{-\frac{(\alpha_1 x^2 + \alpha_2 y^2 + \alpha_3 z^2)}{2}}$$

ההבדל ממתנד הרמוני חד-מימדי הוא שכאן יש אפשרות לניווט-עבור אותה רמת אנרגיה ניתן לקבל כמה מצבים.

נניח ש: $k_1 = k_2 = k_3$ שזהו חומר איזוטרופי ההתקדמות זהה בכמה כיוונים. במקרה זה

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar w \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

$$E_{000} = \frac{3\hbar w}{2}$$

רמת היסוד תהיה

עבור רמת האנרגיה הבאה $E_{100}, E_{010}, E_{001} = \frac{5\hbar w}{2}$ נקבל שלושה מצבים יציבים.

ועבור רמה מעליה $E_{110}, E_{011}, E_{101}, E_{200}, E_{020}, E_{002} = \frac{7\hbar w}{2}$ נקבל שישה מצבים

יציבים וכו'.

5.2 הצגה מטריציונית של אופרטורי מיקום ותנע בבסיס של מתנד הרמוני . מטריצות הייזנברג

את אופרטורי מיקום ותנע של מתנד הרמוני ניתן לייצג כמטריצות בבסיס $\psi_n(x)$ של מתנד הרמוני. התוצאות המתקבלות הן אותן מטריצות שקיבל הייזנברג.

אופרטור מיקום

נסמן על ידי x_{mn} רכיב $m n$ של מטריצת המיקום בבסיס של מצבים יציבים של מתנד הרמוני : $\{\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x), \dots\}$ כאשר

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \quad \text{ו-}$$

על מנת למצוא רכיב של מטריצה מפעילים אופרטור מיקום על וקטור בסיס אחד ועושים מכפלה פנימית עם וקטור בסיס אחר.

$$\begin{aligned} x_{mn} &= \langle \psi_m | \hat{x} \psi_n \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}_m \hat{x} \psi_n dx = A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\sqrt{\alpha} x) x H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2} dx \end{aligned}$$

נעבור ל- y :

$$\begin{aligned} y &= \sqrt{\alpha} x \\ dy &= \sqrt{\alpha} dx \end{aligned}$$

$$= A_m A_n \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) y H_n(y) e^{-y^2} dy$$

$$y H_n(y) = n H_{n-1}(y) + \frac{1}{2} H_{n+1}(y) \quad \text{לפי נוסחאת הרמית :}$$

$$(5.2.1) = A_m A_n \frac{1}{\alpha} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) n H_{n-1}(y) e^{-y^2} dy}_1 + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) \frac{1}{2} H_{n+1}(y) e^{-y^2} dy}_2 \right]$$

1

2

משום שפולינומי הרמית הם אורתוגונאליים בכל פעם אינטגרל אחד יתאפס:

עבור $m = n - 1$ אינטגרל (1) מתקיים ו-(2) מתאפס.

עבור $m = n + 1$ אינטגרל (2) מתקיים ו-(1) מתאפס.

פתרון האינטגרל (1) ו-(2) לפי:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = \delta_m^n 2^n n! \sqrt{\pi} \quad \delta = 0 \text{ אחרת } \delta = 1 \leftarrow m = n$$

כאשר $m = n$ אחרת $\delta = 0$

ולכן נקבל:

$$x_{mn} = \begin{cases} \sqrt{\frac{n}{2\alpha}} & m = n - 1 \\ \sqrt{\frac{n+1}{2\alpha}} & m = n + 1 \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

מזה מקבלים את מטריצת המיקום של הייזנברג:

$$(5.2.2.) \quad \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{matrix} m=0 \\ m=1 \\ m=2 \\ m=3 \\ m=4 \\ \vdots \end{matrix}$$

אופרטור תנע

לפי

$$\begin{aligned}
 p_{mn} &= \langle \psi_m | \hat{p}_x \psi_n \rangle = \left\langle \psi_m \left| \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_n \right. \right\rangle = \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\sqrt{\alpha} x) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \frac{\partial}{\partial x} H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx \\
 &\qquad\qquad\qquad \text{נעבור ל- } y \\
 &\qquad\qquad\qquad y = \sqrt{\alpha} x \rightarrow dy = \sqrt{\alpha} dx \\
 &\qquad\qquad\qquad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} = \sqrt{\alpha} \frac{\partial}{\partial y} \\
 &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \sqrt{\alpha} \frac{\partial}{\partial y} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} dy = \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{\partial}{\partial y} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} dy \\
 &\qquad\qquad\qquad \frac{\partial}{\partial y} \left(H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \right) = H'_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} - y H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{לפי נגזרת מכפלה:} \\
 &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \left(H'_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} - y H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \right) dy \\
 &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) (H'_n(y) - y H_n(y)) e^{-y^2} dy \\
 &\qquad\qquad\qquad \left. \begin{aligned} y H_n(y) &= n H_{n-1}(y) + \frac{1}{2} H_{n+1}(y) \\ H'_n(y) &= 2n H_{n-1}(y) \end{aligned} \right\} \text{לפי משוואת רקורסיה עבור פולינומי הרמית:}
 \end{aligned}$$

נקבל:

$$\begin{aligned}
 p_{mn} &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) \left(2n H_{n-1}(y) - \left(n H_{n-1}(y) + \frac{1}{2} H_{n+1}(y) \right) \right) e^{-y^2} dy = \\
 &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) \left(n H_{n-1}(y) - \frac{1}{2} H_{n+1}(y) \right) e^{-y^2} dy = \\
 &= \frac{\hbar}{i} A_m A_n \left[\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) n H_{n-1}(y) e^{-y^2} dy - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) H_{n+1}(y) e^{-y^2} dy \right]
 \end{aligned}$$

היות וקיבלנו אינטגרלים כמו ב-(5.2.1), לכן:

$$p_{mn} = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \begin{cases} \sqrt{n} & m = n-1 \\ -\sqrt{n+1} & m = n+1 \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

כדי שהמטריצה תהיה צמודה לעצמה נכניס את ה- i פנימה ונקבל מטריצת הייזנברג עבור התנע:

$$(5.2.3) \quad \hat{p} = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{4} & \dots \end{bmatrix}$$

5.3 ניתוח אלגברי של מתנד הרמוני

יתרונה של השיטה האלגברית הוא בכך שהיא מובילה לדברים שאין להם דימוי קלאסי. השימוש בשיטות שונות הוא על מנת לאפשר השוואות וכן מפני שיש מקרים שפשוט יותר לעבוד עם שיטה מסוימת.

5.3.1 אופרטורי a, a^*

מטריצה של אופרטור מיקום:

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{matrix} m=0 \\ m=1 \\ m=2 \\ m=3 \\ m=4 \\ \vdots \end{matrix}$$

מטריצה של אופרטור תנע:

$$\hat{p} = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{4} & \dots \end{bmatrix}$$

נגדיר מטריצה a :

$$(5.3.1) \quad a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \rightarrow a^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

ניתן להגדיר בעזרת מטריצה a את אופרטורי מיקום ותנע ע"י:

$$(5.3.2) \quad \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} (a + a^*)$$

$$(5.3.3) \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} (a - a^*)$$

תכונות:

נחשב את הקומוטטור $[a, a^*]$:

$$a a^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad a^* a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$[a, a^*] = a a^* - a^* a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = I \rightarrow \text{מטריצת יחידה}$$

לכן נניח עבור החישובים הבאים: $[a, a^*] = 1$.
לפי זה מתקיים:

$$(5.3.4) \quad a a^* = 1 + a^* a$$

$$(5.3.5) \quad a^* a = a a^* - 1$$

נמצא את הביטוי של ההמילטוניאן של מתנד הרמוני חד-מימדי בעזרת a ו- a^* :
(5.3.2) ו-(5.3.3)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2} = -\frac{1}{2m} \frac{\alpha}{2} \hbar^2 (a - a^*)(a - a^*) + \frac{k}{2} \frac{1}{2\alpha} (a + a^*)(a + a^*) \\ &= -\frac{\hbar^2 \alpha}{4m} (a^2 - a^* a - a a^* + (a^*)^2) + \frac{k}{4\alpha} (a^2 + a^* a + a a^* + (a^*)^2) \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \text{ היות ו-}$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{\hbar^2}{4m} (a^2 - a^* a - a a^* + (a^*)^2) + \frac{k}{4} \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} (a^2 + a^* a + a a^* + (a^*)^2) \\ &= \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{k}{m}} (2a^* a + 2a a^*) = \frac{\hbar w_0}{2} (a^* a + a a^*) \end{aligned}$$

$$\text{כאשר } w_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \text{ . לכן:}$$

$$(5.3.6) \quad \hat{H} = \frac{\hbar w_0}{2} (a^* a + a a^*)$$

5.3.2 רמות אנרגיה במתנד הרמוני

אנו נראה שניתן לקבל את רמות האנרגיה של ההמילטוניאן זה ממידע על הקומוטטור

$$[a, a^*]$$

טענה:

הערכים העצמיים של אופרטור האנרגיה $\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}(a^*a + aa^*)$, כאשר: $[a, a^*] = 1$,

הם: $E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$ (כלומר רמות האנרגיה של מתנד הרמוני).

הוכחה:

יהי ψ מצב יציב-וקטור עצמי של \hat{H} המתאים לערך E , על כן מתקיים: $\hat{H}\psi = E\psi$.
נבדוק האם $a\psi$ מצב יציב, כלומר, האם $\hat{H}a\psi = ka\psi$ (כאשר k קבוע). בחישוב זה נשתמש פעמיים ב-(5.3.5), חוק הקיבוץ של כפל אופרטורי המאפשר לשים סוגרים כרצוננו, ושניתן להחליף את הסדר בהכפלה של קבוע ואופרטור.

$$\begin{aligned}\hat{H}a\psi &= \frac{\hbar\omega_0}{2}(a^*a + a a^*)a\psi = \frac{\hbar\omega_0}{2}(a a^* a + a^* a a)\psi = \\ &= \frac{\hbar\omega_0}{2}(a a^* a + (a a^* - 1)a)\psi = a \frac{\hbar\omega_0}{2}(a^* a + a^* a - 1)\psi = \\ &= a \frac{\hbar\omega_0}{2}(a^* a + (a a^* - 1) - 1)\psi = a \underbrace{\frac{\hbar\omega_0}{2}(a^* a + a a^*)}_{\hat{H}\psi} \psi - 2 \frac{\hbar\omega_0}{2} a \psi = \\ &= aE\psi - \hbar\omega_0 a \psi = \underbrace{(E - \hbar\omega_0)}_{\text{קבוע}} a \psi\end{aligned}$$

אם $a\psi \neq 0$, היות ו- $(E - \hbar\omega_0)$ ערך קבוע ניתן להסיק כי $a\psi$ וקטור עצמי של אופרטור אנרגיה \hat{H} המתאים לערך עצמי $(E - \hbar\omega_0)$ ולכן המצב יציב.
על כן a נקרא אופרטור הורדה, משום שהוא מוריד את רמת האנרגיה ב- $\hbar\omega_0$ על ידי פליטת פוטון.

אנרגיה של מתנד היא סופית. לכן המתנד לא יכול לפלוט אינסוף קוונטים ועל ידי הפעלת אופרטור הורדה מספר פעמים חייבים להגיע למצב ψ_0 עבורו $a\psi_0 = 0$, כלומר שאי אפשר להוריד אותו ברמת האנרגיה. נסמן את האנרגיה המתאימה ל- ψ_0 ב- E_0 ונשתמש שוב ב-(5.3.5)

$$\begin{aligned}
0 &= \langle a\psi_0 | a\psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | a^* a \psi_0 \rangle = \left\langle \psi_0 \left| \left(\frac{1}{2} a^* a + \frac{1}{2} a^* a \right) \psi_0 \right. \right\rangle \\
&= \left\langle \psi_0 \left| \left(\frac{1}{2} a^* a + \frac{1}{2} (a a^* - 1) \right) \psi_0 \right. \right\rangle = \left\langle \psi_0 \left| \frac{1}{2} (a^* a + a a^*) \psi_0 \right. \right\rangle - \frac{1}{2} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{\hbar\omega_0} \left\langle \psi_0 \left| \frac{\hbar\omega_0}{2} (a^* a + a a^*) \psi_0 \right. \right\rangle - \frac{1}{2} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \frac{E_0}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

לכן: $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_0$ ועבור רמת אנרגיה זו (ורק עבורה) תהליך ההורדה של אופרטור a יכול להיעצר.

מכאן נובע שרמת אנרגיה E של מצב יציב על ידי הורדה מספר פעמים, שנסמן מספר זה ב- n , יגיע למצב E_0 . לכן רמות האנרגיה של מתנד הרמוני הם:

$$(5.3.7) \quad E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

מ.ש.ל

תרגיל:

הראה שאם ψ מצב יציב של מתנד הרמוני (וקטור עצמי) המתאים לאנרגיה (ערך עצמי) E , אזי $a^* \psi$ זהו מצב יציב שמתאים לאנרגיה (ערך עצמי) $(E + \hbar\omega_0)$ -

5.3.3 הצגה מטריציאלי של אופרטור a בבסיס מצבים יציבים של מתנד הרמוני

נמצא הצגה של a בבסיס של מתנד הרמוני:

לפי מה שראינו, המילטוניאן של מתנד הרמוני $\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2} (a a^* + a^* a)$ ומהגדרה של a ,

$$[a, a^*] = 1 \quad \text{לכן:}$$

$$\left. \begin{aligned} aa^* - a^*a &= 1 \\ aa^* + a^*a &= \frac{2\hat{H}}{\hbar\omega_0} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} (5.3.8) & aa^* = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega_0} + \frac{1}{2} \\ (5.3.9) & a^*a = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \end{cases}$$

הגדרה: נסמן את המצב המנורמל המתאים לאנרגיה $E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$ ע"י $|n\rangle$, א.ז.

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad . \quad |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$$

כיוון שהוכחנו שאופרטור a הוא אופרטור הורדה על כן: $a|n\rangle = k|n-1\rangle$ כאשר k קבוע.

היות ו $|n-1\rangle$ אורכו שווה ל-1 (כיוון שהמצבים מנורמלים) לכן: $|a|n\rangle| = |k|$

מכאן, לפי (5.3.9) נקבל:

$$\begin{aligned} \Rightarrow k^2 &= \langle a|n| | a|n\rangle = \langle n|a^*a|n\rangle = \left\langle n \left| \frac{\hat{H}}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \right| n \right\rangle = (n) = \text{נפעיל את האופרטור על } n = \\ &= \left(\frac{E_n}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \right) \underbrace{\langle n|n\rangle}_1 = \frac{E_n}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} \stackrel{\text{ע"י } E_n}{=} \frac{\hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)}{\hbar\omega_0} - \frac{1}{2} = n \quad \Rightarrow k^2 = n \quad \Rightarrow k = \sqrt{n} \end{aligned}$$

כאשר k מבטא את הערכים בתוך המטריצה של האופרטור. ולכן ניתן לכתוב:

$$(5.3.10) \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

על מנת לבנות את המטריצה נפעיל את האופרטורים על וקטורי הבסיס ונשתמש בנוסחה

$$a_{mn} = \langle m|a|n\rangle$$

$$\begin{aligned}
 a|0\rangle &= 0|n-1\rangle & |0\rangle; & |1\rangle; & |2\rangle; & |3\rangle \\
 a|1\rangle &= \sqrt{1}|0\rangle = \sqrt{1}|0\rangle + 0|1\rangle + 0|2\rangle + \dots \\
 a|2\rangle &= \sqrt{2}|1\rangle = 0|0\rangle + \sqrt{2}|1\rangle + 0|2\rangle + \dots \\
 a|3\rangle &= \sqrt{3}|2\rangle = 0|0\rangle + 0|1\rangle + \sqrt{3}|2\rangle + \dots
 \end{aligned}
 \Rightarrow \hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} n=|0\rangle \\ n=|1\rangle \\ n=|2\rangle \\ n=|3\rangle \end{matrix}$$

בצורה דומה עבור a^* - אופרטור העלאה נקבל: $a^*|n\rangle = \tilde{k}|n+1\rangle$, כאשר

$$\begin{aligned}
 \tilde{k}^2 &= |a^*|n\rangle|^2 = \langle a^*|n|a^*|n\rangle = \langle n|aa^*|n\rangle = \left\langle n \left| \frac{\hat{H}}{\hbar\omega_0} + \frac{1}{2} \right| n \right\rangle \\
 &= \left(\frac{E_n}{\hbar\omega_0} + \frac{1}{2} \right) \underbrace{\langle n|n\rangle}_1 = \frac{\hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)}{\hbar\omega_0} + \frac{1}{2} = n+1 \Rightarrow \tilde{k} = \sqrt{n+1}
 \end{aligned}$$

לכן:

$$(5.3.11) \quad a^*|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

ניתן לתאר את האופרטורים a ו- a^* באופן אחר: מתנדים שעולים רמה כתוצאה מקליטת אנרגיה ולהפך. a - אופרטור הריסה - מוציא אחד מהחלקיקים החוצה אל מחוץ למערכת. a^* - אופרטור יצירה - מכניס חלקיק לתוך המערכת. ועל כן a^*, a הם יסודות השדות הקוונטיים.

5.4 תרגילים על מתנד הרמוני

תרגיל 1: מערכת קוונטית הייתה בזמן $t=0$ במצב: $\psi(0) = \frac{3}{5}\psi_0 + \frac{4}{5}i\psi_1$

מצא את התוחלת של מיקום ותנע של המערכת בזמן $t \geq 0$ ב 3 השיטות.

פתרון

• לפי שיטת שרדינגר:

היות לפי (5.1.7) $E_0 = \frac{\hbar w_0}{2}$, $E_1 = \frac{3\hbar w_0}{2}$, כאשר $w_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$. המצב של המערכת בזמן

$$\psi(t) = c_1 \psi_1 e^{\frac{E_1 t}{\hbar i}} + c_2 \psi_2 e^{\frac{E_2 t}{\hbar i}} \quad t \text{ יהיה באופן כללי ובמערכת שלנו}$$

$$\psi(t) = \frac{3}{5} \psi_0 e^{\frac{w_0 t}{2i}} + \frac{4}{5} i \psi_1 e^{\frac{3w_0 t}{2i}}$$

לכן, התוחלת של המיקום תהיה-

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \langle \psi(t) | x \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(t) x \psi(t) dx \\ \langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{3}{5} \psi_0 e^{\frac{i w_0 t}{2}} - \frac{4}{5} i \psi_1 e^{\frac{3i w_0 t}{2}} \right) x \left(\frac{3}{5} \psi_0 e^{-\frac{i w_0 t}{2}} + \frac{4}{5} i \psi_1 e^{-\frac{3i w_0 t}{2}} \right) dx \\ &= \left(\frac{3}{5} \right)^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x \psi_0^2 dx}_{=0} + \left(\frac{4}{5} \right)^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x \psi_1^2 dx}_{=0} + \frac{12}{25} i \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0 \psi_1 e^{\frac{i w_0 t}{2} - \frac{3i w_0 t}{2}} x - \psi_1 \psi_0 e^{\frac{3i w_0 t}{2} - \frac{i w_0 t}{2}} x \right] dx = \end{aligned}$$

כאשר ψ_n מוגדרים לפי (5.1.8) ו- $H_n(x)$ לפי (2.6.4). היות ו- ψ_n הם פונקציות זוגיות (עבור n זוגי) ואי-זוגיות (עבור n אי-זוגי), ψ_n^2 - תמיד פונקציה זוגית. לכן $x \psi_n^2$ - זוהי פונקציה אי-זוגית.

והאינטגרל מ: $(-\infty)$ ועד ∞ של פונקציה אי זוגית מתאפס. לכן :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{12}{25} i \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_0 x \psi_1 e^{-i w_0 t} - \psi_1 x \psi_0 e^{i w_0 t}) dx = \frac{12}{25} i \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\psi_0 x \psi_1 (e^{-i w_0 t} - e^{i w_0 t})}_{\substack{-2i \sin w_0 t \\ \text{לא תלוי } x}} dx = \\ &= \frac{24}{25} \sin w_0 t \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x \psi_1 dx \end{aligned}$$

נציב לפי (5.1.8)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= 0.96 \sin(w_0 t) A_0 A_1 \int_{-\infty}^{\infty} H_0(\sqrt{\alpha} x) x H_1(\sqrt{\alpha} x) e^{-\alpha x^2} dx \\ &= 0.96 \sin(w_0 t) A_0 A_1 \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_0(y) x H_1(y) e^{-y^2} dy = \quad : y = \sqrt{\alpha} x \text{ נעבור ל-} \end{aligned}$$

לפי משוואת הרקורסיה (2.6.5) ונוסחה (2.6.7) נקבל:

$$y H_1(y) = H_0(y) + \frac{1}{2} H_2(y)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= 0.96 \sin(w_0 t) A_0 A_1 \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \left(H_0(y) H_0(y) + \frac{1}{2} \underbrace{H_0(y) H_2(y)}_{=0} \right) e^{-y^2} dy \\ &= 0.96 \sin(w_0 t) A_0 A_1 \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} H_0(y)^2 e^{-y^2} dy \end{aligned}$$

$$A_1 = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad A_0 = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \quad \text{ולפי (5.1.9)}$$

ונוסחה (2.6.7) נקבל:

$$\langle x \rangle = 0.96 \sin(w_0 t) \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\alpha} \sqrt{\pi}$$

-1

$$\langle x \rangle = \frac{0.96}{\sqrt{2\alpha}} \sin(w_0 t)$$

• לפי שיטת הייזנברג:

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 0.6i \\ 0.8i \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow \psi(t) = \begin{pmatrix} 0.6e^{-\frac{i w_0 t}{2}} \\ 0.8ie^{-\frac{3i w_0 t}{2}} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

לכן

$$\langle x \rangle = \langle \psi(t) | x \psi(t) \rangle =$$

$$= \begin{pmatrix} 0.6e^{-\frac{i w_0 t}{2}} & -0.8ie^{-\frac{3i w_0 t}{2}} & 0 & \dots \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.6e^{-\frac{i w_0 t}{2}} \\ 0.8ie^{-\frac{3i w_0 t}{2}} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} =$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(0.6e^{\frac{i\omega_0 t}{2}} \quad -0.8ie^{\frac{3i\omega_0 t}{2}} \quad 0 \quad \dots \right) \begin{pmatrix} 0.8ie^{-\frac{3i\omega_0 t}{2}} \\ 0.6e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \\ \vdots \\ \text{מתאפס בהמשך} \end{pmatrix} =$$

$$\langle x \rangle = \frac{i}{\sqrt{2\alpha}} (0.48e^{-i\omega_0 t} - 0.48ie^{i\omega_0 t})$$

-1

$$\langle x \rangle = \frac{0.96}{\sqrt{2\alpha}} \sin(\omega_0 t)$$

לפי השיטה האלגורית:

•

$$\psi(0) = 0.6|0\rangle + 0.8i|1\rangle \Rightarrow \psi(t) = 0.6e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} |0\rangle + 0.8ie^{-\frac{3i\omega_0 t}{2}} |1\rangle$$

מ (5.3.2) נקבל:

$$\langle x \rangle = \langle \psi(t) | x \psi(t) \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} (a + a^*) \right| \psi(t) \right\rangle$$

אבל לפי (5.3.10) ו (5.3.11)

$$(a + a^*)\psi(t) = 0.6e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \left(\underbrace{0}_{a\psi_0} + \underbrace{\sqrt{1}|1\rangle}_{a^*\psi_0} \right) + 0.8ie^{-\frac{3i\omega_0 t}{2}} \left(\underbrace{\sqrt{1}|0\rangle}_{a\psi_1} + \underbrace{\sqrt{2}|2\rangle}_{a^*\psi_1} \right)$$

לכן:

הבסיסים אורתוגנלים ולכן

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(0.6e^{\frac{i\omega_0 t}{2}} |0\rangle - 0.8ie^{\frac{3i\omega_0 t}{2}} |1\rangle \right) \left(0.6e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \sqrt{1}|1\rangle + 0.8ie^{-\frac{3i\omega_0 t}{2}} (\sqrt{1}|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle) \right)$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2\alpha}} (0.48e^{-i\omega_0 t} - 0.48ie^{i\omega_0 t})$$

-1

$$\langle x \rangle = \frac{0.96}{\sqrt{2\alpha}} \sin(\omega_0 t)$$

תרגיל 2

מצא את $\langle x \rangle$, $(\Delta x)^2$, $\langle p \rangle$, $(\Delta p)^2$ והאי-ודאות $\Delta x \Delta p$, על מצב יציב של מתנד הרמוני.

פתרון

נשתמש בשיטה אלגברית. לפי הגדרת תוחלת ו (5.3.2), התוחלת של אופרטור \hat{x} על מצב

$|n\rangle$ שווה:

$$\langle x \rangle = \langle n | x | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \langle n | (a + a^*) | n \rangle$$

נפעיל את האופרטור על $|n\rangle$ ונשתמש ב-(5.3.10) ו-(5.3.11) ואורתוגונאליות של המצבים יציבים המתאימים לערכים שונים, נקבל:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \langle n | \sqrt{n} | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle = 0$$

לפי הגדרת השונות: $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, לכן נמצא את התוחלת של x^2 :

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha} \langle n | (a + a^*)^2 | n \rangle = \frac{1}{2\alpha} \langle n | a^2 + aa^* + a^*a + (a^*)^2 | n \rangle$$

נמצא איך a^2 פועל על המצב $|n\rangle$: אם נפעיל את a על $|n\rangle$, מקבלים לפי

נוסחא $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$. כשנפעיל שוב את האופרטור a על התוצאה שהתקבלה נקבל את

$\sqrt{n-1}\sqrt{n}|n-2\rangle$. כיוון שהמצבים אורתוגונאליים עבור n שונים, נקבל ש-

$$\langle n | a^2 n \rangle = \sqrt{n-1}\sqrt{n} \langle n | n-2 \rangle = 0$$

באותו אופן ניתן להראות לגבי האופרטור $(a^*)^2$ שמתקיים: $\langle n | (a^*)^2 n \rangle = \langle n | n+2 \rangle = 0$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha} \langle n | (aa^* + a^*a) | n \rangle \quad \text{לכן}$$

$$aa^* + a^*a = \frac{2\hat{H}}{\hbar\omega_0} \quad \text{נציב ונקבל:}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha} \frac{2}{\hbar\omega_0} \langle n | \hat{H} | n \rangle$$

$|n\rangle$ הוא מצב יציב של אופרטור האנרגיה המתאים לרמת אנרגיה E_n , כלומר:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\alpha \hbar \omega_0} \langle n | E_n | n \rangle = \frac{E_n}{\alpha \hbar \omega_0} \langle n | n \rangle$$

המצבים מנורמלים - $\langle n | n \rangle = 1$, וניתן להציב את הביטוי - $E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\alpha \hbar \omega_0} \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\alpha} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

נציב את מה שמצאנו בהגדרה של השונות: $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{\alpha} \left(n + \frac{1}{2} \right)$

השונות היא הסטייה הממוצעת מהמרכז. לכן אפשר לומר ש- Δx , האי ודאות במיקום, היא האמפליטודה של התנועה ההרמונית הפשוטה. האמפליטודה היא ביחס ישר ל-

$$\sqrt{n + \frac{1}{2}}$$

ככל ש n גדל רמת האנרגיה גדלה ולכן גם גודל התנודה מהמרכז- שונות- גדלה.

נעבור לחישוב של תוחלת ושונות של התנע. לפי הגדרת תוחלת ו (5.3.3), התוחלת של אופרטור \hat{p} על מצב $|n\rangle$ שווה:

$$\langle p \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \langle n | (a - a^*) | n \rangle$$

נפעיל את האופרטור על $|n\rangle$ ונשתמש ב-(5.3.10) ו-(5.3.11) ובאורתוגונאליות של המצבים היציבים המתאימים לערכים שונים, לכן:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \langle n | \sqrt{n} | n-1 \rangle - \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \rangle = 0$$

לפי הגדרת שונות: $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$, נמצא את התוחלת של p^2 :

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \frac{\alpha}{2} \langle n | (a - a^*)^2 | n \rangle = -\hbar^2 \frac{\alpha}{2} \langle n | a^2 - a a^* - a^* a + (a^*)^2 | n \rangle$$

משיקולים כמו בחישוב השונות של המיקום נקבל:

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \frac{\alpha}{2} \langle n | (a a^* + a^* a) | n \rangle = \hbar^2 \frac{\alpha}{2} \frac{2}{\hbar \omega_0} E_n = \hbar^2 \alpha \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

לכן, השונות של התנע היא: $(\Delta p)^2 = \hbar^2 \alpha \left(n + \frac{1}{2} \right)$

כעת ניתן לחשב את אי הודאות של הייזנברג:

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{n + \frac{1}{2}} \hbar \sqrt{\alpha} \sqrt{n + \frac{1}{2}} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

עבור $n = 0$ נקבל $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$, ועבור $n > 0$ נקבל אי ודאות גדולה יותר: $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$

תרגיל 3:

נתון גודל פיזיקאלי $A = x^4$. מצא את $\langle A \rangle$ על מצב $|n\rangle$.

פתרון

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} (a + a^*)$$

$$\hat{x}^4 = \frac{1}{(2\alpha)^2} (a + a^*)(a + a^*)(a + a^*)(a + a^*)$$

מאחר והמכפלה הפנימית היא עם $|n\rangle$, כל מצב שאחרי הפעלת האופרטור לא יחזור למצב $|n\rangle$, ויתאפס במכפלה (מפני שהמצבים אורתוגונאליים), לכן ניקח רק את כל המקרים שבהם יש איזון בין אופרטור הורדה לאופרטור העלאה בכל ההרכבים האפשריים.

$$\langle \hat{x}^4 \rangle = \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle =$$

$$\frac{1}{(2\alpha)^2} \langle n | a a a^* a^* + a a^* a a^* + a^* a a a^* + a^* a^* a a + a a^* a^* a + a^* a a^* a | n \rangle$$

לפי הנוסחאות:

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^* |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

נחשב:

$$\begin{aligned}
aaa^*a^* &= aaa^*\sqrt{n+1}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}aa\sqrt{n+2}|n+2\rangle = \\
&\quad \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}a\sqrt{n+2}|n+1\rangle = (n+2)\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle = (n+2)(n+1)|n\rangle \\
aa^*aa^*|n\rangle &= aa^*a\sqrt{n+1}|n+1\rangle = (aa^*)\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle = (n+1)(aa^*)|n\rangle = (n+1)^2|n\rangle \\
a^*aaa^*|n\rangle &= a^*a(n+1)|n\rangle = (n+1)(a^*a)|n\rangle = (n+1)a^*\sqrt{n}|n-1\rangle = (n+1)n|n\rangle \\
a^*a^*aa|n\rangle &= \sqrt{n}a^*a^*a|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}a^*a^*|n-2\rangle = \sqrt{n}(n-1)a^*|n-1\rangle = n(n-1)|n\rangle \\
aa^*a^*a|n\rangle &= (aa^*)n|n\rangle = (n+1)n|n\rangle \\
a^*aa^*a|n\rangle &= (a^*a)n|n\rangle = n^2|n\rangle
\end{aligned}$$

לכן :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}^4 \rangle &= \frac{1}{(2\alpha)^2} \left((n+2)(n+1) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n-1) + (n+1)n + n^2 \right) \\
&= \frac{3}{(2\alpha)^2} (n^2 + (n+1)^2)
\end{aligned}$$

הגדרה : מצב קוהרנטי הוא וקטור עצמי של אופרטור a .

תרגיל 4 :

מצא את מקדמי הפרוק של המצב הקוהרנטי בבסיס יציבים של מתנד הרמוני :

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$$

מציא את התפלגות האנרגיה של המערכת הנמצאת במצב קוהרנטי. מצא

את התפתחות בזמן של מתנד הרמוני הנמצא במצב קוהרנטי.

פתרון

$\psi = \psi_\pi$ הוא וקטור עצמי של אופרטור a , לכן מתקיים :

$$(5.4.1) \quad a\psi = \lambda\psi$$

עבור מספר λ שיכול להיות מספר מרוכב כלשהו.

נציב את הפירוק לפי וקטורי הבסיס : $\sum c_n a|n\rangle = \lambda \sum c_n |n\rangle$ (ניתן להוציא קבועים מחוץ

לאופרטור).

$$\sum c_n \sqrt{n}|n-1\rangle = \sum c_n \lambda |n\rangle$$

נשווה מקדמים של מצבים זהים בשני האגפים : $c_n \lambda = c_{n+1} \sqrt{n+1}$

קבלנו נוסחת רקורסיה $c_{n+1} = \frac{c_n \lambda}{\sqrt{n+1}}$ או $c_n = \frac{c_{n-1} \lambda}{\sqrt{n}}$. ונמשיך להציב אותה בנוסחה

עצמה:

$$c_n = \frac{c_{n-1} \lambda}{\sqrt{n}} = \frac{c_{n-2} \lambda^2}{\sqrt{n-1} \sqrt{n}} = \dots = \frac{c_0 \lambda^n}{\sqrt{n!}}$$

$|c_n|^2$ - ההסתברות שהמתנד נמצא במצב $|n\rangle$ או ההסתברות שבמערכת יהיו n חלקיקים.

$$|c_n|^2 = \frac{\lambda^{2n}}{n!} c_0^2$$

סכום ההסתברויות על כל התחום שווה ל-1 ולכן:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = c_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^{2n}}{n!} = c_0^2 e^{\lambda^2} = 1$$

$$c_0 = e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \quad \text{מכאן } c_0^2 = e^{-\lambda^2}$$

$$(5.4.2) \quad c_n = \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \lambda^n}{\sqrt{n!}} \quad \text{לכן ניתן לכתוב:}$$

וגם הסתברות לאנרגיה $E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$ היא

$$|c_n|^2 = \frac{e^{-\lambda^2} (\lambda^2)^n}{n!}$$

קבלנו התפלגות פואסון עם פרמטר λ^2 - קצב הגעה ממוצע (בתהליך אקראי).

התפלגות פואסון בודקת את כמות ההופעות שיכולות להגיע ליחידת זמן.

אם מתנד הרמוני נמצא במצב קוהרנטי ψ_λ בזמן $t=0$ אזי בזמן $t > 0$ מצב המערכת

יהיה

$$\psi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i(n+0.5)\omega_0 t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+0.5)\omega_0 t} = e^{-\frac{\lambda^2}{2}} e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^{-i\omega_0 t})^n}{\sqrt{n!}} \approx \psi_{\lambda(t)}$$

כאשר $\lambda(t) = \lambda e^{-i\omega_0 t}$ מתאים למצב מתנד קלאסי במרחב הפאזה.

תרגיל 5. מצא פונקצית הגל המתארת מצב קוהרנטי

פתרון

מ- (5.3.2) ו (5.3.3) נקבל

$$. a = \frac{1}{2} \left(\sqrt{2\alpha} \hat{x} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \hat{p}_x \right) = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \hat{x} + \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \frac{\partial}{\partial x}$$

לכן, את המשוואה (5.4.1) של מצב קוהרנטי ניתן לכתוב כ-

$$\sqrt{\frac{\alpha}{2}} x \psi + \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \psi' = \lambda \psi$$

או

$$. \psi' = (\sqrt{2\alpha} \lambda - \alpha x) \psi$$

מסמן $z = \sqrt{2\alpha} \lambda$ ונפתור משוואה זו ע"י הפרדת משתנים:

$$\frac{d\psi}{\psi} = (z - \alpha x) dx, \Rightarrow \ln \psi = -\frac{1}{2\alpha} (z - \alpha x)^2, \Rightarrow \psi = A e^{-\frac{1}{2\alpha} (z - \alpha x)^2}$$

כאשר A קבוע נירמול.

כמו בפרק 2.6 ניתן להראות שקבוע הנירמול בלתי תלוי ב- z . היות עבור $z = 0$ מקבלים

מצב יסוד במתנד הרמוני, לפי (5.1.8) ו (5.1.9) $A = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}$. לכן מצב קוהרנטי שווה

$$.(5.4.2) \quad \psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{1}{2\alpha} (z - \alpha x)^2}$$

פרק 6: קירוב סמי – קלאסי בשיטת WKB

6.1 קירוב מסדר ראשון – למצבים יציבים של חלקיק בשדה משמר (מימד 1)

כדי למצוא מצבים יציבים של חלקיק בשדה משמר נפתור את משוואת שרדינגר:

$$(6.1.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

נניח שההשתנות של פוטנציאל $V(x)$ היא לא חזקה מידי ז. א. הכוח הוא חלש ואין מדרגות בפוטנציאל.

אם $V(x)$ קבוע, משוואת שרדינגר תהיה: $\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + V\psi = E\psi$ שניתן לכתוב אותה כ-

$$\hat{p}^2\psi = 2m(E - V)\psi \quad \text{לכן:} \quad \hat{p}\psi = \sqrt{2m(E - V)}\psi \quad \text{נסמן:}$$

$$(6.1.2) \quad p = \sqrt{2m(E - V)}$$

שיש לו משמעות של תנע. אזי פתרון של משוואת שרדינגר יהיה $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px}$.

לכן עבור $V(x)$ לא קבוע נחפש פתרון משוואה (6.1.1) מהצורה: $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}$ (6.1.3)

$$\text{נגזור:} \quad \psi'(x) = \frac{i}{\hbar}p'(x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}$$

$$\psi''(x) = \frac{i}{\hbar}p''(x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x} - \frac{1}{\hbar^2}(p'(x))^2 e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}$$

נציב את הנגזרות במשוואה (6.1.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{i}{\hbar}p''(x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x} - \frac{1}{\hbar^2}(p'(x))^2 e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}\right) + V(x)e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x} = Ee^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}$$

נעביר אגפים ונצמצם ב- $e^{\frac{i}{\hbar}p(x)x}$:

$$-\frac{i\hbar}{2m}p''(x) + \frac{1}{2m}(p'(x))^2 = E - V(x)$$

$$i\hbar p''(x) - (p'(x))^2 = 2m(V(x) - E)$$

קבלנו משוואה דיפרנציאלית לא ליניארית מסדר שני, שאין לנו כלים לפתור אותה באופן

ישיר. היות ומשוואה זו כוללת רק $p'(x)$ ונגזרותיה, נציב $p'(x) = g(x)$.

$$(6.1.4) \quad i\hbar g'(x) - g^2(x) = 2m(V(x) - E)$$

נתייחס ל- \hbar כפרמטר (ולא כקבוע), ונסמן את הפתרון של משוואה (6.1.4) על ידי $g(x, \hbar)$.
 נכתוב את הפונקציה $g(x, \hbar)$ כטור חזקות לפי \hbar :

$$g(x, \hbar) = g_0(x) + g_1(x)\hbar + g_2(x)\hbar^2 + \dots$$

\hbar הוא מספר קטן, ובחזקות גבוהות מ-2 ניתן להזניח אותו.
 נציב את הפירוק של הפונקציה במשוואה (6.1.4) וניקח רק את האיברים בהם מופיע \hbar
 בחזקה קטנה
 מ-2:

$$2m(V(x) - E) = i\hbar(g_0'(x) + g_1'(x)\hbar + g_2'(x)\hbar^2 + \dots) - (g_0^2(x) + 2g_0(x)g_1(x)\hbar + g_1^2(x)\hbar^2 + 2g_0(x)g_2(x)\hbar^2 + \dots)$$

נסדר את המשוואה לפי החזקות של \hbar :

$$-g_0^2(x) + (ig_0'(x) - 2g_0(x)g_1(x))\hbar + (ig_1'(x) - g_1^2(x) - 2g_0(x)g_2(x))\hbar^2 + \dots = 2m(V(x) - E)$$

נשווה מקדמים לפי חזקות של \hbar :

← מקדם ללא \hbar : $-g_0^2(x) = 2m(V(x) - E)$, לכן:

$$(6.1.5) \quad g_0(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

← המקדם שעל יד \hbar : $ig_0'(x) - 2g_0(x)g_1(x) = 0$ $\Leftrightarrow g_1(x) = \frac{ig_0'(x)}{2g_0(x)}$

את $g_0(x)$ אנחנו כבר יודעים וניתן להציב אותו.

אפשר למצוא מקדמים נוספים. הטורים האלו לא בהכרח מתכנסים, כך שלא בהכרח נקבל קירובים טובים יותר. הקירוב הזה מסדר ראשון (כלומר המקדם של \hbar - $g_1(x)$) הוא מספיק טוב.

לפי ההצבה $p'(x) = g(x)$, ואת הפירוק לטור חזקות ניתן לכתוב:

$$p'(x) = g(x) \approx g_0(x) + \frac{ig_0'(x)}{2g_0(x)}\hbar + \dots$$

בהמשך נזניח את שאר האיברים.

לכן:
$$p(x) = \int g_0(x) dx + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{g_0'(x)}{g_0(x)} dx = \int g_0(x) dx + \frac{i\hbar}{2} \ln|g_0(x)|$$

לפי זה הפתרון הכללי של המשוואה:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p(x)} = e^{\frac{i}{\hbar} \int g_0(x) dx - \frac{1}{2} \ln|g_0(x)|} = e^{\frac{i}{\hbar} \int g_0(x) dx} \cdot e^{-\frac{1}{2} \ln|g_0(x)|}$$

הכנסנו את ה- $\left(-\frac{1}{2}\right)$ לתוך ה- \ln , כעת ניתן לומר $e^{-\frac{1}{2} \ln|g_0(x)|} = \frac{1}{\sqrt{|g_0(x)|}}$

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|g_0(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int g_0(x) dx} \quad \text{לכן נכתוב:}$$

כידוע, $p = \hbar k$ ולפי משוואות (6.1.5) ונסמן:

$$(6.1.6) \quad k(x) = \frac{g_0(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E-V(x))}}{\hbar}$$

היות ול- $g_0(x)$ לפי משוואות (6.1.5) יש שני שורשים, חיובי ושלילי, הפתרון הכללי המקורב מסדר ראשון לבעיה הוא צירוף ליניארי של שתי פתרונות:

$$(6.1.7) \quad \psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|k(x)|}} e^{i \int k(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|k(x)|}} e^{-i \int k(x) dx}$$

כשהשורש שלילי נציב $-k(x)$, נשתמש ש- $|-k(x)| = |k(x)|$ והקבוע \hbar נכנס לתוך הקבועים c_1, c_2 .

מתי הקירוב (6.1.7) יהיה טוב?

נוכל לומר שהקירוב $g(x) = g_0(x) + g_1(x)\hbar$ הוא קירוב טוב, כאשר האיבר השני בטור קטן מהאיבר הראשון, כלומר: $g_0(x) \gg g_1(x)\hbar$.

$$\frac{\hbar g_1(x)}{g_0(x)} \ll 1 \quad \text{זה שקול ל:}$$

$$(6.1.8) \quad \frac{\hbar i g_0'(x)}{2g_0^2(x)} \ll 1 \quad \text{הצבה לפי משוואה (6.1.6) תיתן:}$$

$$g_0^2(x) = 2m(E-V(x)) \quad \text{לפי משוואה (6.1.5)}$$

$$2g_0(x)g_0'(x) = -2mV'(x) \quad \text{נגזור את שני האגפים לפי } x$$

$$\Rightarrow g_0'(x) = -\frac{mV'(x)}{g_0(x)}$$

$$\frac{\hbar m |V'(x)|}{2g_0^3(x)} \ll 1 \quad \text{נציב בתנאי לנכונות הקירוב:}$$

$$(6.1.9) \quad \frac{\hbar m |F|}{2g_0^3(x)} \ll 1 \quad \text{נגזרת של פוטנציאל היא כוח לכן נכתוב:}$$

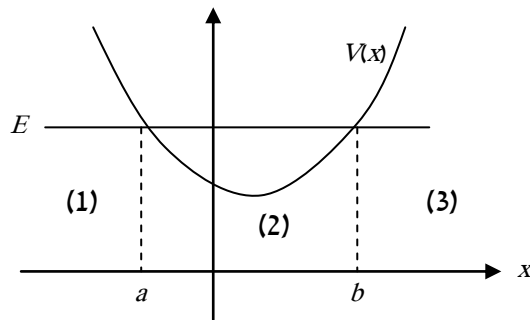
לפי האי שוויון הזה ניתן לומר שהקירוב הוא טוב כאשר:

$$1. \quad F - \text{ הכוח קטן.}$$

$$2. \quad 0 \ll |g_0(x)| = \sqrt{2m(E-V(x))}$$

על פי תנאי 2, אי אפשר להשתמש בקירוב באזורים בהם האנרגיה קרובה לפוטנציאל כלומר $E \approx V(x)$.

6.2 בור פוטנציאל – פתרון WKB



בתחום (1), כאשר $x < a$, ומתקיים $E < V(x)$:

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)}$$

ולכן $|k(x)| = -ik(x) \in \text{Im}(z)^+$.

הפתרון הכללי על פי משוואה (6.1.7):

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|k(x)|}} e^{i \int k(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|k(x)|}} e^{-i \int k(x) dx} = \frac{c_1}{\sqrt{|k(x)|}} e^{-\int |k(x)| dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|k(x)|}} e^{\int |k(x)| dx}$$

נעבור מאינטגרל לא מסוים לאינטגרל מסוים: $\int f(x) dx = \int_a^x f(y) dy = -\int_x^a f(y) dy$

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|k(x)|}} e^{\int_x^a |k(y)| dy} + \frac{c_2}{\sqrt{|k(x)|}} e^{-\int_x^a |k(y)| dy}$$

היות ו- $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$ נקבל ש- $c_1 = 0$. כמו כן $\frac{1}{\sqrt{-i}} = e^{i\frac{\pi}{4}}$. לכן ניתן לכתוב:

$$(6.2.1) \quad \psi_1(x) = \frac{c}{\sqrt{-ik(x)}} e^{-\int_x^a |k(y)| dy} = \frac{c e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int_x^a k(y) dy}$$

בתחום (3), כאשר $x > b$, ומתקיים $E < V(x)$:

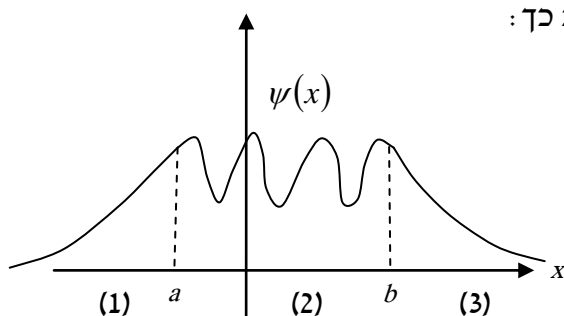
באותו אופן כמו קודם ניתן לקבל:

$$(6.2.2) \quad \psi_3(x) = \frac{\tilde{c}}{\sqrt{-ik(x)}} e^{-\int_b^x |k(y)| dy} = \frac{\tilde{c} e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{k(x)}} e^{i\int_b^x k(y) dy}$$

בתחום (2) כאשר $k(x) \geq 0$, $a < x < b$ ולכן הפתרון הוא מהצורה:

$$(6.2.3) \quad \psi_2(x) = \frac{c_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i\int_a^x k(y) dy} + \frac{c_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\int_a^x k(y) dy}$$

בסופו של דבר הפונקציה המתקבלת נראית כך:



לכאורה היינו צריכים למצוא $\psi(x)$ לפי הדבקת חלקיה לפי רציפות בפונקציה ונגזרותיה בנקודות a ו- b . אבל כיוון שבאזור של נקודות a ו- b , $E \approx V(x)$ ולא מתקיים התנאי 2 לקיום של הקירוב וגם הקירוב שואף לאינסוף בנקודות אלו, לא נוכל להשתמש בשיטות הקודמות.

ישנן שתי שיטות לבצע (בערך) את ההדבקה של הפתרון המקורב:

1. בעזרת פונקציות איירי – באזור הבעייתי מחליפים את $V(x)$ בקירובה הליניארי (קו ישר).

2. התייחסות במישור המרוכב באזור נקודות הדבקה.

נשתמש בשיטה השנייה לבצע הדבקה של $\psi_1(x)$ המוגדרת על ידי (6.2.1) לפונקציה $\psi_2(x)$ המוגדרת על ידי (6.2.3) בנקודה a . היות שבאזור ההדבקה האקספוננטות בפונקציות

$$\frac{e^{i\int_a^x k}}{\sqrt{k}} = \frac{e^{-i\int_a^x k}}{\sqrt{k}} \quad \text{אלו שואפות ל-1, נשווה רק את המקדמים על יד}$$

מקדמים אלו הם: $c e^{i\frac{\pi}{4}}$ עבור ψ_1 ו עבור ψ_2 ישנם 2 מקדמים: ראשון - (על ידי

$$c_2 \frac{c_1}{\sqrt{-1}} = c_1 e^{-i\frac{\pi}{2}} \quad (k \rightarrow -k \text{ החלפה})$$

$$c_1 = c e^{i\frac{3\pi}{4}} = -c e^{-i\frac{\pi}{4}} \quad \text{שנותן} \quad c e^{i\frac{\pi}{4}} = c_1 e^{-i\frac{\pi}{2}}$$

$$\cdot c e^{i\frac{\pi}{4}} = c_2 \quad \text{ו-}$$

לכן, משוואה (6.2.3) תהיה:

$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= \frac{-c e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int_a^x k(y) dy} + \frac{c e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_a^x k(y) dy} \\ &= \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \left(e^{i \left(-\int_a^x k(y) dy + \frac{\pi}{4} \right)} - e^{-i \left(-\int_a^x k(y) dy + \frac{\pi}{4} \right)} \right) = \frac{2ci}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(-\int_a^x k(y) dy + \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{2ci}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_a^x k(y) dy + \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned}$$

באותו אופן נעשה הדבקה בנקודה b , ונקבל:

$$\psi_2(x) = \frac{2\tilde{c}i}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^b k(y) dy - \frac{\pi}{4} \right)$$

צריך לומר ששתי הפונקציות שוות כי הן מגדירות את פונקציית הגל באותו תחום:

$$c \cdot \cos \underbrace{\left(\int_a^x k(y) dy + \frac{\pi}{4} \right)}_{\alpha} = \tilde{c} \cdot \cos \underbrace{\left(\int_x^b k(y) dy - \frac{\pi}{4} \right)}_{\beta}$$

כדי שהשוויון יתקיים, צריכים להתקיים ש:

$$c = \pm \tilde{c}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = 2\pi m \\ \alpha + \beta = \pi + 2\pi m \end{cases}$$

לכן בעצם אפשר לומר שמתקיים: $\alpha + \beta = \pi m$, ונציב:

$$\underbrace{\int_a^x k(y) dy - \frac{\pi}{4}}_{\alpha} + \underbrace{\int_x^b k(y) dy + \frac{\pi}{4}}_{\beta} = \pi m$$

$$\int_a^b k(x) dx = \pi n$$

נכפיל את שני האגפים ב- \hbar ונשתמש ש- $\hbar k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ לפי נוסחא (6.1.6) שיש לו משמעות של תנע ונקבל:

$$(6.2.4) \quad \int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \pi \hbar n = \frac{h}{2} n$$

כאשר $h = 2\pi\hbar$.

קוונטיזציה של בוהר – זומרפלד

כשהאלקטרונים מסתובבים סביב הגרעין, הם נמצאים במסלולים מסוימים לפי תנאי הקוונטיזציה של בוהר - זומרפלד: $\oint p(x) dx = nh$. כלומר, אינטגרל לאורך המסלול של התנע שווה למספר שלם של כפולות של קבוע פלנק- h .

אפשר לומר שאינטגרל על מסלול סגור הוא פעמיים הקטע ab , לכן לפי מה שקבלנו במשוואה (6.2.4):

$$2(ab) \rightarrow \oint \sqrt{2m(E - V(x))} dx = hn$$


כלומר המשוואה שקבלנו מתאימה לתנאי הקוונטיזציה של בוהר – זומרפלד.

תרגיל:

יהי $\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy}$ (על פי משוואה (6.2.3)).

נניח $p(x) = m \cdot v(x)$, כאשר $v(x)$ - מהירות.

הראה כי $J(x) = \rho(x)v(x)$ כאשר: $J(x)$ - צפיפות זרם, $\rho(x)$ - צפיפות המיקום.

פתרון:

הצפיפות $\rho(x)$ קשורה לפונקציית הגל באופן הבא: $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \bar{\psi}(x)\psi(x)$

$$(6.2.5) \quad \rho(x) = \frac{\bar{c}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} \cdot \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} = \frac{|c|^2}{|p(x)|} : \text{לכן לפי הנתונים:}$$

הנוסחה של זרם ההסתברות:

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi'(x)\bar{\psi}(x) - \bar{\psi}'(x)\psi(x))$$

נציב את פונקציית הגל הצמוד שלה והנגזרות:

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(-\frac{c \pm p'(x)}{2 |p(x)|^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx} + \frac{ic \cdot p(x)}{\hbar \sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} \right) \frac{\bar{c}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} - \frac{\hbar}{2mi} \left(-\frac{\bar{c} \pm p'(x)}{2 |p(x)|^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} - \frac{i\bar{c} \cdot p(x)}{\hbar \sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy} \right) \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(y) dy}$$

האיבר הראשון והשלישי מצטמצמים, וגם $e^{-\alpha} e^\alpha = 1$, לכן מה שנשאר במשוואה:

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \frac{2i}{\hbar} \frac{|c|^2}{|p(x)|} p(x)$$

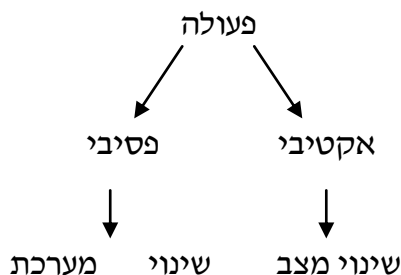
מ.ש.ל. לפי משוואה (6.2.5): $J(x) = \rho(x) \frac{p(x)}{m} = \rho(x)v(x)$

באמצעות הקירוב קבלנו משוואה ידועה, דבר זה מראה שהקירוב שעשינו באמצעות WKB הוא בכיוון הנכון.

פרק 7: סימטריה במכניקה קוונטית

7.1 פעולות על מרחב המצבים

ניתן להתייחס לכל פעולה בשני אופנים, ושניהם נותנים אותה תוצאה:

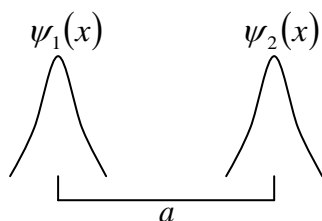


נגדיר אופרטור הפעולה:

אם $\psi_1(x)$ - תיאור המצב לפני הפעולה ו- $\psi_2(x)$ - תיאור המצב לאחר הפעולה ו- T_a מסמן פעולה, כאשר a הוא פרמטר הפעולה, אזי נגדיר \hat{T}_a - האופרטור המתאים למצב $\psi_1(x)$ את המצב $\psi_2(x)$, ז.א. $\psi_2(x) = \hat{T}_a \psi_1(x)$. למשל:

פעולת הזזה

נסמן: T_a - פעולת ההזזה, כאשר a הוא פרמטר המתאר את גודל הזזה. במקרה זה \hat{T}_a - האופרטור המתאים למצב $\psi_1(x)$ את המצב המוזז ב- a . היות והזזה ב- a שקולה להזזת הצירים בכיוון $(-a)$ לכן:



$$\psi_2(x) = \hat{T}_a \psi_1(x) = \psi_1(x-a)$$

טענה: פעולת הזזה מיוצגת על ידי אופרטור אוניטרי זאת אומרת שמתקיים -

$$(7.1.1) \quad T_a^* T_a = I$$

המשמעות של תכונת אוניטריות היא שאורך הווקטור נשמר לאחר הפעלת האופרטור

$$|\hat{T}_a \psi| = |\psi|$$

בדיקה:

נבדוק שהאופרטור שומר על אורך הווקטור.

$$|\hat{T}_a \psi|^2 = \langle \hat{T}_a \psi | \hat{T}_a \psi \rangle = \langle \psi(x-a) | \psi(x-a) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(x-a) \psi(x-a) dx$$

נציב $y = x - a$, לכן: $dx = dy$ והגבולות לא משתנים.

$$|\hat{T}_a \psi|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(y) \psi(y) dy = |\psi|^2$$

הוכחנו שאורך הווקטור נשמר, ומכאן נובע כי \hat{T}_a הוא אופרטור אוניטרי.

הגדרה: חבורה חד פרמטרית היא אוסף פעולות Q_s כלשהי, המתוארת על ידי פרמטר ממשי s , כאשר עבור כל זוג מספרים s_2, s_1 , מתקיים:

$$(7.1.2) \quad Q_{s_1+s_2} = Q_{s_1} Q_{s_2}$$

חבורת חד פרמטריות מקיימות גם את השיויונים הבאים:

$$(7.1.3) \quad Q_0 = I \quad 1. \text{ כאשר } s=0, \text{ מתקיים:}$$

בדיקה: $Q_{s_1} = Q_{0+s_1} = Q_0 Q_{s_1} \Rightarrow Q_0 = I$ (אופרטור שמכפלתו באופרטור אחר נותן את אותו אופרטור הוא אופרטור הזהות).

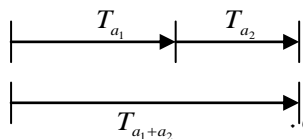
$$(7.1.4) \quad (Q_s)^{-1} = Q_{-s} \quad 2.$$

$$, Q_s Q_{-s} = Q_{s+(-s)} = Q_0 = I \text{ מתקיים:}$$

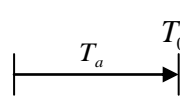
אם מכפלה של שני אופרטורים נותנת את אופרטור הזהות, אז אופרטור אחד הוא האופרטור ההפוך של השני, וניתן לכתוב: $(Q_s)^{-1} = Q_{-s}$.

דוגמאות:

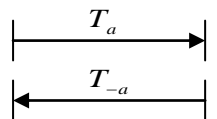
א. פעולת הזזה (עם פרמטר a):

$$\sim \text{ על פי משוואה (7.1.2) מתקיים: } T_{a_1+a_2} = T_{a_1} T_{a_2},$$


זאת אומרת הזזה ב- $a_1 + a_2$ היא הזזה ב- a_1 והזזה ב- a_2 .

$$\sim \text{ על פי משוואה (7.1.3) מתקיים: } T_0 = I, T_0 T_a = T_{0+a} = T_0 T_a \Leftrightarrow$$


זאת אומרת, הזזה ב- a שווה להזזה ב- a ואחר כך הזזה ב- 0 .

$$\sim \text{ על פי משוואה (7.1.4) מתקיים: } (T_a)^{-1} = T_{-a},$$


זאת אומרת הפעולה ההפוכה של הזזה ב- a היא הזזה ב- $(-a)$.

ב. אופרטור התפתחות בזמן (עם פרמטר t):

$$\sim \text{ על פי משוואה (7.1.2) מתקיים: } U(t_1+t_2) = U(t_2)U(t_1)$$

זאת אומרת ההתפתחות בזמן $t_1 + t_2$ היא ההתפתחות בזמן t_1 ואחר כך ההתפתחות בזמן t_2 .

~ על פי משוואה (7.1.3) מתקיים: $U(0) = I \Leftrightarrow U(t) = U(t+0) = U(t)U(0)$.

~ על פי משוואה (7.1.4) מתקיים: $(U(t))^{-1} = U(-t)$.

7.2 יוצר פעולה

הגדרה: יוצר פעולה הוא אופרטור המייצג גודל פיזיקאלי הגורם לביצוע הפעולה.

יוצר פעולה מבטא את התנהגות אינפיניטסימאלית עבור פרמטר s קטן.

נסמן: G - יוצר הפעולה, ו- α - מקדם כלשהו שנמצא בהמשך.

ניתן לבטא פעולה כלשהי באמצעות פירוק באופן דומה לפירוק טיילור:

$$Q_s = I + s\alpha G + \dots$$

האיברים הנוספים הם קירובים מסדרים גבוהים יותר, כאשר עבור פרמטר s קטן ניתן להזניח אותם.

לכן נכתוב: $\alpha G = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{Q_s - I}{s}$.

$$(7.1.5) \quad \alpha G = \left. \frac{d(Q_s)}{ds} \right|_{s=0} \quad \text{על פי משוואה (7.1.3)}$$

מכאן ניתן לומר שיוצר הפעולה קשור עם הנגזרת של הפעולה בנקודה $s = 0$.

כדי להגדיר את מקדם α נתבונן ביוצר של אופרטור התפתחות בזמן.

נפעיל את אופרטור ההתפתחות בזמן על פונקציה כלשהי:

$$\alpha G \psi(\mathbf{r}, 0) = \left. \frac{\partial}{\partial t} U(t) \psi(\mathbf{r}, 0) \right|_{t=0}$$

לפי הגדרת אופרטור התפתחות בזמן:

$$\alpha G \psi(\mathbf{r}, 0) = \left. \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \right|_{t=0}$$

לפי משוואת שרדינגר:

$$\alpha G \psi(\mathbf{r}, 0) = \left. \frac{1}{i\hbar} H \psi(\mathbf{r}, t) \right|_{t=0} = \frac{1}{i\hbar} H \psi(\mathbf{r}, 0)$$

$$\Rightarrow \alpha G = \frac{1}{i\hbar} H$$

לכן G הוא כפולה של H ונוכל לקבל $G = H$ אם נגדיר $\alpha = \frac{1}{i\hbar}$. ואז ניתן לומר, יוצר של

אופרטור התפתחות בזמן הוא ההמילטוניאן.

לכן, על פי משוואה (7.1.5) נגדיר את יוצר הפעולה ע"י:

$$(7.1.6) \quad G = i\hbar \left. \frac{d(Q_s)}{ds} \right|_{s=0}$$

הנגזרת של האופרטור האוניטרי (הפעולה) לא צמוד לעצמו. בתרגיל הבא נראה שכדי שיוצר הפעולה יהיה אופרטור צמוד לעצמו ואז היוצר יבטא גודל פיזיקאלי (על פי הנחת יסוד שנייה) צריך להכפיל את נגזרת הפעולה ב- i .

תרגיל:

יהי $U(t)$ אוסף של אופרטורים אוניטריים המקיים $U(0) = I$. הראה כי $A = \left. \frac{\partial U(t)}{\partial t} \right|_{t=0}$

מקיים:

$$A^* = -A$$

הוכחה:

$$U(t)^* U(t) = I \quad : (7.1.1)$$

נגזור את שני האגפים ונשתמש בנוסחה של נגזרת של מכפלה:

$$\frac{\partial U(t)^*}{\partial t} U(t) + U(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} = 0$$

$$A^* = -A \iff A^* I + I A = 0 : U(0) = I \text{ והנחה } A$$

לכן מתקיים: $(iA)^* = \bar{i}A^* = -i(-A) = iA$, ואופרטור iA צמוד לעצמו ויכול לייצג גודל פיזיקלי.

דוגמה

מצא את היוצר של פעולת ההזזה.

$$G = i\hbar \left. \frac{d(T_a)}{da} \right|_{a=0} \quad \text{נמצא לפי משוואה (7.1.6) היוצר של פעולת ההזזה מוגדר כ-:}$$

נפעיל את היוצר על פונקציה כלשהי:

$$G(\psi(x)) = i\hbar \left. \frac{\partial}{\partial a} \psi(x-a) \right|_{a=0}$$

נסמן: $x = y + a$, $y = x - a$. נעבור למשתנה y ואח"כ נחזור ל- x :

$$\frac{\partial \psi(x-a)}{\partial a} = \frac{\partial \psi(y)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial a} = (-1) \frac{\partial \psi(y)}{\partial y} = - \frac{\partial \psi(x-a)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial y} = - \frac{\partial \psi(x-a)}{\partial x}$$

נחזור ליוצר של פעולת ההזזה. נבצע את ההצבה בשלב האחרון:

$$G(\psi(x)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial a} \psi(x-a) \Big|_{a=0} = i\hbar \left(-\frac{\partial \psi(x-a)}{\partial x} \right) \Big|_{a=0} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

לפי ההגדרה של אופרטור תנע, אפשר לומר:

$$G(\psi(x)) = \hat{p}_x \psi(x)$$

כלומר יוצר של פעולת הזזה מרחבית הוא תנע.

7.3 הקשר בין היוצר והפעולה

כמו שראינו, היוצר של אופרטור התפתחות בזמן $U(t)$ הוא ההמילטוניאן H . כמו כן,

בסעיף 3.3 ראינו ש- $U(t)$ מקיים: $U(t) = e^{\frac{t}{i\hbar} H}$. זה מראה שבמקרא זה הפעולה היא אקספוננט של כפולה מספרית של היוצר. הכפולה זו חיונית על מנת לקבל גודל חסר יחידות שמאפשר הפעלת פונקציה עליו. קשר זה בין יוצר ופעולה נכון גם במקרא כללי. נבדוק זה עבור אופרטור הזזה.

טענה: אם T_a אופרטור הזזה, היוצר של הפעולה הוא אופרטור תנע: $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. נראה

כי:

$$T_a = e^{\frac{a}{i\hbar} \hat{p}_x}$$

הוכחה

לפי הגדרת האקספוננט (פירוק לפי טור טיילור):

$$e^\alpha = \sum \frac{\alpha^n}{n!}$$

כלומר:

$$\begin{aligned} e^{\frac{a\hat{p}_x}{i\hbar}} &= 1 + \frac{a\hat{p}_x}{i\hbar} + \frac{1}{2!} \left(\frac{a\hat{p}_x}{i\hbar} \right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{a\hat{p}_x}{i\hbar} \right)^3 + \dots \\ &= 1 - a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{a^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \end{aligned}$$

כדי לראות איך פועל האופרטור, נפעיל אותו על (וקטור) פונקציית גל כלשהי ונשתמש בנוסחת של טור טיילור.

$$e^{\frac{a\hat{p}_x}{i\hbar}} \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(x) \frac{(-a)^n}{n!} = \psi(x-a)$$

לכן, לפי הגדרת אופרטור הזזה: $e^{\frac{a\hat{p}_x}{i\hbar}} \psi(x) = T_a \psi(x)$

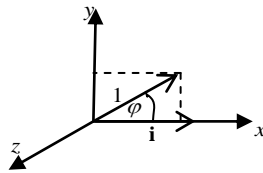
7.4 פעולת הסיבוב ויוצר של פעולת הסיבוב

נבטא את הסיבוב במרחב כאופרטור.

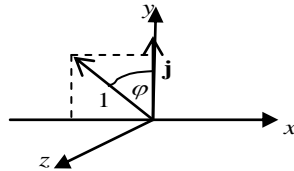
יהי וקטור כלשהו: $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$. סיבוב סביב ציר z בזווית φ , נסמן: R_φ^k , כאשר \mathbf{k} הוא

וקטור יחידה של ציר z .

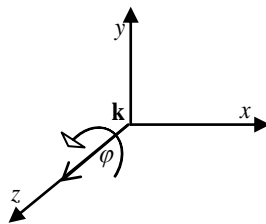
כדי למצוא מטריצה של האופרטור הסיבוב, נבדוק כיצד פועל האופרטור על וקטורי הבסיס:



$$R_\varphi^k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$R_\varphi^k \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$R_\varphi^k \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

לכן המטריצה של אופרטור הסיבוב היא:

$$R_\varphi^k = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

פעולת הסיבוב על מצב כלשהו: $R_\varphi^k \psi(\mathbf{r}) = \psi(R_{-\varphi}^k \mathbf{r})$

כדי לדעת מה קורה בנקודה \mathbf{r} , צריך לבצע את הפעולה ההפוכה על הנקודה (כמו בפעולת הזזה).

ניתן לראות כי אוסף כל הסיבובים סביב ציר קבוע הוא חבורה חד פרמטרית, כלומר:

$$R_{\varphi_2}^k R_{\varphi_1}^k = R_{\varphi_1 + \varphi_2}^k$$

תרגיל בית: בדוק את נוסחה זו.

יוצר של סיבוב סביב ציר z מסמנים על ידי $\hat{\ell}_z$, והוא נקרא רכיב z של התנע הזוויתי.

לפי הגדרת יוצר פעולה – משוואה (7.1.6):

$$\hat{\ell}_z \psi(\mathbf{r}) = i\hbar \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} R_\varphi^k \psi(\mathbf{r}) \right|_{\varphi=0} = i\hbar \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(R_{-\varphi}^k \mathbf{r}) \right|_{\varphi=0}$$

נציב את המטריצה המייצגת את האופרטור:

$$\hat{\ell}_z \psi(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi \left[\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right] \Bigg|_{\varphi=0} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi \begin{pmatrix} x \cos \varphi + y \sin \varphi \\ -x \sin \varphi + y \cos \varphi \\ z \end{pmatrix} \Bigg|_{\varphi=0}$$

לפי כלל שרשרת בנגזרות:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z \psi(\mathbf{r}) &= i\hbar \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} (x \cos \varphi + y \sin \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} (-x \sin \varphi + y \cos \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} (z) \right] \Bigg|_{\varphi=0} \\ &= i\hbar \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} (-x \sin \varphi + y \cos \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial y} (-x \cos \varphi - y \sin \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial z} \cdot 0 \right] \Bigg|_{\varphi=0} \\ &= i\hbar \left[\frac{\partial \psi}{\partial x} y - \frac{\partial \psi}{\partial y} x \right] = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi \end{aligned}$$

$$(7.1.7) \quad \hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \text{ : לכן אופרטור יוצר של סיבוב הוא}$$

ואפשר לכתוב: $\hat{\ell}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$. כאן לא משנה הסדר בכפל כי \hat{p}_y ו- \hat{p}_x כמו \hat{y} ו- \hat{x} מתחלפים (לעומת \hat{p}_x ו- \hat{y} , \hat{p}_y ו- \hat{x}).

במכאניקה קלאסית רכיב z של התנע הזוויתי שווה $l_z = xp_y - yp_x$, לכן לפי תהליך קוונטיזציה נתאים לגודל זה אופרטור: $\hat{\ell}_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. אנו מצאנו את אופרטור זה כיוצר של פעולת סיבוב סביב ציר z .

באותו אופן נקבל שיוצר של סיבוב סביב ציר x ניתן ע"י אופרטור:

$$(7.1.8) \quad \hat{\ell}_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

המיצג את רכיב x של התנע הזוויתי

ויוצר של סיבוב סביב ציר y ניתן ע"י אופרטור:

$$(7.1.9) \quad \hat{\ell}_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

המיצג את רכיב y של התנע הזוויתי.

7.5 חוקי שימור

הגדרה: מערכת קוונטית היא אינווריאנטית (נשמרת) ביחס לפעולה כלשהי Q_s , אם ההמילטוניאן שלה H מתחלף עם Q_s כלומר מתקיים: $[H, Q_s] = 0$.

טענה: אם מערכת קוונטית היא אינווריאנטית (נשמרת) ביחס לפעולה Q_s , אזי גודל הפיזיקאלי הקשור ליוצר הפעולה נשמר.

הוכחה:

נניח שמערכת קוונטית עם המילטוניאן H היא אינווריאנטית (נשמרת) ביחס לפעולה Q_s , זאת אמרת, מתקיים: $[H, Q_s] = 0 \Leftrightarrow HQ_s - Q_s H = 0$.

כדי להגיע ליוצר הפעולה נגזור משוואה אחרונה לפי s , נציב גבול כאשר $s = 0$, ונכפול ב- $i\hbar$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} (HQ_s - Q_s H) \Big|_{s=0} = 0$$

$$i\hbar \left(H \frac{\partial}{\partial s} Q_s \Big|_{s=0} - \frac{\partial}{\partial s} Q_s \Big|_{s=0} H \right) = 0 \quad \text{להמילטוניאן לא תלוי ב- } s, \text{ לכן:}$$

נסמן את יוצר הפעולה Q_s ע"י G . נציב את יוצר הפעולה על פי משוואה (7.1.6):

$$[G, H] = 0 \quad \text{לכן, } HG - GH = 0$$

על פי הגדרת גודל פיזיקלי בהצגת הייזנברג, השינוי בזמן של הגודל הפיזיקאלי G ,

$$G^{(H)} = e^{-\frac{iH}{\hbar}} G e^{\frac{iH}{\hbar}} \quad \text{המתואר ע"י } G^{(H)}, \text{ שווה ל:}$$

$$[G^{(H)}, H] = 0 \quad \text{נבדוק האם מתקיים:}$$

$$[G^{(H)}, H] = G^{(H)} H - H G^{(H)} = e^{-\frac{iH}{\hbar}} G e^{\frac{iH}{\hbar}} H - H e^{-\frac{iH}{\hbar}} G e^{\frac{iH}{\hbar}} \quad \text{נחשב:}$$

נעביר את H פנימה (כי H מתחלף עם כל פונקציה שלו), ואז ניתן לכתוב:

$$[G^{(H)}, H] = e^{-\frac{iH}{\hbar}} \underbrace{(GH - HG)}_0 e^{\frac{iH}{\hbar}} = 0$$

על פי משוואת הדינמיקה של הייזנברג: $[G^{(H)}, H] = i\hbar \frac{\partial G^{(H)}}{\partial t}$ לכן $i\hbar \frac{\partial G^{(H)}}{\partial t} = 0$.

זה מראה ש- $G^{(H)}$ בלתי תלוי בזמן וגודל הפיסיקאלי המתואר ע"י G נשמר. שים לב שבמקרה זה נשמרים ההסתברויות לקבל כל ערך מסוים, תוחלת ושונות וכי של G על המערכת קוונטית זו.

הוכחנו את נכונות הטענה.

דוגמאות לשימוש בטענה:

1. כאשר H אינו תלוי במקום, כלומר יש שדה פוטנציאל אחיד $V(\mathbf{r}) = V_0$. מתקיים $[T_a, H] = 0$, כי H אינו תלוי במקום ולכן הכפלה באופרטור הזזה - T_a , לא תשפיע עליו. במקרה כזה יש שימור של התנע (היוצר של הזזה).

2. כאשר H אינו תלוי בסיבוב סביב ציר a כלשהו, אזי רכיב a של התנע הזוויתי נשמר.

כדוגמה לשימוש בדוגמה אחרונה, נבדוק שהמילטוניאן של אטום מימן, המוגדר ע"י:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\gamma}{r}$$

r המסמל את המרחק מהראשית, לא משתנה בסיבוב. נבדוק שגם הלפלסיאן לא משתנה על ידי הסיבוב. נסמן את הקורדינטות הקרטזיות לפני הסיבוב ע"י x, y, z וקורדינטות החדשות אחרי הסיבוב ע"י x', y', z' . הלפלסיאן

$$\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \text{ ואחרי הסיבוב } \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \text{ אם מתקיים:}$$

ידוע שלפלסיאן בקואורדינטות מוכללות שווה ל:

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial x'} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y'} \right) + \frac{\partial}{\partial z'} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \cdot \frac{\partial}{\partial z'} \right) \right]$$

כאשר h_1, h_2, h_3 הם מקדמי המטריקה בקואורדינאטות החדשות. היות גם קואורדינאטות החדשות הם קואורדינאטות קרטזיות, $ds^2 = (dx')^2 + (dy')^2 + (dz')^2$. לכן $h_1 = h_2 = h_3 = 1$, ולפליסיאן אחרי הסיבוב שווה לפליסיאן לפני הסיבוב. הראנו שהמילטוניאן של אטום מימן אינו תלוי בסיבוב.

מסקנה: באטום מימן הרכיב a של התנע הזוויתי עבור כל כיוון a נשמר.

7.6 מערכות משולבות חלקיקים זהים

כאשר יש לנו מערכת בעלת שני חלקיקים זהים, לא כל הצירופים של המצבים הם אפשריים.

נגדיר אופרטור הנקרא אופרטור חילוף P , כך ש: $P|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle$

כאשר: $|\psi_1\rangle$ הוא מצב של חלקיק אחד

$|\psi_2\rangle$ הוא מצב של חלקיק שני

לפי הגדרת אופרטור החילוף נקבל כי $P^2 = I$, כלומר הפעלה פעמיים של אופרטור החילוף נותנת את אופרטור הזהות.

כאשר מפעילים אופרטור חילוף על שני חלקיקים זהים, אזי המצב אחרי ההחלפה זהה למצב לפני ההחלפה, כלומר המצב $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$ זהה למצב $|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle$ לכן על פי הנחת יסוד

הראשונה הקשר ביניהם הוא של הכפלה בקבוע: $|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle = k|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$

נמצא את הקבוע, נשתמש בהגדרת P , $P^2 = 1$ ו- k :

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = P^2|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = P(P|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle) = P(k|\psi_2\rangle|\psi_1\rangle) = kP(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle) = k^2|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$$

לכן אפשר לומר: $k^2 = 1 \Leftrightarrow k = \pm 1$.

ישנן שתי אפשרויות:

(1) $k = 1$, אופרטור חילוף שומר את וקטור המצב.

מתאים לחלקיקים מסוג בוזונים, המקיימים את התפלגות בוז-איינשטיין.

עבור חלקיקים אלו אם יש שתי אלומות ואלומה אחת עברה חילוף תכונות האלומות יתחזקו.

(2) $k = -1$, אופרטור חילוף הופך את המצב ל-(-).

מתאים לחלקיקים מסוג פרמיונים, המקיימים את התפלגות פרמי-דירק. עבור

חלקיקים אלו אם יש שתי אלומות ואחת עברה חילוף, סכום שתי האלומות ייתן אפס.

אופרטור החלפה נותן את אותו אפקט שיוצר הפרש פאזה.

עקרון האיסור של פאולי:

העקרון טוען כי לא ניתן למצוא שני פרמיונים במצב זהה במערכת אחת.

הוכחה (על דרך השלילה):

נניח ששני פרמיונים נמצאים במצב זהה $|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$. נבחר תיאור של מצב המערכת $\tilde{\psi}$,

$$\tilde{\psi} = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\psi_3\rangle\dots$$

נפעיל אופרטור חילוף על מצב המערכת:

נבצע החלפה של מצב שני החלקיקים, וכיוון שהם זהים נקבל ש:

$$P\tilde{\psi} = |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle|\psi_3\rangle\dots = \tilde{\psi}$$

בגלל שהחלקיקים במערכת הם פרמיונים, לפי הגדרת אופרטור חילוף על פרמיונים

$$P\tilde{\psi} = -\tilde{\psi}$$

כלומר מקבלים ש: $\tilde{\psi} = -\tilde{\psi}$, בסתירה (היות ווקטור של מצב $\tilde{\psi}$ שונה מ-0) להנחה שהם זהים.

דוגמה: מערכת של זוג חלקיקים דו-מצביים

במערכת של זוג חלקיקים דו-מצביים כל חלקיק יכול לקבל שני מצבים אפשריים

(למשל שני חלקיקים בעלי ספין $\frac{1}{2}$). נסמן מצב בסיסי ראשון A , ומצב בסיסי שני B .

תיאור כללי של מצב של זוג חלקיקים זהים:

המצב הכללי הוא צירוף ליניארי של כל האפשרויות למצב שני החלקיקים.

$$\psi = c_1|A\rangle|A\rangle + c_2|A\rangle|B\rangle + c_3|B\rangle|A\rangle + c_4|B\rangle|B\rangle$$

נפעיל אופרטור חילוף כדי לקבל תנאים על המקדמים:

$$P\psi = c_1|A\rangle|A\rangle + c_2|B\rangle|A\rangle + c_3|A\rangle|B\rangle + c_4|B\rangle|B\rangle$$

אם החלקיקים הם בוזונים:

צריך להתקיים $P\psi = \psi$, ולכן התנאי היחיד הוא: $c_2 = c_3$. שאר המקדמים מוגדרים עד כדי קבוע.

$$|A\rangle|A\rangle: \text{ כאשר } c_1 = 1, c_2 = c_3 = c_4 = 0$$

$$|B\rangle|B\rangle: \text{ כאשר } c_4 = 1, c_2 = c_3 = c_1 = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle|B\rangle + |B\rangle|A\rangle): \text{ מצב המערכת הוא } c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_1 = c_4 = 0$$

אם החלקיקים הם פרמיונים:

צריך להתקיים $P\psi = -\psi$, ולכן התנאים על המקדמים הם:

$$c_1 = -c_1, c_2 = -c_3, c_3 = -c_2, c_4 = -c_4$$

לכן: $c_1 = c_4 = 0, c_2 = -c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, ומצב המערכת היחיד הוא: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle|B\rangle - |B\rangle|A\rangle)$.

נניח שהסתברות להיות במצב A היא חצי, וההסתברות להיות במצב B היא חצי. נמצא את ההסתברות לקבלת כל צירוף של מצבים עבור סוגים שונים של חלקיקים:

$ B\rangle B\rangle$	$ B\rangle A\rangle$ או $ A\rangle B\rangle$ או צירוף של שניהם	$ A\rangle A\rangle$	מצב הזוג ← ↓ סוג החלקיקים
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	חלקיקים שונים
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	בוזונים
0	1	0	פרמיונים

הסברים לטבלה:

חלקיקים שונים – 4-מצבים בסיסיים לזוג $|A\rangle|A\rangle, |A\rangle|B\rangle, |B\rangle|A\rangle, |B\rangle|B\rangle$. הנטייה להיות שונים/שווים היא אותו דבר, הסתברות $1/2$ שמצב של שני חלקיקים בוג זהה והסתברות $1/2$ שמצבם שונה.

בוזונים – 3-מצבים בסיסיים לזוג $|A\rangle|A\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle|B\rangle + |B\rangle|A\rangle), |B\rangle|B\rangle$. נוטים להיות זהים, ואכן ההסתברות להיות זהים היא $\frac{2}{3}$, ואילו ההסתברות להיות שונים היא $\frac{1}{3}$.

פרמיונים – מצב זוג יחיד $\frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle|B\rangle - |B\rangle|A\rangle)$.

על פי עקרון האיסור של פאולי, חייבים להיות שונים אחד מהשני תמיד.

פרק 8 : תנע זוויתי

הם $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ אופרטורים מתחלפים (נמדדים יחדיו), ולכן ניתן לקבל מידע על שלושת רכיבי המיקום בו זמנית, וכן גם רכיבי התנע הקווי $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$. אולם רכיבי התנע הזוויתי $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ אינם מתחלפים. זוהי אחת המסקנות מניסוי EPR, שבו ראינו שאי אפשר לדעת את הרכיבים השונים של המומנט המגנטי בו זמנית. לכן התנע הזוויתי דורש טיפול שונה. אנו נראה שערכים של התנע הזוויתי הם דיסקרטיים בשונה מהערכים של התנע שיכולים להיות כלשהם.

8.1 יחסי חילוף בין רכיבי התנע הזוויתי

נחשב את הקומוטטור $[\hat{l}_x, \hat{l}_y]$:

לפי סעיף 7.4 :

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$$

נחשב :

$$\hat{l}_x \hat{l}_y = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = y\hat{p}_z z\hat{p}_x - y\hat{p}_z x\hat{p}_z - z\hat{p}_y z\hat{p}_x + z\hat{p}_y x\hat{p}_z$$

$$\hat{l}_y \hat{l}_x = (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = z\hat{p}_x y\hat{p}_z - z\hat{p}_x z\hat{p}_y - x\hat{p}_z y\hat{p}_z + x\hat{p}_z z\hat{p}_y$$

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= \hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x \\ &= y\hat{p}_z z\hat{p}_x - y\hat{p}_z x\hat{p}_z - z\hat{p}_y z\hat{p}_x + z\hat{p}_y x\hat{p}_z - (z\hat{p}_x y\hat{p}_z - z\hat{p}_x z\hat{p}_y - x\hat{p}_z y\hat{p}_z + x\hat{p}_z z\hat{p}_y) \end{aligned}$$

לפי יחסי החילוף בין האופרטורים :

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = y(\hat{p}_z z - z\hat{p}_z)\hat{p}_x + x(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z)\hat{p}_y = y[\hat{p}_z, z]\hat{p}_x + x[z, \hat{p}_z]\hat{p}_y$$

$$[z, \hat{p}_z] = i\hbar, [\hat{p}_z, z] = -i\hbar \quad \text{ידוע כי :}$$

$$(8.1.1) \quad [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar\hat{l}_z \quad \text{לכן :}$$

באותו אופן :

$$(8.1.2) \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x$$

$$(8.1.3) \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y$$

8.2 ניתוח אלגברי של התנע הזוויתי

נגדיר **תנע זוויתי מוכלל** כגודל פיזיקלי בעל שלושה רכיבים המתוארים על ידי אופרטורים (J_1, J_2, J_3) , המקיימים יחסי חילוף בדומה לתנע הזוויתי, זאת אומרת:

$$(8.2.1) \quad [J_1, J_2] = i\hbar J_3, [J_2, J_3] = i\hbar J_1, [J_3, J_1] = i\hbar J_2$$

8.2.1 משתנים נמדדים יחדיו בתנע הזוויתי

לא ניתן לתאר את התנע הזוויתי בתורת הקוונטים על ידי 3 רכיבים, כמו שמתארים אותה במכאניקה קלאסית. הרכיבים של התנע הזוויתי לא מתחלפים (כמו שרואים מ (8.2.1)) ולכן לא נמדדים יחדיו. לכן נתאר את התנע הזוויתי על ידי אחד מרכיביה וגודל פיזיקאלי הקשור עם התנע הזוויתי שיתחלף עם אחד מהאופרטורים J_1, J_2, J_3 .

$$(8.2.2) \quad J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \quad \text{נגדיר:}$$

כאשר המשמעות של J^2 היא גודל בריבוע של התנע הזוויתי.

נבדוק ש- J^2 מתחלף עם J_3 , כלומר האם מתקיים: $[J^2, J_3] = 0$.

נציב את J^2 , ונפתח סוגריים:

$$[J^2, J_3] = (J_1^2 + J_2^2 + J_3^2)J_3 - J_3(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2)$$

$$= J_1^2 J_3 - J_3 J_1^2 + J_2^2 J_3 - J_3 J_2^2 + J_3^3 - J_3^3$$

$$= J_1(J_1 J_3) - (J_3 J_1)J_1 + J_2(J_2 J_3) - (J_3 J_2)J_2$$

נציב את יחסי החילוף ממשוואה (8.2.1):

$$\begin{aligned} [J^2, J_3] &= J_1(J_3 J_1 - i\hbar J_2) - (J_1 J_3 + i\hbar J_2)J_1 + J_2(J_3 J_2 + i\hbar J_1) - (J_2 J_3 - i\hbar J_1)J_2 \\ &= J_1 J_3 J_1 - i\hbar J_1 J_2 - J_1 J_3 J_1 - i\hbar J_2 J_1 + J_2 J_3 J_2 + i\hbar J_2 J_1 - J_2 J_3 J_2 + i\hbar J_1 J_2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

זאת אומרת ש- J^2 מתחלף עם J_3 . מסקנה: ניתן למדוד את J^2 ו- J_3 יחדיו.

נסמן על ידי $|\lambda, \mu\rangle$ וקטור עצמי מנורמל, משותף לאופרטורים J^2 ו- J_3 , עם ערכים עצמיים λ ו- μ . כלומר מתקיים:

$$J^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle$$

$$J_3|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle$$

נמצא את הערכים ש- λ ו- μ יכולים לקבל.

8.2.2. אופרטורים J_{\pm} .

נגדיר אופרטורים חדשים: $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$. האופרטורים האלו לא צמודים לעצמם. אבל

$$J_+^* = J_-$$

נפעיל את האופרטור J_+ על המצב $|\lambda, \mu\rangle$. המצב המתקבל: $J_+|\lambda, \mu\rangle$.

על מנת לזהות את המצב הזה,

- נפעיל עליו את J^2 :

$$J^2 J_+|\lambda, \mu\rangle = J^2(J_1 + iJ_2)|\lambda, \mu\rangle = (J^2 J_1 + iJ^2 J_2)|\lambda, \mu\rangle$$

ניתן להחליף את J^2 עם J_1 ו- J_2 , לכן:

$$J^2 J_+|\lambda, \mu\rangle = (J_1 + iJ_2)J^2|\lambda, \mu\rangle = (J_1 + iJ_2)\lambda|\lambda, \mu\rangle = \lambda J_+|\lambda, \mu\rangle$$

לכן אם $J_+|\lambda, \mu\rangle \neq 0$, אז גם $J_+|\lambda, \mu\rangle$ הוא וקטור עצמי של J^2 המתאים לערך עצמי λ .

- כעת נפעיל את J_3 על $J_+|\lambda, \mu\rangle$:

$$J_3 J_+|\lambda, \mu\rangle = J_3(J_1 + iJ_2)|\lambda, \mu\rangle = (J_3 J_1 + iJ_3 J_2)|\lambda, \mu\rangle$$

לפי יחסי החילוף של האופרטורים:

$$\begin{aligned} J_3 J_+|\lambda, \mu\rangle &= [J_1 J_3 + i\hbar J_2 + i(J_2 J_3 - i\hbar J_1)]|\lambda, \mu\rangle \\ &= [(J_1 + iJ_2)J_3 + \hbar(J_1 + iJ_2)]|\lambda, \mu\rangle \end{aligned}$$

לפי הגדרת אופרטור J_+ , והפעולה של אופרטור J_3 על וקטור עצמי שלו:

$$\begin{aligned} J_3 J_+|\lambda, \mu\rangle &= \mu J_+|\lambda, \mu\rangle + \hbar J_+|\lambda, \mu\rangle \\ &= (\mu + \hbar) J_+|\lambda, \mu\rangle \end{aligned}$$

מסקנה: אם $J_+|\lambda, \mu\rangle \neq 0$, אז $J_+|\lambda, \mu\rangle$ הוא וקטור עצמי של J_3 , המתאים לערך $\mu + \hbar$.

כלומר

J_+ הוא אופרטור העלאה, וניתן לכתוב: (8.2.3) $J_+|\lambda, \mu\rangle = k_1|\lambda, \mu + \hbar\rangle$.

נמצא את הגודל $|J_+|\lambda, \mu\rangle|^2$:

$$|J_+|\lambda, \mu\rangle|^2 = \langle J_+|\lambda, \mu|J_+|\lambda, \mu\rangle = \langle \lambda, \mu|J_-J_+|\lambda, \mu\rangle$$

נבטא את J_-J_+ באמצעות האופרטורים J^2 ו- J_3 , שאנו יודעים כיצד הם פועלים:

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = J_1^2 - iJ_2J_1 + iJ_1J_2 + J_2^2 = J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] \\ &= J_1^2 + J_2^2 + i \cdot i\hbar J_3 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 - J_3^2 - \hbar J_3 = J^2 - J_3^2 - \hbar J_3 \end{aligned}$$

לכן:

$$|J_+|\lambda, \mu\rangle|^2 = \langle \lambda, \mu|J^2 - J_3^2 - \hbar J_3|\lambda, \mu\rangle$$

נחליף את האופרטורים בערכים העצמיים המתאימים לוקטור העצמי $|\lambda, \mu\rangle$:

$$|J_+|\lambda, \mu\rangle|^2 = \langle \lambda, \mu|\lambda - \mu^2 - \hbar\mu|\lambda, \mu\rangle$$

λ ו- μ הם קבועים לכן נוציא אותם מחוץ למכפלה:

$$|J_+|\lambda, \mu\rangle|^2 = \langle \lambda, \mu|\lambda - \mu^2 - \hbar\mu|\lambda, \mu\rangle = (\lambda - \mu^2 - \hbar\mu) \underbrace{\langle \lambda, \mu|\lambda, \mu\rangle}_1$$

$$(8.2.4) \quad |J_+|\lambda, \mu\rangle|^2 = \lambda - \mu^2 - \hbar\mu$$

קבלנו ביטוי לאורך של וקטור, ולכן הביטוי הוא בהכרח חיובי: $\lambda - \mu^2 - \hbar\mu \geq 0$

ממשוואות (8.2.3) ו- (8.2.4) ניתן לומר כי:

$$(8.2.5) \quad k_1 = \sqrt{\lambda - \mu^2 - \hbar\mu}$$

באופן דומה נקבל עבור J_- שהוא אופרטור הורדה ומקיים:

$$(8.2.6) \quad J_-|\lambda, \mu\rangle = k_2|\lambda, \mu - \hbar\rangle$$

$$(8.2.7) \quad |J_-|\lambda, \mu\rangle|^2 = \lambda - \mu^2 + \hbar\mu \geq 0$$

$$(8.2.8) \quad k_2 = \sqrt{\lambda - \mu^2 + \hbar\mu} \quad \text{ולכן:}$$

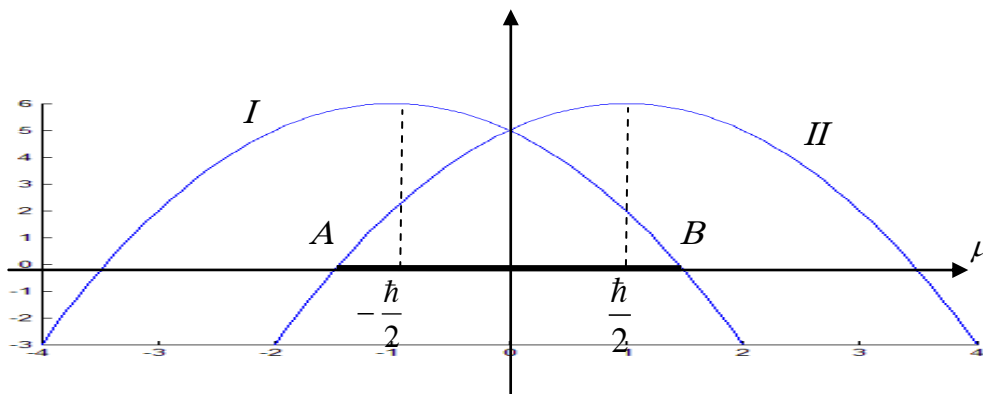
8.2.3 ערכים אפשריים עבור J^2 ו- J_3 .

עבור λ קבוע, מ- (8.2.4), (8.2.7) נובע ש- μ יכול לקבל ערכים המקיימים שני אילוצים:

$$\begin{cases} \lambda - \mu^2 - \hbar\mu \geq 0 & I \\ \lambda - \mu^2 + \hbar\mu \geq 0 & II \end{cases}$$

האילוצים יוצרים שתי פרבולות, שקודקודיהן:

$$\mu_{\max} = -\frac{b}{2a} \rightarrow \begin{cases} I & \mu_{\max} = -\frac{\hbar}{2} \\ II & \mu_{\max} = \frac{\hbar}{2} \end{cases}$$



קבלנו את אותה פרבולה מוזזת ב- \hbar , כאשר הערכים המותרים של μ הם באיזור שבו שתי הפרבולות גדולות מאפס.

גבולות התחום A ו-B (נקודות החיתוך של הפרבולות עם ציר μ):

$$I \quad \mu_{1,2} = \frac{\hbar \pm \sqrt{\hbar^2 + 4\lambda}}{-2} = -\frac{\hbar}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda}$$

$$II \quad \mu_{1,2} = \frac{-\hbar \pm \sqrt{\hbar^2 + 4\lambda}}{-2} = \frac{\hbar}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda}$$

$$(8.2.9) \quad \begin{cases} A: \mu = \frac{\hbar}{2} - \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} \\ B: \mu = -\frac{\hbar}{2} + \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} \end{cases} \quad \text{לכן:}$$

כאשר: $A \leq \mu \leq B$.

בתחום ה- μ האפשריים, לפי (8.2.3), (8.2.5), אופרטור J_+ מתאפס רק בנקודה B . לכן, רק בנקודה זו אי אפשר לבצע עוד העלאה. אופרטור J_- , לפי (8.2.6), (8.2.8), מתאפס רק בנקודה A . לכן, רק בנקודה זו אי אפשר לבצע עוד הורדה.

נתון מצב התחלתי $|\lambda, \mu_0\rangle$, כאשר μ_0 בתחום האפשרי. אם נפעיל עליו את אופרטור J_+ , נקבל מצב חדש $|\lambda, \mu_0 + \hbar\rangle$.

$$\mu_0 + \hbar = B \quad (2) \quad \text{כעת יש שתי אפשרויות: (1) } \mu_0 + \hbar \text{ בתוך התחום.}$$

הוכחנו ש- $J_+|\lambda, \mu_0\rangle = |\lambda, \mu_0 + \hbar\rangle$ מצב אפשרי, לכן $\mu_0 + \hbar$ חייב לקיים את האילוץ ולא יכול להיות מחוץ לתחום. על ידי הפעלה נוספת של J_+ (מספר פעמים) בהכרח פוגעים בשלב מסוים בנקודה B . זאת אומרת עבור n מסוים מתקיים: $\mu_0 + n\hbar = B$. כל עוד לא הגענו לנקודה B , ניתן להפעיל שוב את האופרטור J_+ ולקבל תוצאה אפשרית. כאשר הגענו לנקודה B , האופרטור J_+ על הוקטור מתאפס, ולכן לא יוצר מצב חדש.

בצורה דומה, על ידי הפעלה של J_- מספר פעמים מגיעים לנקודה A , זאת אומרת קיים \tilde{n} עבורו מתקיים: $A = \mu_0 - \tilde{n}\hbar$.

לכן אפשר לומר שהמרחק מ- B ל- A הוא מספר שלם של כפולות של \hbar וקיים מספר שלם n

$$B - A = n\hbar \quad \text{כך ש-}$$

נציב במשוואה את הביטויים של A ו- B על מנת לקבל בסופו של דבר ביטוי ל- λ :

$$B - A = -\frac{\hbar}{2} + \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} - \frac{\hbar}{2} + \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} = -\hbar + 2\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} = n\hbar$$

לכן:

$$2\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} = (n+1)\hbar, \Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda = \left(\frac{n+1}{2}\right)^2 \hbar^2$$

$$\lambda = \frac{(n+1)^2 - 1}{4} \hbar^2 = \frac{n(n+2)}{4} \hbar^2 = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1\right) \hbar^2$$

ונקבל:

$$j = \frac{n}{2}$$

נסמן:

$$(8.2.10) \quad \lambda = j(j+1)\hbar^2, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, 1\frac{1}{2}, 2, \dots$$

זאת אומרת, j יכול להיות מספר שלם או חצי שלם.

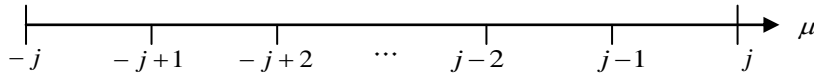
נבטא את A באמצעות j על פי משוואות (8.2.9) ו-(8.2.10):

$$A = \frac{\hbar}{2} - \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \lambda} \stackrel{\text{עצב את } \lambda}{=} \frac{\hbar}{2} - \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} j^2 \hbar^2 + j\hbar^2} = \frac{\hbar}{2} - \hbar \sqrt{j^2 + j + \frac{1}{4}} = \frac{\hbar}{2} - \hbar \left(j + \frac{1}{2}\right) = -j\hbar$$

באותו אופן ניתן להראות כי $B = j\hbar$.

על פי האילוצים: $A \leq \mu \leq B$ ואפשר לומר: $-j\hbar \leq \mu \leq j\hbar$

לכן מספר המצבים האפשריים של μ בתוך התחום הוא: $2j+1$



$$(8.2.11) \quad \mu = m\hbar, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad \text{לכן:}$$

8.2.4 סיכום של התנע הזוויתי המוכלל

בתורת הקוונטים התנע הזוויתי המוכלל מוגדר על ידי שני מספרים: j שמגדיר את הערך של אופרטור J^2 ו- m שמגדיר את הערך של J_3 -הרכיב z של התנע הזוויתי. נסמן על ידי $|j, m\rangle$ את המצב עבור שני הערכים הנ"ל וודאיים. מ-(8.2.10), (8.2.11) נקבל:

$$(8.2.12) \quad J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$(8.2.13) \quad J_3 |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

מ-(8.2.3), (8.2.11) נקבל:

$$(8.2.14) \quad J_+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \hbar |j, m+1\rangle$$

ומ-(8.2.6), (8.2.8) נקבל:

$$(8.2.15) \quad J_- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \hbar |j, m-1\rangle$$

מספר j מבטא תכונה של חלקיק הנקראת ה**ספין** של החלקיק.

בטבלה הבאה רשמנו מידע על תנע זוויתי של מספר חלקיקים עם אורך j קטן.

דוגמאות של חלקיקים	מצבים ודאיים	מספר מצבים	j
חלקיקים ללא ספין	$ 0,0\rangle$	1	0
אלקטרון, פרוטון, נייטרון	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	2	$\frac{1}{2}$
פוטון (המצב $ 1,0\rangle$ לא מתקיים)	$ 1,-1\rangle, 1,0\rangle, 1,1\rangle$	3	1
מזונים, פיאונים	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	4	$\frac{1}{2}$

8.4 התנע הזוויתי של זוג חלקיקים

על מנת לתאר מערכות משולבות מכמה חלקיקים, או תכונות שונות של חלקיק בודד יש אפשרות להשתמש במכפלה טנסורית.

8.4.1 תיאור מצב של שני חלקיקים שונים

נסמן על ידי S את מרחב המצבים האפשריים של החלקיק הראשון. ועל ידי T את מרחב המצבים האפשריים של החלקיק השני.

אם חלקיק 1 במצב $|s\rangle$ וחלקיק 2 במצב $|t\rangle$ אזי נסמן את המצב של הזוג: $|s\rangle|t\rangle$ או $|s,t\rangle$ או (s,t) או $s \otimes t$.

בחרים בסיס אורתונורמלי ב- S $e_1, e_2, \dots, e_k, \dots$

בחרים בסיס אורתונורמלי ב- T $f_1, f_2, \dots, f_l, \dots$

זאת אומרת כל וקטור מ- S מתואר על ידי $\sum_k c_k e_k$

זאת אומרת כל וקטור מ- T מתואר על ידי $\sum_l d_l f_l$

יהיה $S \otimes T$ במרחב בסיס

$$e_1 \otimes f_1, e_1 \otimes f_2, \dots, e_2 \otimes f_1, e_2 \otimes f_2, \dots$$

כלומר כל הצרופים האפשריים של וקטורי הבסיס.

וכל מצב במרחב $S \otimes T$ הוא: $\sum_{kl} c_{kl} e_k \otimes f_l$

המימד של המרחב $S \otimes T$ הינו: $\dim(S \otimes T) = (\dim S)(\dim T)$

$$(8.4.1) \quad \langle s_1 \otimes t_1 | s_2 \otimes t_2 \rangle = \langle s_1 | s_2 \rangle \langle t_1 | t_2 \rangle$$

נגדיר מכפלה פנימית

הבסיס $e_k \otimes f_l$ של $S \otimes T$ הוא אורתונורמלי לפי (8.4.1), היות הבסיסים ב- S ו- T אורתונורמליים.

דוגמא:

תאור המצבים האפשריים של התנע הזוויתי שני חלקיקים n, p פרוטון וניטרון (בעלי ספין

$$:\left(\frac{1}{2}\right)$$

בסיס S עבור p : $|p-\rangle, |p+\rangle$

ובסיס T עבור n : $|n+\rangle, |n-\rangle$

לכן, הבסיס $e_k \otimes f_l$ במרחב $S \otimes T$ המתאר מצב התנע הזוויתי של הזוג הוא :

$$\begin{array}{cccc} |p+\rangle|n+\rangle, & |p+\rangle|n-\rangle, & |p-\rangle|n+\rangle, & |p-\rangle|n-\rangle, \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ |+,+\rangle & |+,-\rangle & |-,+\rangle & |-,-\rangle \end{array}$$

למשל, המצב $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,+\rangle + |+,-\rangle)$ מסמל מצב בו פוטון במצב $|+\rangle$ ← מתאים למצב

$|z+\rangle$, וניטרון במצב $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ ← מתאים למצב $|x+\rangle$.

8.4.2 פעולה ויוצר הפעולה על מרחב מצבים משולבים.

אם נפעיל פעולה $T_a(t)$ על מרחב המצבים כיצד היא תפעל על המכפלה הטנזורית?

נניח שאין השפעה של החלקיקים אחד על השני אזי $T_a(s \otimes t) = T_a(s) \otimes T_a(t)$

איך פועל יוצר הפעולה?

$$\begin{aligned} G &= i\hbar \frac{\partial T_a}{\partial a} \Big|_{a=0} \\ G(s \otimes t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T_a(s \otimes t) \Big|_{a=0} = i\hbar \frac{\partial}{\partial a} (T_a(s) \otimes T_a(t)) \Big|_{a=0} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T_a(s) \otimes T_a(t) \Big|_{a=0} + T_a(s) \otimes i\hbar \frac{\partial}{\partial a} T_a(t) \Big|_{a=0} \quad , \quad T_0 = I \\ &= G(s) \otimes t + s \otimes G(t) \end{aligned}$$

אם T_a פעולת סיבוב, אז G הוא תנע זוויתי לכן :

$$(8.4.2) \quad J_k(s \otimes t) = J_k(s) \otimes t + s \otimes J_k(t)$$

לכן, אם מצבים s, t וקטורים עצמים של J_k המתאימים לערכים m_1, m_2 בהתאם, אזי גם

המצב $s \otimes t$ וקטור עצמי של J_k ומתקיים

$$J_k(s \otimes t) = J_k(s) \otimes t + s \otimes J_k(t) = m_1 s \otimes t + s \otimes m_2 t = (m_1 + m_2)(s \otimes t)$$

המתאימים לערך עצמי $m_1 + m_2$.

נדגים את החיבור של התנע הזוויתי על זוג פרוטון-ניוטון של הסעיף הקודם.

דוגמא:

נמצא את המטריצות J^2, J_1, J_2, J_3 על מרחב מצבים של התנע הזוויתי של פרוטון

וניוטון. הבסיס: $|+, +\rangle \quad |+, -\rangle \quad |-, +\rangle \quad |-, -\rangle$.

פתרון

היות

$$J_3|+\rangle = J_3\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar|+\rangle, \quad J_3|-\rangle = J_3\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|-\rangle$$

לכן

$$J_3|+, +\rangle = |J_3|+\rangle, +\rangle + |+, J_3|+\rangle\rangle = \frac{1}{2}\hbar|+, +\rangle + \frac{1}{2}\hbar|+, +\rangle = \hbar|+, +\rangle,$$

-ו

$$J_3|+, -\rangle = |J_3|+\rangle, -\rangle + |+, J_3|-\rangle\rangle = \frac{1}{2}\hbar|+, -\rangle - \frac{1}{2}\hbar|+, -\rangle = 0\hbar|+, -\rangle,$$

התנע הזוויתי של פרוטון היה מנוגד לתנע הזוויתי של הניוטון, ולכן התנע הכולל שווה ל-

0.

$$J_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

לכן המטריצה של J_3 :

נמצא כעת את המטריצה של J_+ .

היות ו- $J_+|+\rangle = 0$, $J_+|-\rangle = J_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \right) - \left(-\frac{1}{2} \right) \frac{1}{2}} \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar|+\rangle$, וגם

$$J_+(s \otimes t) = J_+(s) \otimes t + s \otimes J_+(t)$$

לכן:

$$J_+|+,+\rangle = |J_+|+\rangle, +\rangle + |+, J_+|+\rangle\rangle = 0$$

$$J_+|+,-\rangle = |J_+|+\rangle, -\rangle + |+, J_+|-\rangle\rangle = \hbar|+,+\rangle$$

$$J_+|-,+\rangle = |J_+(-),+\rangle + |-, J_+(+)\rangle = \hbar|+,+\rangle$$

$$J_+|-, -\rangle = |J_+|-\rangle, -\rangle + |-, J_+|-\rangle\rangle = \hbar|+,-\rangle + \hbar|-,+\rangle$$

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

והמטריצה של J_+ שווה:

היות ו- $J_- = J_+^*$ לכן

$$J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

כעת ניתן למצוא את J_2, J_1 אל ידי

$$J_1 = \frac{J_+ + J_-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \frac{J_+ - J_-}{2i} = \frac{i}{2} (J_- - J_+) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}$$

לפי (8.2.1) והגדרה של J^2

$$J_- J_+ = (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = J_1^2 + i[J_1, J_2] + J_2^2 = J^2 - J_3^2 - \hbar J_3$$

לכן $J^2 = J_- J_+ + J_3^2 + \hbar J_3$ ובבעיה שלנו

$$J_- J_+ = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad J_3^2 + \hbar J_3 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow J^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

גם לזוג החלקיקים ניתן להתייחס כמערכת קוונטית. לכן, כדי לדעת איך הזוג מתנהג מבחינת תנע זוויתי צריך לדעת את הערכים שמתקבלים במדידה של J^2, J_3 .

תרגיל:

עבור זוג פרוטון-ניוטון מצא את המצבים העצמיים של J^2, J_3 המתאימים למצבים העצמיים של התנע הזוויתי.

פתרון

עבור J_3 המטריצה אלכסונית ועל כן הערכים העצמיים הם ערכי האלכסון.

$$m = 1, \underbrace{0}_{\text{שני}}, -1$$

אם נעביר אלומה של זוגות כאלו דרך מכשיר שטרן גרלך ($S - G$), נקבל שלושה כתמי אור כאשר האלומה המרכזית כפולה בעוצמה.

על מנת להראות שאכן האלומה המרכזית כפולה בעוצמה נעביר אותה דרך שדה נוסף ונראה שהיא נפרדת לשתי אלומות.

נמצא את הערכים העצמיים של J^2 .

$$\begin{aligned} \det(J^2 - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 2\hbar^2 - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 - \lambda & \hbar^2 & 0 \\ 0 & \hbar^2 & \hbar^2 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 - \lambda \end{vmatrix} = (2\hbar^2 - \lambda) \begin{vmatrix} \hbar^2 - \lambda & \hbar^2 & 0 \\ \hbar^2 & \hbar^2 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (2\hbar^2 - \lambda)^2 \begin{vmatrix} \hbar^2 - \lambda & \hbar^2 \\ \hbar^2 & \hbar^2 - \lambda \end{vmatrix} = (2\hbar^2 - \lambda)^2 (2\hbar^2 - \lambda)^2 - \hbar^4 = (2\hbar^2 - \lambda)^2 (\hbar^4 - 2\hbar^2 \lambda + \lambda^2 - \hbar^4) \\ &= -\lambda (2\hbar^2 - \lambda)^2 (2\hbar^2 - \lambda) = -\lambda (2\hbar^2 - \lambda)^3 \\ &\Rightarrow \lambda = 0 \qquad \lambda = 2\hbar^2 \end{aligned}$$

הערך עצמי $\lambda = 0$ מתאים למצב, בו לזוג אין מומנט מגנטי או תנע זוויתי. כאשר $\lambda = 2\hbar^2$, הזוג מתנהג כמו חלקיק בעל ספין $j = 1$.

נעשה התאמה בין הבסיס שמבטא תנע של כל אחד מהמרכיבים לבין ההתנהגות כזוג. כשמרכיבים זוג יש כאילו חלקיק חדש ויש לו תנע זוויתי שמתואר על ידי m, j . מצבים אמיתיים של הזוג מוצאים על ידי מציאת וקטור עצמי משותף.

$$(1) \text{ הוקטור } |+,+\rangle \text{ הוא הוקטור } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ נפעיל עליו את } J_3, \text{ נקבל:}$$

$$J_3 |+,+\rangle = \hbar |+,+\rangle \rightarrow m = 1$$

ואם נפעיל עליו את J^2 , נקבל:

$$J^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\hbar^2 - 1(1+1)}_{\substack{\text{לפי דמוסטה של} \\ \lambda = j(j+1)\hbar^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow j = 1$$

לכן $|+,+\rangle = |1,1\rangle$ בהצגה $|j,m\rangle$.

אם עבור הזוג הרכיב של התנע הזוויתי שווה ל- $\hbar (m=1)$ והתנע הכולל שווה ל- $2\hbar^2 (j=1)$, אזי החלקיק הראשון נמצא במצב $|z+\rangle$ וגם השני במצב $|z+\rangle$.

$$(2) \text{ עבור המצב } \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |1, -1\rangle = |-, -\rangle = \text{אז רכיב } z \text{ של התנע הזוויתי הוא } (-\hbar) \text{ ו-}$$

$m = (-1)$ התנע הכולל הוא $2\hbar^2 (j=1)$ החלקיק הראשון נמצא במצב $|z-\rangle$ והשני במצב $|z-\rangle$.

נמצא את הוקטורים העצמיים של הבלוק האמצעי של J^2 .

$$(3) \text{ נציב קודם כל } \lambda = 2\hbar^2 \quad \hbar \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \begin{cases} -a+b=0 \\ a-b=0 \end{cases} \rightarrow a=b = \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$$

הורדנו את הצדדים של המטריצה ואז נשארו המצבים: $|+, -\rangle, |-, +\rangle$. כל אחד בפני עצמו הוא לא וקטור עצמי.

עבור $m=0$ $j=1$ $|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-, +\rangle$ וקטור עצמי מתאים. במקרה זה הזוג מתנהג כחלקיק בעל ספין $j=1$, כאשר הרכיב z של התנע הזוויתי שלו שווה 0.

$$(4) \quad \lambda = 0 \quad \text{אם} \quad \text{ניקח}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \rightarrow a+b=0 \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|+, -\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-, +\rangle = |0,0\rangle$$

אז: זוג כזה מתנהג כמו חלקיק בלי ספין.

8.4.3 מקרה כללי

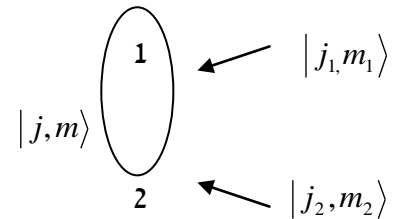
זוג חלקיקים בעלי ספין כלשהו- מקדמי קלבש – גורדון:

נעסוק בתיאור של התנע הזוויתי של זוג חלקיקים: 1 בעל ספין j_1 ו- 2 בעל ספין j_2 .

התכונות של כל חלקיק בזוג מוגדרות על ידי (m_1, m_2) .

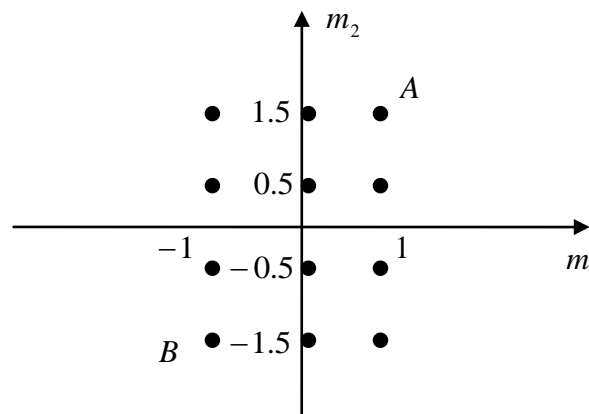
זה מתאים למצב התנע הזוויתי $|j_1, m_1\rangle$ לחלקיק הראשון ולמצב התנע הזוויתי $|j_2, m_2\rangle$ לחלקיק השני.

חיבור התנע הזוויתי של 2 חלקיקים במקרה כללי זה מציאת הקשר בין התנע הזוויתי $|j, m\rangle$ של הזוג, כחלקיק קוונטי והתנע הזוויתי של כל חלקיק בזוג.



נדגים את השיטה על דוגמא עבור זוג חלקיקים בעלי ספין: $j_1 = 1$ ו- $j_2 = 1.5$. בדוגמא זו הבסיס המצבים המתארים את התכונות של כל חלקיק בזוג מוגדרות על ידי (m_1, m_2) .

מספר מצבים בסיסיים שווה ל- $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 3 \cdot 4 = 12$. המצבים מתוארים בגרף בשרטוט הבאה:



מחפשים את הקשר בין התנע הזוויתי של הזוג לבין המצב של החלקיקים בנפרד. במערכת קלאסית כאשר מפרקים מערכת יודעים את הרכיבים שלה, אך במערכת קוונטית לא נתון בוודאות מהם הרכיבים של המערכת משום שהחיבור של 2 חלקיקים למצב של תנע זוויתי

מסוים נותן תוצאה הסתברותית ולכן מצב מסוים יכול להיות מורכב מכמה מצבים שונים של חלקיקים.

בדוגמא למעלה יש 12 מצבים בלתי תלויים

נפעיל על בסיס המצבים את האופרטור J_+ (אופרטור העלאה).

$$\begin{aligned} J_+(m_1, m_2) &= J_+ |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle \otimes J_+ |j_2, m_2\rangle = \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \hbar |j_1, m_1+1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle + \\ &\quad |j_1, m_1\rangle \otimes \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \hbar |j_2, m_2+1\rangle = \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \hbar (m_1+1, m_2) + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \hbar (m_1, m_2+1) \end{aligned}$$

כעת נפעיל אופרטור J_+ על מצב $A = (1, 1.5)$ ונקבל $J_+(A) = 0$.

כמו כן אם נפעיל את האופרטור J_3 על המצבים של הבסיס נקבל:

$$J_3(m_1, m_2) = m_1 \hbar (m_1, m_2) + m_2 \hbar (m_1, m_2) = (m_1 + m_2) \hbar (m_1, m_2)$$

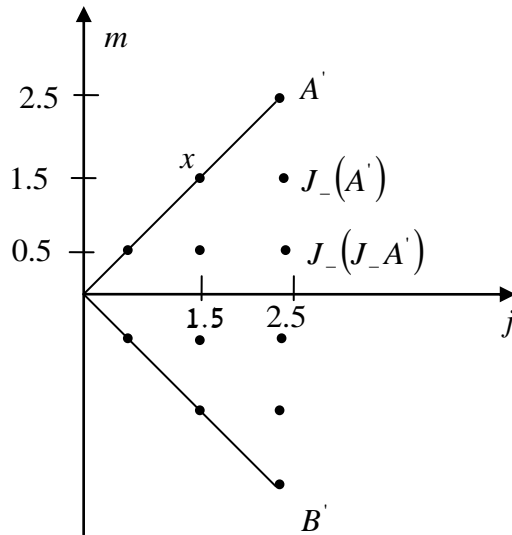
זאת אומרת רכיב z של התנע הזוויתי של הזוג שווה לסכום $m_1 + m_2$ של רכיבי z של כל אחד מהחלקיקים. למשל

$$J_3(A) = J_3(1, 1.5) = (1 + 1.5) \hbar (1, 1.5) = 2.5 \hbar (1, 1.5)$$

לכן m (רכיב z של תנע זוויתי של הזוג) הוא $m = 2.5$.

היות ו- $J_+(A) = 0$ ואופרטור J_+ מתאפס רק על מצב $|j, m\rangle$ כאשר $j = m$ לכן במקרה זה $j = m = 2.5$. זאת אומרת, התנע הזוויתי של הזוג במצב $A = (1, 1.5)$ מתואר ע"י $|2.5, 2.5\rangle$.

נשרטט את האפשרויות j, m של הזוג $|j, m\rangle$



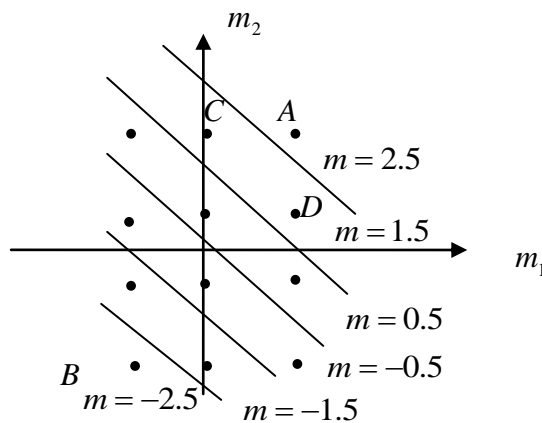
בצורה דומה עבור מצב $B = (-1, -1.5)$ נקבל:

$$J_-(B) = 0$$

$$J_3(B) = J_3(-1, -1.5) = -2.5\hbar(-1, -1.5)$$

היות ו- $J_-(B) = 0$ ואופרטור J_- מתאפס רק על מצב $|j, m\rangle$ כאשר $j = -m$ לכן במקרה זה $j = -m = 2.5$. זאת אומרת, התנע הזוויתי של הזוג במצב $B = (-1, -1.5)$ מתואר ע"י $|2.5, -2.5\rangle$.

אפשר לחלק את מרחב המצבים (m_1, m_2) לתחומים בהם הסכום $m = m_1 + m_2$ נותן אותו דבר.



נפעיל אופרטור הורדה J_- על A' (המצב כזוג) כאשר $A = A'$.

$$\begin{aligned}
 J_-(A') &= J_-|2.5, 2.5\rangle = \sqrt{2.5 \cdot 3.5 - 2.5 \cdot 1.5} \hbar |2.5, 1.5\rangle = \sqrt{5} \hbar |2.5, 1.5\rangle \\
 J_-(A) &= J_- \left(\underbrace{|1, 1.5\rangle}_{m_1 \quad m_2} \right) = J_-|1, 1\rangle \otimes |1.5, 1.5\rangle + |1, 1\rangle \otimes J_-|1.5, 1.5\rangle \\
 &= \sqrt{1 \cdot 2 - 1 \cdot 0} \hbar |1, 0\rangle \otimes |1.5, 1.5\rangle + |1, 1\rangle \otimes \sqrt{1.5 \cdot 2.5 - 1.5 \cdot 0.5} \hbar |1.5, 0.5\rangle \\
 &= \sqrt{2} \hbar \underbrace{|0, 1.5\rangle}_C + \sqrt{3} \hbar \underbrace{|1, 0.5\rangle}_D \\
 J_-(A) &= J_-(A') \rightarrow \sqrt{5} \hbar |2.5, 2.5\rangle = \sqrt{2} \hbar |0, 1.5\rangle + \sqrt{3} \hbar |1, 0.5\rangle \\
 \Rightarrow |2.5, 1.5\rangle &= \sqrt{\frac{2}{5}} |0, 1.5\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |1, 0.5\rangle
 \end{aligned}$$

אם ניקח את הזוג במצב $|2.5, 1.5\rangle$ ונפריד אותו אז נקבל שב- 40% מהזוגות הרכיב של הראשון הוא 0, והרכיב של השני הוא 1.5. וב-60% מהזוגות הרכיב (הספין), של הראשון הוא 1 ושל השני הוא 0.5.

עבור נקודה $x = |1.5, 1.5\rangle$ גם כן $m = 1.5$. לכן היא גם צירוף של C, D אבל צרוף אחר.

$$x = \alpha C + \beta D$$

היות ו- x אורתוגונלי ל- $J_-(A)$ אזי: $x = |1.5, 1.5\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |0, 1.5\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |1, 0.5\rangle$. החלפנו את הקורדינטות והסימון של אחד מהם.

דרך נוספת למצוא את x : להפעיל עליו אופרטור העלאה $J_+(\alpha C + \beta D) = 0$ ולהשוות ל-0, ומגיעים לאותה תוצאה.

המימד של מצבים עם $m = 1.5$ הוא 2, והמימד של מצב עם $m = 2.5$ הוא 1. לכן האופרטור J_+ המופעל על מצבים עם $m = 1.5$ חייב להתאפס על אחד מהמצבים. לכן יש פתרון של המשוואה $J_+(\alpha C + \beta D) = 0$.

באותו אופן, ואותו שיקול אפשר לחזור כאשר עוברים (עם אופרטור העלאה) מ- $m = 0.5$ עם מימד 3 ל- $m = 1.5$ עם מימד 2. כך ניתן למצוא את כל המצבים בהצגה (j, m) והקשר שלהם להצגה (m_1, m_2)

מקדמי קלבש- גורדון C_{j, m, m_1, m_2} נתונים בטבלה, לפי המכפלה הפנימית:

$$C_{j, m, m_1, m_2} = \langle j, m | (m_1, m_2) \rangle$$

$$|2.5, 1.5\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}}|0, 1.5\rangle + \sqrt{\frac{3}{2}}|1, 0.5\rangle \quad \text{בדוגמא שראינו:}$$

לכן:

$$C_{2.5, 1.5, 0, 1.5} = \sqrt{\frac{2}{5}}$$

-1

$$C_{2.5, 1.5, 1, 1.5} = \sqrt{\frac{3}{5}}$$

$$\text{כמו כן } |1.5, 1.5\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}}|0, 1.5\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}}|1, 0.5\rangle \text{ מגדיר מקדמים}$$

$$C_{1.5, 1.5, 0, 1.5} = \sqrt{\frac{3}{5}}$$

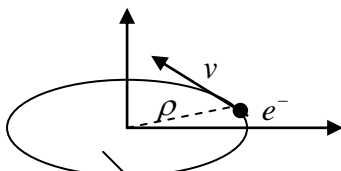
-1

$$C_{1.5, 1.5, 1, 1.5} = -\sqrt{\frac{2}{5}}$$

8.5 מומנט מגנטי ותנע זוויתי של מטען

חלקיק בעל מטען חשמלי q (למשל אלקטרון - e^-)

מבצע תנועה סיבובית ברדיוס ρ במהירות v במישור x, y .



התנע הזוויתי של החלקיק נתון על ידי: $l_z = \rho m v$, כאשר m מסמן את המסה של החלקיק.

סיבוב של החלקיק יוצר זרם I סביב העיגול ששטחו S . במקרה זה: הזרם הוא $I = \frac{qv}{2\pi\rho}$,

כאשר $2\pi\rho$ הוא היקף המסלול שעובר האלקטרון. והשטח הוא $S = \pi\rho^2$.

זרם במעגל סגור יוצר שדה מגנטי בעל מומנט מגנטי: $\mu = I \cdot S$ המאוחד למשטח הזרם.

לכן המומנט המגנטי יהיה: $\mu = \frac{qv}{2\pi\rho} \pi\rho^2 = \frac{qv\rho}{2}$ בכיוון ציר z .

נבטא את המומנט המגנטי באמצעות התנע הזוויתי של האלקטרון: $\mu = \frac{q l_z}{2m} = \frac{q}{2m} l_z$.

משוואה זו נותנת לנו את הקשר בין התנע הזוויתי והמומנט המגנטי: המומנט שווה לקבוע כפול התנע הזוויתי, ללא תלות בצורת המסלול או ברדיוס.

$$(8.5.1) \quad \mu = g \frac{q}{2m} l \quad , \text{ כאשר } g \text{ , מתקיים}$$

בתיאוריה הקלאסית מקדם לנדה אמור להיות שווה ל-1 תמיד, אבל בפועל בניסויים הוא לא יוצא 1, והוא מספק לנו מידע נוסף על המערכת.

אם נסתכל על סיבוב של אלקטרון מסביב לגרעין, אז $g = 1$ - התנועה היא כמו בתיאוריה הקלאסית.

היות והיחס בין l ו- μ לא תלוי ברדיוס, היינו מצפים שנוסחא (8.5.1) תהיה נכונה גם עבור אלקטרון חופשי, כאשר אלקטרון יוצר שדה מגנטי יל ידי סיבוב סביב עצמו (ברדיוס

אפס). אולם, ניסויים מראים שבמקרה זה $g = 2$, ואז המומנט המגנטי הוא $\mu = \frac{q}{m} l$.

זה נובע מכך שהסיבוב של האלקטרון סביב עצמו הוא לא סיבוב ממש.

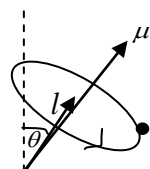
עבור פרוטון מקבלים $g = 2.79$.

עבור ניטרון מקבלים $g = 1.93$.

מדידה של מקדם לנדה מבוססת על פרצסיה של מטענים קוונטים.

כדי למדוד את היחס בין μ (מומנט מגנטי של החלקיק) ו- l (תנע זוויתי של החלקיק),

לחלקיק סביב

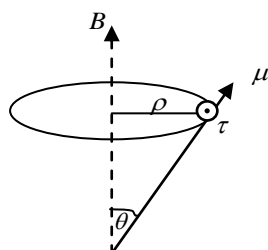


מפעילים שדה מגנטי B , ובודקים מה קורה

לפני הפעלת השדה המגנטי החלקיק מסתובב

ציר הסיבוב מקביל הן למומנט המגנטי

μ והתנע הזוויתי l .



לאחר הפעלת שדה מגנטי חיצוני פועל מומנט כוח על החלקיק. מומנט כוח של שדה מגנטי על מומנט מגנטי הוא: $\tau = \mu \times B$ שגודלו $\tau = \mu B \sin \theta$, כאשר θ זווית בין ציר הסיבוב וכיוון השדה.

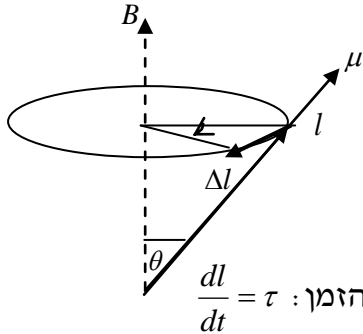
מומנט הכוח מאונך ל- B ו- ρ , ולכן ציר הסיבוב של μ ושל l מתחיל להסתובב סביב ציר B עם תדירות הסיבוב קבועה ω_ρ .

כתוצאה מכך מקבלים שינוי של l בזמן Δt .

$$\Delta l = l(\sin \theta) \omega_\rho \Delta t$$

$$\frac{dl}{dt} = l(\sin \theta) \omega_\rho$$

לפי הגדרת מומנט כוח:



לפי חוק ניוטון, מומנט כוח שווה לנגזרת התנע הזוויתי לפי הזמן: $\frac{dl}{dt} = \tau$

$$l(\sin \theta) \omega_\rho = \mu B(\sin \theta) \Leftrightarrow \omega_\rho = B \frac{\mu}{l}$$

B ידוע. החלקיקים עושים מסלול בתדר ω_ρ , ופולטים קרינה בתדר זה. מכאן ניתן לקבל

את היחס $\frac{\mu}{l}$, ולמצוא את מקדם לנדה.

8.6 תנע זוויתי מסלולי

בסעיף זה נמצא את פונקציות הגל המתארים את המצבים עם תנע הזוויתי ודאי. כמו שראינו מקודם, עבור התנע הזוויתי ישנם שני גדלים \hat{l}^2, \hat{l}_z הנמדדים יחדיו. לכן נחפש מצבים עבורם \hat{l}^2, \hat{l}_z מקבלים ערך ודאי. נזכיר שאופרטורים \hat{l}^2, \hat{l}_z מוגדרים:

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

הבעיה היא למצוא ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים של אופרטורים אלו.

$$\hat{l}^2 \psi = \lambda \psi$$

$$\hat{l}_z \psi = \mu \psi$$

נעבור לקואורדינטות כדוריות: $\psi(x, y, z) \rightarrow \psi(r, \varphi, \theta)$. כדי לפתור את הבעיה אנו

צריכים למצוא את הביטוי של \hat{l}^2, \hat{l}_z בקואורדינטות כדוריות.

תרגיל: מצא את הביטוי של \hat{l}_z בקואורדינטות כדוריות.

פתרון:

נזכיר את הקשרים בין x, y, z ל- r, φ, θ :

$$\begin{cases} \text{I} & r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} \\ \text{II} & \tan \varphi = \frac{y}{x} \\ \text{III} & \cos \theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \end{cases} \quad \begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

נגזור כל משוואה לפי x, y, z כדי לקבל ביטוי לנגזרות:

לפי משוואה I:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{2x}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{r \sin \theta \cos \varphi}{r} = \sin \theta \cos \varphi$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos \theta$$

לפי משוואה II ו-III:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} & \frac{1}{\cos^2 \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta \cos^2 \varphi} \Rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & \frac{1}{\cos^2 \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{1}{x} = \frac{1}{r \sin \theta \cos \varphi} \Rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0 \end{aligned}$$

נבטא את האופרטורי גזירה בקואורדינטות כדוריות:

$$(8.6.1) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases}$$

נציב ב- \hat{l}_z :

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(r \sin \theta \cos \varphi \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right.$$

$$\left. - r \sin \theta \sin \varphi \left(\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right)$$

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(\cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$(8.6.2) \quad \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

מ.ש.ל

ניתן לחשב את \hat{l}_z בדרך נוספת ולהגיע לאותה תוצאה. דרך זו טובה רק אם ניתן לבטא את הפעולה באופן פשוט. נחשב את \hat{l}_z כיוצר של פעולת סיבוב סביב ציר z . R_α הוא פעולת סיבוב סביב ציר z בזווית α , הפועל על ψ באופן הבא:

$$R_\alpha \psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha)$$

נמצא את יוצר הפעולה לפי הגדרת יוצר:

$$\hat{l}_z \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} R_\alpha \psi \Big|_{\alpha=0} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \psi(r, \theta, \varphi - \alpha) \Big|_{\alpha=0}$$

נחשב את הנגזרת של ψ לפי α :

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \psi(r(\alpha), \theta(\alpha), \varphi(\alpha)) = \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial \alpha}}_0 + \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \alpha}}_0 + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \underbrace{\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}}_{-1}$$

לכן ניתן לכתוב:

$$\hat{l}_z \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi - \alpha) (-1) \Big|_{\alpha=0} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}(r, \theta, \varphi)$$

הגענו לאותה תוצאה.

נמצא את המצבים עבורם הרכיב z של התנע הזוויתי ודאי. נמצא את μ (ערך עצמי) ו- ψ

(וקטור עצמי) המקיימים $\hat{l}_z \psi = \mu \psi$, כלומר על פי משוואה (8.6.2):

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = \mu \psi(r, \theta, \varphi)$$

נשתמש בהפרדת משתנים: $\psi(r, \theta, \varphi) = \Phi(\varphi) f(r, \theta)$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) f(r, \theta) = \mu \Phi(\varphi) f(r, \theta)$$

$$\frac{\hbar}{i} \Phi'(\varphi) f(r, \theta) = \mu \Phi(\varphi) f(r, \theta)$$

$$\frac{\hbar}{i} \Phi'(\varphi) = \mu \Phi(\varphi), \Rightarrow \Phi'(\varphi) = \frac{i\mu}{\hbar} \Phi(\varphi)$$

קבלנו משוואה דיפרנציאלית שהפתרון שלה הוא: $\Phi(\varphi) = ce^{\frac{i\mu}{\hbar}\varphi}$

כדי למצוא את μ נשתמש בתכונת המחזוריות של ψ ביחס ל- φ . כלומר:

$$\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi) \Rightarrow f(r, \theta) \Phi(\varphi + 2\pi) = f(r, \theta) \Phi(\varphi)$$

לכן $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$. נציב תנאי זה בפתרון של $\Phi(\varphi)$ שמצאנו:

$$ce^{\frac{i\mu}{\hbar}(\varphi+2\pi)} = ce^{\frac{i\mu}{\hbar}\varphi}$$

$$e^{\frac{i\mu}{\hbar}\varphi} e^{\frac{i\mu}{\hbar}2\pi} = e^{\frac{i\mu}{\hbar}\varphi} \cdot 1$$

המעריך עבורו האקספוננט יהיה אחד: $\frac{\mu}{\hbar} 2\pi = 2\pi m \Leftrightarrow \mu = m\hbar$, כאשר m מספר

שלם.

לסיכום, קיבלנו שהערכים העצמיים של \hat{l}_z הם: (8.6.3) $\mu = m\hbar$

והוקטורים העצמיים (המצבים הודאיים): (8.6.4) $\psi_m(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta) e^{im\varphi}$

כאשר m שלם.

שים לב שהערכים העצמיים של אופרטור \hat{l}_z (המוגדר על פי קוונטיזציה של הגדרות התנע הקלסית לפי שיטת שרדינגר) הם חלק מהערכים של אופרטור J_3 המבטא את רכיב z של התנע הזוויתי המוכלל. לחלקיקם בעלי ספין $\frac{1}{2}$ אין דימוי קלאסי, לכן לא מקבלים את כל המצבים אלא רק את המצבים בהם m הוא מספר שלם ולא מקבלים את הערכים עבורם m חצי-שלם.

כדי למצוא את המצבים הודאיים של \hat{l}^2 אנו צריכים למצוא קודם את הביטוי של \hat{l}^2 בקואורדינאטות כדוריות.

תרגיל: מצא את הביטוי של \hat{l}^2 בקואורדינאטות כדוריות.

פתרון:

לפי הגדרת \hat{l}_x, \hat{l}_y ומשוואה (8.6.1):

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(r \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(-(\sin^2 \theta \sin \varphi + \cos^2 \theta \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)\end{aligned}$$

בצורה דומה

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

לפי הגדרת \hat{l}_{\pm} (נציב ונכנס איברים לפי הנגזרות):

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\underbrace{(-\sin \varphi + i \cos \varphi)}_{ie^{i\varphi}} \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \underbrace{(\cos \varphi + i \sin \varphi)}_{e^{i\varphi}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{l}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\underbrace{(-\sin \varphi - i \cos \varphi)}_{-ie^{-i\varphi}} \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \underbrace{(\cos \varphi - i \sin \varphi)}_{e^{-i\varphi}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{l}_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

באופן דומה לקוונטיזציה של וויל, מתקיים: $\frac{1}{2}(\hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_- \hat{l}_+) = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$. נחשב:

$$\begin{aligned}\hat{l}_+ \hat{l}_- &= \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right) \\ &= \hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + i \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + ie^{i\varphi} \cot \theta (-i) e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + i \cot \theta \left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right) \\ &= \hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + i \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot^2 \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - i \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} - \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{l}_- \hat{l}_+ &= \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right) \\ &= \hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - i \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + e^{-i\varphi} i \cot \theta e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + i \cot \theta \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right) \\ &= \hbar^2 \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - i \frac{\partial}{\partial \theta} \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot^2 \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \cot \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} - \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)\end{aligned}$$

לכן:

$$\frac{1}{2}(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$$

לפי הגדרת \hat{l}^2 :

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}_{\hat{l}_z^2} \right)$$

על פי הנוסחה: $\cot^2 \theta + 1 = \frac{1}{\sin^2 \theta}$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

ניתן להראות שמתקיים לפי נגזרת של מכפלה:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \sin \theta \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

$$(8.6.5) \quad \hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad \text{ולכן אפשר להציב:}$$

מה שהתקבל הוא החלק הזוויתי של הלפלסיאן בקוארדינטות כדוריות.

מ.ש.ל.

למציאת המצבים היציבים והערכים שלהם נפתור את המשוואה: $\hat{l}^2 \psi = \lambda \psi$.

נניח ש- ψ הוא וקטור עצמי של \hat{l}_z (כי רוצים במילא למצוא מצבים משותפים) לכן נציב

את הביטוי (8.6.4) עבור ψ שמצאנו ואת \hat{l}^2 , לפי משוואה (8.6.5), במשוואה:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) f(r, \theta) e^{im\varphi} &= \lambda f(r, \theta) e^{im\varphi} \\ -e^{im\varphi} \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 f(r, \theta) + \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} f(r, \theta) m^2 e^{im\varphi} &= \lambda f(r, \theta) e^{im\varphi} \\ -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 f(r, \theta) + \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} f(r, \theta) m^2 &= \lambda f(r, \theta) \end{aligned}$$

נבצע הפרדת משתנים: $f(r, \theta) = R(r)T(\theta)$

$$-\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 R(r)T(\theta) + \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} R(r)T(\theta) m^2 = \lambda R(r)T(\theta)$$

$$-\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 T(\theta) + \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) m^2 = \lambda T(\theta) \quad : \text{בכל מקרה } R(r) \text{ קבוע ולכן}$$

נעביר אגפים ונחלק ב- $(-\hbar^2)$:

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 T(\theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} T(\theta) + \frac{\lambda}{\hbar^2} T(\theta) = 0$$

נציב

$$\cos \theta = \tau \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial \tau}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \tau} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \tau}$$

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \tau} = (\cos^2 \theta - 1) \frac{\partial}{\partial \tau} = (\tau^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \tau}$$

נחזור למשוואה ונציב :

$$\frac{1}{1-\tau^2} \left((\tau^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \tau} \right)^2 T(\tau) + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-\tau^2} \right) T(\tau) = 0$$

נחשב את האיבר הראשון במשוואה :

$$(\tau^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \tau} T(\tau) = (\tau^2 - 1) T'(\tau)$$

$$\frac{1}{(1-\tau^2)} \left((\tau^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \tau} \right)^2 T(\tau) = \frac{(\tau^2 - 1)}{(1-\tau^2)} \frac{\partial}{\partial \tau} ((\tau^2 - 1) T'(\tau)) = -2\tau T'(\tau) - (\tau^2 - 1) T''(\tau)$$

נציב את הביטוי במשוואה :

$$(1-\tau^2) T''(\tau) - 2\tau T'(\tau) + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-\tau^2} \right) T(\tau) = 0$$

קבלנו את משוואת לג'נדר המוכללת.

אם נניח שהמספר הקוונטי $m = 0$ (רכיב z של המומנט המגנטי), המשוואה המתקבלת היא :

$$(1-\tau^2) T''(\tau) - 2\tau T'(\tau) + \frac{\lambda}{\hbar^2} T(\tau) = 0$$

זו משוואה דיפרנציאלית לא סינגולרית, עם מקדמים משתנים.

נמצא פתרון לפי טור חזקות :

$$T(\tau) = \sum a_n \tau^n$$

$$T'(\tau) = \sum a_n n \tau^{n-1}$$

$$T''(\tau) = \sum a_n n(n-1) \tau^{n-2}$$

נציב במשוואה :

$$(1-\tau^2)\sum a_n n(n-1)\tau^{n-2} - 2\tau\sum a_n n\tau^{n-1} + \frac{\lambda}{\hbar^2}\sum a_n \tau^n = 0$$

$$\sum a_{n+2}(n+2)(n+1)\tau^n - \sum a_n n(n-1)\tau^n - 2\sum a_n n\tau^n + \frac{\lambda}{\hbar^2}\sum a_n \tau^n = 0$$

נשווה מקדמים :

$$a_{n+2}(n+2)(n+1) - a_n n(n-1) - 2a_n n + \frac{\lambda}{\hbar^2}a_n = 0$$

נמצא נוסחת ריקורסיה :

$$a_{n+2} = \frac{n(n-1) + 2n - \frac{\lambda}{\hbar^2}}{(n+2)(n+1)} a_n = \frac{n(n+1) - \frac{\lambda}{\hbar^2}}{(n+2)(n+1)} a_n$$

אם המונה לא מתאפס, אז כאשר $n \leftarrow \infty$, אז $a_{n+2} \approx a_n$, כלומר הטור כמעט ולא מתכנס (אפשר להזניח את הקבועים, ו- $(n+1)$ מצטמצם).

אין התכנסות בנקודות $\tau = \pm 1$ (τ מוגדר לפי $\cos \theta$, ולכן $-1 \leq \tau \leq 1$) זאת אומרת $T(\pm 1)$ ישאף ל- $\pm \infty$ ולזה אין משמעות פיזיקאלית.

$$l(l+1) - \frac{\lambda}{\hbar^2} = 0 \quad \text{לכן המונה חייב להתאפס עבור מספר טבעי } l \text{ כלשהו :}$$

$$(8.6.4) \quad \lambda = l(l+1)\hbar^2 \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad \text{כאשר}$$

l מתאר תנע כולל ונקרא מספר קוונטי שני. הערכים של λ הם כמו הערכים של J^2 פרט לכך ש- j הוא גם יכול להיות חצי שלם, ו- l הוא רק שלם.

כשמתקיים שהמונה מתאפס, כלומר קיים l עבורו $\lambda = l(l+1)\hbar^2$ הפתרונות נקראים פולינומי לג'נדר ומסומנים: $P_l(\tau)$, או עבור θ : $T(\theta) = P_l(\cos \theta)$.

$$(8.6.5) \quad P_l^0(\tau) = P_l(\tau) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{d\tau^l} (\tau^2 - 1)^l \quad \text{הגדרה של פולינומי לג'נדר :}$$

פונקציות מצורפות (מוכללות) של לג'נדר עבור $|m| \leq l$, $(m \neq 0)$ (שתי צורות כתיבה):

$$(8.6.6) \quad P_l^m(\tau) = \frac{(-1)^m}{2^l \cdot l!} (1-\tau^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\tau^{l+m}} (\tau^2 - 1)^l$$

$$P_l^m(\tau) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l \cdot l!} (1-\tau^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\tau^{l+m}} (1-\tau^2)^l$$

הפונקציות $T(\tau) = P_l^m(\tau)$ מקיימות את משוואת לג'נדר.

הפתרון הכללי של התנע הזוויתי (מצבים ודאיים של התנע הזוויתי):

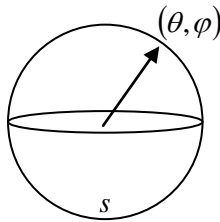
$$\psi_{m,l}(r, \theta, \varphi) = R(r)P_l^m(\cos \theta)e^{im\varphi}$$

עבור כל r נתון, הפונקציות נמצאות על מעטפת כדור ברדיוס r , ונקראות פונקציות הרמוניות ספריות. הפונקציות אורתוגונאליות עבור l, m שונים. ננרמל את החלק של הפונקציה שלא תלוי ב- r (זה כמו לעשות אינטגרל על פני כדור), נגדיר:

$$(8.6.7) \quad Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

ולכן ההרמוניות הספריות: $\psi_{m,l}(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$

כאשר: $s = \{\vec{r} : |\vec{r}| = 1\}$



$$\iint_s \overline{Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi)} Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) ds = \delta_{l_1}^{l_2} \delta_{m_1}^{m_2} : \text{ש כדי לנרמל צריך להתקיים}$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \overline{Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi)} Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) \underbrace{d\varphi \sin \theta d\theta}_{ds} = \delta_{l_1}^{l_2} \delta_{m_1}^{m_2}$$

תרגיל 1:

עבור $l=1$, חשב: Y_1^{-1}, Y_1^0, Y_1^1

פתרון:

$$l=1, m=-1 \rightarrow Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi} \frac{2!}{0!} \frac{(-1)^0}{2 \cdot 1!}} (\sin \theta)^{-1} \sin^2 \theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{1}{2} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

$$l=1, m=0 \rightarrow Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi} \frac{1!}{1!} \frac{(-1)^1}{2 \cdot 1!}} (-2 \cos \theta) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

כדי למצוא את Y_1^1 , נפעיל את \hat{l}_+ על Y_1^0 :

$$\hat{l}_+ \psi_{l,m} = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \hbar \psi_{l,m+1}$$

$$\hat{l}_+ \psi_{1,0} = \sqrt{1(1+1) - 0(0+1)} \hbar \psi_{1,1}$$

$$Y_1^1 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} L_+ Y_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

גם בדרך הרגילה מקבלים אותו דבר.

תרגיל 2:

$$\psi(x, y, z) = x^2 + y^2 - 2z^2$$

א. בדוק ש- ψ הוא מצב ודאי של התנע הזוויתי.

ב. מצא את ψ המתאים למצב $|2, -1\rangle$.

פתרון :

נעבור לקואורדינטות כדוריות :

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta, \varphi) &= r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 2r^2 \cos^2 \theta \\ \psi(r, \theta, \varphi) &= r^2 \sin^2 \theta - 2r^2 \cos^2 \theta = r^2(1 - \cos^2 \theta) - 2r^2 \cos^2 \theta \\ \psi(r, \theta, \varphi) &= r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta\end{aligned}$$

א. נפעיל את אופרטור L_z על הפונקציה, על פי משוואה (8.6.2) :

$$\hat{l}_z \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} (r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta) = 0$$

$$\hat{l}_z \psi = \mu \psi = m \hbar \psi = 0$$

$$\Rightarrow m = 0$$

הפעלה של אופרטור L_z , נותנת קבוע כפול הפונקציה, כלומר הפונקציה מקבלת ערך ודאי של תנע זוויתי בציר z , והוא אפס (במקרה זה).

נפעיל את אופרטור L^2 על הפונקציה, על פי משוואה (8.6.3) :

$$\begin{aligned}\hat{l}^2 \psi &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 (r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta) \right) \\ \hat{l}^2 \psi &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (\sin \theta \cdot 3r^2 \cdot 2 \cos \theta \sin \theta) + \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta)}_0 \right) \\ \hat{l}^2 \psi &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \sin \theta (6r^2 (-\sin \theta \sin^2 \theta + \cos \theta \cdot 2 \sin \theta \cos \theta)) = -6\hbar^2 r^2 (-1 + \cos^2 \theta + 2 \cos^2 \theta) \\ \hat{l}^2 \psi &= 6\hbar^2 r^2 (1 - 3 \cos^2 \theta) = 6\hbar^2 \psi\end{aligned}$$

הפעלה של אופרטור \hat{l}^2 , נותנת קבוע כפול הפונקציה, כלומר הפונקציה מקבלת ערך ודאי של תנע זוויתי כללי, והוא $\lambda = 6\hbar^2$ (במקרה זה).

על פי משוואה (8.6.4) : $\lambda = l(l+1)\hbar^2$, נציב את ה- λ שמצאנו : $6\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$

מכאן נקבל את המספר הקוונטי השני : $l = 2$.

כלומר מצב $\psi = |l, m\rangle \propto |2, 0\rangle$ הוא מצב ודאי של התנע הזוויתי.

ב. נפעיל אופרטור הורדה על המצב $|2, 0\rangle$:

$$\hat{l}_- |2, 0\rangle = \sqrt{\underbrace{l(l+1)}_6 - \underbrace{m(m-1)}_0} \hbar |2, -1\rangle = \sqrt{6} \hbar |2, -1\rangle$$

$$\hat{l}_- \psi = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (r^2 - 3r^2 \cos^2 \theta) = \hbar e^{-i\varphi} 3r^2 \cdot 2 \cos \theta \sin \theta$$

לכן

$$|2,-1\rangle \propto e^{-i\varphi} \cos\theta \sin\theta$$

פרק 9: מבנה אטום מימן

באופן כללי מבנה האטום הוא גרעין ומסביבו אלקטרונים. בדרך כלל מדברים על אטום מימן כי זהו מבנה האטום הכי פשוט, ומהאטום הזה ניתן ללמוד לגבי שאר האטומים. התנהגות האטום מושפעת מהתנהגות האלקטרונים יותר מאשר התנהגות הגרעין. אפשר לומר שפועל על האלקטרון שדה חשמלי הנוצר ע"י הגרעין והאלקטרונים אחרים. נתאר את השפעת הגרעין והאלקטרונים הקרובים על האלקטרון כגורם אחד, כאשר האלקטרונים הם ענן שמקטין את השפעת הגרעין (אפשר להזניח את האלקטרונים שבאותה רמה בגלל ריחוקם). מסיבה זו אפשר להשתמש באטום מימן כקירוב לכל שאר האטומים, כי יש אלקטרון אחד שפועל עליו שדה כתוצאה מהגרעין.

9.1 תיאור מצב אטום מימן, פירוק ההמילטוניאן.

אטום מימן מהווה מערכת עם שני חלקיקים:

פרוטון – בעל מטען חשמלי $+e$, מסה m_p , ומיקום \mathbf{r}_p .

אלקטרון – בעל מטען חשמלי $-e$, ומסה m_e , ומיקום \mathbf{r}_e .

נתאר את מצב המערכת – ע"י מציאת מצבים יציבים אפשריים של המערכת.

$$(9.1.1) \quad \hat{H} = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{כזו: ההמילטוניאן של מערכת}$$

כאשר $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|$, המרחק בין שני המטענים.

מצב יציב של אטום מימן על פי משוואת שרדינגר מקיים: $\hat{H}\psi = E\psi$ כאשר מתקיים:

$$\iiint |\psi|^2 dr < \infty$$

לפני שנפתור, נוריד את דרגות החופש של המערכת על ידי העברה ממערכת של שני חלקיקים למערכת של מרכז מסה ומיקום יחסי. לכן נגדיר קורדינטות חדשות: \mathbf{r} - מיקום יחסי, \mathbf{R} - מרכז מסה. (נסמן את הגדלים הקשורים לפרוטון ב- p , ואת הגדלים הקשורים לאלקטרון ב- e)

$$(9.1.2) \quad \begin{cases} \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p \\ \mathbf{R} = \frac{m_p \mathbf{r}_p + m_e \mathbf{r}_e}{m_p + m_e} \end{cases}$$

לפי הגדרת אופרטור תנע: $\hat{p}_e = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_e}$.

על ידי שימוש בכלל השרשרת והצבה $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ ו- $\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}$ נקבל:

$$\hat{p}_e = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_e} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{P} + \hat{p}$$

בצורה דומה

$$\hat{p}_p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_p} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_p} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{P} - \hat{p}$$

נציב ביטויים אלו באופרטור של האנרגיה הקינטית של ההמילטוניאן:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} &= \frac{\left(\frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{P} + \hat{p} \right)^2}{2m_e} + \frac{\left(\frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{P} - \hat{p} \right)^2}{2m_p} \\ &= \frac{m_e^2 \hat{P}^2}{2m_e (m_p + m_e)^2} + \frac{\hat{P}\hat{p} + \hat{p}\hat{P}}{2(m_p + m_e)} + \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \frac{m_p^2 \hat{P}^2}{2m_p (m_p + m_e)^2} - \frac{\hat{P}\hat{p} + \hat{p}\hat{P}}{2(m_p + m_e)} + \frac{\hat{p}^2}{2m_p} \end{aligned}$$

לכן

$$(9.1.6) \quad \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} = \frac{\hat{P}^2}{2(m_p + m_e)} + \frac{\hat{p}^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \right)$$

נגדיר מסה כוללת: $M = m_p + m_e$

$$\mu = \frac{1}{\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p}} = \frac{m_e m_p}{m_p + m_e} \quad \text{- מסה מצומצמת}$$

המסה המצומצמת מהווה כעין חיבור מקבילי של מסות.

$$\mu \approx \frac{m_e m_p}{m_p} \approx m_e \quad \text{אם } m_e \ll m_p, \text{ ניתן לומר כי } m_p + m_e \approx m_p, \text{ ולכן:}$$

כיוון שהמסה של האלקטרון m_e , קטנה באופן משמעותי ממסה של פרוטון m_p , המסה

המצומצמת דומה למסת האלקטרון.

הביטוי שקבלנו במשוואה (9.1.6) הוא סכום של האנרגיה הקינטית של מרכז המסה עם

האנרגיה הקינטית של המסה המצומצמת. בתיאור של התנע היחסי, כיוון שהפרוטון לא נע

והאלקטרון בתנועה, המסה של האלקטרון היא המשמעותית. ואילו בתנע של מרכז המסה, המסה של הפרוטון משמעותית ושל האלקטרון זניחה.

בהתחלה הייתה לנו פונקציה של 6 משתנים הקשורים אחד עם השני:

$$\{x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2\}$$

$$\hat{H} = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} : \text{ההמילטוניאן היה}$$

$$r^2 = (x_e - x_p)^2 + (y_e - y_p)^2 + (z_e - z_p)^2 : \text{כאשר } r \text{ תלוי בששת המשתנים}$$

לאחר השלבים שבצענו: ישנם 3 משתנים לתיאור מרכז המסה, ו-3 משתנים לתיאור של המיקום היחסי, והם לא קשורים ביניהם.

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V : \text{כעת ההמילטוניאן הוא}$$

כאשר V ו- \hat{p} תלויים רק ב- \mathbf{r} (שלושה משתנים x, y, z), ואילו \hat{P} תלוי ב- \mathbf{R} . נפתור את משוואת שרדינגר עם המשתנים החדשים- נציב באנרגיה הקינטית את הביטוי שמצאנו במשוואה (9.1.6):

$$(9.1.7) \quad \frac{\hat{P}^2}{2M} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\gamma}{r} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

כאשר $\gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ הוא מקדם של האנרגיה הפוטנציאלית.

נשתמש בהפרדת משתנים, ונחפש פתרון מהצורה: $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{R})\tilde{\psi}(\mathbf{r})$: נציב במשוואה (9.1.7):

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}) \frac{\hat{P}^2 \Psi(\mathbf{R})}{2M} + \Psi(\mathbf{R}) \frac{\hat{p}^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r})}{2\mu} - \frac{\gamma}{r} \Psi(\mathbf{R}) \tilde{\psi}(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{R}) \tilde{\psi}(\mathbf{r})$$

נחלק ב- $\Psi(\mathbf{R})\tilde{\psi}(\mathbf{r})$:

$$(9.1.8) \quad \frac{\hat{P}^2 \Psi(\mathbf{R})}{2M \Psi(\mathbf{R})} + \frac{\hat{p}^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r})}{2\mu \tilde{\psi}(\mathbf{r})} - \frac{\gamma}{r} = E$$

$$\frac{\hat{P}^2 \Psi(\mathbf{R})}{2M \Psi(\mathbf{R})} = -\frac{\hat{p}^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r})}{2\mu \tilde{\psi}(\mathbf{r})} + \frac{\gamma}{r} + E = k$$

כל אגף תלוי רק במשתנה אחד ולכן שווה לקבוע.

$$\underbrace{\frac{\hat{P}^2 \Psi(\mathbf{R})}{2M}}_{\text{א. קינטית}} = k \Psi(\mathbf{R}) : \text{המשוואה עבור } \mathbf{R}$$

המשוואה שהתקבלה היא משוואה של חלקיק חופשי בעל מסה $m_1 + m_2$. הפתרון של משוואה זו הוא פונקציה של גל פשוט:

$$(9.1.9) \quad \Psi(\mathbf{R}) = Ae^{i(k_1 R_1 + k_2 R_2 + k_3 R_3)}$$

כאשר $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$.

הפונקציה $\Psi(\mathbf{R})$ מתארת את תנועת מרכז המסה זאת אומרת כיצד האטום מתקדם מרחבית.

נשאר למצוא את החלק השני $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$ המתאר את המבנה הפנימי.

המשוואה עבור \mathbf{r} לפי משוואה (9.1.8), כאשר k מבטא הזזה בקבוע, לכן נניח $k = 0$:

$$\frac{\hat{p}^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r})}{2\mu} - \frac{\gamma}{r} \tilde{\psi}(\mathbf{r}) = E \tilde{\psi}(\mathbf{r})$$

אפשר לכתוב באופן כללי:

$$(9.1.10) \quad \frac{\hat{p}^2 \tilde{\psi}(\mathbf{r})}{2\mu} + V(r) \tilde{\psi}(\mathbf{r}) = E \tilde{\psi}(\mathbf{r})$$

התקבלה משוואת שרדינגר עבור חלקיק בודד בעל מסה μ בשדה חשמלי שנוצר על ידי הגרעין (אנרגיה פוטנציאלית). כפי שראינו ניתן לומר כי $\mu \approx m_e$. מסקנה: בעיית שרדינגר עבור זוג חלקיקים עם כוח שתלוי רק במיקום היחסי ביניהם, מתפצלת לבעיה של מרכז המסה המתנהג כמו חלקיק חופשי, ובעיה של חלקיק עם מסה מצומצמת בשדה קבוע המתאים לכוח.

9.2 קבלת משוואה רדיאלית

משוואת שרדינגר על פי משוואה (9.1.10):

$$(9.2.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \tilde{\psi}(r) + V(r) \tilde{\psi}(r) = E \tilde{\psi}(r)$$

כאשר $r = (x, y, z)$. במקרה שלנו הפוטנציאל הוא $\frac{1}{r}$. ביטוי זה לא ניתן

להפרדה בקורדינטות קרטזיות, לכן נעבור לקורדינטות כדוריות.

הלפלסיאן בקורדינטות כדוריות:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

לפי הגדרת אופרטור התנע הזוויתי הכללי:

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf) - \frac{\hat{l}^2}{r^2 \hbar^2} f \quad \text{לכן ניתן לכתוב את הלפלסיאן באופן הבא :}$$

נציב במשוואה (9.2.1) :

$$(9.2.2) \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\tilde{\psi}(r)) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{l}^2 \tilde{\psi}(r) + V(r)\tilde{\psi}(r) = E\tilde{\psi}(r)$$

על פי חוקי השימור פרק 7.5 : $V(r)$ נשמר ביחס לפעולת סיבוב, ולכן גם התנע הזוויתי \hat{l}^2

- נשמר. ומתקיים $[H, \hat{l}^2] = 0$ וגם $[H, \hat{l}_z] = 0$. כלומר H, \hat{l}^2, \hat{l}_z הם אופרטורים מתחלפים (ונמדדים יחדיו), ולכן ניתן למצוא פתרונות שיהיו מצבים יציבים עבור כל שלושת האופרטורים.

כפי שהראינו בפרק 8.6, הפונקציות שהן מצבים יציבים של \hat{l}^2, \hat{l}_z הן מהצורה :

$$\psi(r, \varphi, \theta) = R(r)Y_l^m(\varphi, \theta)$$

$$(9.2.3) \quad \iint_s |Y_l^m|^2 = 1 \quad \text{כאשר } Y_l^m(\varphi, \theta) \text{ הן הרמוניות ספריות, המקיימות}$$

ומתקיים :

$$\hat{l}^2 Y_l^m(\varphi, \theta) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\varphi, \theta)$$

$$\hat{l}_z Y_l^m(\varphi, \theta) = m\hbar Y_l^m(\varphi, \theta)$$

כדי לבדוק מהם הפתרונות שהם גם מצבים יציבים של H , נציב במשוואת שרדינגר, ונפעיל את האופרטור \hat{l}^2 :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR(r)Y_l^m(\varphi, \theta)) + \frac{1}{2\mu r^2} R(r)\hat{l}^2(Y_l^m(\varphi, \theta)) + V(r)R(r)Y_l^m(\varphi, \theta) = ER(r)Y_l^m(\varphi, \theta)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} (rR(r))'' Y_l^m(\varphi, \theta) + \frac{1}{2\mu r^2} R(r)l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\varphi, \theta) + V(r)R(r)Y_l^m(\varphi, \theta) = ER(r)Y_l^m(\varphi, \theta)$$

נצמצם ב- $Y_l^m(\varphi, \theta)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} (rR(r))'' + \frac{1}{2\mu r^2} R(r)l(l+1)\hbar^2 + V(r)R(r) = ER(r)$$

זו נקראת משוואה רדיאלית עבור בעיה דו גופית. המשוואה תלויה רק ב- r (משתנה סקלרי) שהוא המרחק בין הגרעין לאלקטרון.

עבור אטום מימן :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r} (rR(r))'' + \left(\frac{1}{2\mu r^2} l(l+1)\hbar^2 - \frac{\gamma}{r} - E \right) R(r) = 0$$

נחלק את המשוואה ב- $-\frac{\hbar^2}{2\mu r}$, ונקבל את המשוואה הרדיאלית :

$$(9.2.4) \quad (rR(r))'' - \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(-\frac{\gamma}{r} - E \right) \right) rR(r) = 0$$

בשביל הנרמול של פונקצית הגל צריך להתקיים: $\iiint |\psi(r, \varphi, \theta)|^2 dv = 1$

$$\int_0^\infty \int_S |\psi(r, \varphi, \theta)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi r^2 dr = 1$$

לפי תכונות ההרמוניות הספריות, משוואה (9.2.3):

$$\int_0^\infty R(r)^2 \underbrace{\int_S Y_l^m(\varphi, \theta)^2 \sin \theta d\theta d\varphi}_1 r^2 dr = 1$$

$$\int_0^\infty (rR(r))^2 dr = 1 \quad \text{ולכן:}$$

נסמן: $u(r) = rR(r)$, ואז מתקיים תנאי הנרמול:

$$(9.2.5) \quad \int_0^\infty u(r)^2 dr = 1, \quad u(r) = rR(r)$$

נציב את הפונקציה $u(r)$ במשוואה הרדיאלית (9.2.4):

$$(9.2.6) \quad u(r)'' - \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(-\frac{\gamma}{r} - E \right) \right) u(r) = 0$$

קבלנו משוואה חדשה, ונמשיך לפתור ממנה.

9.3 פתרון של משוואה רדיאלית

נבדוק מתי קיימים פתרונות של משוואה (9.2.6) המקיימים את תנאי הנרמול (9.2.5) של

$u(r)$?

פירוונות יכולים להיות קיימים רק עבור $E < 0 \leftarrow E = -|E|$.

$$(9.3.1) \quad k^2 = \frac{2\mu|E|}{\hbar^2} \quad \text{נסמן:}$$

נחליף את המשתנה r ב- ρ , באופן הבא:

$$(9.3.2) \quad \rho = 2kr$$

בהתאם:

$$u(r) = u\left(\frac{\rho}{2k}\right) = \tilde{u}(\rho)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial \rho}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \rho} = 2k \frac{\partial}{\partial \rho} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} = 4k^2 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2}$$

כעת נציב את הביטויים במשוואה (9.2.6):

$$4k^2 u(\rho)'' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} 4k^2 - \frac{2\mu\gamma 2k}{\hbar^2 \rho} + k^2 \right) u(\rho) = 0$$

לפני k^2 יש סימן + כי לוקחים את הערך המוחלט של E .

נחלק את המשוואה ב- $4k^2$:

$$u(\rho)'' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\mu\gamma}{\hbar^2 k \rho} + \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0$$

נגדיר: $\lambda = \frac{\mu\gamma}{\hbar^2 k}$ ונציב במשוואה:

$$(9.3.3) \quad u(\rho)'' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0$$

את המשוואה אפשר לפתור כטור חזקות, אבל באופן זה קשה להעריך את הסופיות של האינטגרל בתנאי הנרמול. לכן נפתור בדרך אחרת. נחפש פתרון אסימפטוטי המאפיין את התנהגות הפונקציה כאשר המשתנה גדול, כלומר כאשר $\rho \rightarrow \infty$. במקרה זה אפשר להזניח את שני האיברים הראשונים בסוגרים. כתוצאה מכך המשוואה נהיית פשוטה

$$\text{יותר: } \tilde{u}(\rho)'' - \frac{1}{4} \tilde{u}(\rho) = 0 \quad \text{או} \quad \tilde{u}(\rho)'' - \frac{1}{4} \tilde{u}(\rho) = 0$$

זו משוואה דיפרנציאלית פשוטה, שיש לה שתי אפשרויות לפתרון:

$$\tilde{u}_2(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad \text{או} \quad \tilde{u}_1(\rho) = e^{\frac{1}{2}\rho}$$

כדי שהאינטגרל בתנאי הקיום יתכנס, צריך שכאשר $\rho \rightarrow \infty$ הפונקציה $\tilde{u}(\rho) \rightarrow 0$. לכן אפשרות המתאימה לפתרון היא $\tilde{u}_2(\rho)$.

הפתרון $\tilde{u}_2(\rho)$ שמצאנו הוא פתרון מקורב, הפתרון האמיתי יהיה מהצורה:

$$(9.3.4) \quad u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho)$$

כאשר $G(\rho)$ מתאר עד כמה הפתרון המקורב $\tilde{u}_2(\rho)$ רחוק מהפתרון האמיתי $u(\rho)$.

נגזור את $u(\rho)$, כדי להציב במשוואה הדיפרנציאלית:

$$u(\rho)' = -\frac{1}{2}e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho) + e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)'$$

$$u(\rho)'' = \frac{1}{4}e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho) - e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)' + e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)''$$

נציב במשוואה הדיפרנציאלית (9.3.3):

$$e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)'' - e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho)' + \frac{1}{4}e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho) - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4}\right)e^{-\frac{\rho}{2}}G(\rho) = 0$$

$$G(\rho)'' - G(\rho)' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho}\right)G(\rho) = 0$$

את המשוואה הזו נפתור באמצעות טור חזקות, כי כבר פתרנו את הבעיה של ההתכנסות. נכפיל את המשוואה ב- ρ^2 :

$$(9.3.5) \quad \rho^2 G(\rho)'' - \rho^2 G(\rho)' - l(l+1)G(\rho) + \lambda\rho G(\rho) = 0$$

במשוואות דיפרנציאליות ההתנהגות נקבעת על פי הנגזרת מהסדר הגבוה ביותר. אנו מכירים משוואות דיפרנציאליות משני סוגים: משוואות רגילות: אם המקדם הראשון לא מתאפס, אפשר תמיד לפתור באמצעות טור חזקות.

משוואות סינגולריות: במשוואות אלו המקדם שעל יד הנגזרת הגבוהה מתאפס בנקודה כלשהי בתחום ההגדרה. משוואות כאלו לא ניתן לפתור באמצעות טור חזקות פשוט, וצריך להשתמש בטור חזקות מוכלל מהצורה הבאה:

$$(9.3.6) \quad G(\rho) = \rho^\alpha \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{j+\alpha}$$

טור החזקות המוכלל מורכב מטור חזקות רגיל מוכפל ב- ρ^α , כאשר α יכול להיות שבר. ניתן להניח ש- $a_0 \neq 0$. נגזור את טור החזקות המוכלל:

$$G'(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (\alpha + j) \rho^{\alpha+j-1}$$

$$G''(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j (\alpha + j)(\alpha + j - 1) \rho^{\alpha+j-2}$$

נציב במשוואה (9.3.5):

$$\sum a_j (\alpha + j)(\alpha + j - 1) \rho^{\alpha+j} - \sum a_j (\alpha + j) \rho^{\alpha+j+1} - l(l+1) \sum a_j \rho^{\alpha+j} + \lambda \sum a_j \rho^{\alpha+j+1} = 0$$

נצמצם ב- ρ^α :

$$(9.3.7) \quad \sum a_j [(\alpha + j)(\alpha + j - 1) - l(l+1)] \rho^j - \sum a_j (\alpha + j - \lambda) \rho^{j+1} = 0$$

המשוואה מתקיימת עבור $0 \leq j < \infty$. עבור $j = 0$ נקבל ρ^0 , ונשווה מקדמים:

$$a_0[\alpha(\alpha-1)-l(l+1)]=0$$

$$(9.3.8) \quad \alpha(\alpha-1)-l(l+1)=0 : \text{לכן ניתן לצמצם אותו: } a_0 \neq 0$$

המשוואה שהתקבלה נקראת משוואת האינדקס. נמצא את α לפי המשוואה הריבועית שמתקבלת:

$$\alpha^2 - \alpha - l(l+1) = 0$$

$$\alpha_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+4l(l+1)}}{2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+4l^2+4l}}{2} = \frac{1 \pm (2l+1)}{2} =$$

$$\Rightarrow \alpha_1 = l+1$$

$$\alpha_2 = -l$$

היות ו- ρ^{-l} (הפתרון לפי α_2) לא מוגדר ב- $\rho=0$, $\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho^{-l} = \infty$, לכן הפיתרון המתאים

הוא- $\alpha = l+1$.

נמצא נוסחת רקורסיה, נשווה מקדמים של ρ^j על פי משוואה (9.3.7):

$$a_j[(\alpha+j)(\alpha+j-1)-l(l+1)] - a_{j-1}(\alpha+j-1-\lambda) = 0$$

$$a_j = \frac{(\alpha+j-1-\lambda)}{(\alpha+j)(\alpha+j-1)-l(l+1)} a_{j-1}$$

נציב $\alpha = l+1$:

$$a_j = \frac{(l+1+j-1-\lambda)}{(l+1+j)(l+1+j-1)-l(l+1)} a_{j-1}$$

$$a_j = \frac{(l+j-\lambda)}{(l+j+1)(l+j)-l(l+1)} a_{j-1}$$

$$(9.3.9) \quad a_j = \frac{(l+j-\lambda)}{j(2l+j+1)} a_{j-1}$$

כפי שראינו הפתרון צריך להיות מהצורה $u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho)$, כאשר $G(\rho)$ הוא טור חזקות עבורו $\alpha = l+1$ וקיימת לו נוסחת רקורסיה.

טענה: אם כל $a_j \neq 0$, זאת אומרת $l+j-\lambda \neq 0$, אזי מתקיים: $\lim_{\rho \rightarrow \infty} e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho) = \infty$.

על פי הטענה ניתן לומר, שאם a_j מתאפס עבור j מסוים, $G(\rho)$ הוא פולינום. פולינום שואף לאינסוף יותר לאט מאשר האקספוננט, וכך מתקיים תנאי ההתכנסות. כדי לבדוק את נכונות הטענה, נבדוק מה קורה בנוסחת הרקורסיה עבור ערכי j גדולים (נזניח את הקבועים):

$$a_j = \frac{j}{j^2} a_{j-1} = \frac{1}{j} a_{j-1}$$

עבור הטור $e^\rho = \sum \frac{\rho^j}{j!}$, מתקיים: $a_j = \frac{1}{j!} = \frac{1}{j(j-1)!} = \frac{1}{j} a_{j-1}$, מתקבלת אותה נוסחת

רקורסיה, לכן ניתן לומר $G(\rho) \approx e^\rho$. אם כן אז: $\lim_{\rho \rightarrow \infty} e^{-\frac{\rho}{2}} e^\rho \lim_{\rho \rightarrow \infty} e^\rho \rightarrow \infty$. $\lim_{\rho \rightarrow \infty} e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} e^{-\frac{\rho}{2}} e^\rho \lim_{\rho \rightarrow \infty} e^\rho \rightarrow \infty$.

כלומר במצב כזה לא מתקיים תנאי ההתכנסות, כלומר הטענה מתקיימת.

לכן קיים מספר טבעי $j = \tilde{n}$, עבורו מתקיים: $l + \tilde{n} - \lambda = 0 \Leftarrow l + \tilde{n} = n = \lambda$, ולכן $l < n$.

על פי משוואות (9.3.4), (9.3.6) ו-(9.3.9) נקבל את הביטוי של הפונקציה $u(\rho)$:

כאשר a_j נתון באמצעות נוסחת הרקורסיה: $u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{j=0}^{n-l-1} a_j \rho^{j+l+1}$

$$a_j = \frac{(l+j-\lambda)}{j(2l+j+1)} a_{j-1}$$

נפשט את הביטוי של נוסחת הרקורסיה, נציב $\lambda = n$ ונוציא (-) לפני השבר:

$$(9.3.11) \quad a_j = -\frac{(n-l-j)}{j(2l+j+1)} a_{j-1}$$

נבדוק שנוסחת הרקורסיה זו שווה לנוסחת רקורסיה של פולינומי לגר הידועים אשר נחקרו רבות במתמטיקה.

9.4 פולינומי לגר תיאור מצבים יציבים של אטום מימן

פולינומי לגר מוגדרים עבור שני אינדקסים שלמים p ו- q כאשר $q \leq p$ על ידי:

$$(9.4.1) \quad L_p^q(x) = \frac{d^q}{dx^q} \left(e^x \frac{d^p}{dx^p} (x^p e^{-x}) \right)$$

מהגדרתם רואים שהם פולינומים ממעלה $p - q$.

עבור q נתון שפולינומי לגר אורתוגונאליים בקטע $(0, \infty)$ ביחס למשקל $\rho^q e^{-\rho}$ ומתקיים:

$$(9.4.2) \quad \int_0^\infty L_p^q L_p^q \rho^q e^{-\rho} d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!} \delta_{pp}$$

אחת מנוסחאות הרקורסיה של פולינומי לגר:

$$(9.4.3) \quad \rho L_p^q(\rho) = (2p - q + 1) L_p^q(\rho) - \frac{p - q + 1}{p + 1} L_{p+1}^q(\rho) - p^2 L_{p-1}^q(\rho)$$

נשתמש בנוסחת לייבניץ לנגזרת של הכפל

$$L_p^0(x) = e^x \sum_j \binom{p}{j} (x^p)^{(p-j)} (e^{-x})^{(j)} = \sum_j \frac{p!}{j!(p-j)!} \frac{p!}{j!} x^j (-1)^j = \sum_j \frac{(-1)^j (p!)^2}{(j!)^2 (p-j)!} x^j$$

-1

$$\begin{aligned} L_p^q(x) &= \sum_j \frac{(-1)^j (p!)^2}{(j!)^2 (p-j)!} (x^j)^{(q)} = \sum_j \frac{(-1)^j (p!)^2}{(j!)^2 (p-j)!} \frac{j!}{(j-q)!} x^{j-q} \\ &= \sum_j \frac{(-1)^{j+q} (p!)^2}{(j+q)! (p-j-q)! j!} x^j := \sum_j c_j x^j \end{aligned}$$

זה נותן משוואת רקורסיה $c_j = -\frac{p-j-q+1}{j(j+q)} c_{j-1}$ שזהה עם נוסחה

(9.3.11) עבור a_j אם נניח ש: $q = 2l+1$ ו- $p = n+l$. לכן

$$(9.4.4) \quad G(\rho) = A \rho^{l+1} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = A \rho^{l+1} \sum_{j=0}^{n-l-1} \frac{(-1)^j ((n+l)!)^2}{j!(2l+j+1)!(n-l-1-j)!} \rho^j$$

כאשר A קבוע נרמול.

קבוע נרמול A נמצא לפי (9.2.5). נעבור למשתנה $\rho = 2kr$ ונשתמש ב-(9.3.4)

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = \int_0^\infty |u(\rho)|^2 \frac{1}{2k} d\rho = \int_0^\infty e^{-\rho} |G(\rho)|^2 \frac{1}{2k} d\rho = \\ &= \int_0^\infty A^2 e^{-\rho} \rho^{2l+2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)^2 \frac{1}{2k} d\rho = A^2 \frac{1}{2k} \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l+2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)^2 d\rho \end{aligned}$$

כדי לחשב האינטגרל נשתמש בנוסחת הרקורסיה (9.4.3) ואורתוגונאליות (9.4.2) של פולינומי לגר

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l+2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)^2 d\rho &= \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l+1} (\rho L_{n+l}^{2l+1}(\rho)) L_{n+l}^{2l+1}(\rho) d\rho = \\ \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l+1} \left(2n L_{n+l}^{2l+1}(\rho) - \frac{n-l}{n+l+1} L_{n+l+1}^{2l+1}(\rho) + (n+l)^2 L_{n+l-1}^{2l+1}(\rho) \right) L_{n+l}^{2l+1}(\rho) d\rho &= \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \end{aligned}$$

מכאן

$$(9.4.5) \quad A_{nl} = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \quad \text{כאשר} \quad A = \sqrt{2k \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} = \sqrt{2k} A_{nl}$$

כמו שראינו בסעיף הקודם $\lambda = n$ על פי ההגדרה של λ : $n^2 = \lambda^2 = \frac{\mu^2 \gamma^2}{\hbar^4 k^2}$

$$n^2 = \frac{\mu^2 \gamma^2 \hbar^2}{\hbar^4 \cdot 2\mu|E|} = \frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2|E|} : (9.3.1) \text{ על פי משוואה}$$

מכאן נקבל ביטוי לאנרגיה ברמה n :

$$(9.4.6) \quad E_n = -\frac{\gamma^2 \mu}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

המקדם של $-\frac{1}{n^2}$ נקרא קבוע רידברג ומסומן: $R_y = \frac{\gamma^2 \mu}{2\hbar^2}$, לכן אפשר לכתוב:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$$

רידברג גילה את הקבוע באמצעות ניתוח של ספקטרום אטום המימן, עבור שתי רמות אנרגיה:

$$E_{n_1} - E_{n_2} = -R_y \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

כדי לחזור ל $R(r)$ נבטא את התלות ב ρ וברמות אנרגיה

$$\rho = 2kr = 2 \underbrace{\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}}_k r = 2 \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \frac{\gamma \sqrt{\mu}}{\sqrt{2\hbar n}} r = \frac{2\gamma\mu}{\hbar^2} \frac{r}{n}$$

נסמן: $a = \frac{\hbar^2}{\gamma\mu}$, קבוע זה נקרא רדיוס בוהר, והוא מבטא את מרחק האלקטרון מהגרעין

(בקליפה הנמוכה ביותר), כלומר המרחק עם ההסתברות הגבוהה ביותר להמצאות אלקטרון.

$$(9.4.7) \quad k = \frac{1}{na}, \quad \rho = \frac{2r}{na} \quad \text{לכן:}$$

תלות רדיאלית של פונקצית גל באטום מימן היא:

$$R_{nl}(r) = r^{-1} u(r) = r^{-1} u\left(\frac{2r}{na}\right) = A r^{-1} \underbrace{e^{-\frac{r}{na}}}_{e^{-\frac{\rho}{2}}} \underbrace{L_{n+k}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)}_{G(\rho)} = \sqrt{2k} A_{nl} e^{-\frac{r}{na}} 2k \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+k}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$$

לכן

$$(9.4.8) \quad R_{nl}(r) = A_{nl} (2k)^{3/2} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{l+n}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) = A_{nl} \left(\frac{2}{na}\right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na}\right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{l+n}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$$

פונקצית גל של מצב יציב באטום מימן שווה -

$$(9.4.9) \quad \psi_{nlm}(r, \varphi, \theta) = R_{nl}(r) Y_l^m(\varphi, \theta)$$

כל מצב יציב $\psi(r, \varphi, \theta)$ באטום מימן מוגדר באמצעות שלושה אינדקסים: m, l, n , כאשר

כל אחד מהם קשור לערך עצמי של אחד האופרטורים $\hat{L}_z, \hat{L}^2, \hat{H}$: בהתאם: $\hat{H} \rightarrow -\frac{R_y}{n^2}$

$$\hat{L}_z \rightarrow m\hbar, \quad \hat{L}^2 \rightarrow l(l+1)\hbar^2,$$

הערכים שאינדקסים אלו יכולים לקבל הם:

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l < n, \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

תרגיל 1:

חשב את המרחק הממוצע של האלקטרון ברמת היסוד $n=1$ מהגרעין.

פתרון:

נמצא את המצב המתאים לאלקטרון ברמת היסוד לפי (9.4.9): $\psi_{100} = R_{10}(r) Y_0^0(\varphi, \theta)$

על פי משוואות (9.4.1) (9.4.5) (9.4.8) ו-(8.6.7):

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{0!}{2 \cdot 1!}} \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{2e^{-\frac{r}{a}}}{a^{\frac{3}{2}} \sqrt{4\pi}}$$

נמצא את התוחלת של r (המרחק הממוצע מהגרעין):

$$\langle r \rangle = \langle \psi_{100} | r \psi_{100} \rangle = \iiint \psi_{100}^2 r dv$$

לפי קואורדינטות כדוריות: $\langle r \rangle = \iiint \psi_{100}^2 r r^2 \sin \theta dr d\varphi d\theta$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_0 \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta}_2 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a}} r^3 dr$$

נציב את ψ^2 ונפריד את האינטגרל באופן הבא:

$$\rho = \frac{2r}{a} \rightarrow r = \frac{a\rho}{2}$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\pi a^3} 2\pi \cdot 2 \left(\frac{a}{2}\right)^4 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^3 d\rho = \frac{a}{4} \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^3 d\rho$$

לחשב אינטגרל זה נשתמש בנוסחה:

$$(9.4.10) \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^n d\rho = n!$$

שאפשר לפתח אותה לפי אינטגרציה לפי חלקים :

$$\int_0^{\infty} \underbrace{e^{-\rho}}_{(-e^{-\rho})} \rho^n d\rho = -e^{-\rho} \rho^n \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-\rho} n\rho^{n-1} d\rho = n \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{n-1} d\rho$$

נמשיך באותו אופן להציב את הנוסחה בעצמה :

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^n d\rho = n \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{n-1} d\rho = n(n-1) \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{n-2} d\rho = n! \int_0^{\infty} e^{-\rho} d\rho = n! (-e^{-\rho}) \Big|_0^{\infty} = n!$$

לפיכך המרחק הממוצע המתקבל הוא : $\langle r \rangle = \frac{a}{4} 3! = 1.5a$

תרגיל 2 :

מצא את המרחק מהגרעין שבו ההסתברות למצוא את האלקטרון היא הגבוהה ביותר.

פתרון :

כדי למצוא את ההסתברות למצוא אלקטרון בתחום $[r_0, r_0 + dr]$ מהגרעין, נבצע אינטגרל על קליפה של כדור ברדיוס r_0 :

$$\iiint_S \psi_{100}^2 dv = \frac{4}{a^3} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_{r_0}^{r_0+dr} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr$$

dr קטן, ואפשר להעריך את השטח בתחום $[r_0, r_0 + dr]$ באמצעות מלבן, לכן אפשר במקום האינטגרל להציב את ערך הפונקציה בנקודה, ולהכפיל ב- dr :

$$\iiint_S \psi_{100}^2 dv = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r_0}{a}} r_0^2 dr$$

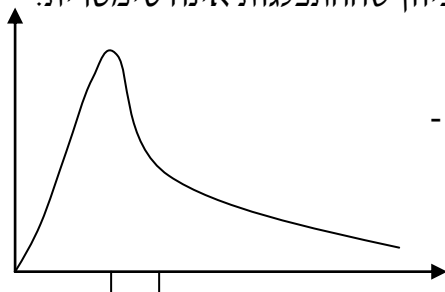
נגדיר את פונקצית צפיפות ההסתברות באופן הבא : $f(r_0) = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r_0}{a}} r_0^2$

נגזור את $f(r_0)$, כדי למצוא מתי מקבלים ערך מקסימלי :

$$f'(r_0) = \frac{4}{a^3} \left(-\frac{2}{a} e^{-\frac{2r_0}{a}} r_0^2 + 2r_0 e^{-\frac{2r_0}{a}} \right) = \frac{8r_0}{a^3} e^{-\frac{2r_0}{a}} \left(-\frac{r_0}{a} + 1 \right) = 0$$

מהמשוואה רואים שמתקבל ערך מקסימלי עבור $r_0 = a$.

על פי התוצאות שקבלנו בתרגילים 1 ו- 2 המרחק הממוצע של אלקטרון מהגרעין והמרחק בעל ההסתברות הגבוהה ביותר אינם זהים. בהתפלגות כלשהי לא תמיד הערך הממוצע הוא גם הערך בעל ההסתברות הגבוהה ביותר, כיוון שההתפלגות אינה סימטרית.



תרגיל 3:

אלקטרון נמצא במצב ψ_{nlm} . מצא את התוחלת של המרחק של האלקטרון מהגרעין.

פתרון:

על פי הגדרת תוחלת: $\langle r \rangle = \langle \psi_{nlm} | r \psi_{nlm} \rangle = \iiint |\psi_{nlm}|^2 r dv$

לפי הגדרה של ψ_{nlm} לפי (9.4.9) ותנאי הנרמול:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^3 dr \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\varphi, \theta)|^2 \sin \theta d\varphi d\theta}_1$$

לפי הנוסחה (9.4.8) של הפונקציות $R_{nl}(r)$ והעברה למשתנה ρ לפי (9.4.7):

$$\langle r \rangle = A_{nl}^2 \left(\frac{2}{na} \right)^3 \int_0^\infty \rho^{2l} e^{-\rho} (L_{n+l}^{2l+1}(\rho))^2 \underbrace{\frac{(na\rho)^3}{(2)^3}}_{r^3} \underbrace{\frac{na}{dr}}_{dr} d\rho = A_{nl}^2 \frac{an}{2} \int_0^\infty \rho^{2l+3} e^{-\rho} (L_{n+l}^{2l+1}(\rho))^2 d\rho$$

או

$$\langle r \rangle = A_{nl}^2 \frac{an}{2} \int_0^\infty (\rho L_{n+l}^{2l+1}(\rho))^2 \rho^{2l+1} e^{-\rho} d\rho$$

לפי נוסחאות הרקורסיה של פולינומי לגר (9.4.3) מתקיים:

$$\rho L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = 2n L_{n+l}^{2l+1}(\rho) - \frac{n-l}{n+l+1} L_{n+l+1}^{2l+1}(\rho) - (n+l)^2 L_{n+l-1}^{2l+1}(\rho)$$

בגלל האורתוגונליות של פולינומי לגר:

$$\langle r \rangle = A_{nl}^2 \frac{an}{2} \int_0^\infty \left[4n^2 (L_{n+l}^{2l+1}(\rho))^2 + \left(\frac{n-l}{n+l+1} \right)^2 (L_{n+l+1}^{2l+1}(\rho))^2 + (n+l)^4 (L_{n+l-1}^{2l+1}(\rho))^2 \right] \rho^{2l+1} e^{-\rho} d\rho$$

כעת נציב לפי (9.4.2):

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \frac{an}{2} \left[4n^2 \frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} + \left(\frac{n-l}{n+l+1} \right)^2 \frac{[(n+l+1)!]^3}{(n-l)!} + (n+l)^4 \frac{[(n+l-1)!]^3}{(n-l-2)!} \right]$$

נכניס את הקבוע שלפני הסוגרים לתוכם :

$$\langle r \rangle = \frac{a}{4} \left[4n^2 + \frac{(n-l)^2}{(n+l+1)^2} \frac{[(n+l+1)!]^3}{(n-l)!} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} + (n+l)^4 \frac{[(n+l-1)!]^3}{(n-l-2)!} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \right]$$

נצמצם את הביטויים עד כמה שאפשר :

$$\langle r \rangle = \frac{a}{4} [4n^2 + (n-l)(n+l+1) + (n+l)(n-l-1)]$$

נפתח את הביטויים בסוגריים :

$$\langle r \rangle = \frac{a}{4} [4n^2 + n^2 - nl - l(l+1) + n(l+1) + n^2 + nl - n(l+1) - l(l+1)]$$

$$\langle r \rangle = \frac{a}{4} [6n^2 - 2l(l+1)]$$

$$\langle r \rangle = \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)]$$

לסיכום :

$$\langle r \rangle = \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)] \text{ : הוא } n \text{ ברמה } n \text{ האלקטרון במוצע בין הגרעין לאלקטרון ברמה } n \text{ הוא}$$

$$\langle r \rangle = 1.5an^2 \text{ עבור } l = 0 \text{ (תנע זוויתי מינימלי), המרחק הוא}$$

כאשר $l > 0$ האנרגיה הקינטית גדלה, האנרגיה הפוטנציאלית קטנה ואז המרחק הממוצע בין האלקטרון לגרעין גדל.

9.5 תיאום מודל אטום מימן למציאות

נמצא כעת ערכים מספריים לגדלים שקיבלנו בחישוב מצבים יציבים של אטום מימן.

$$\text{ידוע שמסת אלקטרון שווה } m_e \approx 0.5 \text{Mev},$$

$$\text{מסת פרוטון שווה } m_p \approx 1000 \text{Mev}.$$

$$\text{לכן המסה המצומצמת שווה בערך למסת האלקטרון } m_e \approx \mu.$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ על מנת לחשב את רדיוס בוהר נשתמש ב- } \hbar c \approx 2000 \text{eVA} \text{ והקבוע-}$$

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar c}{\mu c^2} \frac{\hbar c}{e^2} \approx 0.55 \text{A} \text{ שווה}$$

קבוע רידברג שווה

$$R_y = \frac{e^4 \mu}{2\hbar^2} = \frac{\mu c^2}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \approx 13.3 eV$$

$$E_n \approx \frac{-13.3}{n^2} eV \text{ לכן אנרגיה ברמה } n \text{ שווה}$$

תדר העברה מרמה n לרמה n' בספקטרום של אטום מימן הוא-

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{R_y}{\hbar} \left(\frac{1}{n'} - \frac{1}{n} \right)$$

כאשר $n' = 1$ סידרת תדרים נקראת סידרת לימן, עבור $n' = 2$ סידרת תדרים נקראת סידרת בלמר.

תוצאות מדידות אלו מתאימות לתדרים מחושבים.

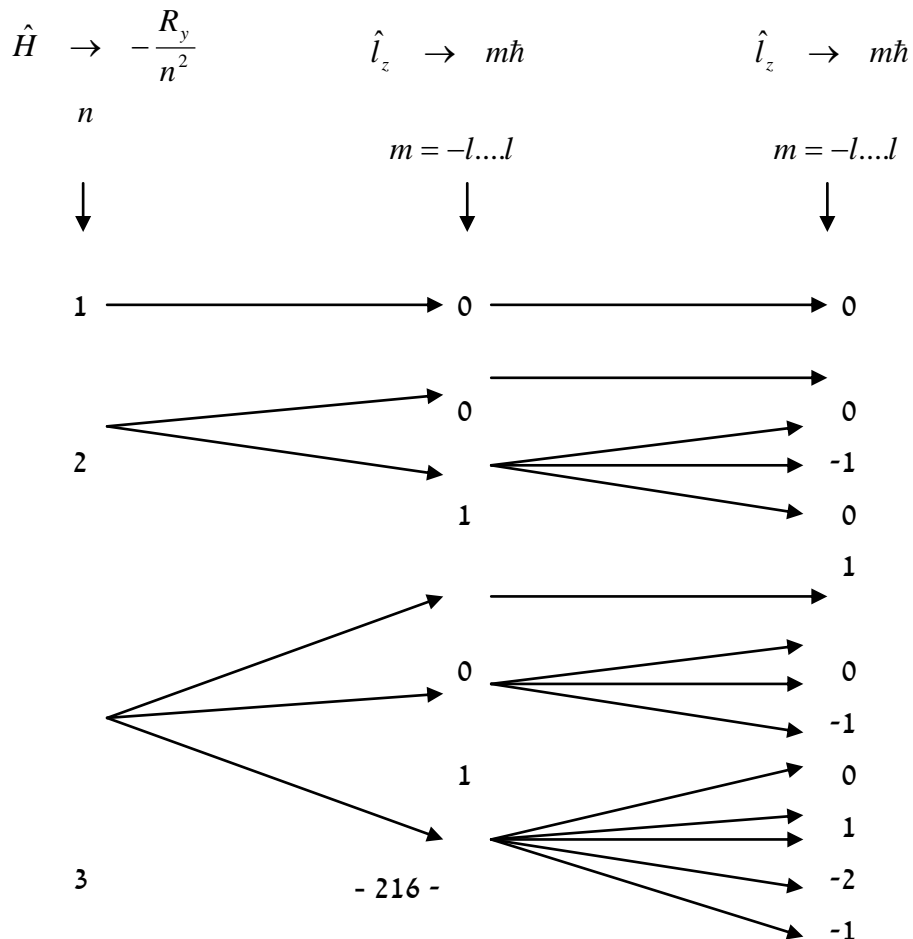
9.6 מבנה אטום כללי

כמו שראינו כל מצב יציב $\psi(r, \varphi, \theta)$ באטום מימן מוגדר באמצעות שלושה אינדקסים: m, l, n , כאשר כל אחד מהם קשור לערך עצמי של אחד האופרטורים:

$$\hat{l}_z \rightarrow m\hbar, \hat{l}^2 \rightarrow l(l+1)\hbar^2, \hat{H} \rightarrow -\frac{R_y}{n^2}$$

הערכים שאינדקסים אלו יכולים לקבל הם

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad l < n, \quad l = 0, 1, \dots, n-1 \quad m = -l, -l+1, \dots, l$$



מסמנים את הערכים השונים של אינדקס l באותיות באופן הבא :

$$l = 0 \rightarrow S$$

$$l = 1 \rightarrow P$$

$$l = 2 \rightarrow D$$

כפי שהסברנו בתחילת הפרק, ההבדל בין מבנה אטום כללי למבנה של אטום מימן הוא שאלקטרון באטום כלשהו מרגיש השפעה של גרעין בעל יותר מפרוטון אחד וענן אלקטרוניים. נזניח את השפעת האלקטרונים האחרים, ונכפיל את האנרגיה הפוטנציאלית של ההמילטוניאן ב- Z שהוא מספר הפרוטונים בגרעין.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

מצב של אלקטרון באטום יהיה מוגדר בעזרת המספרים הקוונטים n, l, m , וכן מספר נוסף המתאר מצב פנימי של אלקטרון ומוגדר על ידי רכיב z של התנע הזוויתי הפנימי שלו, המתאים לאופרטור J_3 עבור $j = \frac{1}{2}$, ומסומן S_z (ספין). עבור גודל זה ניתן לקבל ערכים

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

לסיכום: מצב של אלקטרון באטום מוגדר על ידי 4 מספרים קוונטים: n, l, m, s . המקבלים ערכים:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l$$

$$s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

נמצא את מספר המצבים האפשריים עבור כל n :

על פי עקרון האיסור של פאולי, 2 אלקטרונים לא יכולים להיות ברמת אנרגיה זהה, כלומר בעלי בדיוק אותם ערכים של מספרים קוונטים.

עבור n מסוים יש n אפשרויות של l . עבור l מסוים יש $2n-1$ אפשרויות של m . נסכום את כל המצבים ב- n מסוים של l ו- m נקבל את הטור הבא:

$$1 + 3 + 5 + \dots + (2n-1) = n^2$$

סה"כ עבור n מסוים יש $2n^2$ אפשרויות למצבים שונים.

$$\begin{aligned}
 n = 1 & \rightarrow 2 \\
 n = 2 & \rightarrow 8 \\
 n = 3 & \rightarrow 18 \\
 & \vdots \\
 n & \rightarrow 2n^2
 \end{aligned}$$

לפי עקרון *Aufbau*, קודם כל האלקטרונים ממלאים את המצבים על פי רמת האנרגיה, מהנמוכה לגבוהה.

זוה נותן הסבר על טבלת החומרים:

המערכה המחזורית

1 H 1.01																	2 He 4.00										
3 Li 6.94	4 Be 9.01											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18										
11 Na 22.99	12 Mg 24.31											13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95										
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.87	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.39	31 Ga 69.72	32 Ge 72.61	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80										
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62											39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-70	71 Lu 174.97	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222.01)									
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-102	103 Lr (262)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (264)	108 Hs (265)	109 Mt (268)	110 Uun (269)	111 Uuu (272)	112 Uub (277)			114 Uuq (289)			116 Uuh (289)	118 Uuo (293)								
57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04														
89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)														

פרק 10 : תורת ההפרעות

תורת ההפרעות מתחלקת לשני מקרים : תורת ההפרעות בלתי תלויות בזמן (עבור מצבים יציבים) ותורת ההפרעות התלויות בזמן. תורת ההפרעות בלתי תלויות בזמן מתחלקת גם כן לשני מקרים : מקרה של אי ניוון ומקרה של ניוון.

10.1 הפרעה במצבים יציבים - מקרה של אי ניוון:

נמצא מצבים יציבים של המערכת באמצעות פתרון משוואת שרדינגר : $H\psi = E\psi$,

$$H = H^0 + H^1$$

H^0 הוא המילטוניאן של המערכת ללא הפרעה, עבורו אנו יודעים לפתור את הבעיה (לדוגמא : מתנד הרמוני, חלקיק חופשי, אטום מימן).

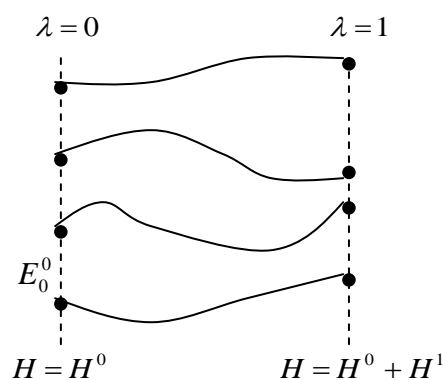
H^1 מתאר את ההפרעה. זו התוספת שצריך על מנת להגיע ל- H , והיא קטנה יחסית ל- H^0 . (לדוגמא : הפעלת שדה מגנטי באזור של אטום מימן). H^1 הוא אופרטור צמוד לעצמו כיוון שהוא מתאר גודל פיזיקאלי.

$$H(\lambda) = H^0 + \lambda H^1 \quad (10.1.1) \quad \text{נגדיר:}$$

כאשר λ הוא פרמטר ממשי, $0 \leq \lambda \leq 1$.

$\lambda = 0$ מבטא מקרה שעבורו אין הפרעה.

נמצא איך משתנה ה- H , כלומר איך משתנה האנרגיה של המערכת בכל רמה n , כתוצאה מהגדלת ה- λ עד 1.



באופן מעשי ניתן למצוא את המסלול על ידי הפעלת ההפרעה באופן הדרגתי.

באופן כללי, נפתור את משוואת שרדינגר $H(\lambda)\psi_n = E_n(\lambda)\psi_n$

נפרק את $E_n(\lambda)$ ו- $\psi_n(\lambda)$ לטור חזקות לפי λ .

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

$$\psi_n(\lambda) = \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots$$

האינדקס העליון של E_n ו- ψ_n מציין את דרגת הקירוב.

המצבים $\psi_n^{(i)}(\mathbf{r}) \leftarrow \mathbf{r}$ הם פונקציות של המיקום,

נציב במשוואת שרדינגר ונפתור לפי טורי חזקות

$$(H^0 + \lambda H^1)(\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots)$$

: נשווה מקדמים של λ^0

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$$

זו המשוואה הידועה, משוואת שרדינגר ללא הפרעה.

E_n^0 - האנרגיה האפשרית של H^0 .

ψ_n^0 - מצב יציב המתאים לאנרגיה E_n^0 .

כיוון שאנו במקרה שאין ניוון, יש מצב אחד המתאים לאנרגיה E_n^0 , זה מתאים למקרה של מתנד הרמוני חד מימדי.

השוואת מקדמים של λ^1 :

$$(10.1.2) \quad H^0 \psi_n^1 + H^1 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0$$

השוואת מקדמים של λ^2 :

$$(10.1.3) \quad H^0 \psi_n^2 + H^1 \psi_n^1 = E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0$$

המשוואות כוללות וקטורים ואופרטורים.

ψ_n^0 מהווה בסיס אורתונורמלי (של הבעיה המקורית), ואילו ψ_n^1, ψ_n^2 הם לא בהכרח אורתונורמלים. מסיבה זו נעבוד תמיד בבסיס ψ_n^0 , ואת כל הוקטורים האחרים, נבטא לפי בסיס זה. במקום למצוא את הוקטורים עצמם, נמצא את מקדמי הפירוק בבסיס ψ_n^0 הידוע.

$$\text{למשל, } \psi_n^1 \text{ הוא צירוף ליניארי של וקטורי הבסיס } \psi_n^0 \text{ : } \psi_n^1 = \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0$$

$$\text{וכן גם } \psi_n^2 \text{ : } \psi_n^2 = \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^2 \psi_k^0$$

נציב במשוואה (10.1.2) את הפירוק של ψ_n^1 :

$$H^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 + H^1 \psi_n^0 = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 + E_n^1 \psi_n^0$$

H^0 הוא אופרטור ליניארי, ויודעים ש- $H^0(\psi_n^0) = E_n^0 \psi_n^0$, כאשר E_n^0 אנרגיה המתאימה למצב ψ_n^0 , לכן:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 E_k^0 \psi_k^0 + H^1 \psi_n^0 = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 + E_n^1 \psi_n^0$$

צריך לשים לב, שבכל משוואה n הוא קבוע (רמת האנרגיה), ו- k משתנה לפי הסכום.

H^1 הוא אופרטור כלשהו, ולא יודעים איך הוא פועל על וקטורי הבסיס.

כפי שאמרנו בסיס ψ_n^0 הוא בסיס אורתונורמלי, לכן נתייחס לשני מקרים:

1. במקרה זה, ניקח מכפלה פנימית עם הווקטור $\langle \psi_n^0 |$, $k = n$

$$\langle \psi_n^0 | \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 E_k^0 \psi_k^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | E_n^1 \psi_n^0 \rangle$$

קבועים נוציא מחוץ למכפלה:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 E_k^0 \langle \psi_n^0 | \psi_k^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \langle \psi_n^0 | \psi_k^0 \rangle + E_n^1 \underbrace{\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle}_1$$

כל המכפלות הפנימיות בסכום, חוץ מאשר עבור $k = n$, מתאפסות:

$$c_{nn}^1 E_n^0 + \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^0 c_{nn}^1 + E_n^1$$

$$\Rightarrow \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^1$$

ψ_n^0 הוא מצב יציב בלי הפרעה. כאשר יש הפרעה, יש תוספת מסדר ראשון של E_n^1 ברמות האנרגיה. לפי הגדרת תוחלת, ניתן לומר כי E_n^1 - תוספת האנרגיה - היא תוחלת של ההפרעה H^1 על מצב ψ_n^0 . אחרי ההפרעה, הקירוב הראשוני של האנרגיה של המצב הוא $E_n^0 + E_n^1$. בכתיבה מטריציונית נאמר כי:

$$\Rightarrow (11.1.4) \quad E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H^1 | \psi_n^0 \rangle = H_{nn}^1$$

2. במקרה זה ניקח מכפלה פנימית עם הווקטור $\langle \psi_k^0 |$, $k \neq n$

$$\langle \psi_k^0 | \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 E_k^0 \psi_k^0 \rangle + \langle \psi_k^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_k^0 | E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 \rangle + \langle \psi_k^0 | E_n^1 \psi_n^0 \rangle$$

קבועים נוציא מחוץ למכפלה:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 E_k^0 \underbrace{\langle \psi_k^0 | \psi_k^0 \rangle}_1 + \langle \psi_k^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \underbrace{\langle \psi_k^0 | \psi_k^0 \rangle}_1 + E_n^1 \underbrace{\langle \psi_k^0 | \psi_n^0 \rangle}_0$$

ולכן:

$$c_{kn}^1 E_k^0 + \langle \psi_k^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = E_n^0 c_{kn}^1$$

$$\Rightarrow H_{kn}^1 = \langle \psi_k^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = c_{kn}^1 (E_n^0 - E_k^0)$$

H_{kn}^1 - האיבר בשורה k ובטור n במטריצה של ההפרעה H^1 .

$$(10.1.5) \quad c_{kn}^1 = \frac{H_{kn}^1}{E_n^0 - E_k^0} \quad \text{ניתן לכתוב:}$$

נדרוש שהמקדם c_{kn}^1 יהיה קטן, כדי להוסיף משהו יותר קטן מהאיבר הקודם (אחרת אין

משמעות לרמות האנרגיה). לכן צריך לומר ש: $|H_{kn}^1| \ll |E_n^0 - E_k^0|$.

אם לא ידוע אחרת, מניחים שמקדם הפירוק החסר הוא $c_{nn}^1 = 0$.

נציב במשוואה (11.1.3) את הפירוק של ψ_n^1 ו- ψ_n^2 לפי בסיס ψ_n^0 :

$$H^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^2 \psi_k^0 + H^1 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^2 \psi_k^0 + E_n^1 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 + E_n^2 \psi_n^0$$

H^0 הוא אופרטור ליניארי, ויודעים איך הוא פועל על ψ_n^0 (הכפלה באנרגיה), לכן:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^2 E_k^0 \psi_k^0 + H^1 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 = E_n^0 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^2 \psi_k^0 + E_n^1 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 + E_n^2 \psi_n^0$$

נפתור את המשוואה, נבחין שוב בין שני מקרים:

1. כאשר $k = n$, במקרה זה, ניקח מכפלה פנימית עם הווקטור $\langle \psi_n^0 |$, נפעיל את

H^0 , קבועים נוציא מחוץ למכפלה, כמו קודם כל המכפלות הפנימיות בסכומים, חוץ מאשר עבור $k = n$, מתאפסות:

$$c_{nn}^2 E_n^0 + \left\langle \psi_n^0 \left| H^1 \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0 \right. \right\rangle = E_n^0 c_{nn}^2 + E_n^1 \underbrace{c_{nn}^1}_0 + E_n^2$$

$$E_n^2 = \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_k^0 \rangle \quad \text{מקבלים את הקירוב:}$$

כאשר k הוא אינדקס כלשהו (לא קשור לכך שקודם לקחנו $k = n$).

$$E_n^2 = \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_k^0 \rangle$$

עכשיו: אם $k = n$ אז $c_{nn}^1 = 0$, לכן הסכום מתקיים רק עבור $k \neq n$:

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} c_{kn}^1 \underbrace{\langle \psi_n^0 | H^1 \psi_k^0 \rangle}_{H_{nk}^1}$$

נציב את הביטוי שקבלנו ממשוואה (11.1.5) ל- c_{kn}^1 :

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{H_{kn}^1}{E_n^0 - E_k^0} H_{nk}^1$$

עבור אופרטור צמוד לעצמו מתקיים $a_{ij} = \bar{a}_{ij}$

$$(11.1.6) \quad E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{|H_{kn}^1|^2}{E_n^0 - E_k^0} \quad \text{לכן אפשר לכתוב:}$$

ההפרעה מסדר ראשון מושפעת רק מהתוחלת של ההפרעה, זאת אומרת ההשפעה של ההפרעה היא באופן נקודתי. ההפרעה מסדר שני מושפעת גם מהמרחק בין רמות האנרגיה. ככל שהפרש בין הרמות גדול יותר, ההפרעה מסדר שני פחות משמעותית.

2. ניקח אינדקס נוסף m , ונבצע מכפלה פנימית עם הווקטור $\langle \psi_m^0 |$, כאשר $m \neq n$.

$$\underbrace{c_{mn}^2 E_m^0}_{\text{עבור } k=m} + \langle \psi_m^0 | H^1 \sum c_{kn}^1 \psi_k^0 \rangle = E_n^0 c_{mn}^2 + E_n^1 c_{mn}^1$$

נעביר אגפים:

$$\sum_{k \neq n} c_{kn}^1 \langle \psi_m^0 | H^1 \psi_k^0 \rangle - E_n^1 c_{mn}^1 = c_{mn}^2 (E_n^0 - E_m^0)$$

נבודד את מקדמי הפירוק, נציב לפי משוואה (10.1.5) ונציב $E_n^1 = H_{nn}^1$:

$$(10.1.7) \quad c_{mn}^2 = \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} \left[\sum_{k \neq n} \frac{H_{kn}^1 H_{mk}^1}{E_n^0 - E_k^0} - \frac{H_{nn}^1 H_{mn}^1}{E_n^0 - E_m^0} \right]$$

גם במקרה זה נניח $c_{nn}^2 = 0$.

תרגיל:

מתנד אנ-הרמוני חד מימדי, בעל ההמילטוניאן של מתנד הרמוני חד מימדי עם הפרעה:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2}_{H^0} + \underbrace{k' x^4}_{H^1}$$

כאשר k' הוא קבוע.

נמצא את E_n^1 , לפי משוואה (11.1.4):

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H^1 \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | k' x^4 \psi_n^0 \rangle$$

נשתמש באופרטורי העלאה והורדה. על פי מה שמצאנו בפרק 5, מתקיים:

$$\hat{x}^4 = \frac{(a + a^*)^4}{(2\alpha)^2}$$

$$E_n^1 = \frac{k'}{4\alpha^2} \langle n | (a + a^*)(a + a^*)(a + a^*)(a + a^*) | n \rangle$$

לפי הגדרת וחישוב של אופרטורי העלאה והורדה בפרק 5:

$$E_n^1 = \frac{3k'}{4\alpha^2} ((n+1)^2 + n^2)$$

כאשר n מציין את רמת האנרגיה.

תופעת סטרוק

בהפעלה של שדה חשמלי על מטען במערכת של מתנד הרמוני חד מימדי, מתקבל ההמילטוניאן:

$$(10.1.8) \quad H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2}_{H^0} + \underbrace{Eqx}_{H^1}$$

נחשב את השינויים: E_n^1 , ψ_n^1 , E_n^2 באנרגיה ומצב היציב בגלל הפרעה עבור המצב ההתחלתי $|n\rangle$.

פתרון

$$E_n^0 = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) : |n\rangle$$

על מנת לחשב את השינויים בהשפעת הפרעה צריך לחשב את H_{kn}^1 .

$$H_{kn}^1 = \frac{Eq}{\sqrt{2\alpha}} \langle k | (a + a^*) | n \rangle$$

בגלל האורתוגונאליות של המצבים והגדרת אופרטורים a, a^* הפועלים $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ו- $a^*|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ (5.3.10), H_{kn}^1 שונה מאפס בשני מקרים בלבד:

$$(1) \quad E_n^0 - E_{k= n-1}^0 = \hbar\omega_0 \quad \text{ובמקרה זה} \quad H_{kn}^1 = \frac{Eq\sqrt{n}}{\sqrt{2\alpha}}$$

$$(2) \quad E_n^0 - E_{k= n+1}^0 = -\hbar\omega_0 \quad \text{ובמקרה זה} \quad H_{kn}^1 = \frac{Eq\sqrt{n+1}}{\sqrt{2\alpha}}$$

לכן:

$$E_n^1 = H_{nn}^1 = 0$$

כתוצאה מההפרעה אין תוספת מסדר ראשון ברמות האנרגיה.

נמצא את התוספת ומסדר שני של אנרגיה, על פי משוואה (10.1.5),

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{|H_{kn}^1|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

$$(10.1.9) \quad E_n^2 = \frac{E^2 q^2}{2\alpha} \left[\frac{n}{\hbar\omega_0} - \frac{n+1}{\hbar\omega_0} \right] = -\frac{E^2 q^2}{2\alpha\hbar\omega_0}$$

מכאן, קירוב מסדר שני של אנרגיה כתוצאה מההפרעה יהיה:

$$\tilde{E}_n = E_n^0 + E_n^2 = E_n^0 - \frac{E^2 q^2}{2\alpha\hbar\omega_0}$$

נמצא את התוספת מסדר ראשון של המצב על פי משוואה (10.1.5):

$$c_{kn}^1 = \frac{H_{kn}^1}{E_n^0 - E_k^0}, \quad \psi_n^1 = \sum_{k=0}^{\infty} c_{kn}^1 \psi_k^0$$

$$c_{kn}^1 = \frac{Eq\sqrt{n}}{\sqrt{2\alpha\hbar\omega_0}} \quad \text{עבור } k = n-1 \text{ מקבלים:}$$

$$c_{kn}^1 = -\frac{Eq\sqrt{n+1}}{\sqrt{2\alpha\hbar\omega_0}} \quad \text{ועבור } k = n+1 \text{ מקבלים:}$$

$$(10.1.10) \quad \psi_n^1 = \frac{Eq\sqrt{n}}{\sqrt{2\alpha\hbar\omega_0}} |n-1\rangle - \frac{Eq\sqrt{n+1}}{\sqrt{2\alpha\hbar\omega_0}} |n+1\rangle \quad \text{לכן}$$

נבדוק את התוצאות שקיבלנו על ידי פתרון משוואת שרדינגר למצבים יציבים בצורה אנליטית. ניתן לכתוב את ההמילטוניאן בצורה הבאה:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + Eqx = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k \left(x^2 + 2\frac{Eq}{k}x + \frac{E^2 q^2}{k^2} \right) - \frac{E^2 q^2}{2k}$$

אם נסמן $\tilde{x} = x + \frac{Eq}{k}$ אזי ההמילטוניאן יקבל צורה

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(\tilde{x})^2 - \frac{E^2 q^2}{2k} \quad \text{שזהו ההמילטוניאן של מתנד הרמוני במשתנה } \tilde{x}.$$

רמות אנרגיה יהיו $\tilde{E}_n = E_n^0 - \frac{E^2 q^2}{2k}$. היות ו- $\alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$, הקירוב השני

לאנרגיה שקיבלנו נותן תוצאה מדויקת במקרה זה.

ביחס למצב יציב המתאים לרמת אנרגיה \tilde{E}_n נקבל $\tilde{\psi}_n(x) = \psi_n^0(\tilde{x}) = \psi_n^0\left(x + \frac{Eq}{k}\right)$

תרגיל בית השווה קירוב ראשוני עם פיתוח של המצב לטור טיילור.

10.2 הפרעה במצבים יציבים - מקרה של ניוון

במקרה של ניוון מלא, יש מטריצה אלכסונית בעלת אותו E עבור המילטוניאן H^0 שלפני הפרעה:

$$H^0 = \begin{pmatrix} E & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & E \end{pmatrix}$$

כאשר: $H^0\psi = E\psi$.

לא משנה מה הבסיס עבור מרחב המצבים, ההמילטוניאן עבור H^0 לא משתנה, הצורה של H^0 בלתי תלויה בבסיס.

אנו מחפשים בסיס שבו הפרעה תהיה אלכסונית. בסיס כזה יהיה בנוי מוקטורים עצמיים של הפרעה. לכן, מוצאים קודם כל את λ המקיימים את המשוואה $\det(H^1 - \lambda I) = 0$ ולאחר מכן עבור כל λ_k מוצאים ווקטור ψ_k המקיים $H^1\psi_k = \lambda_k\psi_k$.

בבסיס של וקטורי ψ_k מתקיים:

$$H^1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

עבור בסיס זה יתקיים:

$$(11.2.1) \quad H = H^0 + H^1 = \begin{pmatrix} E + \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E + \lambda_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & E + \lambda_n \end{pmatrix}$$

במצב כזה הווקטור העצמי ψ_k מתאים לערך העצמי $E + \lambda_k$.

התברר שבמקרה של ניוון, בגלל היווצרות רמות נוספות, וכיוון שהבסיס הראשוני (הבסיס של מתרחב המצבים) יכול להיות כל בסיס, אנו צריכים ללכסן את המטריצה H^1 .

- הפרעה מסדר ראשון, למשל בבלוק הראשון מחברים: $E_0 + a_{11}, E_0 + a_{22} \dots$
- הפרעה מסדר שני לפי פתרון במקרה של אי ניוון.
- גם המצבים מסדר ראשון מושפעים מ- \tilde{B}, \tilde{C} , אבל הנוסחאות פועלות כי $E_j - E_k$, שונה מאפס ויש לביטויים משמעות.

דוגמא: פיצול קווי בלמר בשדה חשמלי

תופעת סטרק – פיצול קווי בלמר בשדה חשמלי.

ישנם 4 מצבים בסיסיים ברמה 2 של אטום מימן: $\psi_{200}, \psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211}$

מצבים אלו הם מצבים עצמיים של H^0 - ההמילטוניאן של אטום מימן.

לפי (9.4.9)

$$e_1 = \psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} = A_1 \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}},$$

$$e_2 = \psi_{21-1} = \sqrt{\frac{1}{64\pi a^3}} \frac{r}{a} \sin \theta e^{-i\varphi} e^{-\frac{r}{2a}} = A_2 \frac{r}{a} \sin \theta e^{-i\varphi} e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$e_3 = \psi_{210} = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^3}} \frac{r}{a} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a}} = A_3 \frac{r}{a} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$e_4 = \psi_{211} = -\sqrt{\frac{1}{64\pi a^3}} \frac{r}{a} \sin \theta e^{i\varphi} e^{-\frac{r}{2a}} = A_4 \frac{r}{a} \sin \theta e^{i\varphi} e^{-\frac{r}{2a}}$$

המילטוניאן של אטום מימן עם השפעה של שדה חשמלי בציר z:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{l^2}{2m^2}}_{H^0} + \underbrace{\frac{\gamma}{r} eEz}_{H^1}$$

המטריצה של ההמילטוניאן H^0 :

$$H^0 = \begin{pmatrix} E_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

לפי הניתוח שעשינו: $E_n = -\frac{\gamma^2 \mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_y}{n^2}$. עבור $n = 2$: $E_2 = -\frac{\gamma \mu}{8\hbar^2} = -\frac{R_y}{4}$

ניתן לכתוב את H^1 בקואורדינטות כדוריות: $H^1 = -eE \underbrace{r \cos \theta}_z$

נמצא הצגה מטרי ציונית של הפרעה H^1 לפי נוסחה: $H_{ij}^1 = -eE \langle e_i | r \cos \theta e_j \rangle$, כאשר מכפלה פנימית מתקבלת על יד אינטגרציה לכל מרחב בקואורדינאטות כדוריות לפי היעקוביאן $dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$.

$$H_{11}^1 = -eEA_1^2 \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right)^2 e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 0$$

$$H_{12}^1 = -eEA_1 A_2 \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi} d\varphi = 0$$

$$H_{13}^1 = -eEA_1 A_3 \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= -eEA_1 A_3 2\pi \frac{2}{3} a^4 \int_0^\infty (2 - \rho) \rho^4 e^{-\rho} d\rho = -eE \sqrt{\frac{1}{32\pi a^3}} \sqrt{\frac{1}{32\pi a^3}} \frac{4}{3} \pi a^4 (2 \cdot 4! - 5!) = 3eEa$$

$$H_{14}^1 = eEA_1 A_4 \int_0^\infty \left(2 - \frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{a}} r^3 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} d\varphi = 0$$

חישוב ערכים אחרים בצורה דומה, מתקבל האופרטור:

$$A = 3eEa_0 \quad \text{כאשר} \quad H^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

נמצא ערכים עצמיים:

$$\det(H^1 - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & A & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 0 \\ A & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & A \\ 0 & -\lambda & 0 \\ A & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 \begin{vmatrix} -\lambda & A \\ A & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 (\lambda^2 - A^2) = 0$$

לכן הערכים העצמיים:

$$\begin{aligned} \rightarrow \lambda_{1,2} &= 0 \\ \lambda_3 &= A \\ \lambda_4 &= -A \end{aligned}$$

לפי המטריצה של הפרעה אפשר לראות שהשורות השנייה והרביעית מתאפסות, לכן הערך העצמי 0 מתאים לוקטורים השני והרביעי:

$$\begin{aligned} x_0^1 &= |2,1,1\rangle \\ x_0^2 &= |2,1,-1\rangle \end{aligned}$$

נציב במטריצה $\lambda = A$, כדי למצוא את הווקטור המתאים לערך זה.

$$\begin{pmatrix} -A & 0 & A & 0 \\ 0 & -A & 0 & 0 \\ A & 0 & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

המשוואות המתקבלות:

$$\begin{cases} -Ax_1 + Ax_3 = 0 \\ -Ax_2 = 0 \\ -Ax_4 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_2 = x_4 = 0 \\ x_1 = x_3 \end{cases}$$

בשביל הנרמול ניקח $\frac{1}{\sqrt{2}}$:

$$x_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{0}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{0}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle)$$

$$x_{-A} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle) \text{ עבור } \lambda = -A, \text{ מתאים הווקטור:}$$

לאחר שמצאנו וקטורים עצמיים המתאימים למטריצה של ההפרעה, נעבור לבסיס חדש בוקטורים אלו:

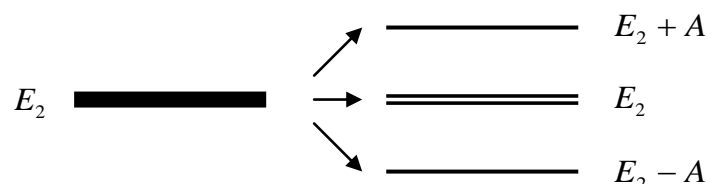
בבסיס זה המטריצה תהיה אלכסונית כאשר באלכסון נמצאים

הערכים העצמיים, שהם בעצם התוספת באנרגיה שמוסיפה ההפרעה:

$$\tilde{H}^1 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H^0 + H^1 \rightarrow \{E_2 + A, E_2 - A, E_2, E_2\}$$

ובאופן סכמטי:



כאשר מפעילים הפרעה כזו אז רמות האנרגיה נפרדות באופן יותר משמעותי, ואפשר לבחון את מבנה הניוון ותכונות נוספות.

אם נפעיל הפרעה מסוג אחר, ניתן יהיה לפצל את שתי הרמות המנוונות למשל באמצעות הוספת שדה מגנטי. ההפרעה שבצענו הייתה בכיוון ציר z , וזה גרם להפרעה על m , שהוא רכיב ה- z של התנע הזוויתי. ההפרעה השפיעה על $m=0$, ולא על $m=\pm 1$, משום שהם נמצאים בקצוות.

אם נבדוק עבור שתי רמות אנרגיה של אטום מימן:

לרמה E_1 יש מצב אחד $|1,0,0\rangle$.

$$H^0 = \begin{pmatrix} E_1 & & & & \\ \hline & E_2 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & E_2 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & E_2 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

כאשר נפעיל הפרעה נקבל ערכים נוספים מחוץ לבלוקים:

$$H^1 = \begin{pmatrix} & X & X & X & X \\ X & A & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & -A & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

כל בלוק במטריצה H^1 מוצאים בנפרד, ובסוף מוצאים את הרכיבים שמחוץ לבלוקים, לפי הבסיסים החדשים שקבלנו עבור מטריצות אלכסוניות של ההפרעה.

10.3 תורת ההפרעות תלויות בזמן

נפתור את משוואת שרדינגר התלויה בזמן כאשר ההמילטוניאן כולל הפרעה:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

כאשר $H = H^0 + U$

ידוע הפתרון של הבעיה הזו עבור H^0 .

$$(10.3.1) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(\lambda)\psi \quad \text{נגדיר } H(\lambda) = H^0 + \lambda U \text{ , ונפתור את המשוואה:}$$

$$\psi(t) = e^{-i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(0) \quad \text{הפתרון של המשוואה ללא הפרעה הוא:}$$

לכן אפשר לומר (נעביר אגפים) : $\psi(0) = e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t)$

$$(10.3.2) \quad \tilde{\psi}(t) = e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t) \quad \text{נגדיר :}$$

כאשר $\psi(t)$ הוא פתרון של משוואה (10.3.1).

נמצא את המשוואה הדיפרנציאלית (משוואת שרדינגר התלויה בזמן) עבור $\tilde{\psi}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t) \right)$$

נבצע נגזרת של מכפלה :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = i\hbar \frac{i}{\hbar} H^0 e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t) + e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} i\hbar \underbrace{\frac{\partial \psi(t)}{\partial t}}_{H(\lambda)\psi(t)}$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = -H^0 e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t) + e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} H(\lambda)\psi(t)$$

נציב לפי הגדרת $H(\lambda)$:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = -H^0 e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} \psi(t) + e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} H^0 \psi(t) + \lambda e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} U \psi(t)$$

אופרטור מתחלף עם הפונקציה שלו ולכן :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \lambda e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} U \psi(t)$$

נחזור למשוואה עם $\tilde{\psi}(t)$ לפי משוואה (11.3.2) :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \lambda e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} U e^{-i\frac{H^0}{\hbar}t} \tilde{\psi}(t)$$

$$(10.3.3) \quad \tilde{U} = e^{i\frac{H^0}{\hbar}t} U e^{-i\frac{H^0}{\hbar}t} \quad \text{נסמן :}$$

המשוואה הדיפרנציאלית עבור $\tilde{\psi}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \lambda \tilde{U} \tilde{\psi}(t)$$

את המשוואה עבור $\tilde{\psi}(t)$ יותר קל לפתור, וממנה נלמד לגבי $\psi(t)$.

$$\tilde{\psi}(t) = \sum_n \lambda^n \tilde{\psi}_n(t) \quad \text{נפרק את } \tilde{\psi}(t) \text{ לטור חזקות לפי } \lambda :$$

כאשר $\tilde{\psi}_n(t)$ הם מקדמי הפירוק.

נציב את טור החזקות במשוואה הדיפרנציאלית :

$$i\hbar \sum_n \lambda^n \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_n(t) = \lambda \tilde{U} \sum_n \lambda^n \tilde{\psi}_n(t)$$

$$i\hbar \sum_n \lambda^n \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_n(t) = \tilde{U} \sum_n \lambda^{n+1} \tilde{\psi}_n(t)$$

נשווה מקדמים לפי החזקות של λ :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_0(t)}{\partial t} = 0 \quad : \lambda^0 \text{ עבור}$$

$$(10.3.4) \quad \tilde{\psi}_0(t) = const = \psi_0(0) = \psi(0) \quad : \text{מכך נובע}$$

קבלנו תנאי התחלה של המערכת, שהוא קירוב מסדר אפס.

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_1(t)}{\partial t} = \tilde{U} \tilde{\psi}_0(t) \quad : \lambda^1 \text{ עבור}$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_1(t)}{\partial t} = \tilde{U} \psi(0) \text{ לפי משוואה (11.3.4) אפשר לומר}$$

נעביר אגפים וניקח אינטגרל :

$$\tilde{\psi}_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{U}(t_1) \psi(0) dt_1$$

\tilde{U} תלוי ב- t , אבל כדי לא להתבלבל נסמן t_1 את משתנה הדמה.

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_2(t)}{\partial t} = \tilde{U}(t) \tilde{\psi}_1(t) \quad : \lambda^2 \text{ עבור}$$

ניקח אינטגרל :

$$\tilde{\psi}_2(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{U}(t_2) \tilde{\psi}_1(t_2) dt_2$$

נציב את $\tilde{\psi}_1(t)$:

$$\tilde{\psi}_2(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^t \tilde{U}(t_2) \left(\int_0^{t_2} \tilde{U}(t_1) \psi(0) dt_1 \right) dt_2 = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^t \int_0^{t_2} \tilde{U}(t_2) \tilde{U}(t_1) \psi(0) dt_1 dt_2$$

אם נמשיך להשוות מקדמים נקבל נוסחא כללית עבור $\tilde{\psi}(t)$ שנקראת **נוסחת דיסון** :

$$(10.3.5) \quad \tilde{\psi}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{i\hbar} \right)^n \int_0^t \int_0^{t_n} \dots \int_0^{t_2} \tilde{U}(t_n) \tilde{U}(t_{n-1}) \dots \tilde{U}(t_1) \psi(0) dt_1 dt_2 \dots dt_n$$

בתוך הסכום יש λ^n , כי זה הטור חזקות של $\tilde{\psi}(t)$, ולא רק נוסחא למקדמי הפירוק $\tilde{\psi}_n(t)$.

$$\tilde{\psi}(t) = e^{\frac{\lambda U}{i\hbar} t} \psi(0) \text{ מקבלים, } \tilde{U} = const \text{ שבעבור}$$

11.4 הסתברות מעבר מרמה לרמה בהשפעה של הפרעה

נפתור את הבעיה הבאה:

נתונה מערכת קוונטית עם המילטוניאן H^0 . ψ_0 הוא וקטור עצמי של H^0 . בזמן $t=0$ המערכת הייתה במצב ψ_0 . הופעלה על המערכת הפרעה בעלת פוטנציאל U . מצא את ההסתברות למצוא את המערכת בזמן t במצב יציב ψ_E המתאים לאנרגיה E (שקול למציאת ההסתברות למצוא את המערכת עם ערך אנרגיה E בזמן t).

פתרון:

נסמן $|c_E(t)|^2$ - ההסתברות למצוא את המערכת בזמן t עם אנרגיה E .
הסתברות מעבר ממצב מסוים על ידי מכפלה פנימית:

$$|c_E(t)|^2 = |\langle \psi_E | \psi(t) \rangle|^2$$

נעבור ל- $\tilde{\psi}(t)$ לפי משוואה (11.3.2):

$$|c_E(t)|^2 = \left| \left\langle \psi_E \left| e^{-\frac{iH^0}{\hbar}t} \tilde{\psi}(t) \right. \right\rangle \right|^2$$

נעביר את האופרטור לצד השמאלי של המכפלה:

$$|c_E(t)|^2 = \left| \left\langle e^{\frac{iH^0}{\hbar}t} \psi_E \left| \tilde{\psi}(t) \right. \right\rangle \right|^2$$

ψ_E הוא וקטור עצמי של H^0 , אז אפשר להציב את הערך העצמי המתאים במקום האופרטור:

$$|c_E(t)|^2 = \left| \left\langle e^{\frac{iE}{\hbar}t} \psi_E \left| \tilde{\psi}(t) \right. \right\rangle \right|^2$$

אפשר להוציא את הקבוע מהמכפלה:

$$|c_E(t)|^2 = \underbrace{\left| e^{\frac{iE}{\hbar}t} \right|^2}_1 |\langle \psi_E | \tilde{\psi}(t) \rangle|^2$$

$$|c_E(t)|^2 = |\langle \psi_E | \tilde{\psi}(t) \rangle|^2 \quad \text{לכן:}$$

נעשה קירוב של $\tilde{\psi}(t)$ לפי שני האיברים הראשונים של טור החזקות:

$$\tilde{\psi}(t) = \tilde{\psi}_0(t) + \lambda \tilde{\psi}_1(t)$$

נציב לפי נוסחת דיסון, משוואה (11.3.5), ונציב $\lambda = 1$ (כי זה רק משתנה דמה ועושים קירוב):

$$|c_E(t)|^2 = \left| \left\langle \psi_E \left| \psi_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{U}(t_1) \psi_0 dt_1 \right. \right\rangle \right|^2$$

ψ_0 אורתוגונאלי ל- ψ_E (מצבים יציבים):

$$|c_E(t)|^2 = \left| \left\langle \psi_E \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{U}(t_1) \psi_0 dt_1 \right. \right\rangle \right|^2$$

ניתן להכניס את המכפלה הפנימית אל תוך האינטגרל:

$$|c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \psi_E | \tilde{U}(t_1) \psi_0 \rangle dt_1 \right|^2$$

נציב את \tilde{U} לפי משוואה (11.3.3):

$$|c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left\langle \psi_E \left| e^{\frac{iH^0 t_1}{\hbar}} U(t_1) e^{-\frac{iH^0 t_1}{\hbar}} \psi_0 \right. \right\rangle dt_1 \right|^2$$

נעביר את האופרטור הראשון לצד השמאלי של המכפלה:

$$|c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left\langle e^{-\frac{iH^0 t_1}{\hbar}} \psi_E \left| U(t_1) e^{\frac{iH^0 t_1}{\hbar}} \psi_0 \right. \right\rangle dt_1 \right|^2$$

האופרטורים פועלים על וקטורים עצמיים שלהם לכן נציב את הערך העצמי במקום האופרטור:

$$|c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left\langle e^{-\frac{iE t_1}{\hbar}} \psi_E \left| U(t_1) e^{\frac{iE_0 t_1}{\hbar}} \psi_0 \right. \right\rangle dt_1 \right|^2$$

נוציא את הקבועים (ביחס למצבים) מחוץ למכפלה (עם הצמדה לפי הצורך):

$$(10.4.1) \quad |c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{\frac{i(E-E_0)t_1}{\hbar}} \langle \psi_E | U(t_1) \psi_0 \rangle dt_1 \right|^2$$

זו הסתברות המעבר בין שתי רמות אנרגיה. ניתן לראות שההסתברות תלויה בהפרש האנרגיה בין הרמות, ובמכפלה הפנימית של שני המצבים.

דוגמה: הפרעה קבועה

עבור U קבוע (אופרטור שלא משתנה עם הזמן אבל לא בהכרח קבוע לפי המרחב):

$$U(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ U_0 & t > 0 \end{cases}$$

במקרה כזה הסתברות המעבר בין שני מצבים יציבים ψ_0 ו- ψ_E היא:

$$|c_E(t)|^2 = \frac{|\langle \psi_E | U_0 \psi_0 \rangle|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{\frac{i(E-E_0)t_1}{\hbar}} dt_1 \right|^2$$

המכפלה הפנימית לא תלויה בזמן לכן אפשר להוציא אותה מחוץ לאינטגרל.

נסמן $\omega = \frac{E - E_0}{\hbar}$ ונחשב את האינטגרל:

$$\left| \int_0^t e^{\frac{i(E-E_0)\tau}{\hbar}} d\tau \right|^2 = \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} d\tau \right|^2 = \left| \frac{e^{i\omega\tau}}{i\omega} \Big|_0^t \right|^2 = \frac{|e^{i\omega t} - 1|^2}{\omega^2}$$

היות

$$|e^{i\omega t} - 1|^2 = |\cos \omega t + i \sin \omega t - 1|^2 = (\cos \omega t - 1)^2 + \sin^2 \omega t = 2 - 2 \cos \omega t = 4 \sin^2 \frac{\omega t}{2}$$

מקבלים

$$(10.4.2) \quad \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} d\tau \right|^2 = \frac{|e^{i\omega t} - 1|^2}{\omega^2} = \frac{4 \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right)}{\omega^2}$$

לכן הסתברות המעבר:

$$(10.4.3) \quad |c_E(t)|^2 = \frac{4 \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right)}{\omega^2} \frac{|\langle \psi_E | U_0 \psi_0 \rangle|^2}{\hbar^2}$$

אם $\langle \psi_E | U_0 \psi_0 \rangle \neq 0$ בזמן המקיים $\omega t < 1$ הסתברות מעבר לרמת אנרגיה E תהיה גבוה.

זה מוביל לחוק האי-ודאות $\Delta \omega \Delta t \geq 1$ שזה שקול ל- $\Delta E \Delta t \geq \hbar$.

11.5 הפרעה מחזורית, כלל הזהב של Fermi

אם $U(t)$ משתנה בזמן עם מחזוריות של ω_0 , ז.א.

$$u(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} V(\mathbf{r}) \cos \omega_0 t & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

אם נסמן $\omega = \frac{E - E_0}{\hbar}$, אזי לפי (11.3.6) הסתברות המעבר בין שתי רמות אנרגיה E_0 ו- E

שווה:

$$(10.5.1) \quad |c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} \langle \psi_E | V(\mathbf{r}) \cos \omega_0 \tau \psi_0 \rangle d\tau \right|^2 = \frac{|V_{EE_0}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} \cos \omega_0 \tau d\tau \right|^2$$

$$= \frac{|V_{EE_0}|^2}{4\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} e^{i\omega_0\tau} d\tau + \int_0^t e^{i\omega\tau} e^{-i\omega_0\tau} d\tau \right|^2 = \frac{|V_{EE_0}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{e^{i(\omega-\omega_0)t} - 1}{\omega - \omega_0} + \frac{e^{i(\omega+\omega_0)t} - 1}{\omega + \omega_0} \right|^2$$

אם $V_{EE_0} \neq 0$ ו $\omega \approx \omega_0$ אז ההסתברות שונה מאפס באופן משמעותי.

וזה גורם להיפוך אוכלוסיה.

נחקור מקרה כאשר הפרעה גורמת רק לעליה באנרגיות. במקרה זה גורם אחרון במשוואה (10.5.1) קטן ביחס לקודמו. לכן בעזרת (10.4.1) נקבל

$$(10.5.2) \quad |c_E(t)|^2 = \frac{|V_{EE_0}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{e^{i(\omega-\omega_0)t} - 1}{\omega - \omega_0} \right|^2 = \frac{|V_{EE_0}|^2 \sin^2\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} t\right)}{\hbar^2 (\omega - \omega_0)^2}$$

בבעיות מעשיות בהשפעת ההפרעה נוצר רצף של מצבי מערכת בעלת צפיפות התפלגות $g(E)dE$ (לפי אנרגיה E של המצב). אנו מעוניינים למצוא קצב מעבר ממצב התחלתי E_0 לקטע $[E - \Delta, E + \Delta]$. הסתברות מעבר לקטע זה שווה:

$$P_E = \int_{E-\Delta}^{E+\Delta} g(E') |c_{E'}(t)|^2 dE' = \int_{E-\Delta}^{E+\Delta} g(E') \frac{|V_{E'E_0}|^2 \sin^2\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} t\right)}{\hbar^2 (\omega - \omega_0)^2} dE'$$

נציב: $dE' = \frac{2\hbar}{t} d\beta$ אזי, $\beta = \frac{\omega - \omega_0}{2} t = \frac{E' - E_0 - \omega_0 \hbar}{2\hbar} t$

$$P_E = \frac{t}{2\hbar} \int_{-\delta}^{\delta} g(E') \frac{|V_{E'E_0}|^2 \sin^2 \beta}{\beta^2} d\beta$$

בהנחה שפונקציות $g(E)$ ו- $|V_{E'E_0}|$ לא משתנות משמעותי בקטע הנייל ולכן ניתן להוציאם מחוץ לאינטגרל, נקבל

$$P_E = \frac{t}{2\hbar} g(E) |V_{EE_0}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} d\beta = \frac{\pi}{2\hbar} g(E) |V_{EE_0}|^2 t$$

שזה מגדיר קצב העברה לרמה E על ידי נוסחה

$$\omega_E = \frac{\pi}{2\hbar} g(E) |V_{EE_0}|^2, \quad (10.5.3)$$

הנקראת כלל הזהב של Fermi.

תיאורית הקוונטים

דף נוסחאות

קרינת גוף שחור: משואת פלאנק - $E = h\nu = \hbar\omega$

עוצמת האור של גוף שחור בתווך התדרים $d\omega$ -

$$I(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2 \left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)}$$

מומנט מגנטי של אלקטרון: הכוח ששדה מגנטי מפעיל על אטום $\mathbf{F} = -\nabla u = \nabla(\vec{\mu} \circ \mathbf{B})$

$$|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, |z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, |y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, S_x = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

קיטוב פוטון: וקטור ג'ינס $J = \begin{pmatrix} A_x e^{i\delta_x} \\ A_z e^{i\delta_z} \end{pmatrix}$

קיטוב בכיוון z $\varphi_z : A_x = 0 \quad \varphi_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

קיטוב בכיוון x $\varphi_x : A_z = 0 \quad \varphi_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

קיטוב מישורי בכיוון זווית θ עם ציר x- $|\varphi_\theta\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$

מצב קיטוב שמאלי -- $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ מצב קיטוב ימני -- $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

הצגה לפי מיקום ותנע

$|\psi(x)|^2$ היא צפיפות התפלגות המיקום. $\tilde{\psi}(k) = F\psi(x)$ (F-טרנספורם פוריה)

$$f(k) = |\tilde{\psi}(k)|^2$$

$$\hat{x}\psi(\mathbf{r}) = x\psi(\mathbf{r}), \quad \hat{y}\psi(\mathbf{r}) = y\psi(\mathbf{r}), \quad \hat{z}\psi(\mathbf{r}) = z\psi(\mathbf{r}),$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

הסתברות: שבמידה נקבל הערך α היא $\frac{|P\psi|^2}{|\psi|^2}$

תוחלת של משתנה דינאמי: $\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle}{\|\psi\|^2}$

שונות של משתנה דינאמי: $\Delta A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

עיקרון האי-ודאות המוכלל: $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$

עקרון אי הודאות של הייזנברג: $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar$

דינמיקה קוונטית:

משוואת שרדינגר למצבים יציבים: $\psi(t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t} \psi(0), \quad \hat{H}\psi = E\psi$

משוואת שרדינגר לחלקיק חופשי: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi$

משוואת שרדינגר בשדה משמר: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, y, z)\psi = E\psi$

משוואת שרדינגר התלויה בזמן: $\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$

ומשוואת שרדינגר תלויה בזמן בשדה משמר: $\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$

משוואת שרדינגר עבור מספר חלקיקים בשדה משמר:

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_k) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \dots + \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k)$$

אופרטור התפתחות בזמן $U(t)$: $U(t)\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r}, t)$

$$W^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \vdots \\ \psi_j^* \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \\ \langle \psi_2 | \\ \vdots \\ \langle \psi_j | \\ \vdots \end{pmatrix} \quad W = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j, \dots) = (|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_j\rangle, \dots)$$

$$U(t) = W \operatorname{diag} \left(e^{\frac{E_j t}{i\hbar}} \right) W^* = e^{\frac{t}{i\hbar} \hat{H}}$$

שינוי בזמן של התוחלת של משתנה דינאמי : $\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$

משפטי ארנפסט : $\frac{d^2 \langle r \rangle}{dt^2} = \langle F \rangle$, $\frac{d \langle p \rangle}{dt} = \langle F \rangle = -\nabla \langle V \rangle$, $\frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$

הצגת הייזנברג : $A^{(H)} = e^{-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} \hat{A} e^{\frac{\hat{H}t}{i\hbar}} = U^*(t) \hat{A} U(t)$

משוואת הייזנברג : $i\hbar \frac{\partial A^{(H)}(t)}{\partial t} = [A^{(H)}(t), \hat{H}]$

גשת פיינמן לתורת הקוונטים

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \quad , \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \iiint K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) \psi(\mathbf{r}_0, t_0) d\mathbf{r}_0$$

$$S(x(\tau)) = \int_{t_0}^t L(\dot{x}(\tau), x(\tau)) d\tau \quad , \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\dot{x}, x) - \frac{\partial L}{\partial x}(\dot{x}, x) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{b}} dx = \sqrt{\pi b} \quad , \quad b \in \mathbb{C} \quad , \quad \operatorname{Re} b \geq 0 \quad , \quad K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \int_{\gamma \in \Gamma} e^{i \frac{s}{\hbar}} D\gamma$$

פוטנציאלים קבועים בקטעים

אופרטור זרימה: $J = \frac{\hbar}{2im} [(\nabla \psi) \bar{\psi} - (\nabla \bar{\psi}) \psi]$

כאשר $J = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$, $\psi(x,t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$

בור אינסופי: $E_n = \left(\frac{\pi n}{2a}\right)^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m}$

$\psi_{2n} = \sin\left(\frac{\pi 2n}{2a} x\right)$ $\psi_{2n+1} = \cos\left(\frac{\pi (2n+1)}{2a} x\right)$

מדרגת פוטנציאל: $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ $T = \frac{4k_2/k_1}{(1+k_2/k_1)^2}$ $R = \left|\frac{1-k_2/k_1}{1+k_2/k_1}\right|^2$

מחסום פוטנציאל: $\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(E-V)} \sin^2(2k_2 a)$, $V < E$

$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(V-E)} \sinh^2(2|k_2|a)$, $V > E$

בור מרובע סופי: $\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V^2}{E(E+|V|)} \sin^2(2k_2 a)$

מתנד הרמוני קוונטי:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E \psi$$

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\sqrt{\alpha} x) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_0 \hbar, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

$$, A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \quad , H_m(x) = (-1)^m e^{x^2} \frac{d^m}{dx^m} (e^{-x^2}) ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = \delta_m^n 2^n n! \sqrt{\pi}$$

$$. xH_m(x) = mH_{m-1}(x) + \frac{1}{2}H_{m+1}(x) \quad , H_m'(x) = 2mH_{m-1}(x)$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) : \text{מתנד הרמוני תלת-מימדי} :$$

$$\begin{aligned} \psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) &= \\ &= \sqrt[4]{\frac{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}{\pi^3}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3} (n_1)! (n_2)! (n_3)!}} H_{n_1}(\sqrt{\alpha_1} x) H_{n_2}(\sqrt{\alpha_2} y) H_{n_3}(\sqrt{\alpha_3} z) e^{-\frac{(\alpha_1 x^2 + \alpha_2 y^2 + \alpha_3 z^2)}{2}} \end{aligned}$$

הצגה מטריציונית של אופרטורי מיקום ותנע בבסיס של מתנד הרמוני

$$\hat{p} = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{4} & \dots \end{bmatrix} \quad \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

ניתוח אלגברי של מתנד הרמוני :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2} (a^* a + a a^*) \quad , [a, a^*] = I \quad , \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} (a + a^*) \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} (a - a^*)$$

$$a^* |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad , \quad E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

קירוב סמי – קלאסי בשיטת WKB :

$$\begin{aligned}
 & , \quad \psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}p(x)} \quad , \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \\
 & , \quad i\hbar g'(x) - g^2(x) = 2m(V(x) - E) \quad , \quad i\hbar p''(x) - (p'(x))^2 = 2m(V(x) - E) \\
 & , \quad k(x) = \frac{g_0(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar} \quad , \quad g_0(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \\
 & , \quad \frac{\hbar m|V'(x)|}{2g_0^3(x)} \ll 1 \quad , \quad \psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|k(x)|}} e^{i\int k(x)dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|k(x)|}} e^{-i\int k(x)dx} \\
 & \quad \int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \frac{\hbar}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad \int_a^b k(x) dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned}$$

סימטריה במכאניקה קוונטית :

חבורה חד פרמטרית: $Q_{s_1+s_2} = Q_{s_1} Q_{s_2}$, $Q_0 = I$, יוצר פעולה $G = i\hbar \left. \frac{d(Q_s)}{ds} \right|_{s=0}$, $Q_s = e^{\frac{s}{i\hbar}G}$

חוקי שימור: $G \leftarrow [H, Q_s] = 0$, אופרטור חילוף: $P|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle$, $k = \pm 1$.

תנע זוויתי :

$$\begin{aligned}
 & \hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad , \quad \hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad , \quad \hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \\
 & , \quad [J_1, J_2] = i\hbar J_3 \quad , \quad [J_2, J_3] = i\hbar J_1 \quad , \quad [J_3, J_1] = i\hbar J_2 \quad \text{תנע זוויתי מוכלל} \\
 & J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2 \quad , \quad [J^2, J_3] = 0 \quad , \quad J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \\
 & \quad , \quad J^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle \quad , \quad J_3|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle \\
 & \quad , \quad k_1 = \sqrt{\lambda - \mu^2 - \hbar\mu} \quad , \quad J_+|\lambda, \mu\rangle = k_1|\lambda, \mu + \hbar\rangle \\
 & \quad k_2 = \sqrt{\lambda - \mu^2 + \hbar\mu} \quad , \quad J_-|\lambda, \mu\rangle = k_2|\lambda, \mu - \hbar\rangle \\
 & \mu = m\hbar \quad , \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad , \quad \lambda = j(j+1)\hbar^2 \quad , \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, 1\frac{1}{2}, 2, \dots
 \end{aligned}$$

$$, J_3|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle, \quad J^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle$$

$$J_-|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\hbar|j,m-1\rangle, \quad J_+|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar|j,m+1\rangle$$

התנע הזוויתי של זוג חלקיקים

$$, \quad G(s \otimes t) = G(s) \otimes t + s \otimes G(t), \quad T_a(s \otimes t) = T_a(s) \otimes T_a(t)$$

$$J_k(s \otimes t) = J_k(s) \otimes t + s \otimes J_k(t)$$

תנע זוויתי מסלולי

$$\omega_p = B \frac{\mu}{l}, \quad \mu = g \frac{q}{2m} l$$

$$\hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad \hat{l}_\pm = \hbar e^{i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\psi_{m,l}(r, \theta, \varphi) = R(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad P_l^m(\tau) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l \cdot l!} (1-\tau^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\tau^{l+m}} (1-\tau^2)^l$$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(\tau) P_n^m(\tau) dx = \delta_n^l \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad \left((1-\tau^2) P_l^m(\tau) \right)' + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-\tau^2} \right) P_l^m(\tau) = 0$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

מבנה אטום מימן

$$\begin{cases} \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p \\ \mathbf{R} = \frac{m_p \mathbf{r}_p + m_e \mathbf{r}_e}{m_p + m_e}, \quad r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{cases}$$

$$, \Psi(\mathbf{R}) = A e^{i(k_1 R_1 + k_2 R_2 + k_3 R_3)}, \quad \frac{\hat{P}^2}{2M} \psi(\mathbf{R}, r) + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} \psi(\mathbf{R}, r) - \frac{\gamma}{r} \psi(\mathbf{R}, r) = E \psi(\mathbf{R}, r)$$

$$, \tilde{\psi}(r, \varphi, \theta) = R(r)Y_l^m(\varphi, \theta) \quad , -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\tilde{\psi}(r)) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{l}^2 \tilde{\psi}(r) + V(r)\tilde{\psi}(r) = E\tilde{\psi}(r)$$

$$(rR(r))'' - \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(-\frac{\gamma}{r} - E \right) \right) rR(r) = 0$$

$$u(\rho)'' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4} \right) u(\rho) = 0 \quad , \lambda = \frac{\mu\gamma}{\hbar^2 k} \quad , \rho = 2kr \quad , k^2 = \frac{2\mu|E|}{\hbar^2} \quad , u(r) = rR(r)$$

$$, \rho^2 G(\rho)'' - \rho^2 G(\rho)' - l(l+1)G(\rho) + \lambda\rho G(\rho) \quad , u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} G(\rho)$$

$$k = \frac{1}{na} \quad , a = \frac{\hbar^2}{\gamma\mu} = 5.3 \times 10^{-9} \text{ cm} \quad , R_y = 13.61 \text{ eV} \quad , E_n = -\frac{\gamma^2 \mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{R_y}{n^2}$$

$$\int_0^\infty L_p^q L_p^q \rho^q e^{-\rho} d\rho = \frac{(p!)^3}{(p-q)!} \delta_{pp'} \quad , \quad L_p^q(x) = (-1)^q \frac{d^q}{dx^q} L_p(x) \quad , L_p(x) = e^x \frac{d^p}{dx^p} (x^p e^{-x})$$

$$\int_0^\infty \rho^n e^{-\rho} d\rho = n! \quad \rho L_p^q(\rho) = (2p-q+1)L_p^q(\rho) - \frac{p-q+1}{p+1} L_{p+1}^q(\rho) - p^2 L_{p-1}^q(\rho)$$

$$, R_{nl}(r) = A_{nl} (2k)^{3/2} \left(\frac{2r}{na} \right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{l+n}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) = A_{nl} \left(\frac{2}{na} \right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na} \right)^l e^{-\frac{r}{na}} L_{l+n}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) \quad ,$$

$$\psi_{nlm}(r, \varphi, \theta) = R_{nl}(r)Y_l^m(\varphi, \theta) \quad , \quad A_{nl} = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}}$$

יקוביאן בקאוארדינטות כדוריות $dxdydz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$

הפרעה במצבים יציבים - מקרה של אי ניוון

$$, c_{kn}^1 = \frac{H_{kn}^1}{E_n^0 - E_k^0} \quad , \quad E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H^1 | \psi_n^0 \rangle = H_{nn}^1 \quad , \quad H = H^0 + H^1$$

$$c_{mm}^2 = \frac{1}{E_n^0 - E_m^0} \left[\sum_{k \neq n} \frac{H_{kn}^1 H_{mk}^1}{E_n^0 - E_k^0} - \frac{H_{nn}^1 H_{mn}^1}{E_n^0 - E_m^0} \right] \quad , \quad E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{|H_{kn}^1|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

הפרעה במצבים יציבים - מקרה של ניוון

$$E = E^0 + \lambda_k, \quad H^1 \psi_k = \lambda_k \psi_k, \quad \det(H^1 - \lambda I) = 0.$$

תורת ההפרעות תלויות בזמן

$$, \tilde{U} = e^{\frac{iH^0}{\hbar}t} U e^{-\frac{iH^0}{\hbar}t}, \quad \tilde{\psi}(t) = e^{\frac{iH^0}{\hbar}t} \psi(t), \quad H = H^0 + U, \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

$$, \tilde{\psi}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{i\hbar} \right)^n \int_0^t \int_0^{t_n} \dots \int_0^{t_2} \tilde{U}(t_n) \tilde{U}(t_{n-1}) \dots \tilde{U}(t_1) \psi(0) dt_1 dt_2 \dots dt_n$$

$$, |c_E(t)|^2 = \frac{4 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\omega^2} \frac{|\langle \psi_E | U_0 \psi_0 \rangle|^2}{\hbar^2}, \quad |c_E(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{\frac{i(E-E_0)t_1}{\hbar}} \langle \psi_E | U(t_1) \psi_0 \rangle dt_1 \right|^2$$

$$w = \frac{\pi}{2\hbar} g(E) |V_{EE_0}|^2$$