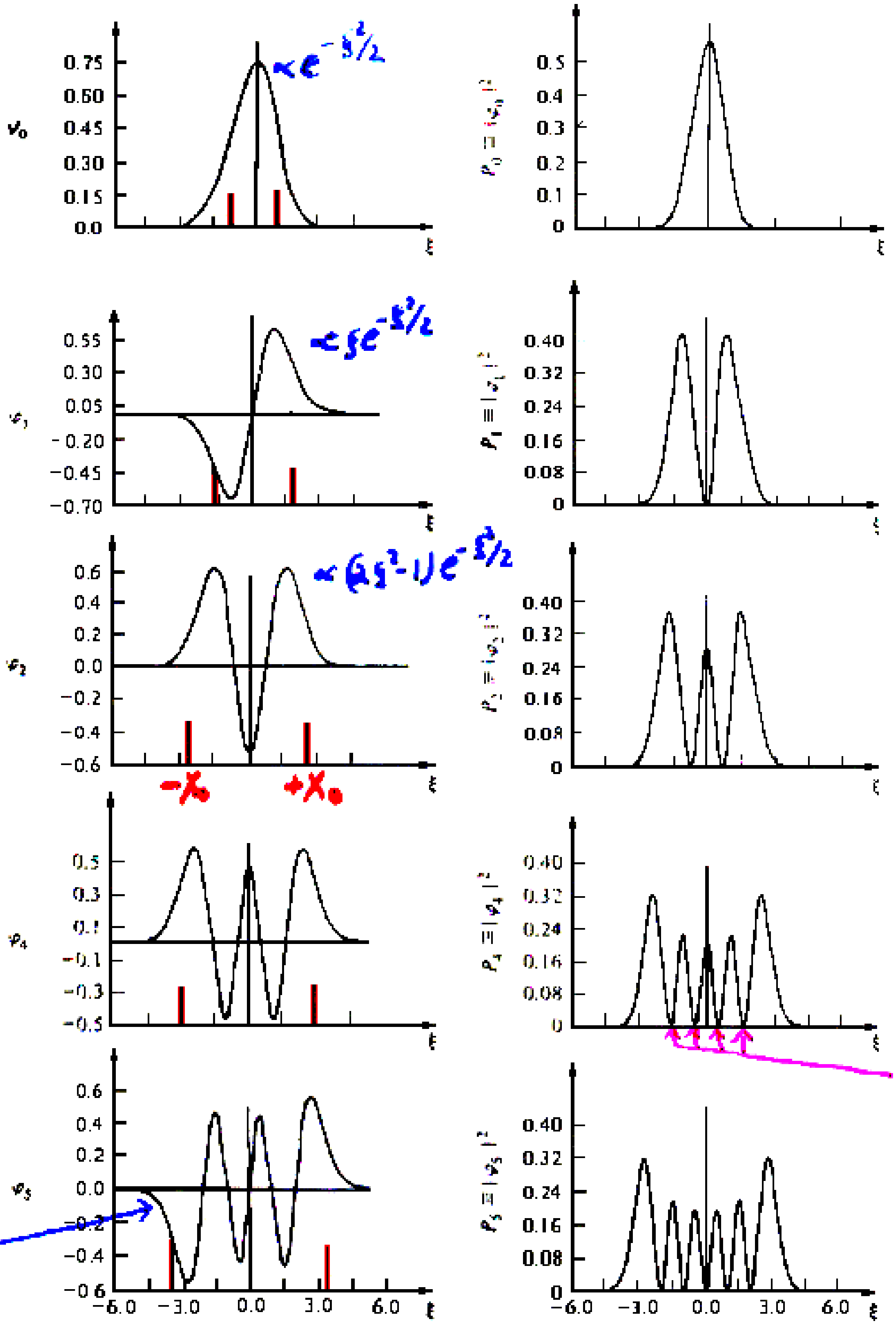
הפונקציות העצמיות של מתנד הרמוני

זוגיות הפתרונות: $\mathcal{P}\varphi_n = (-1)^n \varphi_n$

צפיפות ההסתברות



מספר האפסים $= n$

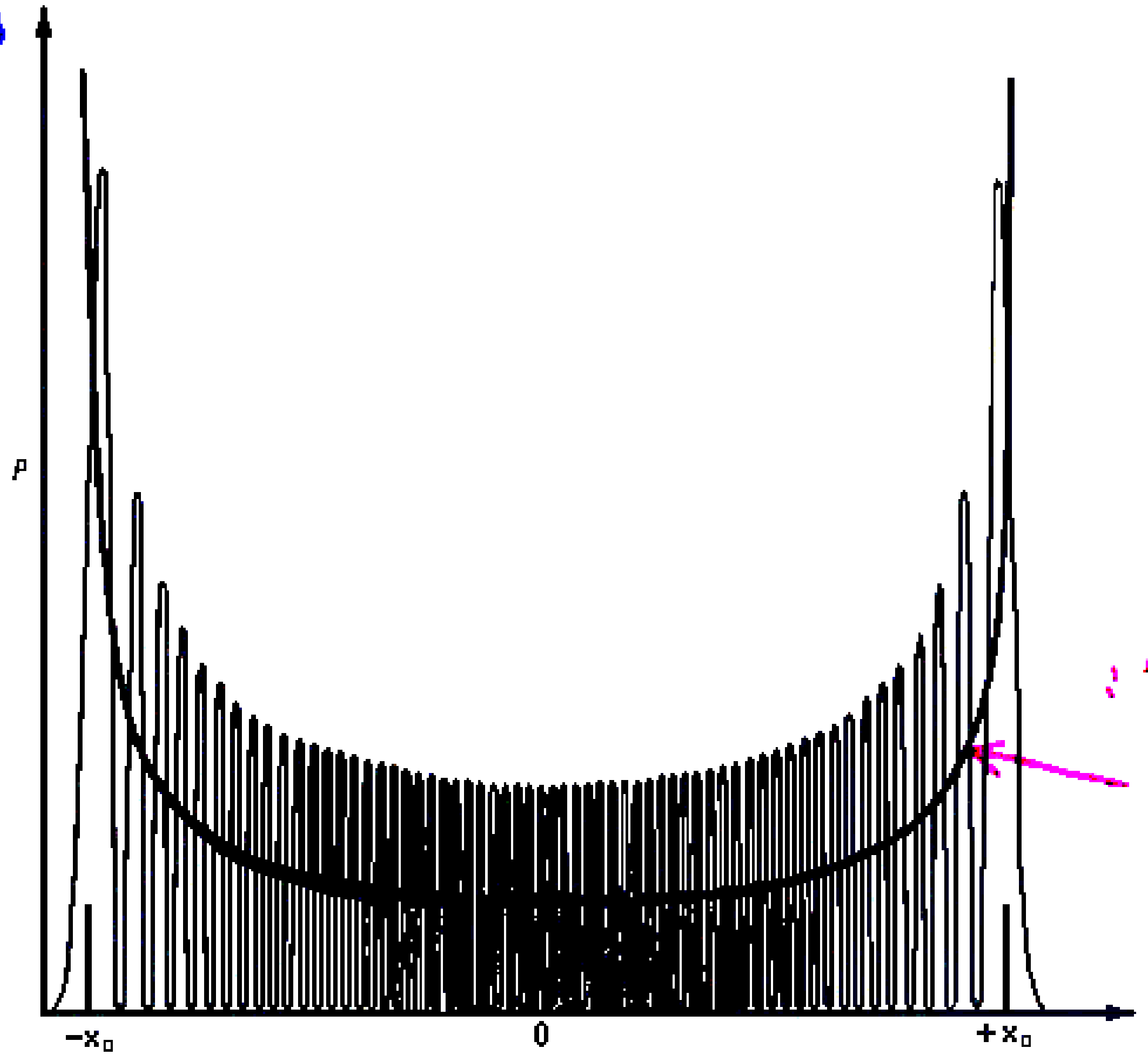
$\varphi \propto e^{-\xi^2/2}$ עבור $|x| > x_0$

FIGURE 7.10 The first few eigenstates of the simple harmonic oscillator and corresponding probability densities. Turning points, $\xi_n^{(0)} = \pm\sqrt{1+2n}$, are denoted by vertical marks.

מתנד הרמוני עם n>>1 - עיקרון ההתאמה

עבור n>>1 $|\psi|^2 \longrightarrow P(x)$ - התפלגות הסיכויים הקלאסית

צפיפות ההסתברות



בגבול הקלאסי:

$$P = \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

הסיכוי למצוא חלקיק בתחום dx -

$$P\,dx = \frac{dt}{T_0/2} = \frac{\omega_0\,dt}{2\pi/2}$$

זמן המחזור

הזמן הדרוש לעבור מ $+x_0$ ל $-x_0$

$$dt = \frac{dx}{dx/dt}$$

$$x = x_0 \sin(\omega_0 t)$$

$$\frac{dx}{dt} = x_0\,\omega_0 \cos(\omega_0 t) = \omega_0\sqrt{x_0^2 - x^2}$$

$$P\,dx = \frac{\omega_0}{2\pi}\,\frac{dx}{\omega_0\sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

$$\rightarrow P = \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

מתנד הרמוני במרחב התנע

מרחב המקום לעומת מרחב התנע

$$\psi(x)=\sum_n a_n \varphi_n(x)$$ בדיד

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

פונקציות עצמיות של $\hat{p}$

ניתן לרשום גם:

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\,\delta(x-x')\,dx'$$

המקדמים של ψ בפיתוח בפונקציות עצמיות של האופרטור $\hat{x}$.

הפונקציות העצמיות של $\hat{x}$

הפירוש הפיזיקלי:

כאשר חלקיק עם $\psi(x)$ כלשהו, לאחר המדידה הוא ימצא ב x' כלשהו כלומר $\psi(x) \leftarrow \delta(x-x') \equiv$ פונקציה עצמית של האופרטור $\hat{x}$.

התמרת פוריה: $b(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\,\varphi_k^*(x)\,dx$ – ψ במרחב התנע.

$$P(x)=|\psi(x)|^2 \qquad P(k)=|b(k)|^2$$

ההצגה במרחב k (מרחב התנע - $\hbar k$) סימטרית לחלוטין להצגה במרחב x.

כיצד נכתוב את משוואת שרדינגר במרחב התנע?

במרחב x:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}\right)\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

נציב $\psi(x)=\int b(k)\varphi_k(x)\,dk$ ונשתמש בקשר: $-i\frac{\partial\varphi_k}{\partial k}=x\cdot\varphi_k$ $\left(\varphi_k=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\right)$

ונקבל

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(k)\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{k}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2}\right)\varphi_k(x)\,dk = E\cdot\int_{-\infty}^{\infty} b(k)\varphi_k(x)\,dk$$

נשתמש באינטגרציה בחלקים

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(k)\frac{\partial^2}{\partial k^2}\varphi_k(x)\,dk = b(k)\frac{\partial\varphi_k(x)}{\partial k}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial b(k)}{\partial k}\frac{\partial\varphi_k(x)}{\partial k}\,dk$$

מכיון ש $b(k) = \frac{\partial b(k)}{\partial k} = 0$

עבור $k=\pm\infty$ (מתנאי הנרמול $\int_{-\infty}^{\infty}|b(k)|^2dk$)

← האבר הראשון מצד ימין מתאפס

$$= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial b(k)}{\partial k}\frac{\partial\varphi_k(x)}{\partial k}\,dk = \int \varphi_k(x)\frac{\partial^2 b(k)}{\partial k^2}\,dk$$

מהפעלה נוספת של אינטגרציה בחלקים

נציב חזרה בביטוי למשוואת שרדינגר ונקבל

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_k(x)\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{k}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2} - E\right)b(k)\,dk = 0$$

$$\rightarrow \quad \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{k}{2}\frac{\partial^2}{\partial k^2}\right)b(k) = E\cdot b(k)$$

משוואת שרדינגר למתנד הרמוני במרחב התנע

באופן כללי:

מרחב-p	מרחב-x
$-i\frac{\partial}{\partial k}$	x
$\hbar k$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\hat{H}(k)b(k,t) = i\hbar\frac{\partial b(k,t)}{\partial t}$$ – משוואת שרדינגר התלויה בזמן

$$b(k,t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}b(k,0)$$ – התפתחות פונקצית הגל בזמן

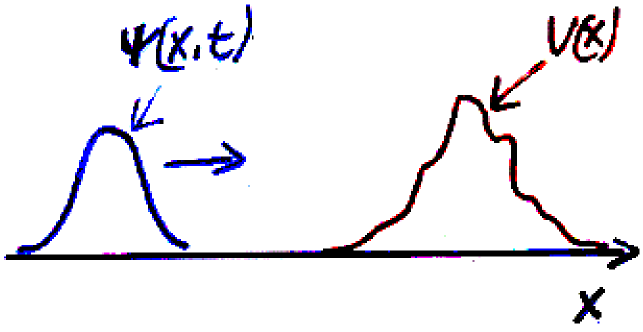
47a

TABLE 9.4 Orthogonal Polynomials Generated by Gram–Schmidt Orthogonalization of $u_n(x) = x^n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Polynomials	**Interval**	**Weighting function** $w(x)$	**Standard normalization**
Legendre	$-1 \leq x \leq 1$	1	$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2\,dx = \frac{2}{2n+1}$
Shifted Legendre	$0 \leq x \leq 1$	1	$\int_{0}^{1} [P_n^*(x)]^2\,dx = \frac{1}{2n+1}$
Chebyshev I	$-1 \leq x \leq 1$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$\int_{-1}^{1} [T_n(x)]^2(1-x^2)^{-1/2}\,dx = \begin{cases}\pi/2, & n \neq 0\\ \pi, & n = 0\end{cases}$
Shifted Chebyshev I	$0 \leq x \leq 1$	$[x(1-x)]^{-1/2}$	$\int_{0}^{1} [T_n^*(x)]^2[x(1-x)]^{-1/2}\,dx = \begin{cases}\pi/2, & n > 0\\ \pi, & n = 0\end{cases}$
Chebyshev II	$-1 \leq x \leq 1$	$(1-x^2)^{1/2}$	$\int_{-1}^{1} [U_n(x)]^2(1-x^2)^{1/2}\,dx = \frac{\pi}{2}$
Laguerre	$0 \leq x < \infty$	e^{-x}	$\int_{0}^{\infty} [L_n(x)]^2 e^{-x}\,dx = 1$
Associated Laguerre	$0 \leq x < \infty$	$x^k e^{-x}$	$\int_{0}^{\infty} [L_n^k(x)]^2 x^k e^{-x}\,dx = \frac{(n+k)!}{n!}$
Hermite	$-\infty < x < \infty$	e^{-x^2}	$\int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2}\,dx = 2^n \pi^{1/2} n!$

Arfken / Mathematical Methods for Physicists p. 521

מצבים לא קשורים - פיזור במימד אחד?



נניח $\frac{dV}{dx}\to 0$

עבור $x\to\pm\infty$

← חלקיק חופשי ב $x=\pm\infty$

כלומר ב $t=\pm\infty$

בחלקיק יעבור? יחזור? יעבור + יחזור?

משוואת הרציפות

בכל נקודה במרחב יתקיים הקשר הבא:

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

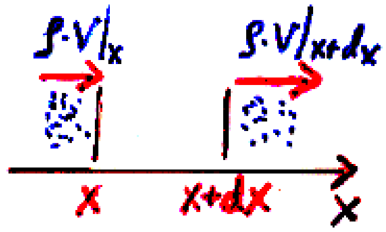
צפיפות ההסתברות $(\rho=|\psi|^2)$

שימור ההסתברות $\left(\int\rho\,dv=1\right)$

צפיפות זרם ההסתברות

אנלוגיה לחלקים למשוואות רציפות אחרות

לדוגמא: רציפות המטען



צפיפות המטען, מהירות

$$\rho\cdot V\big|_{x+dx}-\rho\cdot V\big|_{x}=-\frac{\partial\rho}{\partial t}dx$$

סה"כ המטען היוצא

סה"כ המטען הנכנס

השינוי במטען בתחום $x,\ x+dx$

$$\rightarrow\ \frac{\partial}{\partial x}(\rho V)=-\frac{\partial\rho}{\partial t}\rightarrow\frac{d}{dt}\int\rho\,dv=0$$

אין יצירה או הריסה של מטענים = שימור מטען (בניסוח אינטגרלי $\frac{d}{dt}(\rho\Delta x)=0$)

מה מייצג את $\vec{J}$ במכניקת הקוונטים?

במימד אחד -

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial J_x}{\partial x}=0$$

$$\rho=\psi^*\psi \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t}=\frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

ממשוואת שרדינגר התלויה בזמן:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi \qquad \frac{\partial \psi^*}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi^*$$

נציב בביטוי ל $\frac{\partial \rho}{\partial t}$

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

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x) \qquad \psi^*V(x)\psi=\psi V(x)\psi^*, \quad \hat{p}^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\rightarrow \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right)=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\rightarrow \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\right]=0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}J_x=0 \quad \leftarrow$$ ומהשוואה לביטוי

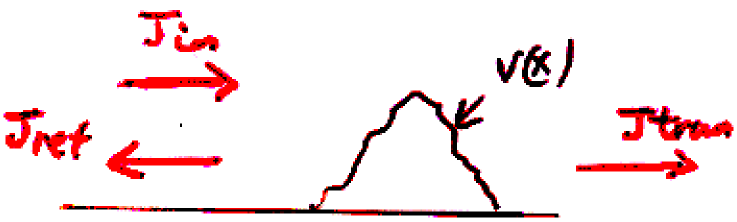
נקבל:

$$J_x=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

ובאופן כללי:

$$\vec{J}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

(אם ψ ממשי $\leftarrow \vec{J}=0$)



מקדמי העברה והחזרה

נשתמש ב J להגדיר את מקדם ההעברה וההחזרה.

מקדם ההעברה $T\equiv\left|\frac{J_{tran}}{J_{in}}\right|$ $\qquad$ $R\equiv\left|\frac{J_{ref}}{J_{in}}\right|$ מקדם ההחזרה

עבור $X \to \pm\infty$ נשתמש ב ψ הפשוטים ביותר האפשריים:

$$\psi_{in} = A e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} \qquad \hbar\omega_1 = E_{in} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$$

$$\psi_{ref} = B e^{i(k_1 x + \omega_1 t)} \qquad \hbar\omega_1 = E_{ref} = E_{in}$$

שימור אנרגיה

$$\psi_{tran} = C e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \qquad \hbar\omega_2 = E_{tran} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V_0 = E_{inc}$$

רכיב פורייה אחד של חבילת גלים המתארת חלקיק "אמיתי"

בהנחה ש: $V(x \to -\infty) = 0$, $V(x \to \infty) = V_0$

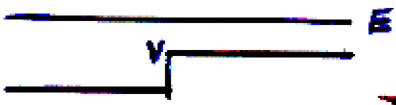
ψ אלו מתארים מצב סטציונרי, תלות ב t.

$$\to \quad J_{in} = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_1|A|^2, \quad J_{tran} = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_2|C|^2, \quad J_{ref} = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_1|B|^2$$

$$\to \quad T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \frac{k_2}{k_1}, \quad R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

רציפות ψ ו $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ $\leftarrow$ $\frac{B}{A}, \frac{C}{A} \ldots$

סיכום מחסומי פוטנציאל שונים

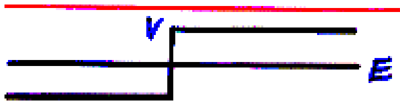


מחסום מדרגה $E > V$

$$T = \frac{4k_2/k_1}{(1 + k_2/k_1)^2} \qquad \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - \frac{V}{E}}$$

$T \to 1$ עבור $E >> V$

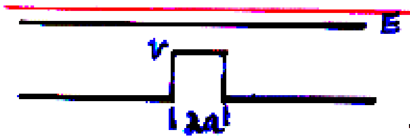
$T = 0$ " $E = V$



מחסום מדרגה $E < V$

$T = 0$

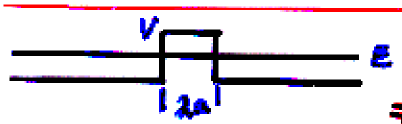
החלקיק חודר למרחק $\leftarrow$ $\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$
בתחום "האסור"



מחסום מלבני $E > V$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{V^2}{E(E-V)}\sin^2(2k_2 a) \qquad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V$$

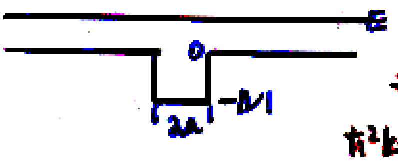
$T = 1$ עבור $k_2 a = \frac{\pi}{2} \cdot n$



מחסום מלבני $E < V$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{V^2}{E(E-V)}\sinh^2(2ka) \qquad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V - E$$

אפקט המנהרה



בור מלבני $E > 0$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{V^2}{E(E+|V|)}\sin^2(2k_2 a) \qquad \hbar^2 k_2^2/2m = E + |V|$$

אפקט רמזאואר (Ramsauer)