עקרון הסופרפוזיציה

משוואת שרדינגר היא לינארית (אין ψ^2, $\sqrt{\psi}$ ....)

← כל צירוף לינארי של פתרונות הוא פתרון.

אם הפונקציות העצמיות של אופרטור ממשי פורשות את מרחב הילברט ← כל פונקציית גל במרחב הילברט = סכום לינארי של פונקציות עצמיות.

$$\psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} b_n(t)\varphi_n(x)$$

בהנחה של C_0 בדיד?

מקדמים (יכולים להשתנות בזמן)

פונקציות עצמיות

בהנחה ש $\hat{H}=\hat{H}(x)$ ב"ת הזמן.

כיצד נמצא את b_n ?

$$b_n=\langle\varphi_n|\psi\rangle$$

כאשר φ_n הן אורתונורמליות ($\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle=\delta_{n,m}$)

מה המשמעות הפיזיקלית של b_n ?

עבור אופרטור כלשהו $\hat{F}$ $\quad \hat{F}\varphi_n=f_n\varphi_n$

הערך הממוצע $\langle F\rangle$ כשהמערכת במצב ψ

נתון ע"י: $\langle F\rangle=\langle\psi|\hat{F}\psi\rangle$

כאשר: $|\psi\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}|b_n\varphi_n\rangle$

$$\rightarrow \quad \langle F\rangle=\langle\sum_n b_n\varphi_n|\hat{F}\sum_l b_l\varphi_l\rangle=\sum_n\sum_l b_n^* b_l\langle\varphi_n|\hat{F}\varphi_l\rangle$$

$$=\sum_n\sum_l b_n^* b_l f_l\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_l\rangle}_{\delta_{n,l}}$$

$$\langle F\rangle=\sum_n |b_n|^2 f_n$$

עפ"י ההגדרה: $\langle F\rangle=\sum_n P(f_n)\, f_n$

← $P(f_n)=|b_n|^2$ הסיכוי לקבל את התוצאה f_n במדידה.

מכיון שפונקצית הגל מנורמלת ($\langle\psi|\psi\rangle=1$)

$$\left\langle \sum b_n \varphi_n \middle| \sum b_l \varphi_l \right\rangle = \sum_n \sum_l b_n^* b_l \langle \varphi_n | \varphi_l \rangle$$

$$= \sum_n \sum_l b_n^* b_l \delta_{nl} = \sum_n |b_n|^2 = 1$$

← הסיכוי לקבל ערך עצמי כלשהו = 1 .

דוגמא

חלקיק נתון בבור חד מימדי אינסופי ברוחב a , פונקצית הגל של החלקיק

$$\psi = A(3\psi_1 + 4\psi_2)$$

א. מהו A ?

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = A^2\langle 3\psi_1 + 4\psi_2 | 3\psi_1 + 4\psi_2\rangle$$

$$= A^2[9\langle\psi_1|\psi_1\rangle + 12\langle\psi_1|\psi_2\rangle + 12\langle\psi_2|\psi_1\rangle + 16\langle\psi_2|\psi_2\rangle]$$

$$= A^2[9+16] = 1$$

פונקציות מאונכות ← 0

$$\rightarrow \quad A = \frac{1}{5}$$

$$\underline{\psi = 0.6\,\psi_1 + 0.8\,\psi_2}$$

ב. מהו $\langle E\rangle$?

$$\langle E\rangle = \sum b_n^2 \cdot E_n$$

$$= (0.6)^2 \cdot E_1 + (0.8)^2 \cdot E_2$$

עבור הבור הנ"ל $E_n = n^2 E_1$

לכן:

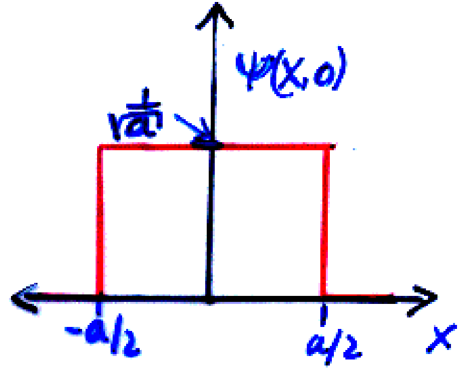
$$\langle E\rangle = 0.36\,E_1 + 0.64 \cdot 2^2 E_1$$

$$\underline{\langle E\rangle = 2.92\,E_1}$$

ב 36% מהמקרים נמדוד $E=E_1$

ב 64% " " $E=4E_1$.

דוגמא



נתון חלקיק חופשי עם פונקצית הגל:

מה נקבל כשמודדים את תנע החלקיק?

צריך לפתח את $\Psi(x,0)$ כסכום של פונקציות עצמיות של $\hat{p}$:

$$\varphi_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

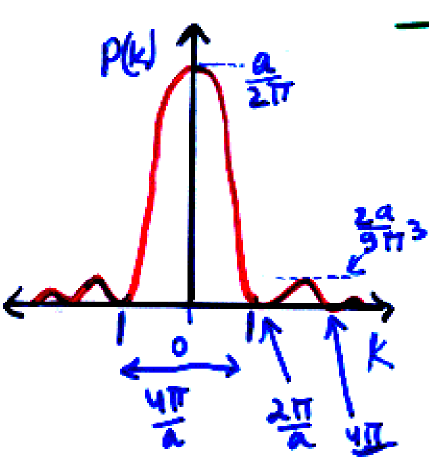
כי הערכים העצמיים רציפים $\int \leftarrow \Sigma$

$$\Psi(x,0)=\int_{-\infty}^{\infty} b(k)\varphi_k\,dk$$

$$b(k)=\langle\varphi_k|\Psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,0)\varphi_k^*\,dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,0)e^{-ikx}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\int_{-a/2}^{a/2}e^{-ikx}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\left(e^{-ik\frac{a}{2}}-e^{ik\frac{a}{2}}\right)}{-ik}=\sqrt{\frac{2}{\pi a}}\frac{\sin(ka/2)}{k}$$

$$\rightarrow P(\hbar k)=|b|^2=\frac{2}{\pi a}\frac{\sin^2(ka/2)}{k^2}$$



תשובה

$\langle p\rangle=0$

$\Delta p=\hbar\Delta k\lesssim\frac{4\pi\hbar}{a}$: התחום בו יתקבלו רוב התוצאות

$\Delta x=a$: האזור בו תחום החלקיק

$\rightarrow \Delta x\Delta p\approx 4\pi\hbar$

איזה חלק מהמדידות יתן $-\frac{2\pi\hbar}{a}\le p\le\frac{2\pi\hbar}{a}$?

$\eta\equiv ka/2$

$$=\frac{2}{\pi a}\int_{-2\pi/a}^{2\pi/a}\frac{\sin^2(ka/2)}{k^2}dk=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin^2\eta}{\eta^2}d\eta=\underline{0.903}$$

יחסי חילוף (Commutator Relations)

<u>הגדרה</u>

אופרטור יחגשי – $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ – "יחס החילוף" בין $\hat{A}$ ו $\hat{B}$
אופרטורים כלשהם

אם $[\hat{A},\hat{B}]=0$ $(\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A} \leftarrow)$

אז $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ נקראים אופרטורים "חילופיים" (commute)

מה המשמעות של יחסי חילוף?

עקרון אי הודאות חל בהכרח כאשר $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$
(נוכיח בהמשך)

תכונות כלליות של יחסי חילוף

$$[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$$

$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$$

$$[\hat{A},a]=0$$

קבוע

$$[\hat{A},a\hat{B}]=[a\hat{A},\hat{B}]=a[\hat{A},\hat{B}]$$

$$[\hat{A},\hat{A}^2]=0$$

או באופן כללי:

$$[\hat{A},f(\hat{A})]=0$$

<u>דוגמא</u>

$$[e^{\hat{A}},\hat{A}]=\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{A}^n}{n!},\hat{A}\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\hat{A}^n,\hat{A}]$$

$$=[1,\hat{A}]+[\hat{A},\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{A}^2,\hat{A}]+\ldots$$

$$=0+0+0+\ldots=0$$

כל פונקציה "סימפטית" ניתן לפתח בטור טיילור כנ"ל
← הדוגמא נכונה לכל $f(\hat{A})$.

האם $\hat{x}$ ו $\hat{p}$ חילופיים?

נציב את הביטויים עבור $\hat{x}$ ו $\hat{p}$ $\qquad \hat{x}=x \quad \hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$

ונקבל:

$$(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})g(x)$$

$$[\hat{x},\hat{p}]g(x)=i\hbar\left(-x\frac{d}{dx}+\frac{d}{dx}x\right)g(x)$$

$$=i\hbar\left(-x\frac{dg}{dx}+\frac{d}{dx}(x\cdot g(x))\right)$$

$$=i\hbar\left(-x\frac{dg}{dx}+g(x)+x\frac{dg}{dx}\right)=i\hbar\cdot g(x)$$

$$\rightarrow \quad \underline{[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar}$$

$\hat{x}$ ו $\hat{p}$ אינם חילופיים

אופרטור יחס החלוף = קבוע.

למה שווה האופרטור $[\hat{x},\hat{p}^2]$?

קל להראות: $[\hat{x},\hat{p}^2]=\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar}\hat{p}+\hat{p}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar}$

$$\rightarrow \quad [\hat{x},\hat{p}^2]=2i\hbar\hat{p}$$

ובאותו אופן $\qquad [\hat{x}^2,\hat{p}]=2i\hbar\hat{x}$

משפט: אם $[\hat{A},\hat{B}]=0$ אז ל $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ יש פונקציות עצמיות משותפות (כלומר יתכן מצב עם $\Delta A\cdot\Delta B=0$)

הוכחה:

נניח: $\qquad \hat{A}\varphi_a=a\varphi_a$

ונקבל: $\qquad \hat{B}\hat{A}\varphi_a=a\hat{B}\varphi_a$

ע"פ יחס החילוף $(\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A})$ $\qquad =\hat{A}(\hat{B}\varphi_a)=a(\hat{B}\varphi_a)$

מסקנה: $\hat{B}\varphi_a$ גם כן פונקציה עצמית של $\hat{A}$ עם ערך עצמי a.

אם φ_a היא הפונקציה העצמית היחידה עם הערך העצמי a

(אין ניוון) ← $\hat{B}\varphi_a$ שווה ל φ_a, עד כדי קבוע $\qquad \underline{\hat{B}\varphi_a=b\varphi_a}$

מ.ש.ל.

דוגמא

עבור חלקיק חופשי $[\hat{P},\hat{H}]=0$ ולכן $\varphi_k=e^{ikx}$ היא
פונקצית עצמית של שני האופרטורים:

$$\hat{P}e^{ikx}=\hbar k\, e^{ikx} \qquad \hat{H}e^{ikx}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{ikx}$$

יחסי חילוף וניוון (Degeneracy)

הגדרה

φ_1,φ_2 בלתי תלויות באופן ליניארי אם $\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2=0$
לכל x גורר בהכרח ! $\lambda_1=\lambda_2=0$ (וכנ"ל ל n פונקציות)

ערך עצמי מנוון – מספר פונקציות עצמיות ב"ת
עם אותו ערך עצמי.

דוגמא:

$$\hat{A}\varphi_1=a\varphi_1$$
$$\hat{A}\varphi_2=a\varphi_2$$

← ל a ניוון כפול.

האם יש ל a פונקציות עצמיות נוספות? (לא בלתי-תלויות)

נבחר: $\varphi_a=\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2$ – צרוף ליניארי של הפונקציות העצמיות
קבועים

$$\hat{A}\varphi_a=\hat{A}(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2)=\alpha a\varphi_1+\beta a\varphi_2$$

$$\to A\varphi_a=a\underbrace{(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2)}_{\varphi_a}$$

φ_a גם כן פונקציה עצמית של $\hat{A}$ ←

כל פונקציה במרחב הנפרש ע"י הפונקציות העצמיות
המנוונות ה ב"ת היא פונקציה עצמית.

האם עדיין מתקיים ש $[\hat A,\hat B]=0$ ← כן! פונקציה עצמית של $\hat A$ היא גם פונקציה עצמית של $\hat B$?

נבדוק

עבור הפונקציה העצמית φ_1 φ_1 פונ' עצמית של $\hat A$

$$\hat B\hat A\varphi_1 = \hat B a\varphi_1 = a(\hat B\varphi_1) = \hat A(\hat B\varphi_1)$$ מתוך החילוף

← $\hat B\varphi_1$ גם כן פונ' עצמית של $\hat A$

← לכן בהכרח $\hat B\varphi_1 = b\varphi_1$?

לא!

למשל: $\hat B\varphi_1 = b(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2) \neq b\varphi_1$ גם כן פונ' עצמית של $\hat A$

מסקנה

אם $[\hat A,\hat B]=0$! a הנו ערך עצמי מנוון של $\hat A$ אזי יתכנו פונקציות עצמיות של $\hat A$ שאינן פונקציות עצמיות של $\hat B$ (אבל יתכנו עדיין פונקציות עצמיות משותפות)

דוגמא - חלקיק חופשי

ל $\hat H$ ערך עצמי: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

עם ניוון כפול $\varphi_1 = e^{ikx}$, $\varphi_2 = e^{-ikx}$ - 2 פונקציות ב"ת עם אותו ערך עצמי

לכן

$$\varphi_3 = \cos kx = \frac{\varphi_1+\varphi_2}{2}$$

$$\varphi_4 = \sin kx = \frac{\varphi_1-\varphi_2}{2i}$$

גם כן פונקציות עצמיות של $\hat H$

למרות ש $[\hat H,\hat P]=0$, φ_3,φ_4 אינן פונקציות עצמיות של $\hat P$.

אבל ניתן למצוא, במקרה זה, φ_1,φ_2, שהן כן פונקציות עצמיות של $\hat H$ ו $\hat P$ (אבל אינן מנוונות עבור $\hat P$

$$\hat P\varphi_1 = \hbar k\varphi_1$$

$$\hat P\varphi_2 = -\hbar k\varphi_2$$)

יחסי חילוף ועקרון אי הודאות

* אם $[\hat{A},\hat{B}]=0$ ניתן למצוא מצב בו $\Delta A\cdot\Delta B=0$

דוגמא:

חלקיק חופשי. מדידת התנע תיתן $\hbar k_0$ (ללא קשר ל ψ ההתחלתי)

כל מדידת תנע נוספת תיתן שוב $\hbar k_0$

← $\langle p\rangle=\hbar k_0$, $\Delta p=0$.

מדידת האנרגיה לאחר מדידת התנע תיתן: $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

וכל מדידת אנרגיה נוספת תיתן שוב $\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

← $\langle E\rangle=\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$, $\Delta E=0$

לכן $\Delta E\cdot\Delta p=0$ עבור חלקיק חופשי.

* אם $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ אזי בכל מצב שהוא $\Delta A\cdot\Delta B>0$

ובאופן כמותי: $[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C} \longrightarrow \Delta A\Delta B\geq\frac{|\langle C\rangle|}{2}$

הוכחה אופרטורית לעקרון אי הודאות

הגדרת ΔA:

$$(\Delta A)^2\equiv\langle(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\rangle=\langle A^2-2A\langle A\rangle+\langle A\rangle^2\rangle=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2$$

חישוב ΔA עבור ψ כשהוא נתון:

$$(\Delta A)^2=\int\psi^*(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\psi\,dx$$

נסמן:

$$\hat{U}\equiv\hat{A}-\langle A\rangle \qquad \hat{V}\equiv\hat{B}-\langle B\rangle$$

נגדיר את הפונקציה:

$$\phi=\hat{U}\psi+i\lambda\hat{V}\psi$$

ונשתמש בהוכחה ש

$$I(\lambda)=\int\phi^*\phi\,dx\geq 0$$

להראות ש

$$\langle U^2\rangle\langle V^2\rangle\geq\frac{1}{4}\langle i[U,V]\rangle^2$$

(ונקבל הגדרה [illegible] A ; B)

המשך ההוכחה

$$I(\lambda)=\int(\hat{U}\psi+i\lambda\hat{V}\psi)^*(\hat{U}\psi+i\lambda\hat{V}\psi)\,dx$$

נפתח את הסוגריים

$$I(\lambda)=\int(\hat{U}\psi)^*\hat{U}\psi\,dx+\lambda^2\int(V\psi)^*V\psi\,dx$$
$$+i\lambda\int\left((U\psi)^*V\psi-(V\psi)^*U\psi\right)dx$$

נשתמש בעובדה ש $\hat{U}$ ו $\hat{V}$ הם אופרטורים הרמיטיים
($\hat{B},\hat{A}$ הם הרמיטיים)
כלומר:

$$\langle\hat{U}\psi|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{U}\psi\rangle$$

ונקבל

$$I(\lambda)=\int\psi^*\left(\hat{U}^2+\lambda^2V^2+i\lambda[\hat{U},\hat{V}]\right)\psi\,dx$$

אבל

$$\langle\psi|\hat{U}^2\psi\rangle=(\Delta A)^2$$

$$I(\lambda)=(\Delta A)^2+\lambda^2(\Delta B)^2+i\lambda\int\psi^*[\hat{U},\hat{V}]\psi\,dx \qquad \leftarrow$$

$$[\hat{U},\hat{V}]=[\hat{A},\hat{B}]$$

נשתמש בקשר (מסוף 8 הבכיח)

אופרטור לא הרמיטי $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger=-[\hat{A},\hat{B}]$ ולכן בעל ערך עצמי דמיוני

$$I(\lambda)=(\Delta A)^2+\lambda^2(\Delta B)^2+i\lambda\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\geq 0 \qquad \leftarrow$$

עבור איזה λ יקבל $I(\lambda)$ ערך מינימלי? מהו הערך המינימלי?

$$\frac{dI}{d\lambda}=0 \longrightarrow 2\lambda(\Delta B)^2+i\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle=0$$

$$\lambda_{min}=-i\frac{\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle}{2(\Delta B)^2}$$

$$\rightarrow I_{min}(\lambda_{min})=(\Delta A)^2-\frac{\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2}{4(\Delta B)^2}+\frac{\langle[A,B]\rangle^2}{2(\Delta B)^2}\geq 0$$

$$\rightarrow (\Delta A)^2(\Delta B)^2\geq-\frac{1}{4}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{\langle i[\hat{A},\hat{B}]\rangle}{2}$$

מתקיים לכל ψ שהוא.

הגורם "הפיזיקלי" לעקרון אי הודאות

מדידת הגודל A תיתן ערך עצמי a ותעביר את ψ ל-φ_a, שהוא אינו פונקציה עצמית של $\hat{B}$. מדידת הגודל B לאחר מדידת A תיתן ערך עצמי מסוים b מתוך התפלגות ערכים אפשריים

פונ' עצמית של $\hat{A}$ ← $\varphi_{a,m} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_{b,n}$ ← פונקציות עצמיות של $\hat{B}$

$$P_r(b_n) = |\langle \varphi_{b,n} | \varphi_{a,m} \rangle|^2 = |c_n|^2$$

ותביא את המערכת ל-$\varphi_{b,n}$ מסוים. מכיון ש:

$$\varphi_{b,n} = \sum_{m=1}^{\infty} d_m \varphi_{a,m}$$

מדידה חוזרת של A יכולה שוב לתת ערך כלשהו מתוך ההתפלגות $P_r(a_m) = |\langle \varphi_{b,n} | \varphi_{a,m} \rangle|^2$

← $\Delta A > 0$ ו- $\Delta B > 0$ ולכן $\Delta A \cdot \Delta B > 0$.

<u>דוגמא</u> – מדידת מקום-תנע-מקום-תנע לחלקיק חופשי.

סט מלא של אופרטורים חילופיים

נתון סט של פונקציות עצמיות מנוונות $\{\varphi_a\}$ עבור הערך העצמי a של הגודל המתאים A. $\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a$

<u>שאלה:</u> האם ניתן להבדיל בין הפונקציות המנוונות בסט?

<u>תשובה:</u> לא! ← הפונקציות זהות עד כ"ג גורם פאזה ← בסתירה להנחה שיש סט מנוון אורתוגונלי ← חייב להיות הבדל "פיזיקלי" בין הפונקציות.

<u>מסקנה:</u> קיים גודל מדיד נוסף, B, שערכו העצמי שונה עבור חלק מהפונקציות בסט $\{\varphi_a\}$

נגדיר תת-סט $\{\varphi_{ab}\}$ המקיים $\hat{B}\varphi_{ab} = b\varphi_{ab}$

אם תת-סט זה עדיין מנוון נמצא אופרטור $\hat{C}$ שיבדיל בין הפונקציות בתת-סט $\{\varphi_{ab}\}$

סט מלא של אופרטורים חילופיים - המספר המינימלי של אופרטורים חילופיים הדרוש להגדרה חד ערכית של פונקציית גל (הסרת כל הניוון)

דוגמא

פונקציית הגל של חלקיק בפוטנציאל $V(r) = -\frac{k}{r}$

φ_n - הפונקציות העצמיות של $\hat{H}$, סט של $2n^2$ פונקציות

$\varphi_{n\ell}$ - פונ' עצמיות של $\hat{H}$ ושל $\hat{L}^2$, סט של $2\ell+1$ פונקציות

$\varphi_{n\ell m}$ - פונ' עצמיות של $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, מוגדר חד ערכית.

למעשה קיים מספר קוונטי "פנימי" נוסף לחלקיק הנקרא ספין ול $\varphi_{n\ell m}$ יש $2s+1$ פונקציות, כאשר s - ספין.
הפונקציה המוגדרת חד ערכית היא $\varphi_{n\ell m s}$

$$\hat{H}\varphi_{n\ell m s} = E_n \cdot \varphi_{n\ell m s} \qquad n = 1, 2, \ldots$$
$$\hat{L}^2 \varphi_{n\ell m s} = \ell(\ell+1)\cdot\hbar\cdot\varphi_{n\ell m s} \qquad 0 \le \ell \le n-1$$
$$\hat{L}_z \varphi_{n\ell m s} = m\cdot\hbar\cdot\varphi_{n\ell m s} \qquad -\ell \le m \le \ell$$
$$\hat{S}_z \varphi_{n\ell m s} = s_z\hbar\cdot\varphi_{n\ell m s} \qquad s_z = \pm\frac{1}{2}$$

עבור אלקטרון

הסט המלא של האופרטורים החילופיים הוא:
$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$

וסט הערכים העצמיים: n, ℓ, m, s_z מגדיר את ψ חד-ערכית.

לדוגמא: $\psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}$, $\psi_{5,3,-2,\frac{1}{2}}$