פיסיקה קוונטית 1

מרצה: אסא אוירבך

23 בפברואר 2009

מחברת זו נכתבה משמיעה בהרצאות של פרופ' אסא אוריבך, ומפורסמת ברשותו. המחברת עלולה להכיל חוסרים וטעויות. אין הטכניון או מי מטעמו ־ ובפרט, הפקולטה לפיזיקה, על מרציה ומתרגליה, אחראים לתוכנו של מסמך זה. רשימות אלו נבדקו ותוקנו על ידי אסא

הערות והארות, אתם מוזמנים לשלוח ל־ronen@tx.technion.ac.il

הערה: וקטורים מסומנים באותיות מודגשות (**r**) ולא בחץ ($\vec{r}$). החץ עושה בלאגן טיפוגרפי...

תוכן עניינים

חלק I
היסטוריה

1 פיסיקה קלאסית

1.1 חלקיקים

מכניקה קלאסית

$$\mathbf{r} = (x, y, z), \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \tag{1.1}$$

הוקטור $\mathbf{r}$ הוא בלתי תלוי בהצגה, אך הייצוג שלו ((x,y,z)) הוא תלוי הצגה.
התיאור השלם של **ההסטוריה** של חלקיק נתון על ידי $\mathbf{r}(t),\mathbf{p}(t)$ כאשר $\mathbf{p}=m\cdot\mathbf{r}$ לזוג $(\mathbf{r}(t),\mathbf{p}(t))$ קוראים מצב החלקיק.
דטרמניזם קלאסי- אם ידועים $(\mathbf{r}_i,\mathbf{p}_i)$, בזמן $t=0$, עבור כל החלקיקים, ואת כוחות הגומלים בינהם, ניתן לחשב את $(r_i(t),p_i(t))$לכל t.

- מצב של חלקיק $\mathbf{r},\mathbf{p}$
  - ללא כוחות על החלקיק, הוא נע בקו **ישר**. התנע שלו נשמר -

$$\mathbf{p}(t)=\mathbf{p}(0) \tag{1.2}$$

$$\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}_0+\frac{\mathbf{p}}{m}t \tag{1.3}$$

  - חלקיק בתוך פוטנציאל $V(\mathbf{r})$ מתואר על ידי האנרגיה שלו - $E=V(\mathbf{r})+\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$
  - הפוטנציאל והאנרגיה מחלקים את המרחב לשני תחומים "אזור קלאסי מותר" ו"אזור קלאסי אסור" - אסור - כאשר האנרגיה הקנטית "שלילית" - החלקיק לא יכול להיות מצוי בהם.
  - בפוטנציאל מרכזי, $V(\mathbf{r})=V(|\mathbf{r}|)$, התנע הזוויתי $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ נשמר.

- **דינמיקה** - שינוי ב<u>זמן</u> של המצב

$$m\ddot{\mathbf{r}}=-\vec{\boldsymbol{\nabla}}V(\mathbf{r}) \tag{1.4}$$

ול-N חלקיקים:

$$m_i\ddot{\mathbf{r}}_i=-\vec{\boldsymbol{\nabla}}V\left(\mathbf{r_1},..\mathbf{r_n}\right)=\mathbf{F}_i \tag{1.5}$$

1.2 גלים

גל סקאלרי לינארי פשוט:

$$\varphi(x,t)=\partial_x^2\varphi-\frac{1}{c^2}\partial_t^2\varphi=0 \tag{1.6}$$

הגודל c, מהירות הגל, נקבע לל ידי התווך של הגל.

- **פתרונות**: תלויים בתנאי התחלה $\varphi(x,0)=\varphi_0(x)$ ותנאי שפה - $\varphi\left(x,t\right)|_{x\pm L/2}=0$, או $\lim_{|x|\to\infty}\varphi\left(x,t\right)=0$
  - פתרונות נוסעים - $\varphi(x,t)=\begin{cases}f(x-ct)\\f(x+ct)\end{cases}$

1.2.1 תכונות גלים

- **סופרפוזיציה** - אם $\varphi_1(\mathbf{r},t)$ ו־$\varphi_2(\mathbf{r},t)$ אזי

$$\varphi_3 = a\varphi_1 + b\varphi_2 \tag{1.7}$$

  – התאבכות: ביטול או חיבור של גלים שחיים באותו זמן/מקום.

- **גלים עומדים** - לדוגמא, במיתר, כאשר 2 הקצוות אינם נעים. $\varphi(0) = 0, \varphi(L) = 0$. הפתרונות של גלים עומדים:

$$\varphi(x,t) = f(t) \cdot g(x) \tag{1.8}$$

לדוגמא, $\varphi(x,t) = \sin(\omega t)\sin(k,x)$. הנקודות שבהן הגל מתאפס בכל זמן נקראות צמתים (Nodes) והנקודות עם המשרעת המקסימלית נקראות Antinodes.

  – הרשימה של הפתרונות הנותרים היא רשימה דיסקרטית של תדירויות ואורכי גל של גלים עומדים. עבור גל באורך L:

$$\omega = ck_n \quad n = 1,2,3.. \tag{1.9}$$
$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} \tag{1.10}$$
$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \tag{1.11}$$

1.3 רצף ובדידות

1.3.1 ההשערה האטומית:

חומר מורכב מיחידות בדידות, בלתי ניתנות לחלוקה

1.3.2 מטען:

מופיע בחומר ביחידות בדידות של e.

יחידת מטען הנמוכה ביותר היא $e = 1.6 \cdot 10^{-14}C$.

תומסון מדד את היחס $\frac{e}{m}$ של אלקטרון, על ידי האצת אלקטורנים בשדה חשמלי, והעברתם בקבל, שם האלקטרונים מוסטים כפונקציה של $\frac{e}{m}$.

1.4 אפקט פוטואלקטרי

נמצא על ידי ניסוי של הרץ, בקליטה ושידור של גלי רדיו. הרץ גילה שאור שפוגע בשפופרת בקטודה שישמשה לישור הזרם, גורם להופעת זרם חשמלי.

לנרד גילה שמתח העצירה אינו תלוי בעוצמת האור, וכן תלוי בתדירות האור.

הסבר האפקט ניתן על ידי אינשטיין ב־ 1905: מתח העצירה

$$eV_0 = h \cdot f - \phi \tag{1.12}$$

- פונקצית העבודה ϕ
- מהקרינה ־ יש מנת אנרגיה $h \cdot f$, כאשר f התדירות, בהרץ ו־h הינו קבוע פלאנק

$$h = 6.6 \cdot 10^{-3} J \cdot \sec \tag{1.13}$$

  – הקבוע הוצג כמה שנים קודם על ידי פלאנק, כדי להסביר קרינת גוף שחור.

1.5 ניסוי ראטרפורד

1.5.1 מודל האטום של תומפסון

־ מטען החיובי בחומר ־ מרוח ־ רציף.

זווית הסטייה של חלקיקי אלפא (גרעין הליום) שעוברים דרך חומר לפי המודל של תומפסון סקאלת האורך היא המרחק בין אטומים ־ בסביבות $R = 1$.

תקיפה ניצבת:

$$\Delta \mathbf{p} = \mathbf{F} \cdot \Delta t \tag{1.14}$$

$$\mathbf{F} = \frac{Q_{1q}}{R^2} \hat{\mathbf{r}} \tag{1.15}$$

והזמן הוא מסדר גודל של $\Delta t = \frac{2R}{\theta}$. החלקיק יקבל מקסימום תנע ניצב בגודל

$$\Delta p_y = \frac{kqQ}{R^2} \cdot \frac{2R}{v} \tag{1.16}$$

$$p = m_\alpha v \tag{1.17}$$

$$\tan \theta = \frac{\Delta p_y}{p_x} = \frac{\left(\frac{KqQ}{R}\right)}{\left(\frac{1}{2} m_\alpha V^2\right)} = \frac{E_{\text{colomb}}}{E_{\text{kinetic}}} \tag{1.18}$$

$$\approx 4.5 \cdot 10^{-4} \tag{1.19}$$

$$\theta = 0.026^\circ \tag{1.20}$$

ניסוי רטרפורד ־ חלק מחלקיקי האלפא הוחזרו בזווית הרבה יותר גדולה. חלקם חזרו אחורה.

מה R של הגרעין לפי החישוב לעיל? $\tan\theta = 1$

$$1 = \frac{kq_{\alpha Q}}{\left(\frac{1}{2}mv^2\right)R} \tag{1.21}$$

$$R \leq 4.6 \cdot 10^{-4} \tag{1.22}$$

(באופן כללי, הנוסא הקלאסית, השטף בכיוון θ, $I(\theta) = \left(\frac{I_0kze^2}{mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$.)

מכאן הגיע ישירות המודל הפלאנטרי של האטום - אלקטורנים מקיפים גרעין קטן. אלקטרון מואץ בתנועה מעגלית אמור לפלוט קרינה ולדעוך. בעית יציבות החומר. (עד תורת הקוונטים)

1.5.2 רנטגן

קרני x נוצרו על ידי שפורפרת קרן קטודית.

שפורפרת ואקום עם 2 אלקטרודות בצדדים נקודתיים - קטודה ואנודה. מטרתה: ליצור אלומת אלקטורנים שמואצת מהקטודה לאנודה, על ידי חימום הקטודה.

כשאלקטרון שמואץ בלמעלה מ־1000 וולט, פוגע באנודה ממתכת כבדה - נפלטת קרינה אלטגומנטית מסוג קרינת רנטגן.

1.5.3 פיזור בראג

לקרינת x באורך גל בסדר גודל של . כאשר מפזרים קרינת X על גביש (מוצק מסודר) - רואים תמונות התאבכות הדומות לפיזור בשריג. לפי הפיזור - בראג שחזר את המבנה הגבישי של החומר.

1.5.4 דיסון ג'רמר

- פיזור אלקטרונים

1.6 ספקטרום של גזים.

לגזים יש קוים ספקטרלים- תדירויות מסויימות שבהן פליטת הקרינה היא רבה.

בור מצא בצורה מדויקת את הקו הספקטרלי f_n - בהסבר שגוי.

1.6.1 הפוסטולטים של בור

- אלקטרונים יכולים להמצא אך ורק במסלולים מסויימים. $\mathbf{r_i}(t)$ ($i = 1, 2, 3$) - סטציונרים.
- פליטת אור אפשרית רק במעבר בין המסלולים הללו, ומאזן האנרגיה בין מסלול i ל־j - נתון על ידי $hf_{ij} = E_i - E_j$
  - E_i - רשימת אנרגיות קבועה תלויה במספר האטומי Z.
- <u>עקרון ההתאמה</u>- באנרגיה גבוה, המסלולים יתאימו לציפיות של מכניקה קלאסית

מסלול מעגלי של אלקטרון סביב z פרוטונים ־ לשניהם מטען $\pm e$. רדיוס המסלול r.

$$\frac{mv^2}{r} = k\frac{ze^2}{r^2} \tag{1.23}$$

$$R = \frac{kze^2}{kv^2} \tag{1.24}$$

$$E(r) = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{kze^2}{r} \tag{1.25}$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{kze^2}{R} \tag{1.26}$$

- המסלול המותר מקיים: התנע הזוויתי הוא כפולה שלמה של $\hbar$.

$$L_n = mvR_n = n \cdot \hbar \qquad n = 1, 2, 3 \tag{1.27}$$

$$R_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2}{mkze^2}\right) = \frac{na_B}{z} \tag{1.28}$$

כאשר $a_B = 0.529$ ־ רדיוס בור.

$$E_n = -\frac{kze^2}{2R_n} = \frac{-z^2mke^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) \tag{1.29}$$

סדרת ליימן ־ סדרת מעברים ל־$n = 1$
סדרת בלמר ־ סדרת מעברים ל־$n = 2$

$$hf_{nm} = E_1\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \tag{1.30}$$

2 דואליות גל/חלקיק

2.1 קו זמן בהתפתחות הקונספט

- 1895 ־ רנטגן גילה את קרני ה־X ־ לאור יש ספקטרום באורכי גל קצרים משנצפו עד אז
  - השימוש בקרני X אישר את המבנה האטומי

- 1898 - מארי קירי גילתה את הקרינה הרדיואקטיבית
- 1901 - מקס פלאנק (בהתבסס על בולצמן), הניח קווינטות של האור (hf - מנות אנרגיה של אור) - הסביר קרינת גוף שחור
- 1905 - אינשטין מסביר את האפקט הפוטואלקטרי ($\Delta E = hf$). האור מורכב ממנות
- 1911 - ניסוי ראטרפורד - גרעין האטום מאוד קטן במוצק.
- 1913 - נילס בוהר - הסבר לספקטרום הפליטה (והבליעה) של המימן. (מדויק מספרית לגבי מימן, מקורב ליסודות אחרים בטווחי קרינת X)
- 1915 - פרנק הרץ - האצת אלקטרון בתוך שפופרת - מינימום אנרגית יינון.
- 1922 - ניסוי קומפטון - פיזור של אור על אלקטרון. חיזוק "לחלקיקיות" של האור.
- 1924 - דה ברולי - "אורך גל" של אלקטרון - $\lambda = \frac{h}{p}$.
- 1928 - דויסון ג'רמר - אישור כי אלקטרונים מבצעים התאבכות, על ידי פיזור בראג מסריג.

2.2 פיזור קומפטון

נניח יחידת אנרגיה "פוטון" מתנגש אם אלקטרון. האנרגיה היא $E = hf$, מתנגש באלקטרון עם מסה m_e.
האלקטרון רותע בזווית θ_e עם תנע p_e והפוטון רותע לתדירות f' ובזווית θ_γ
משימור אנרגיה:

$$hf + m_e c^2 = hf' + \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2} \tag{2.1}$$

שימור תנע בציר x -

$$\underbrace{\frac{hf}{c}}_{\text{Momentum of photon}} = \frac{hf'}{c} \cos\theta_\gamma + p_e \cos\theta_e \tag{2.2}$$

ובציר y

$$0 = -\frac{hf'}{c} \sin\theta_\gamma + p_e \sin\theta_e \tag{2.3}$$

והנעלמים שלנו - $p_e, \gamma', \theta_\gamma, \theta_e$.
הפתרון:

$$\lambda' - \lambda = \frac{c}{f'} - \frac{c}{f} = \frac{h}{m_e c} \left(1 - \cos\theta_\gamma\right) \tag{2.4}$$

היא נוסחאת קומפטון. $\left(\frac{h}{m_e c}\right)$ הוא "אורך גל קומפטון" והוא תכונה של האלקטרון.

2.3 מודל האטום של בוהר

התנה הזוויתי של האלקטרון יכול לקבל מסלולים ספציפיים

$$L = P \cdot R = n\hbar \tag{2.5}$$

$$R_n = \frac{n^2 a_B}{z} \tag{2.6}$$

$$E_n = \frac{z^2}{n^2} E_1 \tag{2.7}$$

ספקטרום הבליעה/פליטה - קווים דיסקרטיים - $f_{nm} = z^2 E_1 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$

ניסוי מוזלי - מדידת ספקטרום הפליטה של קרני x במגוון חומרים,ורישום של הגרף $\left(\sqrt{f_n}\right)$ z (המספר האטומי לפי תדירויות הפליטה) הנתונים שאסף התאימו לנוסחאת בור.

- קווי ה־L, $f^L = (z-c)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ (c, קבוע כלשהו)
- קווי ה־K - $f^K = (z-1)^2 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$

2.4 דה־ברולי

ההנחה של בוהר - $L = p_n \cdot R_n = n \cdot \hbar$.

דה ברולי יצא מההנחה שמקרה כזה של קוונטות נראה כמו תכונה גלית - של גלים עומדים - במסלול סגור על מרחב קומפקטי.

גלים עומדים על מעגל ברדיוס R_n מקיימים - $2\pi R_n = n\lambda$ - "אורך הגל של החלקיק".

$$p_n R_n = n\hbar \tag{2.8}$$

$$2\pi R_n = n\lambda \tag{2.9}$$

$$p_n \frac{n\lambda}{2\pi} = n\hbar = \frac{nh}{2\pi} \tag{2.10}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{2.11}$$

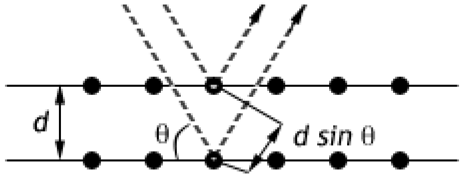
2.5 ניסוי דיויסון ג'רמר

פיזור בראג - שימוש בגביש כשריג־עקיפה אל מול קרן של אלקטרונים.

(ציור ושרטוטים)

מסקנה: גל חוזר קוהרנטי בזווית θ המקיימת את התנאי $2b\cos\theta = m\lambda$.

בזוויות הללו תבצר חזית גל אחידה.



איור 1: פיזור בראג, מתוך ויקיפדיה (רשיון - $GFDL$)

בניסון של דיויסון־ג'רמן הם ביצעו פיזור־בראג של אלקטרונים מגביש - מה שהוכיח תכונות גליות של אלקטרונים.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \tag{2.12}$$

$$\Delta\theta = \frac{\lambda}{d} \tag{2.13}$$

2.6 פיזור של גל מישורי

גל מישורי -$e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}$ נד עם $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$, בכיוון $\hat{\mathbf{k}}$.

הגל פוגע בשריג עם נקודות $\mathbf{R}_i = n_x \cdot a\hat{\mathbf{x}} + n_y a\hat{\mathbf{y}} + n_z a\hat{\mathbf{z}}$ עבור שריג קובי עם קבוע שריג a. ($i = n_x, n_y, n_z$)

הגל מגיע עם כיוון $\mathbf{k}$ ומוחזר בכיוון $\mathbf{k}'$.

$$I(\mathbf{k}) = |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}')|^2 \tag{2.14}$$

בהנתן שהגל הנכנס בכיוון $\mathbf{k}$.

$$\psi(\mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{R}_i} e^{ik(\mathbf{R_i}-\mathbf{r_0})} \times e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)} \tag{2.15}$$

$$= e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r_0}+i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \underbrace{\sum_{\mathbf{R_i}} \underbrace{\left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R_i}}\right)}}_{S(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \tag{2.16}$$

כאשר S היא פונקצית "המבנה" של השריג ("Structure factor").

$$|\psi_k(\mathbf{k}')| = |S(\mathbf{k}-\mathbf{k}')|^2 \tag{2.17}$$

(2.18)

(2.19)

ו־

$$S\left(Q\right)=2\pi\sum_{\mathbf{G}}\delta\left(\mathbf{Q}-\mathbf{G}\right)\tag{2.20}$$

$\mathbf{Q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ וקטור גל יחסי. משמעות הפונקציה ־ הפונקציה מתאפסת עבור כל הכיוונים, פרט למספר סופי של כיוונים G, שבהם יש נקודות אור.

$\mathbf{G}$ ־ מקיים את התנאי $\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n=2\pi n$ כאשר $n\in\mathbb{Z}$. כך ש־

$$S\left(\mathbf{Q}\right)=\sum_{\mathbf{R_n}}e^{i\mathbf{QR_n}}=N\tag{2.21}$$

כאשר N הוא גודל השריג.

$$G=\frac{2\pi m_x\hat{\mathbf{x}}}{a}+\frac{2\pi m_y\hat{\mathbf{y}}}{a}+\frac{2\pi m_z\hat{\mathbf{z}}}{a}\tag{2.22}$$

$$\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}=2\pi\cdot\left(n\in\mathbb{Z}\right)\tag{2.23}$$

2.7 דואליות גל חלקיק

2.7.1 דוגמאות

אורך הגל של גרם מים שנע במהירות $1\frac{cm}{sec}$.

$$\lambda=\frac{h}{mv}=10^{-26}\mathrm{cm}\tag{2.24}$$

אורך גל מאוד קטן ־ לכן לא רואים התאבכויות עבור חומר מקרוסקופי.

בתרמודינמיקה ־

מה אורך הגל (הממוצא) של אטום מימן בטמפרטורת החדר, $T=300^\circ K$?

$$E=k_bT==0.025eV=4\cdot10^{-21}J\tag{2.25}$$

ואורך הגל יהיה

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2kE}}=2\cdot10^{-8}cm\approx2\text{Å}\tag{2.26}$$

המרחק בין האטומים בלחץ אטמוספירה ־

$$l=\left(\frac{22\cdot10^3}{6\cdot10^{23}}\right)^{\frac{1}{3}}=3\cdot10^{-5}\mathrm{cm}\tag{2.27}$$

כלומר, פי 1000 יותר מאורך הגל ־ גם כאן אין לנו השפעות של האפקטים הקוונטים.

אפשר לקרר גז ולהגיע למצבים תרמודיניים מעניינים $\smile$.

2.8 חבילת גלים

גל מישורי אינסופי, במימד אחד:

$$u(x) = e^{ikx} \tag{2.28}$$

עם $\lambda = \frac{2\pi}{k}$.

אם אנחנו רוצים מיקום של הגל, אנחנו צריכים "חבורת גלים". ניתן לתאר מקום של הגל על ידי "מרכז הכובד" של הפונקציה.

אזי, נגדיר חבילת גלים -

$$u(x) = \int dk\, u(k) e^{ikx} \tag{2.29}$$

2.8.1 דוגמא - חבילת גלים גאוסינית

$$u(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta_k} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta_k^2}} \tag{2.30}$$

המקסימום ב־k_0, הרוחב הוא Δ_k (במקום שבו הפונקציה דועכת ל־$e^{-\frac{1}{2}}$) והפונקציה מגדירה חבורת גלים

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta_k} e^{\left[-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta_k^2} + ikx\right]} \tag{2.31}$$

אינטגרל של גאוסיאן - $\sqrt{\frac{\pi}{a}} = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik^2}$. הטריק - החלפת משתנים! השלמה לריבוע והזזה: $y = k - k_0$ ואז $dk = dy$ ו־

$$u(x) = \int dy\, e^{-\frac{y^2}{2\Delta_k^2} + i(y-k_0)x} = \tag{2.32}$$

$$= e^{ik_0x - \frac{1}{2}\Delta_k^2 x^2} \int dy\, e^{-\frac{1}{2\Delta_k^2}\left[y - i\Delta_k^2 x\right]^2} \tag{2.33}$$

נקבע $y' = y - i\Delta_k^2 x$ ו־$dy' = dy$ ונקבל

$$u(x) = e^{ik_0x - \frac{1}{2}\Delta_k^2 x^2} \cdot 1 \tag{2.34}$$

חבילת גלים - אם החבילה מרוכזת סביב וקטור־גל k_0 ברוחב פס Δ_k, במרחב המקום - נקבל פונקציה ממוקמת עם רוחב $\frac{1}{\Delta k}$.

זהו: **עקרון אי הודאות**

לא ניתן להגדיר בו זמנית גם מקום וגם אורך גל בדיוק גבוהה כרצוננו.

$\underline{u(x-x_0)}$ תהיה חבורת גלים המרוכזת ב־x_0 עם רוחב $\frac{1}{\Delta_k}$ -

$$u(x - x_0) = e^{ik(x-x_0) - \frac{(x-x_0)^2}{2}\Delta_k^2} \tag{2.35}$$

ההשתנות של גלים בזמן - תלויה במשוואת הגלים של הטווח.

2.9 משוואת התנועה לגל

$$\partial_x^2\phi - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\phi = 0 \tag{2.36}$$

אז

$$\phi_k = e^{ikx-i\omega t} \tag{2.37}$$

כלומר -

$$\frac{\omega_k^2}{c^2} - k^2 = 0 \Rightarrow \omega_k = ck \tag{2.38}$$

ואז

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx-i\omega_k t}\bar{u}(k) \tag{2.39}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-ct)}\bar{u}(k) \tag{2.40}$$

$$= u(x-ct) \tag{2.41}$$

כלומר, כל החבילה נעה ימינה במהירות c.

2.9.1 תווך דיספרסיבי

עבור גל בריק - $\omega(k) = c\cdot k$. עבור גל קול בתווך, $\omega(k) \neq ck$.
$\omega\left(k\right) = ck + c'k^2 + \ldots$ - $e^{ikx-i\omega(k)t}$.
כיצד חבילת גלים משתנה בזמן כאשר מתקבל $\omega(k)$ כללי?

2.10 מהירות חבורה ופאזה

נגדיר: מהירות חבורה $v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}|_{k_0}$.
מהירות פאזה - $v_{ph} = \frac{\omega(k_0)}{k_0}$.
נקח חבילת גלים, מרוכזת ב־k_0.
צריך למצוא:

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} du\, \bar{u}\left(k-k_0\right) e^{i(kx-\omega_k t)} \tag{2.42}$$

נפתח

$$\omega\left(k\right) = \omega_{k_0} + \frac{\partial\omega}{\partial k}|_{k_0}\left(k-k_0\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\left(k-k_0\right)^2 + \ldots \tag{2.43}$$

.

התנאי להזנחת האיבר הריבועי הוא ש־$\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\left(\Delta k\right)^2 \ll \frac{\partial\omega}{\partial k}\Delta k$, כלומר $\frac{1}{\Delta k} \ll \frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}/\frac{\partial\omega}{\partial k}$.

נציב את הפיתוח של $\omega\left(k\right)$ ונקבל

$$u\left(x,t\right)\approx e^{i\left(k_0x-i\omega_0t\right)}\int dk\,\underbrace{\bar{u}\left(k-k_0\right)e^{i\left(k-k_0x\right)-i\frac{\partial\omega}{\partial k}|_{k_0}\left(k-k_0\right)t}}_{u_0\left(x-\frac{\partial\omega}{\partial k}|_{k_0}\cdot t\right)=u_0\left(x-v_gt\right)} \tag{2.44}$$

$$=e^{-i\left(k_0x-\omega_0t\right)}u_0\left(x-v_gt\right) \tag{2.45}$$

והפאזה, $\phi(t)=k_0\left(x-\frac{\omega_{k_0}}{k_0}t\right)$.
חבורה ופאזה שווים זה לזה רק כשהשיפוע המקומי והשיפוע הגלובאלי של $\omega(k)$ הם שווים.
אם $\bar{u}$ הוא גאוסיאן - $\bar{u}\sim e^{\frac{-\left(k-k_0\right)}{2\Delta k}}$, אזי u ילך כמו $u_0\propto e^{-\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2}\Delta k^2}$

3 טרנספורם פוריה

הגדרה 3.1 טרנספורם פורייה: $G(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f\left(x\right)e^{-ikx}$.
נניח שהאינטגרל קיים לכל k.
נניח $\int_{-\infty}^{\infty}\left|f(x)\right|^2<\infty$ (ל־f יש נורמה סופית)
נרשום: $\mathcal{F}(f)=g$.

משפט 3.2 (פוריה)
אם $g(k)$ קיים (מעל המרוכבים), אזי, נגדיר טרנספורם הופכי $\tilde{f}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,g\left(k\right)e^{+ikx}$
כך ש־$\tilde{f}\approx f$ כך שמתקיים: $\int_{-\infty}^{\infty}dx\left|\tilde{f(x)}-f(x)\right|^2=0$. f ו־f שקולות (לכל מטרה פיסיקלית, הפונקציות שוות, ולכן נכתוב $f=\tilde{f}$)

משפט 3.3 (אויילר)

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-ik\left(x-x_0\right)}=2\pi\delta\left(x-x_0\right) \tag{3.1}$$

לא ניתן כאן את ההוכחה למשפט זה.

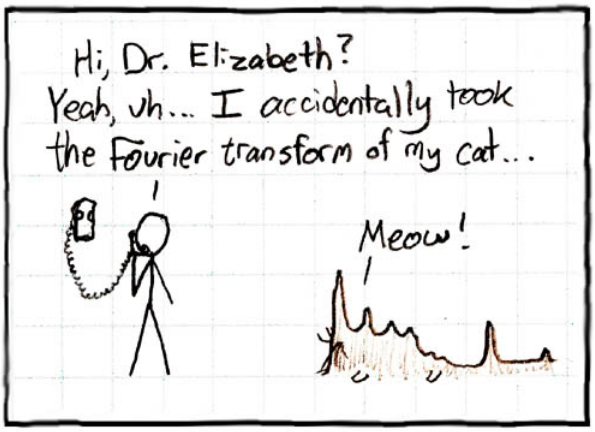
הוכחה: (למשפט פורייה)
נחשב את

$$\int_{-\infty}^{\infty}dk\,e^{-ixk}g(k)=\int_{-\infty}^{\infty}dk\,e^{ixk}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,e^{-ikx'}f(x) \tag{3.2}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,f(x')\int_{-\infty}^{\infty}dk\,e^{ik\left(x-x'\right)} \tag{3.3}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx'\,f(x')\delta\left(x-x'\right)=f(x) \tag{3.4}$$

הדברים הלא חוקיים שעשינו שם: החלפת סדר אינטגרציה, ולדבר על "פונקצית דלתא" של דיראק כפונקציה מוגדרת היטב. ■



איור 2: “Fourier”, from Xkcd.com

3.1 תכונות טרנספורם פוריה

נתונות 2 פונקציות $f_1(x)$, $f_2(x)$

$$g_1(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} f_1(x) \tag{3.5}$$

$$g_2(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\, e^{-ikx} f_2(x) \tag{3.6}$$

נגדיר אינטגרל חפיפה (Overlap)

$$(f_1, f_2) = I = \int_{-\infty}^{\infty} f_1^\star(x) f_2(x) \tag{3.7}$$

נראה ש־

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f_1^*(x) f_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, g_1^*(x) g_2(k) \tag{3.8}$$

הוכחה:

$$\int dk \int dx' e^{ikx'} f_1^*(x') \int dx'' e^{-ixk''} f_2(x) = \tag{3.9}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dx'' \int dx f_1^*(x') f_2(x') \underbrace{\int du\, e^{ik(x-x')}}_{2\pi\delta(x'-x'')} \tag{3.10}$$

$$= \int dx' f_1^*(x') f_2(x') \tag{3.11}$$

(כאשר f^* הוא הצמוד הקומפלקסי של f) ∎

- טרנספורם פוריה הוא אופרטור לינארי: $\mathcal{F}\left(af_1+bf_2\right)=a\mathcal{F}\left(f_1\right)+b\mathcal{F}\left(f_2\right)=ag_1+bg_2$
- אם $\mathcal{F}(f')$ קיים, אזי

$$\mathcal{F}(f')=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{-ikx}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \tag{3.12}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\, e^{ikx'}gx)\right) \tag{3.13}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{-ikx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk'\ (ik')\, g(u)e^{ik'x} \tag{3.14}$$
$$=\frac{1}{2\pi}\int dk'\ (ik')\, g\left(k'\right)\underbrace{\int dx\, e^{i(k'-k)x}}_{2\pi\delta(k'-k)} \tag{3.15}$$
$$=ikg\left(k\right) \tag{3.16}$$

כלומר,

$$\mathcal{F}(f')=ik\mathcal{F}(f) \tag{3.17}$$

– באופן כללי,

$$\mathcal{F}(f^{(n)})=(ik)^n\, g(k) \tag{3.18}$$

וכל זה בתנאי שהטרנספורם קיים.

3.2 דוגמאות

- גאוסיאן: $f(x)=e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$ אז $g(k)=e^{-\frac{k^2}{2}a^2}$.
- $f(x)=\delta x$, $g(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{ikx}\delta x=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

3.3 עוד תכונות - Scaling

$$\mathcal{F}(f(a\cdot x))=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{-ikx}f(a\cdot x) \tag{3.19}$$
$$=\frac{1}{a}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx'\, e^{-i\frac{k}{a}x'}f(x') \tag{3.20}$$
$$=\frac{1}{a}g\left(\frac{k}{a}\right) \tag{3.21}$$

כאשר $a\neq 0$,

- פונקציה מאופננת: $f' = f(x)\cos(k_0x)$.

$$\mathcal{F}\left(f(x)\cdot\cos(k_0x)\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, e^{-ikx}\frac{e^{ik_0x}+e^{-ik_0x}}{2}f(x) \tag{3.22}$$

$$= \frac{1}{2}\left[g(k+k_0)+g(k-k_0)\right] \tag{3.23}$$

- פולס: $f(x) = \begin{cases}1 & x\in[-a,a]\\ 0 & x\notin[-a,a]\end{cases}$

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-a}^{a} dx\, e^{-ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{-ika}-e^{ika}}{ik} = \frac{-2\sin(ka)}{k\sqrt{2\pi}} \tag{3.24}$$

  – העובדה שפונקציה דועכת לאט במרחב וקטור של k, אומרת שיש הרבה משקל לאוכי גל קצרים.
  – בפונקציה כללית - אם יש אי רציפות במרחב x, לטרנספורם-פוריה שלה כנראה יהיו תדרים גבוהים שיסבירו את אי הרציפות
    * גם אי רציפות בנגזרות אומר את זה.

- פונקצית משור: $f(x) = \begin{cases}0 & x\notin[-a,a]\\ \frac{x+a}{a} & x\in[-a,0]\\ \frac{-x+a}{a} & x\in[a,0]\end{cases}$. הנגזרת שלה היא גל ריבועי: $f'(x) = \begin{cases}0 & x\notin[-a,a]\\ +\frac{1}{a} & x\in[-a,0]\\ -\frac{1}{a} & x\in[0,a]\end{cases}$.

  – הנגזרת של פונקצית המדרגה הוא פונקציה δ - $\int_{x_1}^{x_2} dx\,\delta(x-x_0) = \theta(x_2-x_0) - \theta(x_1-x_0)$. ולכן, לפי המשפט היסודי- $\frac{\partial\theta}{\partial x} = \delta(x)$
  –

$$f'' = \frac{1}{a}\delta(x+a) - \frac{2}{a}\delta(x) + \frac{1}{a}\delta(x-a) \tag{3.25}$$

$$\mathcal{F}(f'') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{e^{-ika}}{a} - \frac{2}{a} + \frac{1}{a}e^{-ika}\right] \tag{3.26}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\cos ka - 1}{a}\right) \tag{3.27}$$

$$\mathcal{F}(f) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{1}{k}\right)^2\left(\frac{\cos ka-1}{a}\right) \tag{3.28}$$

דועך כמו $\frac{1}{k^2}$ עבור k גדול.

חלק II
מבוא מתמטי

4 ערכי תצפית

4.1 פונקצית גל ־ צפיפות הסתברות

צפיפות הסתברות ־ למצוא את החלקיק $\rho(\mathbf{x})$ במקום$\mathbf{x}$נתונה על ידי $\rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$.
הסיכוי למצוא חלקיק בקטע $[x_1, x_2]$ נתון על ידי האינטגרל $P_{(x_1,x_2)} = \int_{x_1}^{x_2} dx\, \rho(x)$ ולכן, $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 1$, מנורמל.
בקטע קצר, $x_2 - x_1 = \Delta x$

$$P_{x,\Delta x} = \rho(x)\Delta x \tag{4.1}$$

ולצפיפות ההסתברות (במימד אחד) יש ממימדים של אחד חלקי אורך.

- במכניקה קלאסית, חלקיק קיים במצב $\psi(x)$ באנלוגיה למצב $(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^6$ המתאר מצב של חלקיק קלאסי.
  - קינמטיקה ־ תאור מצבי המערכת ($(\mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}(t_0))$)
  - דינמיקה ־ איך המצבים משתנים בזמן ($m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}$)

נתחיל מקנמטיקה קוונטית ־ להסביר את מצב המערכת בזמן מסויים.

דוגמא: חבילת גלים גאוסיאנית

$$\psi(x) = Ne^{\frac{-x^2}{4a^2}}e^{ikx} \tag{4.2}$$

נחשב את N כך שהפונקציה תהיה מנורמלת

$$N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = N^2\sqrt{2\pi}a = 1 \tag{4.3}$$

$$N = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}a}\right)^2 \tag{4.4}$$

מה הסיכוי למצוא את החלקיק בין x_1 ל־x_2? נעשה $\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|$.

4.2 הסתברות

4.2.1 סופרפוזיציה

$$\psi_3(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x) \tag{4.5}$$

כאשר ψ_3 מנורמלת.

$$\rho_3(x) = |\psi_3(x)|^2 \neq \rho_1(x) + \rho_2(x) \tag{4.6}$$

אין עקרון סופרפוזיציה לצפיפוץ הסתברות.

4.2.2 ערך תצפית

$$\langle x \rangle = \int dx\, x\rho(x) = \int dx\, x\, |\psi(x)|^2 \tag{4.7}$$

לדוגמא, $\psi = Ne^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}+ikx}$. ערך התצפית

$$\langle x \rangle = \int dx\, (x-x_0)\, |\psi|^2 + \int dx\, x_0\, |\psi|^2 = 0 + x_0 \tag{4.8}$$

החלק הראשון הוא 0 מטעמי סימטריה.
כלומר - עבור חבורת גלים מרוכזת ב־x_0, ערך התצפית הוא x_0.

4.2.3 שונות (בריבוע) $\left\langle (x-x_0)^2 \right\rangle$

$$\left\langle (x-x_0)^2 \right\rangle = N^2 \int dx\ (x-x_0)^2\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}} \tag{4.9}$$

$$1 = N^2 \cdot \int dx\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}} \tag{4.10}$$

נחלק את 2 המשוואות, כדי שיצטמצמו דברים. ידוע כי־$\sqrt{\frac{\pi}{c}} = \int dye^{-cy^2}$.

$$\frac{d}{dc}\left(\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-cy^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}\right) = \left(\int dy\, y^2 e^{-cy^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}c^{-\frac{3}{2}}\right) \tag{4.11}$$

נזהה - $c = \frac{1}{2a^2}$, נציב ונקבל:

$$\langle (x-x_0) \rangle = \frac{-\frac{1}{2}\sqrt{\pi}c^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}c^{-\frac{1}{2}}} = \frac{1}{2}c^{-1} = a^2 \tag{4.12}$$

השונות (mean square root deviation)

$$\left\langle (x-x_0)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle + \left\langle x_0^2 \right\rangle - 2\left\langle x_0 x \right\rangle = \tag{4.13}$$

$$= \left\langle x^2 \right\rangle - x_0^2 \tag{4.14}$$

ב־3 מימדים

$$\langle \mathbf{X} \rangle = \langle x \rangle \, \hat{\mathbf{x}} + \langle y \rangle \, \hat{\mathbf{y}} + \langle z \rangle \, \hat{\mathbf{z}} \tag{4.15}$$

$$\langle x \rangle = \int dx \int dy \int dz \left| \psi \left(x, y, z \right)^2 \right| \cdot x \tag{4.16}$$

$$\langle y \rangle = \iiint dv \left| \psi \right|^2 \cdot y \tag{4.17}$$

הגודל $\left\langle \left| \mathbf{x} - \mathbf{x_0} \right|^2 \right\rangle$ נקרא גם "אי הודאות" בריבוע

4.3 טרנספורם פוריה

$$g(k) = \frac{1}{2\pi} \int dx \, e^{-ikx} f(x) \tag{4.18}$$

הטרנספורם משמר את הנורמה. $\int dx \left| f(x) \right|^2 = \int dk \, \left| g(k) \right|^2$ כלומר, אם $f(x)$ צפיפות הסתברות, אז גם $g(k)$.

$f(x)$ הוא מרחב המקום ו־$g(x)$ הוא מרחב התנע.

$p = \hbar k$

$$f(x) \to \psi(x) \tag{4.19}$$

$$g(k) \to \bar{\psi}(k) \tag{4.20}$$

המצב של החלקיק $|\psi\rangle$, מקונה "קט" לפי סימון דיראק.

חפיה בין שני מצבים ־ $(g_1, g_2) = (f_1, f_2)$ ־ המכפלה הסקאלרית שלהם אינה תלויה בהצגה (ב־xאו ב־p)

האורטוגונליות היא תכונה שנשמרת בטרנספורם פוריה.

ערך תצפית של תנע, (במימד אחד)

$$\langle p \rangle = \int dk \; (\hbar k) \left| \psi \left(k \right) \right|^2 \tag{4.21}$$

4.3.1 חישוב $\langle p \rangle$ לפי $\psi(x)$

$$p = \int dk \; \int dx \; \int dx' \, \psi^\star(x) \psi(x') e^{ik(x-x')} \left(\hbar k \right) \tag{4.22}$$

אנחנו רוצים להפטר מה־k־ נרשום $e^{ik(k-x')} hk = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ik(x-x')}$ חוץ מזה, $\psi^\star(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \, e^{ikx'} \psi^\star(x')$

$$= \frac{1}{2\pi}\int dx \int dx' \psi^\star(x)\psi(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\underbrace{dk\, e^{ik(x-x')}}_{2\pi\delta(x-x')}\right] \tag{4.23}$$

$$= \int dx\, \psi^\star(x)\left[\psi(x')\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta\left(x-x'\right)\right] \tag{4.24}$$

$$= \tag{4.25}$$

נחשב את

$$\int dx' f(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta\left(x-x_0\right) = \underbrace{\delta\left(x-x_0\right)f\left(x'\right)}_{=0} - \int dx' \frac{\partial f}{\partial x'}\left(x'\right)\delta\left(x-x'\right) \tag{4.26}$$

וקיבלנו

$$\langle p\rangle = \int dx dx' \psi^\star(x)\left[-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x'}\psi\left(x'\right)\right)\right]\delta\left(x-x'\right) \tag{4.27}$$

$$= \int dx \psi^\star(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\psi\left(x'\right)\right)_{x=x'} = \left(\psi, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) \tag{4.28}$$

התנע הוא אופרטור דיפרנציאלי , $p=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ הפועל על פונקצית הגל. הוא אופרטור גזירה בעוד שהמקום הוא אופרטור הכפלה ב־x.

4.3.2 רשימת אופרטורים לינארים

- X ־ אופרטור הכפלה
- אופרטור גזירה ־ ־ תנע $p(\psi)=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$
- אינטגרציה ־ $I_{x_1,x_2}:\psi=\int_{x_1}^{x_2}dx'\psi\left(x'\right)$
- הכפלת אופרטורים: הרכבה.

$$O_3:\psi=\left(O_1\circ O_2\right)\psi=O_1\left(O_2\left(\psi\right)\right) \tag{4.29}$$

באופן כללי, לא ניתן לשנות את הסדר.

- סכום אופרטרים לינארים ־ גם לינארי ־

$$O_3=O_1+O_2$$

- ערך התצפית של x:

$$\langle x\rangle = \int dx\, x\, |\psi(x)|^2 \tag{4.30}$$

- ערך התצפית של p:

$$\langle p\rangle = \int dk\, \hbar k\, |\psi\left(k\right)|^2 \tag{4.31}$$

4.4 ערך התצפית של האנרגיה

עבור פונקצית צפיפות הסתברות $\psi(x)^2$, ערך התצפית של האנרגיה הפוטנציאלית

$$\langle v(x)\rangle = \int dx\, v(x)\, |\psi(x)|^2 \tag{4.32}$$

ושל האנרגיה הקינטית, $E_u = \frac{p^2}{2m}$

$$\langle E_u\rangle = \int dk\, \frac{\left(\hbar k\right)^2}{2m} \left|\psi\left(k\right)\right|^2 \tag{4.33}$$

$$= \frac{1}{2m}\int dx\, \psi^\star(x) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi(x) \tag{4.34}$$

4.4.1 דוגמא: חבילת גלים גאוסיאנית

$$\psi(x) = e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4a^2}} \tag{4.35}$$

מעטפת ברוחב a.

$$\hat{\mathbf{p}}\psi = -ih\frac{\partial}{\partial x}\psi = -i\hbar\left(-ik_0 - \frac{x}{2a^2}\right)\psi \tag{4.36}$$

$$= \left(\hbar k_0 + \frac{i\hbar x}{2a^2}\right)\psi(x) \tag{4.37}$$

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = \left(\left(\hbar k_0 + \frac{i\hbar x}{2a^2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}\right)\psi(x) \tag{4.38}$$

$$= \left(\hbar^2 k_0^2 + \frac{i\hbar^2 k_0\cdot x}{a^2} - \frac{\hbar^2 x^2}{4a^2} + \frac{\hbar^2}{2a^2}\right)\psi(x) \tag{4.39}$$

נחשב את

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m}\int dx \left(\hbar^2 k_0^2 + \underbrace{\frac{i\hbar^2 k_0 \cdot x}{a^2}}_{0} - \underbrace{\frac{\hbar^2 \overbrace{x^2}^{a^2}}{4a^2}}_{\frac{\hbar^2}{4a^2}} + \frac{\hbar^2}{2a^2} \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \tag{4.40}$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2} \right) = \langle E_u \rangle \tag{4.41}$$

כלומר, במכניקה קוונטית, תיאור של מצב מכיל גם מידע על מיקום וגם על תנע - ולכן גם מידע על אנרגיה קינטית וגם על פוטנציאלית.

חלק מהאנרגיה הקינטית - $\frac{\hbar}{4a^2}$ באה מתוך אי־ודאות לתנע, מתוך המיקום של החלקיק במרחב.

4.4.2 התנע בשלושה מימדים

$$\mathbf{p} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar\vec{\boldsymbol{\nabla}} \tag{4.42}$$

$$\mathbf{p}^2 = \mathbf{p}\cdot\mathbf{p} = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2\nabla^2 \tag{4.43}$$

$$\langle E_u \rangle = \int dx \int dy \int dz\, \psi^\star(\mathbf{x}) \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{x}) \tag{4.44}$$

כלומר, מה שקובע את האנרגיה הקינטית, היא ההשתנות של $\psi(x)$ (ולא $|\psi(x)|^2$!)

5 מרחבי הילברט

הגדרה 5.1 מרחב הילברט הוא מרחב לינארי עם מכפלה פנימית.
$\psi_3(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x)$. אם ψ_1, ψ_2 שיכים למרחב אז גם ψ_3 במרחב.

נקח את המרחב הפרמטר x: $-\infty < x < \infty$.
מכפלה פנימית (סקלית)

$$(\psi, \phi) = \int dx \psi^\star(x)\phi(x) :\rightarrow z \in \mathbb{C} \tag{5.1}$$

זו טרנסופרמציה ממרחב הפונקציות לקומפלקסים
תכונות:

1. לינאריות

$$(\psi, a\phi_1 + b\phi_2) = a(\psi, \phi_1) + b(\psi, \phi_2) \tag{5.2}$$

$$(a\psi_1 + b\psi_2, \phi) = a^\star(\psi_1, \phi) + b^\star(\psi_2, \phi) \tag{5.3}$$

2. $(\psi,\phi)=(\phi,\psi)^{\star}$

3. המכפלה הפנימית היא נורמה בריבוע:

$$(\psi,\psi)=\int dx\,|\psi|^2 \tag{5.4}$$

"וקטורי היחידה" של המרחב הם המצבים המנורמלים ל־1 של $\int dx\,|\psi|^2=1$.

5.1 אי שוויון קושי־שוורץ

משפט 5.2 לכל שני מצבים במרחב הילברט, ψ,ϕ,

$$|(\psi,\phi)|^2\le(\psi,\psi)\,(\phi,\phi) \tag{5.5}$$

הוכחה: נגדיר $w=\psi-\lambda\phi$ עבור λ מרוכב.

$$(w,w)=(\psi-\lambda\phi,\psi-\lambda\phi) \tag{5.6}$$
$$=(\psi,\psi)+|\lambda|^2(\phi,\phi)-\lambda^{\star}(\phi,\psi)-\lambda(\psi,\phi) \tag{5.7}$$

$(\psi,\phi)=|(\psi,\phi)|\,e^{i\alpha}$. **נגדיר** $\lambda=\underbrace{\bar{\lambda}}_{\text{real}}e^{-i\alpha}$

$$(w,w)=(\psi,\psi)+\bar{\lambda}^2(\phi,\phi)-2\bar{\lambda}\,|(\psi,\phi)| \tag{5.8}$$

אם נסתכל על הביטוי כפולינום ב־$\bar{\lambda}$, זהו פולינום מדרגה שניה. אבל $(w,w)\ge 0$, כי הוא נורמה, ולכן הדיסקרימיננטה של הפולינום שלילית (הפולינום לא חוצה את ה־אפס)$b^2-4ac\le 0$

$$4\,|(\psi,\phi)|^2-4\,(\psi,\psi)\,(\phi,\phi)\le 0 \tag{5.9}$$

מחלקים ב־4, מעבירים אגפים, ומקבלים את אי שוויון קושי־שוורץ
השוויון מתקבל כאשר 2 הפונקציות זהות או מקבילות. ■

הוכחה: הוכחה נוספת לאי שוויון.
אנחנו רוצים להוכיח ש־$\langle\alpha,\beta\rangle^2\le\langle\alpha,\alpha\rangle\langle\beta,\beta\rangle$. **נגדיר** - $\gamma=\beta-\frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}\alpha$ ($(\alpha,\alpha)=\|\alpha\|^2$)

$$\begin{aligned}0 &\leq \|\gamma\| = \left(\beta - \frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}\alpha, \beta - \frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}\alpha\right) \\ &= (\beta,\beta) - \left(\beta, \frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}\right) - \left(\frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}, \beta\right) + \left(\frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}, \frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}\right) \\ &= (\beta,\beta) - \frac{(\alpha|\beta)}{\|\alpha\|^2}(\beta,\alpha) - \frac{(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2}(\alpha,\beta) + \frac{(\alpha,\beta)(\beta,\alpha)}{\|\alpha\|^2\|\alpha\|^2}(\alpha,\alpha) \\ &= \|\beta\|^2 - 2\frac{|(\alpha,\beta)|^2}{\|\alpha\|^2} + \frac{|(\alpha,\beta)|^2}{\|\alpha\|^4} - \|\alpha\|^2 \\ &= \|\beta^2\| - \frac{|(\alpha,\beta)|^2}{\|\alpha\|^2}\end{aligned}$$

מעבירים אגב, מכפילים ב-$\|\alpha\|^2$ ומוציאים שורש - ונקבל

$$\|\alpha\|\,\|\beta\| \geq |(\alpha,\beta)|^2$$

■

5.2 הצגת דיראק - Bra-Ket

ניתן לפתח:

$$(\psi,\phi)_x = \int dx\psi^\star(x)\phi(x) = \int dk\psi^\star(k)\phi(k) \tag{5.10}$$
$$= (\psi,\phi)_k \tag{5.11}$$

ההצגה של דיראק - $(\phi,\psi) = \langle\phi|\psi\rangle$

- מגדירים, מצבי x- $|x\rangle$ (ברה) או $\langle x|$(קט), $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$
- נגדיר: חפיפה בין $|x\rangle$ ל-$\langle x'|$

$$\langle x'|x\rangle = \delta\left(x'-x\right) \tag{5.12}$$

-

$$\psi(x_0) = \int dx \underbrace{\langle x_0, x\rangle}_{\delta(x_0-x)}\psi(x) \tag{5.13}$$

- $\langle k|$, $|k\rangle$ דוגמים את $|\psi\rangle$ במרחב התנע:

$$\psi(k) = \langle k|\psi\rangle \tag{5.14}$$

אנלוג וקטורי - $\psi(x)$ מוגדרת על ידי טרנספורם פוריה של פרמטר רציף x. אם נהפוך את x לשריג דיסקרטי $\psi(x)$ תהיה פונקציה דיסקרטית על $\{x_1, x_2, x_3, \dots\}$, והפונקציה מקבלת ערכים רק על השריג.

$$\psi(x_i) = (\psi(x_1), \dots, \psi(x_n)) \tag{5.15}$$

זהו וקטור מרוכב במרחב $\mathbb{C}^n$.
המכפלה הפנימית, במרחב דיסקרטי,

$$(\psi, \phi) = \sum_{i=1}^{N} \psi^\star(x_i) \cdot \phi(x_i) a \tag{5.16}$$

$$= \boldsymbol{\psi}^\star \cdot \boldsymbol{\phi} \tag{5.17}$$

כלומר, $\langle x|$ הוא תיאור של הדלתא של קרוניקר: $\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij}$ בגבול הרצף, $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$.ולכן,

$$\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x) \tag{5.18}$$

נסתכל על $\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ ה"יחס" בין x ל-k הוא בעצם המקדמים של התמרת פוריה

$$\langle k|\psi\rangle = \int dx \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \psi(x) = \psi(k) \tag{5.19}$$

(נשים לב ש-$\psi(x) \neq \psi(k)$, הם הפוריה-טרנספורם אחת של השניה)
ערך תצפית של אופרטור O:

$$\langle O\rangle \equiv (\psi, O\psi) = \left\langle \psi | \underbrace{O|\psi}_{\psi'} \right\rangle = \langle \psi|\psi'\rangle \tag{5.20}$$

נכיל את התיאור לאלמנט מטריצה: $(\phi, O\psi) = \langle \phi|O|\psi\rangle$ שזהו מספר קומפלקסי שתלוי ב-2 מצבים.
אופרטור מוגדר על ידי אוסף כל אלמנטי המטריצה שלו.

$$O = \{\langle \psi|O|\phi\rangle : \psi, \phi \in H\} \tag{5.21}$$

אלמנט מטריצה $\langle \phi|x|\psi\rangle$:

$$= \int dx \phi^\star(x) \cdot x\psi(x) \tag{5.22}$$

5.3 הצמדה הרמיטית

הגדרה 5.3

$$(\phi, O\psi) = \langle\phi| O |\psi\rangle \tag{5.23}$$

נסתכל על $(\phi, O\psi) \neq (\psi, O\phi)$. ולכן

$$\langle\phi| O |\psi\rangle \neq \langle\psi| O |\phi\rangle \tag{5.24}$$

לשם כך, נגדיר את $O^\dagger$, הצמוד ההרמיטי של O - לכל ψ, ϕ -

$$\left(\psi, O^\dagger\phi\right) = (\phi, O\psi)^\star$$

.

אפשר לחלק את שני לשני חלקים -

$$\left(\psi, O^\dagger\phi\right) = (O\psi, \phi)$$

ו-

$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^\star$$

5.3.1 דוגמאות

האופרטור $\hat{\mathrm{x}}$:

$$\begin{aligned}(\phi, x\psi) &= \int dx\, \phi^\star(x)\,(x\psi(x)) && (5.25)\\ &= \int dx\,(x\phi^\star(x))\cdot\psi(x) && (5.26)\\ &= \left(\int dx x\phi(x)\psi^\star(x)\right)^\star && (5.27)\\ &= (\psi, x\phi)^\star && (5.28)\end{aligned}$$

ולכן, $x^\dagger = x$.

הגדרה 5.4 אם הצמוד של אופרטור שווה לעצמו, זהו אפרטור הרמיטי.

במטריצה, $\left(A^\dagger\right)_{i,j} = A^\star_{j,i}$ מגדיר את $A^\dagger$.

5.3.2 תכונות הצמדה הרמיטית

- $(A_1 + A_2)^\dagger = A_1^\dagger + A_2^\dagger$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
  - נחשב,

$$(\phi, A_1(A_2\psi)) = \left(A_1^\dagger\phi, A_2\psi\right) = \left(A_2^\dagger A_1^\dagger\phi, \psi\right) = \left(\psi, A_2^\dagger A_1^\dagger\phi\right)^\star \tag{5.29}$$

$$V(o) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n O^n \tag{5.30}$$

$$V(o)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(O^\dagger\right)^n \tag{5.31}$$

$$\left(e^A\right)^\dagger = 1 + A + \frac{1}{2}A^2 + \ldots \tag{5.32}$$

$$= e^{(A^\star)} \tag{5.33}$$

5.4 הגדרת מרחב הילברט

הגדרה 5.5 מרחב לינארי (סגור תחת צירופים לינארים) של מצבים $\{|\psi\rangle\}$ בעל מכפלה פנימית $\langle\psi|\phi\rangle \in \mathbb{C}$, כאשר המכפלה הפנימית מקיימת אי־שוויון קושי־שוורץ,

$$|(\psi,\phi)|^2 \leq (\psi,\psi)(\phi,\phi) \tag{5.34}$$

המרחב **שלם**, כלומר, לכל סדרת קושי המקיימת $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ $\lim_{n,n'\to\infty} \||\phi_n\rangle - |\phi_n\rangle\|$, אזי הגבול

$$\lim_{n\to\infty} |\phi_n\rangle \in H \tag{5.35}$$

שייך גם הוא למרחב.
המרחב מכיל גם את מצב האפס - $0 \cdot |\psi\rangle = 0$

5.4.1 דוגמא:

פונקצית $\delta(x)$,

$$\langle\delta|\delta\rangle = \int dx\,|\delta(x)|^2 \to \infty \tag{5.36}$$

ולכן פונקצית δ אינה מנורמלת.
אבל

$$\delta_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{x^2}{4a_n^2}} \tag{5.37}$$

ואז

$$\delta(x) = \lim_{n\to\infty, a_n\to 0} \delta_n(x) \tag{5.38}$$

ולכן גם היא במרחב.

5.4.2 עוד פעם הצמדה הרמיטית

אופרטור לינארי **מוגדר** על ידי כל אלמנטי המטריצה שלו. לכל $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ במרחב,

$$(\psi, O\varphi) = \langle\psi|\, O\, |\varphi\rangle \tag{5.39}$$

הצמדה הרמיטית - מציאת האופרטור $O^\dagger$ המקיים, לכל $|\psi\rangle$ ו־$|\varphi\rangle$

$$\begin{aligned}(\psi, O\varphi) &= \left(O^\dagger\psi, \varphi\right) = (\varphi, O\psi)^\star = \langle\varphi|\, O^\dagger\, |\psi\rangle && (5.40)\\ &= \langle\psi|\, O\, |\varphi\rangle^\star && (5.41)\end{aligned}$$

5.4.3 צמוד הרמיטי של P

נתונות פונקציות $\psi(x), \varphi(x)$ כלשהן

$$\begin{aligned}(\varphi, P\psi) &= \int dx\, \varphi^\star(x) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) && (5.42)\\ &= -i\hbar\left[\varphi^\star(x)\psi(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int dx\, \left(\frac{\partial}{\partial x}\varphi^\star\right)\psi x\right] && (5.43)\end{aligned}$$

הפונקציות ψ, φ חייבות לדעוך באינסוף (כי אינטגרל עליהן בריבוע ממינוס אינסוף עד אינסוף הוא סופי) ולכן החלק הראשון מתאפס

$$\begin{aligned}(\varphi, P\psi) &= \left(i\hbar\int dx\psi\left(x\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\varphi^\star(x)\right)\right) && (5.44)\\ &= \left[\int dx\psi^\star\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi(x)\right]^\star && (5.45)\end{aligned}$$

ולכן

$$P^\dagger = P \tag{5.46}$$

כלומר, אופרטור התנע, P הוא הרמיטי.

משפט 5.6 אם A הרמיטי, אזי גם aA^n כאשר a ממשי.

$$\left(aA^n\right)^\dagger = a\left(A^+\right)^n = aA^n \tag{5.47}$$

וכך, כל פולינום ב־A הרמיטי. (אבל אנחנו פיזיקאים, ולכן כל פונקציה היא בקרוב פולינום!) המשפט הכללי עבור f הוא קצת יותר מורכב. פונקציות אנליטיות ב־A הרמיטי הוא הרמיטי

נתון A לא הרמיטי - $A \neq A^\dagger$ - האופרטור

$$H = \frac{A + A^\dagger}{2} \tag{5.48}$$

$$H^\dagger = H \tag{5.49}$$

כדי לבטא את A -

$$A = H + iY \tag{5.50}$$

כאשר $Y = \frac{A - A^\dagger}{2}$, וגם הוא הרמיטי.

כל אופרטור ניתן לרישום כסכום של שני אופרטורים הרמיטיים, כאשר אחד מהם הרמיטי ואחד אנטי-הרמיטי

$$(iY)^\dagger = -iY \tag{5.51}$$

5.5 ערכים עצמיים ומצבים עצמיים של אופרטורים

נדבר על אופרטור לינארי O

הגדרה 5.7 אם קיים $|\phi\rangle$ כך ש-

$$O\,|\phi\rangle = \lambda\,|\phi\rangle \tag{5.52}$$

אזי $|\phi\rangle$ מצב עצמי (מ"ע) של O ו-λ ערך עצמי (ע"ע) של O עבור המצב $|\phi\rangle$.

5.5.1 דוגמא - פונקצית δ

$\delta(x - x_0)$ מתוארת על ידי $(x|x_0)$.

$$\underbrace{X}_{\text{operator}} \cdot \underbrace{\delta(x - x_0)}_{\text{function}} = \underbrace{x_0}_{\text{eigenvalue}} \underbrace{\delta\left(x - x_0\right)}_{\text{function}} \tag{5.53}$$

$$f(x)\delta\left(x - x_0\right) = f\left(x_0\right)\delta\left(x - x_0\right) \tag{5.54}$$

לאופרטור X יש הרבה מצבים עצמיים - כל פונקצית $\delta\left(x - x_0\right)$ הוא מצב עצמי שלו עם ערך עצמי x_0.

5.5.2 דוגמא - אופרטור הגזירה

$O = \frac{\partial}{\partial x}$. נקח מצב - $\psi(x) = e^{ik_0 x}$

$$O\psi = ik_0 e^{ik_0 x} \tag{5.55}$$

ולכן e^{ikx} הוא מצב עצמי של אופרטור הגזירה עם ערך עצמי ik_0 .

משפט 5.8 כל הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי - ממשיים

הוכחה: $|\phi\rangle$ ו־λ מ"ע ו־ע"ע של O. $O^\dagger = O$
$O|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$

$$\lambda^\star \langle\phi|\phi\rangle = (\langle\phi|O|\phi\rangle)^\star = \left(\langle\phi|O^\dagger|\phi\rangle\right)^\star \tag{5.56}$$

$$= \langle\phi|O|\phi\rangle = \langle\phi|\lambda|\phi\rangle = \lambda\langle\phi|\phi\rangle \tag{5.57}$$

כלומר, $\lambda = \lambda^\star$. ■

5.6 בסיס אורתונורמלי

הגדרה 5.9 בסיס דסקרטי: רשימה של מצבים: $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ המקיימים $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$. ו־$\langle\phi_i|\phi_i\rangle = 1$

הגדרה 5.10 בסיס שלם למרחב הילברט - כאשר כל $|\psi\rangle$ במרחב ניתן להצגה כסופרפוזיציה של איברי בסיס.

בסיס רציף $\{|x)\}$ - $(x|x') = 0$, $x \neq x'$, זה בסיס אורתוגונלי - לשני איברים אין חפיפה.

הגדרה 5.11 בסיס שלם של המרחב - אם לכל $|x) \in H$ קיים איבר בסיס אחד $|\phi_n\rangle$ לפחות ש־$\langle\psi|\phi_n\rangle \neq 0$

משפט 5.12 אם $\{|\phi_n\rangle\}$ בסיס שלם, אזי לכל $|\psi\rangle \in H$ יש הצגה באמצעות הבסיס.

$$|\bar\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} \langle\varphi_m \,|\, \psi\rangle\, |\varphi_m\rangle \tag{5.58}$$

הוכחה: נגדיר $|v\rangle = |\psi\rangle - |\bar\psi\rangle$.
נניח, על דרך השלילה, ש־$\|v\| \neq 0$. אז קיים לפחות $\bar m$ מסויים אחד כך שן

$$\langle\phi_{\bar m}|v\rangle \neq 0 \tag{5.59}$$

אבל

$$\langle\varphi_{\bar m}|v\rangle = \langle\varphi_{\bar m}|\bar\psi - \psi\rangle \tag{5.60}$$

$$= \overbrace{\langle\phi_{\bar m}|\sum_m |\phi_m\rangle}^{\delta_{m,\bar m}} \langle\phi_m|\psi\rangle - \langle\phi_{\bar m}|\psi\rangle \tag{5.61}$$

$$= \langle\phi_{\bar m}|\psi\rangle - \langle\phi_{\bar m}|\psi\rangle = 0 \tag{5.62}$$

וזו סתירה, כי δ_{mn} מקבל "1" באיחד האיברים בסכום, ולכן $\|v\| = 0$. ■

5.7 אופרטור הטלה

ψ מנורמל ל־1

$$P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{5.63}$$

ניתן לרשום באמצעות ברה וקט –

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi| \tag{5.64}$$

ואז

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle \tag{5.65}$$

תכונות ההטלה

- $P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle$
- $P_\psi^2 = P_\psi$. נוכיח זאת:

$$(|\psi\rangle \langle\psi|)(|\psi\rangle \langle\psi|) = |\psi\rangle \langle\psi| \tag{5.66}$$

5.8 פיצול היחידה

אופרטור היחידה I, שעבור כל מצב $|\psi\rangle$, $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$.
בהנתן בסיס אורתונורמלי שלם $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$,

$$I = \sum_{n+1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| \tag{5.67}$$

מה זה נותן לנו?

$$\langle\phi_m|\psi\rangle = \langle\phi_m|I|\psi\rangle \tag{5.68}$$
$$= \left\langle \phi_m \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| \psi \right\rangle \tag{5.69}$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \delta_{m,n} \langle\phi_n|\psi\rangle = \langle\phi_m|\psi\rangle \tag{5.70}$$

פיצול היחידה בבסיס רציף $\{|x)\}$,

$$I = \int dx\ |x)\,(x| \tag{5.71}$$

בבסיס $|k\rangle$ -

$$I = \int dk\, |k\rangle \langle k|$$

תרגיל

$$\langle x|x'\rangle = \langle x|I|x'\rangle \tag{5.72}$$
$$= \int dk \langle x|k\rangle \langle k|x'\rangle \tag{5.73}$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{i(x-x')k} = \delta\left(x-x'\right) \tag{5.74}$$

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

5.9 יחסי חילוף

אופרטורים במרחב הילברט, שנוצרים על ידי מכפלת 2 אופרטורים - והחסרה במכפלה בסדר הפוך.

$$[O_1, O_2] = O_1O_2 - O_2O_1 \tag{5.75}$$

כאשר $[O_1, O_2] = 0$ (או, $O_1O_2 = O_2O_1$) אומרים שהאופרטורים מתחלפים.
יחס החילוף $[x,p]$, במרחב L^2 - כל הפונקציות מקיימות: $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in L^2$, $\int dx\,|\psi|^2 < \infty$ ו- $\int dx\ |\phi|^2 < \infty$ -

$$\int dx \left|\frac{\partial}{\partial x}\psi\right|^2 < \infty, \int dx \left|\frac{\partial}{\partial x}\phi\right|^2 < \infty \tag{5.76}$$

נחשב את ערך המטריצה

$$\langle\psi|\,(xp - px)|\phi)\rangle = \langle\psi|\,[x,p]\,|\phi\rangle \tag{5.77}$$

נחשב:

$$\langle\psi|xp-px|\phi\rangle=\int dx\psi^{\star}x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)-\int dx\psi^{\star}\underbrace{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)[x\psi(x)]}_{(-i\hbar)\psi(x)+(-i\hbar)x\frac{\partial}{\partial x}\phi} \tag{5.78}$$

$$=i\hbar\int dx\,\psi^{\star}\phi=i\hbar\langle\psi|\phi\rangle \tag{5.79}$$

$$[x,p]=i\hbar\cdot I=i\hbar \tag{5.80}$$

אי החילוף של x,p הוא ביסוד עקרון אי הודאות, שבנוי על העובדה שקיימים שני גדלים פיזקליים - שסדר הכפל בינהם משנה את התוצאה.

ב־3 מימדים - $x\frac{\partial}{\partial y}f(x,y)$ - $[x,p_y]=0$ -

$$[x_{\alpha},p_{\beta}]=i\hbar\delta_{\alpha,\beta}\qquad\alpha,\beta=x,y,z \tag{5.81}$$

והרבה חלקיקים - $\begin{cases}\mathbf{x_1},\mathbf{x_2},\dots\\ \mathbf{p_1}\mathbf{p_2},\dots\end{cases}$-

$$[x_{i\alpha},p_{j\beta}]=i\hbar\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} \tag{5.82}$$

תכונות יחסי חילוף:

- אופרטור A, קבוע $a=aI$

$$[A,a]=0 \tag{5.83}$$

כי $AI=IA$

- לינאריות - $[C,aA+bB]=a[C,A]+b[C,B]$
- מכפלה: $[A,B\cdot C]=[A,B]C+B[A,C]$ ההוכחה:

$$[A,BC]=ABC-BCA=ABC-BCA-\overbrace{ABC+BAC}^{0} \tag{5.84}$$

- $[A,A^n]=0$ לכל n.
- לכל פולינום של האופרטור f,g - $[A,f(A)]=0$ וגם $[f(A),g(A)]=0$

5.10 עקרון אי הודאות

נראה איך עקרון אי הודאות נובע מאי־החילוף של x, p, תוך שימוש באי־שוויון קושי־שוורץ.
נתונים 2 אופרטורים, A, B כך ש־ $[A, B] = C \neq 0$.
נגדיר עבור מצב $|\psi\rangle$ כלשהו $\Delta A = A - \langle A\rangle_\psi$ ו־ $\Delta B = B - \langle B\rangle_\psi$. נניח ש־ $\Delta A, \Delta B$ הרמיטים - $\Delta A^\dagger = \Delta A, \Delta B^\dagger = \Delta B$
נרשום (קורלטור):

$$\langle\psi|\Delta A\Delta B|\psi\rangle = (\Delta A\psi, \Delta B\psi) \tag{5.85}$$

אי שוויון קושי שוורץ

$$|\langle\psi|\Delta A\Delta B|\psi\rangle| \leq \left\langle\psi|\Delta A^2|\psi\right\rangle \left\langle\psi\left|\Delta B^2\right|\psi\right\rangle \tag{5.86}$$

נסתכל על הזהות: $\Delta A\Delta B = \frac{\Delta A\Delta B+\Delta B\Delta A}{2} + \frac{\Delta A\Delta B-\Delta B\Delta A}{2}$.

$$\Delta A\Delta B = \underbrace{\left\langle\frac{\Delta A\Delta B + \Delta B\Delta A}{2}\right\rangle}_{\in\mathbb{R},\text{Real}} + \underbrace{\left\langle\frac{\Delta A\Delta B - \Delta B\Delta A}{2}\right\rangle}_{\in\mathbb{C}\setminus\mathbb{R},\text{Pure Imagenary}} \tag{5.87}$$

נוכיח -

$$\langle\psi\left|\Delta A\Delta B + \Delta B\Delta A\right|\psi\rangle = \langle\psi\left|\Delta A\Delta B + \Delta B\Delta A\right|\psi\rangle^\star \tag{5.88}$$

ולכן הוא ממשי. עביר ה־"-", מתקבל שהביטוי שווה למינוס הצמוד הקומפלקסי שלו - -

$$\langle\psi\left|\Delta A\Delta B - \Delta B\Delta A\right|\psi\rangle = -\langle\psi\left|\Delta A\Delta B - \Delta B\Delta A\right|\psi\rangle^\star \tag{5.89}$$

ולכן הוא דמיוני טהור.
נמשיך את הפיתוח

$$\left\langle\Delta A^2\right\rangle\left\langle\Delta B^2\right\rangle \geq |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 \tag{5.90}$$

$$= \overbrace{\left|\left\langle\frac{\Delta A\Delta B - \Delta B\Delta A}{2}\right\rangle\right|^2}^{\text{Im}} + \overbrace{\left|\left\langle\frac{\Delta A\Delta B + \Delta B\Delta A}{2}\right\rangle\right|^2}^{\text{Re}} \tag{5.91}$$

$$\leq \left|\left\langle\frac{[\Delta A, \Delta B]}{2}\right\rangle\right|^2 \tag{5.92}$$

נציב את יחס השונות הכללי שקיבלנו עבור x, p - $[\Delta x, \Delta p] = i\hbar$ -

$$\left\langle\Delta x^2\right\rangle\left\langle\Delta p^2\right\rangle \geq \left|\frac{i\hbar}{2}\right|^2 = \frac{\hbar^2}{4} \tag{5.93}$$

נגדיר את $\bar{\Delta x} = \sqrt{\langle\Delta x^2\rangle}$ (כנ"ל ב־p)

משפט 5.13 (עקרון אי הודאות של הייזנברג)

$$\bar{\Delta x}\bar{\Delta p} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{5.94}$$

תכונה כללית, שמתאימה לכל 2 אופרטורים שאינם מתחלפים־

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle [A,B] \rangle\right| \tag{5.95}$$

5.11 אופרטורים ומצבים עצמיים

הגדרה 5.14 מצב עצמי של אופרטור O עם ערך עמי λ הוא **מנוון** אם קיים עוד מצב עצמי עם אותו ערך עצמי

$|\psi\rangle$ ו־$|\phi\rangle$ כך ש־ $\begin{cases} O\left|\psi\right\rangle = \lambda\left|\psi\right\rangle \\ O\left|\phi\right\rangle = \lambda\left|\phi\right\rangle \end{cases}$ ו־$|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ **לא תלויים לינארית, כלומר** $|\psi\rangle \neq a\,|\phi\rangle$ **(עבור** a **כלשהו)**

הגדרה 5.15 מצב לא־מנוון $|\psi\rangle$ עם ערך עצמי λ ־ אין מצב עצמי אחר (לא תלוי לינארית) אם אותו ערך עצמי.

משפט 5.16 (האורתוגונליות)
אם נתונים 2 מצבים עצמיים, $|\psi_2\rangle\,,|\psi_1\rangle$, בלתי מנוונים, עבור אופרטור הרמיטי O, עם ערכים עצמיים λ_1, λ_2, אז המצבים אורטוגונליים זה לזה:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0 \tag{5.96}$$

הוכחה:

$$\langle \psi_2 | O | \psi_1 \rangle = \left\langle \psi_1 | O^\dagger | \psi_2 \right\rangle^\star \tag{5.97}$$
$$= \left(\langle \psi_1 | O | \psi_2 \rangle\right)^\star = \lambda_2^\star \left\langle \psi_1 | \psi_2 \right\rangle^\star \tag{5.98}$$
$$= \lambda_2 \left\langle \psi_2, \psi_1 \right\rangle \tag{5.99}$$
$$\langle \psi_2 | O | \psi_1 \rangle = \lambda_1 \left\langle \psi_2 | \psi_1 \right\rangle \tag{5.100}$$

קיבלנו ש־

$$\underbrace{\langle \lambda_1 - \lambda_2 \rangle}_{\lambda_1 \neq \lambda_2, \neq 0} \underbrace{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}_{=0} = 0 \tag{5.101}$$

■

5.12 הצגה של אופרטורים באמצעות ברה־קט

פיצול היחידה:

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| \tag{5.102}$$

כאשר $|\phi_n\rangle$ הם מצבים אורתוגונלים ־ בסיס

$$O = IOI = \sum_{m,n} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| O |\phi_m\rangle \langle\phi_m| \tag{5.103}$$

$$= \sum_{m,n} = |\phi_n\rangle O_{nm} \langle\phi_m| \tag{5.104}$$

$$O|\phi_1\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle O_{n_1} \tag{5.105}$$

והצגת דירק של אופרטור כללי:

$$O = \begin{pmatrix} |\phi_1\rangle & |\phi_2\rangle & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \dots \\ O_{21} & O_{22} & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\phi_1| \\ \langle\phi| \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{5.106}$$

מכל היצוגים המטריציונית של של O ־ יש הצגה אלכסונית אחת ויחידה (יוכח בהמשך, עם הסתייגויות, כרגע, נניח שזה ככה). (על איברי האלכסון נמצאים הערכים העצמיים ־ שאר המטריצה ־ אפסים)

1. אם O הרמיטי ־ $O_{nm} = O^\star_{mn}$ (לפי הגדרה)

נוכיח שבמטריצה אלכסונית ־ הערכים העצמיים $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ הם אברי האלכסון ־ $O_1, \dots, O_n$

$$O|\psi_N\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle O_n \overbrace{\langle\psi_n|\psi_N\rangle}^{\delta_{nN}} \tag{5.107}$$

(משפט שיהיה במהשך: כל אופרטור "מדיד" אזי יש לו הצגה אלכסונית)

הצגות רציפות $\{|x)\}$ ־

$$O = \int dx' \int dx \ |x)(x| O |x')(x'| \tag{5.108}$$

$$= \int dx' \int dx \, O_{xx'} |x)(x'| \tag{5.109}$$

5.13 הצגות של x ו־p

$$(x|X|\psi\rangle = x\psi(x) \tag{5.110}$$

$$\langle x|p|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \tag{5.111}$$

$$(x_1|X|x_2\rangle = x_1\delta\left(x_1 - x_2\right) \tag{5.112}$$

$$\langle k_1|P|k_2\rangle = \hbar k_1\delta\left(k_1 - k_2\right) \tag{5.113}$$

והצגה אלכסונית:

$$P\left|k_2\right\rangle = \hbar k_2\left|k_2\right\rangle \tag{5.114}$$

$$\langle x_1|P|x_2\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}\left(x_2 - x_1\right) = \lim_{\varepsilon\to 0} -i\hbar\left[\frac{\delta\left(x_2 - x_1 + \varepsilon\right) - \delta\left(x_2 - x_1\right)}{\varepsilon}\right] \tag{5.115}$$

כלומר, ההצגה של P במרחב של x, אינה אלכסונית.
ניתן לרשום פה את ההצגות האלכסוניות הבאות:

$$x = \int dx\left|x\right)x\left(x\right| \tag{5.116}$$

$$p = \int dk\ \left|k\right\rangle\hbar k\left|k\right\rangle \tag{5.117}$$

הגדרה 5.17 אופרטור מדיד ־ אופרטור הרמיטי (צמוד לעצמו) במרחב הילברט H, שאוסף כל המצבים העצמיים שלו פורש את המרחב H.

$$I = \sum_n\left|\phi_n\right\rangle\left\langle\phi_n\right| + \int d\alpha\ \left|\alpha\right)\left(\alpha\right| \tag{5.118}$$

האופרטורים שיעניינו אותנו הם אופרטורים הרמיטים־מדידים, רציפים או דיסקרטים.

משפט 5.18 לכל אופרטור מדיד יש הצגה אלכסונית, הפורשת את מרחב הילברט.

הוכחה: (בקורס במתמטיקה) ∎

5.14 טורי פוריה ־ Sine Transforms

$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ ־ כל פונקציה נתנת לכתיבה כתור של sin.

כתיב דיראק - $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ - בסיס אורטונורמלי. ניתן לרשום את I כ-

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle\phi_n| \tag{5.119}$$

$$= \int |x\rangle \langle xdx| \tag{5.120}$$

כאשר ה-xים הם המצבים העצמיים ו-$\langle x, x'\rangle = \delta(x - x')$.
לכן, ניתן לרשום:

$$|F\rangle = I|F\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \underbrace{\langle\phi_n||F\rangle}_{f_n} \tag{5.121}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} f_n |\phi_n\rangle \tag{5.122}$$

ועבור $f(x)$-

$$F(x) = \langle x|F\rangle = \langle X|| \sum_{n=1}^{\infty} f_n |\phi_n\rangle \tag{5.123}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} f_n \underbrace{\langle x|\phi_n\rangle}_{\phi_n(x)} = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \phi_n(x) \tag{5.124}$$

פונקציות עצמיות של חלקיק בתיבה

5.14.1 חלקיק בתיבה

בתיבה ב-$(0, L)$, מקבלים פונקציות שהן סינוסים שצריכים להתאפס בקצוות. $\sin\frac{\pi x}{L}, \sin\frac{2\pi x}{L}, \sin\frac{3\pi x}{L}$ (עד כדי מכפלה בקבוע)

נמצא את המקדם C - אנחנו ורצים שהנורה של $\varphi_n(x) = C\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$ ו-

$$1 = \int_0^L c^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{L} dx \tag{5.125}$$

$$= c^2 \int_0^K \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2\pi n x}{L}\right) dx \tag{5.126}$$

$$c^2\left(\frac{L}{2} + 0\right) = c^2 \frac{L}{2} \tag{5.127}$$

ולכן $c = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L} \tag{5.128}$$

אנחנו רוצים שהם יהיו אורטוגונליות -

$$\delta\left(x-x'\right)=\left\langle x'|x\right\rangle \tag{5.129}$$
$$=\left\langle x'|I|x\right\rangle \tag{5.130}$$
$$=\sum_{n=1}^{\infty}\left\langle x'|\phi_n\right\rangle \underbrace{\left\langle\phi_n|x\right\rangle}_{\phi_n^{\star}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)} \tag{5.131}$$

ולכן

$$\left(\frac{2}{L}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\sin\frac{\pi n x}{L}\sin\frac{\pi x' n}{L}=\delta l\left(x-x'\right) \tag{5.132}$$

$$f_n=\left\langle\phi_n|F\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L dx\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\cdot F(x) \tag{5.133}$$

דוגמא נפתח משולש - בגובה $\frac{L}{2}$ שבסיסו הוא $[0,L]$ כסכום של סינוסים. נסתכל על החצי הראשון, בו $f(x)=x$.

$$f_n=\int_0^{L/2}\sqrt{\frac{2}{L}}x\sin\frac{\pi n x}{L} \tag{5.134}$$

זו פונקציה שהיא סימטרית סביב $\frac{L}{2}$, ולכן יתרמו לה ה־n־ים האי־זוגיים.

$$f_n=\sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^{L/2}\overbrace{x}^{u}\overbrace{\sin\underbrace{\frac{\pi n x}{L}}_{\alpha x}}^{v'}dx= \tag{5.135}$$
$$=-\frac{\cos\alpha x}{\alpha}x\Big|_0^{L/2}+\int_0^{L/2}\frac{\cos\alpha x}{\alpha}dx \tag{5.136}$$
$$=\sqrt{\frac{2}{L}}\left(\underbrace{\frac{-L^2}{2\pi n}\cos\frac{\pi n}{2}}_{0-N|2}+\frac{L^2\sin\frac{\pi n}{2}}{\pi^2 n^2}\right) \tag{5.137}$$
$$=(-1)^{\frac{n-1}{2}}\frac{L^2}{\pi^2 n^2}\sqrt{\frac{2}{L}} \tag{5.138}$$

ולכן הפונקציה היא

$$\sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{L^2}{\pi^2 n^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n x}{L} \tag{5.139}$$

יש בפונקציה אי רציפות בנגזרת - והיא מתבטאת באיבר של $\frac{1}{n^2}$ בפיתות.

(לא כתבתי, פיתח של מדרגה - $f(x) = \begin{cases} 1 & x \in \left(0, \frac{L}{2}\right) \\ -1 & x \in \left(\frac{L}{2}, L\right) \end{cases}$, $\sum_{n=2,3,6}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \dots$

חלק III
הקורס בפיסיקת קוונטים מתחיל כאן

6 הנחות היסוד של מכניקת הקוונטים

פוסטולטים - הנחות יסוד. ניתנים, לכאורה, להפרכה על ידי ניסוי

6.1 מצב המערכת

בזמן מסויים t_0 מצב חלקיק/מערכת מתואר בשלמות על ידי קט (וקטור) מנורמל במרחב הילברט $\mathcal{H}$.

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1 \tag{6.1}$$
$$|\psi_0\rangle \in \mathcal{H} \tag{6.2}$$

6.2 גדלים פיסקלים

כל גודל פיזיקלי מתואר על ידי אופרטור לינארי במרחב H, הרמיטי ומדיד.

$A^\dagger = A$, או בהצגה אלכסונית

$$A = \sum \overbrace{|a_i\rangle}^{eigenstate} \underbrace{a_i}_{\text{eigenvalue}} \langle a_i| \tag{6.3}$$

כאשר a_i ממשיים.

6.3 תוצאות מדידה של גודל פיסיקלי

מדידה של גודל פיסיקלי מתואר על ידי A, תתן לנו אך ורק תוצאה שהיא אחד מהערכים העצמיים של A.

$$\{a_1, a_2, \dots, a_n\} \tag{6.4}$$

כך ש־$A\left|a\right\rangle = a\left|a\right\rangle$. (נוטציות: $\left|a\right\rangle$ מאופיין על ידי הערך העצמי שלו, ולכן מסמנים אותם אותו הדבר)

מסקנה 6.1 תוצאות מדידה של גודל פיסיקלי הם מספרים ממשיים, כי A הרמיטי

מסקנה 6.2 אם הספקטרום, (רשימת $\{a_i\}$), דיסקרטי, אזי אומרים שהתוצאות של מדידת A מקוונטתות. Quantized.

6.4 סטטיסטיקה של המדידה

ההסתברות למדוד ערך עצמי a_i נתון על ידי

$$P_{a_i} = \sum_{n=1}^{g_{q_i}} \left|\left\langle a_{i_n}|\psi\right\rangle\right|^2 \tag{6.5}$$

נניח שנתונה מערכת במצב $\left|\psi\right\rangle$.

1. המצבים של A לא מנוונים (אין 2 מצבים עם אותו ע"ע) והספקטרום דיסקרטי

   הסיכוי לקבל את העל a_i הוא

$$P(a_i) = \left|\left\langle a_i|\psi\right\rangle\right|^2 \tag{6.6}$$

   (כאן, a_i הוא מצב עצמי עם ערך עצמי a_i)

2. כאשר יש ניוון, קיימים g_{a_i} מצבים מנוונים, $\{\left|a_i,n\right\rangle\}_{n=1}^{g_{a_i}}$ ו־

$$P(a_i) = \sum_{n=1}^{g_{a_i}} \left|\left\langle ka_i, n \mid \psi\right\rangle\right|^2 \tag{6.7}$$

3. אם $\left|a_i\right)$ רציפים (שייכים לקטע רציף על הישר) הסיכוי למצוא את החלקיק ברווח $a_i + \Delta a =$

$$P_{a_i,a_i+\Delta a} = \int_{a_i}^{a_i+\Delta a} da\ \left|\left(a|\psi\right\rangle\right|^2 = \rho(a)\Delta a \tag{6.8}$$

   כאשר $\rho(a)$ היא "צפיפות הסתברות".

הערה 6.3 P_{a_i} דיסקרטי,מנורמלות ליחידה מהווה הסתברות:

$$\sum_i P_{a_i} = \sum_i \left|\left\langle a_i|\psi\right\rangle\right|^2 \tag{6.9}$$

$$= \sum \left\langle\psi\right| \left(\left|a_i\right\rangle\left\langle a_i\right|\right)\left|\psi\right\rangle \tag{6.10}$$

$$= \left\langle\psi|I|\psi\right\rangle = \left\langle\psi|\psi\right\rangle = 1 \tag{6.11}$$

למקרה הרציף -

$$\int_{-\infty}^{\infty} da\rho_a\left(a\right) = \int da\left\langle\psi|a\right\rangle\left\langle a|\psi\right\rangle = 1$$

6.4.1 ערך תצפית

ערך תצפית: $\langle\psi|A|\psi\rangle$.

$$A = \sum a_i |a_i\rangle\langle a_i| \tag{6.12}$$
$$= \sum_i \langle\psi|a_i\rangle a_i \langle a_i|\psi\rangle \tag{6.13}$$
$$= \sum_i a_i P_{a_i} \tag{6.14}$$

וזהו הממוצא של מדידת A אחרי הרבה מאוד ניסיונות.

6.4.2 מופע (פאזה)של מצב $|\psi\rangle$

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle \tag{6.15}$$
$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|e^{-i\theta}e^{i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{6.16}$$

כלומר - מופע לא משפיע על פונקצית ההסתברות, ולכן על כל מדידה פיסיקלית של כל אופרטור A:

$$P_{a_i} = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 = |\langle a_i|\psi'\rangle|^2 \tag{6.17}$$

לעומת זאת, בסופרפוזיציות, הפאזה כן משחקת תפקיד:

$$|\psi\rangle = \alpha|\phi_1\rangle + \beta|\phi_2\rangle \tag{6.18}$$

נניח ϕ_1, ϕ_2 אורתונורמליות.

$$|\psi'\rangle = \alpha e^{i\theta_1}|\phi_1\rangle + \beta e^{i\theta_2}|\phi_2\rangle \tag{6.19}$$

והסיכוי לקבל a_i מ־$|\psi\rangle$, ($\alpha, \beta, \langle a_i|\phi_1\rangle\langle a_i|\phi_2\rangle$ ממשיים)

$$P_{a_i} = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \tag{6.20}$$
$$= |\alpha|^2|\langle a_i|\phi_1\rangle|^2 + |\beta|^2|\langle a_i|\phi_2\rangle|^2 + \alpha\beta\langle a_i|\phi_1\rangle\langle a_i|\phi_2\rangle \tag{6.21}$$

וכאשר $\alpha = |\alpha|e^{i\theta_1}$ ו־$\beta = |\beta|e^{i\theta_2}$, נקבלת תלות בפאזה היחסית - $\theta_1 - \theta_2$,

$$P'_{a_i} = |\alpha|^2|\langle a_i|\phi_1\rangle|^2 + |\beta|^2|\langle a_i|\phi_2\rangle|^2 + 2\alpha\beta\cos(\theta_1-\theta_2)\langle a_i|\phi_1\rangle\langle a_i|\phi_2\rangle \tag{6.22}$$

כלומר, ההסתברות תלויה בהפרש הפאזות.

6.5 קריסת פונקצית גל ־ בעקבות המדידה

לאחר המדידה (קבלת אינפורמציה על ידי גלאי "קלאסי" ־ אנושי?) פונקציית הגל $|\psi\rangle$ קורסת למצב עצמי A המתאים לערך הנמדד (במקרה הלא־מנוון)

$$A\,|\psi\rangle \xrightarrow{\text{measure}} a_i, |a_i\rangle \tag{6.23}$$

מצב קריסת פונקצית הגל לא מתואר על ידי מכניקה קוונטית. (קשה להבין את זה ־ אף אחד לא באמת שלם עם הפוסטולת הזה, אבל ככה זה..)

לדוגמה ־

$$A = 5\,|x\rangle\langle x| + 4\,|y\rangle\langle y| + 7\,|z\rangle\langle z| \tag{6.24}$$

תוצאת המדידה היתה 4 ־ כלומר, פונקצית הגל קרסה בציר ה־y , והפכה מ־

$$|\psi\rangle = \sin\theta\cos\phi\,|x\rangle + \sin\theta\cos\phi\,|y\rangle + \cos\theta\,|z\rangle \tag{6.25}$$

לפונקציה $|y\rangle$, (בסיכוי ־ $P_y = \sin^2\theta\sin^2\phi$)

האפשרויות היחידות למדידה הן $|x\rangle$,5 $|y\rangle$ 4 ו־$|z\rangle$ 7.

$$|\psi\rangle \longrightarrow_{a_n} P_{|a_n\rangle}\,|\psi\rangle \tag{6.26}$$

כאשר אופרטור ההטלה $P_{|a_n\rangle} = |a_n\rangle\langle a_n|$.

במקרה המנוון ־ קריסת פונקצית גל ־

$$A:\ a_{n_1}\,|a_{n,i}\rangle\,,\ i = 1,\ldots,j \tag{6.27}$$

אזי

$$A : |\psi\rangle \longrightarrow a_n, \frac{\sum_{i=g_n}^{j}\langle a_{n_i}\mid\psi\rangle\,|a_{n_i}\rangle}{\left(\sum_i\left|\langle a_{n_i}|\psi\rangle^2\right|\right)^{1/2}} \tag{6.28}$$

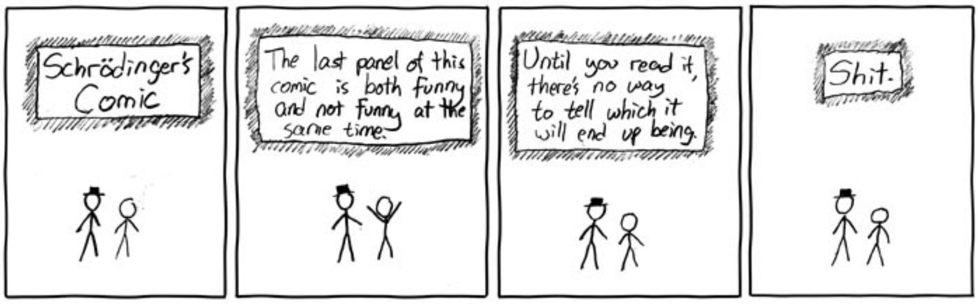
או, אופרטור ההטלה במרחב מנוון,

$$\longrightarrow \frac{P_{a_n}\,|\psi\rangle}{\left(\langle\psi|P_{a_n}|\psi\rangle\right)^{1/2}} \tag{6.29}$$

אם עבור האופרטור

$$A = 5\,|x\rangle\langle x| + 5\,|y\rangle\langle y| + 7\,|z\rangle\langle z| \tag{6.30}$$

מדדנו 5, אז לאחר הקריסה, פונקצית הגל (המנורמלת) תהיה $\cos\phi\,|x\rangle + \sin\phi\,|y\rangle$ ־ עבור האופרטור הזה, x, y לא נמדדו, ולכן הרכיבים בכיוונים אלו נשארו באותו יחס.



איור 3: "Schrodinger", from Xkcd.com

6.5.1 מדידה

מכשיר מדידה של A הוא פונקציה אופרטורית של A, $f(A)$.

למשל, מכשיר שקולט חלקיק בין הנקודה x_1, x_2, הפונקציה שלו תראה:

$$f(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{cases} 1 & x \in (x_1, x_2) \\ 0 & x \notin (x_1, x_2) \end{cases} \tag{6.31}$$

כלומר, נוכל לדעת רק אם החלקיק בין (x_1, x_2) או לא.

$$f(A) = \sum_i |a_i\rangle f(a_i) \langle a_i| \tag{6.32}$$

נקח פונקצית גל $\langle x|\psi\rangle$, שמתוארת במרחב המקום על ידי $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$.

הפונקציה נמדדת על ידי מכשי המדידה $f(x)$. תוצאות המדידה האפשרויות ־ 1 ־ החלקיק נמצא בתוך הטווח (x_1, x_2) ־ 0 ־ אם הוא לא שם. הסתברות המדידה של המונה היא לכן

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \left|\psi(x)\right|^2 = \int_{x_1}^{x_2} dx \left|\psi\right|^2$$

יישום הנדסי ־ מונה גייגר שיושב בתחום ומסמן כאשר יש שם חלקיק.

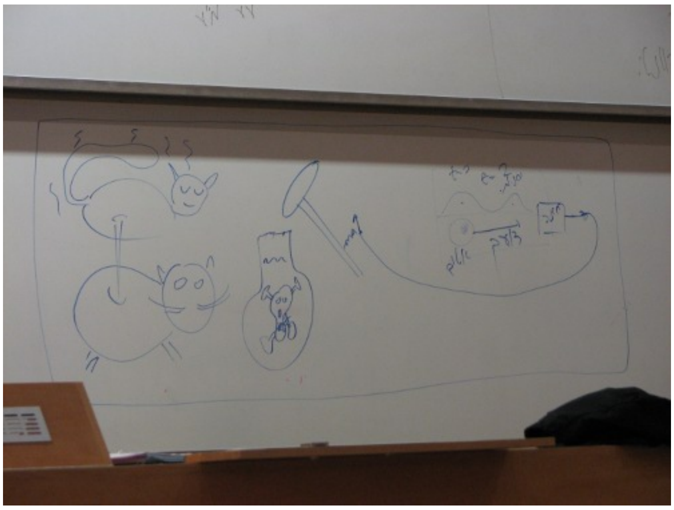
זוהי פונקציה מנוונת ־ כי היא כוללת מספר מצבים עצמיים (כל הטווח ב־(x_1, x_2)), ולכן תוצאת המדידה תהיה פונקצית גל הכוללת את כל הקטע (x_1, x_2).

6.5.2 החתול של שרדינגר

לוקחים חלקיק רדיואקטיבי, עם פונקית גל, שמאפשרת לחלקיק האלפא להיות בתוך הגרעין או מחוץ לגרעין. בשלב מסויים ־ לחלקיק האלפא יש סיכוי של 50% להיות מחוץ לגרעין או בתוך הגרעין. מיקומו של חלקיק האלפא נמדד על ידי מונה גייגר.

ברגע שהחלקיק דועך ־ עזב את גרעין האטום, הוא יכול להכנס למונה, ש"נותן קליק", ושולח אות חשמלי למנוע שמפעיל פטיש ששובר בקבוק ציאניד.

החתול נמצא בתוך קופסא יחד עם כל המערכת המורכבת הזו.



איור 4: אסא מצייר את החתול של שרדינגר. צילום: תום רז

ב־$t=0$ מתחילה המערכת. ב־$t=2$. מה מצב המערכת? אם הגיע חלקיק ־ החתול, בסופו של עניין, מת. אם לא הגיע חלקיק ־ החתול נשאר בחיים.

אם לא מסתכלים על התוצאה, אז החתול בעצם נמצא בסופר פוזיציה ־ של חתול מת וחתול חי.

כאשר פותחים את הקופסא, פונקצית הגל קורסת והחתול נמצא באחד המצבים ־ מת או חי.

6.5.3 שיר/ מאמר בחרוזים מאת סיסל אדמס ־ Straight Dope ־ מופיע ב־moodle

6.6 משוואת שרדינגר

- במכניקה קלאסית ־ מצב מוגדר על ידי $(\mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}(t_0))$ ־ והמצב נפתר על ידי משוואות המילטון.
- הפיתוח המקביל במכניקה קוונטית היא משוואת שרדינגר

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = H\left|\psi(x)\right\rangle \tag{6.33}$$

כאשר

- $\left|\psi(x)\right\rangle$ ־ מצב ב־t
- H ־ אופרטור האנרגיה (הרמיטי)
- $\left|\psi(t)\right\rangle$ ־ שינוי במצב
- $\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\left|\psi(t+\varepsilon)\right\rangle - \left|\psi(t)\right\rangle}{\varepsilon}$

משפט 6.4 (שרדינגר) ב-$L^{(2)}$, מרחב 1 מימדי, חלקיק סקלארי

$$i\hbar\psi\left(x,t\right)=\left[-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}+V(x)\right]\psi(x,t) \tag{6.34}$$

$$\left\langle x|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\right\rangle =\langle x|H|\psi\rangle \tag{6.35}$$

אופרטור ההמילטוניאן בנוטצית דירק:

$$(x|H|x')=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\delta\left(x-x'\right)\left[\frac{\partial^{2}}{\partial x'^{2}}+V(x)\right] \tag{6.36}$$

6.6.1 דוגמה: בור אינסופי

$$\psi(L)=\psi(0)=0 \tag{6.37}$$

והפתרונות הם כמו גל עומד במיתר -

$$\varphi_{n}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2}\right) \tag{6.38}$$

$$E_{n}=\frac{\hbar^{2}n^{2}\pi^{2}}{2mL^{2}} \tag{6.39}$$

וההמילטוניאן, באמצעות המצבים העצמיים:

$$H=\sum_{n=1}^{\infty}E_{n}\left|\phi_{n}\right\rangle \left\langle \phi_{n}\right| \tag{6.40}$$

צורת רישום נוספת ל-$\langle x|H|x'\rangle$ -

$$\langle x|H|x'\rangle=\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n\pi x'}{L}\right)\left(\frac{\hbar^{2}n^{2}\pi^{2}}{2mL^{2}}\right) \tag{6.41}$$

6.6.2 ליכסון ההמילטוניאן

מצב עצמי של H, $|\phi_n\rangle'$ישתנה ככה:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\phi_{n}\right\rangle =H\left|\phi_{n}\right\rangle =E_{n}\left|\phi_{n}\right\rangle \tag{6.42}$$

ופתרון -

$$\left|\phi(t)\right\rangle =e^{-i\frac{E_{n}}{\hbar}t}\left|\phi_{n}\left(0\right)\right\rangle \tag{6.43}$$

אבל ייצוג של $|\psi\rangle$ הוא עד כדי פאזה, ולכן מצב עצמי של H הוא סטציונארי - הפאזה לכאורה מושפעת מהזמן, אבל הפאזה לא משפיעה על המצב.

6.7 פתרון כללי של משוואת שרדינגר

$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{x})$ כאשר $p=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\langle\mathbf{x}|H|\psi(t)\rangle=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\boldsymbol{\nabla}}^2+V\left(\mathbf{x}\right)\right)\psi\left(\mathbf{x},t\right) \tag{6.44}$$

כיוון ש־$H=H^\dagger$, יש לו בסיס שלם אורתוגונלי $|\phi_n\rangle$, והבסיס פורש את המרחב־ $I=\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ עם ערכים עצמיים E_n כך ש־

$$H=\sum_n E_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n| \tag{6.45}$$

רושמים

$$|\psi_0\rangle=\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi_0\rangle=\sum_n c_n(0)|\phi_n\rangle \tag{6.46}$$

$$|\psi(t>0)\rangle=\sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle \tag{6.47}$$

ולכן

$$\langle\phi_n|\psi(t)\rangle \tag{6.48}$$

$$\left\langle\phi_n|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\right\rangle=\langle\phi_n|H|\psi(t)\rangle \tag{6.49}$$

$$\left\langle\phi_n|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{n'}c_{n'}(t)|\varphi_{n'}\right\rangle=E_nc_n(t) \tag{6.50}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t)=E_nc_n(t) \tag{6.51}$$

הפתרון של המשוואה: $c_n(t)=e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}}c_n(0)$ וזה הפתרון השלם של כל המקדמים של פונקצית הגל בכל זמן $t>0$

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}c_n(0)|\phi_n\rangle \tag{6.52}$$

כאשר $c_n=\langle\psi_0|\phi_n\rangle$, נתונים לפי תנעי ההתחלה ־ $|\psi\left(0\right)\rangle=|\psi_0\rangle$.

6.7.1 תכונות כלליות של פתרונות של משוואת שרדינגר

משפט 6.5 מצב פיזיקלי מנורמל ל־1, שומר על הנירמול שלו, תחת התפתחות בזמן.

הוכחה:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{n,n'} \langle\phi_n|\, e^{+\frac{iE_n t}{\hbar}} c_n^\star e^{-\frac{iE_{n'} t}{\hbar}} c_{n'}(0)\,|\phi_{n'}\rangle \tag{6.53}$$

$$= \sum_n |c_n(0)|^2 = \langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1 \tag{6.54}$$

■

משפט 6.6 חוק שימור אנרגיה: לכל $\psi(t)$, ו־H קבוע

$$E = \langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle = \text{const} \tag{6.55}$$

כלומר, האנרגיה אינה משתנה בזמן

הוכחה:

$$\frac{d}{dt}E = \left\langle\dot{\psi}|t|\psi\right\rangle + \left\langle\psi|H|\dot{\psi}\right\rangle \tag{6.56}$$

$$\left|\dot{\psi}\right\rangle == \frac{1}{i\hbar}H\,|\psi\rangle \tag{6.57}$$

$$\left\langle\dot{\psi}\right| = -\frac{1}{i\hbar}\,\langle\psi|\,H \tag{6.58}$$

$$\frac{d}{dt}E = -\frac{1}{i\hbar}\left[\langle\psi|H^2|\psi\rangle - \langle\psi|H^2|\psi\rangle\right] = 0 \tag{6.59}$$

■

הערה 6.7 כל החוקים מניחים שאין חיכוך. לכן, אם ההמילטוניאן לא תלוי בזמן (כלומר, הפוטנציאל לא תלוי בזמן) האנרגיה נשמרת.

הערה 6.8 במכניקת הקוונטים, חוק שימור מנוסח לערכי תצפית!

6.8 דוגמה ־ בור פוטנציאל אינסופי

ברוחב L.
ב־$t=0$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right) \tag{6.60}$$

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right) \tag{6.61}$$

$$E_n = \frac{\hbar n^2 \pi^2}{2mL^2} \tag{6.62}$$
$$|\psi(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-\frac{iE_1 t}{k}}|\psi_1\rangle + e^{-\frac{E_2 t}{\hbar}}|\psi_2\rangle\right) \tag{6.63}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}e^{-\frac{i\hbar\pi^2}{2mL^2}t}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sqrt{\frac{2}{L}}e^{-\frac{i\hbar 4\pi^2}{2mL^2}}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right) \tag{6.64}$$
$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{L}\left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\cos\left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar}t\right)\right] \tag{6.65}$$
$$\tag{6.66}$$
$$\tag{6.67}$$

שני איברים קבועים - ואחד שמתנדנד כמו קוסינוס עם תדירות f:

$$f = \left|\frac{E_1 - E_2}{\hbar}\right| = \frac{\frac{5}{2}\pi^2\hbar}{mL^2} \tag{6.68}$$

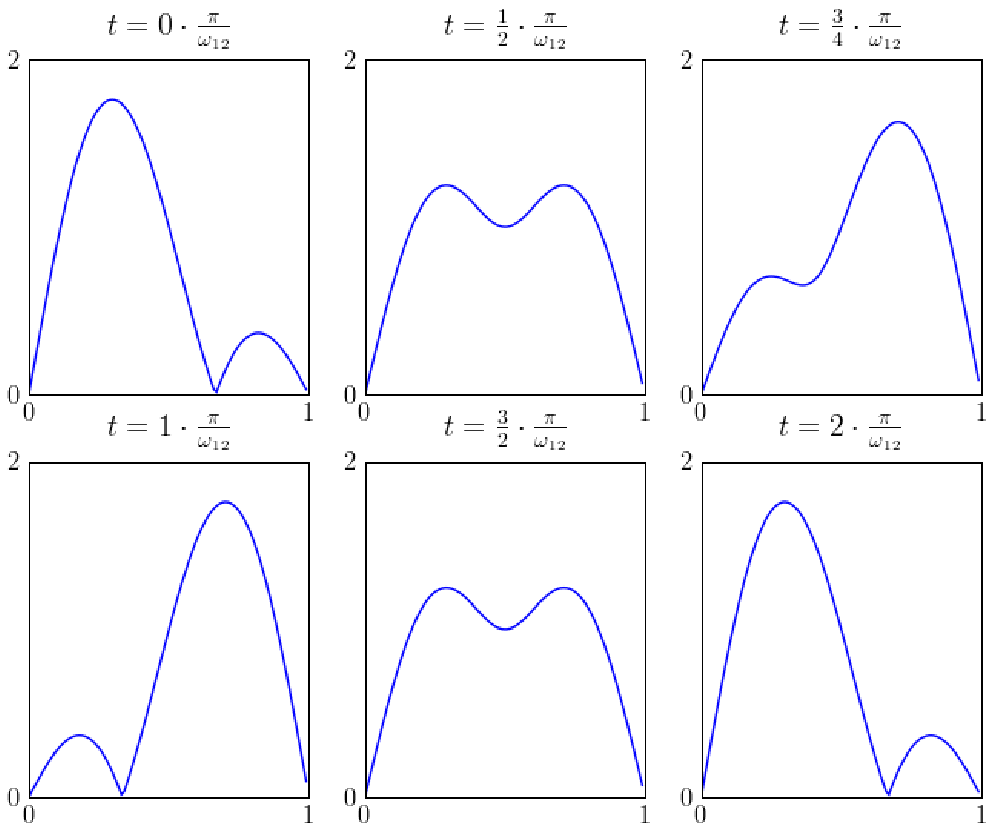
ניתן לראות את ההפתחות בזמן של מצב זה באיור 5.

$$\left\langle x(t) - \frac{L}{2}\right\rangle = \int dx \psi^\star(x,t)\, x\psi(x,t) = \tag{6.69}$$
$$= \int\left(\varphi_1^\star e^{+\frac{iE_1^2}{\pi}} + \varphi_2^\star e^{+\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right)\left(x - \frac{L}{2}\right)\left(\varphi_1 e^{-\frac{iE_1^2}{\pi}} + \varphi_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right) \tag{6.70}$$
$$= \underbrace{\left\langle \varphi_1 \left| x - \frac{L}{2}\right| \varphi_2\right\rangle}_{A} + \underbrace{\left\langle \varphi_2 \left| x - \frac{L}{2}\right| \varphi_2\right\rangle}_{B} + \tag{6.71}$$
$$\left\langle \varphi_2 \left| x - \frac{L}{2}\right| \varphi_1\right\rangle e^{i\frac{E_2 - E1}{\hbar}t} + \left\langle \varphi_1 \left| x - \frac{L}{2}\right| \varphi_2\right\rangle e^{-i\frac{E_2 - E1}{\hbar}t} \tag{6.72}$$

$A, B = 0$ מטעמי סימטריה. $\int dx\left(x - \frac{L}{2}\right)|\varphi_2|^2$.
נותרו איברי ההתאבכות, שאחד מהם הוא הצמוד הקומפלקסי של השני ולכן

$$\left\langle\left(x(t) - \frac{L}{2}\right)\right\rangle = \frac{16L}{9\pi^2}\cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) \tag{6.73}$$

- חלקיק קלאסי - יבצע תנועה שהמהירות שלה אינה רציפה על הקירות
- חלקיק קוונטי - לא יגיע לקיר - ויבצע סינוס רציף (וגזיר! גם המהירות רציפה) בתוך הבור.



זה די דומה לכוהן־טנוג'י, עמוד 275.

איור 5: התפתחות מחזורית בזמן של חבית גלים המורכבת מהרכבה של מצב הבסיס והמצב המעורר הראשון של חלקיק בבור אינסופי. $\omega_{12} = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$, הפאזה בין המצבים.

6.9 חבילת גלים

פונקציה ממוקמת במרחב (סביב הראשית) עם תנע ממוצע k_0

$$\psi_0(x) = Ae^{-\frac{x^2}{4a}+ik_0x} \tag{6.74}$$

חלקיק חופשי -

$$H = \int dk \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)|k\rangle\langle k| \tag{6.75}$$

$$I = \int dk\,|k\rangle\langle k| \tag{6.76}$$

אז

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|I|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \tag{6.77}$$

$$= \int dx' \int dk\, \underbrace{\langle x|k\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}}\, e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\, \underbrace{\langle k|x'\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx'}}\, \psi_0(x') \tag{6.78}$$

$$= \int dx' \int dke^{ik(x-x')-i\frac{E_k}{\hbar}t}e^{-\frac{x^2}{4a^2}-ik_0x'} \tag{6.79}$$

$$K(x,\dot{x},t) = \int dk\, e^{ik(x-x')+i\frac{\hbar^2k^2}{2m}t} \tag{6.80}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} \tag{6.81}$$

$$\psi(x,t) = A\int dx' K(x,x',t)\, e^{-\frac{x'^2}{4a^2}-ik_0x'} = \tag{6.82}$$

$$= A'\frac{1}{1+i(t/\tau)^{\frac{1}{2}}}e^{ik_0\left(x-\frac{\hbar u_0 t}{2m}\right)}e^{-\left[\frac{x\hbar k_0\frac{t}{m}}{4a^2(1+t/\tau)}\right]} \tag{6.83}$$

כאשר $\tau = \frac{2ma^2}{\hbar}$, הוא זמן קוונטית התלוי ברוחב החבילה a.

6.10 משפט אהרנפסט

נגדיר: $\langle O(t)\rangle \equiv \langle\psi(t)\,|\,O\,|\,\psi(t)\rangle$. אם O לא תלוי בזמן - $\frac{d}{dt}\langle O\rangle = \left\langle\dot{\psi}\,\middle|\,O\,\middle|\,\psi\right\rangle + \left\langle\psi\,\middle|\,O\,\middle|\,\dot{\psi}\right\rangle$

$$\left|\dot{\psi}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}H|\psi\rangle \tag{6.84}$$

$$\left\langle\dot{\psi}\right| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|H^\dagger \tag{6.85}$$

ונקבל:

$$\frac{d}{dt}\langle O\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)\,|\,OH-HO\,|\,\psi(t)\rangle \quad (6.86)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle[O,H]\rangle \quad (6.87)$$

(ה־H הגיע ממשוואת שרדינגר־ מ־$\psi(t)$)

- אם O מתחלף אם H, הערך שנותן האופרטור O לא משתנה בזמן
  - למשל, ערך התצפית של H אינו מתפתח בזמן ־ שימור אנרגיה

חוקי שימור ־ כל אופרטור מדיד המתחלף עם ההמילטוניאן, הוא "גודל נשמר"

$$[O,H]=0 \Rightarrow \langle O(t)\rangle = \langle O(0)\rangle \quad (6.88)$$

6.10.1 דוגמה ־ חלקיק חופשי במימד אחד

אזי $H=\frac{p^2}{2m}$.

$$\langle p(t)\rangle = \langle p_0\rangle \quad (6.89)$$

$$v = \frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[x,\frac{p^2}{2m}\right]\right\rangle = \frac{\cancel{2i\hbar}}{\cancel{ik2}m}\langle p\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m} \quad (6.90)$$

לכאורה, במכניקת הקוונטית, ל־$\langle p\rangle$ אין קשר למהירות ־ הוא מתאר את אורך הגל הממוצע של המצב הקוונטי.

אבל למה, מכל האופרטורים, משוואות שרדינגר מכילה דווקא את H? כי זה נותן לנו את $v=\frac{\langle p\rangle}{m}$
נסתכל על טרנספורמצית גלילי ־ עבור מערכת נעה במהירות $\mathbf{V}$

$$\dot{x}' = \dot{\mathbf{x}} - \mathbf{V} \quad (6.91)$$

וחוק שימור התנע:

$$\mathbf{P}' = \mathbf{P} - m\mathbf{V} \quad (6.92)$$

כדי לקיים אותו, נדרוש ־$P=m\mathbf{v}$, וזה מתאים ל־v שמצאנו. ולכן, במשוואת שרדינגר

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (6.93)$$

בהכרח תמיד מתאים

$$\mathbf{p} = -i\hbar\vec{\boldsymbol{\nabla}} \quad (6.94)$$

ההמילטוניאן של שרדינגר עשוי להשתנות בהתאם לנסיבות (מהירויות גבוהות ותיקונים יחסותיים).

$$\left[x,\frac{p^2}{2m}\right] = \frac{1}{2m}\left([x,p]\,p+p\,[x,p]\right) \tag{6.95}$$

$$= \frac{1}{2m}\left(i\hbar p+pi\hbar\right)=\frac{1}{2m}\left(2i\hbar p\right) \tag{6.96}$$

v בכמה רכיבים:

$$\langle\dot{x}_\alpha\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[x_\alpha,\sum_\beta p_\beta^2/2m\right]\right\rangle \tag{6.97}$$

$$= \frac{\langle p_\alpha\rangle}{m} \tag{6.98}$$

כל זה היה נכון לגבי חלקיק חופשי .
בנוכחות פוטנציאל -

$$\langle\dot{\mathbf{x}}\rangle = \frac{\mathbf{p}}{m} \tag{6.99}$$

$$\langle p_x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[p_x,V(x,y,z)\right]\right\rangle \tag{6.100}$$

(נזכר, מהתרגיל, $[p,V(x)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}V(x)$)

$$\langle\dot{p}_x\rangle=-\left\langle\frac{\partial}{\partial x}V(x)\right\rangle=V-\langle F_x\rangle \tag{6.101}$$

וקיבלנו את הכח בכיוון x...

6.11 מינהור

בור פוטנציאל סופי -

$$V(x)=\begin{cases}v_0 & x\notin(-L,L)\\ 0 & x\in(-L,L)\end{cases} \tag{6.102}$$

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi=E\psi \tag{6.103}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \left(V(x)-E\right)\psi(x) \tag{6.104}$$

הפתרון הכללי הוא מהצורה

$$Ae^{-qx}+Be^{+qx} \tag{6.105}$$

ומטעמי נירמול ־ $A=0$. הפונקציה שלנו היא

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{qx} & x>L \\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x\in(-L,L) \\ e^{-qx} & x<-L \end{cases} \tag{6.106}$$

כאשר $q=\sqrt{\frac{2m(v_0-E)}{\hbar}}$ ו־$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

מאחר והבור אינו אינסופי, יש לו זנבות ־ בכל מקום מחוץ לבור, פונקצית הגל דועכת אקספוננציאלית על כל המרחב, אבל איננה אפס. כלומר ־ יש אפשרות לעבור אל מחוץ לבור.

פיתוח מלא של המינהור ־ כהן־טאנוג'י, עמוד 457.

7 תכונות משוואת שרדינגר

במימד אחד ־

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x) &= E\psi(x) && (7.1)\\ \psi'' &= \left(\frac{(V(x)-E)}{\hbar^2}\right)2m\psi(x) && (7.2)\end{aligned}$$

$V(x)$ סופי, $|\psi''(x)|<\infty$ ו־$\psi(x)$ רציף.

דוגמאות נגדיות: $V=\infty$ או $V=\delta(x)$.

7.1 פוטנציאל קבוע למקוטעין

לחלקיק אנרגיה E. הפוטנציאל קבוע למקוטעים, באזורים המותרים $V_i<E$ ובאזורים האסורים ־ $V_i>E$

באזורים המותרים ־ $\psi(x)=A_ie^{ik_ix}+B_ie^{-ik_ix}$ כאשר $k_i=\sqrt{\frac{2m(E-v_i)}{\hbar^2}}$

באזורים האסורים ־ $\psi_j=A_je^{q_jx}+B_je^{-q_jx}$ כאשר $q_j=\sqrt{\frac{2m(V_j-E)}{\hbar^2}}$.

כאשר הקבועים A,B נקבעים על ידי תנאי השפה ־ בנקודת חיבור ־ ψ_i,ψ_{i+1} שווים בנקודה.

$$A_ie^{ik_ix_i}+B_ie^{-ik_ix_i}=A_{i+1}e^{q_{i+1}x_i}+B_{i+1}e^{-q_{i+1}x_i} \tag{7.3}$$

אפשר גם להשוות את הנגזרות בנקודה ־ $\psi_i'=\psi_{i+1}'$

$$(ik_i)\,A_ie^{ik_ix_i}-ik_kB_ie^{-ik_ix_i}=q_{i+1}A_{i+1}q^{q_{i+1}x_i}-q_{i+1}B_{i+1}E^{-q_{i+1}x_i} \tag{7.4}$$

את שתי המשוואות ניתן להציג כמטריצת מעבר -

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{ik_ix_i} & e^{-ik_ix_i} \\ ik_ie^{ik_ix_i} & -ik_ie^{-ik_ix_i} \end{pmatrix}}_{M_i}\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{q_{i+1}x_i} & e^{-q_{i+1}}x_i \\ q_{i+1}e^{q_{i+1}x_i} & -q_{i+1}e^{-q_{i+1}x_i} \end{pmatrix}}_{N_i}\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} \tag{7.5}$$

אזי

$$\left(N^{-1}M\right)_i\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} \tag{7.6}$$

יכול להיות גם מעבר מאזור מותר לאזור מותר או מאזור אסור - עדין צריך להדביק פתרונות, רק שהפעם, שני הצדדים מקבלים "ik" או "q" ביחד.

תנאי שפה אמיתי של המקרה- הפונקציה במקטע הכי ימני ובמקטע הכי שמאלי - צריכות לדעוך לאפס באינסוף.

$$\boxed{T_{i,i+1} = \left(N^{-1}M\right)_i} \tag{7.7}$$

באופן כללי -

$$\begin{aligned} T_{N,1} = \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} &= \left[T_{N,N-1} \cdot T_{N-1,N-2} \cdots T_{1,2}\right]\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} && (7.8) \\ &= \prod_{i=N}^{1} T_{i,i-1} && (7.9) \end{aligned}$$

או

$$T_{1,N} = \prod_{i=1}^{N} T_{i,i+1} \tag{7.10}$$

כאשר כל $T_{1,N}$ הוא פונקציה רק של האנרגיה E

הגדרה 7.1 מצב קשור - עבור $x \to \pm\infty$ אם $V(x) \to 0$ הוא מצב ש-$E_n < 0$.

לכן, אם האנרגיה קטנה מאפס , בצד ימין, A חייב להיות זהותית אפס, כדי ש-Ae^{qx} לא ישאף לאינסוף ומאותם שיקולים - בצד שמאל, $B = 0$.

אם $E < 0$, אזי, $B_1 = 0$ וגם $A_N = 0$

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = T\left(E\right)\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{7.11}$$

אבל $B_1 = 0$ ו-$A_n = 0$ לכן

$$\begin{aligned} B_n &= T^{1,1}A_1 + T^{1,2}\cancel{B_1} && (7.12) \\ 0 = A_n &= T^{21}A_1 + T^{22}\cancel{B_1} && (7.13) \end{aligned}$$

נקח $A_1 = 1$, וקיבלנו ש־

$$T^{21}(E) = 0 \tag{7.14}$$

אם למשוואה הזו יש פתרונות, סביר להניח שיהיו פתרונות דיסקרטיים (לא נוכיח את זה כאן)

$$E_n, \quad (n = 1, 2, \ldots) \tag{7.15}$$

אם אין פתרון למשוואה ־ לא יהיו פתרונות קשורים.
באופן כללי, ניתן לקרב כל פוטנציאל במימד אחד לפוטנציאל קבוע למקוטעין, ולפתור את משוואת שרדינגר במימד אחד ־ בצורה כזו.
באופן כללי, הספקטרום מחולק למצבים קשורים דיסקרטיים ומצבי פיזור רציפים.

- תורת הפיזור ־ תורה של התנהגות של מצבים בספקטרום הרציף הלא־מנורמל. תטופל בקוונטים 2. הם מופיעים בספרי לימוד, אבל הם לא בחומר של הקורס הזה.

7.2 עקרון הואריאציה

(לכל המילטוניאן שיש לו מצב יסוד. שזה כל ההמילטוניאנים שיעניינו אותנו. (לגרביטציה ־ אין מצב יסוד. יש חורים שחורים)

משפט 7.2 אם נקח $\langle\psi|$ מנורמל, אזי

$$\boxed{\langle\psi\,|\,H\,|\,\psi\rangle \geq E_0} \tag{7.16}$$

כאשר E_0 אנרגית מצב הייסוד, $E_0 \leq E_i$ לכל ערך עצמי E_i, $i \neq 0$ ־, ו־$H\,|\psi_0\rangle = E_0\,|\psi_0\rangle$ כאשר ψ_0 הוא מצב היסוד
שוויון $\langle\psi|H|\psi\rangle = E_0$ הוא אך ורק עבור $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$

הוכחה:

$$\langle\psi\,|\,H\,|\,\psi\rangle = \sum_n E_n\,|\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 \tag{7.17}$$

כאשר ϕ_n הם הערכים העצמיים של H, המהווים בסיס למרחב

$$\geq \underbrace{E_0}_{\min E_n} \sum_n \cancel{|\langle\phi_n\,|\,\psi\rangle|^2}^{1} = E_0 \tag{7.18}$$

החלק השני ־ אם יש שוויון ־ אז

$$\sum E_n\,|\langle\phi_n\,|\,\psi\rangle|^2 = E_0 \tag{7.19}$$

רק עבור $|\langle\phi_n\,|\,\psi\rangle| \neq 0$ כאשר $E_n = E_0$, ולכן

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_0} a_n \,|\phi_{0,i}\rangle \tag{7.20}$$

כלומר, ψהוא סכום לינארי של מצבים שהאנרגיות שלהם הוא אפס (g_0 הניוון של המצב העצמי) אם מצב הייסוד לא מנוון ־ אז $|\psi\rangle$ שייך לתת המרחב המנוון של מצב היסוד, ובכל מקרה,

$$\boxed{H\,|\psi_0\rangle = E_0\,|\psi_0\rangle} \tag{7.21}$$

■

- מה זה נותן לנו ־ אפשר "לנחש" מצב ולהשתמש בו לחסום את האנרגיה של מצב היסוד האמיתי.
  - שימוש עיקרי ־ בקירובים. במערכות גודלות עם הרבה דרגות חופש, ורוצים למצוא את מצב היסוד, ניתן לנחש משפחות של פונקציות ψ, ומינימיזציה על הפונקציות יתקרב למצב היסוד.
- שימוש עיקרי בקורס ־ להוכיח משפטים על משוואת שרדינגר במימד אחד.

משפט 7.3 למשוואת שרדינגר במימד 1 אין פתרונות מנוונים

הוכחה: נניח ש־ψ_1, ψ_2 פתרונות מנוונים.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_1 + V(x)\psi_1 = E_1\psi_1 \tag{7.22}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_2 + V(x)\psi_2 = E_1\psi_2 \tag{7.23}$$

$$0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\psi_2\partial_x^2\psi_1 - \psi_1\partial_x^2\psi_2\right) \tag{7.24}$$

$$W(x) = \psi_2\,(x)\,\partial_x\psi_2(x) - \psi_1(x)\partial_x\psi_2(x) \tag{7.25}$$

(זה הוורונסקוניאן שאנחנו מכירים ממד"ר) ואם

$$\frac{\partial}{\partial x}W\,(x) = 0 \tag{7.26}$$

אזי $W(x)$ קבוע.

$$|\psi_1(x)|\,, |\psi_2(x)|\,, |\psi_1'(x)|\,|\psi_2'(x)| \to 0 \tag{7.27}$$

עבור $x \to \pm\infty$, מתנאי הנירמול, והנגזרות ־ מסופיות האנרגיה.

$$E_k = \left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle = \int dx\psi^\star(x)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\partial_x^2\psi(x) \tag{7.28}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int dx\,|\partial_x\psi^\star(x)|^2 + \psi^\star\cancelto{0}{\partial_x\psi(x)} \tag{7.29}$$

סופי אך ורק אם $|\psi'(x)|^2 \to 0$ באינסוף, ולכן הוורונסקיאן , W, שווה לקבוע שהוא אפס.
הוכחנו ש־ $\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = 0$ נעביר אגפים ונחלק ־

$$\frac{d\ln\psi_1}{dx} = \frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{d\ln\psi_2}{dx} \tag{7.30}$$

וקיבלנו ש־

$$\ln\psi_1 = \ln\psi_2 + \lambda \tag{7.31}$$
$$\psi_1(x) = e^{\lambda}\psi_2(x) \tag{7.32}$$

כלומר, 2 הפונקציות שוות עד כדי קבוע. בנירמול ־ הקבוע הוא 1, ולכן הן אותה הפונקציה. ■

משפט 7.4 במימד אחד מצב היסוד חסר צמתים
כלומר ־ אם $\psi_0(x)$ מצב יסוד, ניתן לבחור אותו אי־שלילי ־ $\psi_0(x) > 0$ לכל x.

ראינו שבבור אינסופי ־ המצב מתאפס על שפת הבור. אבל ברגע שהבור סופי, מצב היסוד ידעך לאינסוף.
הוכחה: נניח, על דרך השלילה, שיש צומת ב־x_0^i. נגדיר $\bar{\psi}(x) = |\psi_0(x)|$ **(גם ל־$\bar{\psi}$ יש צמתים)**
נחשב את $\left\langle \bar{\psi}_0 \,\middle|\, H \,\middle|\, \bar{\psi}_0 \right\rangle$ ־

$$= \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle + \langle V(x) \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int dx \left(\left|\partial_x \bar{\psi}\right|^2 + V(x)\left|\bar{\psi}(x)\right|^2 \right) \tag{7.33}$$

אבל ψ מועלה בריבוע, אז הסימן שלו לא משנה, ולכן

$$= E_0 \tag{7.34}$$

ולפי עקרון הואריאציה, אם האנרגיה שווה ל־E_0, אזי המצב הוא מצב עצמי והוא מצב יסוד.
לכן, $\bar{\psi}_0$ הוא מצב יסוד.
קל לראות ש־$\psi_0, \bar{\psi}_0$ אינם תלויים לינארית, אם ψ_0 מחליף סימן ו־$|\psi|$לא, כלומר ־ $\bar{\psi}$ הוא מצב יסוד שאינו תלוי לינארית ב־ψ_0 וזו סתירה למשפט שמצבי שרדינגר במימד אחד לא מנוונים.
הגענו לכך שאין למצב יסוד אפשרות לחצות את האפס. ■

משפט 7.5 כל המצבים הקשורים במימד אחד, יכולים להבחר כפונקציות ממשיות.

הוכחה:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n'' + V(x)\psi_n = E_n\psi_n \tag{7.35}$$

נצמיד את המשוואה קומפלקסית:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n'' + V(x)\psi_n^\star = E_n\psi^\star \tag{7.36}$$

יש לנו 2 משוואות אם אותם משתנים ־ נגדיר $\varphi_n = \frac{\psi_n(x) + \psi_n^\star(x)}{\sqrt{2}}$.
ונטען ־

1. $\varphi_n(x)$ פתרון של משוואת שרדינגר
2. $\varphi_n(x)$ יש אותה אנרגיה E_n לא מנוון
3. φ_n פונקציה ממשית!

■

משפט 7.6 נתונים 2 אופרטורים הרמיטיים A, B מתחלפים.

$$[A, B] = 0 \tag{7.37}$$

אם הספקטרום של A לא מנוון - כל מצב עצמי של A הוא גם מצב עצמי של B.

הוכחה:

$$A\left|\phi_n\right\rangle = a_n\left|\phi_n\right\rangle \tag{7.38}$$

a_n ערך עצמי של A עם מצב עצמי $\left|\phi_n\right\rangle$.

$$A\left(B\left|\phi_n\right\rangle\right) = B\left(A\left|\phi_n\right\rangle\right) = a_n B\left|\phi_n\right\rangle \tag{7.39}$$

כלומר ,

$$A\underbrace{B\left|\phi_n\right\rangle}_{\left|\psi\right\rangle} = a_n\left|\psi\right\rangle \tag{7.40}$$

כלומר, $\left|\psi\right\rangle$ מצב עצמי של A עם ערך עצמי a_n. אבל הנחנו שהספקטרום של A אינו מנוון, ולכן $B\left|\phi_n\right\rangle = \lambda\left|\phi_n\right\rangle$ כי $\left|\psi\right\rangle$ ו- $\left|\phi_n\right\rangle$ תלויים לינארית. ולכן, לפי ההגדרה, λ הוא ערך עצמי של B עם המצב העצמי $\left|\phi_n\right\rangle$.

כלומר - מצבים עצמיים של A, B משותפים. ■

מסקנה 7.7 ולכן , הבסיס של A הוא גם הבסיס של B, שבו המטריצות אלכסוניות.

8 אוסצילטור הרמוני

הערה 8.1 עבור מצבים מנוונים של A, המשפט אינו בהכרח נכון, אבל ניתן **לבחור** בסיס משותף ש־A ו־B, כפי שנראה בהמשך.

8.1 הגדרת סקאלות מרחק וזמן

עבור אוסצילטור הרמוני, ההמילטוניאן הוא:

$$H = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{8.1}$$

סקלת תדירות - $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

משהגדרנו את הפוטנציאל ואת האנרגיה של חלקיק, נקבל שסקאלת האורך הקלאסית נתונה על ידי $E = \frac{1}{2}kx_{tp}^2$ (x_{tp} הוא המיקום של נקודת המפנה) ומתקבל ש-

$$x_{tp} = \sqrt{\frac{2E}{k}} \tag{8.2}$$

ממכניקה קוונטית - משוואת שרדינגר -

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi \tag{8.3}$$

אנחנו רוצים להפוך את המשוואה לחסרת מימדים. כרגע - יש לה מימדים של אנרגיה.

נגדיר סקאלת מרחק - $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$, נגדיר "מרחק חסר מימדים" - Scaled distance - $\xi = \frac{x}{\lambda}$.
ונרשום את משוואת שרדינגר עבור ξ.

נציב $x = \frac{\xi}{\lambda}$ ו- $\frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial x}$ ו- $\frac{1}{\lambda^2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. משוואת שרדינגר שתתקבל מורכבת מאנרגיה קנטית -

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2} = -\frac{1}{\lambda^2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \tag{8.4}$$

והאנרגיה הפוטנציאלית -

$$\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\xi^2 \tag{8.5}$$

וההמילטוניאן שלנו יהיה

$$\overbrace{\frac{1}{2}\underbrace{\hbar\omega_0}_{\text{energy}}\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2\right]}^{H}\psi(\xi) = E\psi(\xi) \tag{8.6}$$

וקיבלנו את סקאלת האנרגיה שלנו - $\hbar\omega_0$ "קוונטה של אנרגיה".

$$\psi(\xi) = \psi\left(\frac{x}{\lambda}\right) \tag{8.7}$$

כאשר כשמנרמלים פונקציות ב-ξ, נגדיר את המכפלה הסקאלרית -

$$\langle \psi \,|\, \xi \rangle = \int d\xi\, \bar{\psi}^\star(\xi)\bar{\varphi}(\xi) \tag{8.8}$$

הגדרה זו נבדלת במימדים - $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\psi\left(\xi\right)$.

8.1.1 התנהגות אסימפטוטית

המשוואה

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\xi^2-\left(\frac{E}{\hbar\omega_0}\right)\right)\psi=0 \tag{8.9}$$

נקח ־ $\xi^2 \gg \frac{E}{\hbar\omega_0}$ ־ כאשר המרחק שבו אנחנו נמצאים רחוק משמעותית מנקודת המפנה הקלאסית ־ באזור האסור.

נזניח את $\frac{E}{\hbar\omega_0}$, והפתרון יהיה $\psi \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$.

נשים לב, שבאזור האסור ־ הפונקציה דועכת כגאוסיאן. להבדיל מפוטנציאל קבוע ־ שבו הפונקציה דעכה באזור האסור כאספוננט.

באוסצילטור הרמוני ־ לא יהיו מצבי רצף, משום שמחסום הפוטנציאל עולה עד אינסוף, ולכן ־ במרחק מספיק גדול מהמרכז, תמיד יהיה אסור אסור.

8.2 אופרטורי העלאה והורדה

אופרטור העלאה $a^\dagger$, אופרטור ההורדה a

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{x}{\lambda}\right)+ip\frac{\lambda}{\hbar}\right]=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right) \tag{8.10}$$

נסתכל על המימדים ־ $\lambda=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ בעל מימדים של אורך. $\hbar/\lambda$ יש מימדים של תנע, ולכן a חסר מימדים.

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda}-ip\frac{\lambda}{\hbar}\right) \tag{8.11}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}\right) \tag{8.12}$$

נחשב את יחס החילוף ־

$$\left[a,a^\dagger\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\frac{x}{\lambda},\frac{-ip\lambda}{\hbar}\right]+\left[\frac{ip\lambda}{\hbar},\frac{x}{\lambda}\right]\right)=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1 \tag{8.13}$$

כלומר, $\left[a,a^\dagger\right]=1$, או $aa^\dagger-a^\dagger a=1$.

8.2.1 מצבי מספר

הגדרה 8.2 נגדיר אופרטור מספר $\hat{\mathbf{N}}=a^\dagger a$. הוא הרמיטי ־

$$\hat{\mathbf{N}}^\dagger=\left(a^\dagger a\right)^\dagger=a^\dagger a=\hat{\mathbf{N}} \tag{8.14}$$

יש לו בסיס אורטוגונלי של מצבים עצמיים ־ $|\varphi_n\rangle$ המקיימים

$$\hat{\mathbf{N}}\left|\varphi_n\right\rangle=n\left|\varphi_n\right\rangle \tag{8.15}$$

כאשר כרגע ־ n ממשי (בהמשך נוכיח ש־n חייב להיות טבעי..)

נחשב את יחס החילוף -

$$\left[\hat{\mathbf{N}},a^{\dagger}\right]=\left[a^{\dagger}a,a^{\dagger}\right]=a^{\dagger}\left[a,a^{\dagger}\right]=a^{\dagger} \tag{8.16}$$

אזי $a^{\dagger}$ הוא אופרטור עצמי של $\hat{\mathbf{N}}$.

$$\left[\hat{\mathbf{N}},a\right]=\left[a^{\dagger}a,a\right]=\left[a^{\dagger},a\right]a=-a \tag{8.17}$$

גם a הוא אופרטור עצמי של $\hat{\mathbf{N}}$, עם ערך עצמי -1

משפט 8.3 אם $\left|\varphi_n\right\rangle$ מצב עצמי של אופרטור המספר $\hat{\mathbf{N}}$, אזי גם $a^{\dagger}\left|\varphi_n\right\rangle$ הוא מצב עצמי של $\hat{\mathbf{N}}$.

הוכחה: $N\left|\varphi_n\right\rangle=n\left|\varphi_n\right\rangle$.

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{N}}a^{\dagger}\left|\varphi_n\right\rangle &= a^{\dagger}\underbrace{aa^{\dagger}}_{=a^{\dagger}a+1}\left|\varphi_n\right\rangle=a^{\dagger}\left(\underbrace{a^{\dagger}a}_{\hat{\mathbf{N}}}+1\right)\left|\varphi_n\right\rangle && (8.18)\\ &= (n+1)\,a^{\dagger}\left|\varphi_n\right\rangle && (8.19)\end{aligned}$$

ועבור

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{N}}a\left|\varphi_n\right\rangle &= \underbrace{a^{\dagger}a}_{=aa^{\dagger}-1}\,a\left|\varphi_n\right\rangle && (8.20)\\ &= aa^{\dagger}a\left|\varphi_n\right\rangle-a\left|\varphi_n\right\rangle && (8.21)\\ &= (n-1)\,a\left|\varphi_n\right\rangle && (8.22)\end{aligned}$$

■

זה מסביר את השם - אופרטורי העלאה והורדה- הם מעלים (מורידים) את המצב העצמי של $\hat{\mathbf{N}}$ מתת־מרחב עם מצב עצמי n ל־$n+1$ ($n-1$)

- אופרטור ההעלאה - $a^{\dagger}$ - raising (Creation operator)
- אופרטור הורדה - a - lowering (annihilation operator)

הערה 8.4 המצבים החדשים שנוצרו - אינם מנורמלים

משפט 8.5 כל הערכים העצמיים של $\hat{\mathbf{N}}$, n, אי שליליים - $n\geq 0$

הוכחה: לכל ψ מתקיים - $\left\langle\psi\middle|\hat{\mathbf{N}}\middle|\psi\right\rangle\geq 0$

$$\left\langle(\psi\mid a^{\dagger})(a\mid\psi)\right\rangle=\left\|a\left|\psi\right\rangle\right\|^2\geq 0 \tag{8.23}$$

■

8.3 פתרונות אוסצילטור הרמוני

נזכר שההמילטוניאן הוא

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \left[-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \xi^2\right] \tag{8.24}$$

ו־

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right) && (8.25)\\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right) && (8.26)\\ a^\dagger a + a a^\dagger &= \frac{1}{2}\left[\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\right] && (8.27)\\ &= \xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} && (8.28) \end{aligned}$$

אזי ההמילטוניאן שלנו הוא

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\hbar^2\omega_0\left(a^\dagger a + a a^\dagger\right) && (8.29)\\ &= \hbar\omega_0\left(\hat{\mathbf{N}} + \frac{1}{2}\right) && (8.30) \end{aligned}$$

ולכן המצבים העצמיים של H הם $|\varphi_n\rangle$ עם ערך עצמי

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{8.31}$$

כאשר n מספרים אי־שליליים.

משפט 8.6 קיים מצב אחד עם $n = 0$, והוא נתון על ידי המשוואה

$$a\,|\varphi_0\rangle = 0 \tag{8.32}$$

הוכחה: $a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)$ וננחש - $\varphi_0 = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + (-\xi)\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0 \tag{8.33}$$

נוודא שזהו מצב עצמי של $\hat{\mathbf{N}}$ -

$$\hat{\mathbf{N}}\,|\varphi_0\rangle = a^\dagger a\,|\varphi_0\rangle = 0\,|\varphi_0\rangle \tag{8.34}$$

ו־$|\varphi_0\rangle$ יחיד מכיוון שאין להמילטוניאן, H , ניוון במימד אחד. ■

נפעיל $a^\dagger|\varphi_0\rangle$, נקבל מצב עצמי של $\hat{\mathrm{N}}$ עם ערך עצמי 1.

נפעיל $\left(a^\dagger\right)^2|\varphi_0\rangle$ ונקבל מצב עצמי של $\hat{\mathrm{N}}$ עם ערך עצמי 2.

כלומר, ניתן ליצר סולם של מצבים עצמיים של $\hat{\mathrm{N}}$ עם ערכים עצמיים טבעיים ־

$$|\varphi_n\rangle = \left(a^\dagger\right)^n|\varphi_0\rangle \qquad n=0,1,2,3,\ldots,\infty \tag{8.35}$$

כל אלו הם מצבים לא מנורמלים.

אנרגיות של ההמילטוניאן יהיו ־$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$.

עוד לא הראנו שכל הספקטורם מתואר על ידי הרשימה הזו ־

משפט 8.7 כל המצבים העצמיים של $\hat{\mathrm{N}}$ (וגם H) נתונים על ידי n טבעיים

הוכחה: נניח שקיים מצב שלו $n=\nu$ לא שלם (וסופי) (הוכחנו כבר ש־n אינו שלילי)

נפעיל על $|\varphi_\nu\rangle$ את a^nאז

$$a^n|\varphi_\nu\rangle = |\varphi_{\nu-n}\rangle \neq 0 \tag{8.36}$$

המצב איננו אפס, כי רק המצב $|\varphi_0\rangle$ מתאפס על ידי הפעלת a (בכלל יחידות הפתרון עבור משוואה דיפרנציאלית מסדר ראשון)

עבור n מספיק גדול ־ נקבל $|\varphi_{\nu-n}\rangle$ כאשר $\nu-n$ שלילי.

אזי, למצב העצמי $|\varphi_{\nu-n}\rangle$ יש ערך עצמי שלילי ־ בסתירה לכך שכל הערכים העצמיים של $\hat{\mathrm{N}}$ חיוביים.

■

עבור מספרים טבעיים ־ קיים מצב יסוד ־ $|\varphi_0\rangle$, המחוסל על ידי a. המצב הלא־טבעי שקיבלנו, ν, אינו מחוסל על ידי a משום שלמשוואה $a|\varphi\rangle=0$ יש רק פתרון אחיד ־ והוא $|\varphi_0\rangle$.

- ידוע שמצב היסוד הוא $\varphi_0(\xi)=\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$
- עירור (Excitation) ־ $a^\dagger|\varphi_0\rangle=|\varphi_1\rangle$

$$|\varphi_1\rangle \propto a^\dagger|\varphi_0\rangle \tag{8.37}$$

$$\varphi_1(\xi) = A\left(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)e^{-\frac{1}{2}\xi} = A\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{8.38}$$

$$\varphi_2(\xi) = A\left(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\left(\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right) = B\left(4\xi^2-2\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{8.39}$$

- בצורה הכללית ־

$$\left\langle\xi\,\middle|\,\left(a^\dagger\right)^n\varphi_0\right\rangle = \left(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{8.40}$$

או, פולינום הרמיט ־

$$= AH_n(\xi)\,e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{8.41}$$

והאנרגיות העצמיות נתונים על ידי $n = 0, 1, 2, \ldots \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0$

נשים לב שהמרחקים בין מצבי אנרגיה סמוכים הם קבועים - $\hbar\omega_0$. והאנרגיה של מצב היסוד היא $0 \geq \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ - בגלל אי הודאות.

זה נקרא - Zero point motion - וזו האנרגיה המינימלית האפשרית במצב היסוד של אוסצילטור הרמוני.

8.4 התמרת הרמיט

$|\varphi_n\rangle$- פורש את המרחב כבסיס שלם. בסיס בדיד (בן־מניה)

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n| \tag{8.42}$$

$$\langle \xi \,|\, I \,|\, \xi' \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(\xi)\, \varphi_n(\xi') = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\, H_n(\xi')\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \tag{8.43}$$

$$= \delta(\xi - \xi') \tag{8.44}$$

את הנירמול של המצבים העצמיים $|\varphi_n\rangle$ קל לקבל.

נניח כי $|\varphi_0\rangle$ מנורמל -

$$\left\| a^\dagger |\varphi_0\rangle \right\| = \left\langle \varphi_0 \,\middle|\, a a^\dagger \,\middle|\, \varphi_0 \right\rangle \tag{8.45}$$

$$= \left\langle \varphi_0 \,\middle|\, \hat{\mathbf{N}} + 1 \,\middle|\, \varphi_0 \right\rangle = 1 \tag{8.46}$$

אזי

$$\left\| \left(a^\dagger |\varphi_n\rangle\right) \right\|^2 = \left\langle \varphi_n \,\middle|\, a a^\dagger \,\middle|\, \varphi_n \right\rangle = (n+1) \langle \varphi_n \,|\, \varphi_n \rangle \tag{8.47}$$

$$|\varphi_{n+1}\rangle = \frac{a^\dagger |\varphi_n\rangle}{\sqrt{n+1}} \tag{8.48}$$

ובאופן כללי -

$$\frac{\left(a^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}} = \frac{\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{8.49}$$

פולינומי הרמיט מנורמלים.

הפתרון הכללי הוא -

$$\varphi_n = A_n H_n(\xi)^{-\frac{\xi^2}{2}} \tag{8.50}$$

כאשר $A_n = \left(2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}\right)^{-\frac{1}{2}}$.

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \tag{8.51}$$

עבור מערכת קלאסית - $\frac{m}{\hbar}$ מאוד גדול - האקספוננט דועך מאוד מהר - ומצב היסוד של חלקיק עם מסה גדולה מאוד מרוכז סביב המינימום (כלומר - מנוחה).
נקודת חזרה קלאסית מתקיימת כאשר $V(x_{tp}) = \frac{1}{2}m\omega_0 x_{tp}^2 = E = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$, אזי, עבור מצב היסוד -

$$x_{tp} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} = \lambda \tag{8.52}$$

במקרה הקוונטי - יש לנו Zero point motion באורך λ .

8.5 ערכי תצפית

נסמן - $|\varphi_n\rangle = |n\rangle$.

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{\lambda} + i\frac{p\lambda}{\hbar}\right] \tag{8.53}$$

אזי, אפשר לכתוב את $\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}$ -

$$\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\lambda\left(a + a^\dagger\right) \tag{8.54}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\sqrt{2}}\frac{\hbar}{\lambda}\left(a - a^\dagger\right) \tag{8.55}$$

נזכיר -

$$a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{8.56}$$

$$a^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{8.57}$$

$$\langle m|a|n\rangle = \delta_{m.n-1}\sqrt{n} \tag{8.58}$$

$$\left\langle m|a^\dagger|n\right\rangle = \delta_{m,n+1}\sqrt{n+1} \tag{8.59}$$

$$\langle m\,|\,x\,|\,n\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(\delta_{m,n-1}\sqrt{n} + \delta_{m,n-1}\sqrt{n+1}\right) \tag{8.60}$$

$$\langle m|x|n\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & 0 \end{pmatrix} \tag{8.61}$$

אזי $\langle n|x|n\rangle = 0$ ו-$\langle x|p|n\rangle = 0$ (עבור אוסצליטור הרמוני שרוכז סביב אפס). אבל אפשר היה להגיע לזה גם מטעמי סימטריה.
$\langle p^2\rangle$ - אנרגיה קינטית, ועבור אוסצילטור הרמוני -$\langle x^2\rangle$ - אנרגיה קינטית.

$$x^2 = \frac{\lambda^2}{2}\left(a^\dagger a^\dagger + aa + a^\dagger a + aa^\dagger\right) \tag{8.62}$$

שני האופרטורים ההרימטיים - $a^\dagger a, aa^\dagger$, תורמים איברים ל- $\langle n|x^2|n\rangle$-

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\lambda^2}{2}\left\langle n|2\hat{\mathbf{N}}+1|n\right\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\lambda^2 \tag{8.63}$$

ועבור p -

$$p^2 = -\left(\frac{\hbar}{\lambda}\right)^2\frac{1}{2}\left(aa + a^\dagger a^\dagger - a^\dagger a - aa^\dagger\right) \tag{8.64}$$

אזי

$$p^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2}(n+1) \tag{8.65}$$

נחשב את אי הודאות -

$$\sqrt{\langle x^2\rangle}\sqrt{\langle p^2\rangle} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{8.66}$$

8.6 אבולוציה (דינמיקה) של ערך התצפית של x במצב $|\psi\rangle$

כאשר ב-$t=0$, נתון - $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle$.

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\psi_n|n\rangle \tag{8.67}$$

כאשר $\psi_n = \langle n|\psi_0\rangle$.

$$\begin{aligned}\langle\psi_0|x|\psi_0\rangle &= \sum_{n,m}\langle n\,|\,\psi_n^\star x\psi_m\,|\,m\rangle && (8.68)\\ &= \sum_{n,m}\psi_n^\star\psi_m\langle n|x|m\rangle && (8.69)\\ &= \lambda\sum_n\left(\psi_{n+1}^\star\psi_n\sqrt{\frac{n+1}{2}} + \psi_{n-1}^\star\psi_n\sqrt{\frac{n-1}{2}}\right) && (8.70)\end{aligned}$$

נשנה את משתנה הסכימה - ונקבל -

$$= \lambda\sum_n\psi_{n+1}^\star\psi_n\sqrt{\frac{n+1}{2}} + \sum_{n'}\psi_{n'-1}^\star\psi_{n'}\sqrt{\frac{n'-1}{2}} \tag{8.71}$$

ועבור $n'-1=n$ נקבל -

$$= \lambda\sum\left(\psi^\star_{n+1}\psi_n+\psi^\star_n\psi_{n+1}\right)\sqrt{\frac{n+1}{2}} \tag{8.72}$$

$$= 2\Re\left(\lambda\sum_n\psi_{n+1}\psi_n\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right) \tag{8.73}$$

עבור $t>0$ -

$$\psi_n\to e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n \tag{8.74}$$

ונזכר ש- $E_n=\hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$.

$$\psi^\star_{n+1}\psi_n \to \underbrace{e^{i\frac{E_{n+1}}{\hbar}t-\frac{iE_nt}{\hbar}}}_{i\omega_0t}\psi^\star_{n+1}\psi_n \tag{8.75}$$

$$\langle x\rangle_t = 2\lambda\Re\left(\sum_n e^{i\omega_0t}\psi^\star_{n+1}\psi_n\right) \tag{8.76}$$

$$= 2\lambda\Re\left(e^{i\omega t}\underbrace{\sum_n\psi^\star_{n+1}\psi_n\sqrt{\frac{n+1}{2}}}_{\frac{1}{2\lambda}x\text{max}^{e^{i\phi}}}\right) \tag{8.77}$$

$$= x_{\text{max}}\cos\left(\omega_0t+\phi\right) \tag{8.78}$$

8.7 הסתברות

האם יש מובן קלאסי לצפיפות ההסתברות $\left|\varphi_n\left(x\right)\right|^2$?

איך נראת הסתברות לחלקיק קלאסי באנרגיה E, להמצא באזור $(x,x+dx)$. כלומר, באיזה חלק מהזמן הוא "מבלה" באזור הדרוש (יחסית לחצי זמן מחזור)

$$P_{x,x+dx} = \frac{dt\left(x\right)}{T_0/2} \tag{8.79}$$

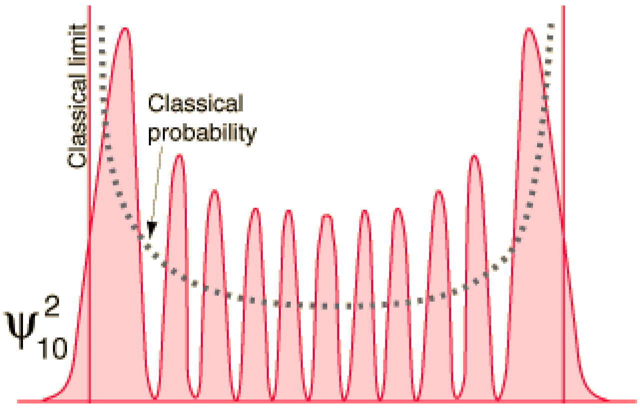
$$\frac{dt}{dx} = = \frac{1}{dx/dt}=\frac{1}{v(x)}=\frac{1}{\sqrt{\frac{(E-V(x))\cdot 2}{m}}} \tag{8.80}$$

ובהצבת $E=\frac{1}{2}m\omega^2x_{tp}^2$

$$= \frac{1}{\omega_0\sqrt{x_{tp}^2-x^2}} \tag{8.81}$$

אזי, ההסתברות הקלאסית

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x_{tp}^2 - x^2}} \tag{8.82}$$



(מתוך: hyperphysics)

8.8 שני אוסצילטורים

$$H^{2D} = \frac{P_x^2}{2m_x} + \frac{P_y^2}{2m_y} + \frac{1}{2}m_x\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m_y\omega_x^2 x^2 \tag{8.83}$$

x, y קוראדינטות בלתי תלויות - $[x, y] = 0$ ו־$[P_x, P_y] = 0$ ו־$[x_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$. אלו הם יחסי חילוף קאנונים.

נסתכל על יחס החילוף -

$$[H_x, H_y] = 0 \tag{8.84}$$

ולכן ניתן לכסן אותם סימולטנית - יש להם מצבים עצמיים משותפים.

פתרון של אוסצילטור דו־מימדי -

$$\psi_{n_x,n_y}(x, y) = \varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y) \tag{8.85}$$

אזי

$$(H_x + H_y)\left(\varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y)\right) = (H_x\varphi_{n_x})\varphi_{n_y} + \varphi_{n_y}\left(H_y\varphi_{n_y}\right) \tag{8.86}$$

$$= E_{n_x}\varphi_{n_x}\varphi_{n_y} + \varphi_{n_x}E_{n_y\varphi_{n_y}} \tag{8.87}$$

$$= \left(E_{n_x} + E_{n_y}\right)\varphi_{n_x}(x)\,\varphi_{n_y}(y) \tag{8.88}$$

הספקטרום יהיה

$$E = \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n_x, n_y = 0, 1, \ldots, \infty \tag{8.89}$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\left(\omega_x + \omega_y\right) \tag{8.90}$$

היות ואנחנו כבר לא במימד אחד - יתכן ניוון.
למשל, כאשר $\omega_x = \omega_y = \omega_0$

$$E_{n_x,n_y} = (n_x + n_y + 1)\,\hbar\omega_0 \tag{8.91}$$

אזי ל־$\varphi_0(x)\varphi_1(y)$ יש אותו ערך עצמי כמו ל־$\varphi_1(x)\varphi_0(y)$, וכמות הניוונים עולה ככל שמתרחקים ממצב היסוד.
באופן כללי, הניוון $g(N) = n + 1$ כאשר $E = (N+1)\,\hbar\omega$

ניוון דומה קורה בבור־פוטנציאל דו מימדי (שאורך צלעו L)

$$\varphi_{nx,n_y} = \left(\frac{2}{L}\right)\sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \tag{8.92}$$

ולכן גם האנרגיות יהיו

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\left(n_x^2 + n_y^2\right)\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \tag{8.93}$$

(וברור שיש ניוון...)

8.9 שני אוסצילטורים צמודים

כאשר יש להם אותה תדירות ואותה המסה - אבל יש צימוד לינארי בינהם.

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\left(x^2 + y^2\right) + \gamma xy \tag{8.94}$$

במקרה הפשוט הזה, כש־ $H \neq H_x + H_y$, אבל H הוא תבנית בי־לינארית סימטרית, ולכן ניתן ללכסן את המטריצה המייצגת (שמקיימת $\begin{pmatrix} x & u \end{pmatrix}(K)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$). נרצה לכתוב טרנספורמציה קאנונית למקרה שבו הקואורדינטות יהיו בלתי תלויות $(x,y) \to (\xi,\eta)$ ו־$(p_x,p_y) \to (P_\xi,P_\eta)$

$$\xi = \frac{x+y}{\sqrt{2}} \tag{8.95}$$

$$\eta = \frac{x-y}{\sqrt{2}} \tag{8.96}$$

$$P_\xi = \frac{P_x + P_y}{\sqrt{2}} \tag{8.97}$$

$$P_\eta = = \frac{P_x - P_y}{\sqrt{2}} \tag{8.98}$$

$$[\xi, P_\xi] = \left[\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{P_x + P_y}{\sqrt{2}}\right] = i\hbar \tag{8.99}$$

צריך למצוא המילטוניאן ספרבילי -

$$H = H_\xi + H_\eta \tag{8.100}$$

עם קוארדינות קאנוניות המקיימות $[\xi, P_\xi] = i\hbar$ וכל השאר- 0 .

$$\begin{aligned}
P_x &= \frac{P_\xi + P_\eta}{\sqrt{2}} && (8.101)\\
P_y &= \frac{P_\xi - P_\eta}{\sqrt{2}} && (8.102)\\
H &= \frac{P_\xi^2}{2m} + \frac{P_\eta^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\left[\left(\frac{\xi+\eta}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{\xi-\eta}{\sqrt{2}}\right)^2\right] - \gamma\left(\frac{\xi^2-\eta^2}{2}\right) && (8.103)\\
&= \frac{P_\xi^2 + P_\eta^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(m\omega_0^2 + \gamma\right)\xi^2 + \frac{1}{2}\left(m\omega_0^2 + \gamma\right)\eta^2 && (8.104)\\
&= H_\xi + H_\eta && (8.105)
\end{aligned}$$

והפתרונות הן פונקציות עצמיות של ξ, η

$$\varphi(\xi,\eta) = \varphi_{n_\xi}(\xi)\,\varphi_{n_\eta}(\eta) \tag{8.106}$$

ולכן

$$\begin{aligned}
E_{n_\eta n_\xi} &= \left(n_\xi + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\xi + \left(n_\eta + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\eta && (8.107)\\
\omega_\xi &= \sqrt{\left(\omega_0^2 + \frac{\gamma}{m}\right)} && (8.108)\\
\omega_\eta &= \sqrt{\left(\omega_0^2 - \frac{\gamma}{m}\right)} && (8.109)
\end{aligned}$$

חלק IV

בעיות עם מספר מימדים

9 חלקיק על טבעת

עד כה דיברנו על מרחב הילברט L^2, שבו הפונקציות אינטגרביליות בריבוע (Square Integrable) מ־$-\infty$ ל־∞.

ניתן לדבר גם על מרחב הילברט המוגדר על טבעת - מעגל, השוכן במישור -

$$0 \le x \le L \tag{9.1}$$

מרחב ההילברט הוא $\left\{ \psi(x) \;\middle|\; \begin{array}{c} \psi(0)=\psi(L) \\ \frac{\partial\psi}{\partial x}\big|_{x=0} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\big|_{x=L} \end{array} \right\}$, בתנאי ש־ $\int_0^L dx\,|\psi|^2 < \infty$.
אופרטור התנע ־

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{9.2}$$

המכפלה הפנימית היא

$$(\varphi,\psi) = \int_0^L \varphi^\star\psi\,dx \tag{9.3}$$

ואז יהיה

$$\begin{aligned} \langle\varphi\,|\,p\,|\,\psi\rangle &= -i\hbar\int_0^L \varphi^\star\frac{\partial}{\partial x}\psi & (9.4)\\ &= \overset{\varphi(0)=\varphi(L)}{\cancel{-i\hbar\varphi^\star\psi|_0^L}} - i\hbar\int dx\,(\partial_x\varphi^\star)\,\psi & (9.5)\\ &= (\langle\psi\,|\,p\,|\,\varphi\rangle)^\star & (9.6) \end{aligned}$$

9.0.1 המילטוניאן חופשי

$$H = -\frac{p^2}{2m} \tag{9.7}$$

נראה שהוא מתחלף עם התנע ־ $[H,p]=0$. נמצא מצבים עצמיים של p־

$$\begin{aligned} \psi_{k_n}(x) &= \sqrt{\frac{1}{L}}e^{ik_nx} & (9.8)\\ P\psi_{k_n} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sqrt{\frac{1}{L}}e^{ik_nx} = \hbar k_n\psi_n(x) & (9.9) \end{aligned}$$

תנאי השפה ־ $\psi(L)=\psi(0)$ ־

$$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-ik_nL} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{ik_n0} \tag{9.10}$$

ולכן ־ $\boxed{k_nL = 2\pi\cdot n}$ ־ התנע מקוונטת ־

$$\boxed{P_n = \frac{n\hbar 2\pi}{L} = \frac{h}{L}\cdot n} \tag{9.11}$$

והמצבים העצמיים של האנרגיה הם ־

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m} = \frac{h^2}{mL^2}\cdot n^2 \tag{9.12}$$

המצבים העצמיים של E_n הם נקודות בדידות על פני פרבולה . יש ניוון בתנע.
ערך התצפית של התנע עבור מצב n הוא $\langle p_n \rangle = n\frac{h}{L}$ - אנחנו מקבלים מצב שבו יש ערך תצפית לתנע!
(נשים לב שהאנרגיה של החלקיק במצב היסוד היא 0, להבדיל מחלקיק בקופסא. זה בגלל שבמצב היסוד, המיקום של החלקיק סימטרי לכל הטבעת - כלומר, אי הודאות במקום היא מקסימלית - על כל הטבעת)

9.1 חלקיק בשדה מגנטי

נוסיף למערכת שדה מגנטי. נעשה זאת על ידי שינוי אופרטור התנע - $\mathbf{p} \to \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$. כאשר $\vec{\boldsymbol{\nabla}} \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$.

$$\int_c d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A} = \oint_{s_c} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \Phi \tag{9.13}$$

אזי, בפיסיקה קלאסית, H יהיה $H = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} = \frac{\left(-i\hbar\vec{\boldsymbol{\nabla}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m}$ ואותו דבר במכניקה קוונטית. אבל בצורה יותר יפה -

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\left(\vec{\boldsymbol{\nabla}} + \frac{ie}{\hbar c} \cdot \mathbf{A}(x)\right)^2 \tag{9.14}$$

9.1.1 חלקיק על טבעת עם שטף מגנטי Φ

$$\int_0^L A(x) \cdot dx \tag{9.15}$$

$$A = \left(\frac{\Phi}{L}\right)\hat{\mathbf{x}} \tag{9.16}$$

וההמילטוניאן שלנו יהיה

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\frac{ie}{\hbar c}}_{1/\Phi_0}\left(\frac{\Phi}{L}\right)\right)^2 \tag{9.17}$$

האיבר Φ_0 מכונה שטף קוונטי (Flux quantum), $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$, והוא קבוע יסודי של הטבע (או מכפלה של כאלה)
המצבים העצמיים הם שוב

$$\psi_{k_n} = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{ik_n x} \tag{9.18}$$

כאשר $k_n = \left(\frac{2\pi}{L}\right) n$. הערכים העצמיים הם (במרחב הזה, n יכול להיות שלילי)

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x + i\left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\left(\frac{2\pi}{L}\right)\right)^2\psi \tag{9.19}$$

יהיו -

$$E_n(\Phi) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\left(n + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \tag{9.20}$$

שזו הזזה של $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ של המצבים העצמיים.

$$E_0 = \left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \hbar^2\left(\frac{2\pi}{L}\right)\frac{1}{2m} \tag{9.21}$$

מכאן, קל לראות שאם מוסיפים קוונטה שלמה של $\frac{\Phi}{\Phi_0}$, זה מזיז את המצבים ביחידה שלמה בינהם - ושקול להעדר שטף מגנטי כלל.

9.1.2 מהירות

נזכיר את **משפט ארנפסט** - $\langle\dot{x}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[x,H]\rangle$ (כאשר עבור המילטוניאן רגיל - $\langle\dot{x}\rangle = \frac{\langle p\rangle}{2m}$)

$$H = \frac{\left(p - \frac{e}{c}A\right)}{2m} \tag{9.22}$$

$$v = \langle\dot{x}\rangle = \left\langle\frac{1}{i\hbar}[x,H]\right\rangle = \left\langle\left[\frac{\partial}{\partial p}H\right]\right\rangle = \frac{\left\langle p - \frac{e}{c}A\right\rangle}{m} \tag{9.23}$$

אזי עבור חלקיק עם שדה מגנטי - משפט אהרנפסט יהיה

$$v = \langle\dot{x}\rangle = \frac{\left\langle p - \frac{e}{c}A\right\rangle}{m} \tag{9.24}$$

אז ערך תצפית של המהירות במצב k_n יהיה

$$v = \frac{\hbar\left(k_n - \frac{\phi}{\phi_0}\frac{2\pi}{L}\right)}{m} \tag{9.25}$$

ובמצב היסוד - $k_n = 0, n = 0$

$$E_0 = \left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \hbar^2\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\frac{1}{2m} \tag{9.26}$$

אזי

$$\langle v_0\rangle = \frac{\hbar \Phi/\Phi_0 2\pi}{m \cdot L} \tag{9.27}$$

כלומר - גם המצב יסוד יש זרימה תמידית, שאינה משתנה עם הזמן, התלויה ב-Φ. למצב הזה קוראים Persistemt current, "זרם תמידי". כלומר - אין **דעיכה** של המהירות מתחת למהירות בסיס מסויימת.
(מצבים דומים, במצב מאקרוסקופי, אפשר למצוא בעל-מוליכים ובעל-נוזלים)
המצבים העצמיים של האנרגיה במערכת הזו הם מרוכבים

9.2 אפקט בוהם־אהרונוב

(בוהם לימד בטכניון, אהרונוב היה סטודנט שלו לתואר שני כשהוא פיתח את האפקט)

בניסוי 2 סדקים, שולחים אלקטרונים, ומאפשרים להם להתפזר מעבר למסך. מעבר למסך, יש סליל אינסופי שמייצר שדה מגנטי B במרכזו, ולא מייצר שדה אל מחוצה לו.

האלקטרון לא נכנס לאיזור שבו יש שדה מגנטי. במצב הקלאסי ־ לא יהיה הבדל האם הסליל "יפעל" או לא.

במקרה הקוונטי־ שדה מגנטי בתוך הסליל יזיז את תמונת ההתאבכות כפונקציה של $\frac{\Phi}{\Phi_0}$.

כלומר, $\mathbf{B}=0$, אבל וקטור הפוטנציאל $\mathbf{A}\neq 0$.

9.3 חוק שימור הזרם

9.3.1 זרם של צפיפות הסתברות

זרם קלאסי (בנוזל, נניח) ־ $\mathbf{j}=\rho(x)\mathbf{v}(x)$ (כאשר ρ היא הצפיפות ו־$\mathbf{v}$ מהירות התנועה)

השטף I_S העובר ביחידת שטח S יהיה $\int d\mathbf{s}\cdot\mathbf{j}$.

בפונקצית גל של שרדינגר ־

$$\rho\left(\mathbf{x}\right)=\left|\psi(\mathbf{x})\right|^{2} \tag{9.28}$$

מהי צפיפות הזרם? כדי לחשב אותה נצטרך למצוא את אופרטור הזרם.

אופרטור הצפיפות בנקודה x_0הוא $\hat{\rho}(x_0)=\left|x_0\right)\left(x_0\right|$.

$$\left\langle \psi\left|\,\rho\,\right|\psi\right\rangle =\left\langle \psi|x_{0}\right)\left(x_{0}|\psi\right\rangle =\left|\psi\left(x_{0}\right)\right|^{2} \tag{9.29}$$

אופרטור המהירות למשוואת שרדינגר (ללא שדה מגנטי) הוא $\hat{\mathbf{v}}=\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}$.

צפיפת הזרם תהיה (כדי שהאופרטור יהיה הרמיטי)

$$\hat{\mathbf{j}}=\frac{\rho\mathbf{v}+\mathbf{v}\rho}{2}=\frac{1}{2m}\left[\left|x_{0}\right)\left(x_{0}\right|\mathbf{p}+\mathbf{p}\left|x_{0}\right)\left(x_{0}\right|\right] \tag{9.30}$$

ערך תצפית של $\mathbf{j}\left(\mathbf{x}_0\right)$ הוא

$$\left\langle \psi\left|\hat{\mathbf{j}}\left(x_{0}\right)\right|\psi\right\rangle =-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^{\star}\left(x_{0}\right)\vec{\boldsymbol{\nabla}}\psi\left(x_{0}\right)-\vec{\boldsymbol{\nabla}}\psi^{\star}\left(x_{0}\right)\psi\left(x_{0}\right)\right] \tag{9.31}$$

אם נניח למשל, $\psi=Ne^{-kx}$ אזי

$$\mathbf{j}\left(x\right)=\hat{\mathbf{x}}\left(\frac{\hbar k}{m}\right)N^{2} \tag{9.32}$$

(כלומר, בכיוון $\hat{\mathbf{x}}$ הנמדד)

משוואת שרדינגר ־

$$i\hbar\dot{\psi}=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi+V(x)\psi \tag{9.33}$$

נצמיד אותה קומפלקסית -

$$-i\hbar\psi^\star = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^\star + V(x)\psi^\star \tag{9.34}$$

(הנחנו ש־V ממשי) נכפיל את המשוואה הרגילה ב־$\psi^\star(x)$, ואת הקומפלקסית ב־$\psi(x)$, ונחסר בינהן -

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^\star\nabla^2\psi - \nabla^2\psi^\star\psi\right)}_{\star} \tag{9.35}$$

באמצעות אינטגרציה בחלקים - נרשום את צד ימין בצורה הבאה -

$$(\star) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\left(\psi^\star\vec{\nabla}\psi - \vec{\nabla}\psi^\star\psi\right) \tag{9.36}$$

נראה את המעבר הזה -

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^\star\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial}{\partial x}\psi^\star\psi\right] + \frac{\partial}{\partial y}[\cdots] + \frac{\partial}{\partial z}[\cdots] \tag{9.37}$$

$$= \left[\cancel{\frac{\partial}{\partial x}\psi^\star\frac{\partial}{\partial x}}\psi + \psi^\star\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^\star\psi - \cancel{\frac{\partial}{\partial x}\psi^\star\frac{\partial}{\partial x}}\psi\right] + \ldots[] + [] \tag{9.38}$$

ו־

$$= [\mathrm{div}\mathbf{j}](-i\hbar) = i\hbar\dot{\rho} \tag{9.39}$$

משפט גאוס אומר ש־

$$I_s = \int_S d\mathbf{s}\cdot\mathbf{j} = \frac{dN}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}\int d^3x\rho(x) \tag{9.40}$$

$$\vec{\nabla}j = -\dot{\rho} = \int_V d^3x\vec{\nabla}\mathbf{j} = -\int_V d^3x\dot{\rho} \tag{9.41}$$

אבל ראינו שזה נכון גם למצב פיזיקלי -

$$\int d^3x|\psi|^2 = 1 \tag{9.42}$$

כלומר, צפיפות ההסתברות "זורמת" באופן רציף.
האם אפשר $\mathbf{j}\neq 0$ ו־$\dot{\rho}=0$ בצפיפות ההסתברות. לדוגמה - שדה מגנטי.
עבור שדה מגנטי של תייל - $\mathbf{j}=\frac{\hat{\theta}}{r}$. לשדה זה - $\vec{\nabla}j=0$ (ממשוואות מקסוול - $\vec{\nabla}\cdot\mathbf{B}=0$ תמיד)
תתכן זרימה מעגלית במצב עצמי של המילטוניאן, מערבולת קוונטית יציבה ו־$\dot{\rho}=0$.

10 תנע זוויתי והצגות של תנע זוויתי

תנע זוויתי (אורביטלי)

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \mathbf{r}\times\mathbf{p} && (10.1)\\ L^x &= yp_z - zp_y && (10.2)\\ L^y &= zp_x - xp_z && (10.3)\\ L^z &= xp_y - yp_z && (10.4) \end{aligned}$$

כאשר האופרטורים x, y, z הם:

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\ni x^\alpha && (10.5)\\ (p_x,p_y,p_z) &\ni p^\beta && (10.6)\\ \left[x^\alpha, p^\beta\right] &= i\hbar\delta_{\alpha,\beta} && (10.7)\\ \left[x^\alpha, x^\beta\right] &= \left[p^\alpha, p^\beta\right] = 0 && (10.8) \end{aligned}$$

שלושת האופרטורים של תנע זוויתי אינם מתחלפים זה עם זה -

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] && (10.9)\\ &= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z && (10.10)\\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_y && (10.11)\\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y && (10.12) \end{aligned}$$

(כאשר לשני היחסים האחרונים הגענו עקב ציקליות של מכפלה וקטורית)
יחסי החילוף הללו נקראים "אלגברה של תנע זוויתי ($SU(2)$)" - $\{L_x, L_y, L_z\}$.

10.1 יחסי החילוף

תנע זוויתי כללי יהיה מוגדר על ידי שלושה אופרטורים הרמיטיים $\{J_x, J_y, J_z\}$, שיחסי החילוף בינהם הם -

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &= i\hbar J_z && (10.13)\\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x && (10.14)\\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y && (10.15) \end{aligned}$$

אנחנו נשתמש **רק ביחסי החילוף** בלי להשתמש בייצוג שלהם, כדי להוכיח דברים יפים על תנע זוויתי.

הגדרה 10.1 אופרטור קסימיר

$$|\mathbf{J}|^2 = (J_x)^2 + (J_y)^2 + (J_z)^2 \qquad (10.16)$$

אופרטור קסימיר מתחלף עם כל אחד מאופורטורי התנע -

$$\begin{aligned}\left[J^2, J_x\right] &= \left[(J_y)^2, J_x\right] + \left[J_z^2, J_x\right] && (10.17)\\ &= J_y(-i\hbar)J_z + (-i\hbar)J_zJ_y + J_z(i\hbar)J_y + (u\hbar J_y)J_z && (10.18)\\ &= 0 && (10.19)\end{aligned}$$

או, באופן כללי -

$$\boxed{\left[J^2, J_\beta\right] = 0} \quad \beta = x, y, z \tag{10.20}$$

האופרטורים מתחלפים, לכן יש מצבים עצמיים של J^2 ושל (למשל) J_z.
נניח שמצאנו מצב עצמי של J^2
עבור m ממשי כלשהו, ערך עצמי של J^2, לא מנוון.

$$J_z \underbrace{|m\rangle}_{\text{Eigenstate}} = \underbrace{\hbar m}_{\text{Eigenvalue}} |m\rangle \tag{10.21}$$

מסקנה 10.2 המצב העצמי של J^z וגם של J^2 מקיים -

$$\begin{aligned}J^z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle && (10.22)\\ j^2 |j, m\rangle &= K(j) |j, m\rangle && (10.23)\end{aligned}$$

השאלה: מהם הערכים המותרים של m ושל j, ומהם הערכים המותרים של $K(j)$ -
התשובה -

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

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

, כלומר - בהנתן j מסויים, m מקבל אחד ממספר גדלים.

$$K(j) = \hbar^2 j(j+1) \tag{10.24}$$

10.2 אופורטורי העלאה והורדה

נגדיר אופרטורי העלאה והורדה -

$$
\begin{aligned}
J^{+} &= J_x + iJ_y && (10.25)\\
J^{-} &= J_x - iJ_y && (10.26)
\end{aligned}
$$

ויחסי החילוף בינהם הם -

$$
\begin{aligned}
\left[J^{+}, J^{-}\right] &= 2\hbar J_z && (10.27)\\
\left[J_z, J^{+}\right] &= i\hbar J_y + \hbar J_x && (10.28)\\
&= \hbar J^{+} && (10.29)
\end{aligned}
$$

(בדומה ליחס החילוף $\left[N, a^{\dagger}\right]$ באוסצילטור הרמוני)

$$
\left[J_z, J^{-}\right] = -\hbar J^{-1} \qquad (10.30)
$$

אזי J^{+}, J^{-} הם אופרטורים עצמיים של J_z.
נרשום, עבור נוחיותנו -

$$
\begin{aligned}
J^2 &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{\left(J^{+}J^{-} + J^{-}J^{+}\right)}{2} + J_z^2 && (10.31)\\
&= J^{+}J^{-} - J_z^2 - \hbar J_z && (10.32)
\end{aligned}
$$

ונוכיח -

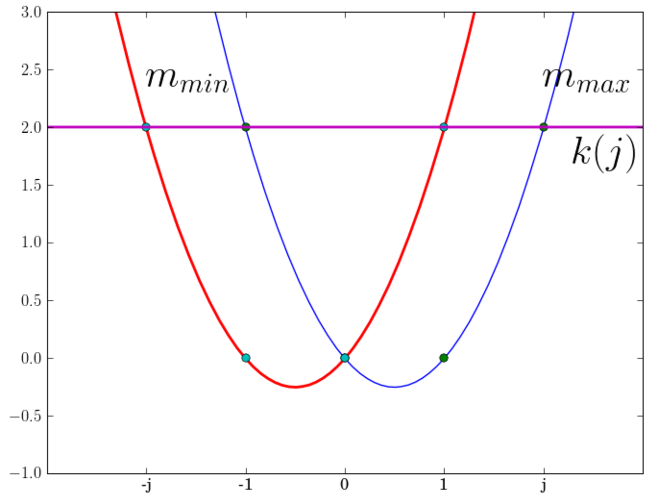
$$
\begin{aligned}
J^{+}J^{-} &= \left(J_x - iJ_y\right)\left(J_x - iJ_y\right) = J_x^2 + J_y^2 + -iJ_xJ_y - J_yJ_x && (10.33)\\
&= J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z && (10.34)\\
J_{-}J_{+} &= J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z && (10.35)
\end{aligned}
$$

והזהות החשובה היא

$$
\boxed{\begin{array}{c} J^{+}J^{-} = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\ J^{-}J^{+} = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{array}} \qquad (10.36)
$$

נחשב את הנורמה של $J^{+}\left|j,m\right\rangle$ (נשים לב- $\left(J^{+}\right)^{\dagger} = J^{-}$)

$$
\begin{aligned}
\left\|J^{+}\left|j,m\right\rangle\right\| &= \left\langle j,m \,\middle|\, J^{-}J^{+} \,\middle|\, j,m\right\rangle && (10.37)\\
&= \left\langle j,m \,\middle|\, J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \,\middle|\, j,m\right\rangle && (10.38)\\
&= \boxed{K(j) - \left(\hbar m\right)^2 - \hbar^2 m \geq 0} && (10.39)
\end{aligned}
$$



איור 6: המצבים המותרים של j בהנתן m

נחשב את הנורמה של $J^{-}\left|j,m\right\rangle$ -

$$\left\|J^{-}\left|j,m\right\rangle\right\|^{2} = \left\langle jm\right|J^{+}J^{-}\left|jm\right\rangle \quad (10.40)$$

$$= \boxed{K(j)-(\hbar m)^{2}+\hbar m\geq 0} \quad (10.41)$$

•

$$\left\langle J^{2}\right\rangle = \left\|J\left|\psi\right\rangle\right\|^{2}\geq 0 \quad (10.42)$$

ולכן, כל ערכי התצפית של $\left\langle J^{2}\right\rangle$ הם חיוביים.

• בהנתן, $K(j)<\infty$ -

משפט 10.3 יש ערך מינימלי $m_{\min}$ וערך מקסימלי $m_{\max}$ עבור הערכים העצמיים של J_z - m.

הוכחה: $\hbar^{2}m^{2}+\hbar^{2}m=\hbar^{2}m\left(m+1\right)\leq K(j)$ (מהנורמה של J^{-}).
$\hbar^{2}m\left(m-1\right)\leq K(j)$ (הנורמה של J^{+}).

אזי החיתוך של האי־שוויונות מגביל לי תחום מותר בין $m_{\max}$ ל־$m_{\min}$. לפי הציור - $m_{\min}=-m_{\max}$ והם תלויים ב־$K(j)$. ■

משפט 10.4 J^{+} מעלה את הערכים העצמיים של $\hbar m$ ל־$\hbar\left(m+1\right)$-

הוכחה:

$$J_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle \quad (10.43)$$

$$J_z \left(J^+ |j,m\rangle\right) = \left(\underbrace{J^+ J_z}_{\hbar m} + \underbrace{\left[J_z, J^+\right]}_{\hbar J^+}\right) |j,m\rangle \quad (10.44)$$

$$= \left(\hbar m + \hbar\right) J^+ |j,m\rangle \quad (10.45)$$

$$= \hbar \left(m+1\right) J^+ |j,m\rangle \quad (10.46)$$

■

ובכיוון ההפוך -

$$J_z J^- |j,m\rangle = \left(J^- J^z + \left[J_z, J^-\right]\right) |j,m\rangle \quad (10.47)$$

$$= \hbar \left(m-1\right) J^- |j,m\rangle \quad (10.48)$$

אזי - קיבלנו ש-

$$J^+ |j,m\rangle = A |j,m+1\rangle \quad (10.49)$$

$$J^- |j,m\rangle = B |j,m-1\rangle \quad (10.50)$$

נזכר, שאי אפשר לטפס ולרדת בסולם עד אינסוף, כי הגבולות חסומים על ידי $K(j)$.

1. $m_{\min} \le m \le m_{\max}$ - כמו כן,

$$K(j) = \hbar \left(m_{\max} \left(m_{\max}+1\right)\right) \quad (10.51)$$

$$= \hbar \left(m_{\min} \left(m_{\min}-1\right)\right) \quad (10.52)$$

לכל מצב m, יש סולם של ערכים מותרים (בדידי). אם נפעיל $\left(J^+\right)^N |m_0\rangle$, נצא מהתחום המותר (כי מגדילים את m ב-1)

מכיוון שאסור לצאת מהתחום המותר - קיים מצב מקסימלי, שערכו $m_{\max}$, כך ש-

$$J^+ |m_{\max}\rangle = 0 \quad (10.53)$$

ומצב מינימלי כך ש-

$$J^- |m_{\min}\rangle = 0 \quad (10.54)$$

איך ניתן לסדר "סולם" עם הפרשים שלמים, כך ש-$m_{\min} = -m_{\max}$ ומספר שלם של נקודות בינהן -

אם ורק אם $m_{\max} = \frac{\text{Integer}}{2}$. נקרא ל-$j$ $m_{\max} =$

איך ניתן לאפס מצב אמצעות J^+?

$$\left\| J^+ \left| m_{\max} \right\rangle \right\| = K(g) - \hbar^2 m_{\max}^2 - \hbar m_{\max} \geq 0 \tag{10.55}$$

הנורמה תתאפס (ו־J^+ יאפס את $m_{\max}$) כאשר

$$\begin{aligned} K(j) &= \hbar \left(m_{\max} \left(m_{\max} + 1 \right) \right) & (10.56) \\ &= \hbar^2 j \left(j + 1 \right) & (10.57) \end{aligned}$$

כאשר $J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots = \infty$ ו־m מקבל את הערכים -

$$m = -j, -j+1, \ldots, j \tag{10.58}$$

ואלו הם $2j$ ערכים.

הספקטרום ש־ $\{J^2, J^z\}$ הוא -

J^2, j		m, J_z		
$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
1	-1	0	1	
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
0		0		

למצב האפס קוראים singlet - כי הוא בודד. למצב המאופיין על ידי $\frac{1}{2}$, קוראים spin $\frac{1}{2}$ ו־doublet ולספין אחד יש שלושה מצבים, והוא triplet.

רשימת השלמים מתאימה לתנע הזוויתי האורביטלי. מצבי ה"חצי" הספינים - לא מתארים תנע זוויתי כמו במכניקה הקלאסית אלא מרחב הילברט של הספין, שנובעים רק כשמכניסים את תורת היחסות והמכניקה הקוונטית ומחליפים את משוואות שרדינגר ומשוואת דיראק. אנחנו לא נכנס לזה עכשיו.

10.2.1 נחשב אלמנט מטריצה

של $\langle j', m' \mid J^+ \mid j, m \rangle$ -

$$J^+ \left| j, m \right\rangle \quad \propto \quad \left| j, m+1 \right\rangle \tag{10.59}$$

נקח את הנורמה של הביטוי הזה (שכבר חישבנו)

$$\left\| J^+ \left| j, m \right\rangle \right\|^2 = \underbrace{\hbar^2 j \left(j+1 \right)}_{K(j)} - \hbar^2 m \left(m+1 \right) \tag{10.60}$$

אז לכן

$$A = \hbar \sqrt{j \left(j+1 \right) - m \left(m+1 \right)} \tag{10.61}$$

$$\left| j, m+1 \right\rangle = \frac{J^+ \left| j, m \right\rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m \left(m+1 \right)}} \tag{10.62}$$

ו־

$$B = \hbar\sqrt{j\left(j+1\right) - m\left(m-1\right)}$$

ו־ $J^{-}\left|j,m\right\rangle = \left|j,m-1\right\rangle$.,

$$\left\langle j',m'\left|J^{+}\right|j,m\right\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m',m+1}\hbar\sqrt{j(j+1) - m\left(m+1\right)} \tag{10.63}$$

$$\left\langle j',m'\left|J^{-}\right|j,m\right\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m',m-1}\hbar\sqrt{j(j+1) - m\left(m-1\right)} \tag{10.64}$$

אלמנטי המטריצה נותנים אפשרות לתאר את $J^{x} = \frac{J^{+}+J^{-}}{2}$ -

$$\left\langle j'm'\left|J_x\right|jm\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\delta_{j,j'}\left[\delta_{m',m+1}\sqrt{j(j+1) - m\left(m+1\right)} + \delta_{m',m-1}\sqrt{j(j+1) - m\left(m-1\right)}\right] \tag{10.65}$$

המטריצות של האופרטורים J_z, J^2 (פותחו בתרגול), לפי הבסיס $\{|j,m\rangle\}$, מצבים עצמיים משותפים ל־ J^2, J_z

$$J^2 = \begin{pmatrix} 0_{\text{Rep spin 0}} & & & \\ & \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 & \\ & \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix}}_{\text{Rep spin}\frac{1}{2}} & & \\ & & \underbrace{\begin{pmatrix} 2\hbar^2 & & \\ & 2\hbar^2 & \\ & & 2\hbar^2 \end{pmatrix}}_{\text{Rep spin}\,1} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{10.66}$$

כאשר כל אחד מהבלוקים הצגה (Representation) של ספין.

אופרטור J_z גם הוא אלכסוני -

$$J_z = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\hbar & \\ & +\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} & \\ & & \begin{pmatrix} -\hbar & & \\ & 0 & \\ & & +\hbar \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{10.67}$$

אפשר גם לרשום את המטריצות הלא־אלכסוניות (אבל הן יהיו בלוק־אלכסוניות)

$$\left(J^{x}\right)_{\substack{m,m' \\ j,j'}} = \frac{\hbar}{2}\delta_{j,j'}\left[\delta_{m',m+1}\sqrt{j(j+1) - m\left(m+1\right)} + \delta_{m',m-1}\sqrt{j(j+1) - m\left(m-1\right)}\right] \tag{10.68}$$

$$J^x=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & & & 0\\ & \underbrace{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}}_{\text{Pauli matrix}-\sigma_x} & & \\ & & \underbrace{\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&\\ \sqrt{2}&0&\sqrt{2}\\ 0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}}_{\text{Of spin }1} & \\ 0 & & & \ddots\end{pmatrix} \tag{10.69}$$

תתי מרחבים אלו קוראים הצגות בלתי פריקות (מתורת החבורות). לא ניתן להציג את שלושת האופרטורים בצורה אלכסונית או באמצעות מטריצות יותר קטנות.

10.3 הצגות תנע זוויתי אורביטלי

תנא זוויתי אורביטלי - $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$.

10.3.1 בקואורדינטות קרטזיות -

$$\mathbf{r} = \hat{\mathbf{x}}x+\hat{\mathbf{y}}y+\hat{\mathbf{z}}z \tag{10.70}$$

$$\vec{\boldsymbol{\nabla}} = \hat{\mathbf{x}}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{\mathbf{y}}\frac{\partial}{\partial x}+\hat{\mathbf{z}}\frac{\partial}{\partial z} \tag{10.71}$$

10.3.2 בקואורדינטת כדוריות

נראה איך מבטאים את ∇f בקואורדינטות כדוריות

$$\mathbf{r}\times\hat{\theta}=\hat{\phi} \tag{10.72}$$

θ היא זווית בין r לציר z. ϕ היא במישור xy.

$$d\mathbf{r} = \hat{\mathbf{r}}dr+r\hat{\theta}d\theta+r\sin\theta\hat{\phi}d\phi \tag{10.73}$$

$$df=d\mathbf{r}\cdot\nabla f = \tag{10.74}$$

עבור $dr \| \hat{\mathbf{r}}$ - $\Leftarrow$

$$dr\left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\vec{\boldsymbol{\nabla}}f\right) = \frac{\partial R}{\partial r}dr \tag{10.75}$$

$$rd\theta\left(\hat{\theta}\cdot\vec{\boldsymbol{\nabla}}\right)f = \frac{\partial f}{\partial\theta}d\theta \tag{10.76}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\hat{\theta}\vec{\boldsymbol{\nabla}}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{10.77}$$

$$r\sin\theta\left(\hat{\phi}\cdot\vec{\boldsymbol{\nabla}}\right)f = \frac{\partial f}{\partial\phi}d\phi \tag{10.78}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\hat{\phi}\cdot\vec{\boldsymbol{\nabla}}\right) = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{10.79}$$

$$\boxed{\vec{\boldsymbol{\nabla}} = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \hat{\phi}\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)} \tag{10.80}$$

10.3.3 תנע זוויתי כאופרטור דיפרנציאלי ב-$\mathbb{R}^3$

נתון על ידי

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times(-i\hbar\nabla) \tag{10.81}$$

$$= -i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot r\times\left(\hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{10.82}$$

$$= -i\hbar\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{10.83}$$

וקיבלנו

$$\boxed{\mathbf{L} = -i\hbar\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)} \tag{10.84}$$

נשים לב ש- $\mathbf{L}$ גוזר רק לפי θ, ϕ ולא לפי r!

$$L_x = \hat{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{L} = -i\hbar\left[\underbrace{\left(\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\phi}\right)}_{-\sin\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \underbrace{\left(\hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\theta}\right)}_{\cos\theta\cos\phi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{10.85}$$

$$= i\hbar\left[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{10.86}$$

$$L_y = i\hbar\left[-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{10.87}$$

והכי חשוב

$$L_z = -i\hbar\left(\underbrace{\left(\hat{\mathbf{z}}\cdot\hat{\phi}\right)}_{0}\frac{\partial}{\partial\theta} - \underbrace{\left(\hat{\mathbf{z}}\cdot\hat{\theta}\right)}_{-\sin\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \quad (10.88)$$

$$= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \quad (10.89)$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \quad (10.90)$$

$$L^+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\phi}\left(i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\partial}{\partial\theta}\right) \quad (10.91)$$

$$L^- = \left(L^+\right)^\dagger = \hbar e^{-i\phi}\left(i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial\theta}\right) \quad (10.92)$$

היות והאופרטורים הללו אדישים ל־$|\mathbf{r}|$, הם אופרטורים הפועלים אך ורק על הגדלים הזוויתיים, ϕ, θ

10.3.4 מרחב שפת כדור

$$\psi\left(\theta,\phi\right) \quad (10.93)$$

נגדיר מכפלה פנימית

$$\left(\psi,\varphi\right) = \int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,\psi^\star\left(\theta,\phi\right)\varphi\left(\theta,\phi\right) \quad (10.94)$$

כאשר ψ, φ פונקציות רציפות.

$$\psi\left(\theta,\phi\right) = \langle\theta,\phi\,|\,\psi\rangle \quad (10.95)$$

$$\begin{cases} 0\leq\theta\leq\pi \\ 0\leq\phi\leq 2\pi \end{cases} \quad (10.96)$$

פרמטרים.

נדרוש, מרציפות -

$$\psi\left(\theta,\phi+2\pi\right) = \psi\left(\theta,\psi\right) \quad (10.97)$$

על θ אין דרישה כזו (בין הקוטב הצפוני לדרומי)

מצבים עצמיים של L^z

$$L^z\psi\left(\theta,\phi\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\psi\left(\theta,\phi\right) \tag{10.98}$$
$$= \hbar m\psi\left(\theta,\phi\right) \tag{10.99}$$

כל פונקציה $f(\theta)e^{im\phi}$. למדנו ש־m שלם וחצי שלם.
נניח ־ $m=\frac{1}{2}$, אזי הפונקציה לא מחזורית על הכדור כי תחום סיבוב ב־2π

$$e^{i\frac{1}{2}\phi} \Rightarrow e^{i\frac{1}{2}(\phi+2\pi)} \tag{10.100}$$
$$e^{i\frac{\phi}{2}} \neq -e^{i\frac{1}{2}\phi} \tag{10.101}$$

וזו סתירה לרציפות, ולכן m המותרים הם שלמים.
אזי m חייב להיות שלם, ולכן גם l־ שלם.

10.3.5 מציאת הפונקציות העצמיות של L_z, L^2

$$Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right) \tag{10.102}$$

שמקיימות:

$$L^2Y_{l,m} = \hbar^2 l\left(l+1\right)Y_{l,m} \tag{10.103}$$
$$L_zY_{l,m} = \hbar m\,Y_{l,m} \tag{10.104}$$

ומנורמלות:

$$\int d\theta\int d\phi\sin\theta\left|Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right)\right|^2=1 \tag{10.105}$$

קודם כל נמצא את המצב $y_{l,l}\left(\theta,\phi\right)$.

$$L^+\left|l,l\right\rangle = 0=\hbar e^{i\phi}\left(i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{\partial}{\partial\theta}\right)y_{l,l}\left(\theta\right)e^{il\phi} \tag{10.106}$$
$$= \left(-l\cot\theta+\frac{\partial}{\partial\theta}\right)y_{ll}\left(\theta\right)=0 \tag{10.107}$$

והפתרון ־

$$Y_{ll}(\theta)\propto\left(\sin\theta\right)^l \tag{10.108}$$

ו־

$$Y_{ll}\left(\theta,\phi\right)=A\left(\sin\theta\right)^l e^{il\phi} \tag{10.109}$$

עד כדי נירמול.

$$Y_{l,l-1}(\theta,\phi) \propto L^{-}y_{l,l}(\theta,\phi) \tag{10.110}$$
$$\vdots \tag{10.111}$$
$$Y_{l,-l} \propto \left(L^{-}\right)^{2l}y_{l,l}(\theta,\phi) \tag{10.112}$$

אבל כבר חישבנו את קבוע הנירמול -

$$|l,n-1\rangle = \frac{L^{-1}|l,m\rangle}{\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}}$$

10.3.6 תכונות של $Y_{l,m}(\theta,\phi)$

.1

$$\langle\theta,\phi|\sum_{m,l}|l,m\rangle\langle l,m| = I|\theta',\phi'\rangle \tag{10.113}$$
$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \langle\theta,\phi\,|\,l,m\rangle \tag{10.114}$$

נכפול את משוואה 10.113 משמאל ומימין ב־$\langle\theta,\phi|$, $|\theta',\phi'\rangle$,

$$\sum_{l,m}Y^{\star}_{l,m}(\theta,\phi)\,Y_{l,m}(\theta',\phi') = \delta(\phi-\phi')\,\delta(\cos\theta-\cos\theta') \tag{10.115}$$

10.3.7 הכינויים של הפונקציות בפי כימאים

$$Y_{0,0} = s\,\text{wave} \tag{10.116}$$
$$Y_{1,m} = p\,\text{wave} \tag{10.117}$$
$$Y_{2,m} = d\,\text{wave} \tag{10.118}$$
$$Y_{3,m} = f\,\text{wave} \tag{10.119}$$

פיזיקאים אוהבים לקרוא ל־ $d-\text{wave}$ - quadropole.

- את $p-\text{wave}$ ניתל להציג כ־(p_x,p_y,p_z).

10.4 טרנספורם הרמוניות כדוריות

$$\psi_{l,m} = \langle l,m|\psi\rangle = \int_0^{\pi}d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,Y^{\star}_{l,m}(\theta,\phi)\,\psi(0,\theta) \tag{10.120}$$
$$\psi(\theta,\phi) = \sum_{l,m}\psi_{l,m}Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{10.121}$$

והפונקציות הללו אורתוגונליות (ומנורמלות)

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, Y^\star_{l,m}(\theta,\phi)\, y_{l',m'}(\theta,\phi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{10.122}$$

11 אטום המימן

ההמילטוניאן של אלקטרון סביב אטום המימן -

$$H = \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m_p} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{ze^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \tag{11.1}$$

(כאשר $z = 1$ עבור פרוטון אחד בגרעין).
נשתמש בטרנספורמציה קאנונית לקוארדינטות מרכז המסה. -

$$\begin{aligned} r_e, p_p, r_e, p_p &\rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{R}_{cm}, \mathbf{P}_{cm}) && (11.2)\\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p && (11.3)\\ \mathbf{R}_{cm} &= \frac{m_e\mathbf{r}_e + m_p\mathbf{r}_p}{m_e + m_p} && (11.4)\\ \mathbf{P}_{cm} &= \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_p && (11.5) \end{aligned}$$

p הוא התנע היחסי הצמוד קנוני ל- $\mathbf{r}$-

$$\mathbf{p} = -\frac{m_e\mathbf{p}_p - m_p\mathbf{p}_e}{m_e + m_p} \tag{11.6}$$

כדי להראות שהטרנספורמציה קאנונית, צריך להראות -

$$[\mathbf{r}, \mathbf{R}_{cm}] = [\mathbf{p}, \mathbf{P}_{cm}] = 0 \tag{11.7}$$

טריוויאלי. (נעשה זאת ברכיבים

$$\begin{aligned} \left[r^\alpha, p^\beta\right] &= \left[r_e^\alpha - r_p^\alpha, -\frac{m_e\mathbf{p}_p^\beta - m_p p_e^\beta}{m_e + m_p}\right] && (11.8)\\ &= \left[\mathbf{r}_p^\alpha, \frac{m_e p_p^\beta}{m_e + m_p}\right] + \left[r_e^\alpha, \frac{m_p p_e^\beta}{m_e + m_p}\right] && (11.9)\\ &= i\hbar\frac{m_e}{m_e + m_p}\delta_{\alpha\beta} + i\hbar\frac{m_p}{m_e + m_p}\delta_{\alpha\beta} = i\hbar\delta_{\alpha\beta} && (11.10)\\ \left[R_{cm}^\alpha, P_{cm}^\beta\right] &= i\hbar\delta_{\alpha\beta} && (11.11)\\ \left[r^\alpha, P_{cm}^\beta\right] &= 0 && (11.12)\\ \left[R_{cm}^\alpha, p^\beta\right] &= 0 && (11.13) \end{aligned}$$

(תרגיל - להוכיח את השניים האחרונים) (יחסי החילוף מקבילים לסוגרי הפאוסון. כאן, אנחנו לא צריכים לגזור כמו בסוגרי פואסון כי כל האופרטורים לינארים)

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_e^2}{2m_p} = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{P_{cm}^2}{2\left(m_e + m_p\right)} - \frac{ze^2}{r} && (11.14) \\ &= H_{cm}(\mathbf{P}_{cm}) + H_{rel}\left(\mathbf{r}, \mathbf{P}\right) && (11.15) \end{aligned}$$

נסמן

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p}\right)^{-1} \tag{11.16}$$

אבל $m_e \ll m_p$ ולכן $\mu \lesssim m_e$.

במשתנים החדשים, פונקצית הגל מתפרקת למכפלה, כאשר $\mathbf{R}_{cm}$ היא רמת האפס של חלקיק אחד חופשי:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r}, \mathbf{R}_{cm} | \psi_n \rangle && (11.17) \\ &= \underbrace{N e^{-i\mathbf{K}_{cm}\mathbf{R}_{cm}}}_{\text{Eigenstate of } \frac{P_{cm}^2}{2M}} \quad \psi_n\left(\mathbf{r}\right) && (11.18) \end{aligned}$$

כאשר n הוא מספר קוונטי של התנועה היחסית

$$H\left(p, r\right)\left|\psi_n\right\rangle = E_n\left|\psi_n\right\rangle \tag{11.19}$$

והאנרגיה הכוללת -

$$E^{tot} = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}_{cm}^2}{2M} + E_n \tag{11.20}$$

($M = m_e + m_p$)

11.1 המילטוניאן אטום המימן

נפתור את ההמילטוניאן של הקוארדינטות היחסיות, במערכת מרכז המסה -

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{|\mathbf{r}|} \tag{11.21}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} + \hat{\theta}\mathbf{p} + \hat{\phi}\mathbf{p} && (11.22) \\ \mathbf{p}^2 &= \underbrace{\left(\hat{\mathbf{r}} p_r\right)^2} + \underbrace{\left(\hat{\theta} p_\theta\right)^2 + \left(\hat{\phi} p_\phi\right)^2} && (11.23) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
p_\theta^2 + p_\phi^2 &= (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{p})^2 && (11.24)\\
&= \frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2 && (11.25)
\end{aligned}
$$

$\mathbf{L}$ היא פונקציה של ϕ, θ ונגזרותיהן בלבד, ולכן

$$[L^\alpha, f(r)] = 0 \tag{11.26}$$

$$\mathbf{p}^2 = p_r^2 + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \tag{11.27}$$

ורשמנו את האנרגיה הקינטית באמצעות התנע הזוויתי, והתנע הרדיאלי.
אנחנו כבר יודעים איך L^2 מתנהג. צריך לבחון את $(\hat{\mathbf{r}}\mathbf{p})^2$.
אם נרצה להגדיר אותו כ־ $p_r = \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p}$ ולבחון את ההרמיטיות שלו -

$$\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{p}\right)^\dagger = \mathbf{p}^\dagger \frac{\mathbf{r}^\dagger}{r} = \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{r} \neq \left(\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{p}\right) \tag{11.28}$$

ולכן הוא לא אופרטור הרמיטי .ברצוננו בסך הכל לרשום את הלפלסיאן $\mathbf{p}^2 = -\hbar^2 \vec{\boldsymbol{\nabla}}^2$ בקואורדינטות קוטביות.
נחשב אותו באמצעות העובדה שהאופרטור L^2 כבר מוכר לנו.
נגדיר - אופרטור הרמיטי לתנע הקווי - $p_r = \frac{\hat{\mathbf{r}}\mathbf{p}+\mathbf{p}\hat{\mathbf{r}}}{2}$.
חישוב p_r:

$$
\begin{aligned}
p_r &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} + \mathbf{p}\mathbf{r}\frac{1}{r}\right) && (11.29)\\
&= (\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p}) + \frac{1}{2}\sum_\alpha \left[P^\alpha, r\alpha\frac{1}{\sqrt{\sum_{\alpha'}\left(r^{\alpha'}\right)^2}}\right] && (11.30)\\
&= \hat{\mathbf{r}}\mathbf{p} + \frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r} - \sum_\alpha \frac{r_\alpha^2}{\left(\sum_{\alpha'}\left(r_{\alpha'}\right)^2\right)^{3/2}}\right) && (11.31)\\
&= \hat{\mathbf{r}}\mathbf{p} - i\hbar\frac{1}{r} && (11.32)
\end{aligned}
$$

מצאנו שהאופרטור ההרמיטי ל־p_r הוא

$$
\begin{aligned}
p_r &= -i\hbar\left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\vec{\boldsymbol{\nabla}}\right) - i\hbar\frac{1}{r} && (11.33)\\
&= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) && (11.34)
\end{aligned}
$$

הוא אופרטור התנע בכיוון r

$$= -i\hbar\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right) \tag{11.35}$$

וכאן מקבלים את $\mathbf{p}^2$ בקואורדינות קוטביות -

$$(\mathbf{p})^2 = -\hbar\nabla = \left(p_r^{\text{Hermitian}}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2 \tag{11.36}$$
$$= -\hbar\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right) + \frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2 \tag{11.37}$$
$$= \boxed{-\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right) + \frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2_{(\theta,\phi)}} \tag{11.38}$$

ולכן, נוכל לפתור את המצבים העצמיים באמצעות המצבים העצמיים של L^2 שאנחנו מכירים, ולפתור רק את האופרטור הראשון של המשוואה.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right) + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{ze^2}{r} \tag{11.39}$$

הפתרונות (המצבים העצמיים) ניתנים לכתיבה כ־$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\phi)$
כאשר l שלם, $m \le m \le l-$ $-l$ וניוון של $2l+1$ מצבים. ואנרגיה המתקבלת - $\mathbf{L} \to \hbar^2 l(l+1)$.

11.1.1 הפרדת משתנים

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{ze^2}{r}\right)R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{11.40}$$
$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{ze^2}{r}\right)R_{n,l}Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{11.41}$$
$$= E_{n,l}\,R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{11.42}$$

נצניע לעת עתה את החלק התלול ב־l, ונשריא רק תלות ב־n.

11.1.2 נגדיר scaling

נגדיר, סקאלת אורך קוונטית a_n וסקלת אנרגיה קוונטית Δ_n.

$$\Delta_n = \frac{\hbar^2}{2\mu a_n^2} = 4\left|E_n\right| \tag{11.43}$$

נבצע החלפת משתנים. $r \to \xi \equiv r/a_n$.

- a_n - סקלת אורך שעדין לא נקבעה.
- Δ_n - סקלת אנרגיה שעדין לא נקבעה.

בסוף נפתור ונמצא את סקאלות אלו ממשוואות שרדינגר.

נחליף משתנים

$$(H-E_n)\,R_{n.l}=\Delta_n\left[-\frac{1}{\xi}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\xi+\frac{l\,(l+1)}{\xi^2}-\frac{\lambda_n}{\xi}-\frac{1}{4}\right]R_n\left(\xi\right)=0 \tag{11.44}$$

(אם נציב את Δ_n שקבענו נקבל את המשוואה הקודמת ה־"$\frac{1}{4}$" החופשי נובע מהעברת אגפים, ומצמצום ב־E_n) $\lambda_n=\frac{ze^2}{a_n\Delta_n}$.

נציב - $u_{n,l}(\xi)=\xi R_n(\xi)$

$$\frac{1}{\xi}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\left(\xi R_n\left(\xi\right)\right) = \frac{1}{\xi}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}U(\xi) \tag{11.45}$$

$$R_n\left(\xi\right) = \frac{u_n\left(\xi\right)}{\xi} \tag{11.46}$$

המשוואה ל־$u_n\left(\xi\right)$ -

$$\boxed{-\frac{1}{\xi}\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi}-\frac{l\,(l+1)}{\xi^2}+\frac{\lambda_n}{\xi}-\frac{1}{4}\right]U_{n,l}\left(\xi\right)=0} \tag{11.47}$$

- כאשר $\xi\to\infty$, המשוואה האסימפטוטית (כאשר נזניח את האיברים התלויים ב־$1/\xi$) אזי $\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u-\frac{1}{4}u=0$ אזי

$$u\sim Ae^{-\xi/2}+Be^{+\xi/2} \tag{11.48}$$

נקבע ש־$B=0$, כדי שהפונקציה לא תתבדר ב־$\xi\to\infty$.

$$u\sim e^{-\xi/2} \tag{11.49}$$

ב־ξ גדול.

- כאשר $\xi\to 0$, למשוואה יש איבר אחד מאוד גדול - $\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u-\frac{l(l+1)}{\xi^2}u=0$ - אזי $u\sim\xi^{l+1}$.

11.1.3 לכן, נגדיר את הפתרון

כך שיקיים את התלות האסימפטוטית הרצויה.

$$\boxed{u_n=Ae^{-\xi/2}\xi^{l+1}F(\xi)} \tag{11.50}$$

אנחנו יודעים ש־$F(\xi)$ ניתנת לפיתוח לטור טיילור -

$$F\left(\xi\right)=\sum_{i=1}^{\infty}C_i\xi^i \tag{11.51}$$

כאשר המקדמים C_i לא ידועים עדין.
נציב את u_n שמצאנו לתוך המשוואה:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-\frac{l\left(l+1\right)}{\xi^2}+\frac{\lambda_n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)\left(Ae^{-\xi/2}\xi^{l+1}\sum_i C_i\xi^i\right) = 0 \tag{11.52}$$

$$\sum_i\left(\left(i+2l+2\right)\left(i+1\right)C_{i+1}-\left(i+l+1-\lambda_n\right)C_i\right)\xi^i = 0 \tag{11.53}$$

(במעבר יש אלגברה מאוד שנובעת מגזירה של טור החזקות). קיבלנו פולינום שהוא זהותית אפס. נשווה כל מקדם ξ_i לאפס בנפרד ונקבל רקורסיה בין המקדמים של $\{C_i\}$:

$$C_{i+1}=\underbrace{\frac{i+l+1-\lambda_n}{\left(1+i\right)\left(i+2l+2\right)}}_{\Gamma_i}C_i \tag{11.54}$$

נקבע - $C_0=1$. עבור i גדול, $\Gamma_i\sim\frac{1}{i}$, אז $C_{i+1}\sim\frac{1}{i}C_i$, או - $C_{i+1}\sim\frac{1}{i!}$ אזי,

$$F\left(\xi\right)=\sum_i C_i\xi^i\sim\sum_i\frac{\xi^i}{i!}=e^{+\xi} \tag{11.55}$$

עבור i גדולים.

$$u=e^{-\xi/2}\xi^{l+1}\overbrace{F\left(\xi\right)}^{\sim e^{+\xi}} \tag{11.56}$$

הפונקציה הזו מתבדרת אם אומנם יש לה אינסוף איברים.

11.1.4 הפתרון:

לקצוץ את הסכום ב־i_{max} כלשהן כך ש־$C_{i,i>i_{\max}}=0$ ואז

$$F\left(\xi\right)=\sum_{i=0}^{i_{max}}C_i\xi^i \tag{11.57}$$

הוא פולינום. וזה מציב לנו תנאי על λ שמופיע בתנאי הנסיגה.
תנאי הנירמול על u מציב לנו תנאי ש־λ_n חייב לקיים
$n=\lambda_n=i_{max}+l+1\in\mathbb{N}$-.
ואז

$$c_i\neq 0, i = 0,1,2,\ldots,i_{max} \tag{11.58}$$

$$c_i=0 \qquad i>i_{max} \tag{11.59}$$

$$F_{n,l}(\xi) = \sum_{i=1}^{i_{max}} c_i \xi^i \tag{11.60}$$

כדי שהמונה במשוואה 11.54 יתאפס, λ_n חייב להיות מספר שלם n,

$$\lambda_n = n = 1, 2, 3, \ldots, \infty \tag{11.61}$$

ו־n נקרא **"מספר קוונטי ראשי"**.

יש כמה ערכים שונים של l, שיתנו את אותו ערך של n- הערך של n מנוון.

אנחנו יודעים ש־$\lambda = \frac{ze^2}{\Delta_n a_n}$. $\Delta_n = \frac{\hbar^2}{2\mu a_n^2}$.

$$\lambda = \frac{ze^2 2\mu a_n}{\hbar^2} = n \tag{11.62}$$

עכשיו ניתן למצוא את a_n

$$a_n = \left(\frac{\hbar^2}{2ze^2\mu}\right) n \tag{11.63}$$

כאשר נציב $n = 1$,

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{2ze^2\mu} \tag{11.64}$$

$$\Delta_1 = \frac{2z^2e^4\mu}{\hbar^2} \tag{11.65}$$

נזכור ש־E_n שלילי ו־$E_n = \frac{|\Delta_n|}{4}$ הוא לפי הערך המוחלט, ולכן

$$\boxed{E_1 = -\frac{z^2e^4\mu}{2\hbar^2} = -13.6 \cdot z^2 \mathrm{eV}} \tag{11.66}$$

קבלנו את סקלת האורך - **"אורך בוהר"** -

$$\boxed{a_B = 2a_1 = \frac{\hbar^2}{\mu z e^2} = 0.529\text{Å}} \tag{11.67}$$

עבור n כללי,

$$\lambda_n = n = \frac{2ze^2\mu a_n}{\hbar^2} \tag{11.68}$$

$$a_n = n a_1 = n\frac{a_B}{2} \tag{11.69}$$

$$E_n = -\frac{\Delta_n}{4} = -\frac{z^2}{n^2}E_1 = -\left(\frac{z^2}{n^2}\right)\left(\frac{e^2}{2a_B}\right) \tag{11.70}$$

11.1.5 השוואה למודל בוהר

הנחה - $L^z = n\hbar$

$$mUR_n = n\hbar \tag{11.71}$$
$$\frac{mv_n^2}{R_n} = \frac{Ze^2}{R_n^2} \tag{11.72}$$

$$R_n^B = \frac{n^2\hbar^2}{mze^2} \tag{11.73}$$
$$E_n^B = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{ze^2}{R_n} = -\frac{e^4 m}{2\hbar^2}\cdot\frac{z^2}{n^2} \tag{11.74}$$

השיקולים - כולם לא נכונים, אבל התשובה הסופית - נכונה.
תורת הקוונטית נותנת את הניוונים נכון -

$$n = i_{max} + l + 1 \tag{11.75}$$

לכל l יש $2l+1$ מצבים של m . לכל n יש:

$$n = 1, \quad l = 0 \tag{11.76}$$
$$n = 2, \quad l = 0 \tag{11.77}$$
$$l = 1 \tag{11.78}$$
$$n = 3, \quad l = 0 \tag{11.79}$$
$$l = 1 \tag{11.80}$$
$$l = 2 \tag{11.81}$$

לכל n - $l = 0, 1, \dots n-1$.
ניוון אטום המימן - לאנרגיה E_n יש ניוון g_n -

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} \underbrace{(2l+1)}_{\text{m-states}} \tag{11.82}$$

- לאטום המימן מספר אינסופי של מצבים קשורים.
- הניוונים משפיעים על גדלים תרמודינמיים (אנטרופיה, חום סגולי..) הם באים לידי ביטוי בספירת מספר האפשרויות שהמערכת יכולה להמצא בה.

11.2 פונקצית גל של אטום המימן

$$\psi_{n,l,m}\left(r,\theta,\phi\right) \tag{11.83}$$

$$\rho=\left|\psi_{n,l,m}\right|^{2} \tag{11.84}$$

$$(1S):=\psi_{1,0,0}=\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}\overbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}^{y_{0,0}} \tag{11.85}$$

$$(2S):=\psi_{2,0,0}=\frac{2}{a_0^{3/2}\sqrt{3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{11.86}$$

הפולינום ב-r^i שמכפיל את האקספוננט נקרא פולינום לגר.

$$(2P):=\psi_{2,1,m}=\frac{1}{\sqrt{3}\left(2a_0\right)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\begin{cases}\sin\theta e^{-i\phi} & m=1\\ \cos\theta & m=0\\ \sin\theta e^{i\phi} & m=-1\end{cases} \tag{11.87}$$

קיומו של מצב היסוד מבטיח שהאנרגיה של אלקטרון תהיה גדולה מאפס, ולכן האלקטרון לא יקרוס פנימה.

11.2.1 מצב היסוד

$$\psi_{100}=\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{11.88}$$

נחשב אנרגיה פוטנציאלית ממוצעת

$$\left\langle\frac{-ze^2}{r}\right\rangle_{15} = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty dr\,r^2\underbrace{\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\sin\theta}_{4\pi}\left(\frac{4}{a_0^3}\right)e^{-2r/a_0}\left(-\frac{ze^2}{r}\right) \tag{11.89}$$

$$= \int_0^\infty d\xi\,\xi e^{-\xi}\left(-\frac{ze^2 4}{a_0^3}\right) \tag{11.90}$$

$$= -\frac{ze^2}{a_B}=\langle V\rangle \tag{11.91}$$

$$E_1=-\frac{ze^2}{2a_0} \tag{11.92}$$

ההפרש בין האנרגיה הפוטנציאלית לכלל האנרגיה היא קינטית, כלומר -

$$\boxed{E_{\text{Kinettic}}=-\frac{1}{2}\langle V\rangle} \tag{11.93}$$

11.2.2 סופרפוזיצה של מצבים

היברדיזציה

$$Y_{1,-1} = \sin\theta e^{i\phi} \quad (11.94)$$
$$Y_{1,0} = \cos\theta \quad (11.95)$$
$$Y_{1,1} = \sin\theta e^{-i\phi} \quad (11.96)$$

$$|P_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle + |1,-1\rangle\right) \quad (11.97)$$
$$P_x(\theta) \propto \sin\theta\cos\phi \quad (11.98)$$
$$P_y \propto \frac{|1,1\rangle - |1,-1\rangle}{\sqrt{2}i} = \sin\theta\sin\phi \quad (11.99)$$
$$P_z \propto |1,0\rangle = \cos\theta \quad (11.100)$$

יש להם את אותם אנרגיות, אבל יש להם כיוונים מועדפים במרחב. זה בסיס טוב לתאר סידור של אטומים בשריג קובי - כי אז האלקטרונים ירצו להיות באורביטלים הללו.

12 ספין

נאלצו להכניס עוד מספר קוונטי לאלקטרון סביב אטום המימן - כדי להסביר את ההתנהגות המגנטית של אטום המימן.

לאטום המימן יש דיפול מגנטי שיש לו שני ערכים בלבד.

נתקבלו שני מספרים מקוונטטים, מאותו גודל - אחד חיובי ואחד שלילי. זה הוביל למחשב בכיוון תנע זוויתי קוונטי כאשר $j = \frac{1}{2}$. נתגלה מרחב פנימי שצמוד לאלקטרון - שיש בו הצגה של תנע זוויתי שבור - ספין חצי.

לאלקטרון - 2 תכונות מוזרות הקשורות זו בזו -

- דובלט של ספין $\frac{1}{2}$ - מסומן ב־$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. ניתן לקבל את הספין על ידי הרחבה של משוואת שרדינגר למשוואת דירק היחסותית.
- האלקטרון הוא **פרמיון**.

אין לאלקטרון זהות שמבדילה אותו מאלקטרון אחר - אם כל המספרים הקוונטיים זהים. בגלל הספין השבור של האלקטרון יש תנאי מאוד מוזר על מרחב הילברט הרב־אלקטרוני. התנאי הזה, עקרון פאולי - אומר שפונקציות הגל של 2 פרמיונים היא אנטיסימטרית תחת החלפה.

$$\psi\left(r_1, r_2\right)|S_1\rangle_1 |S_2\rangle_2 \quad (12.1)$$

פרמי אמר שאם נחליף בין $1 \leftrightarrow 2$, נקבל

$$= (-)\,\psi\left(r_2, r_1\right)|S_2\rangle_1 |S_1\rangle_2 \quad (12.2)$$

וצפיפות ההצטברות היא לגמרי זהה (לא תלויה בסימן..). עבור 2 הפרמוטיצית הסימן הוא חשוב כדי להפריד בין סוגים של חלקיקים

עבור פרמיונים, הסימן שלילי, ועבור בוזונים - הוא חיובי.

דוגמה - 2 אלקטרונים באותו מצב -

$$\psi_{n,l,m}\left(r_1\right)\left|\uparrow\right\rangle_1 \psi_{nlm}\left(r_2\right)\left|\uparrow\right\rangle_2 \tag{12.3}$$

(12.4)

(12.5)

לא יתכן מכיוון שהמצב עם פרמוטציה $2 \leftrightarrow 1$ מקיים:

$$-\psi(r_2)\left|\uparrow\right\rangle_2 \psi_{nlm}(r_1)\left|\uparrow\right\rangle_1 \tag{12.6}$$

הוא זהה אבל בסימן הפוך, ולכן מתאפס, ולא נותן מצב מנורמל לגיטימי לחלקיקים.

במילים פשוטות: אי אפשר לשים 2 אלקטרונים באותו מצב ובאותו ספין, מכיוון שהם פרמיונים.

12.1 הטבלה המחזורית

ניתן לתאר את הספקטרום של אטום המימן על ידי מספר ראשי n והאנרגיה. לכל מספר אטומי ראשי יש אפשרויות שונות ל-l.

במשוואה הרדיאלית, l מופיע כפרמטר.

$$\left(\frac{1}{3}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{l\left(l+1\right)}{\xi^2}\right)u=E_n u \tag{12.7}$$

הניוון של התנע הזוויתי - $(2l+1)$ מצבים עצמיים של L_z. המילטוניאן מתחלף עם L^2 - $[H,L^2]=0$ ועם $[H,L^\alpha]\,,\alpha=x,y,z$.

הניוונים עם מטעמי סימטריה - בגלל התחלפות של ההמילטוניאן עם כל אחד מהאופרטורים של תנע זוויתי.

הניוון של $l=0,1,\ldots,n=1$ הוא ניוון **מיוחד** לפוטנציאל $\left(-\frac{ze^2}{r}\right)$. כל פוטנציאל אחר יתן לנו משוואה רדיאלית שתראה אחרת, והניוון הזה יוסר. הניוון הזה נראה מפתיע - ולקח זמן עד שידעו להסביר אותו. הניוון נובע מסימטריה - SO_4, שבה מגדירים עוד אופרטורים, שהם כמו תנע זוויתי -

אופרטור סימטריה מיוחד לאטום המימן נקרא Runge-Lenz Vector והוא ידוע ממכניקה קלאסית -

$$\mathbf{n}=\frac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}}{m}-\frac{ze^2}{r}\cdot r \tag{12.8}$$

הוא מתחלף עם ההמילטוניאן ומשנה את התנע הזוויתי.

נצפה, שברגע שהפוטנציאל ישתנה, ולא יהיה $\frac{1}{r}$, כמו באטומים דמויי-מימן - שם הפוטנציאל עבור האלקטרונים החיצוניים מתוקן על ידי סיכוך של האלקטרונים הפנימיים, ולכן הפוטנציאל האפקטיבי לא מתנהג כמו $\frac{1}{r}$.

עבור למשל בעיה של 2 אלקטרונים באטום הליום - $z=2$.

$$H=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}-\frac{ze^2}{r_1}-\frac{ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_1-\mathbf{r_2}\right|} \tag{12.9}$$

האיבר הימני הוא איבר אינטראקציה - והוא איבר שקשה להתיחס אליו. אז נזניח אותו לרגע. בתורת ההפרעות נקרב בעיה מסובכת לבעיה פשוטה יותר, ונוסיף תיקונים שאותם קל לחשב - לדוגמה שינוי הפוטנציאל האפקטיבי במקום הוספת איבר נוסף.

אזי ניתן לפרק את $H = H_1 + H_2$ ו־$\psi = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$.

אבל פונקציה זו לא מקיימת את תנאי האנטיסימטריה של עקרון פעולה. נגדיר פונקציה של פרמיונים -

$$\psi^{\text{ferm}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)\right] \tag{12.10}$$

זוהי פונקציה אנטיסימטרית לחילוף, אז היא כשרה לסימטריה של פרמיונים.

$$(H_1 + H_2)\psi^{\text{Ferm}} = (E_1 + E_2)\psi^{\text{Ferm}} \tag{12.11}$$

זה עוזר לנו לצייר את המצבים העצמיים של אטום ההליום.

מצב היסוד של הליום הוא המצב הדו־אלקטורני עם האנרגיה הכי נמוכה. לכן, במצב היסוד של הליום, יש שני אלקטרונים עם ספין $\uparrow, \downarrow$.

נזניח אינטראקטיות ונמלא את הרמות הנמוכות קודם:

$$H - 1S^1 \quad \Rightarrow \quad n = 1, l = 0, \text{spin} \uparrow \text{or} \downarrow \tag{12.12}$$

$$He - 1S^2 \quad \Rightarrow \quad 2 \text{ electrons in } 1S^1 \tag{12.13}$$

$$Li - 1s^2 2S^1 \quad \Rightarrow \quad 1 \text{ electron in } 2S - \text{"Full Shell", noble gas} \tag{12.14}$$

$$Be - 1S^2 2S^2 \quad \Rightarrow \quad 2 \text{ electrons in } 2S \tag{12.15}$$

יש לנו שורה של מצבים שבאטום המימן הם מנוונים, ובאטום כללי - לאו דווקא. בין 2 רמות אנרגיה יש פער שמצריך אנרגיה - אור בתדירון גבוהה - כדי לעבור בינהם.

אנחנו רוצים למצא קליפות - ראשית למלא את רמות האנרגיה התחתונות, אחר כך את הרמות שמעליה.

בבריליום, Be, לא מילינו את הקליפות

$$\begin{matrix} B & C & N \;\; O \;\; F & Be \\ 1S2S^2P^2 & 1S^2 2S^2 2P^2 & & 1S^2 2S^2 2P^6 \end{matrix} \tag{12.16}$$

הניאון הוא גז אציל. הקליפה החיצונית שלו מלאה.

כל הכימיה - עוסקת בכיצד אטומים עושים אינטראקציה עם אטומים אחרים, על ידי חלוקת האלקטרונים בינהם. החומרים האקטיביים יותר הם בעלי קליפות אנרגיה לא מלאות.

12.2 מומנט מגנטי

לולאת זרם, היוצרת שדה מגנטי, ניתנת לתיאור על ידי מוממנט דיפול

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} I \mathbf{A} \tag{12.17}$$

כאשר $\mathbf{A}$ הוא שטח הלולאה.

אם נוכל לקבוע את הזרם של אלקטרון סביב אטום המימן, נוכל להגדיר מומנט דיפול.
באופן קלאסי, באלקטרון עם מטען e ומהירות v ־

$$I = \frac{ev}{2\pi r} \tag{12.18}$$

$$A = \pi r^2 \tag{12.19}$$

$$\mu = \frac{e}{2mc}\underbrace{(mvr)}_{L_z}\hat{\mathbf{z}} \tag{12.20}$$

$$\boxed{\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{\hbar e}{2mc}\right)\frac{\mathbf{L}}{\hbar}} \tag{12.21}$$

הגודל $\left(\frac{\hbar e}{2mc}\right) = \mu_B$ מכונה בוהר־מגנטון.
המומנט המגנטי הזה נקרא מומנט מגנטי אורביטלי. רואים אותו אם שמים את הלולאה הזו בשדה מגנטי.
מומנט בשדה מגנטי

$$E = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} = -\mu_B\left(\mathbf{BL}\right) \tag{12.22}$$

נוסיף שדה מגנטי לאטום המימן ־

$$\left(H^{\text{Hidregen}} - \mu_B B\frac{L^z}{\hbar}\right)\psi_{nlmm_s} = \left(E_n - \mu_B Bm\right)\psi_{nlmm_s} \tag{12.23}$$

אבל לאלקטרון יש גם ספין. האם גם הספין נותן מומנט מגנטי?

הערה 12.1 מטריצות ־ הייזנברג הניח שניתן לתאר את המכניקה הקוונטית כמטריצות (שיש להם ייצוג אלכסוני באותו בסיס אם ורק אם הן מתחלפות). בשלב מסויים היה דיסוננס בין התפיסה המטריציונית של המכניקה הקוונטית לאחרות.

$$H_B = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} \tag{12.24}$$

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_B\frac{\mathbf{L}}{\hbar} \tag{12.25}$$

עבור אלקטרון במסלול אורביטלי, $\mathbf{r}\times\mathbf{p}$. אם נבחר $\mathbf{B}\|\hat{\mathbf{z}}$ אז

$$H_B = -\left(\frac{\mu_B B}{\hbar}\right)L_z \tag{12.26}$$

$$l = 1 \rightarrow \begin{cases} m = -1 \\ m = 0 \\ m = +1 \end{cases} \tag{12.27}$$

כאשר ההפרש בין ה־mים הוא $\mu_B B$. זהו פיצול זימן.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 9.3 \cdot 10^{-21} \frac{\text{erg}}{\text{gauss}} \tag{12.28}$$

הספין של האלקטרון התגלה על ידי לקייחה של האלקטרון והזרמתו לתוך אזור שבו השדה המגנטי לא קבוע. אם יש לנו שדה מגנטי משתנה, $B(z) = \left(B_0 + \frac{\partial B}{\partial z} z\right) \hat{\mathbf{z}}$, אז אם נציב אלקטרון עם מומנט מגנטי מסויים (ומכוון) μ, אז האנרגיה (המגנטית) שהאלקטרון הזה יהיה בה תהיה תלויה ב־z ־

$$E_B(z) = -\mu_B \left(B_0 + \frac{\partial B}{\partial z} \cdot z\right) \cdot m \tag{12.29}$$

יפעל עליו כח שכיוונו בהתאם ל־m. כך ניתן יהיה להפריד מבחינה נסיונית את האטומים לפי m חיובי, שלילי או אפס

$$\mathbf{F} = -\vec{\boldsymbol{\nabla}} E_B = \left(\frac{\partial B}{\partial z} \mu_B\right) m \hat{\mathbf{z}} \tag{12.30}$$

זה כח שיפריד את האלקטרונים בהתאם למצב העצמי של L_Z ־ כלומר ־ יבצע **מדידה** ל L_z.

12.3 נסיון שטרן־גרלך ונפלאות המדידה

נקח שדה מגנטי משתנה במרחב כך ש־

$$\vec{\boldsymbol{\nabla}} B^z \neq 0 \tag{12.31}$$

שולחים אלומה של אטומים דרך השדה. בהתאם למומנט המגנטי של האטום, וקיבלו אלומות פיזור. מספר האלומות הוא כמספר הערכים העצמיים של L_Z.

היו אטומים שהוציאו מספר אי זוגי של אלומות־ כלומר, l, התנע הזוויתי הכללי ־ שלם.

כשעשו את הניסוי באלומה של כסף ־ שנמצא במצב $4S^1$, כלומר ־ אלקטרון אחד בלבד שתורם לתנע הזוויתי הכללי (השאר ־ מבטלים אחד את השני), התקבל מצב שיצאו בו 2 אלומות, כלומר $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$. בשלב זה היה ברור שצריך להוסיף עוד מספר קוונטי ־ הספין של האלקטרון ־ $\pm\frac{1}{2}$.

נתון נוסף שהתגלה בניסוי, הוא שהמומנט המגנטי של האלקטרון כתוצאה מהספין $\frac{1}{2}$ הוא $\boldsymbol{\mu}_s = g\mu_B \underbrace{\hat{\mathbf{S}}_z}_{\pm\frac{1}{2}\hbar} /\hbar$ ו־$g \simeq 2$, כפי שנמדד בניסוי.

למה הספין נושא שדה מגנטי? ספין היא דרגת חופש פנימית..

את העובדה הזו השלים דיראק כשהוא רשם את ההמילטוניאן כך שיהיה קונסיסטנטי עם תורת היחסות.

- ספין $\frac{1}{2}$ אינו תנע זוויתי אורביטלי, אלא קיים במרחב הילברט פנימי , חדש , שאינו שייך ל־$\mathbb{R}^3$.

12.3.1 מרחב ספין $\frac{1}{2}$

זהו מרחב הילברט חדש, ממימד שתיים, שהבסיס שלו הוא $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$, המצבים העצמיים של S^z.

$$S^z = \frac{1}{2}\hbar\underbrace{\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}}_{\sigma^z} \quad (12.32)$$

$$S^x = \frac{1}{2}\hbar\underbrace{\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}}_{\sigma_x} \quad (12.33)$$

$$S^y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \quad (12.34)$$

ניתן לאגוד של שלושת המטריצות לקטור ולסמן

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \quad (12.35)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (12.36)$$

המטריצות מכונות **מטריצות פאולי.**

תכונות

- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = 1$
-

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z \quad (12.37)$$

$$\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x \quad (12.38)$$

$$\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y \quad (12.39)$$

- עבור $\alpha = x, y, z$

$$e^{i\theta\sigma^\alpha} = \sum_{n|2}\frac{(i\theta)^n}{n!}\underbrace{(\sigma^\alpha)^n}_{=1} \quad (12.40)$$

$$+\sum_{n\nmid 2}\frac{(i\theta)^n}{n!}\underbrace{(\sigma^\alpha)^n}_{\sigma_\alpha} \quad (12.41)$$

$$= \cos\theta + i\sigma^\alpha\sin\theta \quad (12.42)$$

מצבים עצמיים של σ_z הם $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. בהצגה ש ל־$S^2$ ־ $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.
המצבים העצמיים של σ^x ־

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix} \tag{12.43}$$

(כי הערכים העצמיים הם ± 1,)

$$\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = |+x\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = |-x\rangle \tag{12.44}$$

נגדיר ־

$$|+\hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \tag{12.45}$$

$$|-\hat{\mathbf{x}}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \tag{12.46}$$

אפשר לוודא את זה במאצעות ניסוי שטרן־גרלך כפול ־ אחרי שקבענו את הספין של אלקטרון בציר z, נבצע את הניסוי שנית, ונראה לאן קורסים האלקטרונים הפעם.
הניסוי הראשון מבצע קיטוב של האלומה, והאלומה המתקבלת עם קוהרנטים עם $|\uparrow\rangle$. אחר כך מכניסים את האלומה למקטב על ציר x , והסיכוי לכל תוצאה של S_x היא חפיפה בין הפונקציה הנמדדת.
עבור $\mathbf{B} = B\cdot\hat{\mathbf{n}}$, $\hat{\mathbf{n}}$ וקטור יחידה

$$\hat{\mathbf{n}} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{12.47}$$

$$H = \frac{-g\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S} = -g\mu_B B\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{12.48}$$

$$\hat{\mathbf{n}}\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi}\\ \sin\theta e^{+i\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{12.49}$$

כאשר האופרטור מוצג במטריצה.
נלכסן את $\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$. הערכים העצמיים הם ± 1 (לפי החוקים של הכפלה של מטריצות פאולי)
מצבים עצמיים עם ע"ע $+1$ ־

$$\hat{\mathbf{n}}\boldsymbol{\sigma}\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix} \tag{12.50}$$

נמצא את u ו־v־

$$u\cos\theta + \sin\theta e^{-i\phi}v = u \tag{12.51}$$

$$\sin\theta e^{i\phi} - \cos\theta v = u \tag{12.52}$$

נסמן $x = \frac{u}{v}$,

$$\cos x + \sin\theta e^{-i\phi} = x \tag{12.53}$$

$$x = \frac{\sin\theta e^{i\phi}}{1-\cos\theta} = \frac{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}{2\sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{12.54}$$

$$= \frac{\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}}{\sin\frac{\theta}{2}} = x = \frac{u}{v} \tag{12.55}$$

וגם, $|u|^2 + |v|^2 = 1$, אז קיבלנו פתרון שהוא:

$$u = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}$$
$$v = \cos\frac{\theta}{2}e^{+i\phi/2}$$

נגדיר מצב ־

$$\hat{\mathbf{n}}\boldsymbol{\sigma}\left|+\hat{\mathbf{n}}\right\rangle = \left|+\hat{\mathbf{n}}\right\rangle$$

$$\left|+n\right\rangle = (u, v) \tag{12.56}$$

$$\left|+n\right\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\left|\uparrow\right\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\left|\downarrow\right\rangle \tag{12.57}$$

וזו ההצגה בבסיס $\left|\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\right\rangle$.
נציב מקטב אחד בכיוון z, ומקטב שני בכיוון $\hat{\mathbf{n}}$.

- מקור של חלקיקים בקטוב בלתי ידוע יגיע למקטב הראשון
- למקטב השני יגיעו רק חלקיקים בקיטוב $\left|\uparrow\right\rangle$, בזרם I .
- אחרי המקטב השני, יש לנו $I_{\left|+n\right\rangle}$. נחשב

$$R = \frac{I_{\left|+n\right\rangle}}{I_{\left|\uparrow\right\rangle}} = \left|\left\langle\uparrow\right|+\hat{\mathbf{n}}\rangle\right|^2 \tag{12.58}$$

$$= \cos^2\frac{\theta}{2} \tag{12.59}$$

$R = 1$ אם $\theta = 0$, ושני המקטבים הם באותו כיוון. אם $\theta = 90^\circ$, $R = \frac{1}{2}$. אם $\theta = 120^\circ$, $R = \frac{1}{4}$. עבור $\theta = 180^\circ$, נקבל $R = 0$. כלומר ־ חסימה מוחלטת נקבל רק כשהמקטב השני הפוך לראשון.

נבצע את אותו חישוב עם שני מקטבים - $\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{n}}'$.

$$\begin{aligned}
R^{++}_{n,n'}\left|\langle +n| + n'\rangle\right| &= \left(\cos\frac{\theta}{2}e^{+i\theta/2}, \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\right)\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta'}{2}e^{-i\frac{\phi'}{2}}\\ \cos\frac{\theta'}{2}e^{+i\frac{\phi'}{2}}\end{pmatrix} && (12.60)\\
&= \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}e^{i(\phi-\phi')} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}e^{-\frac{i(\phi-\phi p)}{2}} && (12.61)\\
&= \ldots && (12.62)\\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\left(\cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos\left(\phi-\phi'\right)\right) && (12.63)\\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}' && (12.64)
\end{aligned}$$

אז קיבלנו -

$$R_{|\langle +n|+n'\rangle|^2} = \left(\frac{1+\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{n}}'}{2}\right) \tag{12.65}$$

בעיה נקח 3 מקטבים - אחד בכיוון $\hat{\mathbf{z}}$, שני בכיוון $\hat{\mathbf{x}}$, ושלישי בכיוון $\hat{\mathbf{z}}$. חלקיק עבר את המקטב הראשון, וחלקיקים בכיוון $\langle\uparrow|$ עברו למקטב השני.

לאחר מכן, מחצית מהחלקיקים עבור את מקטב $\hat{\mathbf{x}}$, ואלו שנמצאו עם $\langle +\hat{\mathbf{x}}|$, עוברים למקטב $\hat{\mathbf{z}}$ השני. נמצא כי מחצית מהחלקיקים עברו את המקטב השלישי בקיטוב $\langle\downarrow|$, למרום שהם קודם נמדדו עם רכיב $\langle\uparrow|$בלבד. הסיבה לכך - המדידה בכיוון $\langle\hat{\mathbf{x}}|$ שקרסה את פונקצית הגל . אין לחלקיקים זיכרון שהם היו מקוטבים $\langle\uparrow|$לפני הקריסה. .

12.4 פרצסיה של ספין

נתון ספין מקוטב $|n_0\rangle$, בשדה $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$.
ההמילטוניאן הוא

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{g\mu_B}{\hbar}BS^z && (12.66)\\
|n_0\rangle &= \cos\frac{\theta}{2b}e^{-i\phi/2}\left|\uparrow\right\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\left|\downarrow\right\rangle && (12.67)\\
E_\pm &= \pm\left(\frac{g\mu_B B}{2}\right) = \mp\frac{\hbar\Omega}{2} && (12.68)
\end{aligned}$$

אזי

$$\begin{aligned}
|n_0(t)\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2+i\Omega\frac{t}{2}}\left|\uparrow\right\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{+i\phi/2-i\Omega\frac{t}{2}}\left|\downarrow\right\rangle && (12.69)\\
&= \left|\theta, \phi-\Omega t\right\rangle && (12.70)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\Omega = \frac{g\mu_B B}{\hbar}} \tag{12.71}$$

היא תדירות הפרצסה (מכונה גם תדירות לרמור). הפרצסיה לא תלויה בזווית θ.
ו־ϕ משתנה במהירות קבועה.
נסתכל על $t_{2\pi}=\frac{2\pi}{\Omega}$ - זמן מחזור לסיבוב שלם.

$$\left|n\left(t_{2\pi}\right)\right\rangle=(-)\left|n_0\right\rangle \tag{12.72}$$

$$e^{iS^z 2\pi/\hbar} = e^{i\sigma^z\pi}=\begin{pmatrix} e^{i\pi} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi}\end{pmatrix} \tag{12.73}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{12.74}$$

יש אפקט פיזיקאלי שניתן למדוד על ידי כך שספין חצי הופך את הסימון של פונקציה הגל, בהתאבכות של שני "קרני" חלקיקים.
פאזה זו נקראת פאזה של Berry.
לאלקטרון סביב האטום יש מומנט מגנטי, אבל גם לפרוטון ולניוטרון יש מומנטים, μ_p, μ_n בהתאמה.
בעוד שלניוטרון אין מטען חשמלי, הוא יוצר בכל זאת שדה מגנטי.

12.4.1 NMR

זהו בסיס לתופעה שנקראת Nuclear Magnetic Ressunance - NMR
התגלו בעקבות בליעות של גלי מיקרוגל על ידי מים, אמוניה, בתדירויות של $\hbar\Omega$.
באמצעות השיטה הזו ניתן לנתח את ההרכב של החומר. זמני הדעיכה, למשל, מעידים על הסביבה של מולקולה.
ב־1977 הציעו לנצל את האפקט לצורך דימות של רקמות ביולוגיות. וככה יצא מזה MRI.
מקשרים בין

$$\Omega(\mathbf{r})=\mathbf{B}\left(\mathbf{r}\right) \tag{12.75}$$

וככה אפשר לפרוש את הרקמות בהשפעת שדה מגנטי משתנה.

חלק V
תורת ההפרעות

13 כללי

עד כה, נמנענו מלטפל בבעיות שלא ניתן לפתור אנליטית במדויק. אבל אין כל כך הרבה בעיות כאלו...
קירובים בפיזיקה זה הרבה יותר מטריקים לקבל תשובות גרועות מחוסר ברירה.
נתון המילטוניאן H מסובך, שלא ניתן לפתרון אנליטי.
נרשום את

$$H=H_0+\lambda H' \tag{13.1}$$

כאשר H_0 הוא המילטוניאן פשוט, הניתן ללכסון, ו־λ הוא קבוע הפיתוח. נשאף ש־$\lambda H'$ יהיה אופרטור "קטן".

פותרים את H בעיקר עד סמך הידע שלנו לגבי מה שקורה ב־H_0.

במובן מסויים ־ שנבין בדיעבד, H' קטן. יש לנו פתרון של H_0 במרחק λ בכיוון H' מהפתרון של H.

הרעיון של תורת ההפרעות הוא רעיון כללי ומשמש בהמון מקומות בפיזיקה

13.0.2 למשל אטום המימן

H_0 יהיה ההמילטוניאן שהכרנו של אטום המימן ו־

$$H' = f(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{13.2}$$

זהו צימוד ספין אורביטלי.

$$H' = e\varepsilon_z z \tag{13.3}$$

זהו אפקט סטרק.

13.0.3 אוסצילטור הרמוני

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{13.4}$$

בתוספת להפרעה אנהרמונית

$$H' = H'x^4 \tag{13.5}$$

או במצבים בהם יש אינטראקציה ־

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum H_0\left(p_i, r_i\right) && (13.6)\\ H' &= \sum_{i<j} V\left(r_i - r_j\right) && (13.7)\end{aligned}$$

14 תורת ההפרעות הלא־מנוונת

תורת ההפרעות היא פיתוח לסדרים של λ.

לכל

$$H_0\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle \tag{14.1}$$

עבור

$$\begin{aligned} \left(H_0+\lambda H'\right)\left|\varphi_n\right\rangle &= E_n\left|\varphi_n\right\rangle \\ \left|\varphi_n\right\rangle &= \left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|\varphi_n^{(2)}\right\rangle && (14.2)\\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}\end{aligned}$$

ואנחנו רוצים שה־λ יהיה קטן מספיק כדי שלא תהיה חפיפה בין E_i שונים בעקבות התיקונים.

14.0.4 המטרה

חישוב המקדמים $E_n^{(i)}$ והתיקונים למצבים עצמיים - $\left|\varphi_n^{(i)}\right\rangle$.

חישובשל התיקונים לפי הסדר של λ^i.

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= g(\lambda) && (14.3)\\ f_1^{(0)} + f_1^{(1)}\lambda + f^{(2)}\lambda^2 + \ldots &= g_0^{(0)} + g_1^{(1)}\lambda + g_2^{(2)}\lambda^2 && (14.4)\end{aligned}$$

נציב את משוואה 14.2 במשוואת שרדינגר. נרשום משוואה לכל סדר ב־λ_i.

$$\begin{aligned} &(H_0+\lambda H')\left(\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + \ldots\right) && (14.5)\\ = \;&\left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \ldots\right)\left(\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + \ldots\right) && (14.6)\end{aligned}$$

נשווה מקדמים - של λ^0

$$H_0\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^0\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle \tag{14.7}$$

בסדר ראשון - - λ^1

$$\left\langle\varphi_n^{(0)}\right|\cancel{\chi}\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + \cancel{a\left|\varphi_n\right\rangle} = \cancel{\chi}\left(E_n^{(1)} - H'\right)\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle \tag{14.8}$$

נבחר, $\left\langle \varphi_n^{(1)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle = 0$ בלי הגבלת הכלליות (תוספת שרירותית של $\alpha\left|\varphi^{(0)}\right\rangle$ ל־$\left|\varphi^{(1)}\right\rangle$ לא משנה את המשוואה)

נגדיר את הפיתוח , $\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_{m\neq n} C_{nm}\left|\varphi_m^{(0)}\right\rangle$. ונציב את זה במשוואה 14.8, נכפיל משמאל ב־$\left\langle\varphi_m^{(0)}\right|$ ונקבל:

$$\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)C_{nm} = E_n^{(1)}\delta_{nm} - \underbrace{\left\langle\varphi_m^{(0)} \mid H' \mid \varphi_n^{(0)}\right\rangle}_{H'_{mn}} \tag{14.9}$$

כאשר H'_{mn} הוא אלמנט מטריצה של ההפרעה H' בבסיס הלא מופרע של $\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle$.

נציב, $m = n$. אזי$C_{nn} = 0$ ו־

$$E_n^{(1)} = \left\langle\varphi_n^{(1)} \mid H' \mid \varphi_n^{(1)}\right\rangle = H'_{nn} \tag{14.10}$$

וזהו ערך התצפית של H' במצב הלא מופרע של $\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle$.

14.0.5 חישוב של C_{mn}

כאשר $n \neq m$,

$$C_{mn} = \frac{-H'_{mn}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{14.11}$$

אזי

$$\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_{m\neq m} C_{mn}\left|\varphi_m^{(0)}\right\rangle = -\sum_{m\neq n}\frac{H'_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{14.12}$$

אם יש ניוון - הטור מתבדר. לכן כרגע אנחנו מדברים רק על מצב בלי ניוון.

על מנת שהטור יהיה קטן, $\left|H'_{mn}\right| \ll \left|E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right|$. זהו "אופרטור הפרעה קטנה".

14.0.6 סדר שני - λ^2

$$\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)\left|\varphi_n^{(2)}\right\rangle = \left(E_n^{(1)} - H'\right)\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + E_n^{(2)}\left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle \tag{14.13}$$

נבחר - $\left\langle\varphi_n^{(2)}|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = 0$. נכפול משמאל ב־$\left\langle\varphi_n^{(0)}\right|$.צד שמאל מתאפס ונשארים עם המשוואה

$$0 = -\left\langle\varphi_n^{(0)}|H'|\varphi_n^{(1)}\right\rangle + E_n^{(2)} \tag{14.14}$$

מציבים את משוואה 14.12 עבור $\left|\varphi^{(1)}\right\rangle$ ומקבלים ביטוי סגור:

$$E_n^{(2)} = -\left\langle\varphi_n^{(0)}\left|H'\sum_{m\neq n}\frac{H'_{m,n}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}\right|\varphi_m^{(0)}\right\rangle \tag{14.15}$$

$$= -\sum_{m\neq n}\frac{H'_{nm}H'_{mn}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{14.16}$$

בטוי זה תלוי אך ורק בערכים העצמיים ואלמנטי מטריצה של H' בבסיס של H_0.

14.0.7 מסקנות

מצב היסוד: התיקון בסדר שני לאנרגיה תמיד שלילי.

$$E_0^{(2)} = -\sum_{m<0}\frac{\overbrace{H'_{0m}H'_{m0}}^{=|H'|^2>0}}{E_m^{(0)} - E_0^{(0)}} < 0 \tag{14.17}$$

נניח שיש שתי רמות כמעט מנוונות (קרובות מאוד) - E_m, E_0. אז האיבר שמחסר בין 2 הרמות הללו יהיה גדול למדי, אבל עבור n - התיקון יהיה שלילי ועבור $n+1$ התיקון יהיה חיובי. זה נקרא Level Repulsion. 2 הרמות קרובות כאשר $\lambda = 0$, אבל מתרחקות כאשר מגדילים את λ.

14.1 אופרטור הרמוני עם הפרעה לינארית

ההמילטוניאן -

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - \gamma x \tag{14.18}$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{14.19}$$

$$\lambda H' = -\gamma x = \underbrace{\frac{-\gamma}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}_{\lambda/\sqrt{2}}\left(a^\dagger + a\right) \tag{14.20}$$

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{14.21}$$

אין תיקון מסדר ראשון מכיוון ש־$\langle m|x|n\rangle = 0$.
נחשב את התיקון מסדר שני ־

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= -\frac{\lambda^2}{2}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n\,|\,(a+a^\dagger)\,|\,m\rangle\,\langle m|a+a^\dagger|n\rangle}{(m-n)\,\hbar\omega} && (14.22)\\
&= -\frac{\lambda^2}{2}\left(\frac{(n+1)}{\hbar\omega}-\frac{n}{\hbar\omega}\right)=\frac{\lambda^2}{2\hbar\omega} && (14.23)\\
&= -\frac{\gamma^2}{m\omega^2} && (14.24)
\end{aligned}$$

התשובה אינה תלויה ב־n, וקיבלנו גודל בלתי תלוי ־n, שאומר ־

$$E_n \cong \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{\gamma^2}{m\omega^2} \tag{14.25}$$

זו בעיה שאפשר לפתור במדויק ־

$$\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}kx-\gamma x && (14.26)\\
&= \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}k\left(\underbrace{x-\frac{\gamma}{k}}_{y}\right)^2-\frac{\gamma^2}{2k} && (14.27)
\end{aligned}$$

תיקון הספקטרום מסדר שני נתן את הספקרום המדויק של $H_0-\gamma x$.

$$E_n = E_n^{(0)}-\lambda^2E_n^{(2)}+0\cdot\lambda^3+\cdots \tag{14.28}$$

התיקון לפונקצית הגל ־

$$\begin{aligned}
\left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle &= \sum_{m\neq n}\frac{\overbrace{H'_{mn}}^{-\frac{\lambda}{2}\left(n|a+a^\dagger|m\right)}}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\left|\varphi_m^{(1)}\right\rangle && (14.29)\\
&= \frac{\lambda}{\sqrt{2}\hbar\omega}\left(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle-\sqrt{n}\,|n-1\rangle\right) && (14.30)\\
&= -\frac{i\lambda}{\hbar\omega}\left(\frac{a^\dagger-a}{\sqrt{2}i}\right)|n\rangle=-\left(\frac{\gamma}{k}\right)\frac{p}{\hbar}\,|n\rangle && (14.31)
\end{aligned}$$

כלומר, אפשר לרשום גם

$$
\begin{aligned}
|\varphi_n\rangle &= |\varphi_n\rangle + \left|\varphi_n^{(1)}\right\rangle = \left(1 - i\left(\frac{\gamma}{k}\right) P/\hbar\right) \left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle && (14.32) \\
&\cong e^{-i\left(\frac{\gamma}{k}\right)p/\hbar} \left|\varphi_n^{(0)}\right\rangle && (14.33)
\end{aligned}
$$

קיבלנו את הפיתוח לסדר ראשון של אופרטור ההזזה ב־$\frac{\gamma}{k}$.

הערה 14.1 λמשמש כמקדם פתוח על מנת לאסוף איברים מסדר זהה. נוכל אחר כך להציב $\lambda = 1$ ולפשט את הביטויים.

14.2 אפקט סטרק

- אנרגית מצב היסוד מתוקנת כאשר אטום נמצא בשדה חשמלי. הוא מסביר את המקדם הדיאלקטרי הסטטי של גז מימן.

$$H = H_0 + \lambda H' \tag{14.34}$$

כאשר H_0 הוא הפוטנציאל של אטום המימן .

$$\lambda H' = e\varepsilon_z z \tag{14.35}$$

הנגזרת השניה של האנרגיה נקראת הקיטוב של האטום.

$$E_1 = E_1^{(0)} + \lambda \underbrace{\langle\psi_{100}|H'|\psi_{100}\rangle}_{=0} + \lambda^2 \sum_{nlm\neq 100} \frac{\left|\langle 100|H'|nlm\rangle\right|^2}{E_{nlm}^{(0)} - E_1^{(0)}} \tag{14.36}$$

מצב היסוד הוא ספירה סימטרית ־ אין לו תלות זוויתי. כשאר אנחנו עושים אינטגרל על כדור על פונקציה כדורית, האינטגרל יתאפס ־ $\langle z\rangle = 0$

$$\int d^3r\rho(\mathbf{r})z = 0 \tag{14.37}$$

אם $\rho(z)$ סימטרי כלפי z, אז התרומות יתאפסות ב־$z, -z$.

נותר להסתכל על האיבר השני.. המכנה חסום על ידי

$$
\begin{aligned}
E_{nl,} - E_1 &\geq E_2 - E_1 = \frac{3}{4}|E_1| && (14.38) \\
&= \frac{3}{8}\frac{e^2}{a_B} && (14.39)
\end{aligned}
$$

$$\left|E^{(2)}\right| \leq \frac{8}{3e^2} a_B \sum_{nlm\neq 100} \left|\langle 100|H'|nlm\rangle\right| \tag{14.40}$$

נשתמש בפיצול היחידה - $I = \sum_{mlm} |nlm\rangle \langle nlm|$, אזי,

$$= \frac{\lambda^2 8a_B}{2e^2} \left\langle 100 \,\middle|\, H'^2 \,\middle|\, 100 \right\rangle \geq \left| E^{(2)} \right| \tag{14.41}$$

$$\lambda^2 \left\langle 100|H'^2|100 \right\rangle = e^2\varepsilon_z^2 \int dr\, r^2 \int d\cos\theta \int d\phi \left|\psi_{100}\left(\mathbf{r}\right)\right|^2 \underbrace{r^2\cos^2\theta}_{z^2} \tag{14.42}$$

$$= e^2\varepsilon_z^2 \underbrace{\left\langle r^2 \right\rangle}_{3a_B^2} \underbrace{\left\langle \cos^2\theta \right\rangle}_{\frac{1}{3}} = e^2\varepsilon_z^2 a_B^2 \tag{14.43}$$

וקיבלנו -

$$E_1 = E_1^{(0)} - \frac{1}{2}\alpha\varepsilon_z^2 \tag{14.44}$$

ו-

$$\alpha \leq \frac{16}{3}a_B^3 \tag{14.45}$$

בחישוב מדוייק מקבלים שזהו מקדם הקיטוב של המימן - $\alpha = \frac{9}{2}a_B^3$, כלומר - מתאים לחסם הגס שקיבלנו.

15 תורת ההפרעות בהצגה מטריציונית

נכתוב את ההצגה המטריציונית של $H_0 + \lambda H'$, בבסיס המצבים העצמיים של H_0

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & & & \\ & E_2^{(0)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & E_n^{()} \end{pmatrix} \tag{15.1}$$

$$\lambda H' = \lambda \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & \cdots \\ H'_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \\ & & \end{pmatrix} \tag{15.2}$$

כאשר אנחנו לא יודעים דבר על H' מלבד שהיא הרמיטית (ולכן ניתנת ללכסון)

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda H'_{nn} - \lambda^2 \sum_{m \neq m} \frac{\left|H'_{nm}\right|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{15.3}$$

- בקירוב מסדר ראשון, "אכפת לנו" רק מהאיברים האלכסוניים של H'.
- בקירוב מסדר שני, "אכפת לנו" רק מהאיברים הלא-אלכסוניים של H'

15.0.1 דוגמה - 2×2

$$H_0 = \epsilon_0 \sigma^z = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 \\ 0 & -\epsilon_0 \end{pmatrix} \tag{15.4}$$

$$\lambda H' = \lambda \sigma^x \begin{pmatrix} 0 & \lambda \\ \lambda & 0 \end{pmatrix} \tag{15.5}$$

$$E_\pm = \pm\sqrt{\epsilon_0^2 + \lambda^2} \tag{15.6}$$

הערה 15.1 ככה מלכסנים מהר מטריצות 2×2 - ניתן לרשום כל מטריצה הרמיטית 2×2 כ-

$$H = (aI + \mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}) \tag{15.7}$$

כאשר a מספר כלשהו, $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ וקטור מקדמים, ו-$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ מטריצת פאולי.
הערכים העצמיים של H הם $a \pm |\mathbf{b}|$

$$E_\pm = \sqrt{\epsilon_0^2 + \lambda^2} = \pm\left(\epsilon_0 + \frac{\lambda^2}{2\epsilon} + o\left(\lambda^2\right)\right) \tag{15.8}$$

אנחנו רוצים לדעת מה קורה לערכים העצמיים כשמוסיפים מטריצה נוספת.
אם המטריצות מתחלפות - לוקחים את סכום האיברים העצמיים של שני המטריצות.
אם הן לא מתחלפות - אנחנו צריכים ללכסן את סכום המטריצות. תורת ההפרעות אומרת לנו איך אפשר "ללכסן" על ידי שימוש במצבים עצמיים של H_0.

16 תורת ההפרעות המנוונת

$$H_0 = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\bar n}^{(0)} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_{\bar n}^{(0)} \end{pmatrix} & & 0 \\ & \begin{pmatrix} E_{n'}^{(0)} & 0 \\ 0 & E_{n'}^{(0)} \end{pmatrix} & \\ 0 & & \begin{pmatrix} \ddots \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{16.1}$$

לכל תת מרחב מנוון

$$H_0 \left|\varphi_{n,i}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|\varphi_{n,i}\right\rangle, i = 1, \dots g \tag{16.2}$$

יש חופש לבחור כל מטריצה אוניטרית

$$\overbrace{U}^{g\times g} \left|\varphi_{n,i}\right\rangle = \left|\psi_{m,i}\right\rangle \tag{16.3}$$

כך ש־

$$U^\dagger H_0 U = H_0 \tag{16.4}$$

, מכיוון שבעצם H_0 פרופורציונאלית למטריצת היחידה בתת מרחב המנוון.

נוסיף את $\lambda H'$, שהיא **מטריצה לא** אלכסונית בתת המרחב המנוון. נבחר את U המלכסן את $\lambda H'$ בתת־מרחב המנוון.

$$U = \begin{pmatrix} (1) & & & \\ & (1) & & \\ & & U_{g\times g} & \\ & & & (1) \end{pmatrix} \tag{16.5}$$

כך ש־

$$U^\dagger H' U = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & \begin{pmatrix} E_1^1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_1^g \end{pmatrix} & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \tag{16.6}$$

כלומר, הוא מלכסן רק את H' בתת המרחב המנוון (שאר האיברים של H' הופכים לאלמנטי מטקיצה שאינם אפס)

כשנחזור על הפעולה בכל תתי המרחבים המנוונים, נקבל את המצבים העצמיים של H', והערכים העצמיים יתנו

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_{n,i}^{(1)} \tag{16.7}$$

כאשר $E_{n,i}^{(1)}$ הם ערכים עצמיים של H' בתת־מרחב מנוון.

- בתורת ההפרעות הבלתי־מנוונת ־ התיקון מסדר ראשון הוא ערך התצפית של $\lambda H'$ במצב הבלתי מנוון.
- בתורת ההפרעות המנוונת ־ עלינו קודם ללכסן את H' בתת־המרחב המנוון, הניוון מוסר על ידי הערכים העצמיים של $\lambda H'$.

סדרים גבוהים (לא בחומר)

$$U^\dagger \left(H_0 + \lambda H'\right) U \tag{16.8}$$

כאשר U מלכסן את H' בתתי־המרחבים המנוונים של H_0.

$$= \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} E_n^{(0)} + \lambda E_{ni}^{(1)} & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} & \left(U^\dagger \left(\lambda H'\right) U_n'\right) \\ & \begin{pmatrix} \ddots & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{16.9}$$

כאשר $U = \begin{pmatrix} (U_n) & & & \\ & (U_{n'}) & & \\ & & (U_{n''}) & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$, היא מטריצת בלוקים אלכסונית עם בלוקים $(U_n)_{g\times g}$.

- H' אינה בלוק־אלכסונית, אלא הבלוקים על האלכסון הם אלכסוניים

$$E_{n_i}^{(2)} = -\lambda^2 \sum_{\substack{n' \neq n \\ j}} \frac{\langle n,i \,|\, \left(U_n^{\dagger} H' U_{n'}\right) \,|\, n,j \rangle}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \tag{16.10}$$

כאשר $E_{n'}^{(0)}, E_n^{(0)}$ הם ערכים עצמיים של H_0.

- תורת ההפרעות טובה רק כאשר ההפרעה קטנה. את ההצדקה הזו עושים רק לאחר החישוב (אם מוצאים שהמספרים המתקבלים הם קטנים יחסית ל־$E^{(0)}$.

16.1 חישוב - אוסצילטור הרמוני דו־מימדי

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} k \left(x^2 + y^2\right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + 1\right) \tag{16.11}$$

הפתרון מנוון -

$$E_{0,1} = E_{1,0} = 2\hbar\omega \tag{16.12}$$

$$\lambda H' = k' xy \tag{16.13}$$

$$H' = \gamma \begin{pmatrix} \langle 10|xy|10\rangle & \langle 10|xy|01\rangle \\ \langle 01|xy|10\rangle & \langle 01|xy|01\rangle \end{pmatrix} \tag{16.14}$$

הערכים האלכסוניים של H' הם אפס.

$$= \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{16.15}$$

ו-

$$E = 2\hbar\omega \pm \varepsilon \tag{16.16}$$

כאשר

$$\varepsilon = \frac{k'\hbar}{m\omega} \tag{16.17}$$

התידירויות הן

$$\omega\pm=\sqrt{\frac{k\pm k'}{m}} \tag{16.18}$$

- הפוטנציאל הופך ממעגל לאליפסה. הניוון שמוסר מהסימטריה המעגלית ־ מוסר.

16.2 אפקט סטארק המנוון ־ ברמה $n=2$.

$$|200\rangle \quad - \quad 2S \tag{16.19}$$
$$|2101\rangle\,|210\rangle\,|211\rangle \quad - \quad 2P \tag{16.20}$$

$$H'=e\varepsilon z \tag{16.21}$$

נסתכל על אלמנטי המטריצה .

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} S & \begin{array}{c}P\\-1\end{array} & \begin{array}{c}P\\0\end{array} & \begin{array}{c}P\\1\end{array}\end{array} \\ \begin{array}{c} S\rightarrow \\ P\rightarrow -1 \\ P\rightarrow 0 \\ P\rightarrow +1 \end{array} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \tag{16.22}$$

בקוארדינטות רדיאליות ־

$$z = \cos\theta \tag{16.23}$$
$$\langle m|z|m'\rangle = \int d\phi e^{-im\varphi}e^{+im'\phi}=\delta_{mm'} \tag{16.24}$$

כל השאר ־ מתאפסים.

$$\Delta = e3a\varepsilon_z \tag{16.25}$$
$$E_\pm = E_n^{(0)}\pm\Delta\rightarrow \begin{array}{c}|\psi_+\rangle\\|\psi_-\rangle\end{array} \tag{16.26}$$
$$E_n^{(0)} \rightarrow \begin{array}{c}|21-1\rangle\\21+1\end{array} \tag{16.27}$$

$$E_+\rightarrow|\psi_+\rangle = \frac{|200\rangle+|210\rangle}{\sqrt{2}} \tag{16.28}$$
$$E_-\rightarrow|\psi_-\rangle = \frac{|200\rangle-|210\rangle}{\sqrt{2}} \tag{16.29}$$

ועדין נשאר ניוון של $|21+1\rangle$, $|21-1\rangle$. הפיצול מכונה hybridisation SP.

16.2.1 מתי אפקט סטארק שגוי?

(ציור)

ברמות גבוהות, למשל, $n = 100$, רמות רידברג.
האלקטרונים כמעט מיוננים ־ קשורים חלש.
תורת ההפרעות תגיד לנו שהרמה תהיה מוזזת בהשפעת שדה חשמלי.
רמה גבוהה יכולה לדעוך. נניח ־ באמצעות מנהור ־

$$\psi(x) \propto e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2m(V-E)}} \tag{16.30}$$

לאלקטרון יש אפשרות, עם הסתברות סופית, לברוח החוצה ולהתיינן מהאטום באמעות מנהור. את האפקט הזה לא מקבלים באמצעות תורת ההפרעות בשום סדר. הפרמטר הקטן שלנו אינו מאפשר פיתוח ללא תור חזקות (non-pertubtive).

חלק VI
נספחים

א' אלגברה ואופרטורים

א'.1 אלגברה לינארית בשפת דיראק

נתון אופרטור הרמיטי, $H = H^\dagger$, בהצגה בבסיס מסויים שלם ־ $\{|\psi_n\rangle\}$. כלומר ־ $I = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$.

$$\langle\psi_m \,|\, H \,|\, \psi_{m'}\rangle = H_{m,m'} \tag{A.1}$$

אנחנו רוצים את $|\varphi_n\rangle$ ו־E_n כך ש־ $H = \sum_n E_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$. זוהי הצגה אלכסונית, אבל בשיל להגיע אליה, אנחנו צריכים את המיפוי בין אברי הבסיס. $\{|\psi_n\rangle\} \to \{|\varphi_n\rangle\}$.
מחפשים את U, הטרנספורמציה הלינארית בין הבסיסים.

$$|\varphi_n\rangle = U|\psi_n\rangle \tag{A.2}$$

נניח שמצאנו את U, ואת

$$\underbrace{\langle\psi_n| U^\dagger}_{\langle\varphi_n|} H \underbrace{U|\psi_n\rangle}_{|\varphi_n\rangle} \tag{A.3}$$

U נקראת טרנספורמציה אוניטרית.

.1

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \tag{A.4}$$

נראה זאת

$$\left\langle \varphi_{m'} \,\middle|\, U^{\dagger}U \,\middle|\, \psi_m \right\rangle - \left\langle \varphi_{m'} | \varphi_m \right\rangle = \delta_{m,m'} \tag{A.5}$$

2. שומר נורמה -

$$\left\| U \left| \psi \right\rangle \right\|^2 = \left\langle \psi \,\middle|\, U^{\dagger}U \,\middle|\, \psi \right\rangle = 1 \tag{A.6}$$

(כאשר $\|\psi\| = 1$)

3. מעביר בסיסים.

2.א' הזזות וסימטריות

הגדרה 1.א' קבוצה סופית של אופרטורים המכילה את היחידה לכל אופרטור יש הופכי בחבורה, והחבורה סגורה תחת כפל.

אופרטורים אוניטריים מקיימים

$$U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = 1 \tag{A.7}$$

ניתן להגדיר איתם חבורה -

$$\{1, U_1, U_2, \ldots\} \tag{A.8}$$

$$U_3^{\dagger}U_3 = U_2^{\dagger}U_1^{\dagger}U_1U_2 = 1 \tag{A.9}$$

יש חבורות סופיות - קבוצה סופית של אופרטורים.
יש חבורות אינסופיות - $\{1, U(\alpha)\}$, יכול להיות רציף בקבוצה אינסופית.

חבורה דיסקרטית - אופרטור השיקוף

$$\begin{aligned} P &= P^{\dagger} && \text{(A.10)} \\ P^2 &= 1 \Rightarrow PP^{\dagger} = P^{\dagger}P = 1 && \text{(A.11)} \end{aligned}$$

אזי החבורה היא $\{1, p\}$.

חבורה אינסופית חבורה סימטריות ההזזות

$$T_a\psi\left(x\right)=\psi\left(x-a\right) \tag{A.12}$$

מזיז את כל הפונקציה ψ ימינה ב־a.

טענה 2.א' $T_a=e^{-iap/\hbar}$. $T_a^{\dagger}=e^{+iap/\hbar}$ (כאן, p הוא אופרטור התנע)

נחשב

$$\begin{aligned}\langle x|T_a|\psi\rangle &= \left\langle x\,\middle|\,e^{-iap/x}\,\middle|\,k\right\rangle\left\langle k\,|\,\psi\right\rangle & \text{(A.13)}\\ &= \int\frac{du}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx-ika}\psi(k) & \text{(A.14)}\\ &= \psi\left(x-a\right) & \text{(A.15)}\end{aligned}$$

דרך שניה -

$$\begin{aligned}e^{-iap/\hbar} &= e^{a\frac{\partial}{\partial x}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n} & \text{(A.16)}\\ e^{-iap/\hbar}\psi(x) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi(x)=\psi\left(x-a\right) & \text{(A.17)}\end{aligned}$$

הזזה בשלושה מימדים

$$\begin{aligned}T_{\mathbf{a}} &= e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}/\hbar} & \text{(A.18)}\\ T_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) &= \psi\left(\mathbf{r}-\mathbf{a}\right) & \text{(A.19)}\end{aligned}$$

אוסף ההזזות מהווה חבורה רציפה, מוגדרת על ידי פרמטר ממשי $\mathbf{a}$,

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &\in \mathbb{R}^3 & \text{(A.20)}\\ T_{\mathbf{a}} &\in \mathcal{H} & \text{(A.21)}\end{aligned}$$

יש קשר בין אופרטור התנע לסימטריה בהזזות.
אם H לא תלוי ב־x (לא תלוי בפוטנציאל) - הוא אינווריינטי להזזות.
נחשב את יחס החילוף

$$\left[H,T_{\mathbf{a}}\right]=0 \tag{A.22}$$

לכל $\mathbf{a}$. זו תכונה של המילטוניאן חופשי, ללא פוטנציאל.

הזזה אינפיניטסימלית

$$\mathbf{a} = d\mathbf{x} \tag{A.23}$$

$$T_{d\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{p}^{d\mathbf{x}}/\hbar} = 1 - ip^{d\mathbf{x}}/\hbar \tag{A.24}$$

הנגזרת של אופרטור ההזזה לפי dx הוא אופרטור התנע

$$\frac{T_{d\mathbf{x}} - 1}{dx^2} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \tag{A.25}$$

$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ - נקרא יוצר ההזזות.

$$T_{\mathbf{a}} = e^{-\mathbf{p}^{\mathbf{a}}/\hbar} \tag{A.26}$$

אם ההמילטוניאן מתחלף עם $T_{\mathbf{a}}$ לכל a

$$[H, T_{\mathbf{a}}] = [H, p] = 0 \tag{A.27}$$

$|k\rangle$ מצב עצמי של H כאשר $[H,p]=0$.

$$e^{-ip^{a}/\hbar}\,|k\rangle = e^{-i\mathbf{ka}}\,|k\rangle \tag{A.28}$$

א'.2.1 אופרטור הסיבוב ב-$\mathbb{R}^3$

1. במישור xy - הוספה של $d\phi$ ל-ϕ.

$$x = r\cos\phi \tag{A.29}$$
$$y = r\sin\phi \tag{A.30}$$
$$dx = r\sin\phi d\phi \tag{A.31}$$
$$dy = r\cos\phi d\phi \tag{A.32}$$

סיבוב פונקציה -

$$d\psi = \psi\left(x+dx, y+dy\right) - \psi\left(x,y\right) \tag{A.33}$$
$$= dx\frac{\partial}{\partial x}\psi + dy\frac{\partial}{\partial s}\psi = rd\phi\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{A.34}$$
$$= rd\phi\frac{L^z}{-i\hbar}\psi \tag{A.35}$$
$$d\psi = \left(R\left(d\phi\right) - 1\right)\psi \tag{A.36}$$

אזי

$$R\left(d\phi\right)=e^{-iL^{z}\frac{d\phi}{\hbar}} \tag{A.37}$$

וזהו יוצר הסיבובבים במישור xy .

הסיבובים במישור היא חבורה אבלית ־ מקיימת את חוק החילוף ־

$$R\left(d\phi_{1}\right)R\left(d\phi_{2}\right)=R\left(d\phi_{2}\right)R\left(d\phi_{1}\right)=R\left(d\phi_{1}+d\phi_{2}\right) \tag{A.38}$$

2. באופן כללי, במישור שמאונך ל־$\hat{\mathbf{n}}$

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}\left(d\psi\right)=e^{-i\hat{\mathbf{n}}\mathbf{L}\cdot d\psi/\hbar} \tag{A.39}$$

כדי לתאר סיבוב במישור כללי ־ הווקטור $\hat{\mathbf{n}}$ מגדיר מישור ניצב, ונגדיר את L_z כך ש־$\hat{\mathbf{n}}\mathbf{L}=L_{z'}$ ונתאים את הצירים כך ש־$\hat{\mathbf{n}}=\hat{\mathbf{z}}'$.

האם $R_1R_2=R_2R_1$ בסיבובים תלת מימדיים? לא. כלומר, חבורת הסיבובים בשלושה מימדית אינה אבלית

$$e^{-i\theta\frac{L_y}{\hbar}}e^{-i\theta\frac{L_z}{\hbar}}\neq e^{-i\theta\frac{L_z}{\hbar}}e^{-i\theta\frac{L_y}{\hbar}} \tag{A.40}$$

מכיוון ש־$[L_x,L_y]\neq 0$.

ההמילטוניאן אינורינטי לסיבובים, לכן המצבים העצמיים שלו הם מצבים עצמיים של אופרטורי היצירה של הסיבובים L^z,L^2 .

ההמילטוניאן מקיים ־ $\boxed{R^{\dagger}HR=H}$. (R ־ סיבוב)

מקיים כאשר $[H,R]=0$.