2001

הנחות היסוד של תורת הקוונטים

הנחה I - אופרטורים וגדלים מדידים

* גודל מדיד של מערכת (= חלקיק) — מיקום, תנע, תנ"ז, אנרגיה
* אופרטור – "פעולה" על פונקציה.

סימון: $\hat{A}$ - אופרטור. דוגמא: $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}, 5^x, \int_{-1}^{2} dx \ldots$

<u>הנחה:</u> לכל גודל מדיד (A) קיים אופרטור $(\hat{A})$ ופונקצית גל (φ) כך ש:

$$\hat{A}\varphi = a\varphi$$

"ערך עצמי"

"פונקציה עצמית"

φ - פונקציה עצמית של האופרטור $\hat{A}$

a - ערך עצמי (= הערך הנמדד לגודל $\hat{A}$ ")

אופרטור התנע $\hat{p}$

$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ או במימד אחד: $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$

עבור איזו מערכת מדידת התנע תיתן תמיד את אותה התוצאה? ומהי התוצאה?

<u>הנעלמים:</u> $\varphi(x)$ - ? p_x - ?

<u>המשוואה:</u>

$$-i\hbar\frac{d\varphi}{dx} = p_x\varphi$$

$$\rightarrow \frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dx} = \frac{ip_x}{\hbar}$$

$$\varphi = Ae^{\frac{ip_x}{\hbar}x}$$ (בהנחה שאין תנאי שפה - חלקיק חופשי)

סימון: $k \equiv \frac{p_x}{\hbar}$

$\varphi_k = Ae^{ikx}$ - הפונקציות העצמיות.

$p_k = \hbar k$ - הערכים העצמיים.

<u>תשובה:</u>

פונקציה מחזורית, חוזרת על עצמה כל

$$\Delta x = \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

$$p = \hbar\cdot\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \leftarrow$$

אופרטור האנרגיה $\hat{H}$

ניתן באמצעות ההמילטוניאן - H

H - ביטוי לאנרגיה הכללית של מערכת כפונקציה של $\vec{x}$ ו $\vec{p}$.

לדוגמא:

עבור חלקיק בעל מסה m בפוטנציאל $V(\vec{r})$

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

משוואת הערכים העצמיים:

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = E\cdot\varphi(\vec{r})$$

- משוואת שרדינגר הב"ת בזמן.

נסתכל עבור המקרה הפשוט ביותר - חלקיק חופשי, חד מימדי.

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

המשוואה:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\cdot\varphi$$

נסמן $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\longrightarrow \quad \varphi'' + k^2\varphi = 0$$

הפתרון:

$$\varphi_k = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

עבור $B=0$ הפונקציות העצמיות של $\hat{H}$ ו $\hat{p}$ זהות.

$\hbar k = p$ ולכן $E_k = \frac{p^2}{2m}$ כמו במכניקה קלאסית.

באם כל פונקציה עצמית של $\hat{P}$ של חלקיק חופשי היא תמיד גם פונקציה עצמית של $\hat{H}$?

<u>הוכחה "אופרטורית"</u> (ללא שימוש בפונקציה מסוימת)

* נניח שמתקיים: $\hat{P}\varphi = \hbar k\cdot\varphi$
(כלומר φ היא פונקציה עצמית כשהיא של $\hat{P}$)

* נראה ש φ היא בהכרח גם פונקציה עצמית של $\hat{H}$

* עבור חלקיק חופשי: $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}$

* נפעיל את $\hat{H}$ על φ ונקבל:

$$\hat{H}\varphi = \frac{\hat{P}}{2m}(\hat{P}\varphi) = \frac{\hat{P}}{2m}(\hbar k\cdot\varphi) = \frac{\hbar k}{2m}\cdot\hat{P}\varphi = \frac{(\hbar k)^2}{2m}\cdot\varphi$$

* $\leftarrow$ φ היא גם פונקציה עצמית של $\hat{H}$
עם ערך עצמי $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$.

<u>מה הסיכוי למצוא את החלקיק בין x ל $x+dx$</u>?

$$P(x) = |\varphi(x)|^2 = \varphi^*\varphi$$

$$P(x) = Ae^{-ikx}\cdot Ae^{ikx} = A^2 - const.$$

מה הקשר לעקרון אי הודאות?

$$\Delta P\Delta x \geq \hbar/2$$

$\Delta P = 0 \leftarrow \Delta x = \infty$.

הנחה II - השפעת המדידה

נתונה מערכת עם פונקציית גל כלשהי Ψ,
מדידה של האופרטור A תתן ערך עצמי כלשהו a,
בתוצאה מהמדידה המערכת תעבור לפונקציה עצמית φ_a

מה הערך שנקבל אם נמדוד את A שוב באופן מיידי? $(\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a)$

דוגמא

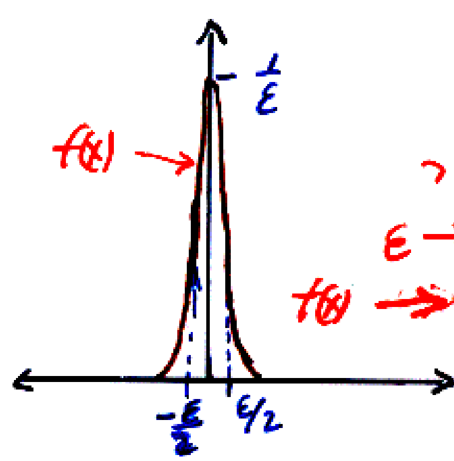
נתון חלקיק חופשי, מדדנו את מיקומו וקיבלנו תוצאה x', מהי פונקציית הגל של החלקיק לאחר המדידה? (חד מימדי)

אופרטור מדידת המיקום הנו: $\hat{x} = x$

$$x\varphi(x) = x'\varphi(x) \longrightarrow \varphi(x) = \delta(x-x')$$

מהי פונקציית $\delta(x)$?

$$f(x) = \begin{cases} \infty & x=0 \\ 0 & x\neq 0 \end{cases}$$



כאשר
$\varepsilon \rightarrow 0$
$f(x) \rightarrow \delta(x)$

ובנוסף מתקיימים התנאים הבאים:

1. פונקציה מנורמלת $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x')dx = 1$

2. $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x')dx = f(x')$

← לאחר המדידה החלקיק נמצא בנקודה אחת בלבד (בהנחה אידאלית של שגיאות מדידה אפס)

הנחה III - פונקצית המצב וערכי תצפית

כיצד המידע על מצב מערכת נתונה ברגע נתון נמצא ?

$\Psi(x,t)$ - פונקצית הגל או פונקצית המצב.

הערך הממוצע של גודל A נתון ע"י:

$$\langle A\rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv$$ - הממוצע של A (התוחלת של A)

ממוצע על מה?

תשובה: על N מערכות זהות

$$\langle A\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A_i$$ - המדידה הנסיונית

על מנת ש $\langle A\rangle$ יהיה מוגדר היטב. $N \gg 1 \leftarrow$

$$\langle A\rangle = \sum_i A_i P(A_i)$$ - עבור A_i בדידים

ההסתברות לקבל את A_i

$$\langle A\rangle = \int A \cdot P(A)\, dA$$ - עבור A כמשתנה רציף.

דוגמא

נתון:

$$\Psi(x,t) = B e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

מהו B ?

יתקבל מהתנאי:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$$

עבור החישוב נציב: $\eta = \frac{x-x_0}{a}$

ונקבל:

$$\int \psi^* \psi \, dx = B^2 a \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2/2} d\eta = \sqrt{2\pi}\, B^2 a = 1$$

מהו ?$\langle x\rangle$

$(\hat{x}=x)$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}x\,\psi\,dx$$

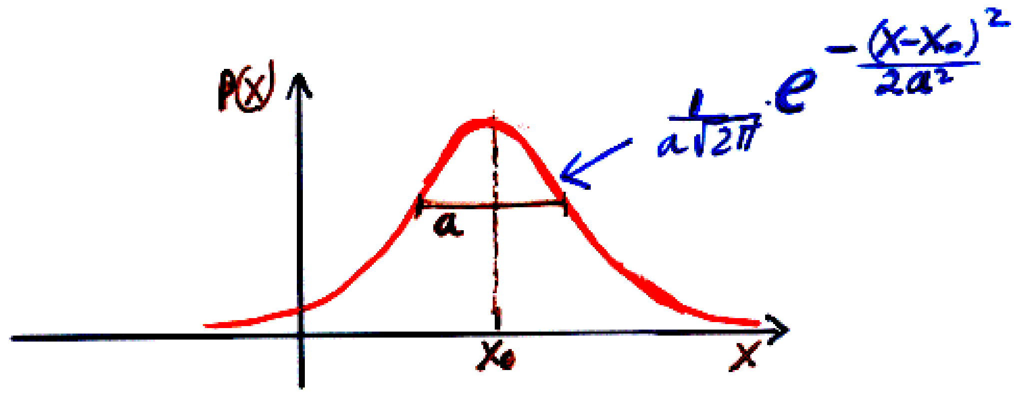
נציב $\eta_0=\frac{x_0}{a}$

$$\rightarrow x = a(\eta+\eta_0)$$

$$\langle x\rangle = B^2a^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\eta^2}{2}}(\eta+\eta_0)\,d\eta = a\eta_0\underbrace{B^2a\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\eta^2}{2}}\,d\eta}_{=1}$$

מתנאי הנירמול

$$\rightarrow \underline{\langle x\rangle = a\eta_0 = x_0}$$



ניתן להראות בנוסף ש $(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = a^2$

מהו ?$\langle p\rangle$

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\hat{p}\,\psi\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\,dx$$

$$= B^2a\int_{-\infty}^{\infty}\left(p_0+\frac{i\hbar}{2a}\cdot\eta\right)e^{-\frac{\eta^2}{2}}\,d\eta = p_0\underbrace{B^2a\int e^{-\frac{\eta^2}{2}}\,d\eta}_{=1}$$

$$\rightarrow \underline{\langle p\rangle = p_0}$$

הנחה IV - ההתפתחות בזמן

ההתפתחות בזמן של פונקצית המצב נתונה ע"י:

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

המילטוניאן

– משוואת שרדינגר התלויה בזמן

אם $\hat H = \hat H(\vec r)$ - האנרגיה הכללית של המערכת לא תלויה בזמן.

אז ניתן למצוא את ψ ע"י הפרדת משתנים

נניח: $\psi(\vec r,t) = \varphi(\vec r)\cdot T(t)$

$T_t = \frac{\partial T}{\partial t}$

ונקבל: $i\hbar \frac{T_t}{T} = \frac{\hat H \varphi}{\varphi}$

פונקציה של t בלבד. פונקציה של $\vec r$ בלבד.

← כל צד = קבוע (נסמן ב E)

מאגף ימין נקבל: $\hat H\varphi(\vec r) = E\cdot\varphi(\vec r)$ $\leftarrow$ $\frac{\hat H\varphi}{\varphi} = E$

– משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן.

מאגף שמאל נקבל: $\frac{T_t}{T} = \frac{E}{i\hbar} \rightarrow T(t) = Ae^{-\frac{iE}{\hbar}t}$

והפתרון המלא:

$$\psi_n(\vec r,t) = A\,\varphi_n(\vec r)\,e^{-i\omega_n t}$$

$\omega_n \equiv \frac{E_n}{\hbar}$

הפונקציות העצמיות (מקיימות $\hat H\varphi_n = E_n\cdot\varphi_n$)

דוגמא:

עבור חלקיק חופשי

$$\hat H \varphi_k = E_k \cdot \varphi_k$$

$$\varphi_k = A e^{ikx} \qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\to \psi(x,t) = A e^{ikx} \cdot e^{-i\omega t} \qquad \hbar\omega = E_k$$

פונקציה כזו היא גל הנע בכיוון $+x$ במהירות:

מהירות הפזה - $v_{phase} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v_{cl}}{2}$ ← המהירות הקלאסית

עבור חלקיק אמיתי הפתרון הנו חבורת גלים ולכן:

מהירות החבורה - $v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial\hbar\omega}{\partial\hbar k} = \frac{\partial\frac{p^2}{2m}}{\partial p} = \frac{p}{m} = v_{cl}$

פתרון בעיית תנאי התחלה

נתונה: $\psi(\vec r,0)$ מהו $\psi(\vec r,t)$?

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t) + \frac{i\hat H}{\hbar}\psi(\vec r,t) = 0$$

$$\to \frac{\partial}{\partial t}\left[e^{\frac{i\hat H t}{\hbar}}\psi(\vec r,t)\right] = 0$$

$$\to e^{\frac{i\hat H t}{\hbar}}\psi(\vec r,t) = C = \psi(\vec r,0)$$

$$\to \underline{\psi(\vec r,t) = e^{-\frac{i\hat H t}{\hbar}}\psi(\vec r,0)}$$

או $\underline{\psi(\vec r,t) = \hat U \psi(\vec r,0)}$

כאשר $\hat U = e^{-\frac{i\hat H t}{\hbar}} = 1 - \frac{i\hat H t}{\hbar} + \left(\frac{-i\hat H t}{\hbar}\right)^2\frac{1}{2!} + \dots$

על מנת "להבציע" את $\hat U$ על פונקציה צריך להשתמש בפיתוח של $\hat U$ לטור טיילור.

דוגמא:

פונ' עצמית של $\hat{H}(r)$

עבור : $\psi_n(\vec{r},0)=\varphi_n(\vec{r})$

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

לכן :

$$U\varphi_n=\left(1-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}-\frac{\hat{H}^2t^2}{2\hbar^2}+\dots\right)\varphi_n$$
$$=\left(1-\frac{iE_nt}{\hbar}-\frac{E_n^2t^2}{2\hbar^2}+\dots\right)\varphi_n$$
$$=e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\cdot\varphi_n$$

כלומר :
$$\psi(\vec{r},t)=U\cdot\varphi_n=e^{-i\omega_nt}\cdot\varphi_n$$

כמו בפיתוח ע"י הפרדת משתנים.

$\hat{H}$ - נותן את הנגזרת בזמן של ψ

← כיצד תראה ψ ב dt מאוחר יותר

$\hat{U}$ - טור טיילור של $\hat{H}$, מהפעלה על ψ

← כיצד תראה ψ ב Δt כלשהו מאוחר יותר.

כיצד משתנים ערכי התצפית בזמן? $(\langle A(t)\rangle=?)$

$$\langle A\rangle_{t=0}=\int\psi^*(r,0)\hat{A}\psi(r,0)dr$$

נפתור עבור המצב הפרטי - $\psi(r,0)=\varphi_n(r)$ - פונ' הגל של המערכת

מצב עצמי של $\hat{H}(r)$

במצב זה נקבל : $\langle A\rangle_{t=0}=\int\varphi_n^*\hat{A}\varphi_n\,dr$

מכיוון ש: $\psi(r,t)=\varphi_n(r)e^{-i\omega_nt}$

בהנחה ש $\hat{A}$ לא תלוי ב t.

נקבל :
$$\langle A\rangle_t=\int\varphi_n^*e^{i\omega_nt}\hat{A}\varphi_ne^{-i\omega t}dr$$
$$=\int\varphi_n^*\hat{A}\varphi_n\,dr\longrightarrow\underline{\langle A\rangle_t=\langle A\rangle_{t=0}}$$

ערך התצפית של <u>כל משתנה</u> לא תלוי בזמן אם המערכת במצב עצמי של ההמילטוניאן (= מצב סטציונרי)