התפתחות פונקצית הגל בזמן

פס בדיוק של פונקציות עצמיות

כפי שראינו

$$\Psi(x,0) = \varphi_n(x)$$

$$\rightarrow \Psi(x,t) = e^{-i\omega_n t}\varphi_n(x)$$

במקרה הכללי:

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \varphi_n(x)$$

$$b_n = \langle \varphi_n | \Psi(x,0) \rangle$$

נשתמש בקשר

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\Psi(x,0)$$

ונקבל

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \sum b_n \varphi_n(x)$$

$$= \sum b_n e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \varphi_n(x)$$

$$= \sum b_n e^{-i\omega_n t} \varphi_n(x) \qquad \omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

$$\underline{\Psi(x,t) = \sum c_n(t)\varphi_n(x)} \qquad c_n(t) = b_n e^{-i\omega_n t}$$

דוגמא:

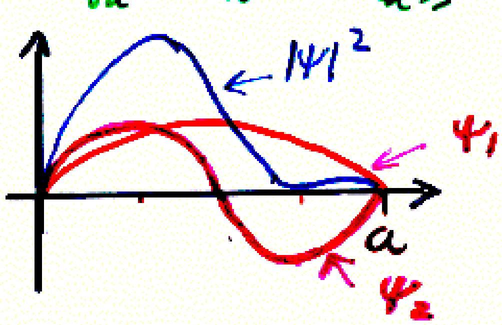
בור חד מימדי ∞ עם $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad E_n = n^2 E_1$$

$\omega_1 t = \pi \qquad \omega_2 t = 4\omega_1 t = 4\pi \qquad t = \frac{\pi}{\omega_1}$

$$\rightarrow \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[-\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] \qquad t=0$$



* מהו $\langle x(t)\rangle$? (כיצד "ינוע" החלקיק בבור ?)

$$\langle x(t)\rangle = \left\langle \sum c_n(t)\varphi_n(x) \,\middle|\, \sum c_m(t)\, x\cdot\varphi_m(x)\right\rangle$$

צריך להציב ולחשב.

* מהו $\langle E(t)\rangle$?

באותו אופן

$$\langle E(t)\rangle = \left\langle \sum c_n(t)\varphi_n(x) \,\middle|\, \sum c_m(t)\hat{H}\varphi_m(x)\right\rangle$$

מכיון ש φ_m הן הפונקציות העצמיות של $\hat{H}$, נקבל:

$$\langle E(t)\rangle = \left\langle \sum_n c_n(t)\varphi_n(x) \,\middle|\, \sum_m c_m(t) E_m \varphi_m(x)\right\rangle$$

$$= \sum_n \sum_m E_m c_n^*(t) c_m(t) \underbrace{\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle}_{\delta_{n,m}}$$

$$= \sum_n E_n |c_n(t)|^2$$

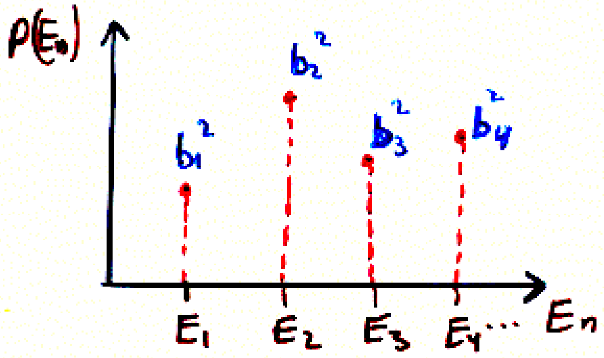
מכיון ש $c_n(t) = b_n e^{-i\omega_n t}$ נקבל

$$\langle E(t)\rangle = \sum_n E_n b_n^2 = \langle E(t=0)\rangle$$

$P(E_n) = b_n^2$ - ההסתברות לקבלת E_n

מסקנה

$\langle E\rangle$! ההתפלגות של ערכי התצפית של E אינם משתנים בזמן. (למרות ש $\psi = \psi(x,t)$)



← נכון באופן כללי כאשר $\hat{H} = \hat{H}(\vec{r})$ (התנאי להפרדת המשתנים)

אם אין תלות של $\hat{H}$ ב t (אין כוח חיצוני המשתנה בזמן)
= "סימטריה בזמן" ← שימור אנרגיה.

חלקיק חופשי - חבורת גלים

תאור נוח (מתמטית) של חלקיק "ממוקם" ע"י חבורת גלים גאוסיאנית:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{a}(2\pi)^{1/4}}e^{ik_0x}e^{-\frac{x^2}{4a^2}}$$

$$\rightarrow \quad P(x,0)=\psi^*\psi=\frac{1}{a\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \qquad \langle x\rangle=0 \quad \Delta x=a$$

$$\langle p\rangle=p_0 \qquad \Delta p=?$$

מהי התפלגות הערכים האפשריים לתנע החלקיק?

נפתח את ψ בסכום (רציף) של פונקציות עצמיות של $\hat{p}$

$$b(k)=\langle\underbrace{\varphi_k}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}}|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{1}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{x'^2}{4a^2}}e^{ix'(k_0-k)}dx'$$

$$b(k)=\frac{\sqrt{2a}}{(2\pi)^{1/4}}e^{-a^2(k_0-k)^2}$$

התמרת פוריה של גאוסיאן ← גאוסיאן

$$\rightarrow \quad P(k)=\frac{2a}{\sqrt{2\pi}}e^{-2a^2(k_0-k)^2} \rightarrow \Delta k=\frac{1}{2a} \rightarrow \underline{\Delta p=\frac{\hbar}{2a}}$$

$$\left[\text{גאוסיאן}=\frac{1}{\Delta\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2\Delta^2}}\right]$$

$$\Delta x\cdot\Delta p=a\cdot\frac{\hbar}{2a}=\frac{\hbar}{2}$$ ← הערך המינימלי האפשרי עפ"י

עקרון אי הודאות מתקבל עבור חבורת גלים גאוסיאנית.

מהו $\psi(x,t)$?

חישוב $\Psi(x,t)$ באופן כללי לחלקיק חופשי

$e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ התקבל מהפעלת e^{ikx} על

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\Psi(x,0)$$

$$= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)e^{ikx}dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} b(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

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

עבור Ψ כלשהי

לכן באופן כללי

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx'}\Psi(x',0)\,e^{i(kx-\omega t)}dx'\,dk$$

נרשום מחדש באופן הבא

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x',0)\,K(x',x,t)\,dx'$$

כאשר

$$K(x',x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left[k(x-x') - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right]}dk$$

(הצבנו $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$)

Free particle propagator

'מקדם' החלקיק החופשי

$K(x',x,t)$ - האמפליטודה לכך שרכיב פונקציית הגל שהיה ב x' ב $t=0$ יעבור ל x בזמן t.

חישוב מפורש נותן:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-uy^2}e^{vy}dy = \sqrt{\frac{\pi}{u}}\,e^{\frac{v^2}{4u}}$$

$$\rightarrow K(x',x,t) = \sqrt{\frac{m}{i\cdot 2\pi\hbar t}}\;e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}}$$

מאפשר לחשב בצורה נוחה את $\Psi(x,t)$ מ $\Psi(x,0)$ כלשהו של חלקיק חופשי.

חישוב $\psi(x,t)$ עבור גאוסיאן ב $t=0$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}(2\pi)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(ik_0 x' - \frac{x'^2}{4a^2}\right)} K(x',x,t)\, dx'$$

נציב את הביטוי של K ונקבל לאחר האינטגרציה

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}(2\pi)^{1/4}\left(1+\frac{it}{\tau}\right)^{1/2}} \cdot e^{i\frac{\tau}{t}\left(\frac{x}{2a}\right)^2} e^{\left[\frac{i\tau}{4a^2 t}\left(x-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2 \cdot \frac{1}{1+it/\tau}\right]}$$

כאשר

$$\tau \equiv \frac{2ma^2}{\hbar}$$

צפיפות ההסתברות:

$$P(x,t) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}\,(1+t^2/\tau^2)^{1/2}}\, e^{-\frac{(x-v_0 t)^2}{2a^2(1+t^2/\tau^2)}}$$

כאשר $v_0 \equiv \frac{\hbar k_0}{m}$

← חבורת הגל נשארת גאוסיאנית

מרכז חבורת הגל $\langle x(t)\rangle = v_0 \cdot t$

רוחב חבורת הגל $\langle a(t)\rangle = a\left(1+\frac{t^2}{\tau^2}\right)^{1/2}$

גובה חבורת הגל $\frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \longrightarrow \frac{1}{a\sqrt{2\pi}\,(1+t^2/\tau^2)^{1/2}}$

עבור $t \gg \tau$ רוחב החבורה גדל ליניארית $a(t) = a\cdot t/\tau$

$$a(t) = \frac{a\cdot t\cdot \hbar}{2ma^2} = \frac{\hbar}{2a}\,\frac{t}{m} = \frac{\Delta p}{m}\cdot t = \underline{\Delta v\cdot t}$$

דוגמא/

במידה מסויימת נקבע מיקום אלקטרון חופשי בדיוק של $\Delta X = 1\text{Å}$

מה אי הוודאות במיקומו לאחר שניה?

$$a(1\sec) = \frac{1.05\cdot10^{-27}\cdot 1}{2\cdot10^{-8}\cdot 9.11\cdot10^{-28}} = 5.78\cdot10^{7}\,cm = \underline{578\,km\ !!}$$

מה ערך $\Delta X \Delta P$?

ההתפתחות בזמן של ערכי תצפית

מהו $\frac{d\langle A\rangle}{dt}$? ($=0$ אם ψ פונ' עצמית של $\hat{H}$)

ל $\langle A\rangle$ אין תלות במקום $\Leftarrow$ $\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{\partial\langle A\rangle}{\partial t}$

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{d\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle}{dt}=\int\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\hat{A}\psi)\,dx$$

נשתמש בכלל הגזירה:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\hat{A}\psi)=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\hat{A}\cdot\psi+\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi$$

עפ"י משוואת שרדינגר
$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\psi \quad , \quad \frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{i\hat{H}\psi^*}{\hbar}$$

נציב למעלה ונקבל

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\hat{A}\psi)=\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*\hat{A}\psi-\frac{i}{\hbar}\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi+\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi$$

$$\rightarrow \quad \frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\langle\hat{H}\psi|\hat{A}\psi\rangle-\langle\psi|\hat{A}\hat{H}\psi\rangle\right]+\langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\rangle$$

מכיוון ש $\hat{H}$ הרמיטי

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left\langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

מסקנה

כל משתנה מדיד המיוצג ע"י אופרטור שאינו תלוי מפורשות בזמן ($\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0$), ושהוא חילופי עם $\hat{H}$ ($[\hat{H},\hat{A}]=0$). אינו משתנה בזמן = קבוע תנועה של המערכת.

עיקרון אהרנפסט (Ehrenfest Principle)

דינמיקה	מערכת
ניוטון	קלאסית
שרדינגר	קוונטית

באיזה מובן הדינמיקה הקוונטית הופכת לקלאסית?

נשים תנועה חד מימדית של חלקיק בפוטנציאל $V(x)$

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

* כיצד משתנה המיקום הממוצע של החלקיק בזמן?

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{x}]\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(x),\hat{x}\right]\right\rangle$$

לכל אופרטור $\hat{A}$ $[f(\hat{A}),\hat{A}]=0$ $\leftarrow$ $[\hat{V}(x),\hat{x}]=0$

$$[\hat{p}^2,\hat{x}] = \hat{p}\underbrace{[\hat{p},\hat{x}]}_{\hbar/i} + \underbrace{[\hat{p},\hat{x}]}_{\hbar/i}\hat{p} = \frac{2\hbar}{i}\hat{p}$$

ולכן

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\cdot\left\langle\frac{2\hbar}{i}\frac{\hat{p}}{2m}\right\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle$$

* כיצד משתנה התנע הממוצע של החלקיק בזמן?

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(x),\hat{p}\right]\right\rangle$$

$=0$ ($\hat{A}$ ו $f(\hat{A})$ חלופיים)

מהו איפוא החילוף $[V(x),\hat{p}]$?

עפ"י ההגדרה של $\hat{p}$ ושל יחס החילוף

$$[\hat{V}(x),\hat{p}]\psi = \hat{V}(x)\hat{p}\psi - \hat{p}\cdot\hat{V}(x)\psi = \frac{\hbar}{i}V(x)\frac{d}{dx}\psi - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(V(x)\cdot\psi)$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}\cdot\psi$$

$$\rightarrow \quad [\hat{V}(x),\hat{p}] = -\frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}$$

לכן

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle$$

מצאנו קודם: $\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$

$\leftarrow$

$$m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle$$

דומה לביטוי הקלאסי $m\frac{d^2x_c}{dt^2} = -\frac{dV(x_c)}{dx_c}$ כאשר x_c - מיקום החלקיק

האם הזיהוי $x_c=\langle x\rangle$ מספיק לקבלת הדינמיקה הקלאסית מהקוונטית?

מתקיים כאשר

$$\left\langle\frac{dV(x)}{dx}\right\rangle = \frac{dV(\langle x\rangle)}{d\langle x\rangle} \quad \left(=\frac{dV}{dx}\Big|_{x=\langle x\rangle}\right)$$

הממוצע על פני ψ

הערך המקומי בנקודה $\langle x\rangle$

<u>לדוגמא:</u> נניח $\hat{V}(x)=\lambda\hat{x}^n \leftarrow \frac{dV}{dx}=\lambda n\hat{x}^{n-1}$

$$\frac{dV}{dx}\Big|_{x=\langle x\rangle} = \lambda n\langle\hat{x}\rangle^{n-1}, \quad \left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle = \lambda n\langle\hat{x}^{n-1}\rangle$$

בשוויון מתקיים (במדויק) רק עבור $n=0$ - חלקיק חופשי
$n=1$ - כח קבוע

עבור $V(x)$ כללי נדרוש:

$$\frac{\Delta x\cdot\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=\langle x\rangle}}{\frac{dV}{dx}\Big|_{x=\langle x\rangle}} \ll 1$$

השתנות יחסית קטנה של V בגבול התחום בו החלקיק נמצא.

סימטריה וחוקי שימור

כל חוק שימור נובע מסימטריה מסוימת

* סימטריה תחת הזזה בזמן

חוקי הפיזיקה (מכניקה, חשמל, גרעין) אינם משתנים בזמן ← $A=\hat{A}(r)$ למערכת סגורה ← $\frac{d\langle E\rangle}{dt}=0$

שימור אנרגיה

* סימטריה תחת הזזה במרחב

חוקי הפיזיקה אינם משתנים במרחב

← $\hat{H}$ תלוי בקואורדינטות יחסיות בלבד (מרחק חלקיק ממקור הכוח)

נגדיר אופרטור הזזה: $\hat{D}(a)f(x)\equiv f(x+a)$

מפיתוח בטור טיילור מקבלים $\hat{D}(a)=e^{\frac{ia\hat{p}}{\hbar}}$

מהסימטריה במרחב ← $\hat{D}(\hat{H}\psi)=\hat{H}(\hat{D}\psi)$ ← $[\hat{D},\hat{H}]=0$

← $[\hat{D},\hat{P}]=0$

← $[\hat{H},\hat{P}]=0$ ← $\frac{d\langle p\rangle}{dt}=0$. שימור תנע

* סימטריה תחת סיבוב

חוקי הפיזיקה אינם תלויים בכיוון

← $\hat{H}$ לא תלוי בזוית

נגדיר באופן דומה אופרטור סיבוב $\hat{R}(\Delta\phi)\cdot f(\phi)=f(\phi+\Delta\phi)$

$\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$ $\quad$ $\hat{R}(\Delta\phi)=e^{\frac{i\Delta\phi\hat{L}_z}{\hbar}}$

$[\hat{R},\hat{H}]=0 \longrightarrow [\hat{L},\hat{H}]=0 \longrightarrow \frac{d\langle L\rangle}{dt}=0$

שימור תנע זויתי

סימטריה תחת שיקוף (עולם ראי)

חוקי הפיזיקה אינם משתנים כאשר $\vec{r} \longrightarrow -\vec{r}$

(נשבר למרבה הפלא באינטראקציות חלשות - התפרקות β)

נגדיר את אופרטור הזוגיות $\hat{P} f(x) = f(-x)$

מהם הערכים העצמיים והפונקציות העצמיות של $\hat{P}$?

ערך עצמי   פונ' עצמית

נניח: $\hat{P}\, u(x) = \lambda \cdot u(x)$

נפעיל שוב את P $\hat{P}^2 u(x) = \hat{P} \lambda u(x) = \lambda^2 u(x) = u(x)$

פעולה כפולה של $\hat{P}$ תחזיר את הפונקציה לעצמה $(x \to -x \to x)$

ולכן $\lambda^2 = 1 \to \lambda = \pm 1$

הפונקציות העצמיות של $\lambda=1$ הן כל הפונקציות הזוגיות $f(x)=f(-x)$

״   ״   ״ $\lambda=-1$ ״   ״   ״ האי-זוגיות $f(x)=-f(-x)$

כל פונקציה ניתן לתאר כסכום של פונקציות עצמיות של $\hat{P}$

$$\psi(x) = \underbrace{\tfrac{1}{2}[\psi(x) + \psi(-x)]}_{\psi^+ \text{ - פונ' זוגית}} + \underbrace{\tfrac{1}{2}[\psi(x) - \psi(-x)]}_{\psi^- \text{ - פונ' אי זוגית}}$$

אם $V(x) = V(-x)$ ← $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ ← $\frac{d\hat{P}}{dt} = 0$ __שימור הזוגיות__

← לפונ' העצמיות של $\hat{H}$ זוגיות מוגדרת.

המערכת זוגית ב- $t=0$ ישאר זוגי לכל t.

״   אי זוגית ״   ״   ״   אי זוגי ״   ״.