דף נוסחאות / סיכום

פיסיקה קוונטית (115203)

בהצלחה

חן אבינדב
חורף תשס"ו

קבועים ויחידות

$h = 6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$

$\hbar = 1.054\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$

$1\,\mathrm{eV} = 1.602\times10^{-19}\ \mathrm{J}$

$c = 3\times10^{8}\ \mathrm{m/s}$

$e = -1.602\times10^{-19}\ \mathrm{C}$

$m_e = 9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg} = 0.511\,\mathrm{MeV/c^2}$

$m_p = 1.672\times10^{-27}\ \mathrm{kg} = 938.3\,\mathrm{MeV/c^2}$

$m_n = 1.672\times10^{-27}\ \mathrm{kg} = 939.6\,\mathrm{MeV/c^2}$

$hc = 12{,}400\ \mathrm{A\cdot eV},\quad \hbar c = 1{,}973\ \mathrm{A\cdot eV}$

$\lambda_c = \dfrac{h}{m_e c} = 0.0243\,\mathrm{A},\ \alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c} \approx \dfrac{1}{137}$

$a_0 = \dfrac{\lambda_c}{2\pi\alpha} = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\,\mathrm{A}$

$E_0 = \dfrac{e^4 m_e}{2\hbar^2} = 13.6\,\mathrm{eV}$

יחסות

$$E_{total}^2 - p^2c^2 = \left(mc^2\right)^2 = E_{rest}^2$$

פיזור בראג

התנאי להתאבכות בונה הוא:

$$2a\sin\theta = n\lambda$$

כאשר λ הוא אורך הגל של החלקיקים הפוגעים (לפי דה-ברולי, $\lambda = h/p$), n הוא סדר ההתאבכות, a הוא המרחק בין מישורי האטומים ו-θ היא הזווית של החלקיקים הפוגעים עם המישור.

מודל בוהר לאטום המימן

הנחת היסוד – התנע הזוויתי מקוונטט:

$$\oint \vec{L}\cdot d\vec{r} = nh$$

כאשר עבור מסלול מעגלי מקבלים $L = mvr = n\hbar$.

מפה לשם מגיעים לקשרים: (Z הוא מספר הפרוטונים)

$$r_n = \frac{a_0}{Z}n^2,\quad E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}$$

ובמעבר בין רמות אנרגיה נפלט פוטון עם אורך גל:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 Z^2}{hc}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = R_H Z^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

האפקט הפוטואלקטרי

עבור פוטון מתקיים:

$$E_\gamma = h\nu = p_\gamma c$$

אנרגיה של אלקטרון שהשתחרר מהמתכת:

$$E_k = h\nu - W$$

אפקט קומפטון

$$\lambda_{after} - \lambda_{before} = \frac{h}{mc}(1-\cos\theta)$$

כאשר m היא מסת החלקיק שממנו פוזרה הקרינה, θ זווית פיזור הקרינה ביחס לכיוון המקורי שלה.

פונקציית דלתא ומדרגה

מוגדרת תחת סימן האינטגרל:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$$

ומקיימת את התכונות הבאות:

$$\delta(x) = \delta(-x),\quad \delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left|g'(x_i)\right|}$$

כאשר $\{x_i\}$ הם השורשים של $g(x)$, ומתקיים $g'(x_i) \neq 0$.

פונקציית דלתא מוגדרת גם כנגזרת של פונקציית המדרגה:

$$\delta(x) = \theta'(x),\qquad \theta(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ 1 & x>0 \end{cases}$$

אודות בסיסים

בסיס $\{e_i\}$ שמקיים $\langle e_i, e_j\rangle = \delta_{ij}$ נקרא בסיס אורתונורמלי. בבסיס זה מתקיים לכל וקטור v:

$$v = \sum_i c_i e_i,\qquad c_i = \langle e_i, v\rangle$$

בסיס זה יקרא גם שלם, אם מתקיים:

$$\sum_i (e_i)_k (e_i)_l = \delta_{kl}$$

$$\sum_i e_i \otimes e_i = Identity$$

טור פורייה

עבור פונקציה מחזורית $f(x) = f(x+L)$,

מגדירים את פונקציות הבסיס $e_n(x) = e^{ik_n x}$,

כאשר $k_n = 2\pi n/L$. בבסיס זה ניתן לרשום:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e_n(x),\quad c_n = \int_0^L e_n^*(x) f(x)\,dx$$

לפי שוויון בסל, מתקיים:

$$\frac{1}{L}\int_0^L |f(x)|^2\,dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2$$

אופרטורים הרמיטיים

אופרטור ייקרא הרמיטי אם הוא מקיים $T = T^\dagger$. כל הערכים העצמיים של אופרטורים כאלה הם ממשיים, ווקטורים עצמיים המתאימים לערכים עצמיים שונים הם אורתוגונליים.

אופרטורים אוניטריים

אופרטור ייקרא אוניטרי אם הוא מקיים $T^{-1} = T^\dagger$, והם מקיימים גם $\langle Tu|Tv\rangle = \langle u|v\rangle$, כלומר הם משמרים מכפלה פנימית.

מטריצה מייצגת

$$T = \sum_{i,j} T_{ij}\,|e_i\rangle\langle e_j|,\quad T_{ij} = \langle e_i|Te_j\rangle$$

כאשר i מייצג שורה ו-j עמודה.

פירוק ספקטרלי

עבור אופרטור נורמלי T ($T^\dagger T = TT^\dagger$), עם ערכים עצמיים $\{\lambda_i\}$ ווקטורים עצמיים אורתונורמליים $\{|v_i\rangle\}$, ניתן לרשום:

$$T = \sum_i \lambda_i\,|v_i\rangle\langle v_i|$$

צמוד הרמיטי

עבור האופרטור הלינארי T נגדיר את הצמוד ההרמיטי שלו להיות האופרטור $T^\dagger$ שמקיים לכל $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$:

$$\langle\varphi_1|T\varphi_2\rangle = \langle T^\dagger\varphi_1|\varphi_2\rangle$$

תכונות:

$$\left(T^\dagger\right)^\dagger = T$$

$$(\alpha T)^\dagger = \alpha^* T^\dagger$$

$$(T+S)^\dagger = T^\dagger + S^\dagger$$

$$(TS)^\dagger = S^\dagger T^\dagger$$

טרנספורם פורייה

זהו טור פורייה, בגבול של אינטרוול אינסופי ועם אינדקס רציף:

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

כאשר הפונקציה $F(k)$ מתפקדת בתור המקדמים:

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

מבחינה פיסיקלית, $F(k)$ היא פונקציית המשקל בחבורת גלים $f(x)$, כאשר פונקציות הבסיס e^{ikx} הם הגלים המישוריים.

תכונות חשובות של הטרנספורם:

$$\mathbf{F}[f(ax)](k) = \frac{1}{|a|}F\left(\frac{k}{a}\right),\quad \mathbf{F}[f(x+a)](k) = e^{ika}F(k)$$

$$\mathbf{F}[\alpha f(x) + \beta g(x)](k) = \alpha F(k) + \beta G(k)$$

$$\mathbf{F}^2[f(x)](k) = f(-x),\qquad \mathbf{F}\left[e^{ik_0 x} f(x)\right](k) = F(k-k_0)$$

ניתן גם להגדיר את פונקציית דלתא בעזרת הטרנספורם שלה:

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)}\,dx$$

הטלה אורתוגונלית

כל אופרטור P המקיים $P^2 = P$ נקרא הטלה, ואם מתקיים גם $P = P^\dagger$ ההטלה נקראת אורתוגונלית. לכל וקטור יחידה $|u\rangle$ ניתן להגדיר את ההטלה עליו $P_u = |u\rangle\langle u|$, והיא אורתוגונלית ומעבירה כל וקטור למרחב שנפרש על ידי $|u\rangle$.

כל בסיס אורתונורמלי $\{|e_i\rangle\}$ מקיימת את תכונת הסגירות:

$$\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = Identity$$

כתיב דיראק

$$\langle\varphi_1|T|\varphi_2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^* T\varphi_2\,dx$$

$$|a\varphi\rangle = a|\varphi\rangle,\quad \langle a\varphi| = \langle\varphi|a^*$$

$$|T\varphi\rangle = T|\varphi\rangle,\ \langle T\varphi| = \langle\varphi|T^\dagger$$

משוואת שרדינגר

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$$

וכאשר הפוטנציאל V אינו תלוי בזמן:

$$\psi(x,t)=u(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}},\quad \hat{H}u(x)=Eu(x)$$

פונקציית הגל

צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק במקום x היא $\Pr(x,t)=\left|\psi(x,t)\right|^2$.

ההסתברות למצוא אותו בקטע $(x,x+dx)$ היא $d\Pr(x,t)=\left|\psi(x,t)\right|^2dx$.

פונקציית הגל היא רציפה וגזירה (פעם אחת ב-t ופעמיים ב-x), ואינטגרבילית בריבוע, כלומר:

$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x,t)\right|^2dx<\infty$ ובפרט, $\psi\to0$ כאשר $x\to\pm\infty$.

זרם הסתברות

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

ומתקיימת משוואת הרציפות:

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0$$

כאשר $P(x,t)=\left|\psi(x,t)\right|^2$. אינטגרציה נותנת:

$$\frac{d}{dt}\int_a^b P(x,t)\,dx=j(a)-j(b),\quad \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x,t)\right|^2dx=0$$

עבור חלקיק חופשי עם תנע $p=mv$, נקבל $j=v$.

עבור פונקציית גל ממשית, לעולם $j\equiv0$.

אופרטור המקום ואופרטור התנע

במרחב התנע:	במרחב המקום:
$\hat{p}=p$	$\hat{x}=x$
$\hat{x}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$	$\hat{p}=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$

מקיימים את יחס החילוף האקסיומטי $[p,x]=-i\hbar$.

הפונקציות העצמיות שלהם במרחב המקום הן:

$$u_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px},\quad w_m(x)=\delta(x-x_m)$$

וניתן להסתכל על תנע קווי כיוצר הזזות במרחב:

$$T_a=e^{\frac{i}{\hbar}ap}=e^{a\frac{d}{dx}},\quad T_af(x,t)=f(x+a,t)$$

בעיות פיזור ומצבים קשורים

מחלקים את איזור הקטסטרופה לאיזורים שבהם הפוטנציאל קבוע, ובכל איזור מגדירים קבוע

$$k=\sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}$$

אם באופן קלאסי החלקיק יכול להיות באיזור הזה נקבל k ממשי, ולהיפך. הפתרונות בכל איזור יהיו מהצורה:

$$u''+k^2u=0\quad\Rightarrow\quad u=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

אם ידוע לנו שבאיזור מסויים נמצא גל ש"מגיע" מכיוון אחד בלבד, מתעלמים מאחד האיברים בפיתרון. אם k מדומה, יש לשים לב לתנאי האינטגרביליות בריבוע. ניתן גם לבחור $A=1$ עבור הגל הפוגע המקורי.

לפי חוק שימור זרם ההסתברות, לעולם $j_I=j_R+j_T$. את הסתברות המעבר וההחזרה אנו מגדירים כך:

$$P_R=\frac{j_R}{j_I},\ P_T=\frac{j_T}{j_I}\quad\Rightarrow\quad P_R+P_T=1$$

כאשר הפוטנציאל לפני ואחרי המחסום זהה (ורק אז!), הסתברות המעבר וההחזרה שוות לערך המוחלט בריבוע של אמפליטודת הגל המתאים.

תמיד נדרוש שהפונקציה העצמית $u(x)$ תהיה רציפה (אם הבעיה היא "מעגלית", נדרוש מחזוריות בזווית: $u(\varphi)=u(\varphi+2\pi)$), וכאשר הפוטנציאל רגולרי (לא אינסופי) נדרוש שגם הנגזרת $u'(x)$ תהיה רציפה.

ואולם, כאשר מדובר בפוטנציאל אינסופי, נדרוש קפיצה בנגזרת:

$$u'(x_0+\varepsilon)-u'(x_0-\varepsilon)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}V(x)u(x)\,dx$$

למשל, עבור פוטנציאל $V(x)=\alpha\delta(x)$ נקבל שצריך להתקיים:

$$u'(0^+)-u'(0^-)=\frac{2m\alpha}{\hbar^2}u(0)$$

משפט הפיתוח

עבור אופרטור A עם ערכים עצמיים בדידים, ניתן לרשום:

$$u(x)=\sum_n A_nu_n(x),\quad A_n=\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x)u(x)\,dx$$

כאשר הבסיס $\{u_n(x)\}$ הוא אורתונורמלי. למקדמים יש משמעות של הסתברות - $\left|A_n\right|^2$ היא ההסתברות למדוד לחלקיק ערך עצמי a_n עבור מדידה של A.

בפרט מתקיים $\sum_n\left|A_n\right|^2=1$.

פיתוח לפי האנרגיה

$$\psi(x,t)=\sum A_nu_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt},\quad A_n=e^{\frac{i}{\hbar}E_nt}\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*(x)\psi(x,t)\,dx$$

משוואות ארנפסט

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

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

מערכת רב-מימדית

כאשר ההמילטוניאן פריק, כלומר ניתן לרשום:

$$H=H_x+H_y$$

אז המצבים העצמיים והאנרגיות של H נתונים על ידי:

$$\left|\psi_{m,n}\right\rangle=\left|X_m\right\rangle\left|Y_n\right\rangle,\quad E_{m,n}=E_m^x+E_n^y$$

$$H_x\left|X_m\right\rangle=E_m^x\left|X_m\right\rangle,\quad H_y\left|Y_n\right\rangle=E_n^y\left|Y_n\right\rangle$$

מעבר בין מרחב המקום ומרחב התנע

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp,\quad \phi(p,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx$$

ל-$\phi(p,t)$ יש אותה משמעות עבור התנע כמו $\psi(x,t)$ עבור המקום.

סטטיסטיקה של משתנה בדיד

X משתנה מקרי שיכול לקבל סט של ערכים $x_1,x_2,\ldots$, כל אחד בהסתברות $p_1,p_2,\ldots$, ונסמן $\Pr(X=x_i)=p_i$.

תנאי הנירמול הוא $\sum_i p_i=1$, וערך התוחלת של X הוא $\langle X\rangle=\sum_i x_ip_i$.

השונות של X היא: $(\Delta X)^2=\mathrm{var}(X)=\left\langle(X-\langle X\rangle)^2\right\rangle=\left\langle X^2\right\rangle-\left\langle X\right\rangle^2$.

סטטיסטיקה של משתנה רציף

X משתנה מקרי שיכול לקבל ערכים רציפים על הישר הממשי, כאשר ההסתברות שנקבל ערך בקטע $[a,b]$ נתונה על ידי פונקציית צפיפות ההסתברות $f(x)$ באופן הבא: $\Pr(X\in[a,b])=\int_a^bf(x)\,dx$.

תנאי הנירמול הוא $\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\,dx$, וערך התוחלת הוא $\langle X\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}xf(x)\,dx$.

עקרון אי-הוודאות

לכל שני אופרטורים A,B מתקיים:

$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\left|\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle\right|$$

אופרטורי סולם

כאשר מתקיים בין שני אופרטורים היחס הבא $[B,A]=kA$, A מעלה את הערך העצמי של B בשיעור k.

קירוב WKB

$$|T|^2=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{V>E}dx\sqrt{2m(V(x)-E)}\right)$$

על קומוטטורים

$$[A,B]=AB-BA$$

$$[AB,C]=A[B,C]+[A,C]B$$

האקסיומות של פיסיקה קוונטית

1. מצב מערכת מיוצג ע"י וקטור מצב במרחב המצבים הפיסיקליים.
2. גודל פיסיקלי מדיד מיוצג ע"י אופרטור הרמיטי בעל בסיס שלם במרחב הנ"ל.
3. מדידת גודל מדיד יכולה להניב אך ורק אחד מן הערכים העצמיים שלו.
4. לאחר מדידה כלשהי שהניבה ערך עצמי מסויים, המערכת קורסת למצב העצמי שלו (כאשר יש ניוון בגודל שמדדנו, המערכת קורסת להטלה של המצב המקורי שלה על המרחב העצמי שמתאים לערך שמדדנו).
5. ההסתברות למדידת ערך עצמי a עם מצב עצמי φ_a היא $\Pr(a) = \left|\langle\varphi_a|\psi\rangle\right|^2$ (כאשר יש ניוון ב- a, ההסתברות היא $\Pr(a) = \sum_i \left|\langle\varphi_a^i|\psi\rangle\right|^2$; עבור ערכים עצמיים רציפים, ההסתברות למדוד ערך עצמי בתחום $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ היא $d\Pr(\alpha) = \left|\langle\varphi_\alpha|\psi\rangle\right|^2 d\alpha$).
6. ההמילטוניאן אחראי להתפתחות המצב בזמן: $i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$.
7. יחס החילוף האקסיומטי (יש כזו מילה בכלל?): $\left[p_j, x_k\right] = -i\hbar\delta_{jk}$.

התפתחות מצב בזמן

אם בזמן $t = t_0$ המערכת היא במצב עצמי $\left|E_n\right\rangle$:

$$\left|\psi(\mathrm{t})\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\left|E_n\right\rangle$$

עבור אופרטור A שאינו תלוי בזמן, מתקיים:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[H,A]|\psi(t)\rangle$$

ובפרט עבור A חילופי עם ההמילטוניאן, נקבל שערך התצפית שלו הוא קבוע, לכן ניתן לאפיין את המערכת על פיו.

מערכת שלמה של אופרטורים חילופיים

(Complete Set of Commuting Operators)

כאשר יש ניוון בע"ע של אופרטור A, ניתן למצוא אופרטור נוסף B, חילופי עם A, שיסיר לפחות חלק מן הניוון. אם זה לא מספיק, ניתן למצוא עוד אופרטור C, שחילופי עם A, B וכו'.

אוסילטור הרמוני – גישה אופרטורית

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

נגדיר גדלים חסרי מימד:

$$X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad P = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p, \quad H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(X^2 + P^2\right)$$

כאשר מתקיים $[P, X] = -i$. נגדיר אופרטורים חדשים:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP), \quad \left[a, a^\dagger\right] = 1$$

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{\hbar\omega}{2}, \quad [H, a] = -\hbar\omega a, \quad \left[H, a^\dagger\right] = \hbar\omega a^\dagger$$

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger + a\right), \quad P = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger - a\right)$$

מכיוון ש- H מורכב מסכום ריבועים של אופרטורים הרמיטיים, הערכים העצמיים שלו חיוביים ולכן $E \geq 0$. מכאן, ומתוך העובדה ש- a מוריד את האנרגיה ב- $\hbar\omega$, ומכך שעבור $a\left|E_0\right\rangle \equiv 0$ נקבל $H\left|E_0\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\left|E_0\right\rangle$, אנו למדים שרמות האנרגיה הן $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

עבור מצב יסוד $\left|E_0\right\rangle$ מנורמל, ניתן לקבל את המצבים הבאים לפי הנוסחה:

$$\left|E_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\left|E_0\right\rangle$$

$$a^\dagger\left|E_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|E_{n+1}\right\rangle, \quad a\left|E_n\right\rangle = \sqrt{n}\left|E_{n-1}\right\rangle$$

לסיום, האופרטור $N = a^\dagger a$ סופר את המצב, ומקיים $N\left|E_n\right\rangle = n\left|E_n\right\rangle$.

אוסילטור הרמוני – פיתרון ישיר של משוואת שרדינגר

לאחר הוצאת מימדים, המשוואה הבלתי תלויה בזמן נראית כך:

$$\frac{d^2u}{dy^2} + \left(\varepsilon - y^2\right)u = 0$$

באינסוף הפתרון מתנהג כמו $u(y) \sim e^{-y^2/2}$, לכן נניח פיתרון מהצורה $u(y) = h(y)e^{-y^2/2}$ ונציב, ונקבל:

$$h''(y) - 2yh'(y) + (\varepsilon - 1)h(y) = 0$$

מניחים ש- $h(y)$ הוא טור חזקות ב- y, ולאחר שמציבים למשוואה מקבלים נוסחה רקורסיבית למקדמים, ומתוך התנאי על כך שהטור יהיה סופי (אחרת נקבל $h(y) \sim e^{y^2}$ וזה רע לבריאות) מקבלים את רמות האנרגיה הדיסקרטיות.

פולינומי הרמיט

מתוך המד"ר $au_{E_0}(x) = 0$ ניתן למצוא את הפונקציה העצמית של מצב היסוד, ומכאן לקבל את שאר הפונקציות בעזרת אופרטור ההעלאה:

$$u_0(X) = C_0e^{-X^2/2} \quad \Rightarrow \quad u_n(X) = C_nH_n(X)e^{-X^2/2}$$

כאשר קבועי הנירמול הם:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$H_n(z)$ נקראים פולינומי הרמיט והם מקיימים את התכונות:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2} = \left.\frac{d^n}{dt^n}e^{2zt-t^2}\right|_{t=0}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}H_m(z)H_n(z)\,dz = 2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{mn}$$

$$\frac{d}{dz}H_n = 2nH_{n-1}, \quad H_{n+1} = 2zH_n - 2nH_{n-1}$$

סוגי אופרטורים

בעזרת התנע הזוויתי ניתן לסווג אופרטורים לשתי קטגוריות:

אופרטור A ייקרא סקלרי, אם הוא מקיים $\left[L_i, A\right] = 0$ לכל i. כך למשל: r^2, p^2, L^2. ערכי התצפית של אופרטורים כאלה אינם משתנים כתוצאה מסיבוב מערכת הצירים.

לעומת זאת, אופרטור $\vec{B} = \left(B_1, B_2, B_3\right)$ ייקרא וקטורי אם הוא מקיים $\left[L_i, B_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}B_k$ לכל i, j, k. כך למשל: $\vec{r}, \vec{p}, \vec{L}$. ערכי התצפית של אופרטורים כאלה משתנים תחת סיבוב כמו וקטורים רגילים.

בעיות שני גופים

מגדירים קואורדינטות חדשות:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \qquad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{p} = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{m_1m_2}, \qquad \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

שמקיימות ביניהן את יחסי החילוף:

$$\left[X, P_X\right] = \left[x, p_x\right] = i\hbar, \quad \left[\vec{P}, \vec{p}\right] = \left[\vec{P}, \vec{x}\right] = \ldots = 0$$

ולאחר שמציבים זאת לתוך ההמילטוניאן מקבלים:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right) = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{P^2}{2M} + V(\vec{r})$$

$M = m_1 + m_2$ מסת המערכת ו- $\mu = m_1m_2/M$ המסה המצומצמת.

ההמילטוניאן שקיבלנו הוא פריק, במובן של $H = H_{C.M.} + H_{Relative}$, ולכן ניתן לפתור את הבעיה בנפרד – עבור תנועת מרכז המסה והתנועה היחסית של המסות.

בור אינסופי חד מימדי

עבור בור בקטע $[0, L]$:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

משפט פיינמן-הלמן

עבור המילטוניאן שתלוי בפרמטר a ומצב עצמי שלו φ_a מתקיים:

$$\frac{\partial}{\partial a}\langle\varphi_a|H|\varphi_a\rangle = \langle\varphi_a|\frac{\partial H}{\partial a}|\varphi_a\rangle$$

תנע זוויתי

נגדיר $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$. ניתן לראות ב- $\vec{L}$ כיוצר סיבובים במרחב, שכן:

$$R_{d\vec\theta}=e^{\frac{i}{\hbar}\vec{L}\cdot d\vec\theta}=e^{\left(d\vec\theta\times\vec r\right)\cdot\vec\nabla},\ R_{d\vec\theta}f\left(\vec r,t\right)=f\left(\vec r+d\vec\theta\times\vec r,t\right)$$

כעת, כאשר הפוטנציאל הוא פונקציה של המרחק בלבד $V(r)$, ההמילטוניאן אינווריאנטי לסיבובים, כלומר חילופי עם $R_{d\vec\theta}$, ומכאן גם שהוא חילופי עם $\vec L$.
רכיבי התנע הזוויתי אינם חילופיים עם עצמם, שכן $\left[L_i,L_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$, ולכן לא נוכל להשתמש בהם לצורך מערכת שלמה. אבל, אם נגדיר $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ נקבל ש- $\left[L^2,L_i\right]=0$. לכן נבחר בתור מערכת שלמה את H,L^2,L_z למשל.

הגדרת המספרים הקוונטים של התנע הזוויתי הקוונטי

$$L^2\left|\ell,m\right\rangle=\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)\left|\ell,m\right\rangle,\quad L_z\left|\ell,m\right\rangle=\hbar m\left|\ell,m\right\rangle$$

כלומר, $\left|\ell,m\right\rangle$ הוא מצב עצמי של L^2 עם ערך עצמי $\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)$, והוא גם מצב עצמי של L_z עם ערך עצמי $\hbar m$. המספר הקוונטי ℓ מקבל ערכים טבעיים בלבד, $\ell=0,1,2,\dots$, והמספר הקוונטי m מקבל ערכי שלמים בתחום $-\ell\le m\le\ell$.

אופרטורי סולם של התנע הזוויתי

$$L_+=L_x+iL_y,\quad L_-=L_x-iL_y,\quad \left[L_+,L_-\right]=2\hbar L_z$$

הם מקיימים $\left[L_z,L_\pm\right]=\pm\hbar L_\pm$, לכן $L_\pm$ מעלה/מוריד את הערך העצמי של L_z ב- $\hbar$, והם לא משנים את הערך העצמי של L^2 (שכן $\left[L^2,L_\pm\right]=0$). בפרט מתקיים:

$$L_\pm\left|\ell,m\right\rangle=C_\pm\left|\ell,m\pm1\right\rangle,\quad C_\pm=\hbar\sqrt{\ell\left(\ell+1\right)-m\left(m\pm1\right)}$$

עבור מצב $\left|\ell,m\right\rangle$ מנורמל. מתקיים גם: $L^2=L_\pm L_++L_z^2\pm\hbar L_z$.

הפונקציות העצמיות של התנע הזוויתי

ייצוג דיפרנציאלי של אופרטורים בקואורדינטות כדוריות:

$$x=r\sin\theta\cos\varphi,\quad y=r\sin\theta\sin\varphi,\quad z=r\cos\theta$$

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi},\quad L_\pm=\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L^2=-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

נחפש את הפונקציות העצמיות $Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)$, שצריכות לקיים:

$$L^2Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)=\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right),\ L_zY_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)=\hbar mY_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)$$

מתוך הצבת L_z למשוואה האחרונה נקבל מד"ר שניתן לפתור ולקבל:

$$Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)=\Theta_{\ell,m}\left(\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\right)$$

לאחר נירמול של החלק התלוי ב- φ. מתוך דרישת החד-ערכיות, נקבל ש- m צריך להיות שלם ומכאן גם ℓ חייב להיות מספר שלם. את $\Theta_{\ell,m}\left(\theta\right)$ ניתן למצוא מתוך המד"ר שמתקבלת לאחר הצבת L_+ למשוואה $L_+Y_{\ell,\ell}\left(\theta,\varphi\right)=0$.
הפונקציה $\Theta_{\ell,m}\left(\theta\right)$ היא מעין "פולינום" בפונקציות $\sin\theta,\cos\theta$, ודרגת הפולינום קובעת את המספר הקוונטי ℓ, בעוד ש- m נקבע מתוך האקספוננט ($e^{im\varphi}$). למשל:

$$Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)=-\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\sin\theta\left(5\cos^2\theta-1\right)e^{i\varphi}\quad\Rightarrow\quad\ell=3,\ m=1$$

ומתקיים: $Y_{\ell,-m}=\left(-1\right)^mY^*_{\ell,m}$, $Y_{\ell,\ell}=C_\ell e^{i\ell\varphi}\sin^\ell\theta$, $P\left(Y_{\ell,m}\right)=\left(-1\right)^\ell Y_{\ell,m}$.
תנאי הנירמול הוא:

$$1=\iiint\left|\psi\left(\vec r\right)\right|^2dv=\int_0^\infty\left|f\left(r\right)\right|^2r^2dr\int_0^\pi\left|\Theta\left(\theta\right)\right|^2\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}\left|\Phi\left(\varphi\right)\right|^2d\varphi$$

זוויות אוילר

לפי ה- $y-convention$ שבה אנחנו משתמשים:

$$R_{z''}\left(\gamma\right)R_{y'}\left(\beta\right)R_z\left(\alpha\right)=R_z\left(\alpha\right)R_y\left(\beta\right)R_z\left(\gamma\right)$$

כאשר y',z'' מייצגים את הצירים הזמניים שסביבם מתבצע כל סיבוב, בעוד ש- x,y,z הם הצירים המקוריים של המערכת.

אופרטור השיקוף

בקואורדינטות כדוריות:

$$P\left(r\right)\to r$$

$$P\left(\theta\right)\to\pi-\theta$$

$$P\left(\varphi\right)\to\pi+\varphi$$

מערכת מצבים ממימד סופי

למשל, אלקטרון שיכול לעבור בין שני אתרים:

$$H=H_0+W,\qquad H_0=\begin{pmatrix}E_1&0\\0&E_2\end{pmatrix},\qquad W=\begin{pmatrix}0&w\\w&0\end{pmatrix}$$

כאשר הייצוג המטריציוני הוא בבסיס $\left|\varphi_1\right\rangle,\left|\varphi_2\right\rangle$.
הערכים והמצבים העצמיים של ההמילטוניאן החדש הם:

$$E_\pm=\frac{1}{2}\left(E_1+E_2\right)\pm\frac{1}{2}\sqrt{\left(E_1-E_2\right)^2+4w^2}$$

$$\begin{pmatrix}\left|\varphi_+\right\rangle\\\left|\varphi_-\right\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta\\\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\left|\varphi_1\right\rangle\\\left|\varphi_2\right\rangle\end{pmatrix},\qquad\tan2\theta=\frac{2w}{E_1-E_2}$$

הסיכוי שהמערכת תעבור ממצב אחד לשני:

$$\Pr_{\substack{\varphi_1\to\varphi_2\\t=0,t>0}}=\sin^22\theta\sin^2\left(\frac{E_+-E_-}{2\hbar}t\right)$$

כאשר ההפרעה חלשה $w\ll\left|E_1-E_2\right|$, $E_+\cong E_1,\ E_-\cong E_2$ ולכן כמעט אין סיכוי שהמערכת תעבור למצב $\left|\varphi_2\right\rangle$.
כאשר במערכת המקורית יש ניוון $E_1=E_2$, נקבל $\theta=\pi/4$:

$$\left|\varphi_\pm\right\rangle=\frac{1}{\sqrt2}\left(\pm\left|\varphi_1\right\rangle+\left|\varphi_2\right\rangle\right),\quad E_\pm=E\pm\left|w\right|$$

$$\Pr\left(\varphi_2\right)=\sin^2\left(\left(E_+-E_-\right)t/2\hbar\right)$$

ויש זמנים שבהם המערכת נמצאת בוודאות במצב $\left|\varphi_2\right\rangle$.

חלקיק בפוטנציאל מרכזי

משוואת שרדינגר התלויה בזמן נראית כך:

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\vec r,t\right)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec\nabla^2\psi\left(\vec r,t\right)+V\left(r\right)\psi\left(\vec r,t\right)$$

ולאחר הפרדה בין המרחב לזמן נקבל את המשוואה הבת"ל בזמן:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec\nabla^2\varphi_E\left(\vec r\right)+V\left(r\right)\varphi_E\left(\vec r\right)=E\cdot\varphi_E\left(\vec r\right)$$

ומכיוון שגם הלפלאסיאן ניתן לפירוק, אפשר להמשיך במלאכת הפישוט ולהפריד בין החלק הרדיאלי לחלק הזוויתי:

$$\vec\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right]$$

$$=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{L^2\left(\theta,\varphi\right)}{\hbar^2r^2}$$

$$\Rightarrow\quad\varphi_E\left(\vec r\right)=R_{E,\ell}\left(r\right)Y_{\ell,m}\left(\theta,\varphi\right)$$

ונקבל את המשוואה הרדיאלית, לאחר הצבה $u\left(r\right)=r\cdot R\left(r\right)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)}{2\mu r^2}+V\left(r\right)\right]R\left(r\right)=ER\left(r\right)$$

$$\Rightarrow\quad-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u\left(r\right)}{dr^2}+\underbrace{\frac{\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)}{2\mu r^2}+V\left(r\right)}_{V_{eff}\left(r\right)}u\left(r\right)=Eu\left(r\right)$$

מכיוון ש- $r>0$ לפי הגדרה, חייבים אנו לראות את עצמנו כאילו אנחנו יצאנו ממצרים, אבל בלי קשר חייבים אנו להגדיר $V_{eff}\left(r<0\right)=\infty$, וכמו כן מתקיים $u\left(0\right)=0$. תנאי הנירמול:

$$1=\int_0^\infty\left|R\left(r\right)\right|^2r^2dr=\int_0^\infty\left|u\left(r\right)\right|^2dr$$

עבור פוטנציאליים שהם "פחות סינגולריים" מ- $1/r^2$, כמו למשל $1/r^{1.9}$, הפונקציה u מתנהגת בערך כמו $r^{\ell+1}$ כאשר $r\to0$.
מכאן, שככל שיש לחלקיק יותר תנע זוויתי כך ההסתברות למצוא אותו בקרבת הראשית פוחתת (משום שהפוטנציאל הצנטרפוגלי "זורק" את החלקיק החוצה).
כמו כן, אם נאמר לנו שלמצב עצמי מסויים יש סימטריה כדורית, נובע מכך ש- $\ell=0$, גם עבור "מצב היסוד" מתקיים $\ell=0$.

ולבקשת הצופים, הלפלסיאן בקואורדינטות גליליות הוא:

$$\vec\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

אטום המימן

הפוטנציאל שאנו נדון בו הוא $V(r) = -Ze^2/r$, כאשר Z המספר האטומי (מספר הפרוטונים בגרעין). עבור אטום המימן, $Z=1$. המשוואה הרדיאלית היא:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]u(r) = Eu(r)$$

כאשר $\mu = Zm_e m_p/\left(m_e + Zm_p\right) \simeq m_e$ היא המסה המצומצמת. פונקציית הגל שמתארת את האלקטרון תהיה:

$$\psi_{E,\ell,m}(\vec{r}) = \frac{1}{r}u_{E,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$

כאשר את $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ כבר מצאנו בפרקים הקודמים.

נמשיך בפיתוח עבור $Z=1$, ונוציא המימדים:

$$r = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\rho = a_0\rho,\quad E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\lambda^2 = -E_0\lambda^2$$

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2\right]u(\rho) = 0,\quad \int_0^\infty \left|u(\rho)\right|^2 d\rho = \frac{1}{a_0}$$

באינסוף הפיתרון מתנהג כמו $u(\rho) \sim e^{-\lambda\rho}$, לכן נציע פיתרון מהצורה $u(\rho) = y(\rho)e^{-\lambda\rho}$, ולאחר שנציב לתוך המשוואה נקבל:

$$y'' - 2\lambda y' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}y + \frac{2}{\rho}y = 0$$

נניח כי $y(\rho)$ הוא טור חזקות ב-ρ, שהחזקה הראשונה שלו היא $\rho^{\ell+1}$ משום שזו ההתנהגות של $u(\rho)$ בקרבת הראשית. מציבים את הטור למשוואה וכו' וכו' ומקבלים תנאי לכך שהטור יהיה סופי:

$$\lambda = \frac{1}{k+\ell+1}$$

עבור k טבעי כלשהו, ואם נסמן $n = k+\ell+1$ נקבל כי $\ell \le n-1$ מכיוון שהחזקה הראשונה בטור חייבת להיות $\rho^{\ell+1}$. ומכאן:

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}$$

כמו שאנחנו יודעים כבר מכיתה ג'. נשים לב שיש ניוון ברמות האנרגיה, והן תלויות רק ב-n ולא ב-ℓ (באופן כללי, זה לא המצב עבור פוטנציאל מרכזי). בסך הכל, יש ניוון של n^2 מצבים לכל רמה.

מתוך המשוואה הרדיאלית לעיל מקבלים את הפונקציות הרדיאליות $R_{n,\ell}(r)$, שמקיימות ביניהן את יחס האורתונורמליות:

$$\left\langle R_{n,\ell}\middle|R_{n',\ell}\right\rangle = \int_0^\infty R_{n,\ell}(r)R_{n',\ell}(r)r^2dr = \delta_{n,n'}$$

יחס זה מתקיים רק(!) כאשר לשתי הפונקציות אותו ערך ℓ. עבור שני ערכים שונים של ℓ, מקבלים שתי משוואות שונות שהפתרונות שלהן לא אורתוגונליים. באופן כללי מתקיים יחס האורתונורמליות:

$$\left\langle\psi_{n,\ell,m}\middle|\psi_{n',\ell',m'}\right\rangle = \delta_{n,n'}\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}$$

ערכי תצפית עבור מצבים עצמיים של אטומים דמויי-מימן:

$$\langle r\rangle = \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right],\left\langle r^2\right\rangle = \frac{a_0^2n^2}{2Z^2}\left[5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)\right]$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \frac{Z}{a_0n^2},\quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2n^3\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}$$

משפט הויריאלי

עבור תנועה בתוך פוטנציאל מרכזי מתקיים תמיד:

$$E = T + V = -\frac{V}{2} + V = \frac{V}{2}$$

מטריצת הסיבוב סביב Y עבור $\ell = 1$

$$R_y(\beta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix}$$

תנע רדיאלי

משיקולי סימטריה הוא מוגדר באופן הבא:

$$p_r = "\hat{r}\cdot\vec{p}" = \frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\left(\frac{d}{dr}r\right)$$

הפונקציות העצמיות של התנע הרדיאלי הן e^{ik_rr}/r, כאשר $p_r = \hbar k_r$. עבור פונקציות אלה מתקיים:

$$\vec{j}\left[\frac{e^{ik_rr}}{r}\right] = \frac{\hbar k_r}{m}\frac{\hat{e}_r}{r^2},\quad \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = \frac{4\pi\hbar k}{m}\delta^3(\vec{r})$$

למצבים אלה יש זרם שכאילו נוצר בראשית עבור $k_r > 0$, או נבלע בראשית עבור $k_r < 0$. הסינגולריות הזו בזרם ההסתברות נובעת מהגדרת הקואורדינטות הכדוריות, שגם היא סינגולרית בראשית.

פונקציות לדוגמה

הפונקציות הרדיאליות $R_{n,\ell}(r)$, והזוויתיות $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$:

$$R_{1,0}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{2,0}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)e^{-Zr/2a_0},\quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}$$

$$Y_{0,0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\qquad Y_{1,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\varphi}\sin\theta$$

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{-i\varphi}\sin\theta$$

פונקציות עצמיות של האוסילטור ההרמוני, כאשר $X = x\sqrt{m\omega/\hbar}$:

$$u_0(X) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-X^2/2},\quad u_1(X) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}2Xe^{-X^2/2}$$

$$u_2(X) = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(4X^2 - 2\right)e^{-X^2/2}$$

$$u_3(X) = \frac{1}{\sqrt{48}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(8X^3 - 12X\right)e^{-X^2/2}$$

הצגת וקטור המקום בעזרת הפונקציות הרדיאליות

$$\vec{r} = (r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta)$$
$$= r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(\frac{-Y_{1,1}+Y_{1,-1}}{\sqrt{2}}, i\frac{Y_{1,1}+Y_{1,-1}}{\sqrt{2}}, Y_{1,0}\right)$$

שימושי למציאת פרישה של פונקציית מצב עם $\ell = 1$ לפי הפונקציות העצמיות.

מטריצות, ערכים עצמיים ומצבים עצמיים בתת-המרחב $\ell = 1$

כל הוקטורים והמטריצות להלן הן בבסיס $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$, בסדר הזה.

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad L_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad L_z = \hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$L_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1&0&1\\0&2&0\\1&0&1\end{pmatrix},\quad L_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&2&0\\-1&0&1\end{pmatrix},\quad L^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

והמצבים העצמיים של L_x, L_y בתת-המרחב הנ"ל, באותו בסיס ולאחר נירמול:

$$\left|L_x = \hbar\right\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix},\quad \left|L_x = 0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix},\quad \left|L_x = -\hbar\right\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$$

$$\left|L_y = \hbar\right\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix},\quad \left|L_y = 0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix},\quad \left|L_y = -\hbar\right\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\i\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$$

עבור $\ell = 1$ מתקיים גם היחס $L_i^3/\hbar^3 = L_i/\hbar$ לכל $i = x,y,z$.