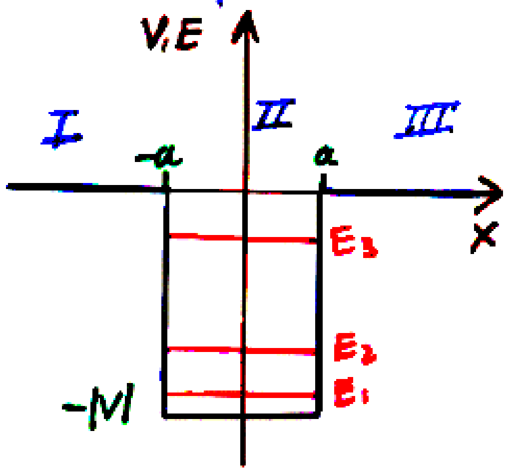
בור פוטנציאל סופי

מהן רמות האנרגיה האפשריות בבור סופי?



נניח בור ריבועי חד מימדי, נבחר פוטנציאל סימטרי: $V(x)=V(-x)$

אזור I $x<-a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx}=-|E|\varphi \qquad E<0$$

נמצאים ביחס ל ∞

$$\rightarrow \quad \varphi_I = Ae^{kx}+A'e^{-kx} \qquad k^2=\frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

∞ עבור $x\rightarrow-\infty$ לכן $A'=0$

אזור II $-a\le x\le a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx}=(|V|-|E|)\varphi \quad\rightarrow\quad \varphi_{II}=Be^{ikx}+Ce^{-ikx} \qquad K^2=\frac{2m}{\hbar^2}(|V|-|E|)$$

$V<0$ – נמצאים ביחס ל ∞

אזור III $a<x$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx}=-|E|\varphi \quad\rightarrow\quad \varphi_{III}=De^{-kx}$$

ארבעה נעלמים: A, B, C, D

ארבעה תנאי שפה:

רציפות הפונקציות:

$$Ae^{-ka}=Be^{-ika}+Ce^{ika} \quad\leftarrow\quad \varphi_I(-a)=\varphi_{II}(-a)$$

$$Be^{ika}+Ce^{-ika}=De^{-ka} \qquad \varphi_{II}(a)=\varphi_{III}(a)$$

רציפות הנגזרת הראשונה:

$$ke^{-ka}=ik(Be^{-ika}-Ce^{ika}) \qquad \varphi'_I(-a)=\varphi'_{II}(-a)$$

$$ik(Be^{ika}-Ce^{-ika})=-kDe^{-ka} \qquad \varphi'_{II}(a)=\varphi'_{III}(a)$$

+ תנאי הנירמול $\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\varphi\,dx=1$

סה"כ 5 תנאים בלתי תלויים ל 4 משתנים?

4 מישוואות לינאריות הומוגניות ל-4 משתנים.
נפתור ע"י שימוש במטריצות.

בכתיבה מטריצית:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-ika} & -e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\kappa a} \\ \kappa e^{-\kappa a} & -ike^{-ika} & ike^{ika} & 0 \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix}}_{D} \underbrace{\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}}_{V} = 0$$

בפתרון לא טריוויאלי רק אם $\det D=0$ (חוק קרמר ← וקטור R ... $A\cdot X=R \rightarrow x_i=\frac{\det A_i}{\det A}$)
כלומר רק 3 מ 4 המשוואות הן בלתי ב"ת.
← נוכל למצוא את $\frac{B}{A}, \frac{C}{A}, \frac{D}{A}$ (A !! מתוך הנירמול)

$D=D(\kappa,k,a)$ ← התנאי $\det D=0$ יתן תנאי על κ,k,a
← תנאי על E,V,a ← תנאי על $E(V,a)$
פרמטרים חופשיים

שלבים בפתרון חישוב $\det D$

1. נחליף את סדר העמודות, וסדר האברים ב V בהתאם

$$\begin{pmatrix} -e^{-ika} & -e^{ika} & e^{-\kappa a} & 0 \\ e^{ika} & e^{-ika} & 0 & -e^{-\kappa a} \\ -ike^{ika} & ike^{ika} & \kappa e^{-\kappa a} & 0 \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} & 0 & \kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ A \\ D \end{pmatrix} = 0$$

← ניצור אפסים בשני הטורים הימניים

ב. נאפס אברים בצד הימני העליון, ככל האפשר.

כיצד? א. נכפיל שורה בקבוע

ב. נחסיר/נחבר שורה אחת לשורה אחרת

בפעולות א,ב. <u>לא משנים</u> את כל המשוואות לפיתרון (לינאריות + הומוגניות)

נכפיל שורה עליונה ב $\underline{k}$ ונוסיף לה את השורה השלישית

" שניה " $\underline{k}$ " " " " הרביעית

(נכפיל שורות 3, 4 ב $\frac{\underline{k}}{ik}$)

$$\begin{pmatrix} G^* & G & 0 & 0 \\ G & G^* & 0 & 0 \\ e^{-ika} & -e^{ika} & -\frac{\underline{k}}{ik}e^{-\underline{k}a} & 0 \\ -e^{ika} & e^{-ika} & 0 & -\frac{\underline{k}}{ik}e^{-\underline{k}a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ A \\ D \end{pmatrix} = 0$$

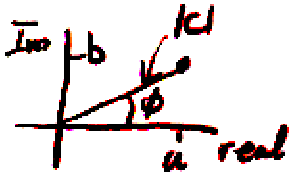
כאשר: $G\equiv(\underline{k}+ik)e^{ika}$

תוצאה: נותר איבר אחד בדטרמיננטה $\neq 0$ (שייך ל $a_{4,4}$)

$$\det D = [G^2-(G^*)^2]\left(\frac{\underline{k}}{ik}\right)^2 e^{-2\underline{k}a} = 0$$

$$\rightarrow G^2=(G^*)^2 \;, \rightarrow \; G=\pm G^*$$

כל מספר מרוכב $c=a+ib$ ניתן לרשום בצורה: $c=|c|e^{i\phi}$



כאשר $|c|=\sqrt{a^2+b^2}$, $tg\phi=\frac{b}{a}$.

נשתמש: $G\equiv(\underline{k}+ik)e^{ika}\equiv|G|e^{i(ka+\phi)}$

כאשר: $|G|=\sqrt{\underline{k}^2+k^2}$ $\qquad tg\phi=\frac{k}{\underline{k}}$

$$G = \pm G^* \longrightarrow e^{i(ka+\varphi)} = \pm e^{-i(ka+\varphi)}$$

$n=0,1,2,\ldots \qquad ka+\varphi = n\cdot\pi$ הפתרון עם סימן + נותן:

$$\to tg\,\phi = tg(n\pi - ka) = -tg(ka)$$

$$\hookrightarrow \frac{\kappa}{k} = -tg(ka)$$

$$\underline{k\,ctg(ka) = -\kappa} \qquad G/G^* = 1$$

$-1 = e^{i\pi} \to 2(ka+\varphi) = n\cdot 2\pi + \pi$ הפתרון עם סימן − נותן:

$$\to tg\,\phi = \frac{\kappa}{k} = tg\left(\frac{\pi}{2} - ka\right) = ctg(ka)$$

$$\to \underline{k\,tg(ka) = \kappa} \qquad G/G^* = -1$$

← קיים פתרון $(\neq 0)$ למשוואת שרדינגר לבור תק-מומק' סופי רק עבור אותם k ו-κ המקיימים את הקשרים לעיל.
← לכן בבור יש רמות-אנרגיה אפשריות.

מהן פונקציות הגל האפשריות? $\left(\frac{B}{A}, \frac{C}{A}, \frac{D}{A} = ?\right)$

משתי השורות האחרונות במטריצה נקבל:

$$\frac{B}{C} = -\frac{G}{G^*} = \mp 1$$

נציב $B=-C$ (עבור $G/G^*=1$) בשתי השורות האחרונות במטריצה ונקבל:

$$\frac{A}{B} = -\frac{D}{B} = -2i\sin(ka)e^{\kappa a}$$

← הפתרונות המתקבלים הם:

$$\varphi_I = -2iB\sin(ka)\,e^{\kappa(x+a)}$$

$$\varphi_{II} = 2iB\sin(kx)$$

$$\varphi_{III} = 2iB\sin(ka)\,e^{-\kappa(x-a)}$$

הפתרונות אי-זוגיים $\to \varphi(x) = -\varphi(-x)$

באותו אופן $G/G^* = -1$ ← $B=C$

$$\rightarrow \frac{A}{B} = \frac{D}{B} = 2\cos(ka)e^{\kappa a}$$

$$\varphi_I = 2B\cos(ka)e^{\kappa(x+a)}$$

$$\varphi_{II} = 2B\cos(kx)$$

$$\varphi_{III} = 2B\cos(ka)e^{-\kappa(x-a)}$$

$\varphi(x)=\varphi(-x)$ ← פתרונות זוגיים.

כיצד נקבע את B ?

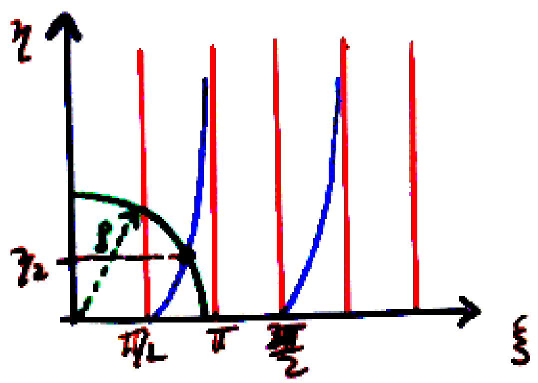
<u>מהן רמות האנרגיה</u> ?

לשם קיצור נציב $\eta = \kappa a$ $\xi = ka$

η ו ξ מקיימים את 2 המשוואות:

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta$$
$$\xi^2+\eta^2=\rho^2$$

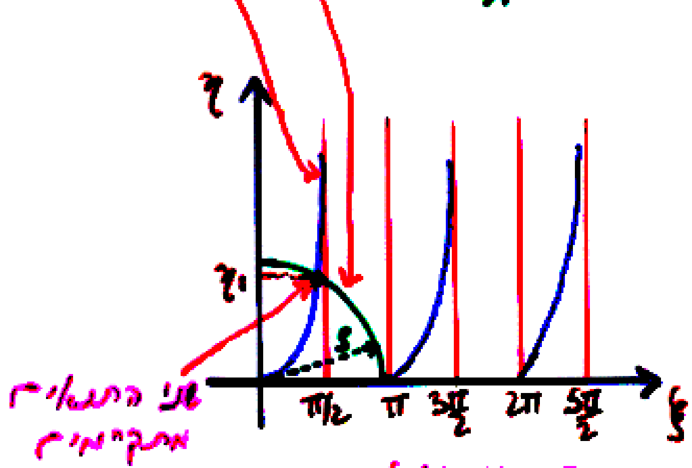
$$\xi \operatorname{tg} \xi = \eta$$
$$\xi^2+\eta^2=\frac{2ma^2|V|}{\hbar^2} \equiv \rho^2$$



פתרון אי-זוגי

קיים רק עבור $\rho > \frac{\pi}{2}$

ככל ש ρ גדל (הבור מתעמק) מספר המצבים הקשורים גדל.



פתרון זוגי

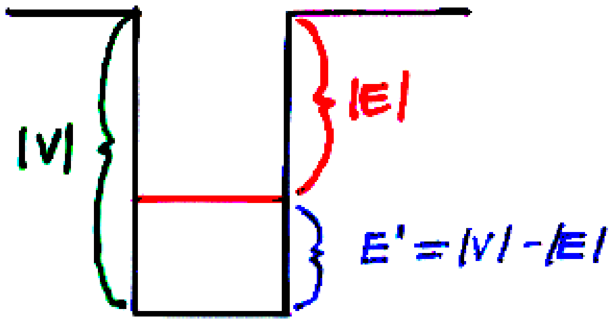
$$\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \rightarrow |E| = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\eta_1^2}{a^2}$$

קיים פתרון גם עבור $\rho \to 0$

← קיים מצב קשור גם עבור בור שעומקו $(-|V|)$ שואף לאפס.

מהן רמות האנרגיה בגבול $|V|\to\infty$?

נמדוד את האנרגיה יחסית
לתחתית הבור



$$|E| = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\eta^2}{a^2}$$

$$E' = |V| - |E| = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\xi^2}{a^2}$$

הגדרה של k^2

$|V| = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\rho^2$ ← השמוש $|V|\to\infty$ מתקבל עבור $\xi^2\to\infty$

רוב נקודות החיתוך מתקבלות ב:

$$\tan\xi = \frac{\eta}{\xi}\to\infty$$

$$\cot\xi = -\frac{\eta}{\xi}\to-\infty$$

כלומר ב: $\xi_n = n\cdot\frac{\pi}{2}$

(פתרונות זוגיים: $\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \ldots$, אי-זוגיים $\pi, 2\pi, \ldots$)

$$\to E'_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\xi_n^2}{a} = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8ma}$$ – הפתרונות של בור ∞.

מצבים לא קשורים $E>0$

5 פרמטרים ב.ת. (A,B,C,D,F) + 5 אילוצים

← אין קונטיזציה של רמות האנרגיה

בפתרון ע"י מטריצה (בשיטה לצ"ל) נקבל 4 משוואות הומוגניות ל 5 נעלמים ← 4 משוואות לא הומוגניות

ל 4 נעלמים $(\frac{B}{A}, \frac{C}{A}, \frac{D}{A}, \frac{F}{A})$ ← $\det D\neq 0$

← אין אילוץ על קשר מסוים בין ξ ל η.

תנע זוויתי

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

בהצגת המקום בקואורדינטות קרטזיות:

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

$$\rightarrow \quad \hat{\vec{L}} = -i\hbar\,\vec{r} \times \vec{\nabla}$$

במפורש:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\ldots\right.$$

יחסי חילוף

כמה מרכיבי התנ"ז ניתן לקבוע בו זמנית?

נבדוק עבור L_x ו- L_y.

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]$$

$$= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x]}_{=0} - \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z]}_{=0} + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]$$

נשתמש בקשרים: $(i \neq j)\quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_i] = i\hbar$

ובקשרים הכלליים:

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

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

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

ובמקרה שלנו:

$$\rightarrow \quad [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + 0 + 0 + 0 = -i\hbar\,\hat{y}\hat{p}_x$$

$$[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y + 0 + 0 + 0 = i\hbar\,\hat{x}\hat{p}_y$$

$$\longrightarrow \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \underline{i\hbar\,\hat{L}_z}$$

ובאופן כללי :

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=i\hbar\hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=i\hbar\hat{L}_y$$

או ברישום מקוצר :

$$\underline{\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{L}}=i\hbar\hat{\vec{L}}}$$

<u>מסקנה</u> : ניתן לקבוע בו זמנית רכיב אחד בלבד של $\vec{L}$
(מצב עצמי של L_x אינו מצב עצמי של L_y או L_z)

לחילופין, אם ניתן לקבוע בו זמנית שני רכיבים של $\vec{L}$
אזי $\vec{L}=0$.

<u>הוכחה</u> :

נניח ש φ היא פונקציה עצמית של $\hat{L}_x$ ו $\hat{L}_y$

$$\rightarrow [\hat{L}_x,\hat{L}_y]\varphi=0$$

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]\varphi=i\hbar\hat{L}_z\varphi \longrightarrow \hat{L}_z\varphi=0=0\cdot\varphi$$

הערך העצמי של $\hat{L}_z$ ← φ היא גם פונקציה עצמית של $\hat{L}_z$

עפ"י עקרון אי הוודאות, אם $[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C}$
אזי $\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}|\langle C\rangle|$

מהו הערך העצמי של L_y ו L_x ?
נשתמש בעקרון אי הוודאות $[\hat{L}_x,\hat{L}_z]=-i\hbar\hat{L}_y$

$$\rightarrow \Delta L_x\Delta L_z\geq\frac{\hbar}{2}|\langle L_y\rangle|$$

מכיוון ש φ היא פונקציה עצמית של $\hat{L}_z$ (עם ערך עצמי 0) ← $\Delta L_z=0$

$$\rightarrow |\langle L_y\rangle|=0$$

מכיוון ש φ היא פונקציה עצמית של $\hat{L}_y$ ← $\langle L_y\rangle=L_y=0$

באותו אופן : $L_x=0$ ← $\underline{\vec{L}=0}$

למדנו שלא ניתן לקבוע בו זמנית יותר מרכיב אחד של $\vec{L}$

כן ניתן לקבוע בו זמנית את L_i (x,y,z) ו $|\vec{L}|$

הוכחה:

הגודל של $\vec{L}$ נתון ע"י: $|\vec{L}| = \sqrt{\vec{L}\cdot\vec{L}} = \sqrt{L^2}$

נראה ש $\hat{L}^2$ חילופי עם $\hat{L}_i$

הביטוי ל $\hat{L}^2$ הוא: $\hat{L}^2 = \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

נבדוק לדוגמא את יחס החילוף עם $\hat{L}_z$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2]$$

$$= [\hat{L}_z, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_z, \hat{L}_y^2] + \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_z^2]}_{=0}$$

$$= \hat{L}_x[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_x + \hat{L}_y[\hat{L}_z, \hat{L}_y] + [\hat{L}_z, \hat{L}_y]\hat{L}_y$$

$$= \hat{L}_x i\hbar \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x + \hat{L}_y(-i\hbar)\hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y = 0$$

כנ"ל

$$[\hat{L}_y, \hat{L}^2] = 0 \qquad [\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0$$

אז ברישום מקוצר

$$\underline{[\hat{\vec{L}}, \hat{L}^2] = 0}$$

לא כל פונקציה עצמית של $\hat{L}^2$ היא פונקציה עצמית של $\hat{L}_i$ (במקרה מנוון), וההפך.

הערכים העצמיים של התנע הזויתי

ניתן להסיק את הערכים העצמיים האפשריים לתנ"ז בהסתמך על יחסי החילוף בלבד (ללא שימוש בפונקציות עצמיות מפורשות ובביטוי המפורש לאופרטורים)

נוסיף את קיומם האפשרי של ערכים עצמיים לתנ"ז שלא ניתן לקבלם מ- $\psi(\vec r)$ - הפתרונות למשוואת שרדינגר

≡ ספין, תנ"ז 'פנימי' ('עצמי'), $\vec{S}$

נגדיר באופן כללי $\hat{\vec J}=\hat{\vec L}+\hat{\vec S}$

כאשר $\hat{\vec J}$ מקיים את האלגברה של $\hat{\vec L}$:

$$\hat{\vec L}\times\hat{\vec L}=i\hbar\hat{\vec L}\ ,\quad [\hat{\vec L},\hat L^2]=0$$

נדון בשיטה הדומה לשיטה במתנד הרמוני

נגדיר: $\hat J_+\equiv\hat J_x+i\hat J_y$, $\hat J_-=\hat J_+^\dagger=\hat J_x-i\hat J_y$

"אופרטורי סולם"

פשוט להראות ש:

$$[\hat J_z,\hat J_+]=\hbar\hat J_+\ ,\quad [\hat J_z,\hat J_-]=-\hbar\hat J_-$$

$$[\hat J^2,\hat J_\pm]=0\ ,\quad [\hat J_+,\hat J_-]=2\hbar\hat J_z\ ,\quad \hat J^2=\hat J_\mp\hat J_\pm+\hat J_z^2\pm\hbar\hat J_z$$

נניח: $\hat J_z\varphi_m=\hbar m\varphi_m$ פונקציה עצמית של J_z

נוכיח ש $m=n$, $n=0,1,2\ldots,-1,-2\ldots$

או $m=n+\frac{1}{2}$

הוכחה

$$\hat J_z\hat J_+\varphi_m=(\hbar\hat J_++\hat J_+J_z)\varphi_m=(\hbar\hat J_++\hat J_+\hbar m)\varphi_m$$

$$\to\ \hat J_z(\hat J_+\varphi_m)=\hbar(m+1)\hat J_+\varphi_m\ \longrightarrow\ \hat J_+\varphi_m=\varphi_{m+1}$$

עד כדי נירמול