פיזיקה קוונטית

פרופ. גרונאו מיכאל

סמסטר חורף 2004-5

$Id: quantic_physics.lyx,v 1.31 2005/01/24 08:18:34 itay Exp $

תוכן עניינים

1 רקע פיזיקלי

תופעות

1. קרינה אלקטרו-מגנטית מתנהגת כמו חלקיקים
2. חלקיקים מתנהגים כגלים.
התופעות הללו הם דואליות של חלקיקים וקרינה.
3. קוונטיזציה של גדלים פיזיקלים. אנרגיה בערכים דיסקרטיים.

1.1 האפקט-הפוטואלקטרי (איינשטיין 1905)

ניסוי הרץ (1887)

1. אור נראה או באולטרה-סגול $(\lambda = 10^3 anstron)$ פוגע במתכת מסוימת נפלטים אלקטר-ונים
2. הפליטה תלויה בתדירות קרינה לכל מתכת יש "תדירות סף" שרק מעליה אלקטרונים נפלטים.
3. עצמת הזרם האלקטרונים פרופורציונלית לעצמת האור
4. האנרגיה של האלקטרונים תלויה בתדירות

רעיון של אינשטיין הקרינה היא אוסף של חלקיקים. לכל חלקיק יש אנרגיה $E = h\upsilon$ כאשר הממד של h הוא אנרגיה כפול זמן. לדוגמה $h = 6.63 \times 10^{-34}(joul \times sec)$, הממד של h הוא של תנע זוויתית $(L = mvr)$
לכל מתכת יש פונקציית עבודה w שמתארת את האנרגיה שדרושה לאלקטרון כדי להשתחרר. אזי $\frac{1}{2}mv^2 = h\upsilon - w$

1.2 אפקט קומפטון (1920)

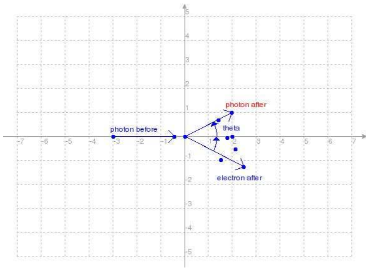
קרינת X = קרינה א"מ (רנטגן 1895) $\lambda = 1$. כאשר קרינת x פוגעת בחומר הקרינה מתפזרת בזוית θ וגם

$$\lambda^{'} - \lambda = \left(\frac{h}{m_e c}\right)(1 - \cos\theta)$$

כאשר $\left(\frac{h}{m_e c}\right) = 0.024\text{A}$ נקרא אורך גל קומפטון של האלקטרון. (m_e מסת האלקטרון)

הסבר (קומפטון) החלקיק חסר מסה פוגע באלקטרון ומתפזר כמו כדור ביליארד.חלקיק חסר מסה לפני התנגשות

איור 1: ההתנגשות



$$E = h\upsilon$$
$$P = \frac{h\upsilon}{c}$$

לאחר התנגשות

$$\begin{aligned} E^{'} &= hv^{'} \\ P^{'} &= \frac{hv^{'}}{c} \end{aligned}$$

ושל האלקטרון לאחר ההתנגשות

$$\begin{aligned} E_e &= mc^2 \\ \mathcal{P} & \end{aligned}$$

אזי שימור אנרגיה

$$hv + mc^2 = hv^{'} + \sqrt{m^2c^2 + \mathcal{P}^2c^2}$$

שימור תנע

$$\vec{P} = \vec{P}^{'} + \vec{\mathcal{P}}$$

לכן

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{P}}^2 &= \left(\vec{p} - \vec{p'}\right)^2 \\ &= \vec{p}^2 + \vec{p}^{'2} - 2\vec{p}\vec{p} \\ &= \left(\frac{hv}{c}\right)^2 + \left(\frac{hv^{'}}{c}\right)^2 - 2\left(\frac{hv}{c}\right)\left(\frac{hv^{'}}{c}\right)\cos\theta \\ \vec{\mathcal{P}}^2c^2 &= \left(hv - hv^{'}\right)^2 + 2\left(hv\right)\left(hv^{'}\right)\left(1 - \cos\theta\right) \qquad (1) \end{aligned}$$

שימור אנרגיה

$$m^2c^4 + \mathcal{P}^2c^2 = \left(hv - hv^{'}\right)^2 + m^2c^4 + 2\left(hv - hv^{'}\right)mc^2 \qquad (2)$$

משני השוואות יוצא

$$\begin{aligned} (1),(2) \Rightarrow mc^2\left(v - v^{'}\right) &= hvv^{'}\left(1 - \cos\theta\right) \\ \frac{1}{v^{'}} - \frac{1}{v} &= \frac{h}{mc^2}\left(1 - \cos\theta\right) \\ \Rightarrow \lambda^{'} - \lambda &= \frac{h}{mc^2}\left(1 - \cos\theta\right) \end{aligned}$$

1.3 חלקיקים כגלים

1.3.1 הקדמה קלאסית

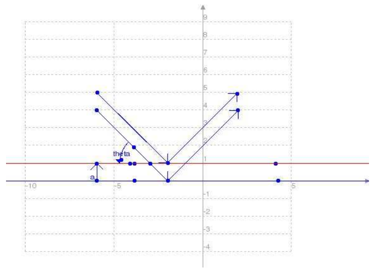
פיזור ברג (1913) פיזור של קרינת X (א"מ) אורך גל λ פוגעת בגביש שבו אטומים/מולקולות מסודרים במישורים מקבילים בעל מרחק אנכי a. יש החזרה בזוית θ מסוימת שהיא מוגברת. הפרש הפזה בין החזר השכבות

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

או

$$\sin\theta = n\left(\frac{\lambda}{2a}\right)$$

איור 2: פיזור ברג



1.3.2 שימוש קוונטי

דה-ברולי (1923) לחלקיק בעל תנע P יש אורך גל דה-ברולי

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

לדוגמה לפוטון $E = hv = pc, \lambda = \frac{c}{v}$ לכן

$$p = \frac{hv}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

דויסון וגרמר (1927) - פיזור אלקטרונים מגביש מסודר מרחק בין מישורים ידוע a

$$\sin\theta = n\left(\frac{\lambda}{2a}\right)$$

בשביל לראות משהו צריך λ קטן מספיק

תרגיל אלקטרון מואץ בפוטנציאל $V(volt)$

$$\begin{aligned}
E = \quad & eV = 1.6\times10^{-19}\left[coul\right]\cdot V\left[Joul\right]\\
p = \quad & \sqrt{2mE}\\
\lambda = \quad & \frac{h}{\sqrt{2me}}\\
= \quad & \frac{6.6\times10^{-34}}{\sqrt{2\cdot0.9\times10^{-30}\cdot1.6\times10^{-19}}}\\
= \quad & \frac{12.3}{\sqrt{V}}\text{A}\\
\Rightarrow V \simeq \quad & (12.3)^{2}\left[Joule\right]
\end{aligned}$$

דוגמה "קלסית"[1] גרגיר אבק $m = 10^{-15}\left[kg\right], v = 10^{-3}\left[\frac{m}{s}\right]$ אזי

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{h}{mv} = \frac{6.6\times10^{-34}}{10^{-15}\times10^{-3}}m\\
&= 6.6\times10^{-6}\text{A}
\end{aligned}$$

1.4 ניסיון רת'רפורד, מודל האטום של בוהר, קווים ספקטרלים

המודל הקלסי אטום=ניטרלי שיש בו אלקטרונים, לפי מודל "עוגת הצימוקים" של טומפסון. המטען החיובי מרוח על כל שטח האטום. האלקטרונים מקובעים על כל האטום.

הניסוי גייגר+מרסדן 1911 מפגיזים את האטום אם חלקיק α טעון חיובית $+2e$ (גרעין He) ומחפשים פיזור אחורה. אם יש פיזור אחורה אז המודל הקלסי לא יכול להיות.

פתרון יש גרעין ששם כל המטען החיובי והאלקטרונים מקיפים את הגרעין

בעיות

1. מטען מואץ קורן ומאבד אנרגיה
2. גילוי קווים ספקטרלים

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)$$

כאשר $R \simeq 10^{-3}\text{A}^{-1}$ קבוע רידברג
כאשר יש סדרות של קרינה

(א) $n_1 = 2$ סדרת בלמר
(ב) $n_1 = 1$ סדרת לימן
(ג) $n_1 = 3$ סדרת פשן

1.4.1 מודל האטום של בוהר

הנחות

1. האלקטרון נע במסלול מעגלי שבו התנע הזוויתי הוא כפולה שלמה של $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.[2]

$$mvr = n\left(\frac{h}{2\pi}\right) \quad (n = 1, 2, 3, ..)$$

אלקטרון אינו פולט קרינה למרות האצתו. (מצב סטציונרי)

2. האלקטרון יכול לקפוץ ממסלול אפשרי אחד לאחר ושינוי האנרגיה מתבטא בפליטה או בליעה של קרינה.

המודל גוף שנע סביב כוח מרכזי מקיים

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (3)$$

$$E = -\frac{e^2}{r}+\frac{1}{2}mv^2 \quad (4)$$

$$E_2 - E_1 = h\nu \quad (5)$$

[2] תנאי הקווינטות הראשון

אזי

$$
\begin{aligned}
(3)\rightarrow\frac{e^2}{v} &= mvr\\
\frac{e^2}{v} &= n\left(\frac{h}{2\pi}\right)\\
\Rightarrow v &= \frac{2\pi e}{h}\left(\frac{1}{n}\right)\\
r &= \frac{e^2}{mv^2}=\frac{h^2}{4\pi^2me^2}n^2\\
\Rightarrow E &= \frac{-4\pi^2me^4}{h^2}\frac{1}{n^2}+\frac{2\pi^2me^4}{h^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{2\pi^2me^4}{h^2}\frac{1}{n^2}\\
R &= \frac{2\pi^2me^4}{h^3c}\simeq 10^{-3}\mathrm{A}
\end{aligned}
$$

כאשר $\frac{2\pi^2me^4}{h^2}\simeq 13.2ev$

1.5 דואליות של התנהגות החלקיק

1.5.1 ניסיון שני סדקים (Young)

נתון גל שעובר דרך שני חריצים. כאשר חוסמים חריץ אחד אז לכל שדה שמגיע העצמה $I\sim|E|^2$ ובה-תאבכות $I\sim|E_1+E_2|^2$[3]

עבור שני סדקים פתוחים נקבל $E=E_1+E_2$ (מד"ח של גלים הם משוואות ליניאריות) ולכן

$$I \quad\sim\quad |E|^2=|E_1+E_2|^2=|E_1|^2+|E_2|^2+2\Re\left(E_1E_2^*\right)$$

הדבר קורה עבור פוטונים וגם חלקיקים. אילו היינו מודדים את האלקטרונים שנכנסים דרך אחד הסדקים הייתה התוצאה חוזרת לצורתה החלקיקית.

פונקציית גל נגדיר $\psi\left(x,t\right)$ (פונקציית גל) (כאשר E אנלוגי בדוגמה של קרינה אלקטרו-מגנטית קלאסית) נגדיר $P=|\psi|^2$ ההסתברות (אנלוגית לעוצמה בקרינה)

אריתמטיקה

1. עבור סדק אחד פתוח $\psi_1\left(x,t\right)$ כאשר $|\psi_1|^2$ ההסתברות למיקום האלקטרון במסך (הסתב-רות למצב סיום)
2. עבור שני סדקים מאחר שזה פונקציית גל. אז $\psi=\psi_1+\psi_2$ וההסתברות למצוא את החלקיקים $|\psi_1+\psi_2|^2$

מסקנה

1. לחלקיק יש תכונה גלית. במובן שהגל מתאר הסתברות.
2. פונקציית הגל $\psi\left(x,t\right)\leftarrow$ ההסתברות היא $P=|\psi|^2$.
3. תצפיות קוונטיות לחלקיק הן רק הסתברותיות ולא ודאיות.
4. התוצאה של המדידה מושפעת מהמדידה עצמה.
5. המדידה בחרה את אחד המצבים ψ_1 או ψ_2.

[3] הרצאה ב 28.10.2004

דוגמה של הניסוי לעקרון אי-הוודאות בגדול העיקרון $\Delta x\cdot\Delta p_x>h$.
נסתכל על הפרש הפאזה $a\sin\theta=n\lambda$ הנותן מקסימום בהתאבכות. אזי $n\in\mathbb{Z};\sin\theta_n=n\frac{\lambda}{a}$
ההפרש בין שני מקסימום

$$\begin{aligned}\Delta x_{\max} &\approx d\sin\theta_n-d\sin\theta_{n-1}\\ \Delta x_{\max} &\approx d\left(\frac{\lambda}{a}\right)\end{aligned}$$

אזי כדי למדוד את אחד הסדקים צריך רזולוציה $\frac{a}{2}$ וע"פ עיקרון אי הוודאות.

$$\Delta p_x \geq \frac{2h}{a}$$

ואם $\Delta\theta=\frac{\Delta p_x}{P}$ נותן אי-וודאות בזווית כאשר $P=\frac{h}{\lambda}$ לכן

$$\Delta\theta > \frac{2h}{a}\cdot\frac{\lambda}{h}=\frac{2\lambda}{a}$$

לכן

$$\Delta x > 2\frac{\lambda}{a}d>\Delta x_{\max}$$

2 משוואות שרדינגר וניסוח לא פורמלי של תורת הקוונטים

2.1 הגדרת המשוואה עבור חלקיק שנע בכיוון אחד

האנרגיה הקינטית $\frac{p^2}{2m}$

אנרגיה פוטנציאלית $V(x)$

האנרגיה הכוללת $E=\frac{P^2}{2m}+V(x)$

המשוואה

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

המשוואה התלת ממדית

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x)\psi\\ \left(\Delta=\nabla^2\right)\Rightarrow &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+V(x)\psi\end{aligned}$$

שיטה לזכור עבור

$$E = \frac{P^2}{2m}+V$$

וניקח $\psi=e^{i(kx-wt)}$

$$\begin{aligned}p &= \hbar k=\frac{h}{\lambda}\\ E &= \hbar\omega=h\nu\end{aligned}$$

נפתח

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{i}{h}E\psi \\
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= E\psi \\
\frac{\partial\psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar}p\psi \\
\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= \frac{p^2}{2m}\psi
\end{aligned}
$$

סה"כ קיבלנו

$$
E\psi = \left(\frac{p^2}{2m}+V\right)\psi
$$

הערה[4]

1. לחלקיק אין מסלול מוגדר היטב. יש מצב קוונטי מתואר למשל ע"י פונקציית גל
2. פרוק ספקטרלי: $\psi\left(x,t\right)=\sum_a c_a\psi_a$
3. משפט הקריסה (כאשר מודדים אז יש קריסה לאחד המצבים)

2.2 חבורת גלים וטרנספורם פוריה

עבור $e^{i(kx-wt)}$ קיבלנו $|\psi|^2=1$ זה בעייתי כי יש אותו סיכוי למצוא חלקיק בכל המרחב. ψ פרוש על פני כל הזמנים וכל המרחב. כדי להגביל נבנה חבילת גלים

$$
f\left(x\right) = \int_{-\infty}^{\infty}g\left(k\right)e^{ikx}dk
$$

כאשר $\mathcal{F}\left[f\left(x\right)\right]\left(k\right)=g\left(k\right)$ טרנספורם פוריה של $f\left(x\right)$ נותן משקולות ל-k שונים. לדוגמה עבור $g\left(k\right)=\delta\left(x-x_0\right)$ אז $f\left(x\right)=e^{ik_0x}$

דוגמה פעמון גאוס $g\left(k\right)=e^{-\alpha(k-k_0)^2}$ אזי נגדיר את הרוחב $\Delta k=\frac{2}{\sqrt{\alpha}}$. נעבור לפונקציה המקורית

$$
\begin{aligned}
f\left(x\right) &= \int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha(k-k_0)^2}e^{ikx}dk \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha(k-k_0)^2+ikx}dk \\
\left(k=k_0+k^{'}\right)\Rightarrow \quad &= e^{ik_0x}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha k^{'2}}e^{ik^{'}x}dk^{'} \\
&= e^{ik_0x}\int_{-\infty}^{\infty}dk^{'}e^{-\alpha\left(k^{'}-\frac{ix}{2\alpha}\right)^2}e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \\
&= e^{-\frac{x^2}{2\alpha}+ik_0x}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right)
\end{aligned}
$$

לחלופין היה ניתן להשתמש בנוסחת ההזזה של טרנספורם פוריה

$$
\mathcal{F}\left[f\left(ax+b\right)\right]\left(\omega\right)=\frac{1}{|a|}e^{ib\omega}\mathcal{F}\left(x\right)\left(\frac{\omega}{a}\right)
$$

רוחב של $\frac{2}{\sqrt{2\alpha}} = \Delta k \leftarrow (g(k))^2$ אז

$$|f(x)| = |\psi|^2 = |E|^2 = \frac{\pi}{\alpha}e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} \to \Delta x = 2\sqrt{2\alpha}$$

קיבלנו

$$\Delta k \Delta x = 4$$

כאשר

$$\begin{aligned} p &= \hbar k \\ \Rightarrow \Delta p &= \hbar \Delta k \\ \Delta p \Delta x &\sim \hbar \end{aligned}$$

חבילה נעה בזמן   גל מסוים $e^{i(k\omega-\omega t)}$ ומהירות הפאזה

$$v_p = \frac{\omega}{k}$$

ניצור חבילה ונראה איך היא נעה בזמן

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx-\omega(k)t)}$$

ל $w(k)$ לדוגמה עבור חלקיק חופשי $\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

$$\begin{aligned} w(k) &= w(k_0) + (k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} \\ f(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha k'^2} e^{i\left[(k-k_0)x-\left(w(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}+\frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}\right)t\right]} \end{aligned}$$

כאשר $v_g = \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0}$ וגם $2\beta = \left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k_0}$ אז

$$|f(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{\pi^2}{\alpha^2+\beta^2t^2}}e^{-\frac{\alpha(x-v_gt)^2}{2(\alpha^2+\beta t^2)}}$$

פונקציית הגל

צפיפות   ההסתברות[5] למצוא חלקיק במקום x ובזמן t = $P = |\psi|^2$

דרישות אלמנטריות מ P

1. נורמליזציה $\int_{-\infty}^{\infty} P dx = 1$ לכן בפרט הפונקציה $\psi(x,t)$ הן אינטגרביליות בריבוע

$$\int |\psi|^2 dx < \infty$$

פונקציות כאלו נקראות $\psi \in L^2$ (נדמה לי שמדובר ב $\psi \in \ell_2$)

2. משואת שרדינגר מבטיחה שההסתברות הכללית (בכל המרחב) אינה משתנה בזמן.

[5] הרצאה ב 4.11.2004

(א) נניח V ממשיים

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi \\
-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi^*}{dx^2}+V\psi^* \\
\Rightarrow i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi\psi^* \\
-i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi^*}{dx^2}\psi+V\psi^*\psi \\
i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi^*}{dx^2}\psi-\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}\right)+V\psi^*\psi-V\psi^*\psi \\
i\hbar\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi-\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)
\end{aligned}$$

הגדרה זרם הסתברות

$$J = \frac{\hbar}{2im}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi-\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)$$

אזי

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

ניקרא למשוואה שקיבלנו משוואת רציפות הסיכויים
נבדוק את ההנחה (2)

$$\begin{aligned}
0=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial}{\partial t}P+\frac{\partial}{\partial x}J\right)dx &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}P(x,t)\,dx+(J)|_{-\infty}^{\infty} \\
\left(J|_{-\infty}^{\infty}=0\right)\Rightarrow\frac{d}{dt}P(x,t) &= 0 \\
P(x,t) &= const
\end{aligned}$$

דוגמה נבדוק קטע $[-a,a]$

$$\frac{d}{dt}\int_{-a}^{a}P(x,t)\,dx = J(-a,t)-J(a,t)\neq 0$$

הערה בבעיה 3 ממדית אז

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P}{\partial t}(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\cdot\vec{J} &= 0 \\
\vec{J} &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\right)
\end{aligned}$$

הערה עבור נפח V

$$\frac{d}{dt}\int_V P(\vec{r},t)\,d^3V = -\int_V\vec{\nabla}\cdot\vec{J}d^3V=-\int_\sigma J_n d\sigma_n$$

3. ψ רציפה (אחרת אין רציפות של P)

4. גזירה ב-x פעמיים $\frac{\partial}{\partial x^2}\psi$ וב t פעם אחת $\frac{\partial}{\partial t}\psi$.

דוגמה $\psi = e^{i(kx-\omega t)}$ (אומנם בדוגמה זו $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2=\infty$) אז

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial x} &= ik\psi\\ \frac{\partial\psi^*}{\partial x} &= -ik\psi^*\\ J &= \frac{\hbar}{2im}\left(ik|\psi|^2+ik|\psi|^2\right)\\ &= \frac{\hbar k}{m}|\psi|^2\\ \left(|\psi|^2=1\right)\Rightarrow &= \frac{p}{m}=v\end{aligned}$$

הערה ψ חייבת להיות מורכבת כדי שיהיה זרם.

הגדרות יסודיות נוספות

הגדרה ערך תצפית = "ממוצע"
$\psi(x,t)$ ממוצע של x יסומן ע"י $\langle x\rangle$ (או $\overline{x}$)

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,dx$$

תכונה של חלקיק שהוא $f(x)$

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,P(x,t)\,dt$$

הגדרה לחלקיק יש תנע p ממוצע של $\langle p\rangle$

$$\mathcal{P}=|\psi|^2;\langle p\rangle = \int p\mathcal{P}(x,t)\,dx$$

כאשר $p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$.
הסברים:

1. ממשואת שרדינגר

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2(\psi)}{\partial x^2}+V\psi\\ E &= \frac{p^2}{2m}+V\\ \Rightarrow p^2 &= -\hbar\frac{\partial^2}{\partial x^2}\\ = &= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\end{aligned}$$

2. חוק התנועה הקלאסי

$$\begin{aligned} m\frac{dx}{dt} &= p \\ \langle p\rangle &= m\frac{d\langle x\rangle}{dt} \end{aligned}$$

מעבור למשוואת שרדינגר

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi \\ m\frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{m}{i\hbar}V\psi \qquad (6) \\ m\frac{d\langle x\rangle}{dt} &= m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^* x\psi dx \\ &= m\int_{-\infty}^{\infty}\psi^* x\psi dx \\ &= m\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x\psi+\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx \qquad (7) \end{aligned}$$

נציב את (6) ב-(7) ונקבל

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}-\frac{m}{i\hbar}V\psi^*\right)x\psi+\psi^* x\left(-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{m}{i\hbar}V\psi\right)\right]dx \\ &= \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi-\psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]dx \\ &= \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi-\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dx \\ \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi-\psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=0\Rightarrow\quad &= \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dx \\ &= -\frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\psi\right)dx+\frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \\ \langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dx \end{aligned}$$

הערות

1. p הוא אופרטור לכן אם לא נשים אותו באמצע נקבל תוצאה שונה.
2. $p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ אופרטור[6] מרחב הפונקציות $\psi(x,t)$
3. $p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ אופרטור ליניארי
4. $p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ אופרטור הרמיטי וערכי התצפית שלו ממשיים $\langle p\rangle\in\mathbb{R}$

2.2.1 יחס חילוף

הגדרה יחס חילוף מוגדר להיות

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

הערה ליחס חילוף מתקיים $[A,B]=-[B,A]$

[6] הרצאה ב 8.11.2004

יחס החילוף התנע והמיקום מקיימים יחס חילוף

$$[p,x] = \frac{\hbar}{i}$$

הוכחות

1. נבדוק את היחס

$$\begin{aligned}[p,x]\psi(x,t) &= \left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},x\right]\psi(x,t)\\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi(x,t)\right)-x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial x}{\partial x}\psi(x,t)=\frac{\hbar}{i}\psi(x,t)\end{aligned}$$

2. נבדוק הרמיטיות

$$\begin{aligned}\langle p\rangle-\langle p\rangle^{*} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx+\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\left|\psi\right|^{2}}{\partial x}dx\\ &= \frac{h}{i}\left[\left|\psi(x)\right|^{2}\right]_{-\infty}^{\infty}\\ &= \left(\left|\psi(\infty)\right|^{2}-\left|\psi(-\infty)\right|^{2}\right)=0\end{aligned}$$

2.3 פונקציית גל של תנע

הגדרות

1. נסמן $\phi(p,t)$ כפונקציית גל של התנע.
2. $\left|\phi(p,t)\right|^{2}$ ההסתברות למדוד p

הגדרה $\phi(p)$ הוא טרנספורם פורייה של $\psi(x)$

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{ikx}dk\\ \left(k=\frac{p}{\hbar}\right)\Rightarrow &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp\\ \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}f(k)e^{-ipk}dk\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\end{aligned}$$

תרגיל

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{\frac{i}{\hbar}p^{'}x}dpe^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}\left(p-p^{'}\right)x}dxdp\\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)2\pi\hbar\delta\left(p^{'}-p\right)dp=\phi(p)\end{aligned}$$

הוכחה נוכיח ש $|\phi(p)|^2$ ההסתברות למדוד p

1. נראה ש $\int_{-\infty}^{\infty}|\phi(p)|^2=1$

$$\begin{aligned}\int\phi^*(p)\,\phi(p)\,dp &= \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dx\psi(x)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*e^{-\frac{i}{\hbar}px}dp\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\,\psi^*(x)\,dx=1\end{aligned}$$

2. נבדוק ממוצע $\langle p\rangle$ כלומר נראה $\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dp\phi^*(p)\,p\phi(p)$

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}dx\psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dx\psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi e^{\frac{i}{\hbar}px}dp\right)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dp\phi(p)\,p\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi^*e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}dp\phi(p)\,p\phi^*(p)\end{aligned}$$

הערה במרחב $\phi(p)$, x הוא אופרטור זהה ל p, במרחב $\psi(x)$ עד כדי סימן

$$x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}$$

האופרטור $\langle XP\rangle$

הערה

1. אופרטור $\langle XP\rangle$ לא הרמיטי כי X,P הרמיטיות.
2. ניתן לקבל הרמיטיות ע"י סימטריזציה $\langle XP+PX\rangle$

2.4 פתרונות לבעיות בממד אחד

משוואת שרדינגר

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi\\ &= \frac{p^2}{2m}\psi+v\psi\\ &= \left(\frac{p^2}{2m}+v\right)\psi\end{aligned}$$

כאשר $H=\frac{p^2}{2m}+v$ הוא המילטוליין

התהליך נניח שאינם תלויים בזמן $V(x)$

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

ננסה למצוא פתרון מהצורה $\psi(x,t)=T(t)\,u(x)$

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t}u(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}T(t)+V(x)\,T(t)\,u(x) \\ \frac{i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t}}{T(t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}}{u(x)}+V(x) \end{aligned}$$

מסקנה שני עביר המשוואה שווים לקבוע שנקרא לא E (האנרגיה) אזי קיבלנו שני משוואות

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dy} &= -\frac{iE}{\hbar}T \\ T &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{aligned}$$

זאת פונקציה סטציונרית. במצב סטציונרי ההסתברות לא תלויה בזמן. כאשר

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+V(x)\,u(x) &= Eu(x) \\ \left(\frac{p^2}{2m}+v\right)u(x) &= Eu(x) \end{aligned}$$

קיבלנו משוואת שרדינגר בלתי תלויה בזמן.

הערה ניתן לראות שכאן האנרגיה היא מקוונטטת (כלומר ערכי האנרגיה הם דיסקרטים)

דוגמאות

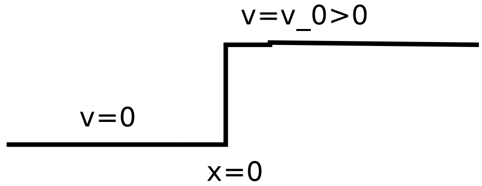
1. פוטנציאל מדרגה
2. בור סופי
3. מחסום סופי
4. פוטנציאלים של פונקציית δ
5. פוטנציאלים מחזוריים

הפתרונות לדברים הללו הם מקורבים למצב שבו אורך הגל ארוך מספיק מהקפיצה.

2.4.1 פוטנציאל מדרגה

שיטה פותרים באזורים השונים (איור 1) ונחליק (נהפוך לרציף) ב $x=0$. עבור פוטנציאל סופי בגלל

טבלה 1: פוטנציאל מדרגה



משוואת שרדינגר

$$\frac{du}{dx} = u'$$

נפתור

$$\begin{aligned} u'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V\left(x\right)\right)u &= 0 \\ \frac{2mE}{\hbar^2} &= k^2 > 0 \\ \frac{2m\left(E - V_0\right)}{\hbar^2} &= q^2 > 0 \end{aligned} \tag{8}$$

שני צידי המשוואה שלנו

$$\begin{aligned} u_1'' + k^2 u_1 &= 0 \\ u_1'' + q^2 u_1 &= 0 \end{aligned}$$

אזי

$$\begin{aligned} u_1\left(x\right) &= e^{ikx} + Re^{-ikx} \\ u_2\left(x\right) &= Te^{iqx} \end{aligned}$$

כאשר $T - Transmition, R - Reflection$ קבועים

הערה u_2 לא תלוי ב e^{-iqk} כי לא יתכן שמשהו יחזור.

תזכורת קיבלנו גל בכיוון x זאת בגלל $\psi = T\left(t\right)u\left(x\right) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{iqx}$ כמוכן

$$\begin{aligned} u_1\left(x=0\right) &= u_2\left(x=0\right) \\ u_1'\left(x=0\right) &= u_2'\left(x=0\right) \\ k - kR &= qT \\ K\left(1-R\right) &= qT \\ 1+R &= T \\ \Rightarrow R &= \frac{k-q}{k+q} \\ T &= \frac{2k}{k+q} \end{aligned}$$

נחשב זרם הסתברות

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im}\left(u^*\frac{\partial u}{\partial x} - u\frac{\partial u^*}{\partial x}\right)$$

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{\hbar k}{m}\left[\left(1^2\right) - R^2\right] \\ J_2 &= \frac{\hbar k}{m}T^2 \end{aligned}$$

נגדיר P_R הסתברות החזרה, P_T הסתברות מעבר, J_I זרם ההסתברות הנכנס, J_R זרם ההסתברות המוחזר. J_T זרם הסתברות העובר.

$$\begin{aligned} J_I &= \frac{\hbar k}{m} \\ J_R &= \frac{\hbar k}{m}R^2 \\ J_T &= \frac{\hbar q}{m}T^2 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
P_R &= \frac{J_R}{J_I} = R^2\left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 \\
P_T &= \frac{J_T}{J_I} = \frac{q}{k}T^2 = \frac{4kq}{(k+q)^2} \\
P_R + P_T &= 1
\end{aligned}
$$

הערות

1. עבור[7] הפרדת משתנים $\psi(x,t) = T(t)\,u(x)$ אז לפתרון של השוואת שרדינגר $T(t) =$ $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ פתרון בעל E מסוים = "סטציונרי". מ"ש בלתי תלויה בזמן תלויה באנרגיה
2. $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ (אופרטור "אנרגיה") כך שמשוואות שרידנגר

$$
H(u_E(x)) = Eu_E(x)
$$

2.4.2 מדרגה עבור $E < V$ כלומר האנרגיה קטנה מהפוטנציאל (במדרגה)

החלק שלפני המדרגה הכל נשמר ואחרי הדרגה

$$
\begin{aligned}
u'' + q^2 u &= 0 \\
q^2 &= \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} < 0 \\
u &= e^{|q|x} + e^{-|q|x}
\end{aligned}
$$

כאשר $e^{|q|x}$ לא אינטגרבילי בריבוע ולכן לא פתרון (להסתברות)

$$
u = e^{-|q|x}
$$

זרם ההסתברות $J_T = 0$ כי לפונקציה ממשית הזרם מתאפס.

$$
p_R = \left|\frac{k-i|q|}{k+i|q|}\right|^2 = 1
$$

משוואת שדינגר בפוטנציאל קבוע מול משוואות מקסוול בתווך בעל שבירה קבוע

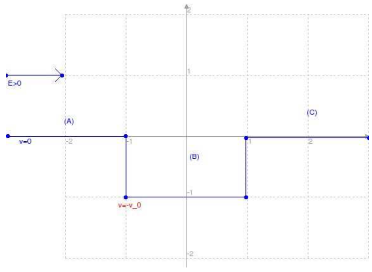
משוואת שרדינגר

$$
\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\right]u(x) = 0
$$

משוואת מקסוול

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varepsilon(x,t) &= 0 \\
\varepsilon(x,t) &= E(x)\,e^{-i\omega t} \\
\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{c^2}\omega^2\right)E(x) &= 0
\end{aligned}
$$

איור 3: בור פוטנציאל



2.4.3 בור פוטנציאל ומחסום סופי ("מנהור")

בבור פוטנציאל (ייפתר בתרגול) (איור 3)

$$T = e^{-2ika}\frac{2kq}{2kq\cos 2qa - i\left(q^2+k^2\right)\sin 2qa}$$

כאשר $2ka$ קבוע הבל

$$\begin{aligned} q &= \frac{\sqrt{2m\left(E+V_0\right)}}{\hbar} \\ k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \end{aligned}$$

מחסום סופי

$$\begin{aligned} K &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ (q=ik)\Rightarrow k &= \frac{\sqrt{2m\left(V_0-E\right)}}{\hbar} \end{aligned}$$

$$|T|^2 = \frac{\left(2Kk\right)^2}{2K^2\cosh^2\left(2ka\right)+\left(K^2-k^2\right)\sinh^2\left(2ka\right)}$$

קירוב WKB (Wentzed-Kramers-Brillin)

קירוב המחסום עבור $ka \gg 1$ אז

$$|T|^2 \approx \left(\frac{4kK}{K^2+k^2}\right)^2 e^{-4ka} \ll 1$$

ניקח מחסום כלשהו ונדרג אותו אינפיסימלית (כסכום רימן לאינטגרל) אזי

$$\begin{aligned} |T|^2 &= |T_1|^2|T_2|^2|T_3|^2 \\ \ln|T|^2 &= \sum_i \ln|T_i|^2 = -2k\left(x_i\right)\Delta x_i \\ k\left(x_i\right) &= \frac{\sqrt{2m\left(V\left(x\right)-E\right)}}{\hbar} \\ \ln|T|^2 &= -\frac{2}{\hbar}\int_{V(x)>E} dx\sqrt{2m\left(V\left(x\right)-E\right)} \\ |T|^2 &= e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{V(x)>E}dx\sqrt{2m\left(V(x)-E\right)}} \end{aligned}$$

[7] הרצאה ב- 15.11.2004

דוגמאות לקירוב WKB

1. פליטה של אלקטרונים ממתכת ע"י הפעלת שדה חשמלי $Fowlen-Nordheim$

$$\begin{aligned}|T|^2 &= e^{\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2m(w-e\varepsilon x)}dx} \\ &= e^{\frac{-4\sqrt{2m}}{3\hbar e\varepsilon}w^{\frac{3}{2}}}\end{aligned}$$

2. פרוק[8] α שני פרוטונים ושני ניוטרונים יושבים בבור פוטנציאל. כאשר חלקיק α יוצא מהגרעין יש דחייה של מטענים מנוגדים בין הגרעין לחלקיק. כלומר מחוץ לבור פוטנציאל יש ירידה בפוטנציאל לפי $\frac{1}{r}$. כלומר יש $tunneling$ בין הבור לבין החוץ. התוצאה לפי WKB היא

$$\begin{aligned}|T|^2 &= e^{-\frac{2}{\hbar}\int_R^b dx\sqrt{(V(x)-E)2m}} \\ &= e^{-\frac{2\pi z_1 z_2 e^2}{\hbar v}}\end{aligned}$$

כאשר $R \gg b$ כלומר $\frac{1}{2}mv^2 = E \ll \frac{z_1 z_2 e^2}{R}$

2.5 בור חד-ממדי אינסופי ותכונות כלליות של הפתרון

נתון בור פוטנציאל $V(x)=\begin{cases}0 & -a<x<a \\ \infty & |x|\geq a\end{cases}$

משוואת שרדינגר

$$\begin{aligned}H=\frac{P^2}{2m}+V &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x) \\ i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} &= H\psi(x,t)\end{aligned}$$

הפרדת משתנים

$$\psi(x,t) = T(t)\,u(x)$$

אזי

$$\begin{aligned}Hu_E(x) &= Eu_E(x) \\ T(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\end{aligned}$$

אז פתרון כללי

$$\psi(x,t) = \sum_E c_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et}u_E(x)$$

ונקרא ל $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ המקדם הסטציונרי עבור E.

פתרון מחוץ לבור $|x|\geq a$

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}u''+V(x)u &= Eu \\ \Longleftrightarrow u &= 0\end{aligned}$$

[8] הרצאה ב 18.11.2004

בתוך הבור $-a<x<a$ $V=0$ אז ע"פ ההגדרה $E=V+T>0$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{2m}u'' &= Eu \\ u''+\frac{2mE}{\hbar^2}u &= 0 \end{aligned}$$

אם תנאי שפה $u(\pm a)=0$ (כדי לקבל רציפות) כמוכן בגלל $E>0$ אז $u=Ae^{qx}+Be^{-qx}$ לא פתרון אפשרי. (הסבר נוסף למי שלמד מד"ח או מד"ר א' היא שלבעיית שטורם ליוביל רגולרית יש רק ע"ע אי-שליליים)
הפתרון הראשון הוא הפתרון הטרוויאלי $u=0$ (עבור ע"ע 0)
שאר הפתרונות

$$u = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)+B\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

(למוקירי מד"ח בתנאי דריכלה סביב $\pm a$ שני הפתרונות מתקבלים, לכן נבדוק את שניהם.)

1. הפתרונות האי-זוגיים

$$\begin{aligned} u(\pm a) &= A\sin(kx)=0 \\ ak &= n\pi \\ E_{1,n} &= \frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2n^2 \\ &= \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right)n^2 \end{aligned}$$

2. הפתרונות הזוגיים

$$\begin{aligned} u(\pm a) &= B\cos(kx)=0 \\ ak &= \left(n-\frac{1}{2}\right)\pi \\ E_{2,n} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n-1)^2 \end{aligned}$$

הערה יש תנאי נרמול לכל אחד מהפתרונות (שמתאים לתנאי הסתברות מנורמלת)

$$\int_{-\infty}^{\infty}|u(x)|\,dx = \int_{-a}^{a}|u(x)|\,dx=1$$

ולכן

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty}A^2\sin^2x \\ &= \int_{-a}^{a}A^2\frac{1}{2}x \\ &= \frac{A^2}{2}(2a)=A^2a=1 \\ \Rightarrow A=B &= \frac{1}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

לצורך נוחות נסמן $l=2n$ אז נרשום

$$\begin{aligned} E_{2,n} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\frac{(l-1)^2}{4} \\ E_{1,n} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\frac{l^2}{4} \end{aligned}$$

סה"כ

$$l\in\mathbb{N};E_l = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}l^2 \qquad (E_1=E_{1,1},E_2=E_{2,1},...)$$

וגם הפתרון הטרוויאלי $u=0$ מתבטל.

תכונות של פתרונות הבור

1. פונקציות גל השייכות לאנרגיות שונות הם א"ג

$$\forall n,m\in\mathbb{N};\int_a^b u_n^*u_m dx = \delta_{n,m} \qquad \left(\delta=\begin{cases}1 & m=n\\ 0 & m\neq n\end{cases}\right)$$

2. חישוב מקדמים c_n

$$\begin{aligned} \int_{-a}^{a}u_m^*(x)\,\psi(x,t)\,dx &= \int_{-a}^{a}u_m^*(x)\sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}u_n(x)\,dx \\ &= c_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} \\ \Rightarrow c_m &= \frac{\int_{-a}^{a}u_m^*(x)\,\psi(x,t)\,dx}{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}} \\ |c_m|^2 &= \left|\int_{-a}^{a}u_m^*(x)\,\psi(x,t)\,dx\right|^2 \end{aligned}$$

המשמעות הפיזיקלית

1. $\psi(x,t)$ מנורמלת

$$\begin{aligned} 1=\int_{-a}^{a}|\psi(x,t)|^2dx &= \int_{-a}^{a}\left(\sum_n c_n^*e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}u_m^*(x)\right)\left(\sum_l c_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t}u_l(x)\right)dx \\ &= \int_{-a}^{a}\sum_n |c_n|\,|u_n|^2dx=\sum_n|c_n| \\ \Rightarrow\sum_n|c_n| &= 1 \end{aligned}$$

2. ערך תצפית של אנרגיה

$$\langle H\rangle = \int\psi^*H\psi dx$$

האופרטור של האנרגיה $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)$ משוואת שרדינגר

$$Hu_n(x) = E_n u_n(x)$$

כאשר u_n יקראו פונקציות עצמיות E_n ע"ע.
נפתח את ערך התצפית

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int_{-a}^{a}dx\left(\sum_n c_n^* e^{\frac{i}{\hbar}E_nt}u_m^*(x)\right)H\left(\sum_l c_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_lt}u_l(x)\right)\\
&= \int_{-a}^{a}dx\left(\sum_n c_n^* e^{\frac{i}{\hbar}E_nt}u_m^*(x)\right)\left(\sum_l c_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_lt}E_nu_l(x)\right)\\
&= \sum_n |c_n|^2E_n\\
\Rightarrow\langle H\rangle &= \sum_n |c_n|^2E_n
\end{aligned}$$

הערה $|c_n|^2$ היא ההסתברות למדוד אנרגיה E_n במצב $\psi(x,t)$

הערה כאשר מודדים את המערכת היא קורסת למצבי היסוד כלומר $u_n(x)$ הם ψ השונים.

2.6 רקע מתמטי לתורת הקוונטים

אופרטור הזוגיות $P:x\mapsto -x$ אז[9] $P^2=1$

$$\begin{aligned}
Pu(x) &= \lambda u(x)\\
u(x)=P^2(x) &= P\lambda u(x)=\lambda Pu(x)=\lambda^2u(x)\\
\Rightarrow\lambda_P &= \pm1
\end{aligned}$$

משפט הפירוק הספקטרלי

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{2}\left[\psi(x)+\psi(-x)\right]\\
&+ \frac{1}{2}\left[\psi(x)-\psi(-x)\right]
\end{aligned}$$

כאשר $u_+(x)=\frac{1}{2}\left[\psi(x)+\psi(-x)\right]$ הפונקציה הזוגית מתאימה לע"ע $\lambda=1$
$u_-(x)=\frac{1}{2}\left[\psi(x)-\psi(-x)\right]$ הפונקציה האי-זוגית מתאימה לע"ע $\lambda=-1$
הפונקציות העצמיות של H ($u_n(x)$) הן גם פונקציות עצמיות של P. ומתקיים יחס חילוף

$$\begin{aligned}
[H,P] &= 0\\
PH &= HP
\end{aligned}$$

כאשר משוואת שרדינגר $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$, $\psi(x,t)$ נפעיל את אופרטור הזוגיות

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(P\psi(x,t)\right) &= PH\psi(x,t)\\
&= (PH)\psi(x,t)\\
H(-x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(-x)\\
V(x)=V(-x)\Rightarrow &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)=H(x)\\
\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(P\psi(x,t)\right) &= HP\psi(x,t)
\end{aligned}$$

כלומר $P\psi(x,t)$ פתרון. מהליניאריות

$$(1\pm p)\psi = \psi(x)\pm\psi(-x)$$

פתרונות זוגיים ואי-זוגיים.

[9] הרצאה ב 22.11.2004

מסקנה אם לפונקציית גל יש זוגיות מסוימת עבור $t=0$ יש לה אותה זוגיות בכל t לכן הזוגיות נשמרת.

הערות

1. חלקיק חופשי $H=\frac{p^2}{2m}$ אז עבור אופרטור H

$$\begin{aligned} u^{''}+\frac{2mE}{\hbar^2}u &= 0 \\ E &= \frac{\hbar^2k^2}{2m}>0 \end{aligned}$$

האנרגיה יכולה לקבל כל ערך רציף של k.

2. עבור אופרטור p (תנע)

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=p\Rightarrow p\left(e^{ikx}\right)=\hbar k, p\left(e^{-ikx}\right)=-\hbar k$$

במצב כזה כמו $\cos(x)=\frac{e^{ikx}+e^{-ikx}}{2}$ שיש שני ערכי תנע נקרא מנוון.

הערה למצב של 2 פונקציות עצמיות יש אותו ע"ע נקראה מצב מנוון

משפט לבעיות פוטנציאל חד-ממדיות אין נוון באנרגיה

הוכחה 2 פתרונות $u_E(x)$ עם אותה E

$$\begin{aligned} u_1^{''}+\frac{2m}{\hbar^2}(-V+E)u_1 &= 0 \\ u_2^{''}+\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)u_2 &= 0 \\ \frac{u_1^{''}}{u_1} &= \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)=\frac{u_2^{''}}{u_2} \\ u_1^{''}u_2-u_2^{''}u_1 &= 0 \\ \frac{d}{dx}\left(u_1^{'}u_2-u_2^{'}u_1\right) &= 0 \\ u_1^{'}u_2-u_2^{'}u_1 &= const \\ \left(u_1,u_2\xrightarrow{x\to\infty}0\right)\Rightarrow &= 0 \\ \frac{u_1^{'}}{u_1} &= \frac{u_2^{'}}{u_2} \\ \Rightarrow\ln u_1 &= \ln u_2+\ln c \\ u_1 &= cu_2 \end{aligned}$$

ולכן תלוי ליניארית ולכן לא פתרונות שונים.

פונקציות עצמיות של אופרטור התנע

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial u_p(x)}{\partial x} &= pu_p(x) \\ p\in\mathbb{R};u_p(x) &= ce^{\frac{ipx}{\hbar}} \end{aligned}$$

אורתוגונליות

$$\begin{aligned} \int dxu_{p'}^*(x)u_p(x) &= |c|^2\int dxe^{\frac{i}{\hbar}\left(p-p^{'}\right)x} \\ &= 2\pi\hbar|c|^2\delta\left(p-p^{'}\right) \end{aligned}$$

אזי ננרמל $u_p=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ ולכן

$$\int dx u_p^*(x)\,u_p(x) = \delta\left(p-p'\right)$$

(כלומר על עוצמת רצף של פונקציות עצמיות, $\delta_{n,m}$ של קרונקר הפכה ל $\delta\left(p-p'\right)$ של דירק)

משפט פיתוח $\psi(x) = \int dp\phi(p)\frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ המקדמים $\phi(p)$ כאשר $|\phi(p)|^2$ היא צפיפות ההסתברות למדוד p

(עבור ערכים דיסקרטים $\psi(x,t)=\sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}u_n(x)$ בבור הפוטנציאל. $|c_n|^2$ ההסתברות למדוד מצב דיסקרטי.

3. אופרטור המקום ל-X פונקציות עצמיות

$$\begin{aligned} x\omega_{x_0}(x) &= x_0\omega_{x_0}(x) \\ \Rightarrow \omega_{x_0}(x) &= \delta(x-x_0) \\ \psi(x) &= \int dx_0\psi(x_0)\,\delta(x-x_0) \end{aligned}$$

קיבלנו משפט פיתוח של כל $\psi(x)$ באמצעות פונקציות עצמיות של אופרטור X כאשר $|\psi(x_0)|^2$ צפיפות ההסתברות למדוד x_0.

מרחבים ווקטורים בסימון דירק

וקטור יסומן[10] $|\psi\rangle$

הפונקציונל שמפעיל מכפלה סקלרית $\langle\varphi|$

הגדרות

1. אז

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\langle\varphi|\,,|\psi\rangle)$$

2. הרמיטיות של המ"פ $\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle$

3. נסמן $\langle\varphi|T|\psi\rangle = (\langle\varphi|\,,T\,|\psi\rangle)$

4. הגדרת $T^\dagger$

$$\langle\varphi|T|\psi\rangle = \langle\psi|T|\varphi\rangle^*$$

5. אופרטור הרמיטי

$$\langle\psi|T|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|T|\psi\rangle$$

6. ניתן לתת הצגה מטריצית של אופרטור

$$T_{mn} = \langle u_n|T|u_n\rangle$$

[10] הרצאה ב 25.11.2004

7. $|a\psi\rangle = a\,|\psi\rangle\,, \langle a\varphi| = \langle\varphi|\,a^*$
8. $|T\psi\rangle = T\,|\psi\rangle$ **וגם** $\langle T\psi| = \langle\psi|\,T^\dagger$
9. $(T_1T_2)^\dagger = T_2^\dagger T_1^\dagger$
10. **בסיס שלם** - $\{|u_n\rangle\}$

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = 1$$

לכן

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

לדוגמה

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_n \langle u_n|\psi\rangle\,|u_n\rangle \\
|\varphi\rangle &= \sum_{n'} \langle u_{n'}|\varphi\rangle\,|u_{n'}\rangle \Rightarrow \langle\varphi| = \sum_{n'} \langle\psi|u_{n'}\rangle\,\langle u_{n'}| \\
\langle\varphi|\psi\rangle &= \sum_{n'} \langle\varphi|u_n\rangle\,\langle u_n|\psi\rangle\,\langle u_n|u_n\rangle \\
&= \left\langle \varphi\right| \sum_n |u_n\rangle\,\langle u_n|\,\left|\psi\right\rangle \\
\Rightarrow \sum_n |u_n\rangle\,\langle u_n| &= 1
\end{aligned}$$

הערה **למרכיבים של אופרטור** $\hat{x}$ **שלמות הבסיס** $|x\rangle$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\,\langle x|\,dx = 1$$

לכן

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\psi\rangle &= \int \langle\varphi|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle\,dx \\
&= \int \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dx
\end{aligned}$$

כאשר

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\psi\rangle\,|x\rangle\,dx$$

משפטים על אופרטור הרמיטי ($A^\dagger = A$)

1. ע"ע של אופרטור הרמיטי ממשיים.
2. ו"ע המתאימים לע"ע שונים הם א"ג

הוכחה

1. נניח $A^\dagger = A$ ו"ע הם $A\left|\psi\right\rangle = a\left|\psi\right\rangle$

$$\begin{aligned}\left\langle A\psi|\psi\right\rangle &= \left\langle \psi|A|\psi\right\rangle = \left\langle \psi|a|\psi\right\rangle \\ \left\langle a\psi|\psi\right\rangle &= a^* \left\langle \psi|\psi\right\rangle = \left\langle \psi|\psi\right\rangle a \\ \Rightarrow a &= a^*\end{aligned}$$

2. ו"ע המתאימים לע"ע שונים הם א"ג

$$\begin{aligned}\left\langle \varphi|A|\psi\right\rangle &= \left\langle \eta|a\psi\right\rangle = \left\langle \varphi|\psi\right\rangle a \\ &= \left\langle A\varphi|\psi\right\rangle = b\left\langle \varphi|\psi\right\rangle \\ \Rightarrow ab\left\langle \varphi|\psi\right\rangle &= 0 \\ \Rightarrow \left\langle \varphi|\psi\right\rangle &= 0\end{aligned}$$

נוון נניח שלערך עצמי מסוים a יש יותר מווקטור עצמי אחד (יש שני ו"ע לע"ע)

$$\begin{aligned}A\left|\psi_1\right\rangle &= a\left|\psi_1\right\rangle \\ A\left|\psi_2\right\rangle &= a\left|\psi_2\right\rangle\end{aligned}$$

אז נייצר בסיס א"ג

$$A\left(\alpha_1\left|\psi_1\right\rangle + \alpha_2\left|\psi_2\right\rangle\right) = a\left(\alpha_1\left|\psi_1\right\rangle + \alpha_2\left|\psi_2\right\rangle\right)$$

דרגת הניוון יוגדר ריבוי אלגברי או דרגת המרחב הנפרש ע"י ו"ע של הע"ע a.

הערה אופרטור הרמיטי מייצג כל גודל מדיד. ו"ע מהווים בסיס למרחב המצבים.

אופרטורים "מדידים" חילופיים

הגדרה אופרטורים שמקיימים את יחס החילוף $[A,B] = AB - BA = 0$ הם מדידים. (מתחלפים בכפל)

משפט לשני אופרטורים מדידים המצבים עצמיים משותפים $\Longleftrightarrow$ הם חילופיים. (מתחלפים בכפל)

הוכחה

1. צ"ל אם מצבים עצמיים משותפים אזי $[A,B]$
כלומר הנתון

$$\begin{aligned}A\left|\psi_a\right\rangle &= a\left|\psi_a\right\rangle \\ B\left|\psi_a\right\rangle &= b\left|\psi_a\right\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow BA\left|\psi_a\right\rangle &= Ba\left|\psi_a\right\rangle \\ &= aB\left|\psi_a\right\rangle \\ &= ab\left|\psi_a\right\rangle \\ \Rightarrow AB\left|\psi_a\right\rangle &= Ab\left|\psi_a\right\rangle \\ &= bA\left|\psi_a\right\rangle \\ &= ab\left|\psi_a\right\rangle\end{aligned}$$

לכן

$$\begin{aligned}\forall\psi; (AB - BA)\left|\psi\right\rangle &= 0 \\ \Rightarrow (AB - BA) &= O\end{aligned}$$

2. נניח $[A,B]=0$ שאין ניוון צ"ל המצבים משותפים.
נבחר

$$A\left|\psi_a\right\rangle = a\left|\psi_a\right\rangle$$

אז

$$\begin{aligned} A\left(B\left|\psi_a\right\rangle\right) &= BA\left|\psi_a\right\rangle = Ba\left|\psi_a\right\rangle \\ &= a\left(B\left|\psi_a\right\rangle\right) \end{aligned}$$

אז אם אין ניוון $B\left|\psi_a\right\rangle = b\left|\psi_a\right\rangle \Rightarrow$ אם יש ניוון

$$A\left|\psi_a^1\right\rangle = a\left|\psi_a^1\right\rangle$$

ובאותו אופן נוכיח.

מערכת שלמה של אופרטורים מדידים נניח שיש A מ"ע (מצב עצמי) $\left|\psi_a\right\rangle$ אם אינם מנוונים אפשר לתאר ע"י $\left|\psi_a\right\rangle$ את המערכת הפיזיקלית.
אם יש ניוון יש אופרטור נוסף $\left|\psi_a\right\rangle$ וקיים אופרטור נוסף $[B,A]=0$. סה"כ לכל סדר של ניוונים נוסיף אופרטורים חילופיים.

3 ניסוח פורמלי של תורת הקוונטים

סימונים

1. הסימון[11] של דירק
   $|\psi\rangle \in \mathbb{F}$ ווקטור

2. A אופרטור ליניארי במרחב $\mathbb{F}$ הוא הרמיטי

3. מ"ע (מצבים עצמים) מהווים בסיס למרחב $\mathbb{F}$

3.1 הנחות הפיזיקליות של תורת הקוונטים (אקסיומות)

1. מצב מערכת פיזיקלית = ווקטור $|\psi\rangle \in \mathbb{F}$. כל המצבים $|a\rangle, |\psi\rangle$ מנורמלים

$$1 = \langle a|a\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

2. גודל פיזיקלי "מדיד" ניתן ע"י אופרטור הרמיטי, A

3. התוצאות האפשריות למדידת A הן רק ע"ע a של A. [קוונטיזציה]

$$A\left|a\right\rangle = a\left|a\right\rangle$$

4. כאשר מודדים A במצב $|\psi\rangle$ ההסתברות למדוד מצב a כאשר אין ניוון $|\langle a|\psi\rangle|^2$
   כאשר יש ניוון מסדר n מודדים $\sum_{j=1}^{n}|\langle a_j|\psi\rangle|^2$

5. כאשר מודדים ב $|\psi\rangle$ את המצב a המצב קורס ל $|a\rangle$ $|\psi\rangle \rightarrow |a\rangle$

---

[11] הרצאה ב 29.11.2004

6. משוואת שרדינגר - התפתחות בזמן ל $|\psi\rangle$

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$$

כאשר H המילטוניאן (הביטוי הקלסי לאנרגיה)

$$\begin{aligned} H(r,P) &= \frac{P^2}{2m}+V(r) \\ &= \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+V(r)\right) \end{aligned}$$

7. מתקיים יחס חילוף (של אופרטורים)

$$-[x,P] = PX-XP=-i\hbar=[P,x]=\frac{\hbar}{i}$$

אופרטורים בלתי חילופים $\Leftarrow$ עקרון אי-ודאות.

דוגמה ניסוי שני סדקים הסתברות למדוד חלקיק ב x $|\langle\psi_x|\psi_s\rangle|^2$. **יש שני אפשריות** (מ"ע) $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$. ע"פ השלמות

$$|\psi_1\rangle\langle\psi_1|+|\psi_2\rangle\langle\psi_2| = 1$$

קיבלנו אופרטור. נשליך את האופטור

$$|\langle\psi_x|1|\psi_s\rangle|^2 = |\langle\psi_x|\psi_1\rangle\langle\psi_2|\psi_s\rangle+\langle\psi_x|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi_s\rangle|^2$$

אם נמדוד את הסדקים שמהם עברו החלקיקים. המצב יקרוס לאחד מהמ"ע.

3.2 סופרפוזיציה

היא

$$\begin{aligned} P_a(\psi) &= |\langle a|\psi\rangle|^2 \\ &= |\alpha_1\langle a|\psi_1\rangle+\alpha_2\langle a|\psi_2\rangle|^2 \\ &= \alpha_1^2\langle a|\psi_1\rangle^2+\alpha_2^2\langle a|\psi_2\rangle^2+2Re\alpha_1\alpha_1\langle a|\psi_1\rangle\langle a|\psi_2\rangle^* \end{aligned}$$

כלומר במצב של התאבכות (של מספר מצבים ללא מדידה) ההסתברות לא מסתכמת ליניארית, יש רכיב התאבכות

$$2Re\alpha_1\alpha_1\langle a|\psi_1\rangle\langle a|\psi_2\rangle^*$$

3.3 H בלתי תלוי בזמן

יהי H בלתי תלוי במפורש בזמן. ניתן לבצעה הפרדת משתנים אז

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

כלומר $|E_n\rangle$ מצבים בלתי תלויים בזמן. כלומר מאחר שבסיס למרחב $|\psi(t)\rangle\in\mathbb{F}$ אז ניתן לפרוש מצב כללי ע"י

$$|\psi(t)\rangle = \sum c_n(t)|E_n\rangle$$

נציב במשוואת שרדינגר

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} &= \sum i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt}\left|E_n\right\rangle \\
H\left|\psi\right\rangle &= \sum c_n(t)\,H\left|E_n\right\rangle
\end{aligned}
$$

לכן

$$
\sum i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt}\left|E_n\right\rangle = \sum c_n(t)\,H\left|E_n\right\rangle
$$

נשליך על $\left\langle E_n\right|$ (לא תלוי בזמן) (נזכיר כי $H = E_m$ ע"ע - כפל סימון)

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{d\left\langle E_m|\psi(t)\right\rangle}{dt} &= i\hbar\frac{dc_m(t)}{dt} = \sum c_n(t)\left\langle E_m\right|H\left|E_n\right\rangle = E_m c_m(t) \\
i\hbar\frac{dc_m(t)}{dt} &= E_m c_m(t) \\
\Rightarrow c_n &= ce^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}
\end{aligned}
$$

3.4 עקרון אי-הוודאות

- נניח $[A,B]=0$ כלומר אופרטורים חילופים $\Leftarrow$ קיים בסיס של מ"ע משותפים. אין ודאות במדידת a,b
- יהי $[A,B]\neq 0$ נגדיר אי-וודאות ע"י

$$
\Delta A = \sqrt{\left\langle\psi\right|\left(A-\left\langle\psi\right|A\left|\psi\right\rangle\right)^2\left|\psi\right\rangle}
$$

(סטית תקן)
אזי

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

כאשר A,B הרמיטים

הוכחה

נגדיר

$$
\lambda\in\mathbb{R};\left|\psi\right\rangle = (A+i\lambda B)\left|\psi\right\rangle
$$

אזי

$$
\begin{aligned}
0 &\leq \left\langle\psi|\psi\right\rangle \\
&= \left\langle\psi\right|(A-i\lambda B)(A+i\lambda B)\left|\psi\right\rangle \\
&= \left\langle\psi\right|A^2+i\lambda[A,B]+\lambda^2B^2\left|\psi\right\rangle \\
\left\langle A^2\right\rangle+i\lambda\left\langle[A,B]\right\rangle+\lambda^2\left\langle B^2\right\rangle &\geq 0
\end{aligned}
$$

עבור אופרטור הרמיטי

$$
\begin{aligned}
\left\langle\psi\right|A^2\left|\psi\right\rangle &= \left\langle\psi\right|A\cdot A\left|\psi\right\rangle \\
&\geq 0
\end{aligned}
$$

אזי

$$\begin{aligned}\left\langle A^2\right\rangle &\geq 0\\ \left\langle B^2\right\rangle &\geq 0\\ \langle[A,B]\rangle &= \langle\psi|\,[A,B]\,|\psi\rangle\\ &= \langle\psi|\,BA-AB\,|\psi\rangle\\ &= \langle\psi|\,BA\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,AB\,|\psi\rangle\\ &= \langle\psi|\,BA\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,BA\,|\psi\rangle^*=2Im\left(\langle\psi|\,BA\,|\psi\rangle\right)\end{aligned}$$

נבדוק את הדיסקרמיננטה של פולינום ריבועית

$$(i\lambda\langle[A,B]\rangle)^2-4\langle\psi|\,A\,|\psi\rangle\,\lambda\,\langle\psi|\,B\,|\psi\rangle \leq 0$$

נכון לכל A,B הרמיטים שלא מקיימים יחס חילוף ולכן נציב

$$\begin{aligned}A &\rightarrow A^{'}=A-\langle\psi|\,A\,|\psi\rangle\\ B &\rightarrow B^{'}=B-\langle\psi|\,B\,|\psi\rangle\end{aligned}$$

נציב בדסקרמיננטה אזי נציב $\lambda=1$

$$\begin{aligned}(i\langle[A,B]\rangle)^2-4\langle\psi|\,A^{'}\,|\psi\rangle\,\langle\psi|\,B^{'}\,|\psi\rangle &\leq 0\\ \Rightarrow\left\langle A^{'}\right\rangle\left\langle B^{'}\right\rangle &\geq \frac{1}{4}\left(i\langle[A,B]\rangle\right)^2\\ \Delta A\Delta B &\geq \frac{1}{2}\left|\langle[A,B]\rangle\right|\end{aligned}$$

■

מסקנה עבור האקסיומה של תורת הקוונטים $[x,P]=\frac{\hbar}{i}$ גורר

$$\Delta x\Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

3.5 התפתחות בזמן של ממוצע של גודל פיזיקלי מדיד

נמצא[12] ביטוי לנגזרת הממוצע בזמן

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)\,|A|\psi(t)\rangle = \left\langle\frac{d}{dt}\psi(t)\,|A|\psi(t)\right\rangle+\left\langle\psi(t)\,|\frac{d}{dt}A|\psi(t)\right\rangle+\left\langle\psi(t)\,|A|\frac{d}{dt}\psi(t)\right\rangle \quad (9)$$

ע"פ משוואת שרדינגר

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}|\psi\rangle &= \frac{1}{i\hbar}H\,|\psi\rangle\\ \left\langle\frac{d}{dt}\psi\right| &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\,H\end{aligned}$$

נציב חזרה במשוואה

$$(9)\Rightarrow\frac{d}{dt}\langle\psi(t)\,|A|\psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}\left\langle\psi(t)\,|\frac{d}{dt}A|\psi(t)\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)\,|\,[A,H]\,|\psi(t)\rangle$$

[12] הרצאה ב 2.12.2004

מסקנות

1. כאשר עבור A מקיים יחס חילוף $[A,H]=0$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = 0$$

לכן ערך התצפית של A בכל מצב - קבוע בפרט עבור מצב עצמי של A

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

$$\langle a|A|a\rangle = a$$

דוגמה P הזוגיות בבור ∞ $[H,P]=0$

2. $[A,H]=0$ אז יש $|a,E\rangle$ מ"ע משותפים ל-A ול-H. אפשר לאפיין את המצבים ע"י a,E.(קבוע=תנועה)

3.6 ערכי תצפית של x ו- P מתנהגים כמו באופן קלסי

נראה כי

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

ממשוואת שרדינגר

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[P,H]\rangle$$

אבל

$$\begin{aligned}\left[x,P^2\right] &= xp^2-p^2x=[x,p]\,p+p\,[x,p]=2i\hbar p\\ \left[P,x^{n+1}\right] &= [p,xx^n]=[p,x]\,x^n+x\,[p,x^n]=\frac{\hbar}{i}nx^n+\frac{\hbar}{i}x^n\\ &= \frac{\hbar}{i}(n+1)\,x^n\end{aligned}$$

וגם

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[x,H]\rangle \tag{10}$$

כאשר

$$\begin{aligned}H &= \frac{P^2}{2m}+V(x)\\ [x,H] &= \left[x,\frac{P^2}{2m}+V(x)\right]\\ &= \left[x,\frac{P^2}{2m}\right]+[x,v(x)]\\ &= \frac{1}{2m}2i\hbar p+0\\ &= \frac{\hbar ip}{m}\end{aligned}$$

$$(10) \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \frac{\hbar ip}{m}\right\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}$$

כלומר קיבלנו יש קשר בין שממוצע התנע לממוצע במיקום

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle [P,H]\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[P, \frac{P^2}{2m}+V(x)\right]\right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[P, \frac{P^2}{2m}\right]+[P,V(x)]\right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle 0+[P,V(x)]\rangle \\ &= -\left\langle \frac{d(V(x))}{dx}\right\rangle\end{aligned}$$

כלומר קיבלנו קשר בין ממוצע התנע לממוצע נגזרת הפוטנציאל
אזי גם קיבלנו כמעט את החוק השני של ניוטון

$$\begin{aligned}\Rightarrow m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} &= \left\langle \frac{d(V(x))}{dx}\right\rangle \\ &\neq \frac{dV(\langle x\rangle)}{d\langle x\rangle}\end{aligned}$$

3.7 ההצגה של איזנברג

הקדמה למדנו הצגת שרדינגר $|\psi(t)\rangle$ תלויים בזמן. אופרטורים H,P,X בלתי תלויים בזמן נניח H בלתי תלוי ב-t

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle$$

אזי

$$U(t-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$$

אופרטור יוניטרי עבור H הרמיטי.
נניח $|\psi(t_0)\rangle$ מ"ע של H

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

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

ההצגה של איזנברג

$$\begin{aligned}|\psi_S\rangle &= |\psi(t)\rangle \\ &= U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle\end{aligned}$$

אופרטורים (בהצגת איזנברג) יש דרישה שערכי תצפית בלתי תלויים בהצגה.

$$\langle\psi_S|A_S|\psi_S\rangle = \langle\psi_H|A_H|\psi_H\rangle$$

אבל

$$\begin{aligned} \langle\psi_S|A_S|\psi_S\rangle &= \psi_H^\dagger U^\dagger A_S U \psi_H \\ \Rightarrow A_H &= U^\dagger A_S U \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \end{aligned}$$

אז ניתן לראות כי

$$\begin{aligned} \frac{dX_H}{dt} &= \frac{P_H}{m} \\ \frac{dP_H}{dT} &= -\frac{dV(x_H)}{dX_H} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dA_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} H A_S e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} A_S H e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \\ \Rightarrow \frac{d}{dt}A_H &= \frac{i}{\hbar}[H, A_H] \\ \Rightarrow \frac{dA_H}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[A_H, H] \end{aligned}$$

נשים[13] לב גם כי עיקרון אי-הוודעות עבור הצגת שרדינגר

$$\left\langle \frac{d}{dt}A_S \right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A_S, H]\rangle$$

3.8 עקרון אי-הוודאות בזמן

כאשר אופרטור A מדיד (H, P, X) בלתי תלוי במפורש בזמן.
נובע ממשוואות שרדינגר

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[A, H]|\psi\rangle$$

אם מתקיים יחס חילוף

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = 0$$

בפרט $|\psi\rangle = |a\rangle$ נשמר.
אם אין יחס חילוף אז עיקרון אי-הוודאות הכללי

$$[A, B] \neq 0 \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[A, B]|\psi\rangle|$$

ניקח A אופרטור שאינו חילופי עם H

$$\begin{aligned} \Delta A \Delta E &\geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[A, H]|\psi\rangle| \\ &= \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d}{dt}\langle\psi|[A, H]|\psi\rangle\right| \end{aligned}$$

[13] הרצאה ב 6.12.2004

נגדיר

$$\Delta t = \frac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt}\langle\psi|\left[A,H\right]|\psi\rangle\right|}$$
$$\Rightarrow \Delta t\Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

הסבר Δt הזמן שבו הממוצע חולף על פני קטע ΔA המאפיין את השינוי במערכת.

4 שיטות פתרון

נתון

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle$$

H אופרטור נתון באמצעות X,P $\left[X,P\right]=i\hbar,$.
חשוב מאוד למדוד ע"ע של H

$$\psi(t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\psi\rangle$$

שיטות לפתרון

שיטות מדויקות

1. שיטה מטריצית
2. שיטה אופרטורית
3. שיטה של משואה דיפרנציאלית

שיטות מקורבות

1. תורת ההפרעות הבלתי תלויות בזמן
2. שיטת הווריאציות

4.1 שיטת מטריצית

הערה שיטה מטריצית טובה כאשר יש מספר מצבים סופי

4.1.1 מערכת עם 2 מצבים

דוגמאות

1. ספין של אלקטרון - שתי דרגות חופש $\uparrow\downarrow$
2. H_2^+ יון מימן - כלומר מולקולה של שני מימנים ואלקטרון אחד נע בניהם
3. מולקולת האמוניה H_3N

שאלה נתונים שני מצבים

$$H_0|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$$
$$H_0|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle$$

בגלל הזנחות יש תוספת ל-H שיקרא W נניח שידוע

$$\begin{aligned}
\langle\psi_1|W|\psi_1\rangle &= w_{11}\\
\langle\psi_2|W|\psi_2\rangle &= w_{22}\\
\langle\psi_2|W|\psi_1\rangle &= w_{21}\\
\langle\psi_1|W|\psi_2\rangle &= w_{12}
\end{aligned}$$

כלומר בבסיס $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ אז

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

E_1, E_2 ממשים.

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$$

w_{11}, w_{22} ממשים וגם $w_{12} = w_{21}^*$
נניח גם $w_{11} = 0, w_{22} = 0$, w_{12} ממשי אז

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + W\\
&= \begin{pmatrix} E_1 & w_{12} \\ w_{12} & E_2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

נמצא אנרגיה המערכת ומצבים העצמיים של H. נסמן ע"ע $E_\pm$ כלומר

$$H|\psi_\pm\rangle = E_\pm|\psi_\pm\rangle$$

כאשר בהצגה

$$H = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}$$

נמצא מטריצת מעבר אבל כל מטריצה הרמיטית ניתנת ללכסון ע"י מטריצה יוניטרית למטריצה אלכסונים

$$U^\dagger H U = D$$

במקרה שלנו U א"ג כלומר הצורה הכללית (לא כולל שיקוף הציר אחד)

$$U = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

דרישת הלכסון

$$UHU^\dagger = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}$$

המטרה למצוא θ באמצעות E_1, E_2, w_{12}

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_1 & w_{12} \\ w_{12} & E_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}\\
\Rightarrow \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -E_1\sin\theta + w_{12}\cos\theta \\ -w_{12}\sin\theta + E_2\cos\theta \end{pmatrix} &= 0\\
\frac{1}{2}\sin 2\theta\,(E_2 - E_1) + w_{12}\cos 2\theta &= 0\\
\tan 2\theta &= \frac{2w_{12}}{E_1 - E_2}
\end{aligned}$$

סה"כ

$$
\begin{aligned}
|\psi_\pm\rangle &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \\
\tan 2\theta &= \frac{2w_{12}}{E_1 - E_2}
\end{aligned}
$$

נמצא ע"ע

$$
\begin{aligned}
det\begin{pmatrix} E_1 - E & w_{12} \\ w_{12} & E_2 - E \end{pmatrix} &= (E_1 - E)(E_2 - E) - w_{12}^2 = 0 \\
E^2 - E(E_1 + E_2) + E_1E_2 - w_{12}^2 &= 0 \\
E_\pm &= \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4w_{12}}
\end{aligned}
$$

הערה יש 2 מצבים קיצוניים

1. עבור $|2w_{12}| \ll |E_1 - E_2|$

$$
\begin{aligned}
\tan 2\theta &\approx \sin 2\theta \approx \frac{2w_{12}}{E_1 - E_2} \\
|\theta| \ll 1, \cos 2\theta &\approx 1 \\
|\psi_+\rangle &\approx |\psi_-\rangle + \frac{w_{12}}{E_1 - E_2}|\psi_2\rangle
\end{aligned}
$$

2. $|2w_{12}| \gg |E_1 - E_2|$ לדוגמה במקרה של ניוון התחלתי באנרגיה $E_1 = E_2$ ואז

$$
\theta \simeq \frac{\pi}{4}
$$

ואז

$$
|\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle \pm |\psi_2\rangle)
$$

התפתחות מצב בזמן נניח[14] שבזמן $t = 0$ המצב הוא $|\psi_1\rangle$, מה ההסתברות למצוא את האלקטרון בזמן t במצב $|\psi_2\rangle$?

הפתרון

$$
\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= \cos\theta|\psi_+\rangle - \sin\theta|\psi_-\rangle \\
|\psi_2\rangle &= \cos\theta|\psi_+\rangle + \sin\theta|\psi_-\rangle
\end{aligned}
$$

המצב הכללי

$$
|\psi(t)\rangle = a_+ e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t}|\psi_+\rangle + a_- e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\psi_-\rangle
$$

כאשר תנאי התחלה

$$
\begin{aligned}
|\psi_1(t=0)\rangle &= \cos\theta|\psi_+\rangle - \sin\theta|\psi_-\rangle \\
\Rightarrow |\psi_1(t)\rangle &= \cos\theta e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t}|\psi_+\rangle - \sin\theta e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\psi_-\rangle
\end{aligned}
$$

[14] הרצאה ב- 7.12.2004

אזי

$$\begin{aligned}
P_{1\to 2}(t) &= \left|\langle\psi_2|\psi(t)\rangle\right|^2\\
\langle\psi_2|\psi_+\rangle &= \sin\theta\\
\langle\psi_2|\psi_-\rangle &= \cos\theta\\
P_{1\to 2}(t) &= \frac{1}{4}\sin^2 2\theta\left|e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}-e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}\right|^2
\end{aligned}$$

תרגיל

$$\begin{aligned}
\left|e^{-\alpha_!}-e^{-\alpha_2}\right|^2 &= \left|e^{-i\frac{\alpha_1+\alpha_2}{2}}\right|^2\left|e^{-i\frac{(\alpha_!-\alpha_2)}{2}}-e^{i\frac{(\alpha_1-\alpha_2)}{2}}\right|^2\\
&= 1\cdot\left|2i\sin\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}\right|^2=4\sin^2\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}
\end{aligned}$$

נוסחת $(Rabi)$ למעבר ממצב $1\to 2$ בזמן t:

$$P_{1\to 2}(t) = \sin^2 2\theta\sin^2\left(\frac{E_+-E_-}{2\hbar}t\right)$$

4.2 אוסילטור הרמוני

4.2.1 אוסילטור הרמוני חד ממדי

$V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ כאשר ω התדירות הקלסית.

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

צ"ל

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

הוכחה (ניתן נרשום את משוואת שרדינגר הלא תלויה בזמן

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u_E(x) = Eu_E(x)$$

ולפתור אותה בצורה דיפרנציאלית)
נפטור ע"י שיטה אופרטורית
אנו יודעים כי $[p,x]=-i\hbar$

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

נרשום

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(X^2+P^2\right)$$

כאשר X,P חסר ממדים.

$$
\begin{aligned}
X &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \\
P &= \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p
\end{aligned}
$$

לכן

$$
[P,X] = -i
$$

נגדיר $A=\frac{1}{\sqrt{2}}(X+iP)$ (כאשר X,P הרמיטים) נגדיר אופרטור "חדש"

$$
A^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X-iP)
$$

לכן ההמילטוניאן

$$
\begin{aligned}
H &= \hbar\omega A^\dagger A + \frac{\hbar\omega}{2} i [P,X] \\
([P,X]=-i) \Rightarrow \quad &= \hbar\omega A^\dagger A + \frac{\hbar\omega}{2}
\end{aligned}
$$

כאשר יחס החילוף

$$
\left[A,A^\dagger\right] = 1
$$

נבדוק את יחס החילוף $[H,A]$

$$
\begin{aligned}
[H,A] &= \left[\hbar\omega A^\dagger A + \frac{\hbar\omega}{2}, A\right] \\
&= \hbar\omega\left[A^\dagger A, A\right] \\
&= \hbar\omega\left[A^\dagger, A\right]A = -\hbar\omega A \\
\left[H,A^\dagger\right] &= \ldots = \hbar\omega A^\dagger
\end{aligned}
$$

טענה A מוריד ע"ע של H ב- $\hbar\omega$
$A^\dagger$ מעלה ע"ע של H ב-$\hbar\omega$

הוכחה

1. נניח $H|E\rangle = E|E\rangle$ ונוכיח כי

$$
H(A|E\rangle) = (E-\hbar\omega)(A|E\rangle)
$$

אבל

$$
\begin{aligned}
&HA|E\rangle \\
([H,A]=-\hbar\omega A \Rightarrow HA-AH=-\hbar\omega A) \Rightarrow \quad &= AH|E\rangle - \hbar\omega A|E\rangle \\
&= AE|E\rangle - \hbar\omega A|E\rangle \\
&= (E-\hbar\omega)(A|E\rangle)
\end{aligned}
$$

2. נוכיח כי

$$H\left(A^{\dagger}|E\rangle\right) = (E-\hbar\omega)\left(A^{\dagger}|E\rangle\right)$$

אבל

$$\begin{aligned} & & HA^{\dagger}|E\rangle \\ \left(\left[H,A^{\dagger}\right]=\hbar\omega A^{\dagger}\Rightarrow HA^{\dagger}-A^{\dagger}H=\hbar\omega A^{\dagger}\right)\Rightarrow &=& A^{\dagger}H|E\rangle+\hbar\omega A^{\dagger}|E\rangle \\ &=& A^{\dagger}E|E\rangle+\hbar\omega A^{\dagger}|E\rangle \\ &=& (E+\hbar\omega)\left(A^{\dagger}|E\rangle\right) \end{aligned}$$

נבדוק מהם E?

1. $E\geq 0$ בגלל ש

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

כלומר סכום של ריבועי אופרטורים הרמיטים ולכן ע"ע חיובים.

2. A מוריד E בשיעור $\hbar\omega$
3. $A|E_0\rangle=0$ מצב נמוך ביותר. (כלומר אחד מעל $|E\rangle=0$)
4. מהו E_0

$$\begin{aligned} H|E_0\rangle &=& \hbar\omega A^{\dagger}A|E_0\rangle+\frac{1}{2}\hbar\omega|E_0\rangle \\ &=& \frac{1}{2}\hbar\omega|E_0\rangle \end{aligned}$$

כלומר $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ אז

$$n\in\mathbb{N}\cup\{0\};E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

צ"ל

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

הוכחה נוכיח $|E_n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}A^{\dagger}|E_{n-1}\rangle$
אנו יודעים $|E_n\rangle=b_nA^{\dagger}|E_{n-1}\rangle$ וצריך לנרמל

$$\begin{aligned} \langle E_n|E_n\rangle &=& b_n^2\left\langle E_{n-1}|AA^{\dagger}|E_{n-1}\right\rangle \\ \left(\left[A,A^{\dagger}\right]=1\right)\Rightarrow &=& b_n^2\left\langle E_{n-1}|A^{\dagger}A+1|E_{n-1}\right\rangle \end{aligned}$$

אבל

$$H = \hbar\omega\left(A^{\dagger}A+\frac{1}{2}\right)$$

לכן מהנרמול

$$\begin{aligned} &=& b_n^2n=1 \\ \Rightarrow b_n &=& \frac{1}{\sqrt{n}} \end{aligned}$$

הערות

1. ניתן היה לפתור אם

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u_E(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u_E(x) = Eu_E(x)$$

והתנהגות אסימפטוטית.

2. כמוכן ניתן לפתור ע"י

$$\begin{aligned}
A\left|E_0\right\rangle &= 0\\
\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)u_{E_0}(x) &= 0\\
\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)u_{E_0}(x) &\\
u_{E_0}(x) &= ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\\
u_{E_n}(x) &= c\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\\
&= c\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}
\end{aligned}$$

4.3 מצבים של תנע זוויתי בפיזיקה קוונטית

הערה תנע[15] זוויתי חשוב מאוד בבעיות שבהם $V(\vec{r})=V(r)$ אז תנע זוויתי נשמר.

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

פיתוח נתונים היחסי חילוף

$$\begin{aligned}
[x,p_x] &= i\hbar\\
[y,p_y] &= i\hbar\\
[z,p_z] &= i\hbar
\end{aligned}$$

(לכן $\vec{L}$ הוא אופרטור מסובך)

1. נראה יחס חילוף

$$\begin{aligned}
[L_x,L_y] &= i\hbar L_z\\
[L_y,L_z] &= i\hbar L_x\\
[L_z,L_x] &= i\hbar L_y
\end{aligned}$$

הוכחה

$$\begin{aligned}
[L_x,L_y] &= [yp_z-zp_y,zp_x-xp_z]\\
&= [yp_z,zp_x]-[zp_y,zp_x]-[yp_z,xp_z]+[zp_y,xp_z]\\
&= y[p_z,z]p_x-0-0+[z,p_z]p_yx=i\hbar(xp_y-yp_x)=i\hbar L_z
\end{aligned}$$

[15] הרצאה ב 13.12.2004

2. נמצא גודל של $\sqrt{\vec{L}^2} = \left|\vec{L}\right|$

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\
\left[L^2, L_x\right] &= \left[L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x\right] \\
&= \left[L_y^2, L_x\right] + \left[L_z^2, L_x\right] \\
&= L_y\left[L_y, L_x\right] + \left[L_y, L_x\right]L_y + L_z\left[L_z, L_x\right] + \left[L_z, L_x\right]L_z \\
&= -i\hbar L_z L_y - -i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0
\end{aligned}$$

3. לכן מצבים של תנע זוויתי הם מצבים עצמיים של $\vec{L}^2, L_z$ נסמן

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2\left|\lambda, m\right\rangle &= \lambda\hbar^2\left|\lambda, m\right\rangle \\
L_z\left|\lambda, m\right\rangle &= m\hbar\left|\lambda, m\right\rangle
\end{aligned}$$

נרצה למצוא ע"ע m, λ

טענה

$$\begin{aligned}
\ell \in \left\{l | l = \frac{n}{2}, n \in \mathbb{N}\right\} \cup \{0\}; \lambda &= \ell(\ell+1) \\
m &\in \left\{l | l = \frac{n}{2}, n \in \mathbb{N}, -\ell \leq l \leq \ell\right\}
\end{aligned}$$

הוכחה נסמן

$$\begin{aligned}
L_+ &= L_x + iL_y \\
L_- &= L_x - iL_y
\end{aligned}$$

אופרטור מעלה ומוריד בהתאמה

$$L_z\left|\lambda, m\right\rangle = m\hbar\left|\lambda, m\right\rangle$$

צ"ל

$$\begin{aligned}
L_z\left(L_+\left|\lambda, m\right\rangle\right) &= (m+1)\hbar\left|\lambda, m\right\rangle \\
\vec{L}^2\left(L_+\left|\lambda, m\right\rangle\right) &= \lambda\hbar^2\left(L_+\left|\lambda, m\right\rangle\right) \\
L_z\left(L_-\left|\lambda, m\right\rangle\right) &= (m-1)\hbar\left|\lambda, m\right\rangle \\
\vec{L}^2\left(L_-\left|\lambda, m\right\rangle\right) &= \lambda\hbar^2\left(L_-\left|\lambda, m\right\rangle\right)
\end{aligned}$$

נראה

$$\begin{aligned}
\left[L_z, L_+\right] &= \hbar L_+ \\
\left[L_z, L_-\right] &= -\hbar L_-
\end{aligned}$$

אבל

$$\begin{aligned}
\left[L_z, L_+\right] &= \left[L_z, L_x + iL_y\right] \\
&= i\hbar L_y + i\left(-i\hbar L_x\right) \\
&= \hbar\left(L_x + iL_y\right) = \hbar L_+ \\
\left[\vec{L}^2, L_+\right] &= \left[\vec{L}^2, L_x + iL_y\right] = 0 \\
\left[L_z, L_-\right] &= \left[L_z, L_x - iL_y\right] \\
&= i\hbar L_y + i\left(i\hbar L_x\right) \\
&= -\hbar\left(L_x - iL_y\right) = -\hbar L_- \\
\left[\vec{L}^2, L_-\right] &= \left[\vec{L}^2, L_x - iL_y\right] = 0
\end{aligned}$$

כמובן נשים לב כי

$$\begin{aligned}
L_+L_- &= (L_x+iL_y)(L_x-iL_y)\\
&= L_x^2+L_y^2-i[L_x,L_y]\\
&= L_x^2+L_y^2+\hbar L_z\\
\Rightarrow L_+L_- &= \vec{L}^2-L_z^2+\hbar L_z\\
L_-L_+ &= \vec{L}^2-L_z^2-\hbar L_z
\end{aligned}$$

טענות

- $\lambda \geq 0$ מאחר שע"ע של תבנית ריבועית מסדר שני של אופרטורים הרמיטים

$$\vec{L}^2 = L_x^2+L_y^2+L_z^2$$

- m חסום ע"י λ

$$\begin{aligned}
L_+L_- &= L_-^\dagger L_-\\
\Rightarrow \langle\lambda m|L_+L_-|\lambda m\rangle &\geq 0\\
\langle\lambda m|L_+L_-|\lambda m\rangle &= \left\langle\lambda m|\vec{L}^2-L_z^2+\hbar L_z|\lambda m\right\rangle\\
\Rightarrow \hbar^2\left[\lambda-m^2+m\right] &\geq 0\\
\Rightarrow \lambda-m(m-1) &\geq 0\\
\lambda-m(m+1) &\geq 0
\end{aligned}$$

נגדיר $\lambda=\ell(\ell+1)$. הסכם נבחן רק $\ell\geq 0$

$$\begin{aligned}
\lambda &= \ell(\ell+1)\geq 0\\
\ell(\ell+1) &\geq m(m-1)\\
\ell(\ell+1) &\geq m(m+1)\\
\Rightarrow m &\leq \ell\\
m &\geq -\ell
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\ell\leq m\leq \ell$$

אבל L_+ מעלה m ב-1 כלומר יש מקסימום. עבור m_1 הגבוה ביותר, m_2 הנמוך ביותר.

$$\begin{aligned}
L_+|m_1\rangle &= 0\\
L_-|m_2\rangle &= 0
\end{aligned}$$

הרצאה ב 30.12.2004

אטום מימן פתרנו במדויק $|n,l,m\rangle$ שמתאימים ל-$\left(H,\vec{L}^2,L_z\right)$. ידועות לנו גם $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ וגם

$$\int d\Omega Y_{l,m}^*Y_{l'm'} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

מהמשוואה הרדיאלית

$$E_n = -(13.6ev)\frac{1}{n^2}$$

כאשר יש ניוון ב-m וניוון ב-l (רק לאטום מימן). כאשר ידוע

$$R_{n,l}(r) = \ldots$$

כאשר

$$u = rR; \int_0^\infty u_{n,l}^2 dv = \int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1$$

האם $R_{n,l}$ א"ג

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}u + v(r)\right) &= H_r \\ H_r u &= Eu\end{aligned}$$

וגם H_r הרמיטי ולכן

$$\begin{aligned}\int_0^\infty u_{n,l}u_{n',l}dr &= \delta_{nn'} \\ \int_0^\infty R_{nl}R_{n'l}r^2 dr &= \delta_{nn'}\end{aligned}$$

כלומר רק עבור $l = l'$ אנו מקבלים פונקציות א"ג.

הסתברות

$$|Y_{l,m}(\theta,\varphi)| = |Y_{l,m}(\theta)|$$

למשל עבור

$$|Y_{0,0}| = const$$

כלומר סימטריה כדורית
עבור

$$|Y_{10}| = c|\cos\theta|$$

5 תורת ההפרעות הבלתי תלויה בזמן

time − independent perturbation thoery

נניח שפתרנו את המצבים והאנרגיות של H_0. אזי הפתרון הידוע

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle$$

נקרא ל-W תוספת הפרעה.

$$H = H_0 + W$$

נניח שההפרעה חלשה כלומר

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|H_0|\varphi_n\rangle &= E_n^0 \\ \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle &\ll E_n^0\end{aligned}$$

נסמן $W=\lambda H_1$ כאשר נדרוש H_1 בסדר גודל H_0 כלומר ההפרש בין H_0 ו-W הוא קבוע חסר ממדים $\lambda\ll 1$. לכן

$$H = H_0+\lambda H_1$$

כלומר אנו רוצים לפתור את

$$\begin{aligned} H\left|\psi_n\right\rangle &= E_n\left|\psi_n\right\rangle \\ \left(H_0+\lambda H_1\right)\left|\psi_n\right\rangle &= E_n\left|\psi_n\right\rangle \end{aligned}$$

5.1 תורת ההפרעות ללא ניוון

נפתח את E_n ו- $\left|\psi_n\right\rangle$ כטור ב-λ.

$$E_n(\lambda) = E_n^0+\lambda E_n^1+\lambda^2E_n^2+\ldots=\sum_{k=0}^{\infty}E_n^k\lambda^k$$

נפתח את $\left|\psi_n\right\rangle$, אם נסמן $N(\lambda)$ כגורם נרמול

$$\left|\psi_n(\lambda)\right\rangle = N(\lambda)\left[\left|\varphi_n\right\rangle+\sum_{k\neq n}c_{nk}(\lambda)\left|\varphi_k\right\rangle\right]$$

לכן טור המקדמים

$$c_{nk}(\lambda) = \lambda c_{ck}^{(1)}+\lambda^2c_{nk}^{(2)}+\ldots$$

לכן נציב

$$\begin{aligned} &\left(H_0+\lambda H_1\right)\left(\left|\varphi_n\right\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+\lambda^2\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle+\ldots\right) \\ = &\left(E_n^0+\lambda E_n^1+\lambda^2E_n^2+\ldots\right)\left(\left|\varphi_n\right\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+\lambda^2\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle+\ldots\right) \end{aligned}$$

אנו רוצים שהשוואה תתקיים בכל סדר

$$\begin{aligned} \lambda^0;H_0\left|\varphi_n\right\rangle &= E_n^0\left|\varphi_n\right\rangle \\ \lambda^1;H_0\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+H_1\left|\varphi_n\right\rangle &= E_n^0\sum_{k\neq n}c_{n,k}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+E_n^1\left|\varphi_n\right\rangle \\ \lambda^2:H_0\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle+H_1\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle &= E_n^0\sum_{k\neq n}c_{n,k}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle+E_n^1\sum_{k\neq n}c_{n,k}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+E_n^2\left|\varphi_n\right\rangle \end{aligned}$$

5.1.1 תורת ההפרעות בסדר ראשון

נהפוך צדדים במשוואה.

$$\begin{aligned} \left\langle\varphi_n\right|\cdot\left[E_n^0\sum_{k\neq n}c_{n,k}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle+E_n^{'}\left|\varphi_n\right\rangle\right] &= E_n^1 \\ \Rightarrow\Delta E_n^1=\lambda E_n^1 &= \left\langle\varphi_n\right|W\left|\varphi_n\right\rangle \\ &= \left\langle\varphi_n\right|\lambda H_1\left|\varphi_n\right\rangle \end{aligned}$$

לכן התיקון לאנרגיה E_n מסדר ראשון = לערך התצפית של ההפרעה במצב בלתי מופרע. התיקון לאנרגיה מסדר ראשון

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$

נבדוק את ההטלה על $|\varphi_k\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_k | \cdot \left[E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{n,k}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{'} |\varphi_n\rangle \right] &= E_k^0 c_{n,k}^{(1)} + \langle \varphi_k | H_1 | \varphi_n \rangle \\
&= E_n^0 c_{n,k}^{(1)} \\
\Rightarrow \lambda c_{n,k}^{(1)} &= \frac{\langle \varphi_k | \lambda H_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \\
\Rightarrow |\psi_n\rangle &= |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} |\varphi_k\rangle
\end{aligned}$$

לצורך תורת ההפרעות נדרוש

$$|\langle \varphi_k | W | \varphi_n \rangle| \ll \left| E_n^0 - E_k^0 \right|$$

במצב זה (תרגיל בית) הנרמול הוא

$$N(\lambda) = 1 + o\left(\lambda^2\right)$$

5.1.2 תורת ההפרעות מסדר שני

נשליך[16] על $\langle \varphi_n|$

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_n | \left[H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + H_1 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle \right] &= \langle \psi_n | H_1 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle \\
&= \langle \varphi_n | \left[E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{n,k}^{(2)} |\varphi_k\rangle + E_n^1 \sum_{k \neq n} c_{n,k}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^2 |\varphi_n\rangle \right] \\
&= \langle \varphi_n | E_n^2 |\varphi_n\rangle \\
\Rightarrow \lambda^2 E_n^2 &= \sum_{k \neq n} \lambda c_{nk}^{(1)} \langle \psi_n | \lambda H_1 |\varphi_k\rangle \\
&= \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \lambda H_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \langle \psi_n | \lambda H_1 |\varphi_k\rangle \\
&= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}
\end{aligned}$$

הערות

1. ההפרעה מורידה את רמת היסוד (כי בטור $E_n^0 - E_k^0 < 0$)
2. ("רמות דוחות זו את זו")
3. השפעת רמה שכנה גדלה ככל שהפרש האנרגיה קטן.

[16] הרצאה ב 3.1.2005

1. תרגיל $\lambda^2 E_n^2 \le \frac{(\Delta W)_n^2}{\Delta E}$

$$(\Delta W)^2 = \left\langle \varphi_n | W^2 | \varphi_n \right\rangle - \left(\left\langle \varphi_n | W | \varphi_n \right\rangle\right)^2$$

כאשר ΔE המרחק לאנרגיה הקרובה ביותר.

$$\begin{aligned}
\lambda^2 E_n^2 &\le \frac{1}{\Delta E} \sum_{k \neq n} \left| \left\langle \varphi_k | W | \varphi_n \right\rangle \right|^2 \\
&= \frac{1}{\Delta E} \sum_{k} \left\langle \varphi_n | W | \varphi_k \right\rangle \left\langle \varphi_k | W | \varphi_n \right\rangle - \left(\left\langle \varphi_n | W | \varphi_n \right\rangle\right)^2 \\
&= \frac{1}{\Delta E} \left[\left\langle \varphi_n | W^2 | \varphi_n \right\rangle - \left(\left\langle \varphi_n | W | \varphi_n \right\rangle\right)^2 \right] \\
&= \frac{(\Delta W)^2}{\Delta E}
\end{aligned}$$

דוגמה אטום מימן בשדה חשמלי "חלש"

ברמת היסוד $n = 1, l = m = 0$, כלומר יש רק מצב אחד בעל אנרגיה

$$\begin{aligned}
E_1^0 &= -13.6eV \\
&= -\frac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2
\end{aligned}$$

נבחר את הכיוון של השדה החשמלי בכיוון z. $\vec{E} = Ez$ אז

$$\begin{aligned}
H_0 &= \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \\
W &= eEz \\
\langle z_1 \rangle &\sim r_1 \sim 10^{-8} cm
\end{aligned}$$

תיקון לאנרגית היסוד בסדר ראשון

$$\begin{aligned}
\Delta E_1^1 &= \lambda E_1^1 = \langle \varphi_1 | W | \varphi_1 \rangle \\
&= \langle 1,0,0 | eEz | 1,0,0 \rangle \\
&= eE \langle 1,0,0 | z | 1,0,0 \rangle \\
&= eE \int d^3 r \varphi_{1,0,0}^* (\vec{r})\, z \varphi_{1,0,0} (\vec{r}) = * \\
\varphi_{n,l,m} (\vec{r}) &= R_{n,l} (\vec{r})\, Y_{l,m} (\theta, \varphi)
\end{aligned}$$

נשים לב לזוגיות של הפונקציה $\varphi_{n,l,m}(\vec{r})$

$$\begin{aligned}
\varphi_{n,l,m} (-\vec{r}) &= (-1)^l \varphi_{n,l,m} (\vec{r}) \\
\vec{r} &\to \vec{r} \\
r &\to r \\
\theta &\to \pi - \theta, \varphi \to \pi + \varphi
\end{aligned}$$

לכן

$$* = 0$$

נבדוק סדר שני

$$\Delta E_1^2 = e^2E^2 \sum_{\substack{n\neq 1\\ l,m}} \frac{|\langle 1,0,0|z|n,l,m\rangle|^2}{E_1^0-E_n^0}$$

$$E_1^0-E_n^0 = -13.6\left(1-\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{e^2}{2r_1}\left(1-\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{e^2}{2r_1}\left(\frac{n^2-1}{n^2}\right)$$

$$\begin{aligned}
\langle 1,0,0|z|n,l,m\rangle &= \int r^2 dr R_{10}^*(r)R_{n,l}(r)\int d\Omega Y_{00}^* Y_{l,m}(r\cos\theta)\\
(d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi)\Rightarrow &= \int r^3 dr R_{10}^*(r)R_{n,l}(r)\int d\Omega Y_{00}^* Y_{l,m}\cos\theta\\
&= \int r^3 dr R_{10}^*(r)R_{n,l}(r)\int d\Omega\left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right)Y_{10}^*\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{l,m}\\
&= \int r^3 dr R_{10}^*(r)R_{n,l}(r)\frac{1}{\sqrt{3}}\int d\Omega Y_{lm}Y_{10}^*\\
&= \int r^3 dr R_{10}^*(r)R_{n,l}(r)\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{l,1}\delta_{m,0}\\
\left(R_n=\int r^3 dr R_{10}^*(r)R_{n,1}(r)\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}}R_n\delta_{l,1}\delta_{m,0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow |\langle 1,0,0|z|n,l,m\rangle|^2 &= \frac{1}{3}R_n^2 = f(n)r_1^2\\
f(n) &= \frac{2^8n^7(n-1)^{2n-5}}{3(n+1)^{2n+5}}\\
\Delta E_1^2 &= -2e^2E^2r_1^3\sum_{\substack{n\neq 1\\ l,m}}\frac{n^2f(n)}{n^2-1}
\end{aligned}$$

מחישוב נומרי

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{n\neq 1\\ l,m}}\frac{n^2f(n)}{n^2-1} &= 1.125\\
\Rightarrow \Delta E_1^2 &= -2.25e^2E^2r_1^3
\end{aligned}$$

קיבלנו את אפקט סטרק הריבועי.

תרגיל בית ניתן[17] להראות

$$\left|\Delta E_1^2\right| \le \frac{e^2E^2\left\langle 100|Z^2|100\right\rangle}{\left|E_1^0-E_2^0\right|}$$

לפי שלמות המצבים. המצב $\langle 100|$ בלתי תלוי ב-θ,φ

$$\begin{aligned}
\frac{1}{3}\left\langle r^2\right\rangle &= \left\langle\left|z^2\right|\right\rangle = \left\langle\left|x^2\right|\right\rangle = \left\langle\left|y^2\right|\right\rangle\\
\Rightarrow \frac{1}{3}\left(3r_1^2\right) &= r_1^2
\end{aligned}$$

[17] הרצאה ב 6.1.2005

וידוע $Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. בנוסף $\left|E_1^0-E_2^0\right|=\frac{3}{8}\frac{e^2}{r_1}$כלומר

$$\left|\Delta E_1^2\right| \leq \frac{8}{3}r_1^3E^2$$

5.2 תורת ההפרעות אם נוון

למשל $n=2$ המצבים $l=0,m=0,l=1,m=0,\pm1$

נקרה לדרגת הניוון של מצב n: $N_n=4$. המצב $|\varphi_n\rangle$ מנוון באנרגיה E_2^0. נסמן $i=$ אינדקס הניוון $(i=1,2,3,4)$ אז

$$H_0\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle = E_n^0\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle$$

אינדקס הניוון קשור לאופרטורים אחרים החילופים בינם לבין עצמם ועם H. כלומר יש

$$[I,H_0] = 0$$

כאשר לא היה ניוון $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle=\delta_{nm}$. ניתן לבחור אופרטורים I כך ש

$$\left\langle\varphi_n^i|\varphi_m^j\right\rangle = \delta_{nm}\delta_{ij}$$

לכן גם כל וקטור במרחב הע"ע או הערך תצפית הוא בעצמו ו"ע לכן

$$H_0\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle = E_n^0\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle$$

אזי

$$|\psi_n\rangle = N\left[\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\sum_{i=1}^{N_k}\beta_i\left|\varphi_k^{(i)}\right\rangle+\lambda^2\ldots\right]$$

$$\begin{aligned}(H_0+\lambda H_1)&\left[\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\sum_{i=1}^{N_k}\beta_i\left|\varphi_k^{(i)}\right\rangle\right]\\ =\ &\left[E_0+\lambda E_n^1+\ldots\right]\left[\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\sum_{i=1}^{N_k}\beta_i\left|\varphi_k^{(i)}\right\rangle\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow\lambda_0: H_0\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle &= E_0\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle\\ \lambda_1: H_0\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\sum_{i=1}^{N_k}\beta_i\left|\varphi_k^{(i)}\right\rangle+H_1\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle &= E_0\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\sum_{i=1}^{N_k}\beta_i\left|\varphi_k^{(i)}\right\rangle+E_n^1\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle\\ 0+H_1\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle &= E_n^1\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle\end{aligned}$$

נכפיל ב- $\left\langle\varphi_n^{(j)}\right|$ ונקבל

$$\begin{aligned}\left\langle\varphi_n^{(j)}\right|W\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle &= \left\langle\varphi_n^{(j)}\right|\lambda E_n^1\sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle\\ \sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i\left\langle\varphi_n^{(j)}\right|W\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle &= \lambda E_n^1\alpha_j\end{aligned}$$

מטריצת ההפרעה במרחב של המצבים המנוונים $h_{ji}=\left\langle \varphi_n^{(j)}\middle| W \middle|\varphi_n^{(i)}\right\rangle$ המטריצה מסדר $N_n\times N_n$ לכן

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N_n} h_{ji}^{(n)}\alpha_i &= \Delta E_n^1\alpha_j\\ \Rightarrow \left[h^{(n)}\right]\vec{\alpha}_k &= \Delta E_{n,k}^1\vec{\alpha}_k\end{aligned}$$

לכן קיבלנו שהתיקון לאנרגיה מסדר ראשון = לע"ע של מטריצת ההפרעה במרחב המנוון. לכן המצבים לאחר ההפרעה = הו"ע של h.

סיכום תורת ההפרעות המנוונת

$$\begin{aligned}\left\langle \varphi_n^{(i)}|W|\varphi_n^{(j)}\right\rangle &= h_{i,j}^{(n)}\\ k=1\dots k;\left(h^{(n)}\right)(\alpha)_k &= \Delta E_n^{'}(k)(\alpha)_k\end{aligned}$$

בכתיב שונה

$$\det\left(h-\Delta E_n^1(K)\,I\right) = 0$$

מספר הפתרונות הוא N_n, בדר"כ אין נוון לאחר ההפרעה. לכן

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{N_n}\alpha_i(k)\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle$$

הערה צריך לבדוק מתי H_i אלכסונית בבסיס $\left|\varphi_n^i\right\rangle$.
תשובה, אם $[H_1,I]=0$. (I אופרטור $CSCO$ של הניוון)

דוגמה אפקט[18] סטרק - אטום מימן בשדה חשמלי קבוע והומוגני במרחב. עבור $n=2$ יש 4 מצבים מנוונים

$$|0,0\rangle,|1,0\rangle,|1,1\rangle,|1,-1\rangle$$

נבחר הפרעה $W=e\vec{E}\vec{r}$ אז W

$$\begin{pmatrix}\langle 0,0|W|0,0\rangle & \langle 0,0|W|1,0\rangle & 0 & 0\\ \langle 1,0|W|0,0\rangle & \langle 1,0|W|1,0\rangle & 0 & 0\\ 0 & 0 & \langle 1,1|W|1,1\rangle & 0\\ 0 & 0 & 0 & \langle 1,-1|W|1,-1\rangle\end{pmatrix}$$

האם L_z, L^2 חילופים עם W?

$$\begin{aligned}[L_z,z] &= 0\\ \left[L^2,z\right] &\neq 0\end{aligned}$$

לכן חילופי רק אם L_z. אז לא אלכסונים רק בחלק (בבלוק) בוא $m_1=m_2$.
עבור אופרטור אי-זוגי z נקבל ש $\langle n,l_1,m|z|n,l_2,m\rangle\neq 0$ רק עבור $l_2-l_1=uneven$, מאחר שהזוגיות מוגדרת ע"י $(-1)^l$.
בדוגמה

$$\begin{aligned}\langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle &= \int_0^\infty r^3 dr R_{20}(r)R_{21}(r)\int d\Omega\cos\theta Y_{0,0}^*(\theta,\varphi)\,Y(\theta,\varphi)\\ &= -3r_1\end{aligned}$$

[18] הרצאה ב 10.1.2005

סה"כ

$$\begin{pmatrix} 0 & -3eEr_1 & 0 & 0 \\ -3eEr_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

כדי למצוא תיקון נלכסן את המטריצה. שנים מהע"ע $\Delta E^1_{n=2}(k=3,4)=0$. נקבל גם

$$\begin{vmatrix} -\Delta E^1_2 & -3eEr_1 \\ -3eEr_1 & -\Delta E^1_2 \end{vmatrix} = 0$$

נקבל $\Delta E^1_{n=2}(k=1,2)=\pm 3eEr_1$
זה אפקט סטרק הליניארי.
המצבים העצמים המתאימים

$$3eEr_1 \begin{pmatrix} \mp 1 & -1 \\ -1 & \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

לכן המ"ע

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle\right), |2,1,1\rangle, |2,1,-1\rangle$$

לכן סה"כ ל$|2,1,1\rangle, |2,1,-1\rangle$ אין תיקון באנרגיה. עבור $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle\right)$ הרמה גבוה ב $3eEr_1$ ועבור $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle\right)$ קיבלנו הורדה ב $3eEr_1$.

בעיית שני מצבים נניח שיש המילטוניאן

$$\begin{aligned} H_0|\varphi_1\rangle &= E_1|\varphi_1\rangle \\ H_0|\varphi_2\rangle &= E_2|\varphi_2\rangle \end{aligned}$$

ושהמצבים נפרסים ע"י שני מ"ע. נניח שם $H=H_0+W$ נרצה למצוא

$$\begin{aligned} H|\psi_+\rangle &= E_+|\psi_+\rangle \\ H|\psi_-\rangle &= E_-|\psi_-\rangle \end{aligned}$$

נכתוב בבסיס $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix}$$

הנחנו $w_{11}=w_{22}=0$, w_{21} ממשי. מצאנו

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \cos\theta|\varphi_1\rangle + \sin\theta|\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \sin\theta|\varphi_1\rangle + \cos\theta|\varphi_2\rangle \\ \tan 2\theta &= \frac{2W_{12}}{E_1-E_2} \\ E_\pm &= \frac{1}{2}(E_1+E_2) \pm \sqrt{(E_1-E_2)^2+4w_{12}^2} \end{aligned}$$

נניח הפרעה חלשה אז

$$\begin{aligned} \sin\theta &\approx \frac{w_{12}}{E_1-E_2} \\ \cos\theta &\approx 1 \\ \Rightarrow |\psi_+\rangle &= |\varphi_1\rangle + \frac{W_{12}}{E_1-E_2}|\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle &= |\varphi_2\rangle + \frac{w_{12}}{E_1-E_2}|\varphi_1\rangle \end{aligned}$$

קיבלנו חזרה את תורת ההפרעות.
ההנחה $w_{11} = w_{22} = 0$ אז הנחנו סדר ראשון מתאפס. אז

$$E_+ = E_1 + \frac{w_{12}^2}{E_1 - E_2}$$

6 נושאים נוספים

6.0.1 אטום מימן בשדה מגנטי קבוע

(ההוכחה[19] המדויקת תימצא בקורס קוונטים 2)

אפקט זימן לאטום מימן

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

לאלקטרון יש תנע זוויתי $\vec{L}$. נניח שהאטום בתוך שדה מגנטי קבוע

$$\vec{B} = B\hat{z}$$

אז יש מומנט דיפול $\vec{M}_L$ כאשר האנרגיה $W = -\vec{M} \cdot \vec{B}$
נניח e נע על רדיוס r יש לו תנ"ז $L = \mu r v$.

$$\begin{aligned}
\left|\vec{M}_L\right| &= i\pi r^2 \frac{1}{c} \\
i &= e\frac{v}{2\pi r} \\
\left|\vec{M}_L\right| &= \frac{erv}{2c} \\
\Rightarrow \left|\vec{M}_L\right| &= -\frac{e}{2\mu c} L \\
\vec{M}_L &= -\frac{e}{2\mu c} \vec{L}
\end{aligned}$$

כלומר זה הקשר הקלסי. (מקורב)
לכן התיקון לאנרגיה.

$$\begin{aligned}
W &= H_1 = \frac{eB}{2\mu c} L_z \\
&= \omega_L L_z
\end{aligned}$$

(w_L נקרא תדירות לרמור) התדירות הקלסית

$$\omega_c = \frac{eB}{\mu c}$$

בלי שדה מגנטי

$$\begin{aligned}
E_n^0 &= -\left(\frac{e^2}{2r_1}\right)\frac{1}{n^2} \\
|\varphi_n\rangle &= |n, l, m\rangle
\end{aligned}$$

אז נבדוק אם תורת ההפרעות עבור

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + \omega_L L_z \\
[H_0, L_z] &= 0
\end{aligned}$$

[19] הרצאה ב 13.1.2005

אין צורך התורת ההפרעות כי $[L_z,H]=0$ אז

$$\begin{aligned} H\left|n,l,m\right\rangle &= \left(H_0+\omega_L L_z\right)\left|n,l,m\right\rangle \\ &= \left(E_n^0+\hbar\omega_L m\right)\left|n,l,m\right\rangle \end{aligned}$$

6.1 הספין

פיתוח הספין

1. שטרן גרלך (1921)
2. המבנה הדק (עדין) של רמות אטום המימן
3. אפקט זימן האנומלי. (1925)
4. פאולי (1928) ניסוח של הספין.
5. דירק (1929) מאחד את תורת הקוונטים אם תורת היחסות הפרטית.

6.1.1 ניסוי שטרן גרלך

תזכורת   מצאנו כבר

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

כאשר $[r_x,p_x]=i\hbar \Rightarrow [L_x,L_y]=i\hbar L_z$ מצאנו גם

$$\left[\vec{L}^2,L_z\right] = 0$$

כאשר הע"ע של $\vec{L}$ הם $l\left(l+1\right)\hbar^2$ כאשר

$$l = 0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\ldots$$

התעלמנו הערכים הלא שלמים בגלל שיקולי רציפות.
ע"ע של L_z $m\hbar$ כאשר $-l\le m\le l$. הפתרונות של

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{l,m} &= m\hbar Y_{l,m} \\ \Rightarrow Y_{l,m} &= \Theta\left(\theta\right)e^{im\varphi} \\ \Rightarrow e^{im\varphi} &= e^{im(\varphi+2\pi)} \\ \Rightarrow m &\in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

חייבו

$$m = 0,\pm1,\ldots,\pm l$$

ניסוי שטרן גרלך בניסוי לקחו אטומי כסף ושחררו אותם בכיוון x דרך שדה מגנטי בכיוון z כך ש $\frac{\partial B}{\partial z}\neq 0$. האטום ניטרלי ולכן אין כוח לורנץ. נניח שיש מומנט מגנטי

$$\begin{aligned} V &= -\vec{M}\cdot\vec{B} \\ \vec{F} &= -\vec{\nabla}V = M_z\frac{\partial B_z}{\partial z} \end{aligned}$$

אם נשים לוח בצד השני של השדה נצפה למדוד את האטומים על כל הלוח. אבל הם מצאו קוונטיזציה ל-2 ערכים של M_z. בלי קשר לתנע זוויתי אורביטלי (שהיה ניטרלי). כלומר יש אופרטור (ספין) שמאפשר שני מצבים עצמים.

6.1.2 המבנה הדק

מצב של אלקטרון

$$|\psi\rangle \in m(\vec{r}) \times m(\vec{s})$$

לכן $\psi(\vec{r}, s_z)$ $s = \frac{1}{2}$ לאלקטרון

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ S &= \frac{1}{2} \\ m_s &= \pm\frac{1}{2} \end{aligned}$$

מצבי בספין $|s,m\rangle$ במקרה של אלקטרון נתון $s = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |s,m\rangle &= \hbar^2 s(s+1)|s,m\rangle \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 |s,m\rangle \\ s_z |s,m\rangle &= m\hbar |s,m\rangle \end{aligned}$$

מאחר שיש s אחד $\frac{1}{2}$, לא נתייחס יותר ל s. אז המצבי היחידים

$$\begin{aligned} \left|m = \frac{1}{2}\right\rangle &= |\uparrow\rangle = |+\rangle \\ \left|m = -\frac{1}{2}\right\rangle &= |\downarrow\rangle = |-\rangle \end{aligned}$$

המצבים א"ג

$$\langle \pm | \pm \rangle = \delta$$

אופרטור היחידה

$$|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = I$$

מצב כללי של ספין

$$|\chi\rangle = C_+ |+\rangle + C_- |-\rangle$$

מטריצות פאולי

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}\sigma_x \\ S_y &= \frac{\hbar}{2}\sigma_y \\ S_z &= \frac{\hbar}{2}\sigma_z \end{aligned}$$

אז

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

המטריצות

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[S_x,S_y] &= i\hbar S_z\\ S_\pm &= S_x \pm iS_y\end{aligned}$$

כאשר[20]

$$S_\pm\left|s,m\right\rangle = \hbar\sqrt{s\left(s+1\right)-m\left(m\pm1\right)}\left|s,m\pm1\right\rangle$$

לכן

$$\begin{aligned}S_-\left|+\right\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\left|-\right\rangle\\ &= \hbar\left|-\right\rangle\\ S_+\left|-\right\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{3}{4}+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\left|+\right\rangle\\ &= \hbar\left|+\right\rangle\end{aligned}$$

לכן

$$\begin{aligned}S_+ &= \hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\\ S_- &= \hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\end{aligned}$$

תכונות מטריצות פאולי

1. $[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z$
2. $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=I$
3. אנטי חלופיות $\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x=0$

באופן כללי $\sigma_i\sigma_j+\sigma_i\sigma_j=2\delta_{ij}I$

- σ_i הרמיטיות וחסרות עקבה
- פורשות את מרחב כל המטריצות חסרות העקבה על $\mathbb{C}^2$.
- נתונה הזהות

$$\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\right) = \vec{A}\cdot\vec{B}I+i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)$$

תרגיל נתון $\left|\chi\right\rangle=c_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ מצא את ערך התוחלת S_x,S_y,S_z

$$\begin{aligned}\left\langle S_x\right\rangle &= \left(c_+^*c_-^*\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_+\\c_-\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}Re\left(c_+^*c_-\right)\\ \left\langle S_y\right\rangle &= \left(c_+^*c_-^*\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_+\\c_-\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}Im\left(c_+^*c_-\right)\\ \left\langle S_z\right\rangle &= \left(c_+^*c_-^*\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_+\\c_-\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\left(\left|c_+\right|^2-\left|c_-\right|^2\right)\end{aligned}$$

[20] הרצאה ב 17.1.2005

תרגיל איך נרשום מצב המתאר ספין $\pm\frac{\hbar}{2}$ ביחס לציר היוצר זווית ϕ עם ציר x במישור xy (במקום s_x)

$$\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$$

לכן

$$\begin{aligned} s_\phi &= S_x \cos\phi + S_y \sin\phi \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \cos\phi - i\sin\phi \\ \cos\phi + i\sin\phi & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

לכן הע"ע

$$\begin{aligned} \lambda^2 - 1 &= 0 \\ \lambda &= \pm 1 \end{aligned}$$

והו"ע

$$\begin{aligned} \lambda = 1 : |\chi\rangle_\phi &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ \lambda = -1 : |\chi\rangle_\phi &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

תרגיל (בית) ניתן להפעיל על הוקטור סיבוב בכיוון ציר ϕ.

$$|\chi_+\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

מסובבים ב $\frac{\pi}{2}$ סביב ציר במישור xy היוצר זווית $\phi + \frac{\pi}{2}$ אם X.

$$R^{(s)}_{\vec{\theta}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{s}\cdot\theta\hat{\theta}}$$

אז $\theta = \frac{\pi}{2}$ $\hat{\theta} = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)$

$$R^{(s)}_{\vec{\theta}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 1 \end{pmatrix}$$

הערה יש זהות

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{s}\cdot\vec{\theta}} = e^{-\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}} = \cos\frac{\theta}{2} - i\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}\right)\sin\frac{\theta}{2}$$

תיאור במרחב ספין+במרחב $S_z, \vec{r}$ מהווים מערכת שלמה

$$\left[\vec{L}, \vec{S}\right] = 0$$

נגדיר תנע זווית כולל

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

הבסיס לתיאור מצבי מרחב+ספין:

$$|\psi\rangle = |\vec{r}, s_z\rangle$$

אורטונורמליות של הבסיס

$$\left\langle \vec{r}', s_z' | \vec{r}, s_z \right\rangle = \delta^3\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) \delta_{s_z, s_z'}$$

שלמות כמו כן שלמות הבסיס

$$\sum_{s_z=\pm\frac{1}{2}} \int d^3r \left|\vec{r}, s_z\right\rangle \left\langle \vec{r}, s_z\right| = 1$$

$$|\psi\rangle = \sum_{s_z=\pm\frac{1}{2}} \int d^3\vec{r} \left\langle \vec{r}_1 s_z | \psi \right\rangle \left|\vec{r}, s_z\right\rangle$$

הקבועים

$$\psi_{\pm}(\vec{r}) = \langle \vec{r}, \pm | \psi \rangle$$

הספין עובד כאופרטור בצורה של מטריצה 2×2

$$[\psi(\vec{r})] = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$[\psi(\vec{r})]^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_+^\dagger & \psi_-^\dagger \end{pmatrix}$$

וכן[21]

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int d^3r \, [\psi(\vec{r})]^\dagger [\varphi(\vec{r})]$$

$$\langle \psi | O | \varphi \rangle = \int d^3r \, [\psi(\vec{r})]^\dagger O [\varphi(\vec{r})]$$

כאשר O אופרטור מדידה על אלקטרון.

תרגיל נסובב את הצירים

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\psi\left(R^{-1}\vec{r}\right) = \langle \vec{r} | R\psi \rangle$$

$$= \left\langle R^{-1}\vec{r} | \psi \right\rangle$$

אזי

$$\langle \vec{r} | R | \psi \rangle = \left\langle \vec{r} | \psi' \right\rangle = \psi'(r)$$

בצורה מטריציונים הסיבוב של L, S ניתן ע"י.

$$\begin{pmatrix} \psi_+'(\vec{r}) \\ \psi_-'(\vec{r}) \end{pmatrix} = (R_\theta(s)) \begin{pmatrix} \psi_+\left(R^{-1}\vec{r}\right) \\ \psi_-\left(R^{-1}\vec{r}\right) \end{pmatrix}$$

בצורה זאת R^{-1} הוא סיבוב הציר על המרחב $\vec{r}$.

[21] הרצאה ב 20.1.2005

6.2 תרגילים

1. נתון

$$\psi\left(|x|,t=0\right) = \begin{cases} c\left(1-\frac{|x|}{a}\right) & |x|\le a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$

(א) חשב את a

(ב) צפיפות ההסתברות למדוד תנע p בזמן $t=0$

(ג) ערך תצפית של p

(ד) חשבו את ערך תצפית האנרגיה

פתרון

(א)

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 dx\\ &= 2c^2\int_0^a\left(1-2\frac{x}{a}+\frac{x^2}{a^2}\right)dx\\ &= 2c^2a\left(1-1+\frac{1}{3}\right)=\frac{2}{3}c^2a\\ c &= \sqrt{\frac{3}{2a}}\end{aligned}$$

(ב) נבצע התמרת פורייה

$$\begin{aligned} \phi\left(p,t=0\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-a}^{a}\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\int_{-a}^{0}\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx+\int_0^a\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\int_0^{\infty}\psi\left(x,0\right)e^{\frac{i}{\hbar}px}dx+\int_0^a\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\right)\\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\left(\int_0^a\psi\left(x,0\right)\cos\frac{px}{\hbar}dx\right)\\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{3}{2a}}\left(\int_0^a\left(1-\frac{x}{a}\right)\cos\frac{px}{\hbar}dx\right)\\ &= \sqrt{\frac{3\hbar^3}{\pi a^3}}\frac{1}{p^2}\left(1-\cos\left(p\frac{a}{\hbar}\right)\right)\\ \left|\phi\left(p,t=0\right)\right|^2 &= \frac{12\hbar^3}{\pi a^3}\frac{\sin^4\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}{p^4}\end{aligned}$$

(ג) $\langle p\rangle=0$ מאחר ש p אופרטור אי-זוגי במרחב סימטרי.

(ד) $H=\frac{P^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ אז

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \begin{cases} 0 & x<-a \\ \frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}} & -a\le x<0 \\ -\frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}} & 0\le x<a \\ 0 & x\ge a \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}}\left(\delta\left(x+a\right)-2\delta\left(x\right)+\delta\left(x+a\right)\right)$$

אז

$$\begin{aligned} \langle H\rangle &= \langle\psi|H|\psi\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}}\int_{-\infty}^{\infty}-\psi^*\left(\delta\left(x+a\right)-2\delta\left(x\right)+\delta\left(x+a\right)\right)dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}}\left(-\psi^*\left(-a\right)+2\psi^*\left(0\right)-\psi^*\left(a\right)\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a}\sqrt{\frac{3}{2a}}2\sqrt{\frac{3}{2a}} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned}$$

2. חלקיק נע עם תנע זוויתי $\vec{L}$

(א) האם יתכן למדוד סימלטנית את $\vec{L}$ ומרחק החלקיק מהראשית $r=\sqrt{\vec{r}^2}$

(ב) הוכיח כי ערך התצפית של L_y מתאפס במצב העצמי של L_x.

(ג) נתון $\langle z\rangle=a$ חשב במצב זה את המכפלה המינימלית של אי וודאות בגדלים $\Delta y\Delta L_x$

(ד) נתונות $L_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, L_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&i\\0&-i&0\end{pmatrix}$ מצא את L_z

פתרון

(א) נבדוק יחס חילוף

$$[L_x,r] = [yp_z-zp_y,r]$$

אבל אם חילופי אם $\vec{r}^2$ יהיה גם חילופי אם כל פונקציה שלו

$$\begin{aligned} \left[yp_z-zp_y,x^2+y^2+z^2\right] &= 2i\hbar yz-2i\hbar zy \\ &= 2i\hbar\left[y,z\right]=0 \end{aligned}$$

(ב) ידוע

$$\begin{aligned} L_x\left|X\right\rangle &= m\hbar\left|X\right\rangle \\ \left[L_z,L_x\right] &= i\hbar L_y \\ i\hbar\left\langle X\right|L_y\left|X\right\rangle &= \left\langle X\right|L_zL_x-L_xL_z\left|X\right\rangle \\ &= m\hbar\left\langle X\right|L_z\left|X\right\rangle-\left\langle X\right|L_z\left|X\right\rangle=0 \end{aligned}$$

(ג) עיקרון אי-הודעות

$$\Delta y \Delta L_x \quad \geq \quad \frac{1}{2}\left|\langle|\left[y,L_x\right]|\rangle\right|$$

לכן נחשב

$$\left[y,L_x\right] \quad = \quad \left[y,yp_z-zp_y\right]=-z\left[y,p_y\right]=-i\hbar z$$

(ד) $L_x=\frac{1}{i\hbar}\left[L_y,L_z\right]$

3. נתון[22] $V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ וגם $W=vP$ כאשר P תנע של החלקיק

(א) חשב $E_n^{(1)}$

(ב) חשב את המצבים $\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle$ בסדר ראשון ע"י $\left|E_n^0\right\rangle$

(ג) חשבו את התיקון לאנרגיה מסדר שני

(ד) להוכיח כי ג' תוצאה מדויקת

פתרון

(א) אז

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{'} &= \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle\\ &= v\left\langle E_n^0|p|E_n^0\right\rangle\end{aligned}$$

וגם

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p &= P=\frac{A-A^{\dagger}}{\sqrt{2}i}\\ \Rightarrow p &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(A-A^{\dagger}\right)\end{aligned}$$

ומהא"ג

$$\begin{aligned}\left\langle E_n^0|p|E_n^0\right\rangle &= \left\langle E_n^0|\alpha A+\beta A^{\dagger}|E_n^0\right\rangle\\ &= \tilde{\alpha}\left\langle E_n^0|E_{n-1}^0\right\rangle+\tilde{\beta}\left\langle E_n^0|E_{n+1}^0\right\rangle\\ &= 0\end{aligned}$$

(ב) הנוסחה לסדר ראשון

$$\begin{aligned}\left|E_n^{(1)}\right\rangle &= \left|E_n^0\right\rangle+\sum_{k\neq n}c_{nk}^{(1)}\left|E_k^0\right\rangle\\ c_{nk} &= \frac{v\left\langle E_k^0|p|E_n^0\right\rangle}{E_n^0-E_k^0}\end{aligned}$$

אז

$$\begin{aligned}E_n^0-E_k^0 &= \hbar\omega\left(n-k\right)\\ v\left\langle E_k^0|p|E_n^0\right\rangle &= iv\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\langle E_k^0|A-A^{\dagger}|E_n^0\right\rangle\\ &= iv\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n}\left\langle E_k^0|E_{n-1}^0\right\rangle-\sqrt{n+1}\left\langle E_k|E_{n+1}\right\rangle\right)\\ &= iv\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\sqrt{n}\delta_{k,n-1}-\sqrt{n+1}\delta_{k,n+1}\right)\end{aligned}$$

[22] הרצאה ב 24.1.2005

אז

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + iv\sqrt{\frac{m}{2\omega\hbar}}\left(\sqrt{n}\left|E_{n-1}^0\right\rangle + \sqrt{n+1}\left|E_{n+1}^0\right\rangle\right)$$

(ג) התיקון לאנרגיה

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{(2)} &= \sum_{k\neq n}\frac{v^2\left|\left\langle E_k^0|p|E_n^0\right\rangle\right|}{E_n^0-E_k^0} \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{v^2\frac{m\hbar\omega}{2}n\delta_{k,n-1}-(n+1)\,\delta_{k,n+1}}{E_n^0-E_k^0} \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{v^2\frac{m\hbar\omega}{2}n}{E_n^0-E_k^0}\delta_{k,n-1}-\sum_{k\neq n}\frac{v^2\,(n+1)}{E_n^0-E_k^0}\delta_{k,n+1} \\
&= \frac{v^2m\hbar\omega}{2}\left(\frac{n}{\hbar\omega}-\frac{n+1}{\hbar\omega}\right)=-\frac{v^2m}{2}=-\frac{m}{2}v^2
\end{aligned}$$

(ד) אנו יודעים

$$\begin{aligned}
H &= H_0+W \\
&= \frac{p^2}{2m}+vp+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \\
&= \frac{(p+mv)^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-\frac{m}{2}v^2
\end{aligned}$$

כלומר ההמילוטנאן מורכב מאוסילטור הרמוני

$$\begin{aligned}
[x,p] &= i\hbar \\
\Rightarrow [x,p+mv] &= i\hbar
\end{aligned}$$

לה נתאים $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$
ומורכב מהזזה. כלומר

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{m}{2}v^2$$

4. נתונה מולקולה אם 3 אטומים. ואלקטור שמקפץ בניהם. כאשר $|i\rangle$ מצב המולקולה שהאלקטרון קשור לאטום $i=1,2,3$. המילטוניאן המולקולה בבסיס המצבים $|i\rangle$.

$$H = \varepsilon\sum_{i=1}^{3}|i\rangle\langle i|+\delta\sum_{i\neq j}|i\rangle\langle j|$$

כאשר ε,δ נתונים

(א) אילו אנרגיות אפשר למדוד למולקולה
(ב) למדוד את המצבים הללו
(ג) ההסתברות כאשר הוא קשור לאחד האטומים למדוד את האנרגיות השונות
(ד) ההסתברות שברגע t יהיה קשור לאטום אחר.

פתרון

(א) לכתוב H כמטריצה

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon & \delta & \delta \\ \delta & \varepsilon & \delta \\ \delta & \delta & \varepsilon \end{pmatrix}$$

אז

$$\begin{aligned} \det\begin{pmatrix} \varepsilon - E_k & \delta & \delta \\ \delta & \varepsilon - E_k & \delta \\ \delta & \delta & \varepsilon - E_k \end{pmatrix} &= 0 \\ \varepsilon - E_1 &= \delta \\ E_1 &= \varepsilon - \delta \end{aligned}$$

אם נסמן $x = \varepsilon - X$ אז

$$\begin{aligned} \det\begin{pmatrix} x & \delta & \delta \\ \delta & x & \delta \\ \delta & \delta & x \end{pmatrix} &= x^3 - 2\delta x + 2\delta^3 \\ &= (x-\delta)\left(x^2 + \delta x - 2\delta^2\right) \\ &= (x-\delta)^2 (x + 2\delta) = 0 \end{aligned}$$

אז

$$\begin{aligned} E_1 &= E_2 = \varepsilon - \delta \\ E_3 &= \varepsilon + 2\delta \end{aligned}$$

(ב) המצבים העצמים המנוונים

$$E_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \sqrt{\frac{1}{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

עבור

$$E_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(ג) האלקטרון קשור ל $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ ההסתברות P_k למדוד כל אחד מהאנרגיות

$$|\langle p_k|1\rangle|^2 = |\langle 1|p_k\rangle|^2$$

וגם אפשר

$$\begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix}$$

אזי

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{1}{2} \\ P_2 &= \frac{1}{6} \\ P_3 &= \frac{1}{3} \end{aligned}$$

(ד) המצב ב $t=0$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_3\rangle$$

אז לכל מצב $e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}, e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}$ לכן

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}|\psi_3\rangle \\
&= \frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{1,2}t}\left(2|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle\right) + \frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}\left(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle\right)
\end{aligned}$$

לכן

$$\begin{aligned}
P_2(t) &= |\langle 2|\psi(t)\rangle|^2 \\
&= \left|\langle 2|\frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{1,2}t}\left(2|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle\right) + \frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}\left(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle\right)\right|^2 \\
&= \left|-\frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{1,2}t} + \frac{1}{3}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}\right|^2 \\
&= \frac{1}{9}\left(2 - 2\cos\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right) = \frac{4}{9}\sin^2\left(\frac{3\delta}{2\hbar}t\right)
\end{aligned}$$