דף נוסחאות / סיכום:

פיסיקה קוונטית 1 ו-2 (115204)

בהצלחה

חו אבינדב **אביב תשס"ו**

חלקיקים עם ספין 2 / 1

אופרטור הספין $\vec{S}$ הוא אופרטור תנע זוויתי למעשה, ולכן הוא מקיים את כל יחסי החילוף שמקיים גם $\vec{L}$:

$$\left[S_i, S_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k, \quad \left[\vec{S}^2, S_i\right] = 0$$

בבסיס המצבים העצמיים של $\vec{S}^2, S_z$ $\left\{\left|\uparrow_z\right\rangle, \left|\downarrow_z\right\rangle\right\}$ של חלקיקים עם ספין 1/2, אופרטור הספין מוגדר באמצעות <u>מטריצות פאולי</u> $\vec{S} = (\hbar/2)\vec{\sigma}$, כאשר:

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

מטריצות פאולי מקיימות:

$$\det[\sigma_i] = -1, \;\; \mathrm{tr}[\sigma_i] = 0, \;\; \sigma_i^2 = I$$

$$\left[\sigma_i, \sigma_j\right] = \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\left\{\sigma_i, \sigma_j\right\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\mathbf{I}$$

$$\sigma_i\sigma_j = \frac{1}{2}\left(\left[\sigma_i, \sigma_j\right] + \left\{\sigma_i, \sigma_j\right\}\right) = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k + \delta_{ij}\mathbf{I}$$

אופרטורי <u>העלאה והורדה</u> $S_\pm = S_x \pm iS_y$:

$$S_+\left|\uparrow_z\right\rangle = 0, \qquad S_+\left|\downarrow_z\right\rangle = \hbar\left|\uparrow_z\right\rangle$$

$$S_-\left|\uparrow_z\right\rangle = \hbar\left|\downarrow_z\right\rangle, \quad S_-\left|\downarrow_z\right\rangle = 0$$

לכל $\vec{A}, \vec{B}$ שמתחלפים עם $\vec{\sigma}$ ולכל וקטור יחידה $\hat{n}$:

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

$$\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right)^k = \begin{cases} I & k \text{ even} \\ \vec{\sigma}\cdot\hat{n} & k \text{ odd} \end{cases}$$

$$e^{\pm i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}/2} = I\cos\theta/2 \pm i\left(\hat{n}\cdot\vec{\sigma}\right)\sin\theta/2$$

<u>מצבים עצמיים</u> של $S_{\hat{n}} = \vec{S}\cdot\hat{n}$:

$$\left|\uparrow_n\right\rangle = \cos(\theta/2)\left|\uparrow_z\right\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi}\left|\downarrow_z\right\rangle$$

$$\left|\downarrow_n\right\rangle = -\sin(\theta/2)e^{-i\varphi}\left|\uparrow_z\right\rangle + \cos(\theta/2)\left|\downarrow_z\right\rangle$$

כאשר $\hat{n} = (\cos\varphi\sin\theta, \sin\varphi\sin\theta, \cos\theta)$.

(למשל עבור $\hat{n} = \hat{y}$ ניקח $\theta = \pi/2, \;\; \varphi = \pi/2$.)

חיבור שני ספינים 2 / 1

אם נחבר $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, כאשר $\vec{S}_1, \vec{S}_2$ שניהם אופרטורים של ספין חצי, <u>המצבים העצמיים</u> $\left|S, M\right\rangle$ של המערכת $\left\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\right\}$ יהיו:

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

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

כאשר $\left|\pm,\pm\right\rangle = \left|m_1, m_2\right\rangle$. בבסיס $\left\{\left|\pm,\pm\right\rangle\right\}$ של המערכת $\left\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1,z}, S_{2,z}\right\}$ ניתן לרשום:

$$\vec{S}^2 = \hbar^2\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \left|+,+\right\rangle \\ \left|+,-\right\rangle \\ \left|-,+\right\rangle \\ \left|-,-\right\rangle \end{array}$$

ניתן לראות שהאופרטור S^2 אינו אלכסוני בבסיס המצבים הזה, ואכן הם אינם מצבים עצמיים שלו.

תורת ההפרעות הבלתי תלויה בזמן

<u>ללא ניוון</u>: עוסקת בבעיות שבהן ההמילטוניאן הוא מהצורה $H = H_0 + W$, כאשר W היא ההפרעה הקטנה ו-H_0 הוא ההמילטוניאן המקורי, שאנו יודעים כבר את הפתרונות שלו $H_0\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\varphi_n\right\rangle$. מגדירים, באופן מלאכותי, <u>פרמטר קטן</u> $\lambda \ll 1$ כך ש-$W = \lambda H_1$.
מניחים שההפרעה אינה משנה את מרחב המצבים, כלומר שכל מצב של המערכת עדיין ניתן לפרישה בעזרת המצבים העצמיים המקוריים. לכן נניח שמצב עצמי חדש של המערכת יהיה מהצורה:

$$\left|\psi_n\right\rangle = N(\lambda)\left(\left|\varphi_n\right\rangle + \sum\nolimits_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\left|\varphi_k\right\rangle\right)$$

כאשר $N(\lambda)$ הוא מקדם נירמול שנקבע בסוף החישוב.

מפתחים את האנרגיות העצמיות E_n ואת המקדמים $C_{nk}(\lambda)$ לטור בפרמטר הקטן λ :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots, \quad C_{nk}(\lambda) = \lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda^2 C_{nk}^{(2)} + \ldots$$

כאשר ל-$C_{nk}(\lambda)$ אין איבר מסדר אפס, משום שעלינו לדרוש שיתקיים $\left|\psi_n\right\rangle \underset{\lambda\to 0}{\rightarrow} \left|\varphi_n\right\rangle$, וזה גורר $C_{nk}(\lambda) \underset{\lambda\to 0}{\rightarrow} 0$. את הטורים הנ"ל מציבים למשוואת הערכים העצמיים $H\left|\psi_n\right\rangle = E_n\left|\psi_n\right\rangle$, ודורשים שהמקדם של λ בכל אגף יהיה זהה. מכאן מקבלים את המשוואות הבאות:

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

$$\left(\lambda^1\right): \qquad H_0\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda C_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda H_1\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^{(0)}\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda C_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda E_n^{(1)}\left|\varphi_n\right\rangle$$

$$\left(\lambda^2\right): \qquad H_0\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda^2 C_{nk}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda H_1\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda C_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle =$$
$$= E_n^{(0)}\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda^2 C_{nk}^{(2)}\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda E_n^{(1)}\sum\nolimits_{k\neq n}\lambda C_{nk}^{(1)}\left|\varphi_k\right\rangle + \lambda^2 E_n^{(2)}\left|\varphi_n\right\rangle$$

המשוואה מסדר 0 מתקיימת באופן טריוויאלי. על מנת לחלץ מידע מהמשוואות האחרות, כופלים אותן משמאל ב-$\left\langle\varphi_n\right|$ על מנת לקבל את תיקוני האנרגיה, וכופלים ב-$\left\langle\varphi_k\right|$ עבור $k \neq n$ ספציפי על מנת לקבל את מקדמי פונקצית הגל C_{nk}. משתמשים בכך שהפונקציות העצמיות הן א"ג, לכן $\left\langle\varphi_k\middle|\varphi_n\right\rangle = \delta_{kn}$ (אך $\left\langle\varphi_k\right|H_1\left|\varphi_n\right\rangle \neq \delta_{kn}$!). באופן כזה מקבלים את <u>התיקונים מסדר ראשון ושני לרמות האנרגיה ואת התיקון מסדר ראשון לפונקציות הגל</u>:

$$E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\left\langle\varphi_n\right|\underbrace{W}_{=\lambda H_1}\left|\varphi_n\right\rangle}_{=\lambda E_n^{(1)}} + \underbrace{\sum_{k\neq n}\frac{\left|\left\langle\varphi_k\right|W\left|\varphi_n\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}}_{=\lambda^2 E_n^{(2)}}$$

$$\left|\psi_n\right\rangle = \left|\varphi_n\right\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{\left\langle\varphi_k\right|W\left|\varphi_n\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\left|\varphi_k\right\rangle$$

חשוב: <u>סימן התיקון מסדר שני</u> לאנרגית מצב היסוד לעולם יהיה שלילי (או שהוא אפס).

<u>תנאי תקפות</u> הוא שהתיקון באמת קטן: $\left|\left\langle\varphi_n\right|W\left|\varphi_n\right\rangle\right| \ll \left|E_n^{(0)}\right|$ לתיקון האנרגיה (לכל n), $\left|\left\langle\varphi_k\right|W\left|\varphi_n\right\rangle\right| \ll \left|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right|$ לתיקון המצבים. יש תלות בהפרש בין רמות האנרגיה, לכן עלולה להתעורר בעיה כאשר הרמות מצטופפות ($n,k\to\infty$).קיים <u>חסר עליון לתיקון</u> מסדר שני לאנרגיה, שכן לפי משפט מתקיים: $\left|\lambda^2 E_n^{(2)}\right| \leq (\Delta W)_n^2/(\Delta E)_n$, כאשר מוגדר:

$$(\Delta E)_n = \min_{k\neq n}\left|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right|, \qquad (\Delta W)_n^2 = \left\langle\varphi_k\right|W^2\left|\varphi_n\right\rangle - \left(\left\langle\varphi_k\right|W\left|\varphi_n\right\rangle\right)^2$$

<u>עם ניוון</u>: באופן כללי, כאשר יש ניוון נתעניין בתיקון מסדר ראשון בלבד לרמות האנרגיה, ובפיצול של המצבים העצמיים. עבור רמת אנרגיה $E_n^{(0)}$ שאינה מנוונת, התיקון מסדר ראשון הוא כמו במקרה ללא ניוון, והמצב העצמי נשאר $\left|\varphi_n\right\rangle$. אך כאשר לרמה $E_n^{(0)}$ יש ניוון (כלומר, ישנם N_n מצבים עצמיים שמתאימים לאותה אנרגיה), רושמים את המטריצה המייצגת של W בבסיס המצבים העצמיים של אותה רמה, ומלכסנים אותה. הערכים העצמיים הם התיקון מסדר ראשון לאנרגיה (כלומר, $\lambda E_n^{(1)} = \alpha$ כאשר α הוא הערך העצמי של W), והוקטורים העצמיים הם המצבים העצמיים החדשים. <u>אם המטריצה W אלכסונית בתת-המרחב המנוון</u>, הרי שהבעיה פשוטה: התיקונים לאנרגיה הם האיברים על האלכסון, והמצבים העצמיים החדשים הם פשוט המצבים העצמיים שכבר היו קודם (רק שאז הם היו שייכים לאותה רמת אנרגיה, וכעת לפחות חלק מהניוון יוסר). <u>מטריצת ההפרעה</u> שצריך ללכסן היא $W_{ij}^{(n)} = \left\langle\varphi_n^{(i)}\right|W\left|\varphi_n^{(j)}\right\rangle$, כאשר $\varphi_n^{(i)}$ הם המצבים המנוונים של רמת האנרגיה $E_n^{(0)}$.

הערה: אם <u>ההפרעה W אלכסונית כולה</u> (ולא רק בתת-מרחב מסויים), הרי שניתן לפתור את הבעיה במדוייק – המצבים לא משתנים ורק רמות האנרגיה מקבלות תוספת.

חיבור תנע זוויתי מסלולי עם ספין 2 / 1

כאשר מחברים $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}(1/2)$, הערכים האפשריים של j הם $\ell \pm 1/2$. ניתן להשתמש בקשר $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+$ ולקבל את כל המקדמים באופן מיידי:

$$\left|j = \ell + 1/2, \;\; M\right\rangle = \sqrt{\tfrac{\ell + M + 1/2}{2\ell+1}}\left|M - 1/2, 1/2\right\rangle + \sqrt{\tfrac{\ell - M + 1/2}{2\ell+1}}\left|M + 1/2, -1/2\right\rangle$$

$$\left|j = \ell - 1/2, \;\; M\right\rangle = \sqrt{\tfrac{\ell - M + 1/2}{2\ell+1}}\left|M - 1/2, 1/2\right\rangle - \sqrt{\tfrac{\ell + M + 1/2}{2\ell+1}}\left|M + 1/2, -1/2\right\rangle$$

המילטוניאן בשדה א"מ

בנוכחות שדה אלקטרומגנטי עם פוטנציאל סקלרי φ ו-וקטורי $\vec{A}$:

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\varphi+V$$

כאשר השדות הנגזרים הם :

$$\vec{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\vec{\nabla}\varphi$$

$$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$$

<u>חופש הכיול</u> – לכל פונקי' $f\left(\vec{r},t\right)$ הטרנספורמציה הבאה אינה משנה את השדות $\vec{E}$ ו- $\vec{B}$:

$$\varphi'=\varphi+\frac{1}{c}\frac{\partial f\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}$$

$$\vec{A}'=\vec{A}-\vec{\nabla}f\left(\vec{r},t\right)$$

$$\psi'=e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}f\left(\vec{r},t\right)}\psi$$

עבור שדה $\vec{E}$ חשמלי <u>קבוע</u>:

$$W=-q\vec{E}\cdot\vec{r}$$

מומנט דיפול מגנטי

לאלקטרון עם תנ"ז $\vec{L}$ וספין $\vec{S}$:

$$\vec{M}=-\frac{e}{2mc}\left(\vec{L}+2\vec{S}\right)$$

$$W=-\vec{M}\cdot\vec{B}$$

עבור חיבור שני ספין חצי

$$\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&2&0\\0&2&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{array}{c}|+,+\rangle\\|+,-\rangle\\|-,+\rangle\\|-,-\rangle\end{array}$$

חיבור תנע זוויתי כללי

נניח מצב המערכת נפרש על ידי המצבים העצמיים של שני אופרטורים של תנע זוויתי, $\vec{J}_1$ ו- $\vec{J}_2$. באופן טריוויאלי, ניתן להציג את מצב המערכת כמכפלה טנזורית של המצבים של כל אופרטור תנע זוויתי בנפרד, כלומר $\left|j_1,m_1\right\rangle\otimes\left|j_2,m_2\right\rangle=\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle$, והם יהיו מצבים עצמיים של מערכת האופרטורים $\left\{\vec{J}_1^2,\vec{J}_2^2,J_{1,z},J_{2,z}\right\}$.

אך לפעמים עדיף לעבוד דווקא עם מצבים עצמיים של המערכת $\left\{\vec{J}_1^2,\vec{J}_2^2,\vec{J}^2,J_z\right\}$, כאשר $\vec{J}=\vec{J}_1+\vec{J}_2$:

$$\vec{J}^2=\vec{J}_1^2+\vec{J}_2^2+2\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2=\vec{J}_1^2+\vec{J}_2^2+J_{1,+}J_{2,-}+J_{1,-}J_{2,+}+2J_{1,z}J_{2,z}\quad\Big|\quad\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2=\left(\vec{J}^2-\vec{J}_1^2-\vec{J}_2^2\right)/2$$

נשים לב שהמצב $\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle$ הוא גם מצב עצמי של J_z עם ע"ע $\hbar\left(m_1+m_2\right)$, אך אינו מצב עצמי של $\vec{J}^2$ ולכן זה אומר שאנו צריכים להחליף את בסיס המצבים העצמיים מ- $\left\{\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle\right\}$ ל- $\left\{\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle\right\}$, כאשר $J=\left|j_1-j_2\right|,\ldots,\left(j_1+j_2\right)$ ו- $M=-J,\ldots,J$ בקפיצות שלמות. מתקיים :

$$\vec{J}^2\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\hbar^2J\left(J+1\right)\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle,\qquad J_z\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\hbar M\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle$$

$$\vec{J}_1^2\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\hbar^2j_1\left(j_1+1\right)\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle,\quad\vec{J}_2^2\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\hbar^2j_2\left(j_2+1\right)\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle$$

<u>מקדמי קלבש-גורדן</u> $\left\langle j_1,j_2,m_1,m_2\middle|j_1,j_2,J,M\right\rangle$ נותנים לנו את המעבר בין הבסיסים בשני הכיוונים :

$$\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle\left\langle j_1,j_2,m_1,m_2\middle|j_1,j_2,J,M\right\rangle$$

$$\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle=\sum_{J=\left|j_1-j_2\right|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{J}\left|j_1,j_2,J,M\right\rangle\left\langle j_1,j_2,J,M\middle|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle$$

נהוג לבחור את המקדמים להיות ממשיים, כך ש- $\left\langle j_1,j_2,m_1,m_2\middle|j_1,j_2,J,M\right\rangle=\left\langle j_1,j_2,J,M\middle|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle$.

מתוך אורתנורמליות של מצבי הבסיס $\left\{\left|J,M\right\rangle\right\}$ מקבלים את היחס הבא עבור המקדמים :

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}\left\langle j_1,j_2,m_1,m_2\middle|J',M'\right\rangle\left\langle j_1,j_2,m_1,m_2\middle|J,M\right\rangle=\delta_{J'J}\delta_{M'M}$$

<u>מציאת המקדמים</u> : באופן כללי, לוקחים J ספציפי ומוצאים את המצב העליון שלו, $M=J$. ברגע שהוא ידוע, פועלים עם $J_-=J_{1,-}+J_{2,-}$ על מנת להוריד את M עד ל- $-J$, כאשר האופרטור $J_{1,\pm}$, למשל, פועל כך :

$$J_{1,\pm}\left|\ell_1,\ell_2,m_1,m_2\right\rangle=\hbar\sqrt{\ell_1\left(\ell_1+1\right)-m_1\left(m_1\pm1\right)}\left|\ell_1,\ell_2,m_1-1,m_2\right\rangle$$

וכיצד מוצאים את המצב העליון לכל J ? ידוע שעבור ה- J המקסימלי, שהוא $J_{\max}=j_1+j_2$, המצב העצמי שלו $\left|J,M\right\rangle=\left|j_1+j_2,j_1+j_2\right\rangle$ הוא פשוט $\left|j_1,j_2,m_1,m_2\right\rangle=\left|j_1,j_2,j_1,j_2\right\rangle$. אחרי שסיימנו לעבוד עם J מסויים, עוברים ל- $\left(J-1\right)$. את המצב העליון שלו, $\left|J-1,J-1\right\rangle$, מוצאים מתוך זה שהוא א"ג ל- $\left|J,J-1\right\rangle$ (שכבר ידוע) ומתוך זה ששניהם מורכים מאותם שני מצבים, $\left|m_1,m_2\right\rangle=\left|j_1-1,j_2\right\rangle$ ו- $\left|m_1,m_2\right\rangle=\left|j_1,j_2-1\right\rangle$. ממשיכים עם J_- עד שמסיימים עם $\left(J-1\right)$, וממשיכים הלאה ל- $\left(J-2\right)$ באותו אופן – מתוך דרישה א"ג וכו'.

<u>יחסי חילוף</u> : $\left[\vec{J}^2,\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2\right]=\left[J_z,\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2\right]=0,\qquad\left[\vec{J}^2,J_{1,z}\right],\left[\vec{J}^2,J_{2,z}\right],\left[\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2,J_{1,z}\right],\left[\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2,J_{2,z}\right]\neq0$

מכפלה טנזורית של אופרטורים

רוצים לדעת איך אופרטור מסויים C פועל במרחב המצבים של $\vec{S}_1\otimes\vec{S}_2$, בבסיס $\left\{\left|+,+\right\rangle,\left|+,-\right\rangle,\left|-,+\right\rangle,\left|-,-\right\rangle\right\}$. לצורך כך נפרק את האופרטור למכפלה של שני אופרטורים, שהראשון פועל רק במרחב של $\vec{S}_1$, נסמן אותו A, והשני פועל רק במרחב $\vec{S}_2$, נניח B. האופרטור הכללי נתון על ידי :

$$C=A\otimes B=\begin{bmatrix}A_{++}\left(B\right)&A_{+-}\left(B\right)\\A_{-+}\left(B\right)&A_{--}\left(B\right)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}A_{++}\begin{pmatrix}B_{++}&B_{+-}\\B_{-+}&B_{--}\end{pmatrix}&A_{+-}\begin{pmatrix}B_{++}&B_{+-}\\B_{-+}&B_{--}\end{pmatrix}\\A_{-+}\begin{pmatrix}B_{++}&B_{+-}\\B_{-+}&B_{--}\end{pmatrix}&A_{--}\begin{pmatrix}B_{++}&B_{+-}\\B_{-+}&B_{--}\end{pmatrix}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}A_{++}B_{++}&A_{++}B_{+-}&A_{+-}B_{++}&A_{+-}B_{+-}\\A_{++}B_{-+}&A_{++}B_{--}&A_{+-}B_{-+}&A_{+-}B_{--}\\A_{-+}B_{++}&A_{-+}B_{+-}&A_{--}B_{++}&A_{--}B_{+-}\\A_{-+}B_{-+}&A_{-+}B_{--}&A_{--}B_{-+}&A_{--}B_{--}\end{bmatrix}\begin{array}{c}|+,+\rangle\\|+,-\rangle\\|-,+\rangle\\|-,-\rangle\end{array}$$

האיברים הם למשל $A_{+-}=\left\langle+_{S_1}\middle|A\middle|-_{S_1}\right\rangle$ ו- $B_{+-}=\left\langle+_{S_2}\middle|B\middle|-_{S_2}\right\rangle$, כאשר $\left|\pm_{S_1}\right\rangle$ הוא מצב עצמי של $S_{1,z}$. כך למשל, אם נרצה לחשב את המטריצה של $S_{2,x}$ בבסיס $\left\{\left|\pm,\pm\right\rangle\right\}$ נחשב $S_{2,x}=\mathbf{I}_1\otimes\left(S_{2,x}\right)$, כאשר $\mathbf{I}_1$ זו מטריצת יחידה הפועלת על $\vec{S}_1$ בלבד ו- $\left(S_{2,x}\right)$ היא המטריצה 2×2 המוכרת הפועלת על $\vec{S}_2$.

סיבובים וטרנספורמציה אקטיבית ופסיבית

<u>טרנספורמציה אקטיבית</u> היא כזו שמשנה את מצב המערכת ביחס למערכת הצירים, אך היא לא משנה את מערכת הצירים עצמה או את האופרטורים שמוגדרים במערכת. כך למשל, סיבוב אקטיבי ב- 90° סביב ציר y יהפוך את המצב $\left|\uparrow_z\right\rangle$ ל- $\left|\uparrow_x\right\rangle$, מבלי לשנות את הצירים או את האופרטור $\vec{S}$. אם U היא הטרנספורמציה, המצבים החדשים של המערכת מתקבלים על ידי $\left|\psi_{\text{new}}\right\rangle=U\left|\psi_{\text{old}}\right\rangle$. <u>טרנספורמציה פסיבית</u> היא כזו שמסובבת את כל מערכת הצירים, ובכלל זה גם את המצבים והאופרטורים שמוגדרים לנו. שינוי המצבים נעשה בצורה זהה, $\left|\psi_{\text{new}}\right\rangle=U\left|\psi_{\text{old}}\right\rangle$ (כמובן שכעת מדובר ב- U אחרת), והאופרטורים משתנים לפי $A_{\text{new}}=UA_{\text{old}}U^\dagger$. כאשר U יוניטרית (כמו למשל במקרה של סיבוב), מתקיים $UU^\dagger=I$ ונקבל שערכי התצפית אינם משתנים $\left\langle\psi_{\text{new}}\middle|A_{\text{new}}\middle|\psi_{\text{new}}\right\rangle=\left\langle\psi_{\text{old}}\middle|A_{\text{old}}\middle|\psi_{\text{old}}\right\rangle$. <u>סיבוב אקטיבי</u> של מצב ספין כלשהו בזווית θ סביב הציר $\hat{n}$ מתקבל על ידי הפעלת האופרטור $R_a\left(\theta,\hat{n}\right)=e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{S}/\hbar}=e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}/2}$. <u>הסיבוב הפסיבי</u> המקביל מתקבל על ידי האופרטור $R_p\left(\theta,\hat{n}\right)=R_a\left(-\theta,\hat{n}\right)=e^{i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}/2}$.

חלקיק טעון בשדה מגנטי קבוע

עבור שדה מגנטי קבוע (ללא שדה חשמלי) נוח לבחור $\varphi = 0$ ו- $\vec{A} = -\left(\vec{r} \times \vec{B}_0\right)/2$, שנותן את השדות $\vec{E} = 0$ ו- $\vec{B} = \vec{B}_0$.

בחירה זו נותנת את ההמילטוניאן הבא:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\left(\vec{L}\cdot\vec{B}_0\right) + \frac{q^2}{8mc^2}\left(\vec{r}\times\vec{B}_0\right)^2$$

ובמקרה הפרטי של $\vec{B}_0 = B_0\hat{z}$ מקבלים:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{qB_0}{2mc}L_z + \frac{q^2B_0^2}{8mc^2}\left(x^2+y^2\right)$$

$\omega_L = qB_0/(2mc)$ היא תדירות לרמור ($\omega_L = \omega_c/2$).

רמות לנדאו לחלקיק חופשי בשדה מגנטי קבוע:

$$E_n = \hbar\omega_c\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

אפקט זימן האנומלי

שוב מכניסים אטום מימן לשדה מגנטי חיצוני $\vec{B} = B\hat{z}$, אך כעת מניחים שהשדה חלש יחסית ($B \ll 10^5\,\mathrm{Gauss}$) כך שיש להתחשב גם בתיקון המבנה הדק לרמות האנרגיה, בנוסף להפרעה כתוצאה מהשדה המגנטי שהוספנו, שהיא:

$$W_B = -\vec{M}\cdot\vec{B} = \frac{eB}{2\mu c}\left(L_z + 2S_z\right)$$

כמו בהפרעת $\vec{L}\cdot\vec{S}$ במבנה הדק, גם כאן יקל עלינו לבצע את החישובים בבסיס $\left|n,j,\ell,m\right\rangle$, מכיוון שההפרעה חילופית עם $\vec{L}^2$ ו- J_z, שהם האופרטורים הגורמים לניוון באנרגיות (לאחר התחשבות במבנה הדק), ולכן ההפרעה תהיה אלכסונית בכל תת-מרחב מנוון וחישוב התיקון הוא פשוט:

$$\Delta E_B^{(1)} = \frac{eB}{2\mu c}\underbrace{\left\langle L_z + 2S_z\right\rangle}_{J_z + S_z} = \omega_L\left(m\hbar + \left\langle S_z\right\rangle\right)$$

על מנת לחשב את $\left\langle S_z\right\rangle$ משתמשים במקדמי קלבש-גורדן ומבטאים את $\left|n,j,\ell,m\right\rangle$ בעזרת מצבי $\left|n,\ell,m_\ell,m_s\right\rangle$. בסך הכל:

$$\Delta E_B^{(1)} = m\hbar\omega_L\left(1 \pm \frac{1}{2\ell+1}\right) \qquad \text{for} \quad j = \ell \pm \tfrac{1}{2}$$

הפרעה פתאומיות והפרעה איטית

מדובר במקרה פרטי של תורת ההפרעות התלויה בזמן, שבה ההמילטוניאן של המערכת משתנה מאוד לאט או מאוד מהר. בשני מקרים אלו אין צורך להניח שההפרעה חלשה.

הפרעה איטית (אדיאבטית): במקרה שבו ההמילטוניאן שמתאר את המערכת משתנה לאט מאוד, ניתן להניח ש"אין ערבוב" בין מצבי המערכת בזמן שהשינוי מתרחש. למשל, אם ניקח בור פוטנציאל אינסופי וחלקיק שנמצא ברמה ה- n ית שלו, ונשנה את רוחב הבור לאט מאוד, החלקיק יישאר באותה רמה n. כמובן שפונקצית הגל שלו תשתנה בהתאם לרוחב הבור בכל רגע ורגע (וכנ"ל לגבי האנרגיה), אך עדיין הוא יישאר במצב עצמי לאורך כל השינוי.

הפרעה מהירה (פתאומית): כאשר ההמילטוניאן של המערכת משתנה מהר מאוד, ניתן להניח שהמערכת אינה מספיקה להגיב לשינוי, והיא נשארת עם אותה פונקצית גל שהייתה לה לפני ההפרעה. למשל, אם נכין חלקיק ברמה ה- n ית של בור פוטנציאל אינסופי, ונשנה באופן פתאומי ומיידי את רוחב הבור, החלקיק יישאר עם אותה פונקצית גל שהייתה לו לפני ששינינו את הבור. ההסתברות למצוא אותו ברמות האנרגיה של הבור החדש נתונה על ידי הטלה של פונקצית הגל של הבור הישן על פונקציות הגל של הבור החדש.

אפקט זימן הלא-אנומלי

מכניסים אטום מימן לשדה מגנטי חיצוני $\vec{B} = B\hat{z}$. מתוך הנוסחה ל-"חלקיק טעון בשדה מגנטי קבוע" בתוספת הספין, לאחר הצבה $q = -e$, מקבלים המילטוניאן:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{\frac{eB_0}{2mc}\left(L_z + 2S_z\right)}_{W} + \underbrace{\cancel{\frac{e^2B_0^2}{8mc^2}\left(x^2+y^2\right)}}_{W'}$$

עבור שדות לא חזקים מדי ($B \ll 10^9\,\mathrm{Gauss}$), ההפרעה W' זניחה לעומת W ולא נתייחס אליה. כמו כן מניחים שהשדה לא חלש מדי ($B \gg 10^4\,\mathrm{Gauss}$) כך שמתעלמים מתיקוני המבנה הדק לאטום המימן. התוספת $W = \omega_L\left(L_z + 2S_z\right)$ חילופית עם H_0 ולכן קיים פיתרון מדוייק לבעיה – כל רמת אנרגיה פשוט מקבלת תוספת של:

$$\Delta E_{\text{zeeman}} = \omega_L\hbar\left(m_\ell + 2m_s\right)$$

המבנה הדק של אטום המימן

נוסיף שני תיקונים לרמות האנרגיה של אטום המימן – הראשון כתוצאה מאינטראקציית ספין-מסילה ($\vec{L}\cdot\vec{S}$) והשני הוא תיקון יחסותי מסדר ראשון (p^4).

באופן מפורש ההפרעות הן:

$$W_{\vec{L}\cdot\vec{S}} = \frac{e^2}{2\mu^2c^2}\frac{\vec{L}\cdot\vec{S}}{r^3}, \qquad W_{p^4} = -\frac{p^4}{8\mu^3c^2}$$

על מנת לחשב את התיקון של $\vec{L}\cdot\vec{S}$ עוברים לבסיס $\left|n,j,\ell,m\right\rangle$, מכיוון שההפרעה הזו חילופית עם $\vec{J}^2, J_z$ ולכן היא תהיה אלכסונית בכל תת-מרחב של n, ואז למרות שמדובר בתורת ההפרעות המנוונת (ניוון $2n^2$ באנרגיות) התיקון מסדר ראשון הוא פשוט ערך התצפית של $W_{\vec{L}\cdot\vec{S}}$ במצבי $\left|j,\ell,m\right\rangle$. מפרידים ל- $j = \ell \pm \tfrac{1}{2}$ ומקבלים:

$$\Delta E_{\vec{L}\cdot\vec{S}}^{(1)} = \frac{e^2}{4\mu^2c^2r_1^3}\cdot\frac{1}{n^3\ell\left(\ell+\tfrac{1}{2}\right)(\ell+1)}\cdot\begin{cases}\ell & j = \ell + \tfrac{1}{2}\\ -(\ell+1) & j = \ell - \tfrac{1}{2}\end{cases}$$

על מנת לחשב את התיקון היחסותי נעזרים בכך שניתן לרשום:

$$W_{p^4} = -\frac{p^4}{8\mu^3c^2} = -\frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{p^2}{2\mu}\right)^2 = -\frac{1}{2\mu c^2}\left(H_0 + \frac{e^2}{r}\right)^2$$

ואז נקבל:

$$\Delta E_{p^4}^{(1)} = \left\langle n,\ell,m_\ell\right|W_{p^4}\left|n,\ell,m_\ell\right\rangle = -\frac{e^2}{2r_1}\cdot\frac{\alpha^2}{n^3}\left(\frac{1}{\ell+\tfrac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)$$

שני התיקונים בסך הכל נותנים:

$$\Delta E_{\text{total}}^{(1)} = -\frac{e^2}{2r_1}\frac{\alpha^2}{n^3}\left(\frac{1}{j+\tfrac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)$$

מה המשמעות j שמופיע בתשובה? נניח מכינים אלקטרון במצב n,ℓ,m_ℓ,m_s ידוע. מבלי להתחשב במבנה הדק, יש לאלקטרון זה אנרגיה ידועה היטב התלויה ב- n בלבד. אך אם נתייחס גם להפרעות הנ"ל, הרי שהאלקטרון לא באמת נמצא במצב עצמי של ההמילטוניאן המופרע, משום שאין לו j מוגדר. האלקטרון יהיה בסופרפוזיציה של מצבים עם $j = \ell \pm 1/2$, כל אחד עם אנרגיה שונה לפי התוצאה שקיבלנו לעיל.

עבור $\ell = 0$ אומנם מקבלים ש- $<\vec{L}\cdot\vec{S}>$ מתאפס, אך קיים תיקון אחר לאנרגיות (דארווין), ולכן פורמלית עדיין מציבים $\ell = 0$ בנוסחה ומקבלים תוצאה נכונה.

הפרעה מחזורית למערכת שתי רמות

נניח מערכת שתי רמות עם $E_1 > E_2$ והמילטוניאן H_0, ומוסיפים הפרעה מחזורית מהצורה $V(t) = V\cos\omega t$. נרשום את ההמילטוניאן הכולל של המערכת כך:

$$H = \begin{pmatrix}E_1 & 0\\ 0 & E_2\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix}V_{11} & V_{12}\\ V_{12}^* & V_{22}\end{pmatrix}$$

נניח פיתרון $\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1,2} C_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}\left|n\right\rangle$ עם ת"ה $C_n(0) = \left\langle n\middle|\psi(0)\right\rangle$:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix}V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t}\\ V_{12}^*e^{-i\omega_{12}t} & V_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix}$$

כאשר $\omega_{12} = \left(E_1 - E_2\right)/\hbar > 0$. תחת הקירוב הסקולרי מקבלים את המערכת:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & V_{12}e^{i(\Delta\omega)t}\\ V_{12}^*e^{-i(\Delta\omega)t} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\ C_2\end{pmatrix} \qquad \left(\Delta\omega = \omega_{12} - \omega\right)$$

ההנחות הן ש- $\Delta\omega \ll \omega, \omega + \omega_{12}$, ההפרעה חלשה $V_{ij} \ll \hbar\omega_{12}$ ומזניחים איברים מהירים $e^{i\omega t}, e^{i(\omega_{12}+\omega)t}$ לעומת האיברים האיטיים $e^{i(\omega_{12}-\omega)t}$.

תורת ההפרעות התלויה בזמן – כללי

נתעניין בהמילטוניאן מהצורה $H = H_0 + V(t)$, כאשר ל-H_0 פתרונות ידועים $H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ ו-$V(t) = \lambda v(t)$ היא הפרעה "קטנה". נרצה לדעת מה ההסתברות $P_{fi}(t)$ למצוא את המערכת במצב $|\varphi_f\rangle$ כלשהו בזמן t, כאשר ידוע לנו המצב ההתחלתי של המערכת $|\varphi_i\rangle$. עלינו לפתור את משוואת שרדינגר התלויה בזמן: $(H_0 + V(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$

נציע פיתרון מהצורה: $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}|\varphi_n\rangle$

מהצבה שלו למשוואה והטלה על $\langle\varphi_f|$ מקבלים:

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_f(t) = \sum_n C_n(t)e^{i(E_f-E_n)t/\hbar}\langle\varphi_f|V(t)|\varphi_n\rangle$$

קיבלנו מד"ר לכל f, ובסך הכל זוהי מערכת משוואות, עם תנאי התחלה $C_n(0) = \delta_{n,i}$. מפתחים לטור ב-λ את המקדמים $C_n(t)$, ומציבים למערכת הזו. בסדר אפס ב-λ מקבלים ש-$C_n^{(0)}(t)$ קבועים, כלומר $C_n^{(0)}(t) = \delta_{n,i}$ לכל t. למקדמים בסדרים הגבוהים מתקבלת נוסחת רקורסיה:

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_f^{(k+1)}(t) = \sum_n C_n^{(k)}(t)e^{i(E_f-E_n)t/\hbar}\langle\varphi_f|v(t)|\varphi_n\rangle$$

מקדמי סדר ראשון מקבלים מהצבת $C_n^{(0)}(t) = \delta_{n,i}$ לטור, עם $k=0$:

$$\lambda C_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{fi}t}V_{fi}(t)\,dt$$

כאשר $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ ו-$V_{fi}(t) = \langle\varphi_f|V(t)|\varphi_i\rangle$.

לכן ההסתברות המבוקשת בסדר ראשון היא:

$$P_{fi}(t) = \left|\delta_{i,f} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{fi}t}V_{fi}(t)\,dt\right|^2$$

והתנאי לתקפות הפיתרון הוא $P_{fi} \ll 1$ עבור $f \neq i$.

(כאשר יש ניוון צריך אולי לסכם על כל המצבים באותה רמה)

הפרעה מחזורית

נניח הפרעה מהצורה $V(t) = V\cos\omega t$ כאשר V אופרטור שאינו תלוי בזמן. הצבה ל-$P_{fi}(t)$ הכללי שמצאנו נותנת (עבור $f \neq i$):

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t}\frac{V_{fi}}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)dt\right|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

מסמנים $P_\pm = \left(e^{i(\omega_{fi}\mp\omega)t}-1\right)/\omega_{fi}\mp\omega$, ואז ניתן להוכיח שעבור $\omega \neq 0$ ובתנאים מסויימים (המפורטים למטה) ניתן להזניח את P_+P_- בפתיחת הסוגריים, ואז נקבל $P_{fi}(t) = |V_{fi}|^2\left(P_+^2 + P_-^2\right)/4\hbar^2$. נתעניין ב-$P_+$ בלבד (נניח שלא קיים מעבר שבו המערכת יורדת באנרגיה), ואז הסתברות המעבר נתונה על ידי:

$$P_{fi}(t) = \frac{|V_{fi}|^2}{4\hbar^2}\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}t\right)/\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2$$

(תחת הזהות $e^{i2\alpha} - 1 = 2ie^{i\alpha}\sin\alpha$). מכאן מסתבר שהקירוב לעיל (הזנחת האיבר P_+P_-) מותר כאשר $t \gg 2\pi/\omega$ מחד (כך שהמרחק בין השיאים של P_+, P_- יהיה גדול מהרוחב שלהם), ו-$t \ll \hbar/|V_{fi}|$ מאידך (כך שההסתברות $P_{fi}(t)$ תהיה קטנה).

כלל הזהב של פרמי

כלל זה מדבר על <u>יינון מצבים</u>, כלומר מעבר ממצבים קשורים של H_0 למצבים חופשיים ברצף. בגבול שבו $(\omega_{fi}-\omega)t \gg 1$, מתקבל מ-$P_{fi}(t)$ (להפרעה מחזורית) הגבול: $P_{fi}(t) = |V_{fi}|^2\left[2\pi t\delta(\omega_{fi}-\omega)\right]/4\hbar^2$. מגדירים את <u>צפיפות ההסתברות למעבר ביחידת זמן</u>, ממצב התחלתי $|\varphi_i\rangle$ למצב סופי $|\mathbf{k}_f\rangle$:

$$R_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\mathbf{k}_f|V|\varphi_i\rangle\right|^2\rho(\mathbf{k}_f)\delta(E_i - E_f + \hbar\omega)\qquad[\omega \neq 0]$$

כאשר $\rho(\mathbf{k}_f)$ היא צפיפות המצבים במרחב $\mathbf{k}$, כך ש-$dn = \rho(\mathbf{k}_f)d\mathbf{k}$ הוא מספר המצבים בסביבת $\mathbf{k}_f$ של $d\mathbf{k}$. לכן ההסתברות למעבר ממצב $|\varphi_i\rangle$ למצבים בסביבת $d\mathbf{k}$ של $|\mathbf{k}_f\rangle$ תוך זמן dt היא: $dP_{fi} = R_{fi}(\mathbf{k}_f)d\mathbf{k}\,dt$

(ניתן להשתמש בכלל גם עבור הפרעה קבועה: מציבים $\omega = 0$ וכופלים את R_{fi} ב-4.)

חישוב צפיפות המצבים

מניחים שאנו בנפח קובי עם צלע L (ונפח כולל $V = L^3$). הנחה זו כופה מחזוריות על הפתרונות לחלקיק חופשי $|\phi\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{V}$, כך שרכיבי התנע יכולים לקבלים ערכים של $k_i = (2\pi/L)n_i$ בלבד. כל שלשה (n_x, n_y, n_z) תורמת נקודה למרחב הפאזה, וכולן ביחד מהוות מעין שריג, שנפח כל תא שלו הוא $v = (2\pi/L)^3$. לכן מספר המצבים בתוך אלמנט נפח $d\mathbf{k}$ מתקבל מתוך חלוקה של נפח האלמנט בנפח שתופס כל מצב, $dn = d\mathbf{k}/(2\pi/L)^3$. אבל $dn = \rho(\mathbf{k})d\mathbf{k}$ ולכן $\rho(\mathbf{k}) = 1/v = (L/2\pi)^3$.

ניתן לקבל גם צפיפות מצבים ביחס לאנרגיה, $\rho(E)$, מתוך כך שהאנרגיה של המצב תלויה רק ב-$|\mathbf{k}|$ לפי $E = \hbar^2|\mathbf{k}|^2/2m$, ולכן לכל המצבים שנמצאים בקליפה כדורית דקה יש אותה אנרגיה. בסך הכל מקבלים מתוך נוסחה לנפח של קליפה דקה ולאחר חלוקה בנפח מצב בודד: $\rho_{3D}(E) = L^3\left(m^3/2\pi^4\hbar^6\right)^{1/2}E^{1/2}$. צפיפות המצבים ביחס לאנרגיה ובכיוון מסויים $\hat{\mathbf{k}}$, $\rho(E, \hat{\mathbf{k}})$, מתקבלת מתוך $\rho(E)$ על ידי חלוקה ב-4π משום שאין תלות של הצפיפות בכיוון. כל התוצאות פרופורציוניות ל-L^3, אך נירמול פונקציית הגל ב-$1/\sqrt{L^3}$ מבטיח שהתוצאות בסופו של דבר אינן תלויות בגודל זה. תוצאות למימד אחד ושניים:

$$\rho_{1D}(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}},\qquad \rho_{2D}(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$$

אינראקציה של אטום המימן עם קרינה

המילטוניאן של אטום מימן בנוכחות קרינה אלקטרומגנטית:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e}{\mu c}\left(\vec{p}\cdot\vec{A}\right)}_{W_1(t)} + \underbrace{\frac{e}{\mu c}\left(\vec{S}\cdot\vec{B}\right)}_{W_2(t)} + \cancel{\frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2}$$

ניקח למשל גל המתקדם בכיוון ציר $\hat{y}$, עם השדות הבאים:

$$\vec{E} = \hat{z}E\cos(ky - \omega t),\quad \vec{B} = \hat{x}B\cos(ky - \omega t)$$

נוח לבחור את הכיול $\vec{A} = \hat{z}A\sin(ky - \omega t)$, $\varphi = 0$, ואז מתקיימים הקשרים $B = kA = \omega A/c = E$. ניתן להראות ש-$\langle W_2\rangle/\langle W_1\rangle \sim r_1/\lambda$, כאשר λ הוא אורך גל הקרינה, ומניחים $\lambda \gg r_1$. לכן בסדר אפס מזניחים את $W_2(t)$ ואז:

$$W_1(t) = \frac{eA}{\mu c}p_z\sin\left(\cancel{ky} - \omega t\right) \approx -\frac{eA}{\mu c}p_z\sin\omega t = -eEz\cos\omega t = V_{DE}(t)$$

כאשר גם כאן קירבנו לסדר אפס ב-$\langle ky\rangle \sim r_1/\lambda$. זהו איבר הקירוב <u>הדיפול החשמלי</u>. כאשר לוקחים סדר ראשון בפרמטר הקטן מקבלים את איבר <u>הדיפול המגנטי</u> ו<u>הקוודרופול החשמלי</u>:

$$\underbrace{\frac{eB}{2\mu c}\left(L_x + 2S_x\right)\cos\omega t}_{V_{DM}(t)},\qquad \underbrace{\frac{eB}{2\mu c}\left(p_zy + p_yz\right)\cos\omega t}_{V_{QE}(t)}$$

את ערכי התצפית של האופרטורים הנ"ל מחשבים בעזרת:

$$p_z = \mu[z, H_0]/i\hbar \quad\Rightarrow\quad \langle f|p_z|i\rangle = i\mu\omega_{fi}\langle f|z|i\rangle$$

$$\langle f|p_zy + p_yz|i\rangle = i\mu\omega_{fi}\langle f|yz|i\rangle$$

כלל: $\int_{4\pi}Y^*_{\ell_1m_1}Y_{\ell_2,m_2}Y_{\ell_3,m_3}d\Omega \neq 0$ רק אם מתקיימים:

$$m_1 = m_2 + m_3,\qquad \ell_1 + \ell_2 + \ell_3\ \ \text{even}$$

$$|\ell_2 - \ell_3| \le \ell_1 \le \ell_2 + \ell_3$$

כללי ברירה לאטום המימן

קוודרופול חשמלי

$\Delta\ell = 0, \pm2$
$\Delta m_\ell = 0, \pm1, \pm2$
$\Delta m_s = 0$

דיפול מגנטי (צריכים להתקיים התנאים על התנ"ז המסלולי <u>או</u> על הספין)

$\vec{B} \parallel \hat{x}, \hat{y}$	$\vec{B} \parallel \hat{z}$
$\Delta\ell = 0$	$\Delta\ell = 0$
$\Delta m_\ell = \pm1$	$\Delta m_\ell = 0$
$\Delta m_s = \pm1$	$\Delta m_s = 0$

דיפול חשמלי (<u>כל</u> התנאים חייבים להתקיים)

$\vec{E} \parallel \hat{x}, \hat{y}$	$\vec{E} \parallel \hat{z}$
$\Delta\ell = \pm1$	$\Delta\ell = \pm1$
$\Delta m_\ell = \pm1$	$\Delta m_\ell = 0$
$\Delta m_s = 0$	$\Delta m_s = 0$

תורת הפיזור

F_{in} הוא שטף החלקיקים הפוגעים, ביחידות של מספר החלקיקים ליחידת שטח ליחידת זמן, ו- $dn(\theta,\varphi)$ הוא מספר החלקיקים ליחידת זמן המתפזרים בזווית (θ,φ) עד כדי $d\Omega$. נגדיר חתך הפעולה הדיפרנציאלי $\sigma(\theta,\varphi)$ בתור היחס, כלומר $dn=F_{\text{in}}\sigma(\theta,\varphi)d\Omega$. ניתן להראות שההתנהגות של פונקצית הגל המתפזרת עבור $r\to\infty$ חייבת להיות מהצורה $e^{ikz}+f_k(\theta,\varphi)e^{ikr}/r$.

כיצד נקשר בין f_k ו- σ? זרם ההסתברות של הגל הנכנס (e^{ikz}) הוא פשוט $J_{\text{in}}=\hbar k/m$. ניתן למצוא גם את זרם ההסתברות של הגל המתפזר $f_k(\theta,\varphi)e^{ikr}/r$, ולראות שהוא $J_{\text{sc}}=\left|f_k(\theta,\varphi)\right|^2\hbar k/\left(mr^2\right)$ (מתעלמים מהרכיבים המשיקיים של זרם ההסתברות, משום שהם דועכים כמו r^{-3}). כעת, $F_{\text{in}}=CJ_{\text{in}}$ בעוד ש- $dn=CJ_{\text{sc}}dS=CJ_{\text{sc}}r^2d\Omega$. מתוך צירוף שתי המשוואות מקבלים בדיוק $\sigma(\theta,\varphi)=\left|f_k(\theta,\varphi)\right|^2$.

גלים חלקיים

ניתן לפתח כל פונקצית גל שתלויה ב- (r,θ) בלבד לטור בפולינומי לג'נדר:

$$\psi(r,\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell e^{i\delta_\ell}P_\ell(\cos\theta)R_{k,\ell}(r)$$

כאשר δ_ℓ הם פרמטרים התלויים בפונקציה, ו- $R_{k,\ell}(r)$ הם פתרונות למשוואה הרדיאלית. בפרט, הפיתוח של הגל המישור e^{ikz} הוא:

$$e^{ikz}=\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell\sqrt{\frac{\pi}{2k^2}}P_\ell(\cos\theta)R_{k,\ell}(r)$$

ואז מתוך השוואה של הביטויים הנ"ל עם פונקצית הגל המתפזרת $e^{ikz}+f_k(\theta,\varphi)e^{ikr}/r$ (בגבול שבו $r\to\infty$) נקבל:

$$f_k(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\left(\delta_\ell\right)P_\ell(\cos\theta)$$

כאשר δ_ℓ הם פרמטרים התלויים בפוטנציאל המפזר. מכאן ניתן לקבל את חתך הפעולה הכולל, בעזרת אורתוגונליות של $P_\ell(\cos\theta)$:

$$\sigma_{\text{total}}=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\left(\delta_\ell\right)$$

δ_ℓ הם למעשה <u>הסחות הפאזה</u>, והם נקבעים מתוך ההתנהגות האסימפטוטית של פונקצית הגל בפוטנציאל המפזר. כלומר, פותרים את המשוואה הרדיאלית עבור הפוטנציאל הנתון, ואז מחפשים <u>התנהגות אסימפטוטית</u> ב- $kr\to\infty$ של $\sin\left(kr-\pi\ell/2+\delta_\ell\right)$ עבור $u(r)$ (כזכור $u(r)=rR(r)$), כאשר ℓ הוא התנע הזוויתי של החלקיק. מכאן מוצאים את δ_ℓ.

עבור פוטנציאלים עם טווח פעולה סופי R, באופן קלאסי רק חלקיקים עם תנע זוויתי $\ell\le kR$ מושפעים מהפיזור. באופן קוונטי נאמר שרק גלים חלקיים עם $\ell\le kR$ מושפעים באופן משמעותי מהפיזור, בעוד שעבור גלים עם $\ell>kR$ מתקיים $\delta_\ell\to 0$. לכן ניקח בטור איברי ℓ רק עד kR. בפרט עבור $kR\ll 1$ לוקחים רק פיזור של גלי S, עם $\ell=0$.

(<u>המשפט האופטי</u>: $\operatorname{Im}\left\{f_k(0)\right\}=k\sigma_{\text{total}}/4\pi$)

תזכורת – <u>המשוואה הרדיאלית</u> שיש לפתור עבור פוטנציאל $V(r)$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)+k^2\right]u(r)=0\qquad\left(E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right)$$

כאשר $u(r)$ רציפה, ו- $u'(r)$ רציפה אלא אם כן יש פוטנציאל "מיוחד" ואז:

$$u'\left(r_0+\varepsilon\right)-u'\left(r_0-\varepsilon\right)=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_{r_0-\varepsilon}^{r_0+\varepsilon}V(r)u(r)dr$$

<u>פולינומי לג'נדר</u> הראשונים:

$$P_0(\cos\theta)=1,\qquad P_2(\cos\theta)=\frac{1}{2}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

$$P_1(\cos\theta)=\cos\theta,\qquad P_3(\cos\theta)=\frac{1}{2}\left(5\cos^3\theta-3\cos\theta\right)$$

נספחון מתמטי

סכום סדרה חשבונית והנדסית ותוצאות שימושיות:

$$\sum\nolimits_{k=1}^{n}\left[a_1+(k-1)d\right]=\frac{n}{2}\left[2a_1+(n-1)d\right],\qquad\sum\nolimits_{k=0}^{n}ar^k=a\frac{1-r^{n+1}}{1-r}$$

$$\left|\int_0^t e^{i\omega t'}dt'\right|^2=\frac{4}{\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2},\qquad\int_0^\infty r\sin(qr)e^{-r^2/a^2}dr=\frac{\sqrt{\pi}}{4}a^3qe^{-q^2/a^2}$$

קירוב בורן

תקף כאשר אנרגיית החלקיקים המתפזרים גדולה מאוד מהפוטנציאל המפזר. בקירוב זה מקבלים:

$$f_k(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{\text{space}}d^3\vec{r}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(\vec{r})$$

$\left(\vec{q}=\Delta\vec{k}=\vec{k}_{\text{in}}-\vec{k}_{\text{sc}}\right)$ ועבור פוטנציאל מרכזי:

$$f_k\left(\theta,\cancel{\varphi}\right)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty rV(r)\sin(qr)dr$$

כאשר $\left|\vec{q}\right|=\left|\Delta\vec{k}\right|=2k\sin(\theta/2)$ משום שההתנגשות אלסטית ולכן $\left|\vec{k}_{\text{in}}\right|=\left|\vec{k}_{\text{sc}}\right|$. התנאי המתמטי לשימוש בקירוב בורן:

$$\frac{\mu}{k\hbar^2}\left|\int_0^\infty dr'V\left(r'\right)\left(e^{2ikr'}-1\right)\right|\ll 1$$

ואם נניח של- $V(r)$ יש טווח סופי R וכן שהאנרגיות גבוהות, כלומר $kR\gg 1$, נקבל שהאינטגרל על $e^{2ikr'}$ מתאפס ואז מתקבל התנאי $\bar{V}\ll E$, כאשר E זו אנרגית החלקיק ו- $\bar{V}$ הוא הממוצע של $V(r)$.

חלקיקים זהים

כנגד שני סוגי חלקיקים דיברה תורת הקוונטים: <u>בוזונים (ספין שלם)</u> ו<u>פרמיונים (ספין חצי-שלם)</u>. פרמיונים זהים חייבים להיות במצב שהוא אנטי-סימטרי לגבי החלפה של כל זוג מביניהם (כלומר, פונקצית הגל מקבלת מינוס תחת החלפת שני חלקיקים), בעוד שבוזונים זהים יהיו במצב שהוא סימטרי לגבי החלפה ביניהם (פונקצית הגל אינה משתנה). המצב כולו חייב להיות סימטרי/אנטי סימטרי, ולא רק החלק הספינורי או המרחבי. בפרט, אם המצב הספינורי הוא סימטרי אזי המצב המרחבי צריך להיות אנטי-סימטרי (עבור פרמיונים), ולהיפך. עבור בוזונים, גם החלק הספינורי וגם החלק המרחבי חייבים להיות סימטריים. עבור מערכת של שני ספינים $1/2$, מצבי <u>הטריפלט</u> ($\ell=1$) הם סימטריים ומצב <u>הסינגלט</u> ($\ell=0$) הוא אנטי-סימטרי.

<u>עקרון פאולי</u> – שני פרמיונים זהים לא יכולים להיות באותו מצב קוונטי, משום שהמצב האנטי-סימטרי היחיד שמקיים דרישה זו הוא מצב האפס, שאינו פיסיקלי.

מוגדר <u>אופרטור החילוף</u> P_{ij}, שמחליף בין המצבים של החלקיקים ה- i,j. מצבים של חלקיקים זהים חייבים להיות מצבים עצמיים של P_{ij} (לכל זוג i,j), כאשר לבוזונים יהיה ערך עצמי $+1$ ולפרמיונים -1. האופרטור P_{ij} הוא הרמיטי ומקיים $P_{ij}^2=1$.

במקרה של שני חלקיקים זהים, ניתן ליצור מצבים סימטריים או אנטי-סימטריים בעזרת האופרטורים $S_\pm=\left(1\pm P_{12}\right)/2$. אלה הם אופרטורי הטלה (על מרחב סימטרי או אנטי-סימטרי של מצבים), כלומר $S_\pm^2=S_\pm$. כיצד נשתמש בהם? אם ידוע ששני החלקיקים הזהים נמצאים במצבים חד-חלקיקיים $\left|\varphi\right\rangle,\left|\phi\right\rangle$ (אך לא ידוע מי נמצא באיזה מצב, כמובן, משום שהם זהים), המצב הסימטרי או אנטי-סימטרי המתאים יהיה $S_\pm\left(\left|\varphi\right\rangle\otimes\left|\phi\right\rangle\right)$, <u>עד כדי נירמול</u> של המצב.

כאשר נתון בסיס של מצבים למרחב מסויים, ורוצים לדעת כיצד התנהגו חלקיקים זהים במרחב זה, מפעילים את כל איברי הבסיס את האופרטור המתאים $S_\pm$ ומקבלים בסיס חדש למרחב הסימטרי או אנטי-סימטרי המתאים.

עבור שני חלקיקים זהים המאכלסים מצבים חד-חלקיקיים שונים $\left|\varphi_1\right\rangle,\left|\varphi_2\right\rangle$ ואופרטורים $\hat{t}_1,\hat{t}_2$ הפועלים כל אחד על חלקיק אחר:

$$\left\langle\psi_{S,A}\right|\hat{t}_i\left|\psi_{S,A}\right\rangle=\frac{\left\langle\varphi_1\right|\hat{t}\left|\varphi_1\right\rangle+\left\langle\varphi_2\right|\hat{t}\left|\varphi_2\right\rangle}{2}$$

$$\left\langle\psi_{S,A}\right|\hat{t}_1+\hat{t}_2\left|\psi_{S,A}\right\rangle=\left\langle\varphi_1\right|\hat{t}\left|\varphi_1\right\rangle+\left\langle\varphi_2\right|\hat{t}\left|\varphi_2\right\rangle$$

עבור N חלקיקים <u>הדטרמיננטה של סלייטר</u> יוצרת מצב אנטי-סימטרי:

$$\left|\psi\right\rangle_A=\begin{vmatrix}\left|1,\varphi_1\right\rangle & \left|1,\varphi_2\right\rangle & \dots & \left|1,\varphi_N\right\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \left|N,\varphi_1\right\rangle & \left|N,\varphi_2\right\rangle & \cdots & \left|N,\varphi_N\right\rangle\end{vmatrix}$$

וכמו כן ניתן להשתמש בנוסחאות הבאות:

$$\left|\psi\right\rangle_S=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\alpha=1}^{N!}P_\alpha\left|\psi\right\rangle,\qquad\left|\psi\right\rangle_A=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\alpha=1}^{N!}\varepsilon_\alpha P_\alpha\left|\psi\right\rangle$$

כאשר α רץ על כל הפרמוטציות P_α של N איברים, ε_α היא הזוגיות של הפרמוטציה P_α, ו- $\left|\psi\right\rangle=\left|1\varphi_1,2\varphi_2,\dots,N\varphi_N\right\rangle$.

קבועים ויחידות

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$a_0 = r_1 = \dfrac{\lambda_c}{2\pi\alpha} = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\,\mathrm{A}$

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

יחסות

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

מודל בוהר לאטום המימן

הנחת היסוד – התנע הזוויתי מקוונטט :

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

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

מפה לשם מגיעים לקשרים : (Z הוא מספר הפרוטונים)

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

ובמעבר בין רמות אנרגיה נפלט פוטון עם אורך גל :

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

האפקט הפוטואלקטרי

עבור פוטון מתקיים :

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

אנרגיה של אלקטרון שהשתחרר מהמתכת :

$$E_k = h\nu - W$$

פיזור בראג

התנאי להתאבכות בונה הוא :

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

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

אפקט קומפטון

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

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

פונקציית דלתא ומדרגה

מוגדרת תחת סימן האינטגרל :

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

ומקיימת את התכונות הבאות :

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

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

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

פונקציית דלתא מוגדרת גם כנגזרת של פונקציית המדרגה :

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

אודות בסיסים

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

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

בסיס זה יקרא גם שלם, אם מתקיים :

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

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

טור פורייה

עבור פונקציה מחזורית $f(x) = f(x+L)$,

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

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

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

לפי שיוויון בסל, מתקיים :

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

אופרטורים הרמיטיים

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

אופרטורים אוניטריים

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

מטריצה מייצגת

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

כאשר i מייצג שורה ו- j עמודה.

פירוק ספקטרלי

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

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

טרנספורם פורייה

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

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

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

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

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

תכונות חשובות של הטרנספורם :

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

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

$$\mathbf{F}^2[f(x)](k) = f(-x),\qquad \mathbf{F}\left[e^{ik_0x}f(x)\right](k) = F(k-k_0)$$

ניתן גם להגדיר את פונקציית דלתא בעזרת הטרנספורם שלה :

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

צמוד הרמיטי

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

$$\left\langle\varphi_1\middle|T\varphi_2\right\rangle = \left\langle T^\dagger\varphi_1\middle|\varphi_2\right\rangle$$

תכונות :

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

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

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

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

הטלה אורתוגונלית

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

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

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

כתיב דיראק

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

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

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

משוואת שרדינגר

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

וכאשר הפוטנציאל V אינו תלוי בזמן :

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

זרם הסתברות

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

ומתקיימת משוואת הרציפות :

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

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

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

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

עבור פונקציית גל ממשית, לעולם $j\equiv 0$.

אופרטור המקום ואופרטור התנע

במרחב המקום :

$$\hat{x}=x$$

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

במרחב התנע :

$$\hat{p}=p$$

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

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

הפונקציות העצמיות שלהם במרחב המקום הן :

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

וניתן להסתכל על תנע קווי כיוצר הזזות במרחב :

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

בעיות פיזור ומצבים קשורים

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ואולם, כאשר מדובר בפוטנציאל אינסופי, נדרוש קפיצה בנגזרת :

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

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

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

פונקציית הגל

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

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x,t)\right|^2dx<\infty$$

ובפרט, $\psi\to 0$ כאשר $x\to\pm\infty$.

משפט הפיתוח

עבור אופרטור A עם ערכים עצמיים בדידים, ניתן לרשום :

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

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

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

פיתוח לפי האנרגיה

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

משוואות ארנפסט

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

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

מערכת רב-מימדית

כאשר ההמילטוניאן פריק, כלומר ניתן לרשום :

$$H=H_x+H_y$$

אז המצבים העצמיים והאנרגיות של H נתונים על ידי :

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

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

מעבר בין מרחב המקום ומרחב התנע

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

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

סטטיסטיקה של משתנה בדיד

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

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

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

סטטיסטיקה של משתנה רציף

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

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

עקרון אי-הוודאות

לכל שני אופרטורים A,B מתקיים :

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

אופרטורי סולם

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

קירוב ***WKB***

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

על קומוטטורים

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

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

האקסיומות של פיסיקה קוונטית

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

התפתחות מצב בזמן

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

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

עבור אופרטור A שאינו תלוי בזמן, מתקיים:

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

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

מערכת שלמה של אופרטורים חילופיים
(Complete Set of Commuting Operators)

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

אוסילטור הרמוני – גישה אופרטורית

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

נגדיר גדלים חסרי מימד:

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

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

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

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

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

$$X^2=\frac{1}{2}\left(a^{\dagger 2}+a^2+2a^\dagger a+1\right),\quad a^\dagger a|E_n\rangle=n|E_n\rangle$$

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

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

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

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

אוסילטור הרמוני – פיתרון ישיר של משוואת שרדינגר

לאחר הוצאת מימדים, המשוואה הבלתי תלויה בזמן נראית כך:

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

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

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

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

פולינומי הרמיט

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

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

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

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

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

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

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

לפולינומי הרמיט אותה זוגיות כמו ל- n.

סוגי אופרטורים

בעזרת התנע הזוויתי ניתן לסווג אופרטורים לשתי קטגוריות:

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

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

בעיות שני גופים

מגדירים קואורדינטות חדשות:

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

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

שמקיימות ביניהן את יחסי החילוף:

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

ולאחר שמציבים זאת לתוך ההמילטוניאן מקבלים:

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

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

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

משפט פיינמן-הלמן

עבור המילטוניאן שתלוי בפרמטר a ומצב עצמי שלו φ_a מתקיים:

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

בור אינסופי חד מימדי

בור בקטע $[0,L]$: $n=1,2,\ldots$

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

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

תנע זוויתי

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

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

כעת, כאשר הפוטנציאל הוא פונקציה של המרחק בלבד $V(r)$, ההמילטוניאן אינווריאנטי לסיבובים, כלומר חילופי עם $R_{d\vec{\theta}}$, ומכאן גם שהוא חילופי עם $\vec{L}$.

רכיבי התנע הזוויתי אינם חילופיים עם עצמם, שכן $\left[L_i,L_j\right]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$, ולכן לא נוכל להשתמש בהם לצורך מערכת שלמה. אבל, אם נגדיר $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ נקבל ש- $\left[L^2,L_i\right]=0$. לכן נבחר בתור מערכת שלמה את H,L^2,L_z למשל.

הגדרת המספרים הקוונטים של התנע הזוויתי הקוונטי

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

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

אופרטורי סולם של התנע הזוויתי

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

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

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

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

הפונקציות העצמיות של התנע הזוויתי

ייצוג דיפרנציאלי של אופרטורים בקואורדינטות כדוריות:

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

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

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

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

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

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

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

לאחר נירמול של החלק התלוי ב- φ. מתוך דרישת החד-ערכיות, נקבל ש- m צריך להיות שלם ומכאן גם ℓ חייב להיות מספר שלם. את $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ ניתן למצוא מתוך המד"ר שמתקבלת לאחר הצבת L_+ למשוואה $L_+Y_{\ell,\ell}(\theta,\varphi)=0$.

הפונקציה $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ היא מעין "פולינום" בפונקציות $\sin\theta,\cos\theta$, ודרגת הפולינום קובעת את המספר הקוונטי ℓ, בעוד ש- m נקבע מתוך האקספוננט ($e^{im\varphi}$). למשל:

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

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

תנאי הנירמול הוא:

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

זוויות אוילר

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

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

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

אופרטור השיקוף

בקואורדינטות כדוריות:

$$P(r)\to r$$

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

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

מערכת מצבים ממימד סופי

למשל, אלקטרון שיכול לעבור בין שני אתרים:

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

כאשר הייצוג המטריציוני הוא בבסיס $\left|\varphi_1\right\rangle,\left|\varphi_2\right\rangle$.

הערכים והמצבים העצמיים של ההמילטוניאן החדש הם:

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

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

הסיכוי שהמערכת תעבור ממצב אחד לשני:

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

כאשר ההפרעה חלשה $w\ll\left|E_1-E_2\right|$, $E_+\cong E_1,\ E_-\cong E_2$ ולכן כמעט אין סיכוי שהמערכת תעבור למצב $\left|\varphi_2\right\rangle$.

כאשר במערכת המקורית יש ניוון $E_1=E_2$, נקבל $\theta=\pi/4$:

$$\left|\varphi_\pm\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\pm\left|\varphi_1\right\rangle+\left|\varphi_2\right\rangle\right),\quad E_\pm=E\pm|w|$$

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

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

חלקיק בפוטנציאל מרכזי

משוואת שרדינגר התלויה בזמן נראית כך:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

עבור פוטנציאליים שהם "פחות סינגולריים" מ- $1/r^2$, כמו למשל $1/r^{1.9}$, הפונקציה u מתנהגת בערך כמו $r^{\ell+1}$ כאשר $r\to0$.

מכאן, שככל שיש לחלקיק יותר תנע זוויתי כך ההסתברות למצוא אותו בקרבת הראשית פוחתת (משום שהפוטנציאל הצנטרפוגלי "זורק" את החלקיק החוצה).

כמו כן, אם נאמר לנו שלמצב עצמי מסויים יש סימטריה כדורית, נובע מכך ש- $\ell=0$, גם עבור "מצב היסוד" מתקיים $\ell=0$.

ולבקשת הצופים, הלפלסיאן בקואורדינטות גליליות הוא:

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

אטום המימן

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

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

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

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

כאשר את $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ כבר מצאנו בפרקים הקודמים.
נמשיך בפיתוח עבור $Z=1$, ונוציא המימדים:

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

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

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

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

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

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

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

$$E_n=-\frac{\mu e^4Z^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{E_0Z^2}{n^2}$$

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

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

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

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

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

ערכי תצפית עבור מצבים עצמיים של אטומים דמויי-מימן:

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

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

משפט הויריאלי

עבור תנועה בתוך פוטנציאל מרכזי מתקיים תמיד:

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

מטריצת הסיבוב סביב Y עבור $\ell=1$

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

תנע רדיאלי

משיקולי סימטריה הוא מוגדר באופן הבא:

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

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

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

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

פונקציות לדוגמה

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

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

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

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

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

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

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

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

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

הצגת וקטור המקום בעזרת הפונקציות הרדיאליות

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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