תכונה נוספת שכל סט שלם מקיים:

לכן:

$$|\varphi\rangle = \sum_{l,m} a_{l,m}\,|Y_{lm}\rangle \qquad a_{lm} = \langle Y_{lm}|\varphi\rangle$$

$\Leftarrow$

$$|\varphi\rangle = \sum_{l,m} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}|\varphi\rangle$$

נבחר $|\varphi\rangle = 1$ ונקבל:

$$\underline{\sum_{l,m} |Y_{lm}\rangle\langle Y_{lm}| = 1}$$

חישוב הפונקציות העצמיות באמצעות $\hat{L}_\pm$

נתחיל מהפתרון מהצגה:

$$Y_l^m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}\Theta_l^m(\theta)$$

נשתמש בקשר:

$$\hat{L}_+ Y_l^l = 0$$

$$\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) e^{il\varphi}\Theta_l^l(\theta) = 0$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial\Theta}{\partial\theta} = l\,\mathrm{ctg}\,\theta\cdot\Theta$$

ונקבל:

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\ln\Theta = \frac{\partial}{\partial\theta}\ln(\sin^l\theta) \;\rightarrow\; \underline{\Theta_l^l = A_{ll}\sin^l\theta}$$

נבנה את שאר ה Y_l^m ע"י הפעלה חוזרת של $\hat{L}_-$

$$Y_l^{l-1} = \hat{L}_- Y_l^l = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\overbrace{\sin^l\theta\, e^{il\varphi}}^{Y_l^l}$$

$$= -\hbar\, e^{i(l-1)\varphi}\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + l\,\mathrm{ctg}\,\theta\right)\sin^l\theta}_{}$$

ב"ת ב φ

לכל $f(\theta)$ מתקיים:

$$\left(\frac{d}{d\theta} + l\,\mathrm{ctg}\,\theta\right)f(\theta) = \frac{1}{\sin^l\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin^l\theta\, f(\theta)\right]$$

ולכן נקבל:

$$Y_\ell^{\ell-1} = -c\,\frac{e^{i(\ell-1)\varphi}}{\sin^\ell\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin^{2\ell}\theta\right)$$

ובאותו אופן:

$$Y_\ell^{\ell-2} = \hat{L}_- Y_\ell^{\ell-1} = \hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{-\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y_\ell^{\ell-1}$$

$$= c' e^{i(\ell-2)\varphi}\underbrace{\left(\frac{-\partial}{\partial\theta} - (\ell-1)\,\mathrm{ctg}\theta\right)}\frac{1}{\sin^\ell\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin^{2\ell}\theta\right)$$

$$= c' e^{i(\ell-2)\varphi}\overbrace{\frac{1}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d\theta}}\left[\sin^{\ell-1}\theta\cdot\frac{1}{\sin^\ell\theta}\left(\frac{d}{d\theta}\sin^{2\ell}\theta\right)\right]$$

$$Y_\ell^{\ell-2} = c''(-1)^2\frac{e^{i(\ell-2)\varphi}}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin^{2\ell}\theta\right)\right]$$

נעבור למשתנה $\mu \equiv \cos\theta$, ונקבל:

$$Y_\ell^{\ell-1} = c'\frac{e^{i(\ell-1)\varphi}}{\sin^{\ell-1}\theta}\frac{d}{d\mu}\left[(1-\mu^2)^\ell\right], \quad Y_\ell^{\ell-2} = c''\frac{e^{i(\ell-2)\varphi}}{\sin^{\ell-2}\theta}\frac{d^2}{d\mu^2}\left[(1-\mu^2)^\ell\right]$$

ובאופן כללי:

$$\underline{Y_\ell^m = c\,\frac{e^{im\varphi}}{(1-\mu^2)^{m/2}}\left(\frac{d}{d\mu}\right)^{\ell-m}\left[(1-\mu^2)^\ell\right]}$$

עבור $m=\ell$ $\quad |Y_\ell^\ell|^2 \propto \sin^{2\ell}\theta$

← עבור ℓ גדול החלקיק נמצא בעיקר סביב $\theta \approx 90^\circ$

מתאים לגבול הקלאסי של תנועה במישור X-Y (תנ"ז בכיוון z)

הפונקציות העצמיות של $\hat{L}_x$ ו $\hat{L}_y$

כתשובה מורכבת במצב $l=1,\ m=1$, מהם הערכים שאפשר לקבל במדידת L_x, וההסתברות לכל אחד מהם?

הערכים העצמיים → הפונקציות העצמיות

$$\hat{L}_x X_l^n(\theta,\varphi)=\hbar n X_l^n(\theta,\varphi)$$

פיתוח בפונ' עצמיות של $\hat{L}^2,\hat{L}_z$ — $X_l^n(\theta,\varphi)=\sum_m a_m Y_l^m(\theta,\varphi)$

a_m^2 - ההסתברות למדידת $L_z=\hbar m$ במצב עצמי של L_x $(=\hbar n)$

משתמשים בקשר:

$$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$$

$$\hat{L}_\pm Y_l^m=c_{lm}^\pm Y_l^{m\pm 1}$$

ידוע l
מהו $c^\pm$?

נקבל מהתנאי לנורמליזציה:

$$\langle\hat{L}_+ Y_l^m|\hat{L}_+ Y_l^m\rangle=1$$

משתמשים בקשר $\hat{L}_+^\dagger=\hat{L}_x^\dagger-i\hat{L}_y^\dagger=\hat{L}_-$ ונקבל:

$$\rightarrow \langle Y_l^m|\hat{L}_-\hat{L}_+ Y_l^m\rangle=1$$

$$\hat{L}_-\hat{L}_+=\hat{L}^2-\hat{L}_z^2-\hbar\hat{L}_z$$

$$\langle Y_l^m|\hat{L}^2-\hat{L}_z^2-\hbar\hat{L}_z|Y_l^m\rangle=\hbar^2[l(l+1)-m^2-m]$$

$$=\langle c_{lm}^+ Y_l^{m+1}|c_{lm}^+ Y_l^{m+1}\rangle=\hbar^2[l(l+1)-m(m+1)]=(c_{lm}^+)^2$$

$$\rightarrow \underline{c_{lm}^\pm=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}}$$

מהו $\langle L_x\rangle$ ו-ΔL_x במצב עצמי של $\hat{L}_z$?

$$\langle L_x\rangle = \langle Y_\ell^m|\hat{L}_x|Y_\ell^m\rangle$$
$$= \tfrac{1}{2}\langle Y_\ell^m|\hat{L}_+ + \hat{L}_-|Y_\ell^m\rangle$$
$$= \tfrac{1}{2}\langle Y_\ell^m|C_{\ell m}^+ Y_\ell^{m+1}\rangle + \tfrac{1}{2}\langle Y_\ell^m|C_{\ell m}^- Y_\ell^{m-1}\rangle$$

$$\underline{\langle L_x\rangle = 0}$$

$$\hat{L}_x^2 = \tfrac{1}{4}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^2 = \tfrac{1}{4}(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \underbrace{\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+}_{2(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)})$$

$$\left.\begin{aligned}\hat{L}_-\hat{L}_+ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z\\ \hat{L}_+\hat{L}_- &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z\end{aligned}\right\} \rightarrow 2(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)$$

$$\rightarrow \langle L_x^2\rangle = \langle Y_\ell^m|\hat{L}_x^2|Y_\ell^m\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar^2[\ell(\ell+1) - m^2]$$

$$\rightarrow \underline{\Delta L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{\ell(\ell+1) - m^2}}$$

ניתן להסיק בצורה מיידית משיקול סימטריה

1. מלבד הכיוון $\hat{z}$, אין כיוון מועדף במישור X-Y ←
$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$

2. מאותה סיבה: $\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle$
אבל $\langle L^2\rangle = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + \langle L_z^2\rangle$

$$\rightarrow \langle L_x^2\rangle = \tfrac{1}{2}(\langle L^2\rangle - \langle L_z^2\rangle)$$
$$= \frac{\hbar^2}{2}[\ell(\ell+1) - m^2]$$

מכאן את הממוצע, ואת רוחב ההתפלגות של L_x

מהי ההתפלגות עצמה?

$[\hat L^2,\hat L_x]=0$ ← הפונקציות העצמיות של $\hat L_x$ הן גם
בונ' עצמיות של $\hat L^2$ עם ערך עצמי $\hbar^2\ell(\ell+1)$

נניח $\ell=1$ ←

$$X(\theta,\varphi)=a_1Y_1^1+a_0Y_1^0+a_{-1}Y_1^{-1}$$ - הפונקציה העצמית של $\hat L_x$

מהם a_i?

$$\hat L_x X=\overbrace{\hbar n}^{\text{הערך העצמי של } \hat L_x} X$$

$$\frac{1}{2}(\hat L_+ + \hat L_-)(a_1Y_1^1+a_0Y_1^0+a_{-1}Y_1^{-1})=\hbar n(a_1Y_1^1+a_0Y_1^0+a_{-1}Y_1^{-1})$$

נשתמש בקשרים:

$$\hat L_+Y_1^0=\sqrt{2}\hbar Y_1^1,\quad \hat L_+Y_1^{-1}=\sqrt{2}\hbar Y_1^0,\quad \hat L_-Y_1^0=\sqrt{2}\hbar Y_1^{-1},\quad \hat L_-Y_1^1=\sqrt{2}\hbar Y_1^0$$

ונקבל:

$$a_1Y_1^0+a_0Y_1^1+a_0Y_1^{-1}+a_{-1}Y_1^0=\sqrt{2}n(a_1Y_1^1+a_0Y_1^0+a_{-1}Y_1^{-1})$$

מכיון שבסיס Y_ℓ^m הנו אורתונורמלי, השיוויון מתקיים עבור המקדמים של כל אחד מה Y_ℓ^m בנפרד.

$$\left.\begin{aligned} Y_1^1 &\to & a_0-\sqrt{2}n a_1 &=0\\ Y_1^0 &\to & a_1+a_{-1}-\sqrt{2}n a_0 &=0\\ Y_1^{-1} &\to & a_0-\sqrt{2}n a_{-1} &=0 \end{aligned}\right\}\to\begin{pmatrix}-\sqrt{2}n & 1 & 0\\ 1 & -\sqrt{2}n & 1\\ 0 & 1 & -\sqrt{2}n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_0\\ a_{-1}\end{pmatrix}=0$$

$\sqrt{2}n(2n^2-2)=0$ ← מהתנאי להתאפסות הדטרמיננטה נקבל

$n=0,1,-1$ שלושה ערכים עצמיים ←

הפונקציות העצמיות:

$n=0$ $\quad X_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^1-Y_1^{-1})$

$n=1$ $\quad X_1=\frac{1}{2}(Y_1^1+\sqrt{2}Y_1^0+Y_1^{-1})$

$n=-1$ $\quad X_{-1}=\frac{1}{2}(Y_1^1-\sqrt{2}Y_1^0+Y_1^{-1})$

$\langle X|X\rangle=1$ מקדמי נירמול

<u>תשובה:</u> הערכים האפשריים במדידת L_x הם $0, \pm\hbar$

מה ההסתברות לכל אחת מהם? (במצב בו L_z ידוע)

צריך לפתח את $Y(X)$

$m=0 \quad Y_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_1 - X_{-1})$

$m=1 \quad Y_1^1 = \frac{1}{2}(X_1 + \sqrt{2}X_0 + X_{-1})$

$m=-1 \quad Y_1^{-1} = \frac{1}{2}(X_1 - \sqrt{2}X_0 + X_{-1})$

עבור $m=1,-1$ נקבל

L_x	$P_r(L_x)$
$-\hbar$	0.25
0	0.5
$\hbar$	0.25

עבור $m=0$ $\quad P_r(\hbar)=P_r(-\hbar)=0.5$

בכל אחת מהאפשרויות (מצב ב L_z ידוע) נקבל $\langle L_x\rangle=0$

לאחר מדידת L_x נרצה ונמדוד את L_z. אם התחלנו במצב $L_z=0$ מה הסיכוי למדוד שוב (לאחר מדידת L_x) $L_z=0$?

מדוע $Y_\ell^m \propto e^{im\varphi}$ מתאר תנע סביב ציר $\hat{z}$?
(איפה כאן התנועה סביב ציר z?)

הערה לסיום – בנושא קוונטיזציה של האנרגיה, התלויה במידות (מימדים, צורת הפוטנציאל), הקוונטיזציה של התנע הזוויתי היא <u>מוחלטת</u>, בדומה לקוונטיזציה של מסה ומטען בטבע (היום יש קשר בין הקוונטיזציות הנ"ל?)

בעיות בשלושה מימדים

פתרון משוואת שרדינגר בשלושה מימדים

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

משוואה דיפרנציאלית חלקית (בד"כ מסובך לפתור)

תזכורת: חלקיק חופשי בקואורדינטות קרטזיות

$$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} = \frac{\hat p_x^2}{2m}+\frac{\hat p_y^2}{2m}+\frac{\hat p_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2$$

$$\hat H\varphi = E\varphi \longrightarrow \vec\nabla^2\varphi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi$$

$\varphi = X(x)Y(y)Z(z)$ שיטת הפרדת משתנים

$$\to X''+k_x^2X=0\ ,\quad Y''+k_y^2Y=0\ ,\quad Z''+k_z^2Z=0$$

$$k_x^2+k_y^2+k_z^2=k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\varphi(x,y,z)=Ae^{i(k_x\cdot x+k_y\cdot y+k_z\cdot z)}$$

$$\to \varphi_{\vec k}(\vec r)=Ae^{i\vec k\cdot\vec r}\ ,\quad \underline{\varphi_{\vec k}(\vec r,t)=Ae^{i(\vec k\cdot\vec r-\omega t)}}\ ,\quad \omega=\frac{E_k}{\hbar}$$

$\vec k\cdot\vec r=const$ על פני מישור ← גל מישורי (ניצב ל $\vec k$)

$\vec k\cdot\vec r-\omega t=const$ על פני מישור הנע במהירות $V_{ph}=\frac{\omega}{|k|}$ בכיוון $\vec k$.

כיצד ננרמל את $\varphi_{\vec k}(\vec r)$?

משתמשים בנרמול $\langle\varphi_{\vec k}|\varphi_{\vec k'}\rangle=\delta(\vec k-\vec k')$ (מדוע לא $\langle\varphi|\varphi\rangle=1$?)

כלומר

$$\rightarrow\quad A^2\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}=\delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

כאשר:

$$\int d\vec{r}\equiv\iiint dx\,dy\,dz\ ,\qquad \delta(\vec{k}-\vec{k}')=\delta(k_x-k_x')\cdot\delta(k_y-k_y')\cdot\delta(k_z-k_z')$$

לתזכורת:

$$\int f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx=f(x_0)\ ,\qquad f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx}\bar{f}(k)\,dk$$

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

אם $\bar{f}(k)=\delta(k-k')$ מהו $f(x)$?

נציב בהתמרת פוריה:

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx}\delta(k-k')\,dk=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik'x}$$

ומהי לכן ההצגה האינטגרלית של $\delta(k-k')$?

נציב שוב את ההתמרה:

$$\bar{f}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik'x}\,dx=\delta(k-k')$$

$$\rightarrow\quad \delta(k-k')=\frac{1}{2\pi}\int e^{-i(k-k')x}\,dx$$

ובשלושה מימדים:

$$\delta(\vec{k}-\vec{k}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\,d\vec{r}$$

$$\rightarrow\quad A^2=\frac{1}{(2\pi)^3}\qquad \underline{\varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}}$$

חבורת גלים כלשהי $\Psi(\vec{r},t)$ ניתן לייצג ע"י

$$\Psi(\vec{r},t)=\int b(\vec{k},t)\,\varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\,d\vec{k}\ ,\qquad b(\vec{k},t)=\langle\varphi_{k}|\Psi\rangle$$

$|b(\vec{k},t)|^2d\vec{k}$ – ההסתברות למצוא תנע בתחום $\vec{k},\ \vec{k}+d\vec{k}$

חלקיק חופשי בקואורדינטות כדוריות

משוואת שרדינגר:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Phi = E\cdot\Phi$$

$$\vec{\nabla}^2 = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r}_{?} + \frac{1}{r^2}\underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{=-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}}$$

אז מה 'לצבוע' את האבר הראשון שמתאים בקשר

$$L^2 = (\vec{r}\times\vec{p})^2 = (\vec{r}\times\vec{p})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$

מאלגברה וקטורית מתקבל:

$$\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C}) = \vec{B}\cdot(\vec{C}\times\vec{A})$$

$$(\vec{r}\times\vec{p})\cdot(\vec{r}\times\vec{p}) = \vec{r}\cdot(\vec{p}\times(\vec{r}\times\vec{p}))$$

(הסדר חשוב! $\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C}) \neq (\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}$)

ובנוסף שימוש ב:

$$\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C}) = (\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B} - (\vec{A}\cdot\vec{B})\vec{C}$$

$$\vec{p}\times(\vec{r}\times\vec{p}) = (\vec{p}\cdot\vec{p})\vec{r} - (\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{p}$$

ונקבל סה"כ:

$$L^2 = r^2p^2 - (\vec{r}\cdot\vec{p})^2$$

$$\rightarrow E = \frac{p^2}{2m} = \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{(\vec{r}\cdot\vec{p})^2}{2mr^2} = \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{p_r^2}{2m}$$

כלומר האבר הראשון הוא: $-\frac{p_r^2}{\hbar^2}$

<u>מהו</u> $\hat{p}_r$? ע"פ אנלוגיה למכניקה קלאסית:

$$\hat{p}_r \overset{?}{=} \frac{1}{r}(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})$$

<u>אבל</u> $\vec{r}\cdot\vec{p}$ אינו אופרטור הרמיטי, הצירוף ההרמיטי הוא:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2r}(\hat{r}\cdot\hat{p} + \hat{p}\cdot\hat{r})$$

$$\rightarrow \underline{\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r} \qquad \hat{p}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)$$

$$\rightarrow \underline{\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r}$$

דרך חלופית למציאת האופרטורים $\hat{P}_r$ ו $\hat{P}_r^2$

ע"י פיתוח $\hat{L}^2$ באופן ישיר כמכפלת אופרטורים (הסדר חשוב!)

$$\rightarrow \hat{\vec{L}}^2 = r^2\hat{\vec{p}}^2 - (\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2 + i\hbar\,\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}$$

← נותן ביטוי כנ"ל ל $\hat{\vec{p}}^2$.

מהן הפונקציות העצמיות של $\hat{P}_r$?

$$\hat{P}_r\phi_k = \hbar k\cdot\phi_k$$

$$-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial(\phi_k\cdot r)}{\partial r} = \hbar k\phi_k$$

נגדיר $U=\phi\cdot r$ ← $\frac{\partial U}{\partial r} = ik\cdot U$

$$\rightarrow U = Ae^{ikr} \rightarrow \underline{\phi_k = A\frac{e^{ikr}}{r}}$$

והפתרון התלוי בזמן: $\phi_k = A\frac{e^{i(kr-\omega t)}}{r}$

גל כדורי יוצא - תנ"צ $=\infty$ (סימטריה כדורית)

ϕ_k הנ"ל הן הפתרון למשוואת שרדינגר לחלקיק חופשי עם $\vec{L}=0$.

פתרון לא פיזיקלי עבור מצב ב"ת בזמן (מדוע?)

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \qquad \vec\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r},\ \vec\nabla_r\cdot = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\cdot,\ \nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\cdot\right)$$

$$\rightarrow \nabla\phi_k = ik\phi_k - \frac{\phi_k}{r} \qquad \psi^*\psi = A^2/r^2$$

$$\rightarrow \vec{J} = J_r = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\left(ik\psi - \frac{\psi}{r}\right) - \psi\left(-ik\psi^* - \frac{\psi^*}{r}\right)\right] = \frac{\hbar k}{m}\frac{A^2}{r^2}$$ – שטף זרם ההסתברות

$$\vec\nabla\cdot\vec{J} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\cdot\frac{\hbar k}{m}\frac{A^2}{r^2}\right) = 0 \text{ for } r\neq 0$$

$$\int_0^R \vec\nabla\cdot\vec{J}\,dv = \int_{r=R}\vec{J}\cdot d\vec{S} = \frac{\hbar k A^2}{m}\int\frac{r^2}{r^2}d\Omega = \frac{4\pi\hbar k A^2}{m}$$ אבל עבור $r=0$

משפט גאוס

$$\rightarrow \underline{\vec\nabla\cdot\vec{J} = -\frac{\partial\rho}{\partial t} = C\,\delta(\vec{r})}$$

פונקצית הגל הרדיאלית לחלקיק עם תנע-זויתי

$$\left(\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\right)\varphi_{k\ell m}=E_{k\ell m}\varphi_{k\ell m}$$

נפתור ע"י הפרדת משתנים:

$$\varphi_{k\ell m}=R_{k\ell}(r)\,Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$\rightarrow\quad -\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r\cdot+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]R_{k\ell}(r)=\frac{2mE_{k\ell m}}{\hbar^2}\cdot R_{k\ell}(r)$$

נציב $E\equiv\frac{\hbar^2k^2}{2m}$, $x\equiv kr$ ונקבל

$$R''+\frac{2}{x}R'+\left(1-\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right)R=0$$

כאשר $R=R(x)$, $R'=\frac{dR}{dx}$

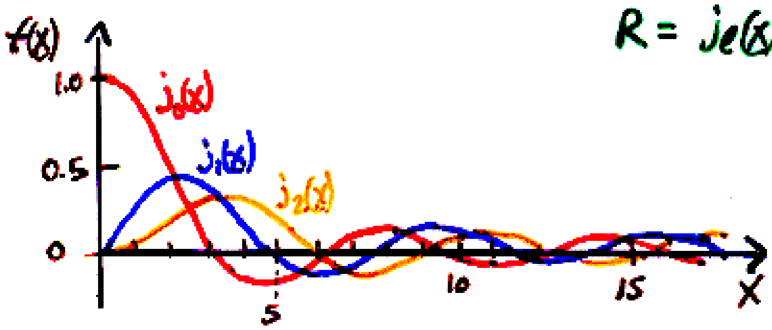
ניתן לפשט זאת ע"י הצבה $U=x\cdot R$

$$\rightarrow\quad U''+\left(1-\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right)U=0$$

המשוואה הדיפרנציאלית של בסל (Bessel)
משוואה דיפרנציאלית רגילה לינארית הומוגנית מסדר שני.

פתרונות

פונקציות בסל הספריות $R=j_\ell(x)$



$$j_0(x)=\frac{\sin x}{x}$$

$$j_1(x)=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x}$$

$$j_2(x)=\left(\frac{3}{x^3}-\frac{1}{x}\right)\sin x-\frac{3}{x^2}\cos x$$

באופן אסימפטוטי

$$j_\ell(x)\xrightarrow[x\to 0]{}\frac{x^\ell}{1\cdot3\cdot5\cdots(2\ell+1)}$$

$$j_\ell(x)\xrightarrow[x\to\infty]{}\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{\ell\pi}{2}\right)$$

קיים פתרון נוסף,
פונקציות נוימן (Neumann), אבל
מצוין ! $n_\ell(x)\xrightarrow[x\to 0]{}x^{-(\ell+1)}$
הפתרונות לא מתאימים לבעיה עבור $\ell>0$.

פונקציות בסל מאונכות:
$$\int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r)\, r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k')$$

והן מתקבלות מהקשר:
$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{\sin x}{x}\right)$$

פונקציות הגל העצמיות של $\hat{H}$ לחלקיק חופשי הן לכן

$$\underline{\varphi_{k\ell m}(r,\theta,\varphi) = |k\ell m\rangle = j_\ell(kr)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)}$$

במצב זה

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1), \quad L_z = \hbar m$$

פונקצית הגל מוגדרת חד ערכית ע"י k, ℓ, m.

לחלופין, חלקיק חופשי בקואורדינטות קרטזיות מתואר ע"י:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = |\vec{k}\rangle \qquad P_x = \hbar k_x, \quad P_y = \hbar k_y, \quad P_z = \hbar k_z$$

ופונקצית הגל מוגדרת חד ערכית ע"י k_x, k_y, k_z.

מהו התנע הזויתי של גל מישורי? (בעיית פיזור)

נפתח את הגל המישורי כסכום של גלים כדוריים, לחלקיק עם $|\vec{k}|$ נתון:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m}(\vec{k})\, \varphi_{k\ell m}$$

מקדמי הפיתוח נתונים ע"י:
$$a_{\ell m}(\vec{k}) = 4\pi i^\ell\, Y_\ell^{m*}(\alpha,\beta)$$

כאשר α, β הם θ, φ של $\vec{k}$.

הסיכוי למדידת $L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$
$$\rightarrow P(\ell^2) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} |a_{\ell m}|^2 = (4\pi)^2 \sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_\ell^m(\alpha,\beta)|^2 \; -$$

הסיכוי למדידת $L_z = \hbar m$
$$P(L_z) = (4\pi)^2 \sum_{\ell=|m|}^{\infty} |Y_\ell^m(\alpha,\beta)|^2 \; -$$

ניתן לבחור (ללא הגבלת הכלליות) $\alpha = 0 \Leftarrow \vec{k}$ בכיוון z.

סימטריה ב $\varphi \Leftarrow m=0$, ולכן $Y_\ell^m \to P_\ell$ ונקבל

$$\underline{P(\ell^2) = (2\ell+1)^2} \quad ?$$

חלקיק בבור פוטנציאל כדורי אינסופי

$$V(r) = 0 \qquad r<a$$
$$\quad\;\; = \infty \qquad r \geq a$$

$j_\ell(ka)=0$ ← תנאי השפה הנ"ל

מתקיים עבור סט $\{X_{\ell n}\}$ $(X=ka)$

n \ ℓ	0 (S)	1 (P)	2 (D)	3 (F)	4 (G)	5
1	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36
2	6.28	7.73	9.10	10.42	...	
3	9.42	...				

סימון המצב ←

← סט בדיד של $\{K_{n\ell}\}$ ולכן סט בדיד של אנרגיות

לדוגמא: עבור $\ell=0$

$$j_0(x)=\frac{\sin x}{x}$$

$\rightarrow X_{n0} = n\cdot\pi \qquad n=1,2,\dots$

$$\rightarrow E_n = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot n^2 \rightarrow E_{min} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

(עבור חלקיק בתיבה ברוחב a קיבלנו:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2) \rightarrow E'_{min} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot 3 = 3E_{min}\ )$$

סדר רמות האנרגיה עבור הנ"ל!

$n \quad \ell$

1S, 1P, 1D, 2S, 1F, 2P, 1G, 2D, ...

בור פוטנציאל סופי

$$V(r) = -V_0 \quad r<a \longrightarrow U''(x)+K^2U(x)=0 \qquad K^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$
$$\quad = 0 \quad r\geq a \qquad U''(x)+k^2U(x)=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

בדומה ל ∞

משוואות זהות לאלו של בור חד מימדי סופי

מהתנאי $U(0)=0$ ← פתרונות אי זוגיים בלבד

הדרישה למצב קשור אחד לפחות $V_0a^2>\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$.