מכניקת הקוונטים 1

מבוא למכניקה קוונטית - שקפים.

ההסבר הקלאסי על ידי תורה אלקטרומגנטית:

- גל מישורי: $\vec{E}=\vec{E}_0\cos\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)$
- צפיפות אנרגיה אלקטרומגנטית ביחידות נפח: $u=\frac{1}{2}\varepsilon_0E^2=\frac{\varepsilon_0}{2}I$ (בקוונטים עובדים עם SI), כאשר, I – זו עוצמת האור.

$\underbrace{u}_{\text{ממוצע בזמן}}=\frac{1}{T}\int_0^T\frac{1}{2}\varepsilon_0E(t)^2$ ועל כן u איננו תלוי בתדירות ω.

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{\max}=eV_0=\frac{\varepsilon_0}{2}I$$

- $$(Millikam)\begin{cases}eV_0=h\nu-W\\ eV_0=\frac{h}{2\pi}\omega-W\end{cases}\qquad\left\{\underbrace{\nu}_{\text{תדירות}}=\frac{\omega}{2\pi}\right\}$$

Einstein (1905)-האפקט הפוטואלקטרי:

לאור יש התנהגות של חלקיק . ניתן למצוא קשר בין תופעת הגל הא"מ לחלקיק.

$E=h\nu=\frac{h}{2\pi}\omega\quad(E\propto\omega)$.

h – קבוע בססי של Planck .

מתוך ניסוי Millikan נקבל:

$h=6.62\cdot10^{-34}\left[J\cdot Sec\right]$ וגם $\boxed{h\nu=eV_0+W}$.

כלומר, ישנה אפשרות לתאר את הגל בצורת חלקיקים.

הפוטון:

$$E\longleftrightarrow\omega\quad\underbrace{\Rightarrow}_{\text{קיבלנו את הקשר}}\quad\boxed{E=\frac{h}{2\pi}\omega=h\nu}\quad,\quad\{[h]=[energy\times time]\}$$

$$\vec{p}\longleftrightarrow\vec{k}\quad\underbrace{\Rightarrow}_{\text{נחפש את הקשר ביניהם בעזרת היחידות}}\quad\frac{[p]}{[k]}=[M]\frac{[L]}{[T]}\times[L]=\left[\frac{ML^2}{T}\right]=[energy\times time]=[h]\quad\overbrace{\Rightarrow}^{\text{קיבלנו את הקשר}}\quad\boxed{\vec{p}=\frac{h}{2\pi}\vec{k}}$$

(מקסוול מצא $\varepsilon_0\mu_0c^2=1$)

לסיכום: $$\begin{cases}E=\frac{h}{2\pi}\omega=h\nu\\ \vec{p}=\frac{h}{2\pi}\vec{k}\end{cases}$$

נגדיר: $\hbar\triangleq\frac{h}{2\pi}$.

מסה של הפוטון:

הפוטון הינו חלקיק יחסותי.

עבור חלקיק יחסותי מתקיים: $E^2=p^2c^2+m_0^2c^4$.

ננסה לחלץ את m_0 על מנת למצוא את מסת הפוטון:

$$(\hbar\omega)^2=(\hbar k)^2c^2+m_0^2c^4 \underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{עבור גל} \\ \text{א"מ מתקיים} \\ \omega=ck}} \cancel{(\hbar\omega)}^2=\cancel{(\hbar\omega)}^2+m_0^2c^4\Rightarrow\underbrace{\boxed{m_0=0}}_{\text{מסת הפוטון}}$$

מהירות $\vec{u}$ של הפוטון:

באופן כללי מתקיים: $m\equiv\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\ ;;\ \vec{p}=\frac{m_0\vec{u}}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\ ;;\ E=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}$.

עבור הפוטון:

$$\underbrace{\frac{E}{c^2}}_{\text{סופי}}=\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\underbrace{\Rightarrow}_{\substack{m_0\to0 \\ \sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}\to0}}\underbrace{\boxed{u=c}}_{\text{מהירות הפוטון}}$$

הפוטון הוא חלקיק לכל דבר, אנו יכולים לתאר מסה, מהירות ואת האנרגיה שלו.

פיסיקה קוונטית והקבוע של *Plank* $(\hbar)$:

מימדים של h:

$$\text{פעולה}\equiv\frac{ML^2}{T}=E\times T\Leftarrow \hbar=time\times energy=length\times momentum=angle\times angular\ momentum$$

(אם מקבלים פעולה שהיא בסדר גודל מקורב לזה של h אז אנו דנים במערכת קוונטית)
פיסיקה קוונטית מוגדרת כמערכת שפעולתה בסדר גודל של $\hbar$.

דוגמא 1, האפקט הפוטו-אלקטרי:

אנרגיה באפקט הפוטו אלקטרי: $E=eV_0\approx1[eV]=1.6\cdot10^{-19}[J]$

$$\omega=\frac{2\pi}{\lambda}c=6\pi\cdot10^{15}\left[\frac{1}{\sec}\right]\quad\left(\lambda\approx10^3\left[\overset{0}{\mathrm{A}}\right]\right)\quad\left\{a\left[\overset{0}{\mathrm{A}}\right]=10^{-10}[m]\right\}$$

מערכת קוונטית $\Leftarrow \frac{E}{\omega}\approx10^{-35}[J\cdot\sec]\approx\hbar$.

דוגמא 2, אנטנה:

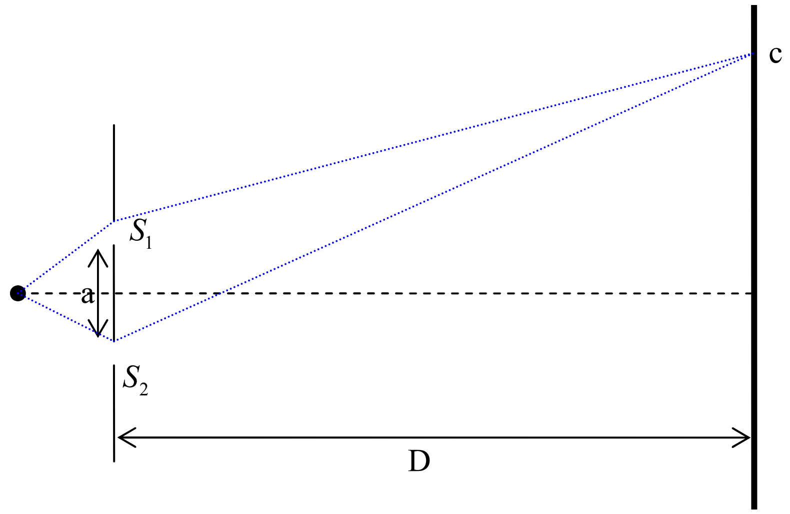
נתונים של אנטנת רדיו: $\underbrace{P}_{\text{הספק}}\approx1[KW]$, $\nu\approx1[MHz]$.

נחשב את הפעולה של התהליך:

אין צורך במערכת קוונטית $\Leftarrow \underbrace{P\times\nu^{-2}}_{\substack{\text{זו הקומבניצה} \\ \text{שנותנת לנו יחידות} \\ \text{של זמן}\times\text{אנרגיה}}}\approx10^{31}\hbar\gg\hbar$

(במקרה הזה אין צורך בקוונטים אבל אם יהיה לנו צורך בהספק גבוהה מאוד אז כן יהיה צורך במערכת קוונטים, כלומר תלוי בנתונים)

התאבכות של גלים, ניסוי יאנג:



$\underbrace{\psi(r,t)}_{\text{שדה חשמלי של הגל}}=\psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$ - זה הגל ההרמוני שלנו.

ידוע שניתן לתאר כל פתרון מדויק של בעיה אלקטרומגנטית בעזרת סופרפוזיציה.

האמפלידוטה בנקודה C: $\underbrace{\psi(c)}_{\text{אמפלידוטה בנקודה C}}=\psi_{S_1}+\psi_{S_2}$

והעוצמה בנקודה C היא: $I(c)=|\psi(c)|^2$.

שני הדברים הללו ניתנים על ידי העיקרון של Huyghens-Fresnel, האומר שניתן להפוך את הבעיה לבעיה של שני גלים מונוכרומטים.

נחשב את האמפלידוטה בנקודה C :

$$\psi(c)=\psi_0 e^{-i\omega t}\left(e^{i\vec{k}\vec{r}_1}+e^{i\vec{k}\vec{r}_2}\right)$$

$$\begin{cases}\vec{r}_1=\overrightarrow{S_1c}\\ \vec{r}_1=\overrightarrow{S_2c}\end{cases}$$

$$\Rightarrow I(c)=|\psi(c)|^2=|\psi_0|^2\left|1+e^{i\vec{k}(\vec{r}_2-\vec{r}_1)}\right|^2=2|\psi_0|^2\left(1+\cos\vec{k}(\vec{r}_2-\vec{r}_1)\right)$$

נגדיר פאזה: $\underbrace{\delta}_{\text{פאזה}}\triangleq\vec{k}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$ ונקבל,

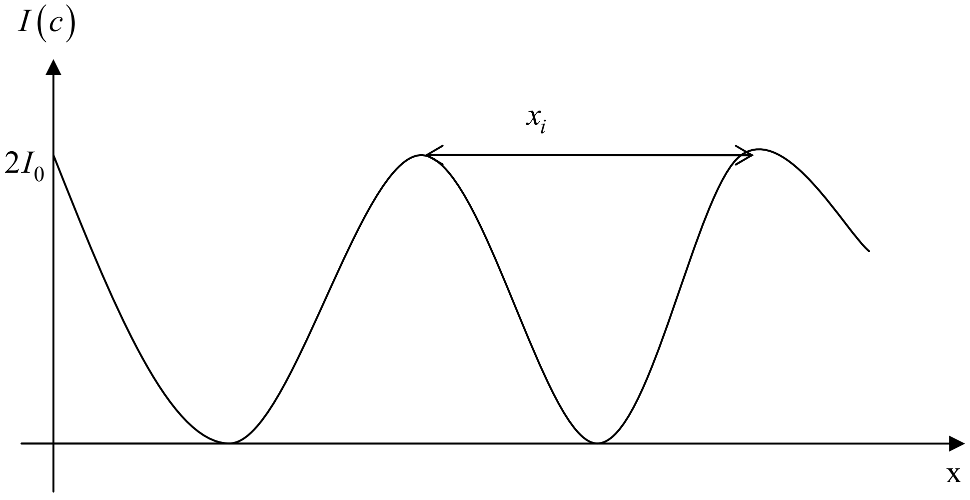
$$\delta=\frac{2\pi}{\lambda}\left(\cos\theta_1\left|\overrightarrow{S_1C}\right|-\cos\theta_2\left|\overrightarrow{S_2C}\right|\right)$$

בגבול של זויות קטנות: $\begin{cases}a\ll D\\ x\ll D\end{cases}\Leftarrow\cos\theta_1\simeq\cos\theta_2\simeq1$.

$$\delta\cong\frac{2\pi}{\lambda}\left(|S_1C|-|S_2C|\right)\underbrace{\cong}_{\text{לראות בתרגול}}\frac{2\pi}{\lambda}\cdot\frac{ax}{D}$$

$$I(c)=\underbrace{2|\psi_0|^2}_{\equiv I_0}\left(1+\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}\cdot\frac{ax}{D}\right)\right)$$

כלומר התמונה שהקבל הל המסך היא:

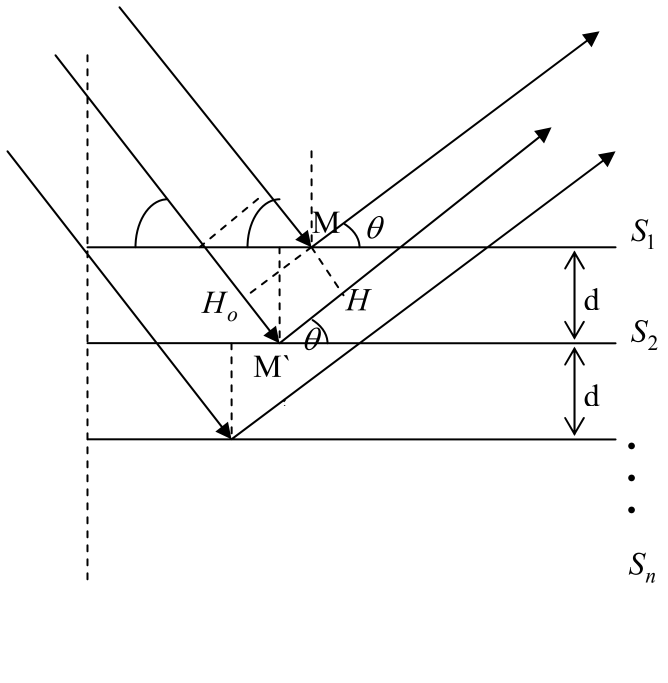


נחשב את x_i (מרחק בין שני מקסימומים):

$$\frac{2\pi}{\lambda}\frac{ax_i}{D}=2\pi n\ ,\ n\in\mathbb{Z}\Rightarrow x_i=\frac{\lambda D}{a}\cdot n$$

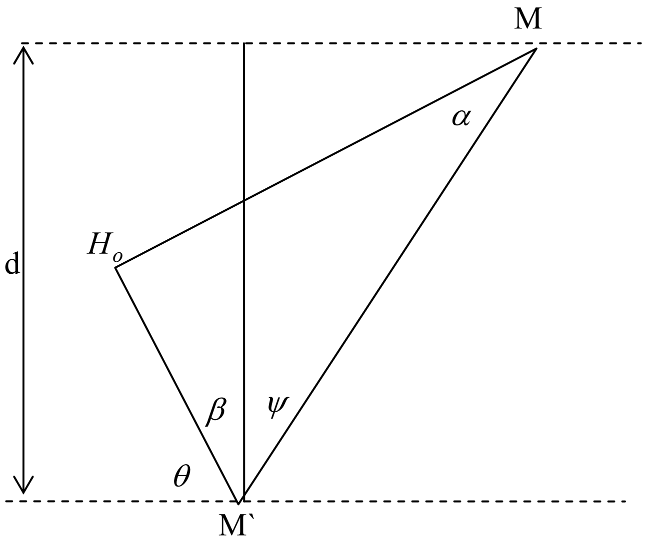
פיזור ***Bragg***:

פיזור של גלים א"מ על ידי גביש.



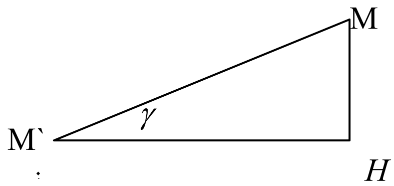
על מנת לקבל את תמונות ההתאבכות מספיק לנו שני מישורים סמוכים.

נגדיל את הציור:



$$H_oM' = \frac{d}{\cos\psi}\sin(\theta-\psi)\ .$$

$$\psi+\theta+\gamma=\frac{\pi}{2}$$



$$\Rightarrow \frac{M'H}{M'M}=\cos\gamma \Rightarrow M'H = M'M\cos(\theta+\psi)$$

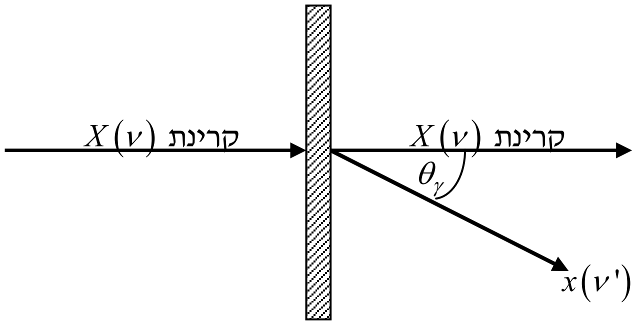
$$\frac{\lambda}{2\pi}\delta = \frac{d}{\cos\psi}\left[\sin(\theta-\psi)+\sin(\theta+\psi)\right] = \frac{d}{\cos\psi}2\sin\theta\cos\psi$$

$$\lambda = 2\pi n = 2d\sin\theta\frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \boxed{n\lambda = 2d\sin\theta}\ ,\ n=1,2,3,...$$

פיזור ***Compton*** (1922):

(הוכחה ראשונה של חלקיקיות האור)

הניסוי:



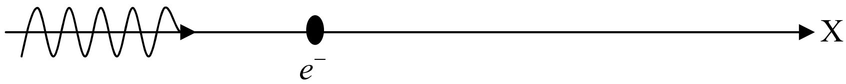
(מתכת $\Leftarrow$ אלקטרונים חופשיים)

נוסחת Compton:

$$\boxed{\underbrace{\lambda'-\lambda}_{\text{שינוי אורך הגל}}=\frac{h}{m_e c}\left(1-\cos\theta_\gamma\right)}$$, כאשר m_e - מסת האלקטרון.

הוכחה, פיזור של פוטון על ידי אלקטרון:

לפני ההתנגשות:

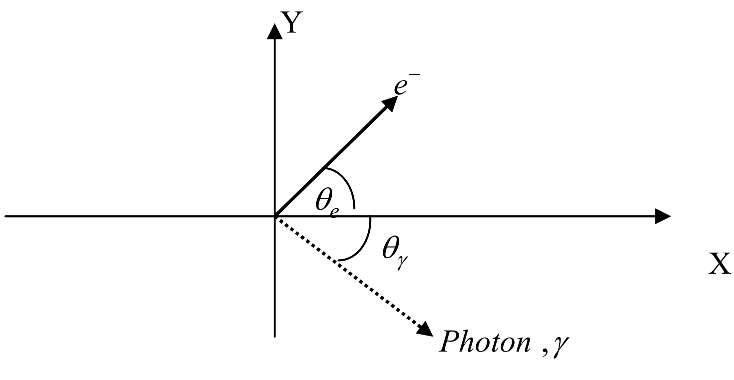


$$p=0 \qquad E_e=m_e c^2$$

$$p_\gamma=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda} \qquad E_\gamma=h\nu$$

אחרי ההתנגשות:

$$E_e=\sqrt{p^2c^2+m_e^2c^4}$$



$$E_\gamma=h\nu'$$

$$p_\gamma=\frac{h\nu'}{c}=\frac{h}{\lambda'}$$

שימור אנרגיה:

$$(1)\quad h\nu+m_ec^2=h\nu'+\sqrt{p^2c^2+m_e^2c^4}$$

שימור תנע:

בציר x: $$(2)\quad \frac{h\nu}{c}=\frac{h\nu'}{c}\cos\theta_\gamma+p\cos\theta_e$$

בציר y : $(3)\quad 0=-\frac{h\nu'}{c}\sin\theta_\gamma+p\sin\theta_e$

נפתח את נוסחה 1 :

$$\left(h\nu-h\nu'+m_ec^2\right)^2=m_e^2c^4+p^2c^2\Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow(4)\quad\left(h\nu-h\nu'\right)^2+m_e^2c^4+2m_ec^2h\left(\nu-\nu'\right)=m_e^2c^4+p^2c^2$$

$$(2),(3)\Rightarrow\begin{cases}p^2\cos^2\theta_e=\left(\frac{h}{c}\right)^2\left(\nu-\nu'\cos\theta_\gamma\right)^2\\ p^2\sin^2\theta_e=\left(\frac{h}{c}\right)^2\left(\nu'\cos\theta_\gamma\right)^2\end{cases}\Rightarrow p^2c^2=\left(h\nu-h\nu'\cos\theta_\gamma\right)^2+\left(h\nu'\sin\theta_\gamma\right)^2\Rightarrow$$

$$\Rightarrow(5)\quad p^2c^2=\left(h\nu\right)^2+\left(h\nu'\right)^2-2h^2\nu\nu'\cos\theta_\gamma$$

$$(4)+(5)\Rightarrow\left(h\nu-h\nu'\right)^2+2m_ec^2h\left(\nu-\nu'\right)=\left(h\nu\right)^2+\left(h\nu'\right)^2-2h^2\nu\nu'\cos\theta_\gamma\Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow-2h^2\nu\nu'+2m_ec^2h\left(\nu-\nu'\right)=-2\eta\nu\nu'\cos\theta_\gamma\Leftrightarrow\frac{\nu-\nu'}{\nu\nu'}=\frac{h}{m_ec^2}\left(1-\cos\theta_\gamma\right)\Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow-\frac{c}{\nu}+\frac{c}{\nu'}=\frac{h}{m_ec}\left(1-\cos\theta_\gamma\right)\Leftrightarrow\underbrace{\boxed{\lambda'-\lambda=\frac{h}{m_ec}\left(1-\cos\theta_\gamma\right)}}_{\text{מקרה פרטי עבור אלקטרון}}$$

עבור פיזור אחר המסה תהיה שונה

אורך גל Compton של האלקטרון:

$$\lambda_c\triangleq\frac{h}{m_ec}=0.0243\,\mathring{\mathrm{A}}$$

הערה: על מנת לראות את האפקט יש צורך בקרינה עם אנרגיה גבוהה מאוד (ואורך גל קצר), וזו הסיבה לשימוש בקרינת X קשה.

חזרה על תכונות גליות:

מיתר חד ממדי: $y(x,t)$

משוואת הגל:

$$v^2\frac{\partial^2y}{\partial x^2}=\frac{\partial^2y}{\partial t^2}$$

פתרון כללי: $y(x,t)$

$$\begin{cases} x = \frac{1}{2}(p+q) \\ t = \frac{1}{2v}(q-p) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} p \equiv x - vt \\ q \equiv x + vt \end{cases}$$

באופן כללי: $x(p,q)$,
$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial q} \;;\; \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial t} = -v\frac{\partial}{\partial p} + v\frac{\partial}{\partial q}$$

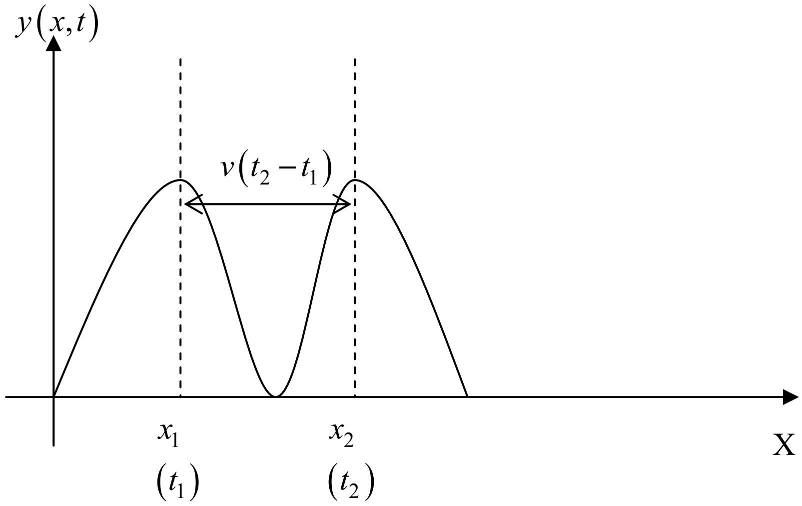
$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial q}\right)^2 \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} = v^2\left(\frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial q}\right)^2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial p \partial q} \equiv 0}$$

$$\frac{\partial y}{\partial q} = \underbrace{g_1(q)}_{\text{פונקציה כללית של q}} \Rightarrow y(p,q) = f(p) + \underbrace{\int g_1(q)\,dq}_{g(q)} \Rightarrow \boxed{y(p,q) = y(x,t) = f(x-vt) + g(x+vt)}$$

פירוש פיסקאלי של הפתרון:

נניח ש $g \equiv 0$ $\Leftarrow$ $y(x,t) = f(x-vt)$:



הדוגמא הקנונית, גל הרמוני:

$$f(x-vt) = A\cos(k(x-vt)+\varphi) = A\cos(kx - kvt + \varphi) = A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \frac{2\pi}{T}t + \varphi\right)$$

כאשר, A –אמפליטודה , λ -אורך גל, T - זמן מחזור , $\omega = \frac{2\pi}{T}$ -תדר ומספר גל: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

$$\Rightarrow \boxed{f(x-vt) = A\cos(kx - \omega t)}$$

קשר בין ω ל-k $\{w(k)\}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = -A\omega^2 \cos(kx-\omega t) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = -Ak^2 \cos(kx-\omega t) \end{cases}$$

$$\Rightarrow v^2k^2 = \omega^2 \Rightarrow \boxed{vk=\omega}$$

מהירות הפאזה:

$v_p \triangleq \frac{\omega}{k}$.

מהירות חבורה:

$v_g \triangleq \frac{\partial \omega}{\partial k}$.

עבור $\omega = vk$ מתקיים, $v_p = v_g = v$.

- למהירות הפאזה אין משמעות פיסיקלית.
- מהירות חבורה מתארת את מהירות העברת המידע ולכן היא תמיד קטנה ממהירות האור. מתאר את קצב העברת האנרגיה בגל מנקודה לנקודה (מעבר אנרגיה לאורך הגל).

דוגמא:

ניקח חלקיק יחסותי בעל מסה m : $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$.

במילון שלנו: $E = \hbar\omega \ ;; \ p = \hbar k$.

נעשה שימוש במילון זה ונעבור לגל $\omega - k$.

$$\Rightarrow \boxed{\hbar\omega = \sqrt{p^2c^2k^2 + m^2c^4}} \Leftrightarrow \boxed{\omega = \sqrt{k^2c^2 + \frac{m^2c^4}{\hbar}}}$$

נחשב את מהירות הפאזה ומהירות החבורה של הגל שקיבלנו:

$v_p = \frac{\omega}{k} = c\sqrt{1+\frac{m^2c^2}{\hbar^2k^2}} > c$, דוגמא למהירות פאזה שיותר גדולה ממהירות האור (ולמרות זאת זה אינו מפריעה).

מהירות החבורה:

$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c}{\sqrt{1+\frac{m^2c^2}{\hbar^2k^2}}} < c$, מהירות החבורה תמיד חייבת להיות קטנה ממהירות האור.

דוגמא נוספת – גלי חומר:

חלקיק לא יחסותי בעל מסה m : $E = \frac{p^2}{2m}$.

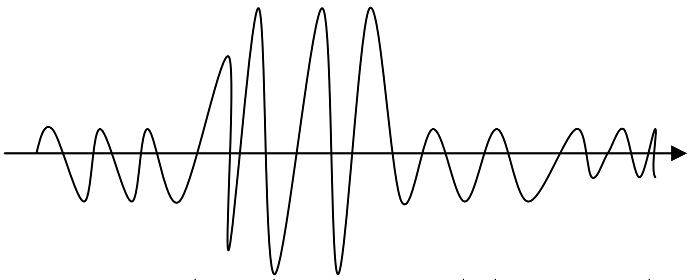
נבנה את הגל בעזרת המילון שלנו ונקבל:

$$\Rightarrow \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \Rightarrow \boxed{\omega = \frac{\hbar}{2m}k^2}$$

נחשב את מהירות הפאזה: $v_p = \frac{\hbar k}{2m}$.

ומהירות החבורה: $v_g = \frac{\hbar k}{m} = 2v_p$.

סופרפוזיציה של גלים מישוריים, חבורת גלים:



ניתן לחשב על חבורת הגלים כאוסף של גלים מישורים. כלומר על ידי סופר פוזיציה של גלים הרמוניים מישורים ניתן לחשב את חבורת הגלים. (משפט פורייה)

הצגה קומפלקסית:

$$y(x,t)=A\cos(\omega t-kx)=A\,\mathrm{Re}\left(e^{i(kx-\omega t)}\right)$$

נגדיר את:

$$\bar{y}(x,t)\triangleq Ae^{i(kx-\omega t)}$$

סופרפוזיציה: $k\in[k_1,k_2]$

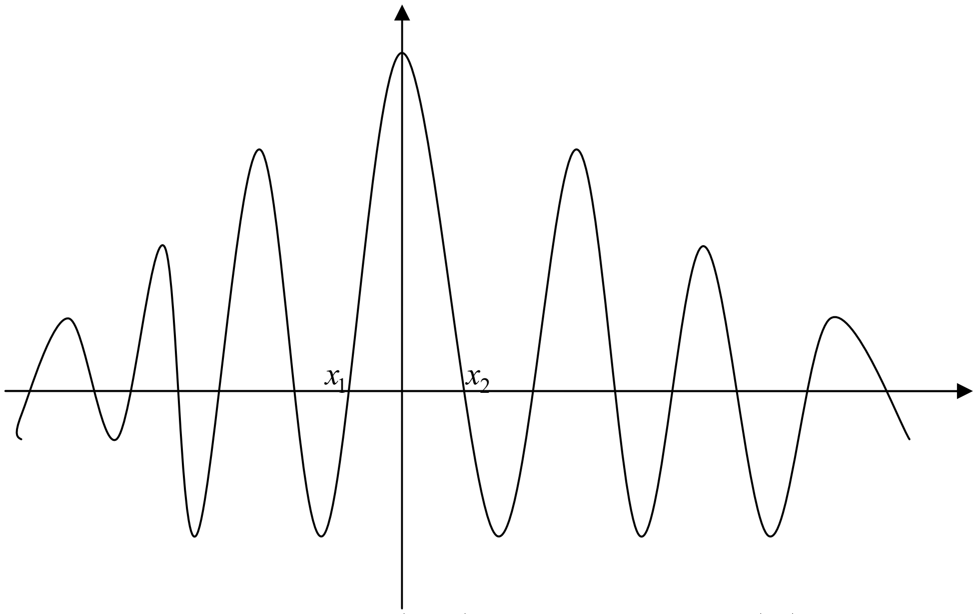
$$\bar{y}(x,t)=\frac{A}{k_2-k_1}\int_{k_1}^{k_2}e^{ikx}\cdot e^{-\omega t}dk$$

נגדיר: $\Delta k\triangleq k_2-k_1$.

$$\Rightarrow \bar{y}(x,t)=\frac{Ae^{-i\omega t}}{\Delta k}\frac{1}{ix}\left(e^{ik_2x}-e^{ik_1x}\right)=\frac{Ae^{-i\omega t}}{\Delta k}\frac{1}{ix}e^{i\frac{k_1+k_2}{2}x}\left(e^{i\frac{k_2-k_1}{2}x}-e^{-i\frac{k_2-k_1}{2}x}\right)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \bar{y}(x,t)=Ae^{-i\omega t}e^{i\frac{k_2+k_1}{2}x}\cdot\frac{\sin\left(\frac{\Delta kx}{2}\right)}{\frac{\Delta kx}{2}}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{y(x,t)=A\frac{\sin\left(\frac{\Delta kx}{2}\right)}{\frac{\Delta kx}{2}}\cos\left(\frac{k_1+k_2}{2}x-\omega t\right)}$$



סופרפוזיציה של גלים ההרמונית תמיד מקבלים גל יותר ממוקם.
גל הרמוני מישורי הוא גל <u>בלתי ממוקם</u> .

$$x_1, x_2 \quad \begin{cases} \sin\left(\frac{\Delta k x}{2}\right) = 0 \\ \frac{\Delta k x}{2} \neq 0 \end{cases} \Rightarrow \boxed{\frac{\Delta k}{2} x = n\pi \quad , n \in \mathbb{Z}}$$

$$\begin{cases} \frac{\Delta k}{2} x_1 = -\pi \\ \frac{\Delta k}{2} x_2 = +\pi \end{cases} \xrightarrow[\Delta x = x_2 - x_1]{} \boxed{\Delta k \Delta x = 4\pi}$$

קיבלנו קבר בין Δk לבין Δx .
לקבלת חבורת גלים רחבה יותר נשתמש ב Δk קטן יותר.
לקבלת Δx קטן יותר ניקל Δk גדול יותר. (גל צפוף יותר)
<u>מסקנה</u>: אם נרצה חבורת גלים מרוכזת יותר ניקח יותר גלים בטווחי מספרי גל גדולים יותר.

באופן כללי:

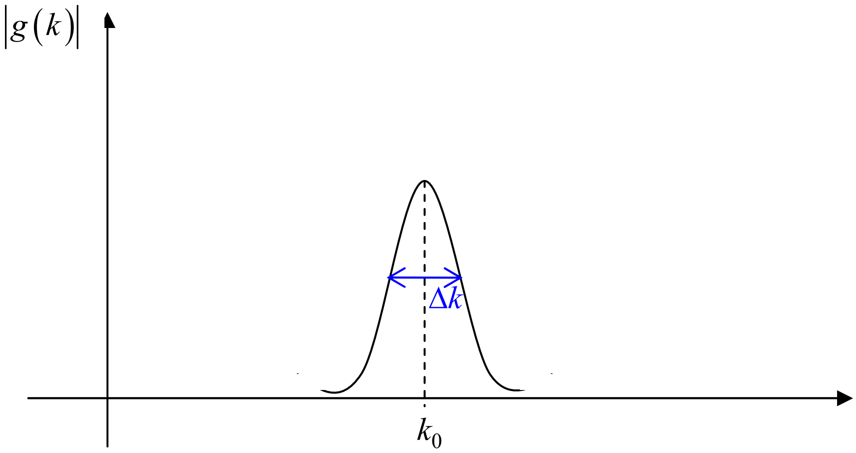
ראינו סופר פוזיציה של שני גלים: $\psi(x,t) = \frac{A}{k_2 - k_1} \int_{k_1}^{k_2} e^{i(kx - \omega t)} dk$.

נגדיר אם כן את המקרה הכללי ביותר: $\boxed{\psi(x,t) \triangleq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx-\omega t)} dk}$

נראה מה קורה בחבורת הגלים בזמן $t = 0$:

$$\psi(x, t=0) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(k)}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{ikx} dk$$

אם ניקח את האמפליטודה $|\psi(x,0)|$ היא תהיה מקסימאלית בהתאבכות בונה ושווה לאפס בהתאבכות הורסת.
נניח:



$$g(k)=\left|g(k)\right|\cdot e^{i\alpha(k)}$$

פאזה $\alpha(k)$ היא פונקציה רציפה של k עבור Δk קטן נקבל:

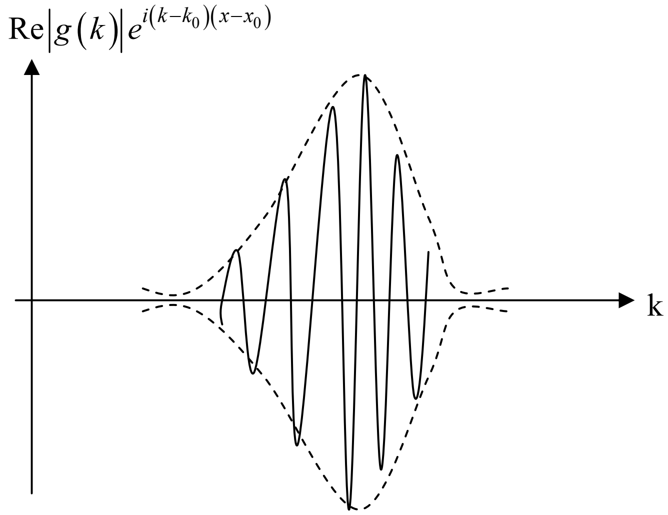
$$\alpha(k)\approx\alpha(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{d\alpha}{dk}\right)\Bigg|_{k=k_0}+.....$$

$$\Rightarrow\psi(x,0)\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\left(k_0x+\alpha(k_0)\right)}\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\left|g(k)\right|\cdot e^{i(k-k_0)(x-x_0)}dk\quad,\quad x_0\triangleq-\left(\frac{d\alpha}{dk}\right)\Bigg|_{k=k_0}$$

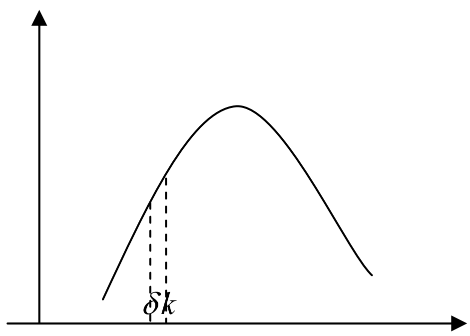
מקרה ראשון:

נניח ש $\Delta x = x - x_0$ הוא גדול.

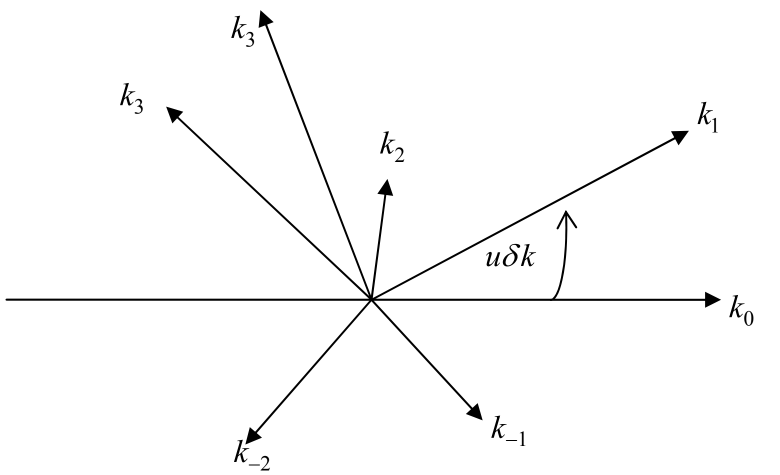
במקרה זה ניתן לומר ש $\int_{-\infty}^{\infty} \left|g\left(k\right)\right| \cdot e^{i\left(k-k_0\right)\left(x-x_0\right)} dk \xrightarrow[\Delta x \to \infty]{} 0$.



Fresnel:



$$\int \left|g\left(k\right)\right| \cdot e^{i\left(k-k_0\right)\left(x-x_0\right)} = \lim_{\delta k \to 0} \delta k \sum_n \left|g\left(k_n\right)\right| \cdot e^{i\left(k_n-k_0\right)\overbrace{\left(x_n-x_0\right)}^{\equiv u}}$$



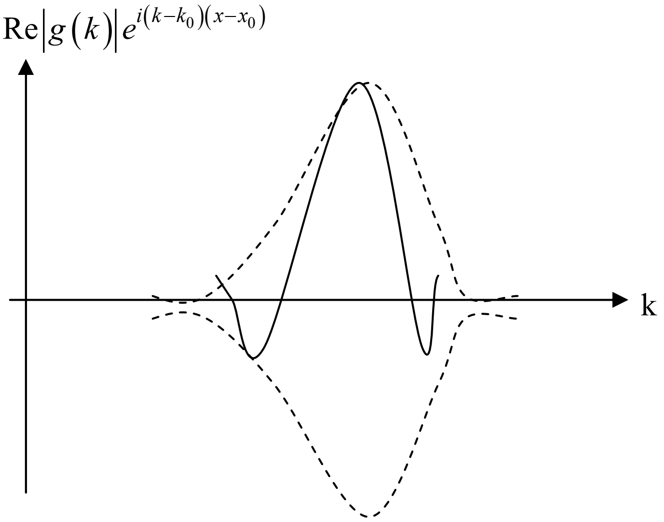
כל איבר בסכום מתואר על ידי וקטור במישור המרוכב. ניתן לראות שעל מנת לעבור בין הוקטורים יש לבצע "סיבוב" במישור המרוכב.

הגודל של כל וקטור הוא $\left|g\left(k\right)\right|$.

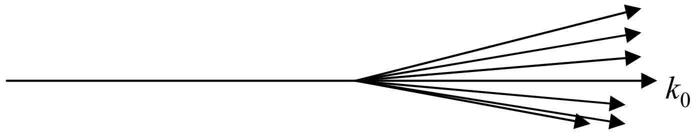
הסכום הכולל ישאף לאפס כאשר מספר הוקטורים שואף לאינסוף, על כל וקטור חיובי יהיה וקטור שלילי (אשר ערכו בקירוב דומה) ולכן הסכום הוא בקירוב אפס.

מקרה שני:

$\Delta x = x - x_0$ הוא קטן:



מתקבלת אמפליטודה מקסימאלית סביב x_0.



ניתן לראות שוקטור הסופרפוזיציה הוא בעל גודל סופי (בניגוד לקודם שהוקטור יתאפס).

מסקנה:

- $\left|\psi(x,0)\right|$ ממקום ברווח Δx, $\Delta x \geq \frac{1}{\Delta k}$

עקרון אי-הודאות של *Heisenberg*:

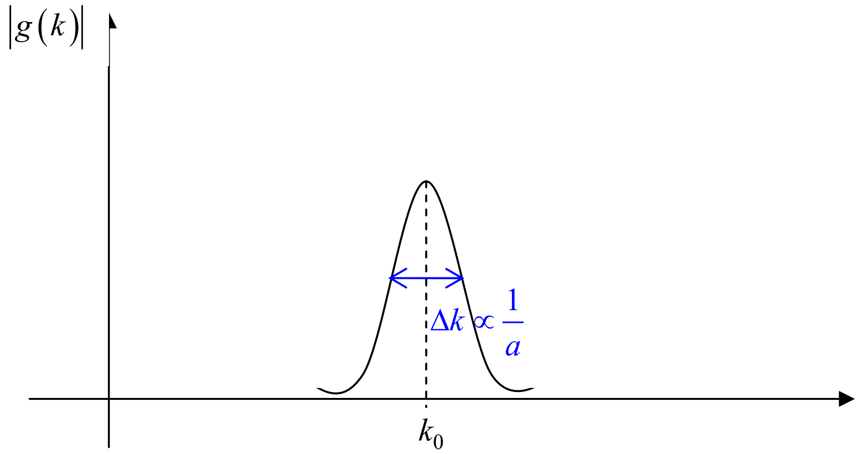
- צריך חפיפה רחבה יותר במרחב מספרי הגלים k על מנת לבנות חבורת גלים ממוקמת יותר.
כלומר, אם נרצה Δx צר זה שקול ל Δk רחב (חוברת גלים) ואם נרצה Δx רחב זה שקול ל Δk צר (גל מישורי).

$$\boxed{\begin{array}{c} \Delta x \text{ צר} \Leftrightarrow \Delta k \text{ רחב} \\ \Delta x \text{ רחב} \Leftrightarrow \Delta k \text{ צר} \end{array}}$$

$$\begin{cases} \Psi(x,0) = e^{ik_0x} \Leftarrow \text{הפונקציה הצרה ביותר} \\ \psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk \equiv \underbrace{\delta(x)}_{\Delta \text{ של דירק}} = \begin{cases} 1 & x=0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases} \Leftarrow \text{הפונקציה הרחבה ביותר} \end{cases}$$

חבורה גוסיאנית של גלים: (חשוב)

הגדרה:



$$g(k)=\underbrace{\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}}}_{\text{נירמול}}\cdot e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}$$

$$\boxed{\Delta k \propto \frac{1}{a}}$$

חבורת גלים גאוסינית:

$$\boxed{\psi(x,t=0)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{3}{4}}}\cdot\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}\cdot e^{ikx}dk}$$

נפתח את האקספוננט:

$$\left\{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2+ikx=-\frac{a^2}{4}\left(k-k_0-\frac{2ix}{a^2}\right)+ik_0x-\frac{x^2}{a^2}\right\}$$

לכן,

$$\Rightarrow \psi(x,0)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{3}{4}}}e^{ik_0x}e^{-\frac{x^2}{a^2}}\cdot\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}\left(k-k_0-\frac{2ix}{a^2}\right)^2}dk \Rightarrow$$

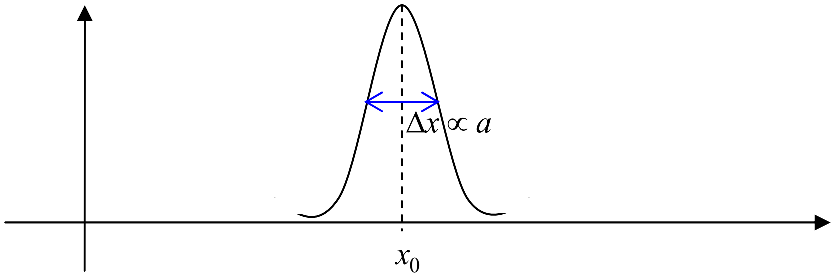
נגדיר את האינטגרל:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(y+\beta)^2}dy=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

ואם כן נקבל גאוסיאן ב x :

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x,0)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{3}{4}}}\cdot e^{ik_0x}\cdot e^{-\frac{x^2}{a^2}}\cdot\frac{2\sqrt{\pi}}{a}}$$

$$\boxed{\Delta x \propto a}$$



רוחב של חבורת גלים:

נגדיר: $\Delta x; \frac{f(\Delta x)}{f(0)} = \frac{1}{\sqrt{e}}$

עבור $f(x) = e^{-\frac{x^2}{b^2}}$ נקבל $\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}}$.

נבדוק שהוא מקיים את התנאי שהגדרנו:

$$\frac{e^{-\left(\frac{\Delta x}{b}\right)^2}}{1} = \frac{1}{\sqrt{e}}$$

עקרון אי הודאות במקרה הזה:

$$\begin{cases} \Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}} \\ \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{2}}{a} = \frac{1}{a} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\Delta k \cdot \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}}}$$

נדון במקרה שבו הזמן איננו אפס $t \neq 0$ - התנהגות בזמן של חבורת גלים גאוסיאנית:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$$

נניח ש $g(k)$ ממוקם מסביב ל- $k = k_0$ לכן,

$$\omega(k) \cong \omega(k_0) + (k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k=k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)\bigg|_{k=k_0} + \ldots$$

$$\Rightarrow kx - \omega t \cong \left(k_0 x - \omega(k_0)t\right) + (k-k_0)\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)\bigg|_{k=k_0} \cdot t\right] - \frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)\bigg|_{k=k_0} \cdot t$$

נגדיר $g = k - k_0$ ונזכיר ש $\frac{d\omega}{dk} = v_g$.

$$\Rightarrow \psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \int_{-\infty}^{\infty} g(q+k_0) e^{iq(x-v_g t)} e^{-i\frac{q^2}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} \cdot t} \qquad (**)$$

מקרה 1 - נניח ש $\omega = ck$ (גלים א"מ):

מתקיים: $\frac{d^2\omega}{dk^2} = 0$ ולכן נקבל,

$$\Rightarrow \psi(x,t) \underbrace{=}_{(**)} f(x - v_g t)$$

מקרה 2- נניח ש $\frac{d^2\omega}{dk^2} \neq 0$:

ניקח שוב חבורה גאוסינית, כלומר, $g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}$ ונגדיר: $\beta \equiv \left.\frac{d^2\omega}{dk^2}\right|_{k=k_0}$ ונחשב את:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}q^2} \cdot e^{iq(x-v_g t)} \cdot e^{-i\frac{q^2}{2}\beta t} \cdot dq \Rightarrow$$

על מנת לחשב זאת נפתח את המעלות האקספוננט קודם לכן,

$$-\frac{a^2}{4}q^2 + iq(x - v_g t) - i\frac{q^2}{2}\beta t = -\frac{q^2}{2}\underbrace{\left(\frac{a^2}{2} + i\beta t\right)}_{A} + iq\underbrace{(x - v_{gt})}_{B} \equiv$$

$$\equiv -\frac{A}{2}q^2 + iBq = -\frac{A}{2}\left(q^2 - \frac{2iB}{A}q\right) = \boxed{-\frac{A}{2}\left[\left(q - i\frac{B}{A}\right)^2 + \left(\frac{B}{A}\right)^2\right]}$$

$$\Rightarrow e^{-\frac{B^2}{2A}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{A}{2}\left[\left(q-i\frac{B}{A}\right)^2\right]} = e^{-\frac{B^2}{2A}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{A}}\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x,t) = \frac{\left(\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}}\right)}{\sqrt{\frac{a^2}{2} + i\beta t}} \cdot e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{2\left(\frac{a^2}{2} + i\beta t\right)}}}$$

והרוחב של הגאוסיאן הוא: $\boxed{\Delta x = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\beta^2 t^2}{a^4}}}$.

גלי חומר – תכונות גליות של חלקיקים (דה ברולי 1924):

$$E \xleftrightarrow{\hbar} \omega$$
$$\vec{p} \xleftrightarrow{\hbar} \vec{k}$$

חלקיק בעל מסה m ומהירות $\vec{v}$ (תנע $\vec{p}$) ואנרגיה קינטית $E_k = \frac{p^2}{2m}$.

מה יהיה אורך גל λ_m של חלקיק?

$$\underbrace{\lambda_m = \frac{h}{p}}_{\left\{p=\hbar k=\frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\right\}} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$

סדר גודל של λ_m:

דוגמא של חלקיק כלשהו:

אורך גל של חלקיק בעל הנתונים: $\begin{cases} v = 3\cdot 10^8 \left[\frac{m}{\sec}\right] \\ m = 10^{-9}\left[gr\right] \end{cases}$

$$\lambda_m = \frac{h}{mv} = 2/2\cdot 10^{-14} m = 2/2\cdot 10^{-4} \overset{\circ}{A}$$

דוגמא של אלקטרון:

נתוני האלקטרון: $E_k = 150\left[ev\right], m_e$.

נחשב את אורך הגל דברולי: $\lambda_m = \frac{h}{\sqrt{2m_eE_k}} = 1\overset{\circ}{A}$.

(פיזור אלקטרונים על גביש)

דוגמא 3 - ניסוי של Davisson-Germer, 1927:

מתח V:

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = eV$$

$$\Rightarrow \lambda_m = \frac{h}{\sqrt{2mev}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2eV}} \Rightarrow \underbrace{\boxed{\lambda_m = \frac{12.25}{\sqrt{V}}\overset{\circ}{A}}}_{\text{נוסחת Davisson-Germer}}$$

גלי חומר – משוואת *Schrodinger*:

דוגמא- גלים א"מ:

$$c^2\frac{\partial^2\zeta}{dx^2} = \frac{\partial^2\zeta}{\partial t^2} \Leftrightarrow \begin{cases} \zeta\left(x,t\right) = Ae^{i\left(kx-\omega t\right)} \\ w = ck \end{cases}$$

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\zeta}{\partial t}=-i\omega\zeta\\[2mm]\dfrac{\partial\zeta}{\partial x}=ik\zeta\end{cases}\Leftrightarrow\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x}\leftrightarrow ik\\[2mm]\dfrac{\partial}{\partial t}\leftrightarrow -i\omega\end{cases}$$

$$\omega=ck\Leftrightarrow\omega^2=c^2k^2\Leftrightarrow\omega^2\zeta=c^2k^2\zeta\Leftrightarrow\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}\right)^2\zeta=c^2\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\zeta\Leftrightarrow\frac{\partial^2\zeta}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2\zeta}{\partial x^2}$$

למעשה שחזרנו את משוואת הגלים.

חלקיק:

$$E=\frac{p^2}{2m}\Leftrightarrow\underbrace{\hbar\omega=\frac{1}{2m}\left(\hbar k\right)^2}_{\text{דה ברולי}}\Leftrightarrow\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\omega\cdot\underbrace{\psi}_{\text{משהו שמקיים את משוואת הגלים}}=\frac{\hbar k^2}{2m}\psi\Leftrightarrow-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi\Leftrightarrow i\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{-\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\Leftrightarrow\underbrace{\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}}_{\text{משוואת שרדינגר עבור חלקיק בעל אנרגיה קינטית בלבד (חלקיק בודד}}$$

לסיכום:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Leftrightarrow E=\frac{p^2}{2m}\Leftrightarrow\underbrace{\boxed{\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2m}}}_{\text{גלי חומר}}$$

עבור אנרגיה כוללת: $E=\dfrac{P^2}{2m}+V\Leftrightarrow\hbar\omega=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}+V$ ← זה נכון עבור המקרה שבו V קבוע ואיננו פונקציה של x.

נקבל משוואת שרדינגר כוללת (עבור מקרה חד מימדי):

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

הערה חשובה: כאן קיבלנו משוואה שבא V יכול להיות תלוי ב – x. הסיבה לכך היא שניתן לפתח כל פונקציה לסכום של גלים הרמוניים ועל כן ניתן לעשות את הכללה הזו.

המקרה של גלים א"ם:

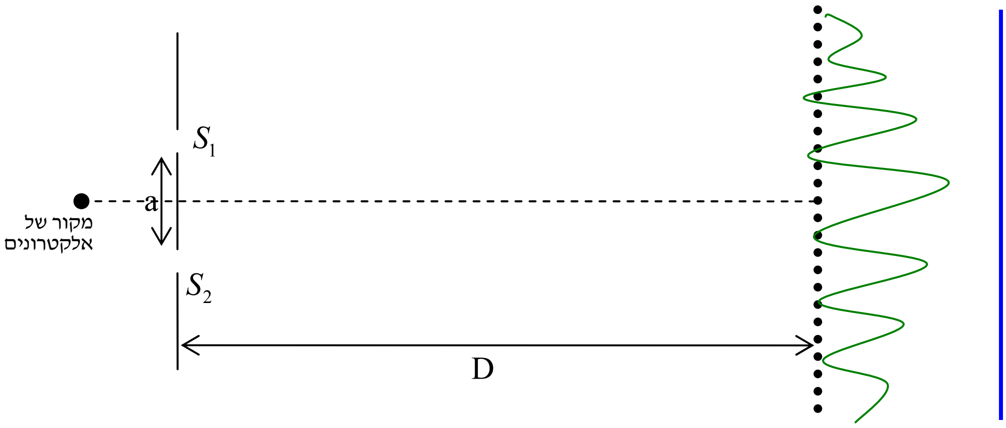
משוואת הגלים מהצורה: $\dfrac{\partial^2\zeta}{\partial t^2}=c^2\dfrac{\partial^2\zeta}{\partial x^2}$ והפתרון הוא מהצורה $\zeta\left(x,t\right)$ חייב להיות ממשי כלומר $\zeta\left(x,t\right)\in\mathbb{R}$.

בשונה הפונקציה $\psi\left(x,t\right)$ השייכת למשוואת שרדינגר היא פונקציה מרוכבות,כלומר, $\boxed{\psi\left(x,t\right)\in\mathbb{C}}$.

פרוש פיסיקאלי של $\psi\left(x,t\right)$ בגלי חומר:

- לפונקציה $\psi\left(x,t\right)$, פונקצית גל של חלקיק, נקרא <u>אמליטודת ההסתברות</u>.
- הגדול $\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2$ הוא צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק במיקום $\vec{x}$ בזמן t.

נחזור על ניסוי יאנג:



בפיסיקה הקלאסית אנו יכולים לדעת בוודאות מה הגלאי שאליו יגיע האלקטרון.
בפיסיקה הקוונטית אנו לא יודעים בוודאות איפה יפגע האלקטרון אלה רק את ההסתברות שהוא יפגע.
(בירוק זו תמונות הפגיעות כלומר ההתנהגות של $\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2$)
אם סוגרים חריץ אחד אנו נקבל שההסתברות לפגיעה בגלאים היא אחידה וזו התנהגות קלאסית. (קו כחול)

משוואת שרדינגר במקרה תלת מימדי:

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

עקרון אי הודאות של *Heisenberg* במכניקה קוונטית:

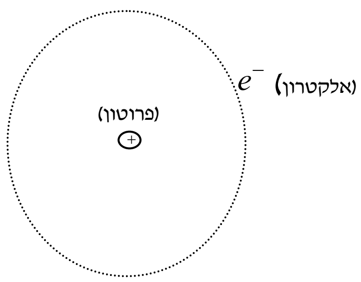
ראינו שעקרון אי הודאות קשור לכל תופעה גלית וכאשר אנו בונים חוברת גלים שבנוי בטווח Δk של אורכי גל וקיבלנו את הקשר: $\Delta k\cdot\Delta x\geq 2\pi$.
נפרש את אי השוויון הזה בעולם הקוונטי.
בעולם הקוונטי: $\begin{cases}E=\hbar\omega\\ \vec{p}=\hbar\vec{k}\end{cases}$ ואם כן,

$$\Delta k\cdot\Delta x\geq 2\pi \Leftrightarrow \Delta p\Delta x\geq 2\pi\hbar \Leftrightarrow \underbrace{\boxed{\Delta p\Delta x\geq h}}_{\text{עקרון אי הודאות בעולם הקוונטי}}$$

פירוש הדבר הוא ש Δp זהו רוחב החבורה של החלקיק (במרחב של תנע , מהירויות) ו Δx (מיקום החבורה) רוחב חבורת החלקיקים.
על מנת לדעת באופן מדויק את מיקום החלקיק בנקודה אחת צריך תווך אינסופי של תנעים.
אם נרצה לדעת באופן מדויק את התנע של החלקיק אזי לא נדע את המיקום המדויק של התנע.

דוגמא-יציבות של אטומים במכניקה קוונטית:

אטום מימן:



(מערכת זו איננה יציבה באופן קלאסי)

$$\underbrace{E(r,p)=\frac{p^2}{2m}-\frac{4\pi e^2}{r}}_{in\ c.g.s}$$

נסמן ב $\tilde{r}$ את אי הודאות במיקום האלקטרון וב $\tilde{p}$ את אי הודאות בתנע של האלקטרון אזי, $\Leftrightarrow \tilde{p}\cdot\tilde{r}\geq h$

אי הודאות באנרגיה: $\tilde{E}_{\min} \Leftrightarrow \tilde{E}\geq\frac{\tilde{p}^2}{2m}-\underbrace{\frac{4\pi e^2}{h}}_{\left\{\tilde{r}\geq\frac{h}{\tilde{p}}\right\}}\tilde{p}\geq\tilde{E}_{\min}$

האנרגיה המינימאלית נתונה על ידי: $\frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{p}}=0$ וזה מתקיים עבור $\boxed{\tilde{p}_0=\frac{4\pi e^2 m}{h}\ ;\ \tilde{r}_0=\frac{h^2}{4\pi me^2}}\Leftarrow$

$$\Rightarrow\underbrace{\boxed{\tilde{E}_{\min}\Big|_{(r_0,p_0)}=-\frac{8\pi e^4 m}{h^2}}}_{\text{אנרגיה במצב יסוד}}$$

נקרא ל $\boxed{\tilde{r}\equiv \text{רדיוס בוהר}}$.

תכונות כלליות של אמפלידטות ההסתברות:

חלקיק בעל מסה m, פונקצית גל $\psi(x,t)$.

נגדיר את צפיפות ההסתברות: $\rho(x,t)\triangleq|\psi(x,t)|^2$.

1. שימור ההסתברות:

$$\begin{cases}-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} & (1)\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2\psi^*+V\psi^*=-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} & (2)\end{cases}$$

נכפול את משוואה (1) ב ψ^* ואת משוואה (2) נכפול ב ψ ונחסר ביו המשוואות ונקבל:

$$(1)\cdot\psi^*-(2)\cdot\psi\Rightarrow\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi\cdot\nabla^2\psi^*-\psi^*\cdot\nabla^2\psi\right)=i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{(\psi^*\psi)}_{=\rho(\vec{r},t)}+\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}\left(\psi\cdot\vec{\nabla}\psi^*-\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)=0\Rightarrow$$

נגדיר את וקטור צפיפות זרם ההסתברות:

$$\vec{J}(r,t)\triangleq\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\cdot\vec{\nabla}\psi^*-\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

$$\Rightarrow\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho+\vec{\nabla}\vec{J}(r,t)=0}$$

נראה את שימור ההסתברות:

$$\int\left(\frac{\partial}{\partial t}\rho+\vec{\nabla}\vec{J}\right)d^3r=0\ \underbrace{\Rightarrow}_{\int\vec{\nabla}\vec{J}d^3r=0}\ \frac{\partial}{\partial t}\int|\psi(r,t)|^2 d^3r=0$$

$$1=\int|\psi(r,t)|^2 d^3r=const.\ (\text{לא תלוי בזמן})$$

זהו תנאי חשוב מאוד, תמיד לבדוק שפונקצית הגל שמקבלים מנורמלת.
כל פונקצית גל חייבת להיות מנורמלת.

תנועת מרכז המסה של חבורת גלים:

חלקיק קוונטי: $\left|\psi(x,t)\right|^2 = \underbrace{\rho(x,t)}_{\text{צפיפות הסתברותית}}$

הגדרת הממוצע של x: $\underbrace{\langle x\rangle}_{\text{הממוצע של x}} = \int_{-\infty}^{\infty} x\cdot\rho(x,t)\,dx \overset{?}{=} x_0 + v_g t$

הוכחה של הקשר:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty} x\cdot\underbrace{\psi(x,t)\cdot\psi^*(x,t)}_{=\left|\psi(x,t)\right|^2}dx$$

חלקיק ≡ חבורת גלים.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

$$\Rightarrow \langle x\rangle = \frac{1}{2\pi}\int x\cdot\psi^*(x,t)\,dx\cdot\int g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk \underset{\left\{xe^{ikx}=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k}e^{ikx}\right\}}{\Rightarrow} \langle x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\psi^*(x,t)\,dx\int \underbrace{e^{-i\omega t}}_{\text{שים לב זה עדין פונקציה של k}} g(k)\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k}\left(e^{ikx}\right)dk$$

$$\underset{\text{אינטגרציה בחלקים}}{\Rightarrow} \langle x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\psi^*(x,t)\,dx\int e^{ikx}i\frac{\partial}{\partial k}\left(g(k)\cdot e^{-i\omega t}\right)dk =$$

$$\Rightarrow \langle x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\underbrace{\int g^*(k')e^{-i(k'x-\omega' t)}dk'}_{\text{שים לב זהו k שונה עכשיו יש לשים דגש על כך}}\int e^{ikx}i\frac{\partial}{\partial k}\left(g(k)\cdot e^{-i\omega t}\right)dk$$

אינטגרל על x יש לנו:

$$\left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}dx = \delta(k-k') = \begin{cases}1 & k=k'\\ 0 & k\neq k'\end{cases}\right\} \Leftarrow (**)$$

$$\left\{\begin{array}{l}\int F(k')dk'\int G(k)dk\cdot\delta(k-k') = \\ \underset{(**)}{=} \boxed{\int F(k)G(k)dk}\end{array}\right\} \Leftarrow (***)$$

$$\underset{(***)}{\Rightarrow} \langle x\rangle = \int g^*(k)e^{i\omega t}i\frac{\partial}{\partial k}\left(g(k)e^{-i\omega t}\right) = \underbrace{i\int g^*(k)\frac{\partial g}{\partial k}dk}_{\equiv x_0} + \underbrace{\int \underbrace{\left|g(k)\right|^2}_{g^*\cdot g=|g|^2}\frac{\partial\omega}{\partial k}dk}_{\equiv\left\langle\frac{\partial\omega}{\partial k}\right\rangle=\left\langle v_g\right\rangle} \Rightarrow$$

Intermezzo:

$$\int\left|\psi(x,t)\right|^2dx = \frac{1}{2\pi}\int dx\iint g^*(k)g(k')e^{-i(kx-\omega t)}e^{i(k'x-\omega' t)}dkdk' =$$

$$= \iint g^*(k)g(k')\delta(k-k')dkdk' = \int\left|g(k)\right|^2dk$$

$$\Rightarrow \underbrace{\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk = 1}}_{\text{שיוון פרסוול}}$$

$$\boxed{p = \hbar k \text{ צפיפות ההסתברות למצוא חלקיק קוונטי עם תנע } \Leftrightarrow |g(k)|^2}$$

$$\boxed{\Rightarrow \langle x\rangle(t) = x_0 + \langle v_g\rangle t}$$

משפט Ehrenfest:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle \stackrel{?}{=} \frac{1}{m}\langle p\rangle$$

משוואת שרדינגר : $-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{d}{dt}\int x\cdot\psi^*(x,t)\cdot\psi(x,t)\,dx = \int x\cdot\left(\frac{d\psi^*}{dt}\cdot\psi + \psi^*\cdot\frac{d\psi}{dt}\right)dx \underset{\text{שרדינגר}}{=} \frac{i\hbar}{2m}\int\left\{\psi^*\cdot x\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\cdot x\cdot\psi\right\}dx =$$

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle x\rangle}{dt} == \frac{1}{m}\left(-i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx\right)}$$

כעת נחשב את $\langle k\rangle$ וזאת על מנת להראות של $p = \left(-i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx\right)$:

$$\langle k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} k|g(k)|^2 dk \Rightarrow$$

$$\left\{g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx}\psi(x,0)\,dx\right\}$$

$$\Rightarrow \langle k\rangle = \frac{1}{2\pi}\iint\left[\psi^*(x',0)\psi(x,0)\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} ke^{i(x-x')}dk}_{(****)}\right]dxdx' \Rightarrow$$

$$\underbrace{\int \underbrace{ke^{ik(x-x')}}_{=-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{ik(x-x')}} dk}_{-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\right]}_{\delta(x-x')}} \Leftarrow (****)$$

$$\Rightarrow \langle k\rangle = -\frac{1}{i}\iint\psi^*(x',0)\psi(x,0)\frac{\partial}{\partial x}(\delta(x-x'))\,dxdx' = -\frac{1}{i}\int\psi^*(x')\underbrace{\left(\int\psi(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x)\,dx\right)}_{=-\int\frac{\partial\psi}{\partial x}\delta(x-x')}dx' =$$

$$= \frac{1}{i}\iint\psi^*(x',0)\frac{\partial\psi(x,0)}{\partial x}\delta(x-x')\,dxdx' \Rightarrow \boxed{\langle k\rangle = \frac{1}{i}\int\psi^*(x,0)\frac{\partial\psi(x,0)}{\partial x}dx}$$

נוסחת Ehrenfest עבור חלקיק קוונטי חופשי:

$$\boxed{\langle p\rangle=\hbar\langle k\rangle=\hbar\frac{1}{i}\int\psi^*(x,0)\frac{\partial\psi(x,0)}{\partial x}dx}$$

$\langle p\rangle$ - ממוצע של התנע עבור חלקיק קוונטי חופשי.

נוסחת Ehrenfest עבור חלקיק בפוטנציאל V :

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle\overset{?}{=}-\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle=-i\hbar\frac{d}{dt}\left(\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx\right)=-i\hbar\int\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dx\Rightarrow$$

נעשה שימוש במשוואת שרדינגר הכללית: $V(x)\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$.

$$\Rightarrow\frac{d}{dt}\langle p\rangle=-\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi dx=-\int|\psi(x)|^2dx=-\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle p\rangle=-\left\langle\frac{dV}{dx}\right\rangle}$$

תנע במכניקה קוונטית - הגדרה של אופרטור:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

$$\begin{cases}\langle p\rangle=\langle\hbar k\rangle=\int\psi^*(x,t)\cdot\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\equiv p}\psi(x,t)dx\\ \langle x\rangle=\int\psi^*\cdot x\cdot\psi dx\end{cases}$$

נגדיר את p :

$$\boxed{p\triangleq\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}}$$

p , מגדיר אופרטור תנע.

מרחב/מערכת (E) של פונקציות מנורמלות $\psi(x,t)$.

$$p:\left\{\begin{matrix}E\longrightarrow E\\ \psi(x,t)\longrightarrow\underbrace{p\cdot\psi(x,t)}_{\equiv\varphi(x,t)}\end{matrix}\right\}$$

איך נוכל להגדיר פונקציה $f(p)$ של האופרטור p .

למשל: $f(p)=p^2$.

$$\langle f(p)\rangle=\int\psi^*(x,t)\cdot f\left(\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\right)\cdot\psi(x,t)dx$$

למשל, $E_k=\frac{p^2}{2m}$ -זהו אופרטור אנרגיה קינטית.

אופרטור הרמיטי:

דרישה עבור אופרטור הרמיטי: ממוצע $\langle f(p)\rangle$ הוא ממשי בלבד.

עבור תנע $p=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}$: $\langle p\rangle\in\mathbb{R}$?

$$\langle p\rangle-\langle p\rangle^*=\int\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi-\psi\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi^*\right]dx=\frac{\hbar}{i}\int\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right]dx=\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial x}|\psi|^2\right]dx\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\langle p\rangle-\langle p\rangle^*=\frac{\hbar}{i}\left(|\psi|^2(x\to\infty)-|\psi|^2(x\to-\infty)\right)\underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{דרשית}\\\text{נירמול}\\|\psi|^2\xrightarrow[x\to\pm\infty]{}0}}\langle p\rangle\in\mathbb{R}$$

משוואת Schrödinger ואופרטור המילטוניאן:

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi+V(x)\psi}_{\text{משוואות שרדינגר}}$$

נכתוב את משוואת שרדינגר בעזרת אופרטורים:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2}_{=p^2}\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t)\equiv H\psi$$

עבור H המוגדר על ידי:

$$\underbrace{H=\frac{p^2}{2m}+V(x)}_{\text{המילטוניאן}}$$

משוואת שרדינגר בכתיב אופרטורים:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

(זוהי משוואה הרמיטית, כלומר ערך התצפית שלה ממשי)

הצגות:

$$1=\underbrace{\int\psi^*(x,t)\cdot\psi(x,t)\,dx=\int g^*(k)\cdot g(k)\,dk}_{(\text{Parseval-Plancherel})}$$

תנע בממוצע:

$$\langle\hbar k\rangle=\langle p\rangle=\int\psi^*\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\underbrace{\equiv p}_{\text{בהצגה של x}}}\psi\,dx=\int g^*(k)\cdot\underbrace{\hbar\cdot k}_{\underbrace{\equiv p}_{\text{בהצגה של k}}}\cdot g(k)\,dk$$

$$\langle x\rangle=\int\psi^*\cdot x\cdot\psi\,dx=\int g^*(k)\cdot\underbrace{(?)}_{\substack{\text{אופרטור}\\\text{מיקום}\\\text{בהצגת}\\\text{תנע}}}\cdot g(k)\,dk$$

נחשב את אופרטור המיקום בהצגת תנע:

$$\langle x\rangle=\int\psi^*\cdot x\cdot\psi\,dx=\frac{1}{2\pi}\int dx\int dk\int g^*(k)g(k)e^{-i(kx-\omega t)}e^{i(k'x-\omega' t)}dk'\Rightarrow$$

$$\left\{ x\cdot e^{i(k'-k)x} = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k'}e^{i(k'-k)x} \right\}$$

$$\Rightarrow \langle x\rangle = -i\iint g^*(k)g(k')e^{i(\omega-\omega')t}\frac{1}{2\pi}\underbrace{\frac{\partial}{\partial k'}\left(\int e^{i(k'-k)x}dx\right)}_{=-\delta(k-k')}dkdk'$$

$$\underset{\text{אינגרציה בחלקים}}{\Rightarrow} \langle x\rangle = +i\iint g^*(k)\frac{\partial}{\partial k'}g(k')e^{i(\omega-\omega')t}\delta(k-k')dkdk'$$

$$\left\{ \int dk\int A(k)B(k')\delta(k-k')dk' = \int A(k)B(k)dk \right\}$$

$$\Rightarrow \langle x\rangle = +i\int g^*(k)\frac{\partial}{\partial l}g(k)dk$$

ועל כן אופרטור מיקום באמצעות תנע הוא: $\boxed{x = i\frac{\partial}{\partial k} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}}$.

$$\boxed{\langle x\rangle = \int \psi^*\cdot x\cdot\psi dx = \int g^*(k)\cdot\left(i\frac{\delta}{\delta k}\right)\cdot g(k)dk}$$

קומוטטור:

עבור אופרטורים: $x\cdot p \overset{?}{=} p\cdot x$

$$\boxed{[x,p] \equiv x\cdot p - p\cdot x}$$

- אם שני אופרטורים לא מתחלפים, אזי יש בניהם את עיקרון אי הוודאות של הייזנברג.
- אם הם מתחלפים $\left([,]=0\right)$ אזי ניתן למדוד את שניהם באופן מדויק.

$$\forall\psi\ ,\ [x,p]\psi = xp\psi - px\psi = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right] = \frac{\hbar}{i}\left[\cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \psi - \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}}\right] = -\frac{\hbar}{i}\psi \Rightarrow$$

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

משוואת Schrödinger לא תלויה בזמן:

משוואת שרדינגר התלויה בזמן:

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

נחפש פתרונות של משוואת שרדינגר:

$$\psi(x,t) \equiv \underbrace{T(t)\cdot\varphi(x)}_{\text{נניח פתרונות מהצורה}}$$

נציב את הפתרון במשוואת שרדינגר:

$$i\hbar\varphi(x)\frac{dT}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)T(t)\varphi(x)$$

עבור $\psi(x,t)\neq 0$:

$$\underbrace{i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt}}_{\text{פונקציה התלויה בזמן בלבד}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)}_{\text{פונקציה התלויה במיקום בלבד}} = \underbrace{E}_{\text{const}}$$

$$\begin{cases} i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt}=E & (1) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+V=E & (2) \end{cases}$$

$\Leftarrow(1)$

$$i\hbar\frac{dT}{dt}=ET \Leftrightarrow \frac{dT}{T}=\frac{E}{i\hbar}dt \Leftrightarrow \ln\frac{T}{T(0)}=\frac{E}{i\hbar}t \Rightarrow \boxed{T(t)=T(0)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}}$$

(הערה: לקבוע E יש יחידות של אנרגיה)

$\Leftarrow(2)$

$$\underbrace{\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+V\varphi=E\varphi}}_{\text{משוואת שרדינגר הלא תלויה בזמן}}$$

באופן כללי (מקרה תלת מימדי) נקבל:

$$\underbrace{\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi+V\varphi=E\varphi}}_{\substack{\text{משוואת שרדינגר הלא תלויה בזמן} \\ \text{עבור המקרה התלת מימדי}}} \Leftrightarrow \boxed{H\varphi=E\varphi}$$

(**שים לב!!** H הינו אופרטור לא ניתן לצמצם בקלות את φ מכיוון שבצד אחד מופעל עליו האופרטור H)

ערך עצמי של אופרטור הרמיטי:

(פונקציה עצמית)

עבור אופרטור A:

$$A:\left\{\begin{matrix} E\longrightarrow E \\ f(x)\longrightarrow Af(x)=g(x)\end{matrix}\right\}$$

דוגמא לאופרטור:

$$Af(x)=3f(x)$$

דוגמא נוספת:

$$Af(x)=\frac{df}{dx}$$

דוגמא נוספת:

$$Af(x)=xf(x)-x^3$$

אופרטור הוא ליניארי:

זה אומר שכל אופרטור מקיים את השוויון הבא:

$$\forall(f_1,f_2),\forall(\lambda_1,\lambda_2)\in\mathbb{C}^2 \Rightarrow A\left(\lambda_1 f_1(x)+\lambda_2 f_2(x)\right)=\lambda_1 Af_1(x)+\lambda_2 Af_2(x)$$

עבור כל אופרטור ליניארי: $Af(x)=g(x)$

קיימת תת משפחה של פונקציות המקיימת: $f_\lambda(x)$: $\boxed{Af_\lambda(x)=\lambda f_\lambda(x)}$.

לפונקציות $f_\lambda(x)$ קורים פונקציות עצמיות של A ול- λ קוראים ערך עצמי של A.

ערכים עצמיים ופונקציות עצמיות של אופרטור:

$$A:\begin{Bmatrix} E\longrightarrow E \\ \psi(x)\longrightarrow A\psi(x)=\varphi(x)\end{Bmatrix}$$

הגדרת הליניאריות:

$$A\left(\lambda_1\varphi_1(x)+\lambda_2\varphi_2(x)\right)=\lambda_1 A\varphi_1(x)+\lambda_2 A\varphi_2(x) \quad ,\forall(\varphi_1,\varphi_2)\in E^2 \ ,\forall(\lambda_1,\lambda_2)\in\mathbb{C}^2$$

פונקציות עצמיות של A $\{f_\lambda(x)\}$ **:**

$$Af_\lambda(x)=\lambda f_\lambda(x)$$

λ - ערך עצמי של A.

$$\boxed{A \text{ ספקטרום של } =\{\lambda\}}$$

דוגמא:

$$A=i\frac{d}{d\theta}$$

$$f_\lambda(\theta) \qquad , \quad \theta\in[0,2\pi]$$

תחום ההגדרה של הפונקציה $f_\lambda(\theta)$

דרישה לפונקציות מחזוריות: $f_\lambda(\theta+2\pi)=f_\lambda(\theta)$.

מה הספקטרום של A ?

$$i\frac{d}{d\theta}f_\lambda=\lambda f_\lambda \Leftrightarrow Af_\lambda=\lambda f_\lambda$$

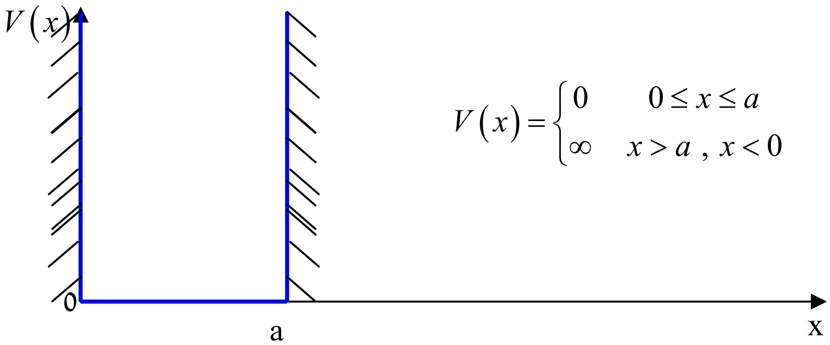
$$\Rightarrow\frac{d\ln f_\lambda}{d\theta}=-i\lambda\Rightarrow \ln f_\lambda=-i\lambda\theta+const\Rightarrow\boxed{f_\lambda(\theta)=f(0)e^{-i\lambda\theta}}$$

$$\underbrace{f_\lambda(\theta+2\pi)=f_\lambda(\theta)}_{\text{נתון}}\Rightarrow e^{i\lambda 2\pi}=1\Rightarrow\lambda=0,\pm1,\pm2,\pm.....$$

משוואת שרדינגר שאינה תלויה בזמן-תזכורת:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi\Leftrightarrow\boxed{H\psi=E\psi}$$

ספקטרום של המילטוניאן עבור חלקיק בפוטנציאל אינסופי (חלקיק בתיבה):



$$V(x)=\begin{cases}0 & 0\le x\le a\\ \infty & x>a\ ,\ x<0\end{cases}$$

הערה: "ספקטרום קלאסי" של H הוא רציף.

למשוואת שרדינגר יש חשיבות רק בתחום: $0<x<a$.

$$\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi=E\psi\Rightarrow$$

+ שני תנאי שפה: $\psi(x=0)=\psi(x=a)=0$. (פונקצית גל $\psi(x)$ רציפה)

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

אפשרות ראשונה: $E<0$: $E=-|E|$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar}|E|\psi=0 \Rightarrow \psi(x)=A\cosh x+B\sinh x$$

נציב תנאי התחלה:

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x=0)=0\Rightarrow A=0\\ \psi(x=a)=0\Rightarrow B\underbrace{\sinh a}_{\neq 0}=0\Rightarrow B=0\end{array}\right\}\Rightarrow \boxed{\psi(x)=0}$$

(נירמול: $1=\int_0^a|\psi(x)|^2\,dx$)

אפשרות שנייה $E>0$:

$$\hbar^2\equiv\frac{2m}{\hbar^2}E>0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0\Rightarrow\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

נתיב תנאי התחלה:

$$\left.\begin{array}{c}\psi(0)=0\Rightarrow B=0\\ \psi(x=a)=0\Rightarrow A\sin ka=0\Rightarrow \sin ka=0\Rightarrow ka=n\pi\ \ ,n=1,2,...\end{array}\right\}\Rightarrow$$

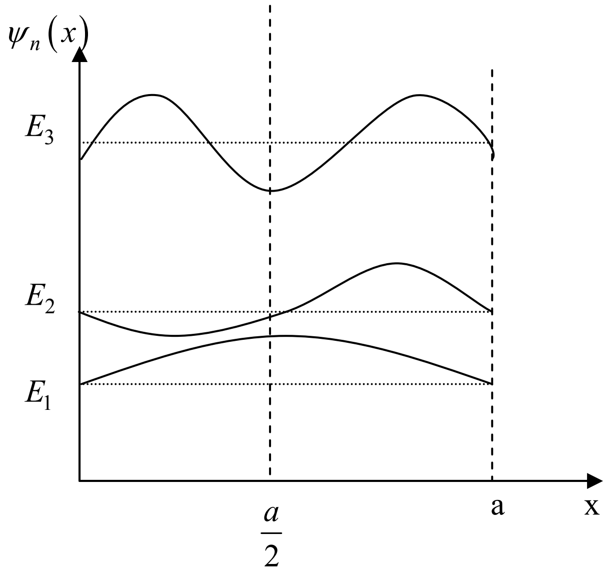
הערה: $n=0\Rightarrow k=0\Rightarrow\psi(x)=0$.

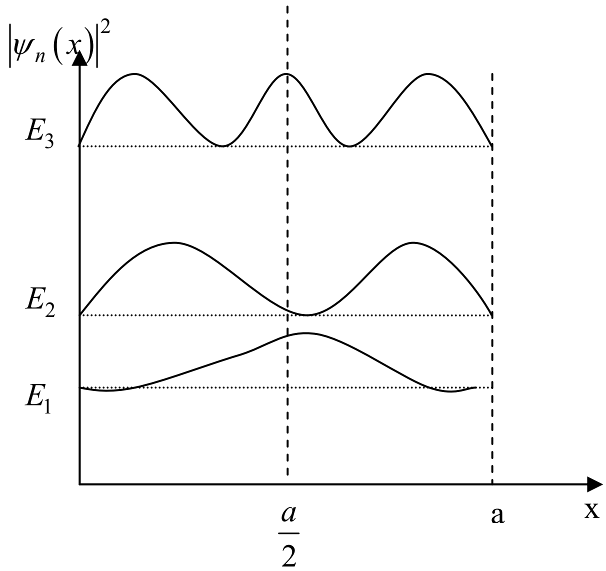
$$\Rightarrow\boxed{\left\{\begin{array}{l}\psi_n(x)=A\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\\ E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\end{array}\right.}$$

A נתון על ידי נירמול של ψ.

הנירמול של ψ הוא באופן כללי $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx=1$ ואצלנו זה יהיה נכון גם בתחום: $\int_0^a|\psi(x)|^2\,dx=1$.

$$\int_0^a|\psi(x)|^2\,dx=1\Rightarrow 1=A^2\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx=\left\{\sin^2x=\frac{1}{2}-\frac{\cos 2x}{2}\right\}=A^2\frac{a}{2}\Rightarrow\boxed{A=\sqrt{\frac{2}{a}}}$$





ממוצע של התנע:

$$\langle p\rangle_n=\int\psi_n{}^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_n dx$$

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

אצלנו: $\left(\psi-\text{ממשי}\right)$ $\psi=\psi^*$

$$\langle p\rangle_n=\frac{\hbar}{i}\int_0^a\psi_n(x)\frac{d\psi_n}{dx}dx=\frac{\hbar}{i}\underbrace{\int_0^a\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\psi_n^2(x)dx}_{\text{ממשי}}=\frac{\hbar}{i}\times\text{ממשי}\Rightarrow\langle \mathrm{p}\rangle_n=0$$

ממוצע של האנרגיה:

$$\left\langle H\right\rangle_n \equiv \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a \psi_n(x)\left(\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x)\right)dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a\left\{\frac{d}{dx}\left(\psi_n(x)\frac{d\psi_n}{dx}\right)-\frac{d\psi_n}{dx}\frac{d\psi_n}{dx}\right\}dx \Rightarrow$$

$$\boxed{\Rightarrow \left\langle H\right\rangle_n = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a\left|\frac{d\psi_n}{dx}\right|^2 dx} = \ldots = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 \Rightarrow \boxed{\left\langle H\right\rangle_n = E_n}$$

עקרון הסופרפוזיציה:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \\ \psi(x=0)=\psi(x=a)=0 \end{cases} \Rightarrow \left\{\psi_n(x), n\in\mathbb{N}^*\right\}$$

מצב כללי של חלקיק בתיבה הוא סופרפוזיציה של גלים $\psi_n(x)$: $\boxed{\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\psi_n(x)}$.

$A_n = ?$:

הגדרה של אנרגיה במצב ψ :

$$\left\langle H\right\rangle_\psi = \int_0^a \psi^*(x)H\psi(x)dx = \int_0^a\psi^*(x)\sum_n A_n \underbrace{H\psi(x)}_{=E_n\psi_n(x)}dx = \sum_n A_nE_n\int_0^a\psi^*(x)\psi_n(x)dx =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}A_nE_n\int_0^a\sum_{m=1}^{\infty}A^*_m\psi_m(x)\psi_n(x)dx = \sum_{n,m}A_nA_m^*E_n\underbrace{\int_0^a\psi_m(x)\psi_n(x)dx}_{(**)}$$

$$(**)\Rightarrow \frac{2}{a}\int_0^a\sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi mx}{a}\right)dx = \frac{\sin((n-m)\pi)}{(n-m)} - \frac{\sin((n+m)\pi)}{(n+m)} = \underbrace{\boxed{\begin{cases}1 & n=m\\ 0 & n\neq m\end{cases} = \delta_{nm}}}_{\delta \text{ של קרוניקר}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\left\langle H\right\rangle_\psi = \sum_{n=1}^{\infty}E_n\left|A_n\right|^2}$$

סיכום עד לשלב זה- חלקיק קוונטי בתיבה:

1. **ספקטרום:** $n=1,2,3,\ldots$, $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$.
2. **פונקציות עצמיות:** $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right)$.
3. **אנרגיה ממוצעת במצב זה:** $\boxed{\left\langle H\right\rangle_n = E_n}$.
4. **פתרון כללי וסופרפוזיציה:** $\boxed{\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\psi_n(x) \quad , A_n\in\mathbb{C}}$ **, סופרפוזיציה זו זה כמו חבורת גלים.**

$$\left\{\left\langle p\right\rangle_n = \hbar\frac{\pi n}{a} \Rightarrow \left\langle p\right\rangle_\psi = \sum_{n=1}^{\infty}A_n\left(\hbar\frac{\pi n}{a}\right)\right\}$$

פירוש של המקדמים A_n :

$$\left\langle H\right\rangle_{\psi}=\sum_{n=1}^{\infty}\left|A_n\right|^2 E_n$$

נרמול:

$$\int_0^a\left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx=1\Rightarrow\int_0^a\sum_{n=1}^{\infty}A_n{}^*\psi_n\left(x\right)\sum_{m=1}^{\infty}A_m\psi_m dx=\sum_{n,m}A_n{}^*A_m\underbrace{\int_0^a\psi_n\left(x\right)\psi_m\left(x\right)dx}_{=\delta_{nm}}=\sum_{n=1}^{\infty}\left|A_n\right|^2=1$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\sum_{n=1}^{\infty}\left|A_n\right|^2=1\\ \underbrace{\left\langle H\right\rangle_{\psi}=\sum_{n=1}^{\infty}E_n\left|A_n\right|^2}_{\text{אנרגיה ממוצעת עבור מצב } \psi_n \text{ בעל הסתברות } \left|A_n\right|^2 \text{ ואנרגיה } E_n}\end{cases}$$

<u>A_n ?</u>

$$\psi\left(x\right)=\sum_m A_m\psi_m\left(x\right)\Leftrightarrow\psi_n{}^*\left(x\right)\psi\left(x\right)=\sum_m A_m\psi_n{}^*\left(x\right)\psi_m\left(x\right)$$

$$\Rightarrow\int_0^a\psi_n\left(x\right)\psi\left(x\right)dx=\sum_m A_m\underbrace{\int_0^a\psi_n\left(x\right)\psi_m\left(x\right)dx}_{\delta_{nm}}\Rightarrow\boxed{A_n=\int_0^a\psi_n\left(x\right)\psi\left(x\right)dx}$$

(הערה: אין צורך בצמוד $\left\{\psi^*{}_n\right\}$ מכיוון שמקרה פרטי זה $\psi_n=\text{Real}$)

$\left|A_n\right|^2=$ הסתברות למצוא את החלקיק הקוונטי במצב $\psi_n\left(x\right)$ בעל אנרגיה E_n .

התפתחות בזמן של $\psi\left(x\right)$:

$$\psi_n\left(x\right)\to\psi_n\left(x\right)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow\underbrace{\boxed{\psi\left(x,t\right)=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\psi_n\left(x\right)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}}}_{\text{הכללה של פעימות של גלים בעלי תדירויות } \frac{E_n}{\hbar}}$$

פתרון של בעיה במכניקה קוונטית, "המתכון":

- **שלב 1** – הגדרת הפוטנציאל $V\left(x\right)$. (אם זו בעיה רב ממדית $V\left(r\right)$)
- **שלב 2** - ספקטרום ופונקציות עצמיות של ההמילטוניאן
  - o פתרון של משוואת $Schr\ddot{o}dmger$:

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

+ תנאי שפה $\Leftarrow\left(E_n,\psi_n\right)$.

- **שלב 3-** מצב קוונטי כללי, סופרפוזיציה: $A_n \in \mathbb{C}$, $\psi(x)=\sum_n A_n\psi_n(x)$.
- **שלב 4 -** $|A_n|^2$ - הסתברות למצוא מצב $\psi_n(x)$ כעל אנרגיה E_n .
- **שלב 5 –** נירמול: $\sum_n |A_n|^2=1$
- **שלב 6 -**התפתחות בזמן: $\psi_n(x,t)=\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$ (מצב עצמי) , $\psi(x,t)=\sum_n A_n\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$.

מחסום פוטנציאל במימד אחד:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+(V-E)\psi=0$$

עבור, $V(x)=V=const$

$$\psi(x)=A_+e^{i\frac{px}{\hbar}}+A_-e^{-i\frac{px}{\hbar}}$$

כאשר, $const:(A_+,A_-)$ $p^2\equiv 2m(E-V)$

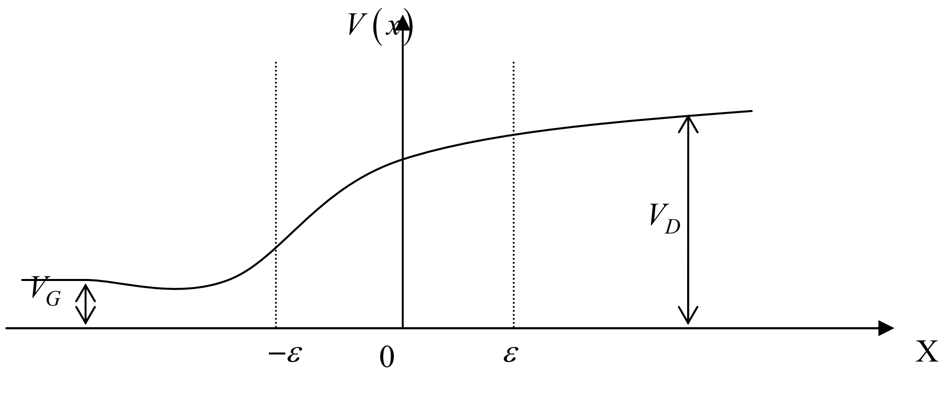
1. $\underline{E-V>0}$ $\Leftarrow$ $p\in\mathbb{R}$:

$$\psi(x,t)=A_+\underbrace{e^{i\frac{(px-Et)}{\hbar}}}_{\xrightarrow{x>0}}+A_-\underbrace{e^{-i\frac{(px-Et)}{\hbar}}}_{\xleftarrow{x<0}}$$

2. $\underline{E-V<0}$ $\Leftarrow$ $p^2<0$ $\left\{p^2=i^2x_0^2\right\}$:

$$\psi(x,t)=A_+e^{-\frac{x}{x_0}+iE\frac{t}{\hbar}}+A_-e^{+\frac{x}{x_0}-iE\frac{t}{\hbar}}$$

תנאי שפה של פונקצית גל:



$V_G=0$,$V_D=\infty$

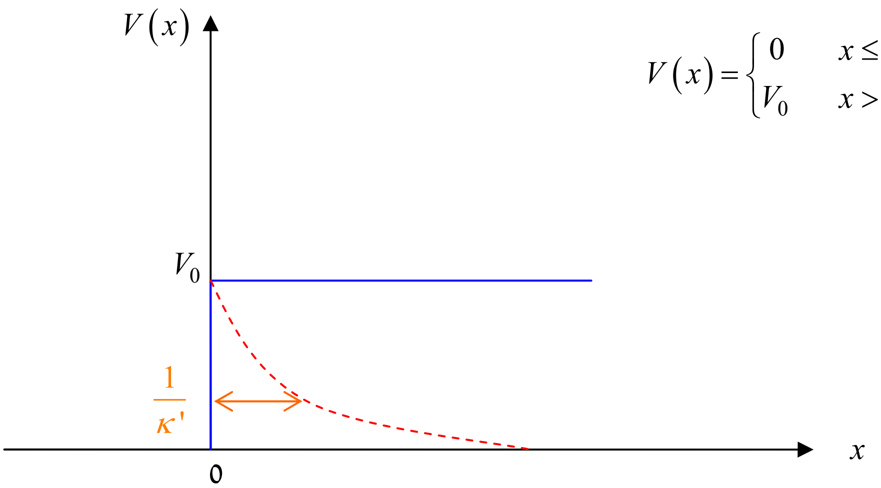
רציפות של $\psi(x)$ ושל $\psi'(x)$:

$$\psi'(+\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}(v(x)-E)\psi(x)dx$$

$V(x)$ - היא פונקציה רציפה..

כאשר $\varepsilon\to 0$ נקבל $\psi'(+\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)=0$.

החזרה על ידי מדרגת פוטנציאל:



$$V(x)=\begin{cases}0 & x\le 0\\ V_0 & x>0\end{cases}$$

(המסלול האדום מייצג את פונקצית החלקיק)

נגדיר וקטור גל $k\equiv\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

מקרה ראשון- $E<V_0$:

נגדיר במקרה זה : $\kappa'\equiv\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}>0$.

נראה את הפתרון של משוואת שרדינגר עבור $x>0, x<0$.

<u>$x<0$</u> :

$$\psi(x)=Be^{ikx}+\tilde{A}e^{-ikx}$$

במקדם B, בערכו המוחלט מודד את ההסתברות למציאת חלקיק במינוס אינסוף, ניתן אם כן לבחור את הסתברות זו להיות 1 , מכיוון שאנו מיצרים אותו במינוס אינסוף.

כלומר: $\psi(x<0)=1\cdot e^{ikx}+Ae^{-ikx}$

(A – תלוי במדרגת הפוטנציאל, מראה לנו מה חוזר עקב המדרגה)

<u>$x>0$</u>:

$$\psi(x>0)=\underbrace{\cancel{\alpha e^{\kappa' x}}}_{\substack{\alpha=0\\(\text{נירמול})}}+\beta e^{-\kappa' x}=\beta e^{-\kappa' x}$$

(α,β , מתקבלים מתנאי התחלה. יש צורך בשמני מקדמים במקרה זה מכיוון שאנו בתוך מדרגת הפוטנציאל ואנו לא יודעים מה קורה במצב זה)

$\alpha=0$ - וזאת מכיוון שאם $\alpha\neq 0$ הנרמול לא מתקיים אלה תהיה התבדרות.

$|\beta|^2$ - נותן את ההסתברות למציאת החלקיק מתחת למדרגת הפוטנציאל.

כעת נחשב את הקבועים A,β :

רציפות של ψ ושל הנגזרת ψ' ב- $x=0$:

דרישה לרציפות של הפונקציה: $\psi(x=0^-)=\psi(x=0^+)\Rightarrow 1+A=\beta \quad (1)$

דרישה לרציפות הנגזרת: $\psi'(x=0^-)=\psi'(x=0^+)\Rightarrow ik(1-A)=-\kappa'\beta \quad (2)$

$$(1),(2)\Rightarrow\boxed{\begin{cases}A=\dfrac{k-i\kappa'}{k+i\kappa'}\\[2ex] \beta=1+A=1+\dfrac{k-i\kappa'}{k+i\kappa'}\end{cases}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{\kappa'} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}}} \underbrace{\xrightarrow[\underbrace{\hbar\to 0}_{\text{התנהגות קלאסית}}]{\substack{m\to\infty \\ V_0\to\infty}}}_{\substack{\text{בכל המקרים הללו} \\ \text{אין חדירה של החלקיק} \\ \text{לבור הפוטנציאל}}} 0$$

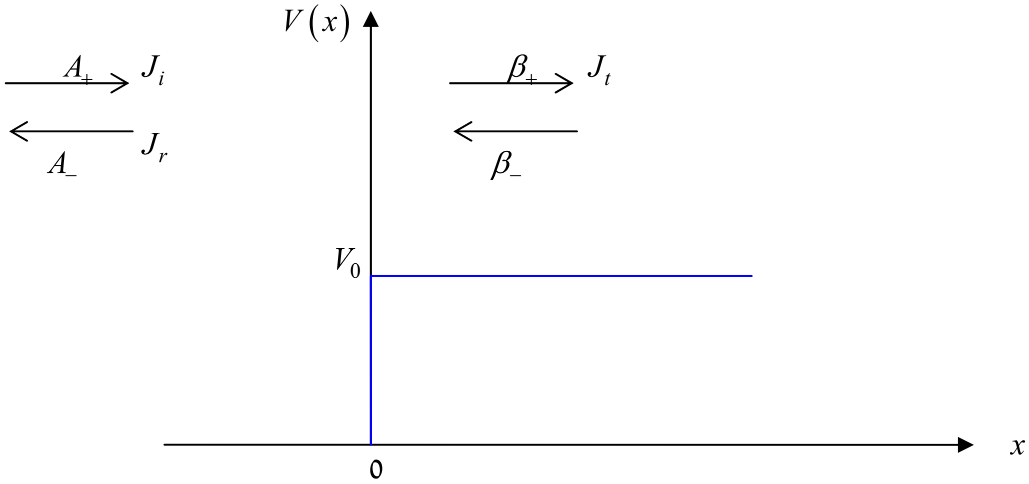
מקרה 2 - $E > V_0$:

(החלקיק מגיע עם אנרגיה גבוהה יותר ממדרגת הפוטנציאל)

נגדיר: $k' = \sqrt{\dfrac{2m\left(E - V_0\right)}{\hbar^2}}$

ועבור $x < 0$ נקבל את הפתרון: $\psi\left(x < 0\right) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}$.

ועבור $x > 0$ נקבל את הפתרון: $\psi\left(x > 0\right) = \beta_+ e^{ik'x} + \beta_- e^{-ik'x}$



נדרוש את רציפות הפונקציה ורציפות הנגזרת ונקבל:

$$\begin{cases} A_+ + A_- = \beta_+ + \beta_- \\ k\left(A_+ - A_-\right) = k'\left(\beta_+ - \beta_-\right) \end{cases} \Rightarrow$$

מקרה $2-a$:

ניתן לבחור: $\begin{cases} A_+ = 1 \\ \beta_- = 0 \end{cases}$ ואז נקבל שתי משוואות בשני נעלמים.

באותה מידה ניתן לבחור: $\begin{cases} A_+ = 0 \\ \beta_- = 1 \end{cases}$.

$$\Rightarrow \begin{matrix} k\left(1 - A_-\right) = k'\beta_+ \\ 1 + A_- = \beta_+ \end{matrix} \Rightarrow \boxed{\begin{cases} A_- = \dfrac{k - k'}{k + k'} \\ \beta_+ = \dfrac{2k}{k + k'} \end{cases}}$$

(A, β מתארים את האמפליטודות השונות)

צפיפות זרם ההסתברות:

$$\begin{cases} \vec{J} = \dfrac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \cdot \vec{\nabla}\psi - \psi \cdot \vec{\nabla}\psi^*\right) \\ \rho = \left|\psi\right|^2 \end{cases}$$

המקרה הסטיונארי מתקיים: $\overbrace{\cancel{\dfrac{\partial\rho}{\partial t}}}^{=0} + div\left(\vec{J}\right) = 0$.

נחשב את צפיפויות הזרם, J_i, J_r, J_t :

$$J_i = \frac{\hbar}{2im}\left(e^{-ikx}\frac{d}{dx}e^{ikx} - e^{ikx}\frac{d}{dx}e^{-ikx}\right) = \frac{\hbar}{2im}\left(ik+ik\right) = \frac{\hbar k}{m}$$

$$J_r = \ldots = \frac{\hbar k}{m}\left|A_-\right|^2$$

$$J_t = \ldots = \frac{\hbar k'}{m}\left|\beta_+\right|^2$$

ואכן מתקיים , $J_i = J_r + J_t$.

מקדם החזרה R:

$$\boxed{R \equiv \frac{\left|J_r\right|}{\left|J_i\right|}}$$

מקדם העברה T :

$$\boxed{T \equiv \frac{\left|J_t\right|}{\left|J_i\right|}}$$

תמיד צריך להתקיים:

$$\boxed{R + T = 1 \Leftrightarrow J_i = J_r + J_t}$$

כאשר במקרה שלנו:

$$R = \left|A_-\right|^2 \quad , \quad T = \frac{k'}{k}\left|\beta_+\right|^2$$

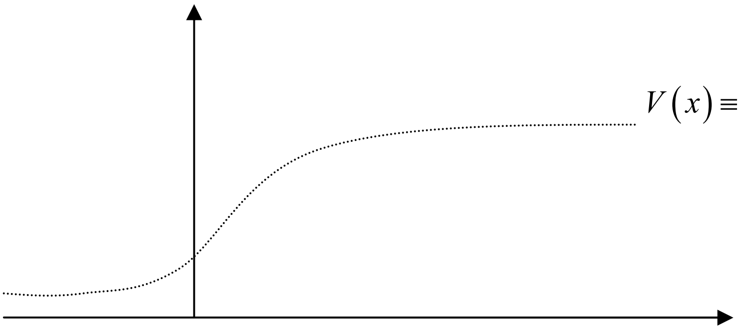
אנחנו מצפים ש:

$$R \xrightarrow[\hbar \to 0]{} 0$$

אבל אם ניקח את הביטוי שקיבלנו עבור $\left|A_-\right|^2$ אנו לא מקבלים ש $R \to 0$ גם כאשר $\hbar \to 0$.

<u>באופן קלאסי:</u>

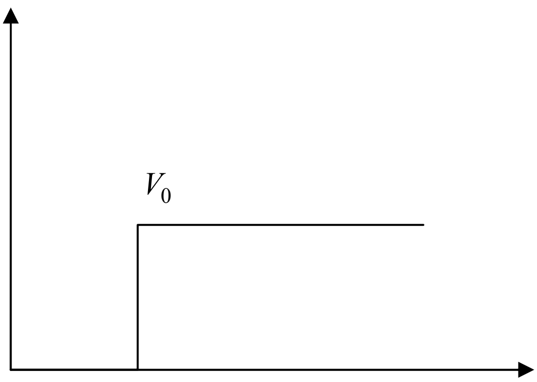
בנקודה $x = 0$ קיים כוח והוא שווה ל $F = -V_0\delta\left(x\right)$.



$$V\left(x\right) \equiv \frac{V_0}{1+e^{-\alpha x}}$$

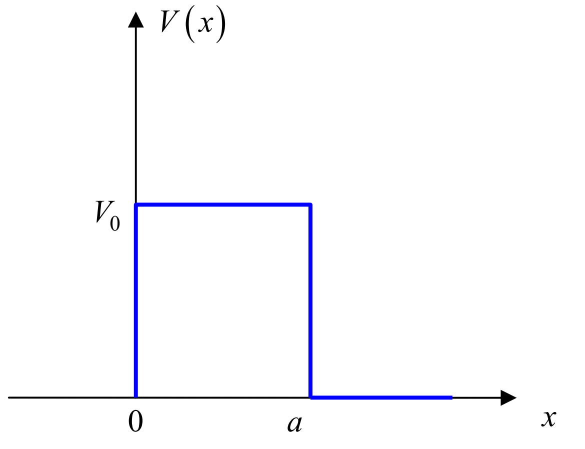
$\Rightarrow$

$\underset{\alpha \to \infty}{\Rightarrow}$



$$\Rightarrow R = \exp\left(-4\pi\frac{\sqrt{2mE}}{\alpha\hbar}\right) \xrightarrow[\hbar \to 0]{} 0$$

חדירה דרך מחסום פוטנציאל – *(Tunneling effect)*:



נגדיר: $\kappa' \equiv \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} > 0$, $k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

נפריד למקרים, מקרה ראשון $E < V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx} & x < 0 \\ Be^{-\kappa' x} + Ce^{\kappa' x} & 0 < x < a \\ De^{ikx} & x > a \end{cases}$$

(תמיד יש לכתוב את הסופר פוזיציה של שתי הפתרונות ולאחר מכן ניתן לזרוק איברים שניתנים לזריקה אבל חשוב להסביר מדוע!!)
נדרוש רציפות ונקבל:

$\underline{x=0}$:

$$\begin{cases} 1 + A = B + C \\ ik(1-A) = -\kappa'(B-C) \end{cases}$$

$\underline{x=a}$:

$$\begin{cases} Be^{-\kappa' a} + Ce^{\kappa' a} = De^{ika} \\ \kappa'\left(Ce^{\kappa' a} - Be^{-\kappa' a}\right) = ikDe^{ika} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{D = \frac{4ik\kappa' e^{-ika}}{(k+i\kappa')^2 e^{\kappa' a} - (k-i\kappa')^2 e^{-\kappa' a}}}$$

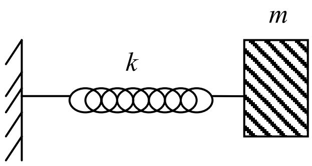
כאשר $\kappa' a \gg 1$:
(נקבל גבול של אפקט טאנל)

$$\Rightarrow |D|^2 \simeq \frac{16k^2\kappa'^2}{\left(k^2+\kappa'^2\right)^2} e^{-2\kappa' a}$$

(הסיבה לדרישה $\kappa' a \gg 1$ היא שכאשר $a \gg \frac{1}{\kappa'}$ אז יש את אפשט המנהרה)

אוסילטור הרמוני במימד אחד:

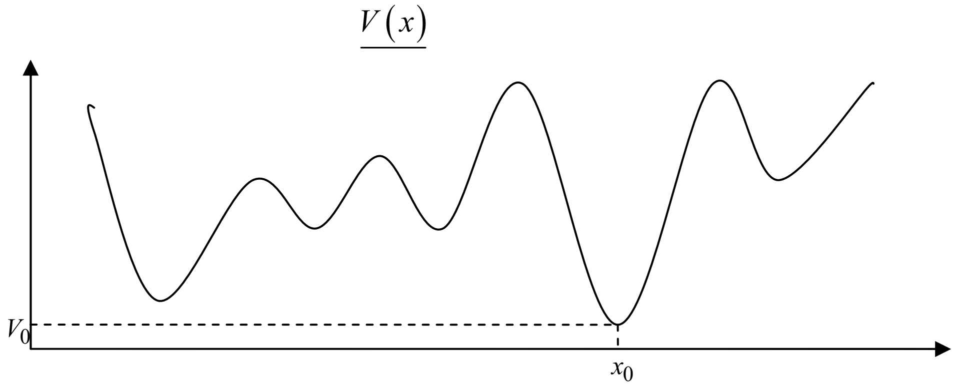
באופן קלאסי:



הכוח באופן קלאסי: $F=-k\left(x-x_0\right)$

אנרגיה פוטנציאלית באופן קלאסי: $V\left(x\right)=V_0+\frac{k}{2}\left(x-x_0\right)^2$.

ניתן לתאר כל דבר בפיזיקה הליניארית בעזרת אוסילטור הרמוני:



נקודת שיווי משקל מוגדרת על ידי: $\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=x_0}=0$

$$V\left(x\right)\underset{\underset{Taylor}{\uparrow}}{\cong}V_0+\frac{k}{2}\left(x-x_0\right)^2+C\left(x-x_0\right)^3+\ldots$$

$\left|x-x_0\right|\ll\frac{k}{c}$, $x-x_0$ (קטן) .

$$\underbrace{\Rightarrow V\left(x\right)\simeq V_0+\frac{k}{2}\left(x-x_0\right)^2}_{\text{קיבלנו פוטנציאל של אוסילטור הרמוני מתוך פוטנציאל כללי}}$$

משוואות התנועה של אוסילטור הרמוני:

$$m\ddot{x}=-k\left(x-x_0\right)$$

אנרגיה כוללת של אוסילטור הרמוני:

$$\boxed{E=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2}>0$$

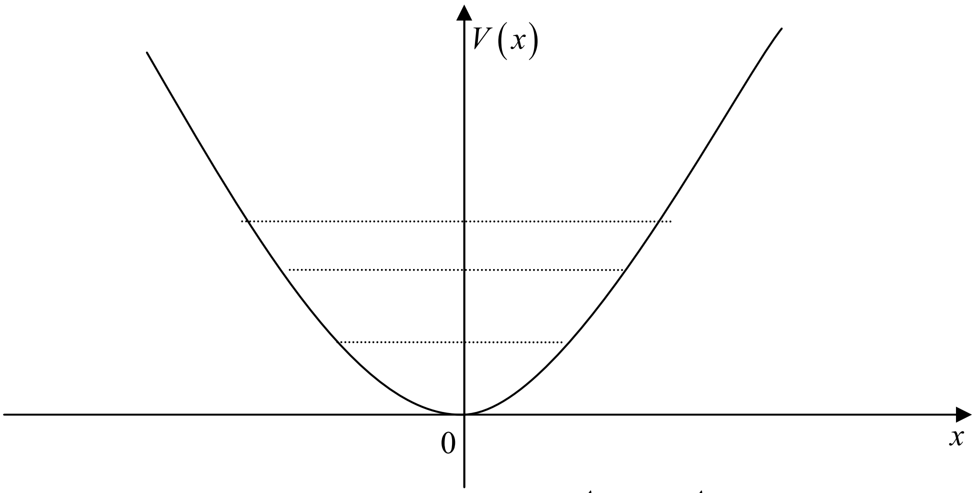
עבור: $\omega\equiv\sqrt{\frac{k}{m}}$, $V_0=0,x_0=0$.

בעזרת האנרגיה נכתוב את ההמילטוניאן הקלאסי של אוסילטור הרמוני:

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

כאשר, $\underbrace{p_x=m\dot{x}}_{\text{התנע}}$.

כעת נעבור לאופן הקוונטי:
מהו ספקטרום האנרגיה הזו?
הפוטנציאל הוא מהצורה הבאה:



ניתן לראות שעבור $x\to\infty$, $v\to\infty$ ולכן נצפה לערכי אנרגיה בדידים.
משוואת שרדינגר היא אם כן:

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=E\psi}\Leftrightarrow H\psi=E\psi$$

יחידות אנרגיה:

$$[\hbar\omega]$$

יחידות אורך:

$$\left[a\equiv\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$$

(a – הינו בעל יחידת אורך וזהו האורך האופייני של בעיית אוסילטור הרמוני)

פולינום הרמיט:

נגדיר את הגדלים על מנת לכתוב את משוואת שרדינגר בצורה נוחה יותר:

$$\varepsilon\equiv\frac{2E}{\hbar\omega}\qquad y\equiv\frac{x}{a}$$

$$\underbrace{\boxed{\underbrace{\left(y^2-\frac{d^2}{dy^2}\right)}_{H}\phi(y)=\varepsilon\phi(y)}}_{\substack{\text{זו בדיוק משוואת שרדינגר} \\ \text{התרון של משוואה זו היא שהיא חסרת יחידות}}}\quad ,\phi(y)\equiv\frac{1}{\sqrt{a}}\psi(x)$$

משוואה זו נקראת פולינום הרמיט.

שיטת הפתרון האלגברי של פולינום הרמיט:

ראשית נגדיר את שני האופרטורים הבאים:

$$\begin{cases} A \equiv -\dfrac{d}{dy} + y \\ B \equiv \dfrac{d}{dy} + y \end{cases}$$

$$A\left(B\phi\right) = \underbrace{\left(-\frac{d}{dy} + y\right)}_{A}\left[\underbrace{\left(\frac{d}{dy} + y\right)}_{B}\phi\right] = \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 - 1\right)\phi$$

ניתן לראות שניתן לכתוב את ההימלטוניאן בצורה הבאה:

$$H\phi = \left(AB + 1\right)\phi = \varepsilon\phi \Rightarrow \boxed{H = AB + 1}$$

וכמו ניתן לרשום:

$$BA\phi = \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 + 1\right)\phi$$
$$\Rightarrow \boxed{H = BA - 1}$$

מקרה ראשון: נניח ש $\left(\phi, \varepsilon\right)$ פתרון של משוואת שרדינגר:

$$H\phi = \varepsilon\phi \Leftrightarrow \left(BA - 1\right)\phi = \varepsilon\phi \underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{נפעיל} \\ \text{את} \\ \text{A}}} A\left(BA - 1\right)\phi = \varepsilon A\phi \Leftrightarrow \left(ABA - A\right)\phi = \varepsilon A\phi \Leftrightarrow \left(AB - 1\right)\left(A\phi\right) = \varepsilon A\phi \Leftrightarrow$$

$$\underbrace{\Leftrightarrow}_{\{H = AB + 1\}} \left(H - 2\right)A\phi = \varepsilon A\phi \Leftrightarrow H\left(A\phi\right) = \left(\varepsilon + 2\right)A\phi$$

מה שקיבלנו זה שאם יש לנו פתרון אחד, אנו יכולים לקבל את כל הפתרונות בעזרת פתרון זה ובעזרת האופרטורים A ו B.

לסיכום: אם $\left(\phi, \varepsilon\right)$ פתרון אזי $\left(A\phi, \varepsilon + 2\right)$ הוא גם כן פתרון.
(ניתן להפעיל את A אינסוף פעמים ובכך לקבל את סולם הפתרונות)

מקרה שני: נניח $\left(\phi, \varepsilon\right)$ פתרון:

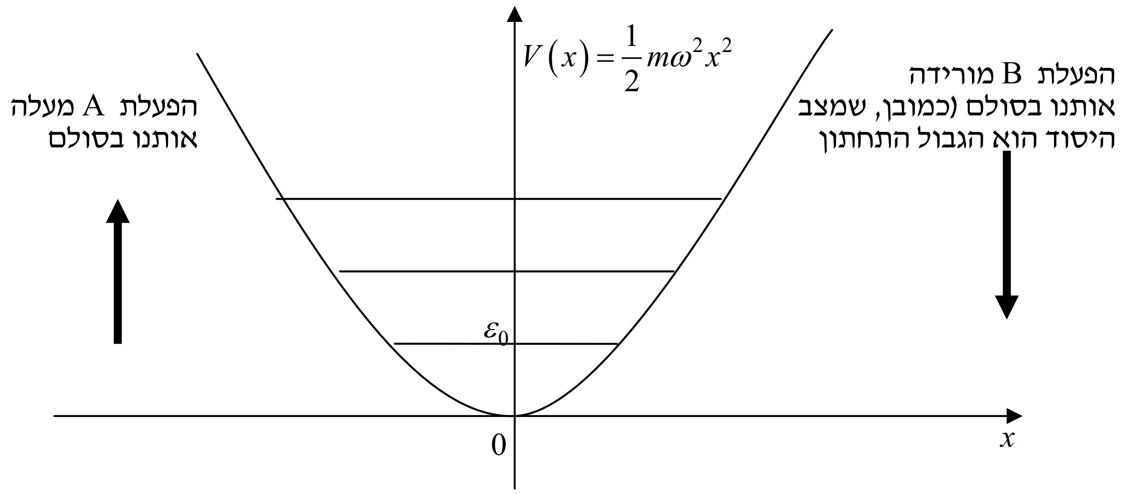
$$H\phi = \varepsilon\phi \Leftrightarrow \left(AB + 1\right)\phi = \varepsilon\phi \underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{נפעיל} \\ \text{את} \\ \text{B}}} B\left(AB + 1\right)\phi = \varepsilon B\phi \Leftrightarrow \left(BAB + B\right)\phi = \varepsilon B\phi \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \left(BA + 1\right)\left(B\phi\right) = \varepsilon B\phi \Leftrightarrow \underbrace{\left(BA - 1\right)}_{\equiv H}\left(B\phi\right) = \left(\varepsilon - 2\right)B\phi$$

קיבלנו סולם נוסף של פתרונות, $\left(B\phi, \varepsilon - 2\right)$
מכיוון שזוהי משוואה מסדר שני , הרי המרחב פרוס על ידי שני וקטורים בת"ל.
אנו מצאנו שני וקטורים בת"ל ואם כן קיבלנו את כל הפתרונות של הבעיה.

כעת יש עלינו להראות שהפתרון שהצענו $\left(\phi, \varepsilon\right)$ באמת קיים.

מצב היסוד- (ϕ_0,ε_0) **:**



(הערה: $\varepsilon_0 \geq 0$)

נאפיין את ε_0 בעזרת $B\phi$:

$$\left(\varepsilon-2,\quad \underbrace{B\phi}_{\substack{\text{זהו מצב}\\ \text{פיסיקלי}\\ \text{ועל כן}\\ \text{חייב להיות}\\ \text{מנורמל}\\ \text{כלומר}\\ B\phi\neq 0}}\right)$$

עבור מצב היסוד אנו יודעים ש $\phi_0 \neq 0$ (זהו מצב פיסיקלי).

$$\underbrace{B\phi_0=0}_{\substack{\text{כי אם}\\ B\phi_0\neq 0\\ \text{אז זה היה}\\ \text{פתרון של משוואת}\\ \text{שרדינגר ואז המצב}\\ \varepsilon_0\text{-2}\\ \text{הוא גם מצב עצמי וזה לא יכול להיות}\\ \text{לא יכול להיות מצב עצמי יותר נמוך}\\ \text{מתוך ההגדרה מצב יסוד הוא הנמוך ביותר}}}$$

$$H\phi_0=\varepsilon_0\phi_0 \Leftrightarrow (AB+1)\phi_- = \varepsilon_0\phi_0 \Leftrightarrow A(B\phi_0)=(\varepsilon_0-1)\phi_0 \Rightarrow \begin{cases} B\phi_0=0\\ \phi_0\neq 0\end{cases} \Rightarrow \boxed{\varepsilon_0=1}\Rightarrow \boxed{E_0=\frac{\hbar\omega}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \ ,n=0,1,2,...$$

$$\left\{(\phi_0,\varepsilon_0)\to(A\phi,\varepsilon+2)\Rightarrow \varepsilon_1=\varepsilon_0+2\right\}$$

פונקציות עצמיות: ϕ_0

על מנת למצוא את הע״ע יש לפתור את המשוואה:

$$B\phi_0 = 0 \Leftrightarrow \left(\frac{d}{dy}+y\right)\phi_0 = 0$$

נפתור את המשוואה:

$$\frac{d\phi_0}{dy} = -y\phi_0 \Rightarrow \frac{d\phi_0}{\phi_0} = -ydy \Rightarrow \phi_0(y) = Ne^{-\frac{y^2}{2}} \Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{4}} Ne^{-\frac{x^2}{2}\cdot\frac{m\omega}{\hbar}}$$

נרמול:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|\, dx = 1$$

(מתוך הנרמול אנו מקבלים את קבוע הנרמול N)

$$\boxed{\Rightarrow \underbrace{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}_{\text{מצב היסוד של אוסילטור הרמוני כאשר } E_0=\frac{\hbar\omega}{2}}}$$

בעזרת הפעלת A ניתן למצוא את הפונקציה הבאה וכן עלה:

$$\boxed{\psi_1(x) = A\psi_0(x) = \left(-\frac{d}{dy}+y\right)e^{-\frac{y^2}{2}} \Rightarrow \psi_1(x) = \sqrt{2}\,\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \cdot x \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$$

$$\boxed{\begin{gathered}\psi_n(y) = \left(\sqrt{\pi}\,2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) \\ H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n}\left(e^{-y^2}\right)\end{gathered}}$$

$$\begin{cases} H_0(y) = 1 \\ H_1(y) = 2y \\ H_2(y) = 4y^2 - 2 \\ . \\ . \\ . \end{cases}$$

עקרונות של מכניקה קוונטית-מבוא:

קצת היסטוריה:

1922: De Broglie
1924: *Heisenberg* (תורת המטריצות)
1925: *Dirac* (מרחב וקטורי)
1926: *Schrödinger*
1927: *Hilbert & Von Newmann*

מרחב וקטורי של Hilbert :

תכונה עיקרית של פונקצית גל היא:

$$\boxed{\int \left|\psi\left(r,t\right)\right|^2 d^3r < \infty \ \{\text{סופי}\}}$$

הגדרה של מרחב וקטורי E_H :

דוגמא: עבור $\mathbb{R}^3$, $E_H = \ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$.

הצגות שונות של פונקצית הגל:

- $\vec{r}, \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}} \leftarrow \psi\left(\vec{r},t\right)$
- $i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}} , \vec{p} \leftarrow \varphi\left(\vec{p},t\right)$

ראינו שניתן להציג כל מצב קוונטי בשתי דרכים, חשוב להבין שבעצם מספר ההצגות הוא אינסופי ואפשר לעשות שימוש בהצגה הנוחה ביותר לנו.

מצב קוונטי: $\left|\psi\left(t\right)\right\rangle \in E_H$

מכפלה סקאלרית ורוטציות של *Dirac* :

נניח שיש לנו שני וקטורים : $\left|\psi_1\right\rangle,\left|\psi_2\right\rangle$, אז ניתן להדיר מכפלה סקלרית שלהם ע"י : $\left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle$
E_H הוא מרחב הרמיטי ועל כן בדרך כלל $\left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle \in \mathbb{C}$.
אורך של ווקטור בריבוע ניתן על ידי:

$$\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle = \left\|\psi\right\|^2 = \left\|\left|\psi\right\rangle\right\|^2 > 0$$

דוגמא:
נתונים שני הוקטורים הבאים,

$$\left|v\right\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix}, v_i \in \mathbb{C} \ ;; \quad \left|u\right\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_n \end{pmatrix}, u_i \in \mathbb{C}$$

$$\left\langle v\middle|u\right\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i{}^* u_i$$

מתכון: $\sum_{i=1}^{n} v_i * u_i = \left\langle v | u \right\rangle = \underbrace{\begin{pmatrix} v_1 * & v_2 * & \ldots & v_n * \end{pmatrix}}_{(1,n)} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ . \\ u_n \end{pmatrix}}_{(n,1)}$

מכפלה סקלרית ב- $\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$ **:**

$$\left\langle \psi_2 | \psi_1 \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_2 *(r) \psi_1 *(r) d\vec{r} = \int \varphi_2 *(p) \varphi_1(p) d\vec{p}$$

Bra – Ket :

דוגמא: מרחב Hillbert סופי,

$$\left\langle v \right| = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ . \\ . \\ . \\ v_n \end{pmatrix} \in E_H$$

$$E_H \longrightarrow E_H * (dual)$$

$$\underbrace{\left| v \right\rangle}_{Ket} \longrightarrow \underbrace{\left\langle v \right|}_{Bra} \equiv \begin{pmatrix} v_1 * & v_2 * & \ldots & v_N * \end{pmatrix}$$

$$\underset{bra|ket}{\left\langle v | v \right\rangle}$$

(bra - זה לא וקטור ; Ket – זה קטור)

$\underline{\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)}$:

$$\left| \psi \right\rangle \longrightarrow \left\langle \psi \right|$$

מכפלה סקלרית= $\left\langle \phi | \psi \right\rangle$

אופרטורים:

$$\hat{A}: \quad \begin{aligned} E_H &\longrightarrow E_H \\ \left| \psi \right\rangle &\longrightarrow \hat{A} \left| \psi \right\rangle \end{aligned}$$

הצגה של אופרטור בבסיס נתון, מטריצה:

$$\hat{A}|u\rangle = |v\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{\hat{A}} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ . \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j a_{ij} u_j \\ \sum_j a_{2j} u_j \\ . \\ . \\ . \\ \sum_j a_{ij} u_j \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

$$\langle v|\left(\hat{A}|u\rangle\right) = \sum_{i=1}^{n} v_i^* \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} u_j\right)$$

$$\boxed{a_{ij} = \langle v_i | A | u_j \rangle}$$

$$\langle v|\hat{A} = (v_1^*, v_2^*, \dots, v_n^*) \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_{(n,n)} = \frac{(1,n)}{(bra)} = \left(\sum_{j=1}^{n} a_{j1} v_j^*, \dots,\right)$$

$$\left(\langle v|\hat{A}\right)|u\rangle = \left(\dots, \sum_{j=1}^{n} a_{ji} v_j^*, \dots\right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ . \\ . \\ . \\ u_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ji} v_j^* u_i = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} v_i^* u_j = \langle v|\left(\hat{A}|u\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\left(\langle v|\hat{A}\right)|u\rangle = \langle v|\left(\hat{A}|u\rangle\right) = \langle v|\hat{A}|u\rangle}$$

$\langle v|\hat{A}|u\rangle$: אלמנט מטריצה של האופרטור $\hat{A}$ בין המצבים $|u\rangle$ ו $\langle v|$.

ממוצע של אופרטורים:

$$\langle \psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle a(t)\rangle_{\psi}$$

אופרטור הרמיטי – צמוד קומפלקסי:

$\hat{A}$, צמוד קומפלקסי $\hat{A}^\dagger$.

$$\langle\psi_2|\hat{A}^\dagger|\psi_1\rangle=\left(\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle\right)^*$$

אופרטור הרמיטי מוגדר על ידי:

$$\boxed{\hat{A}=\hat{A}^\dagger}$$

משפט: ממוצע $\langle a\rangle$ של אופרטור הרמיטי הוא ממשי בלבד $\langle a\rangle\in\mathbb{R}$.

$$\hat{A}=\hat{A}^\dagger\Rightarrow\langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle\underbrace{=}_{\text{לפי הגדרה}}\left(\langle\psi|A|\psi\rangle\right)^*=\langle a\rangle^*\overbrace{=}^{\text{הרמיטי}}\langle\psi|A|\psi\rangle=\langle a\rangle\Rightarrow\boxed{\langle a\rangle=\langle a\rangle^*\quad,\forall|\psi\rangle}$$

כלומר, עבור אופרטורים הרמטיים ניתן להוכיח שערך התצפית של אופרטור הרמיטי הוא תמיד ממשי.

דוגמא1- מרחב סופי, $\hat{A}=\left[A_{ij}\right]$ הרמיטי:

$$\boxed{A_{ij}=A_{ji}^*\Leftrightarrow\hat{A}=\hat{A}^\dagger}$$

דוגמא 2-אופרטור מיקום $\hat{x}$, $E_H=\ell_z(\mathbb{R})$.

$$\underbrace{\hat{x}\overset{?}{=}\hat{x}^\dagger}_{\text{האם אופרטור זה הרמיטי?}}$$

$$\forall\left(|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle\right)\in E_H^2$$

$$\langle\psi_2|\hat{x}^\dagger|\psi_1\rangle=\left(\langle\psi_1|\hat{x}|\psi_2\rangle\right)^*=\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\cdot x\cdot\psi_2(x)\,dx\right)^*=\int\psi_1(x)\cdot x\cdot\psi_2^*(x)\,dx=$$

$$=\int\psi_2^*(x)\cdot x\cdot\psi_1(x)\,dx=\langle\psi_2|\hat{x}|\psi_1\rangle$$

לכן,

$$\langle\psi_2|\hat{x}^\dagger|\psi_1\rangle=\langle\psi_2|\hat{x}|\psi_1\rangle\quad,\forall(\psi_1,\psi_2)\Rightarrow\boxed{\hat{x}=\hat{x}^\dagger}$$

כלומר, $\hat{x}$ אופרטור הרמיטי.

דוגמא 3 – אופרטור תנע $\hat{p}_x$ (במרחב $E_H=\ell_z(\mathbb{R})$):

$$\hat{p}^\dagger \overset{?}{=} \hat{p}$$

ניקח שני וקטורים כלשהם במרחב: $\forall\left(|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle\in E_H^2\right)$:

$$\langle\psi_2|\hat{p}^\dagger|\psi_1\rangle=\left(\langle\psi_1|\hat{p}|\psi_2\rangle\right)^*=\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\cdot\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)}_{\substack{\hat{p}\\ \text{בהצגת מיקום}}}\cdot\psi_2(x)dx\right)^*=\left(-\frac{\hbar}{i}\right)\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)\left(\frac{d}{dx}\right)\psi_2^*(x)dx=$$

$$\underbrace{=}_{\substack{\text{אינטגרציה}\\ \text{בחלקים}\\ u=\psi_1\\ du=\frac{d\psi_1}{dx}dx\\ v=\psi_2^*\\ dv=\frac{d\psi_2^*}{dx}dx}}+\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2^*(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi_1(x)dx=\langle\psi_2|\hat{p}|\psi_1\rangle$$

כלומר הראנו ש $\hat{p}$ אופרטור הרמיטי,

$$\langle\psi_2|\hat{p}^\dagger|\psi_1\rangle=\langle\psi_2|\hat{p}|\psi_1\rangle\ ,\forall\left(|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle\in E_H^2\right)\Rightarrow\boxed{\hat{p}=\hat{p}^\dagger}$$

ערך עצמי ומצב עצמי של אופרטור:

נגדיר אופרטור $\hat{A}$.

מצב $|\psi_a\rangle$ הוא מצב עצמי של $\hat{A}$ עבור ערך עצמי a_α :

$$\boxed{\hat{A}|\psi_a\rangle=a_\alpha|\psi_a\rangle}$$

עבור אופרטורים הרמיטיים $\hat{A}$:

$$\langle\psi_a|\hat{A}|\psi_a\rangle\underbrace{=}_{\substack{\hat{A}=\hat{A}^\dagger\\ \text{הרמיטי}}}\langle\psi_a|\hat{A}^\dagger|\psi_a\rangle=\left(\langle\psi_a|\hat{A}|\psi_a\rangle\right)^*=a_\alpha^*$$

לכן, $a_\alpha=a_\alpha^*$ $\Leftarrow$ a_α הוא ממשי.

$\hat{A}$ - הרמיטי במרחב E_H :

$$\begin{cases}\hat{A}|\psi_a\rangle=a_\alpha|\psi_a\rangle\\ \hat{A}|\psi_b\rangle=a_\beta|\psi_b\rangle\end{cases},\left(a_\alpha\neq a_\beta\right)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\boxed{\langle\psi_b|\psi_a\rangle=0}$$

הוכחה:

נגדיר:

$$\begin{cases}\hat{A}|\psi_a\rangle=a_\alpha|\psi_a\rangle\\ \hat{A}|\psi_b\rangle=a_\beta|\psi_b\rangle\end{cases},\left(a_\alpha\neq a_\beta\right)$$

$$\left\langle \psi_a \left| \hat{A} \right| \psi_b \right\rangle = \left\langle \psi_a \left| \left(\hat{A}\psi_b \right) \right. \right\rangle = a_\beta \left\langle \psi_a | \psi_b \right\rangle = \left\langle \left(\psi_a \hat{A} \right) \right| \left. \psi_b \right\rangle = a_\alpha \left\langle \psi_a | \psi_b \right\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(a_\alpha - a_\beta \right) \left\langle \psi_a | \psi_b \right\rangle = 0 \underset{a_\alpha \neq a_\beta}{\Rightarrow} \boxed{\left\langle \psi_a | \psi_b \right\rangle = 0}$$

משפט ספקטרלי:

בסיס של מרחב Hilbert:

דוגמא: $E_H = \ell_2\left(\mathbb{R}\right)$.

חלקיק קוונטי בפוטנציאל של אוסילטור הרמוני, פתרנו בעבר[I] ומצאנו:

$$\phi_n\left(x\right) = c_n e^{\frac{x^2}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} \quad , n = 0,1,2,....$$

$\left\{ \phi_n\left(x\right), n = 0,1,2,... \right\}$ מגדיר בסיס של $\ell_2\left(\mathbb{R}\right)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n{}^*\left(x\right) \phi_m\left(x\right) dx = \delta_{nm}$$

$$\psi\left(x\right) \in \ell_2\left(\mathbb{R}\right)$$

$$\psi\left(x\right) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n\left(x\right)$$

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n\left(x\right) \psi\left(x\right) dx$$

באופן כללי נגדיר בסיס $\left\{ |n\rangle \right\}$ של E_H:

נגדיר: $\left\langle m | n \right\rangle = \delta_{mn}$

ולפי ההגדרה: $\boxed{c_n = \left\langle n | \psi \right\rangle}$; $\boxed{\left\langle \psi \right| = \sum_{n=1}^{\infty} c_n{}^* \left\langle n \right|}$; $\boxed{\left| \psi \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left| n \right\rangle}$; $\forall \left| \psi \right\rangle \in E_H$.

$$\boxed{\left\langle \psi | \psi \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \left| c_n \right|^2}$$

$$\left| \psi \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left| n \right\rangle \ ;; \ \left| \phi \right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} b_m \left| n \right\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\left\langle \phi | \psi \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} b_n{}^* c_n}$$

אופרטור היטל (פרוג'קטור) – נוסחת הסגירה:

$$\left\langle u | v \right\rangle \in \mathbb{C}$$

$$\forall \left| \psi \right\rangle \in E_H \quad , \quad \left(\left| u \right\rangle \left\langle v \right| \right) \left| \psi \right\rangle = \left| u \right\rangle \left(\left\langle v | \psi \right\rangle \right) = \left(\left\langle v | \psi \right\rangle \right) \left| u \right\rangle$$

נגדיר: $\boxed{\hat{P}_n \equiv \left| n \right\rangle \left\langle n \right|}$ - פרוג'קטור.

עבור כל מצב ψ שאפשר לפרוס בבסיס n מתקיים:

[I] ראה עמוד 47 – פתרון של אוסילטור הרמוני

$$\left|\psi\right\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\left|n\right\rangle\Rightarrow\hat{P}_n\left|\psi\right\rangle=\left\langle n|\psi\right\rangle\left|n\right\rangle=c_n\left|n\right\rangle$$

כלומר, הפרוג'קטור מתיל את הוקטור ψ לכיוון n.

תוכנה חשובה מאוד של הפרוג'קטור:

$$\boxed{\hat{P}_n^{\,2}=\hat{P}_n}$$

הוכחה:

$$\hat{P}_n^{\,2}=\left(\left|n\right\rangle\left\langle n\right|\right)\left(\left|n\right\rangle\left\langle n\right|\right)=\left|n\right\rangle\underbrace{\left(\left\langle n|n\right\rangle\right)}_{=1}\left\langle n\right|=\left|n\right\rangle\left\langle n\right|=\hat{P}_n$$

נגדיר תת מרחב E_ν המוגדר על ידי $\left\{\left|n\right\rangle,n\in\{\nu\}\right\}$:

$$\boxed{\hat{P}_\nu=\sum_{n\in\{\nu\}}\hat{P}_n}$$

כעת נראה את הפרוג'קטור כאשר $E_\nu=E_n$:

$$\hat{P}_\nu=\sum_{n=1}^{\infty}\hat{P}_n=1\Leftrightarrow\hat{P}\sum_{n=1}^{\infty}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|=1\Rightarrow\underbrace{\boxed{\sum_{n=1}^{\infty}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|=1}}_{\text{נוסחת הסגירה}}$$

פרוק ספקטרלי של אופרטור:

אופרטור הרמיטי: $\hat{A}^\dagger=\hat{A}$.

$\{a_\alpha,\alpha=1,2,....\}$ - ע"ע של $\hat{A}$.

$$\hat{A}\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle=a_\alpha\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle$$

$a_\alpha\in\mathbb{R}$, $\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle$ וקטור עצמי

לאותו ע"ע יכול להיות מצב שיש לו מספר של ו"ע (המקרה המנוון), כלומר, $r_\alpha=1,2,....,n_\alpha$ מתאר את הניוון של המצבים $\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle$.

$$\left(a_\alpha\neq a_\beta\right)\begin{cases}a_\alpha & \text{עבור } \left|\alpha,r_\alpha\right\rangle\\ a_\beta & \text{עבור } \left|\beta,r_\beta\right\rangle\end{cases},\ a_\alpha\in\mathbb{R}$$

$$\left\langle\beta,r_\beta|\alpha,r_\alpha\right\rangle=\delta_{\alpha\beta}\delta_{r_\alpha r_\beta}$$

משפט ספקטרלי:

המערכת $\left\{\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle\right\}$ של מצבים עצמיים של אופרטור הרמיטי $\hat{A}$ מגדירה בסיס של מרחב E_H (הילברט כולו).

פירוק ספקטרלי של אופרטור הרמיטי:

$\left\{\left|\alpha,r\right\rangle\right\}$ בסיס של E_H.

פרוג'קטור $\hat{P}_\alpha$ מוגדר להיות:

$$\hat{P}_\alpha=\sum_{r_\alpha=1}^{n_\alpha}\left|\alpha,r_\alpha\right\rangle\left\langle\alpha,r_\alpha\right|$$

נוסחת הסגירה:

$$\sum_\alpha\hat{P}_\alpha=1$$

עבור כל וקטור: $\forall|\varphi\rangle\in E_H$

$$\hat{A}|\varphi\rangle=\hat{A}\left(\sum_\alpha \hat{P}_\alpha|\varphi\rangle\right)=\sum_\alpha \hat{A}\hat{P}_\alpha|\varphi\rangle=\sum_\alpha a_\alpha\hat{P}_\alpha|\varphi\rangle\Rightarrow\boxed{\hat{A}=\sum_\alpha a_\alpha\hat{P}_\alpha}$$

$$\underbrace{\boxed{\hat{A}=\sum_\alpha\sum_{r_\alpha=1}^{n_\alpha}|\alpha,r_\alpha\rangle a_\alpha\langle\alpha,r_\alpha|}}_{\text{נוסחת הפירוק הספקטרלי של אופרטור הרמיט}}$$

הדרך ללכסן מטריצה:

1. נגדיר בסיס: $\{|i\rangle\}$ של E_H מזה מקבלים מטריצה עבור האופרטור $\hat{A}$.

$$\{|i\rangle\}\ \Downarrow^*\ \{|\alpha,r_\alpha\rangle\}$$

* המעבר מבסיס לבסיס מתבצע על ידי אופרטור U אוניטרי, אשר הגדרתו $UU^\dagger=U^\dagger U$

2. קבלת הע"ע a_α: יש לנו אופרטור $\hat{A}$ ואנו מחפשים a_α אשר מקיים: $\hat{A}|\alpha\rangle=a_\alpha|\alpha\rangle$.

$$\hat{A}|\alpha\rangle=a_\alpha|\alpha\rangle\Leftrightarrow\left(\hat{A}-a_\alpha 1\right)|\alpha\rangle=|0\rangle$$

נגדיר בסיס $\{|i\rangle\}$ של E_H ונקבל מנוסחת הסגירה את המשוואה: $\sum_i|i\rangle\langle i|=1$.

$$\Rightarrow\left(\hat{A}-a_\alpha 1\right)\sum_i|i\rangle\langle i||\alpha\rangle=|0\rangle\underset{\substack{\text{נכפול}\\\text{ב}\\ \mathrm{x}\langle j|}}{\Rightarrow}\sum_i\langle j|\hat{A}-a_\alpha 1|i\rangle\langle i|\alpha\rangle=0\Leftrightarrow\sum_i\left(A_{ji}-a_\alpha\delta_{ij}\right)\alpha_i=0$$

קיבלנו מערכת אינסופית של משוואות אשר לכל אחת מהן יש פתרון.
על מנת לקבל פתרון עלינו לבדוק מתי det מתאפסת:

$$\underset{\alpha_i\neq 0}{\Rightarrow}\boxed{\det\left(\hat{A}-a_\alpha 1\right)=0}$$

3.
$$\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}=\begin{pmatrix}a_0 & & & \\ & a_1 & (0) & \\ & & \dots & \\ & (0) & a_n & \\ & & & \dots\end{pmatrix}$$

$$\hat{U}:\{|i\rangle\}\to\underset{\hat{A}}{\{|\alpha,r_\alpha\rangle\}}$$

אופרטור אוניטרי:

$\hat{U}$ - הוא אוניטרי בתנאי שהוא מקיים: $1=UU^\dagger=U^\dagger U$

$$\Leftrightarrow U^{-1}=U^\dagger$$

משפט:

$$\forall|\varphi\rangle\in E_H,\|U\varphi\|^2=\|\varphi\|\Leftrightarrow\langle U\varphi|U\varphi\rangle=\langle\varphi|\varphi\rangle$$

(במילים: אופרטור אוניטרי שומר על גודלו של הוקטור)

הוכחה:

בכיוון הראשון: U הוא אוניטרי ,כלומר, $1=UU^{\dagger}=U^{\dagger}U$.

$$\langle\varphi|\varphi\rangle=\langle\varphi|U^{\dagger}U|\varphi\rangle=\langle U\varphi|U\varphi\rangle\Leftrightarrow\|\varphi\|^2=\|U\varphi\|^2$$

בכיוון השני: $\forall\lambda\in\mathbb{C}$, $\forall(|\varphi\rangle,|\chi\rangle)\in E_H^2$

$$|\varphi+\lambda\chi\rangle=|\varphi\rangle+\lambda|\chi\rangle\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\langle\varphi+\lambda\chi|\varphi+\lambda\chi\rangle=\langle U(\varphi+\lambda\chi)|U(\varphi+\lambda\chi)\rangle\Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow\cancel{\langle\varphi|\varphi\rangle}+\cancel{|\lambda|^2\langle\chi|\chi\rangle}+2\operatorname{Re}(\lambda\langle\varphi|\chi\rangle)=\cancel{\langle U\varphi|U\varphi\rangle}+\cancel{|\lambda|^2\langle U\chi|U\chi\rangle}+2\operatorname{Re}(\lambda\langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

$$\Rightarrow\operatorname{Re}(\lambda\langle\varphi|\chi\rangle)=\operatorname{Re}(\lambda\langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

$\underline{\lambda=1}$:

$$\operatorname{Re}(\langle\varphi|\chi\rangle)=\operatorname{Re}(\langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

$\underline{\lambda=i}$:

$$\operatorname{Re}(i\langle\varphi|\chi\rangle)=\operatorname{Re}(i\langle U\varphi|U\chi\rangle)\Leftrightarrow\operatorname{Im}(\langle\varphi|\chi\rangle)=\operatorname{Im}(\langle U\varphi|U\chi\rangle)$$

$$\langle\varphi|\chi\rangle=\langle U\varphi|U\chi\rangle\Leftrightarrow\langle\varphi|U^{\dagger}U|\chi\rangle=\langle\varphi|\chi\rangle\ ,\forall|\varphi\rangle,|\chi\rangle\ ,\boxed{U^{\dagger}U=1}$$

עבור אוסילטור הרמוני מתקיים:

$$\{|n\rangle, n=0,1,2,....\}$$

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&&&\\\sqrt{1}&0&\sqrt{2}&(0)&\\&\sqrt{2}&.&\sqrt{3}&\\&(0)&\sqrt{3}&.&...\\&&&...&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{p}=-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&&&\\-\sqrt{1}&0&\sqrt{2}&(0)&\\&-\sqrt{2}&.&\sqrt{3}&\\&(0)&-\sqrt{3}&.&...\\&&&...&0\end{pmatrix}$$

עקרונות של מכניקה קוונטית:

עקרון ראשון- עקרון הסופרפוזיציה:

מערכת קוונטית: "חלקיק" ("אטום"),כדי לתאר את כל המצב של "חלקיק" קוונטי צריך ראשית להגדיר את מרחב Hilbert , E_H עם בסיס $\{|\psi_i\rangle\}$.

כל מצב אפשרי ,מצב $|\psi\rangle$, של חלקיק קוונטי נתון על ידי הסופרפוזיציה:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \quad , \quad c_i = \langle\psi_i|\psi\rangle .$$

$$\underbrace{\sum_i |c_i|^2 = 1}_{\text{הוא מנורמל } |\psi\rangle}$$

ה"חלקיק" יכול להיות בכל סופרפוזיציה של מצבים עצמים היא גם מצב פיסקלי של המערכת.

פאזה:

$\varphi(x)\in\mathbb{C}$, נתאר את פונקצית הגל בעזרת פונקציה זו.

מבחינה קוונטית, המצב $\varphi(x)$ והמצב $(\delta\in\mathbb{R})$ $e^{i\delta}\varphi(x)$ הם דומים מבחינה קוונטית וזאת משום שאנו יכולים למדוד רק את הערך המוחלט בריבוע ומבחינה זו הם יתנו אותו הדבר.
כלומר,המצב $|\psi\rangle\in E_H$ והמצב הזה $e^{i\delta}|\psi\rangle$ הם אותו הדבר מבחינה קוונטית .

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \;,\; e^{i\delta}|\psi\rangle = \sum_i e^{i\delta} c_i |\psi_i\rangle \quad \underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{רק לערך}\\ \text{המוחלט יש}\\ \text{חשיבות פיזיקאלית}}} \quad |e^{i\delta}c_i|^2 = |c_i|^2$$

שים לב ,המצב הבא שונה:

ניקח שני מצבים $|\psi_1\rangle , |\psi_2\rangle$ ועל פי עקרון הסופרפוזיציה גם המצב הבא מגדיר את המערכת $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$.

נגדיר שני מצבים חדשים $e^{i\delta_1}|\psi_1\rangle , e^{i\delta_2}|\psi_2\rangle$ (בעצם המצבים החדשים דומים למצבים הקודמים) כעת נקבל את המצב שהוא הסופר פוזיציה של המצבים: $|\psi'\rangle = e^{i\delta_1}|\psi_1\rangle + e^{i\delta_2}|\psi_2\rangle$,אבל $|\psi'\rangle \neq |\psi\rangle$ (אין פאזה אבסולוטית למערכת) .
אי אפשר למדוד פאזה אבסולוטית אבל ניתן למדוד פאזה יחסית.

עקרון שני-עקרון המדידה:

1. לכל גודל פיסקלי מוגדר אופרטור הרמיטי $\hat{A}$.
2. $\forall|\psi\rangle\in E_H$: התוצאות היחידות של מדידה של $\hat{A}$, הן ערכיים עצמיים a_α .
3. מיד אחרי המדידה של $\hat{A}$ בהסתברות $P(a_\alpha)$ המצב הקוונטי הוא $|\psi_\alpha\rangle \equiv \hat{P}_\alpha|\psi\rangle$

$$\left\{ \underbrace{\hat{P}_\alpha \equiv \sum_{r_\alpha=1}^{n_\alpha} |\alpha, r_\alpha\rangle\langle\alpha, r_\alpha|}_{\text{פרוזקטור}} \right\}.$$

אין זמן אופיני. מטילים את המצב ψ לתת מרחב שמתאים למצב האפשרי a_α .

$$P(a_\alpha) = \langle\psi_a|\psi_\alpha\rangle = \|\psi_\alpha\|^2$$

$$|\psi'\rangle \equiv \frac{|\psi_\alpha\rangle}{\|\psi_\alpha\|}$$

4. ערך ממוצע של גודל פיזיקאלי a : $\langle a\rangle=\sum_\alpha a_\alpha p(a_\alpha)$.

$$P(a_\alpha)=\left\|\psi_\alpha\right\|^2=\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle \underbrace{=}_{|\psi_\alpha\rangle\equiv\hat{P}_\alpha|\psi\rangle} \langle\psi|\hat{P}_\alpha\hat{P}_\alpha|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle$$

לכן,

$$\langle a\rangle=\sum_\alpha a_\alpha\langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle=\langle\psi|\sum_\alpha a_\alpha\hat{P}_\alpha|\psi\rangle \underbrace{=}_{\substack{\text{פירוק} \\ \text{ספקטרלי} \\ \text{של } \hat{A} \\ \sum_\alpha a_\alpha\hat{P}_\alpha=\hat{A}}} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\boxed{\langle a\rangle_\psi=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$

עקרון שלישי-התפתחות בזמן של מצב קוונטי:

עבור מצב $|\psi(t)\rangle$ הנתון בזמן t, התפתחות בזמן היא <u>דטרמיניסטית</u> ונתונה על ידי משוואת Schrödinger :

$$\boxed{i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}=\hat{H}|\psi(t)\rangle}$$

$$\Leftrightarrow|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t)|\psi(t=0)\rangle\ ,\ \hat{U}(t)=e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

הערה: אין אופרטור זמן, אופרטור זה משהו הסתברותי ואין דבר כזה בזמן.

שימור נירמול בזמן: $\left\|\psi(t)\right\|=1$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{d}{dt}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle & (1) \\ -i\hbar\dfrac{d}{dt}\langle\psi|=\langle\psi|\hat{H}^\dagger=\langle\psi|\hat{H} & (2) \end{cases}$$

נכפול את (1) ב $x\langle\psi|$ ואת (2) נכפול ב $x|\psi\rangle$.

<u>$(1)-(2)$</u>:

$$\Rightarrow i\hbar\left(\left\langle\psi\left|\frac{d\psi}{dt}\right.\right\rangle+\left\langle\frac{d\psi}{dt}\right|\psi\right\rangle\right)=0\Leftrightarrow\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle=0$$

$\Leftarrow$ לכן ψ נשמר בזמן.

תלות בזמן של מצב $|\psi(t)\rangle$:

(בסיס של E_H: $(|\psi_\alpha\rangle,E_\alpha)$ ספקטרום של $\hat{H}$)

$$\hat{H}|\psi_\alpha\rangle=E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$$

בזמן $t=0$:

$$|\psi(t=0)\rangle=\sum_\alpha c_\alpha|\psi_\alpha\rangle\ \ ,c_\alpha=\langle\psi_\alpha|\psi(t=0)\rangle$$

בזמן t כלשהו:

$$|\psi(t)\rangle=\sum_\alpha\lambda_\alpha(t)|\psi_\alpha\rangle$$

$$i\hbar\sum_\alpha\frac{d\lambda_\alpha(t)}{dt}|\psi_\alpha\rangle=\sum_\alpha\lambda_\alpha(t)E_\alpha|\psi_\alpha\rangle\Leftrightarrow i\hbar\frac{d\lambda_\alpha}{dt}=E_\alpha\lambda_\alpha(t)$$

$$\Rightarrow \lambda_\alpha(t)=\underbrace{\lambda_\alpha(t=0)}_{=c_\alpha}e^{-i\frac{E_\alpha t}{\hbar}}=c_\alpha e^{-i\frac{E_\alpha t}{\hbar}}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underbrace{\boxed{\left|\psi(t)\right\rangle=\sum_\alpha c_\alpha e^{-i\frac{E_\alpha t}{\hbar}}\left|\psi_\alpha\right\rangle}}_{\text{פעימות - סופרפוזיציה של אוסילציה בתדירויות שונות}}$$

מבנה של מרחב Hilbert :

דוגמא-חלקיק קוונטי במקרה אחד ממדי+ פוטנציאל הרמוני

מרחב Hilbert- $\ell_2(\mathbb{R})$.

הבסיס נתון על ידי פונקציות: $\{\phi_n(x), n\in N\}$.

נרצה לפתור חלקיק קוונטי בבור פוטנציאל הרמוני דו ממדי.

$$\underbrace{\phi(x)=\sum_n c_n\phi_n(x)\Leftrightarrow\left|\phi\right\rangle=\sum_n c_n\left|\phi_n\right\rangle}_{\text{במקרה החד ממדי}}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\phi(x,y)=\sum_{n,m}c_{n,m}\phi_n(x)\phi_m(x)}_{\text{דו ממדי}}$$

הדבר המאפין אופרטור הרמוני זה גודל האנרגיה ω_1 ואורך a_1 : $\left\{a_1=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_1}}\quad ;;;;\quad \hbar\omega_1\right\}$

מרחב Hilbert : $\ell_2(\mathbb{R})$ והבסיס שפורס את המרחב הדו ממדי הוא:

$$\underbrace{\left\{\phi_n\left(\frac{x}{a_1}\right)\phi_m\left(\frac{y}{a_2}\right), n\in\mathbb{N}, m\in\mathbb{N}\right\}}_{\text{בסיס של המחרב הדו ממדי במקרה זה}}$$

מכפלה טנזוריאלית של מרחבי Hilbert :

$$\boxed{\ell_2(\mathbb{R}^2)=\ell_2(\mathbb{R})\otimes\ell_2(\mathbb{R})}$$

ועבור וקטור, $\left|\phi\right\rangle\in\ell_2(\mathbb{R}^2)$ נקבל:

$$\boxed{\left|\phi\right\rangle=\sum_{n,m}c_{n,m}\left|\phi_n\right\rangle\otimes\left|\phi_m\right\rangle}$$

באופן כללי עבור שני מרחבי Hilbert : E ו-F נקבל מרחב שלישי בצורה הבאה.:

$$\left.\begin{array}{l}E_H:\{\left|e_m\right\rangle\}\\ F_H:\{\left|f_n\right\rangle\}\end{array}\right\}\Rightarrow \underbrace{G_H}_{\text{מרחב Hilbert חדש}}=E_H\otimes F_H$$

$$\forall\left|\psi\right\rangle\in G_H\ ,\ \left|\psi\right\rangle=\sum_{n,m}c_{n,m}\left|e_m\right\rangle\otimes\left|f_n\right\rangle$$

$$\ell_2(\mathbb{R}^3)=\ell_2(\mathbb{R})\otimes\ell_2(\mathbb{R})\otimes\ell_2(\mathbb{R})\underbrace{=}_{(x,y,z)\to(r,\theta,\varphi)}\ell_2(\mathbb{R}_+)\otimes\ell_2(\theta)\otimes\ell_2(\varphi)$$

לכל דרגת חופש, יש מרחב Hilbert $\Leftarrow$ $E=E_1\otimes E_2\otimes\ldots\otimes E_N$.

תכונות של מכפלה טנזוריאלית:

1. מימד של E_H הוא N_E, מימד של F_H הוא N_F אז המימד של $G_H = E_H \otimes F_H$ הוא $N_G = N_E \cdot N_F$
2. הגדרה: $\boxed{|u,v\rangle = |u\rangle|v\rangle \equiv |u\rangle \otimes |v\rangle}$
3. מכפלה סקלרית:

$$\begin{cases} |\psi\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle \\ |\chi\rangle = |u'\rangle \otimes |v'\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{gathered} \langle \chi|\psi\rangle = \langle u'|u\rangle \cdot \langle v'|v\rangle \\ \{\langle \psi|\chi\rangle = \langle \chi|\psi\rangle^*\} \end{gathered}}$$

4. אופרטורים:

מרחב המוגדר, $G_H = E_H \otimes F_H$ במרחב זה ניתן להגדיר את האופרטורים.

$$E_H \to \overbrace{\hat{A}_{E_H}}^{\text{אופרטור}}$$

$$F_H \to \hat{B}_{F_H}$$

$$\boxed{\Rightarrow \underbrace{\hat{C}_{G_H}}_{\substack{\text{אופרטור} \\ \text{של} \\ G_H}} = \hat{A}_{E_H} \otimes \hat{B}_{F_H}}$$

$$\boxed{\left(\hat{A}_{E_H} \otimes \hat{B}_{F_H}\right)\left(|u\rangle \otimes |v\rangle\right) = \left(\hat{A}_E|u\rangle\right) \otimes \left(\hat{B}_F|v\rangle\right)}$$

$$\boxed{\begin{gathered} \forall \hat{A}_E \to \hat{A}_E \otimes \mathrm{I}_F \\ \forall \hat{B}_F \to \mathrm{I}_F \otimes \hat{B}_F \end{gathered}}$$

(I -מטריצת היחידה)

דוגמא- מערכת של שני חלקיקים לאורך ציר x:

$$H_1 = \frac{\hat{p}_1}{2m_1} + \frac{1}{2} m_1 \omega_1 \hat{x}_1^2 \quad : \ell_2(\mathbb{R})$$

$$H_2 = \frac{\hat{p}_2}{2m_2} + \frac{1}{2} m_2 \omega_2 \hat{x}_2^2 \quad : \ell_2(\mathbb{R})$$

אלו שני חלקיק שני בורות שונים ושתי מסות שונות.

$$\boxed{H = H_1 \otimes \mathrm{I}_2 + \mathrm{I}_1 \otimes H_2 = \frac{\hat{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}\left(m_1 \omega_1 \hat{x}_1^2 + m_2 \omega_2 \hat{x}_2^2\right)}$$

$$\boxed{E_{n_1,n_2} = \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)}$$

כמה מילים בקשר למדידה במכניקה קוונטית:

1. ראינו(עמוד 57) שאם יש לנו מערכת קוונטית מבודדת,ההתפתחות בזמן היא דטרמיניסטית ונתונה על ידי משוואת שרדינגר: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$.
2. מדידה: $|\psi(t)\rangle \xrightarrow[\hat{A} \to a_\alpha]{\text{מדידה}} \hat{P}_\alpha |\psi(t)\rangle \equiv |\psi_\alpha\rangle$, עצם קיומה של המדידה זה שאנו משנים באופן בלתי הפיך את המצב $|\psi(t)\rangle$.
3. מערכת קוונטית זה למעשה "חלקיק"/אטום ונקרא למערכת זו 'S'. להגיד שאני מודד את האטום זה להגיד שיש בנוסף עליו מכשיר נוסף שגם היא בעצם מערכת קוונטית.(מכשיר מדידה= גלאי,'D')

נגדיר אם כן מערכת מבודדת חדשה: $\underbrace{D+Atom}_{E_D\otimes E_{atom}}$, למערכת מבודדת זו יש המילטוניאן.

סיכום:

S : $|\psi(t)\rangle$ ללא מדידה, התפתחות דטרמיניסטית בזמן לפי משוואת שרדינגר:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

מדידה, $|\psi(t)\rangle \leftarrow |\psi(t)\rangle \hat{P}_\alpha \equiv |\psi_\alpha\rangle$ של $\hat{A}$ (a_α) : $|\psi(t)\rangle=\sum_\alpha c_\alpha(t)|\psi_\alpha\rangle$.

מערכת מבודדת: "$S+D$" ההתפתחות דטרמיניסטית לפי H: $H=H_S+H_D+H_{Interaction}$ $\Leftarrow$ סתירה!

Jhon Van Newmann:

מערכת "S+D": מרחב Hilbert $\underbrace{S}_{\{|\alpha\rangle\}}\otimes D$.

$\underline{t=0}$:

גלאי במצב קוונטי: $|D_0\rangle$.

מדידה:
$$|\alpha\rangle\otimes|D_0\rangle\to|\alpha\rangle\otimes|D_\alpha\rangle$$
$$|\alpha'\rangle\otimes|D_0\rangle\to|\alpha'\rangle\otimes|D_{\alpha'}\rangle$$

דוגמא של גלאי – מדידת מיקום של אטום:

$$\left\{\underbrace{\left|\begin{smallmatrix}{\color{orange}\bigcirc}\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle}_{\text{אור דולק}},\underbrace{\left|\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle}_{\text{אור כבוי}}\right\}$$

אור דולק= עובר אטום בגלאי.

נדרוש: $\left\langle\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}{\color{orange}\bigcirc}\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle=0$ (כל פעם תיתן רק אופציה אחת)

$$\begin{cases}\underbrace{|\psi_1\rangle}_{\text{אטום}}\otimes\left|\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle\longrightarrow|\psi_1'\rangle\otimes\left|\begin{smallmatrix}{\color{orange}\bigcirc}\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle\\ |\psi_2\rangle\otimes\left|\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle\longrightarrow|\psi_2'\rangle\otimes\left|\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle\end{cases}$$

גישת הסופרפוזיציה תיתן לנו:

$$|\psi_1'\rangle\otimes\left|\begin{smallmatrix}\bigcirc\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle+|\psi_2'\rangle\otimes\left|\begin{smallmatrix}{\color{orange}\bigcirc}\\ \shortparallel\end{smallmatrix}\right\rangle$$

נדון בשתי גישות של מדידה:

נתאר גישה אחת של $S+D$ $(S\otimes D)$.

$\underline{t=0}$: $|\psi_s\rangle=\sum_\alpha c_\alpha|\alpha\rangle$

$$\left(\sum_\alpha c_\alpha|\alpha\rangle\right)\otimes|D_0\rangle\to\sum_\alpha c_\alpha|\alpha\rangle\otimes|D_\alpha\rangle$$

גישה שנייה: נעשה מדידה, כלומר נתייחס ל D כגלאי ולא כחלק מהמערכת.

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle \otimes |D_0\rangle \to \begin{cases} |\alpha\rangle \otimes |D_{\alpha}\rangle ,|C_{\alpha}|^2 \\ |\alpha'\rangle \otimes |D_{\alpha}'\rangle ,|C'_{\alpha}|^2 \\ \vdots \end{cases}$$

יחסי חילוף של גדלים פיסיקליים:

1. הוכחה כללית של עיקרון אי הודאות של Heisenberg .
2. הוכחה של מפשט Ehrenfest והגבול בים מכניקה קוונטית למכניקה קלאסית.
3. מושג של מערכת שלמה של אופרטור הרמטיים.

2 אופרטורים: $\hat{x}$ ו $\hat{p}_x$ $\left(\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)$, $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$, $[\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar$ ו $[\hat{z},\hat{p}_z] = i\hbar$.

תנע זוויתי באופן קלאסי: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$.

באופן קוונטי:

$\underbrace{\hat{\vec{L}}}_{\text{אופרטור קוונטי}} = \left(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right)$ - אופרטור קוונטי.

$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ (באופן דומה ניתן לקבל את $\hat{L}_x, \hat{L}_y$)

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z \Leftrightarrow \boxed{\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar \hat{\vec{L}} \ \ ,\ \hat{\vec{L}} = \left(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right)}$$

עקרון אי הודאות Heisenberg :

ניקח 2 גדלים פיסיקליים: $\hat{A},\hat{B}$ (הרמיטים).

$|\psi\rangle$ מצב קוונטי כלשהו שמתאר את המערכת.

$$\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$\langle b\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$$

$$(\Delta a)^2 \equiv \underbrace{\langle a^2\rangle}_{=\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle} - \underbrace{\langle a\rangle^2}_{=\left(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right)^2}$$

$$(\Delta b)^2 \equiv \langle b^2\rangle - \langle b\rangle^2$$

נגדיר את האופרטורים החדשים $\hat{A}', \hat{B}'$:

$$\hat{A}' \equiv \hat{A} - \langle a\rangle$$

$$\hat{B}' \equiv \hat{B} - \langle b\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (\Delta a)^2 = \langle\psi|\hat{A}'^2|\psi\rangle \\ (\Delta b)^2 = \langle\psi|\hat{B}'^2|\psi\rangle \end{cases}$$

נגדיר: $\lambda \in \mathbb{R}, |\psi\rangle \in E_H$.

$$\left\|\left(\hat{A}' + i\lambda\hat{B}'\right)|\psi\rangle\right\|^2 \ge 0$$

$$0 \le \left\| \left(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}' \right) |\psi\rangle \right\|^2 \underbrace{=}_{\substack{A,B \\ \text{הרמטיים}}} \langle \psi | \left(\hat{A}' - i\lambda \hat{B}' \right) \left(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}' \right) |\psi\rangle =$$

$$= \langle \psi | \hat{A}'^2 | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \hat{B}'^2 | \psi \rangle + i\lambda \langle \psi | \left[\hat{A}', \hat{B}' \right] | \psi \rangle = (\Delta a)^2 + \lambda^2 \left(\Delta b^2 \right) + i\lambda \langle \psi | \left[\hat{A}', \hat{B}' \right] | \psi \rangle$$

ניתן להתייחס כאל פולינום מסדר שני של λ :

$$-\left(\langle \psi | \left[\hat{A}', \hat{B}' \right] | \psi \rangle \right)^2 - 4 (\Delta a)^2 (\Delta b)^2 \le 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\boxed{(\Delta a)_\psi \cdot (\Delta b)_\psi \ge \frac{1}{2} \left| \langle \psi | \left[\hat{A}, \hat{B} \right] | \psi \rangle \right|}}_{\text{תמיד תלוי במצב בו אנו עובדים}}$$

$$\left\{ \left[\hat{A}', \hat{B}' \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\}$$

דוגמא:

$$\begin{cases} \hat{A} = \hat{x} \\ \hat{B} = \hat{p}_x \end{cases} \Rightarrow \left[\hat{x}, \hat{p}_x \right] = i\hbar$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \ge \frac{1}{2} \hbar}$$

משפט Ehrenfest :

נגדיר גודל פיסיקלי על ידי אופרטור $\hat{A}$.

נרצה לדעת מה ההתפתחות בזמן של הממוצע $\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.

$$\frac{d}{dt}(\langle a\rangle) = \left(\frac{d}{dt}(\langle\psi|)\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\frac{d}{dt}(\hat{A})\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right) \Rightarrow$$

$$\text{משוואת שרדינגר} \Leftrightarrow \begin{cases} \overbrace{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle}^{\text{bra משוואת שרדינגר של ה}} \\ \underbrace{-i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi| = \langle\psi|H}_{\text{ket משוואת שרדינגר של ה}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\boxed{\frac{d}{dt}(\langle a\rangle) = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{A},\hat{H}\right]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle}}_{\text{Ehrenfest נוסחת}}$$

באופן כללי $\hat{A}$ לא תלוי בזמן, לכן $\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = 0$.

$$\underbrace{\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}(\langle a\rangle) = \langle\psi|\left[\hat{A},\hat{H}\right]|\psi\rangle}}_{\text{Ehrenfest צורה יפה יותר של נוסחת}}$$

גודל פיסיקלי הוא קבוע בזמן בתנאי $\left[\hat{A},\hat{H}\right] = 0$ (A ו H מתחלפים), במקרה זה נקרא ל $\hat{A}$ קבוע של התנועה ומתקיים: $\boxed{\frac{d}{dt}(\langle a\rangle) = 0}$.

דוגמא- חלקיק קוונטי בפוטנציאל $V(r)$:

נגדיר שני אופרטורים:

$$\begin{cases} \hat{q}_i : \overbrace{\underbrace{\hat{x}}_{\hat{q}_1}, \underbrace{\hat{y}}_{\hat{q}_2}, \underbrace{\hat{z}}_{\hat{q}_3}}^{\text{מחלפים בתוכם}} \\ \hat{p}_i : \underbrace{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z}_{\text{מחלפים בתוכם}} \end{cases}$$

$$\left[\hat{q}_i,\hat{q}_j\right] = \left[\hat{p}_i,\hat{p}_j\right] = 0$$

$$\left[\hat{q}_j,\hat{p}_k\right] = i\hbar\delta_{jk}$$

בתרגיל כיתה ראינו את הקשרים הבאים:

$$\left[\hat{q}_j,\hat{p}_j^m\right] = m(i\hbar)\hat{p}_j^{m-1}$$

$$\left[\hat{p}_j,\hat{q}_j^n\right] = -n(i\hbar)\hat{q}_j^{n-1}$$

נגדיר את הפונקציה הבאה: $\hat{F} \equiv F(\hat{q}_i,\hat{p}_i)$

$$\begin{cases} \left[\hat{q}_i,\hat{F}\right]=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\hat{p}_j}\left(\hat{F}\right) \\ \left[\hat{p}_j,\hat{F}\right]=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\hat{q}_j}\left(\hat{F}\right) \end{cases}$$

ניקח את $\hat{F}\left(\hat{p}_i,\hat{q}_i\right)=\hat{H}$:

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right)+V\left(\vec{r}\right)$$

משפט Ehrenfest :

$$\boxed{\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\left\langle p_j\right\rangle\right)=-\left\langle\dfrac{\partial h}{\partial q_j}\right\rangle \\ \dfrac{d}{dt}\left(\left\langle q_j\right\rangle\right)=+\left\langle\dfrac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_j}\right\rangle \end{cases}}$$

נראה מה קורה בגבול הקלאסי, נראה את ההבדל בין משוואות המילטון יעקובי למשוואת Ehrenfest .

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}}{2m}+V\left(\hat{r}\right)$$

$$\Rightarrow\begin{cases} \overbrace{\dfrac{d}{dt}\left(\left\langle\vec{r}\right\rangle\right)=\dfrac{\left\langle\vec{p}\right\rangle}{m}}^{\text{זה בדיוק נוסחת המילטון יעקובי}} \\ \underbrace{\dfrac{d}{dt}\left\langle\vec{p}\right\rangle=-\left\langle\vec{\nabla}V\left(\vec{r}\right)\right\rangle}_{\substack{\text{זה כמאט משוואת המילטון יעקבי} \\ \text{משוואת המילטון יעקובי בצורתה הנכונה} \\ \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\left\langle\vec{p}\right\rangle=-\vec{\nabla}V\left(\vec{r}\right)\Big|_{\vec{r}=\left\langle\vec{r}\right\rangle}}_{\text{המילטון יעקובי הקלאסי}}}} \end{cases}$$

המקרה החד מימדי, נראה מהם התנאים לעבור מהמצב הקוונטי למצב הקלאסי:

$$\frac{d}{dt}\left\langle p\right\rangle=\underbrace{-\left\langle\frac{d\hat{V}}{d\hat{x}}\right\rangle}_{\text{קוונטי}}\neq\underbrace{-\frac{dV}{dx}\bigg|_{x=\left\langle x\right\rangle}}_{\text{קלאסי}}$$

נפתח לטור טיילור:

$$F\left(\hat{x}\right)\equiv-\frac{d\hat{V}}{d\hat{x}}$$

$$f\left(\hat{x}\right)=F\left(\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)+\left(\hat{x}-\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)f'\left(\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)+\frac{1}{2}\underbrace{\left(\hat{x}-\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)^2}_{\equiv\Delta x^2}f''\left(\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)+\ldots$$

$$\Rightarrow\left\langle f\left(\hat{x}\right)\right\rangle=f\left(\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)+\underbrace{\frac{1}{2}\left(\Delta x\right)^2\cdot f''\left(\left\langle\hat{x}\right\rangle\right)}_{\substack{\text{זה בעצם ההבדל בין המצב הקלאסי} \\ \text{לבין המצב בקוונטי}}}+\ldots$$

גבול קלאסי יתקבל כאשר:

$$\underbrace{\left|\Delta x^2\cdot\frac{f''\left(\left\langle x\right\rangle\right)}{f\left(\left\langle x\right\rangle\right)}\right|\ll1\Leftrightarrow\left|\Delta x^2\frac{d^3V}{dx^3}\right|\ll\left|\frac{dV}{dx}\right|}_{\text{תנאי למצב קלאסי}}$$

התנאי לקבל את הגבול הקלאסי תלוי בשני דברים , קודם כל במצב (האם הוא צר או רחב, Δx^2) וזה גם תלוי בפוטנציאל (נגזרות על V).

מושג של מערכת שלמה של אופרטורים הרמיטים:

מערכת שלמה/מינימאלית היא מערכת של אופרטורים המתחלפים שבסדרת מדידות ניתן להגיע למצב טהור.
לכל מערכת קוונטית ניתן להגדיר מערכת שלמה כזו.

דוגמא-אוסילטור הרמוני חד ממדי:

אנו רוצים לראות האם עבור מערכת נתונה ניתן להגדיר מצב טהור (מצב לא מנוון המכיל רק אמפליטודה אחת המתארת את המצב)

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

$$\left(\phi_n\left(x\right),\varepsilon_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)$$

$$P_n\left|\psi\right\rangle=\alpha\left|\phi_n\right\rangle$$

במקרה של אוסילטור הרמוני חד ממדי, מדידה של האנרגיה בלבד נותנת לנו מצב טהור.

אוסילטור הרמוני דו ממדי:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2\equiv\hat{H}_x+\hat{H}_y$$

$$\left\{\phi_n\left(x\right)\phi_m\left(y\right),\left(n,m\right)\in\mathbb{N}\right\}$$

$$E\left(n,m\right)=\hbar\omega\left(n+m+1\right)$$

פרט למצב היסוד אנו לא מקבלים מצב טהור וזאת משום שישנן קומבינציות שונות של n, m שנותנות לנו את אותה האנרגיה.

למשל, $E=\hbar\omega\left(3\right)$, כלומר $n+m+1=3$ וישנן מספר אופציות כאלו.

דוגמא:

המקרה של $2\hbar\omega$, תת המרחב שמתאר הוא דו ממדי.

$$\underbrace{\left\{\phi_1\left(x\right)\phi_2\left(y\right),\phi_2\left(x\right)\phi_1\left(y\right)\right\}}_{\text{אלו שני ווקטורים שמגדירים את תת המרחב}}$$

$$\underbrace{\left\{\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{נרמול}}\left(\phi_1\left(x\right)\phi_2\left(y\right)+\phi_2\left(x\right)\phi_1\left(y\right)\right),\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{נרמול}}\left(\phi_1\left(x\right)\phi_2\left(y\right)-\phi_2\left(x\right)\phi_1\left(y\right)\right)\right\}}_{\text{בסיס אחר שגם כן מתאר את תת המרחב}}$$

מצב טהור זה דבר שקול לזה שיש בסיס אחד לכל האופרטורים המתחלפים.

משפט ראשון:

לשני אופרטורים הרמיטים $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ שמתחלפים יש בסיס של E_H מוגדר על ידי וקטורים עצמיים של $\hat{A}$ ו $\hat{B}$.

הוכחה:

עבור אופרטור $\hat{A}$, $\left\{a_\alpha,\left|\alpha,r\right\rangle\right\}$, מערכת עצמית של $\hat{A}$: $\hat{A}\left|\alpha,r\right\rangle=a_\alpha\left|\alpha,r\right\rangle$.

נניח ש: $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$.

$$\hat{B}\hat{A}\left|\alpha,r\right\rangle=\hat{A}\hat{B}\left|\alpha,r\right\rangle=\hat{B}a_\alpha\left|\alpha,r\right\rangle\Leftrightarrow\hat{A}\left(\hat{B}\left|\alpha,r\right\rangle\right)=a_\alpha\left(\hat{B}\left|\alpha,r\right\rangle\right)$$

לכן, $\hat{B}|\alpha,r\rangle$ הוא וקטור עצמי של $\hat{A}$.

ישנן שתי אפשריות:

1. a_α הוא ע"ע לא מנוון:

$$\Rightarrow \hat{B}|\alpha,r\rangle = (const)\cdot|\alpha,r\rangle$$

לכן ל $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ יש בסיס עצמי משותף $\{|\alpha,r\rangle\}$.

2. a_α הוא ע"ע מנוון:

הוקטור $\hat{B}|\alpha,r\rangle$ הוא ניצב לכל וקטור $|\beta,S\rangle$ עצמי של $\hat{A}$ עבור $(a_\beta \neq a_\alpha)$

$$\Rightarrow \langle\beta,S|\hat{B}|\alpha,r\rangle = \delta_{\alpha\beta}B_{sr}^{(\alpha)}$$

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} \boxed{a_0} & & & & & (0) \\ & \boxed{a_1} & & & & \\ & & \cdots & & & \\ & & & \underbrace{\boxed{a_\alpha}}_{\substack{\text{בתוך הבלוק} \\ \text{יש לנו שני} \\ \text{וקטורים} \\ |\alpha_1\rangle,|\alpha_2\rangle \\ (*)}} & & \\ & & & & \cdots & \\ (0) & & & & & \boxed{///} \end{pmatrix}$$

מטריצה $\hat{B}$ היא אלכסונית ב"בלוקים".

$$(*)\begin{cases} \hat{A}|\alpha_1\rangle = a_\alpha|\alpha_1\rangle \\ \hat{A}|\alpha_2\rangle = a_\alpha|\alpha_2\rangle \end{cases}$$

$$\langle\alpha_1|B|\alpha_2\rangle \neq 0, \langle\alpha_2|B|\alpha_1\rangle \neq 0, \langle\alpha_{1,2}|B|\alpha_{1,2}\rangle \neq 0$$

$$\begin{pmatrix} \times & \times \\ \times & \times \end{pmatrix}$$

קיים בסיס $\{|\alpha,\beta,r\rangle\}$ עצמי של $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$.

$$\begin{cases} \hat{A}|\alpha,\beta,r\rangle = a_\alpha|\alpha,\beta,r\rangle \\ \hat{B}|\alpha,\beta,r\rangle = b_\beta|\alpha,\beta,r\rangle \end{cases} \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = 0$$

נרצה להראות שהיתן בסיס משותף ל $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$ נקבל מכך ש $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$ אופרטורים מתחלפים.

משפט שני:

נתון- מרחב $Hilbert \;\; E_H$, מצב קוונטי $|\psi\rangle$ כלשהו.

מערכת שלמה $\left\{\hat{A},\hat{B},...,\hat{X}\right\}$ של אופרטורים הרמיטים מתחלפים.

נגדיר מצב:

$$|\psi_0\rangle = \underbrace{c}_{\text{קבוע נירמול}} \; \underbrace{\hat{P}_{\xi...} \; \underbrace{\hat{P}_{\beta} \; \underbrace{\hat{P}_{\underset{\hat{A}}{\alpha}} |\psi\rangle}_{\text{המצב אחרי המדידה במצב } \hat{A}}}_{\text{המצב אחרי המדידה במצב } \hat{B}}}_{\text{המצב אחרי המדידה במצב } \hat{X}}$$

נרצה להוכיח שאם $\left\{\hat{A},\hat{B},...,\hat{X}\right\}$ מערכת שלמה אזי המצב $|\psi_0\rangle$הוא יחיד וכמו כן להראות שהוא מצב עצמי של כל האופרטורים.

1. המצב $|\psi_0\rangle$הוא מצב עצמי של $\left\{\hat{A},\hat{B},...,\hat{X}\right\}$.
2. המצב $|\psi_0\rangle$ הוא מוגדר היטב (כלומר הוא לא מנוון, הוא לא סופר פוזיציה של הוקטורים האחרים).

הוכחה:

אנו יודעים ש $\hat{A}$ מתחלף עם כל האופרטורים: $\left\{\hat{B},...,\hat{X}\right\}$ ועל כן גם $\hat{P}_{\alpha}$.

$$\left[\hat{P}_{\alpha},\hat{P}_{\beta}\right] = ... = \left[\hat{P}_{\alpha},\hat{P}_{\xi}\right] = 0$$

זה נובע מכך שכל אופרטור ניתן לכתוב כסופר פוזיציה של הפרוזקטורים שלו : $\hat{A} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}\hat{P}_{\alpha}$.

$$\hat{A}|\psi_0\rangle = c\cdot\hat{A}\left(\hat{P}_{\xi}...\hat{P}_{\beta}\hat{P}_{\alpha}^2\right)|\psi\rangle = c\cdot\hat{A}\cdot\hat{P}_{\alpha}\left(\hat{P}_{\xi}...\hat{P}_{\beta}\hat{P}_{\alpha}\right)|\psi\rangle = c\cdot a_{a}\cdot\hat{P}_{\alpha}\left(\hat{P}_{\xi}...\hat{P}_{\beta}\hat{P}_{\alpha}\right)|\psi\rangle$$

$$= a_{\alpha}\cdot c\left(\hat{P}_{\xi}...\hat{P}_{\beta}\hat{P}_{\alpha}\right) = a_{\alpha}|\psi_0\rangle$$

$$\left\{\;\hat{P}_{\alpha} \equiv \hat{P}_{\alpha}^2\right\}$$

קיבלנו ש $|\psi_0\rangle$ מצב עצמי של כל אופרטורים (הוכחנו את 1).

הערות:

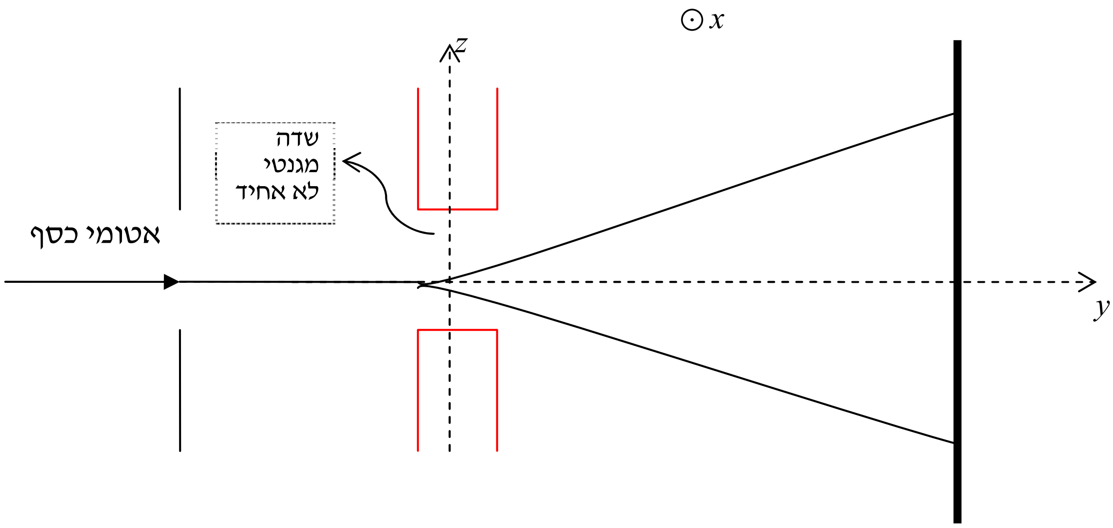
- כאשר אנחנו מודדים בסדר הזה ,כלומר, קודם כל את α . אין חשיבות לסדר המדידה.
- אם ההמילטוניאן הוא חלק מהמערכת השלמה אז ניתן לומר ש $|\psi_0\rangle$ הוא מצב קבוע בזמן.
  כלומר אם בזמן $t=0$ מקבלים $|\psi_0\rangle$ אז $|\psi_0\rangle$ קבוע בכל זמן אחר.

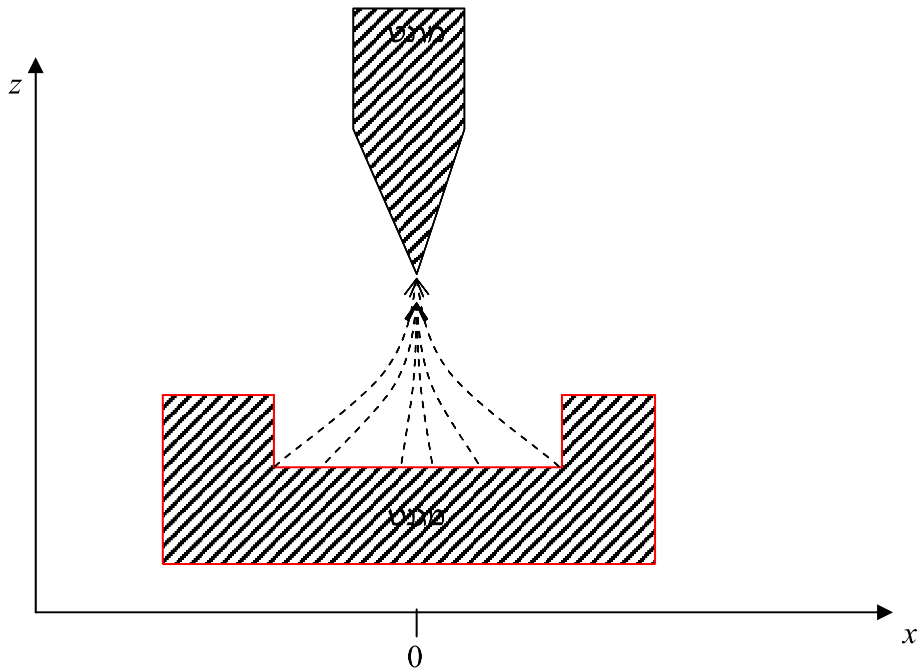
ספין חצי – ניסוי Stern-Gerlach :

ספין חצי זו מערכת במרחב הילברט שלה שני ממדים (2 רמות אנרגיה).

ניסוי Stern-Gerlach :

אלומת אטומי כסף בשדה מגנטי לא אחיד.



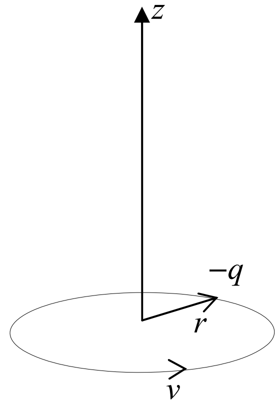


1. אטומים ניטרליים לכן אין כוח לורנץ.
2. שינוי הכיוון, מדוע? באופן קלאסי יודע לנו כי באטומים יש אלקט' המסתובבים במסלול סגור סביב האטום.
   מטען שמצבע מסלול סגור$\Leftarrow$זרם במסלול הסגור $\Leftarrow$ מייצר מומנט מגנטי. המומנט המגנטי מושפע מהשדה המגנטי החיצוני המשתנה בזמן.

תאור קלאסי: מומנט מגנטי $\vec{\mu}$ של אטום ניוטרלי.

מקור של $\vec{\mu}$:

דוגמא: חלקיק בעל מסה m ומטען $-q$, חלקיק זה נע בתנועה מעגלית במסלול בעל רדיוס r, ובמהירות v.



זרם I :

$$I=\frac{-q}{2\pi r}\cdot v$$ = "צפיפות מטען כפול מהירות"

מומנט מגנטי $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu}=I\cdot \underbrace{\vec{S}}_{\text{וקטור שטח}}$$

ווקטור השטח מוגדר על ידי :

$$\vec{S}=\pi r^2\hat{z}$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{\mu}=\frac{-q}{2\cancel{\pi}\cancel{r}}\cdot v\cdot\cancel{\pi}r^{\cancel{2}}\hat{z}=-\frac{q}{2}\cdot v\cdot r\,\hat{z}}$$

תנע זוויתי $\vec{L}$:

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}=m\cdot r\cdot v\,\hat{z}$$

המומנט המגנטי מוגדר בעזרת תנע זוויתי:

$$\Rightarrow \boxed{\vec{\mu}=\underbrace{-\frac{q}{2m}}_{\substack{\gamma_0\\ \text{יחס}\\ \text{גירומגנטי}}}\vec{L}}$$

$\vec{\mu}$ בשדה מגנטי $\vec{B}$ האנרגיה היא:

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

מומנט מכני:

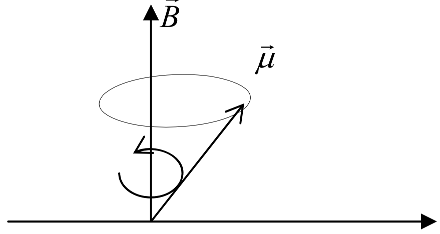
$$\vec{\Gamma}=\vec{\mu}\times\vec{B}$$

חוק ניטון נותן לנו את הקשר הבא:

$$\frac{d\vec{L}}{dt}=\vec{\Gamma}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\vec{\mu}}{dt}=\gamma_0\cdot\vec{\mu}\times\vec{B}}$$

זה מתאר:



תדירות ω_0 (Larmor) , $\omega_0=\gamma_0 B$.

סיכום התיאור הקלאסי:

מומנט מגנטי $\vec{\mu}$ של אטום ניטרלי:

$$\boxed{\begin{cases} \vec{\mu} = -\dfrac{q}{2m}\vec{L} \\ \gamma_0 \equiv -\dfrac{q}{2m} \end{cases}}$$

(γ_0 - פקטור גירומגנטי)

אנרגיה מגנטית:

$$\boxed{W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}}$$

פרסציה:

$$\boxed{\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma_0\vec{\mu}\times\vec{B}}$$

תדירות Larmor :

$$\boxed{\omega_0 = \gamma_0\left|\vec{B}\right|}$$

נניח ש:

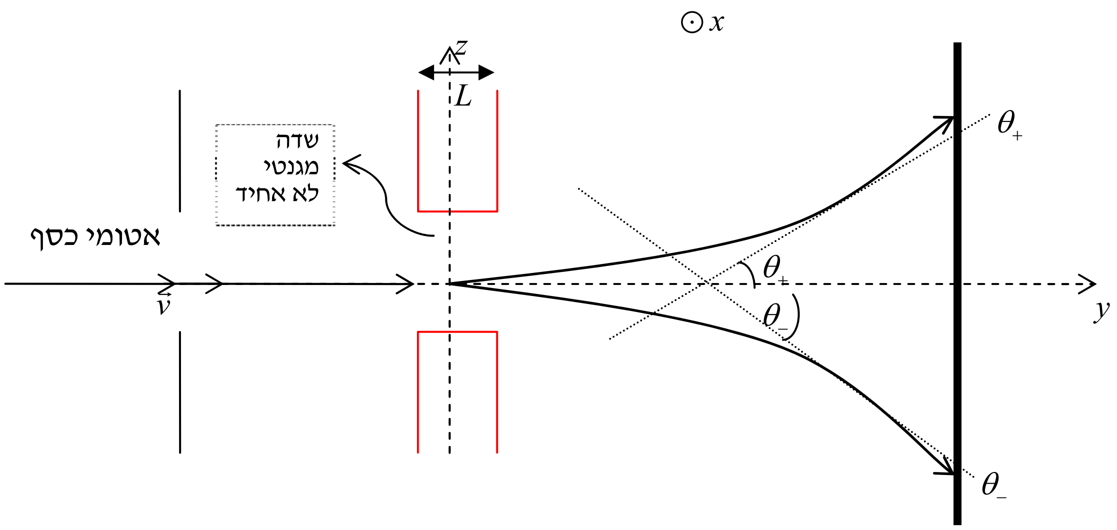
- מסלול האטומים נמצא במישור $x=0$.
- $\vec{B} = B_z\hat{z}$ (לשדה המגנטי רכיב בציר z בלבד).
- $\dfrac{\partial B_z}{\partial y} = \dfrac{\partial B_z}{\partial x} \equiv 0$.

כוח:

$$\vec{F} = \vec{\nabla}\left(\vec{\mu}\cdot\vec{B}\right) \Rightarrow \boxed{\vec{F}_z = \mu_z\left(t\right)\frac{\partial B_z}{\partial z}}$$

(נניח ש: $\mu_z\left(t\right) \simeq \mu_z\left(0\right)$)

אנו מצפים לראות מסלולים או קלפי מעלה או קלפי מעטה.

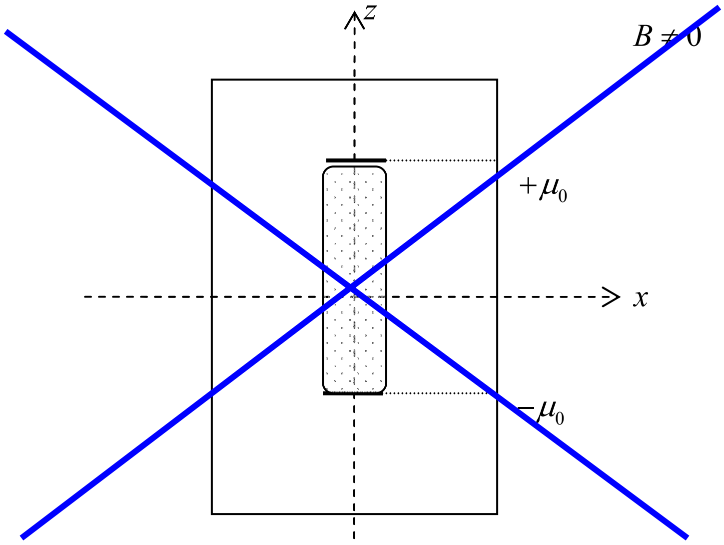


$$\Delta\theta \equiv \theta_+ - \theta_- \cong \frac{\Delta P_z}{\underbrace{P}_{\text{תנע כולל}}} = \frac{\int F_z dt}{P}$$

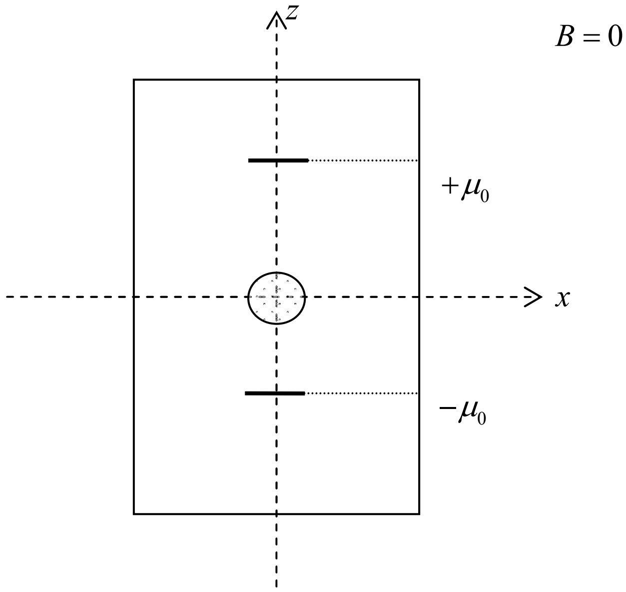
$$\int F_z dt \cong \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}\frac{L}{v} \Rightarrow \boxed{\Delta\theta \cong \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}\frac{L}{mv^2}}$$

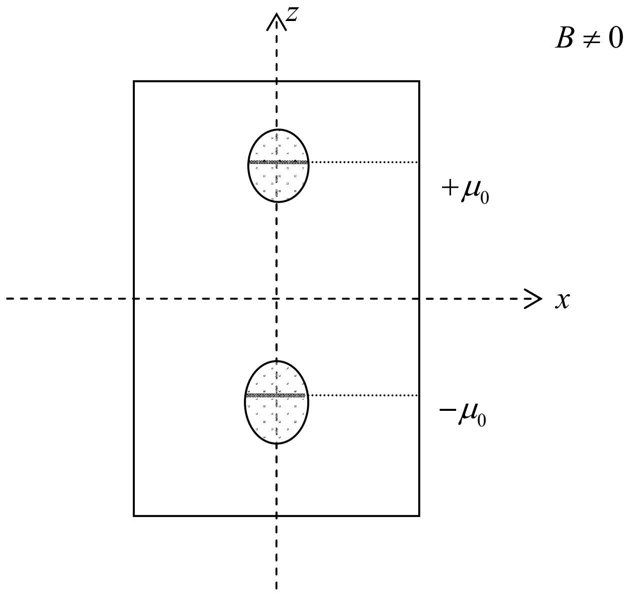
תוצאות הניסוי :

היינו מצפים במקרה הקלאסי לקבל רצף של אטומים :



התוצאות שקיבלו בפועל שונה ונראה :





$$\mu_0 = 9.27 \cdot 10^{-24} \left[J \cdot T^{-1} \right] \quad (*)$$

$$\underbrace{\underbrace{\mu_0 \overset{?}{=} \frac{q}{2m}\hbar}_{\text{על פי בוהר}} = (*)}_{\text{על פי תוצאות הניסוי}}$$

$\left|\vec{L}\right| = \hbar$, $q = -e$,m –מסה של אלקטרון.

תאור קוונטי של ניסוי *Stern-Gerlach* :

1. בונים מרחב Hilbert המתאים לבעיה: $E_H = \ell_2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \underbrace{E_{\text{int.}}}_{\text{מרחב פנימי דרגות החופש של המומנט המגנטי}}$.

$$\underbrace{\{\dim E_{\text{int}} \geq 2\}}_{\substack{\text{על פי תוצאות הניסוי} \\ (\text{Otto Stern})}}$$

נניח ש: $\dim E_{\text{int}} = 2$.

בסיס: $\left(\left|+\right\rangle_z, \left|-\right\rangle_z\right)$.

מדידה של מומנט מגנטי: $\hat{\mu}_z$.

$$\begin{cases} \hat{\mu}_z \left|+\right\rangle_z = \mu_0 \left|+\right\rangle_z \\ \hat{\mu}_z \left|-\right\rangle_z = -\mu_0 \left|-\right\rangle_z \end{cases}$$

$$\left|\mu\right\rangle = \alpha\left|+\right\rangle_z + \beta\left|-\right\rangle_z$$

$$\underbrace{|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1}_{\text{נירמול}}$$

הצגה מטריציאלית:

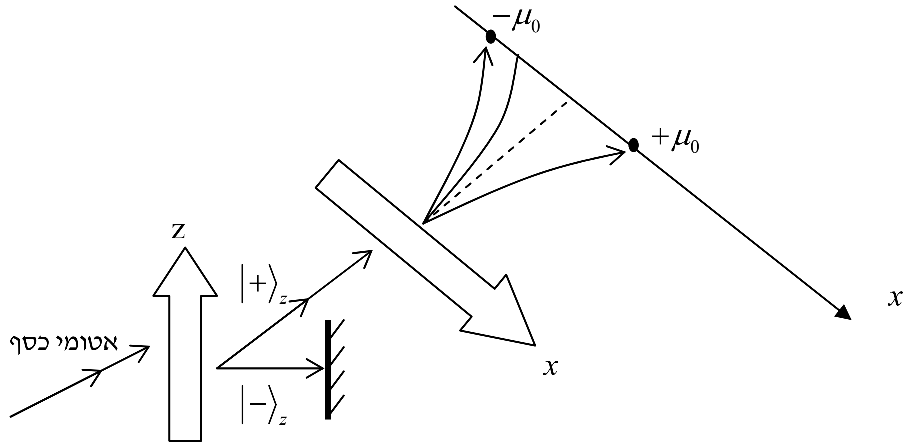
$$\left|+\right\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \ , \left|-\right\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(כל מה שעשינו מייחוס לציר z , אם נעשה את המדידות לאורך ציר x או y היינו מצפים לכך שנקבל אותו דבר. כל הפיזיקה המדוברת כאן איננה תלויה בציר z)

מומנט מגנטי לאורך ציר x וציר y : $\hat{\mu}_x,\hat{\mu}_y$

שני מגנטים של S-G בטור .



מהלך הניסוי: מגנט אחד בציר z – רואים שני כתמים לאורך ציר z. נחסום אחת מהאלומות.
שמים מגנט נוסף לאורך ציר x ומודדים מומנט מגנטי לאורך ציר x . מקבלים תוצאה זהה לתוצאה בניסוי הקודם.
אם היינו חוסמים את האלומה העליונה ולא את התחתונה היינו מקבלים אותו הדבר.

<u>$\hat{\mu}_x$?</u>

$\left(|+\rangle_x,|-\rangle_x\right)$ וקטורים עצמיים של $\hat{\mu}_x$.

$\hat{\mu}_x$ בבסיס $\left(|+\rangle_x,|-\rangle_x\right)$?

$$\hat{\mu}_x=\mu_0\begin{pmatrix}\alpha_x & \beta_x\\ \gamma_x & \delta_x\end{pmatrix}$$

דרישות:

1. $\hat{\mu}_x$ הוא מטריצה הרמיטית:
$$\gamma_x{}^*=\beta_x\ ,\ \left(\alpha_x,\delta_x\right)\in\mathbb{R}^2$$
2. מדידה של $\hat{\mu}_x$: $\pm\mu_0$. על כן $\mathrm{Tr}\left(\hat{\mu}_x\right)=0$ ועל כן $\alpha_x+\delta_x=0$.
3. $\mathrm{Det}\left(\hat{\mu}_\mathrm{x}\right)=-1\Rightarrow\alpha_x\delta_x-\gamma_x\beta_x=-1$
4. ${}_z\langle+|\hat{\mu}_x|+\rangle_z=0=\mu_0\alpha_x$

מתוך דרישות אלו נקבל:

$$\Rightarrow\begin{cases}\alpha_x=-\delta_x=0\\ \gamma_x\beta_x=1\\ \gamma_x=\beta_x{}^*\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\left|\beta_x\right|^2=1\\ \left|\gamma_x\right|^2=1\end{cases}$$

$$\begin{cases}\beta_x=e^{-i\phi_x}\\ \gamma_x=e^{+i\phi_x}\end{cases}$$

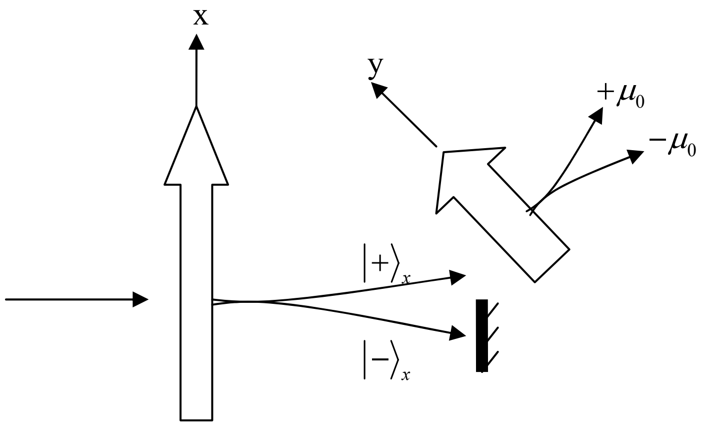
$$\hat{\mu}_x=\mu_0\begin{pmatrix}0 & e^{-i\phi_x}\\ e^{i\phi_x} & 0\end{pmatrix}$$

עבור y נקבל:

$$\hat{\mu}_y=\mu_0\begin{pmatrix}0 & e^{-i\phi_y}\\ e^{i\phi_y} & 0\end{pmatrix}$$

$$\left|+\right\rangle_x = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{נרמול}}\left(\left|+\right\rangle_z + e^{i\phi_x}\left|-\right\rangle_z\right)$$

נבצע את הניסוי הבא:



$$_x\left\langle +\right|\hat{\mu}_y\left|+\right\rangle_x = 0 = \mu_0\cos\left(\phi_x - \phi_y\right)$$

$$\Rightarrow \phi_x - \phi_y = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \underbrace{\boxed{\phi_x = 0\ ,\ \phi_y = -\frac{\pi}{2}}}_{\text{בחירה שרירותית המקיימת את התנאי}}$$

$$\boxed{\hat{\mu}_x = \mu_0\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mu}_y = \mu_0\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mu}_z = \mu_0\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}}$$

בבסיס $\left\{\left|+\right\rangle_z, \left|-\right\rangle_z\right\}$.

מטריצות Pauli :

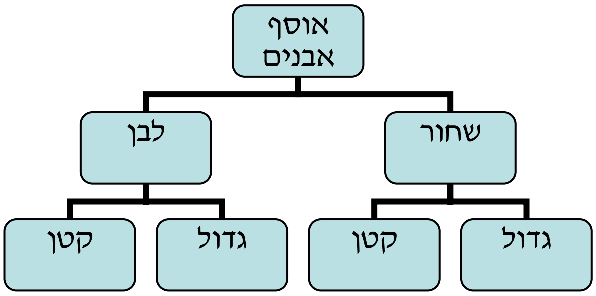
$$\boxed{\hat{\mu}_x = \mu_0\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mu}_y = \mu_0\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mu}_z = \mu_0\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}}$$

$$\boxed{\mathrm{I} = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}}$$

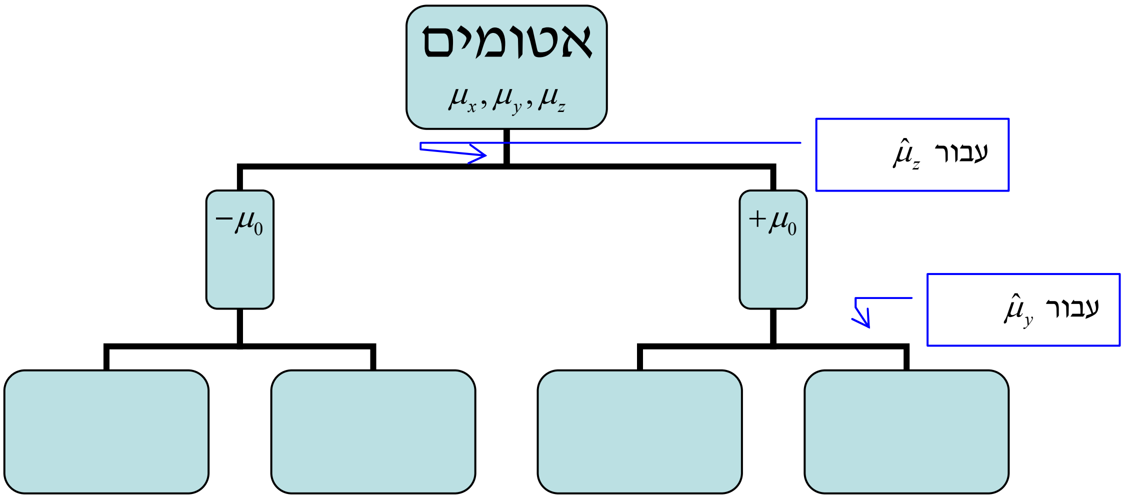
$$\Rightarrow \begin{cases}\left|\pm\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\right\rangle_z \pm \left|-\right\rangle_z\right)\\ \left|\pm\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\right\rangle_z \pm i\left|-\right\rangle_z\right)\end{cases}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y\right] &= 2i\mu_0\hat{\mu}_z\\ \left[\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y\right] &= 2i\mu_0\hat{\mu}_x\\ \left[\hat{\mu}_z, \hat{\mu}_x\right] &= 2i\mu_0\hat{\mu}_y\end{aligned}}$$

לוגיקה קלאסית:



לוגיקה קוונטית:

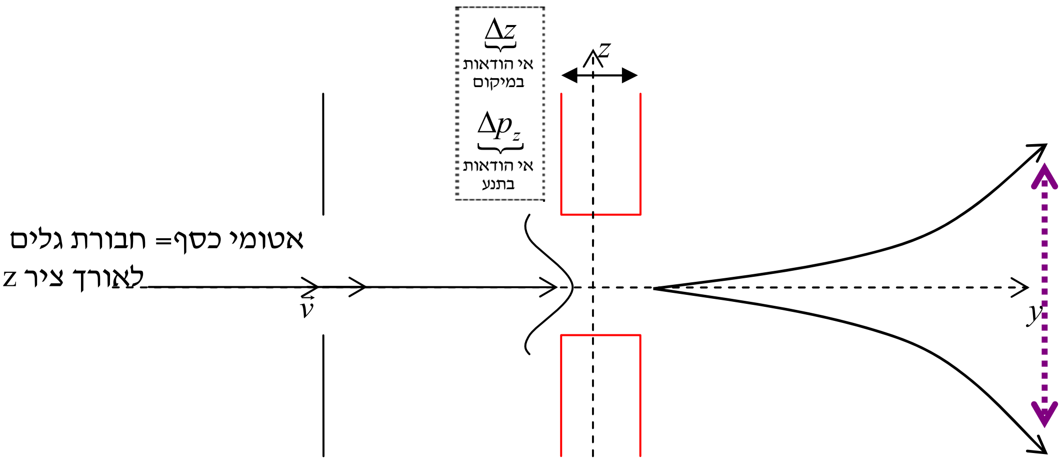


כאן, כאשר אנו מודדים בכיוון מסוים , כבר אין אנו יכולים לומר כלום על המדידה בציר אחר. האופרטורים לא מתחלפים ולכן לא ניתן לבצע את המדידות במקביל.

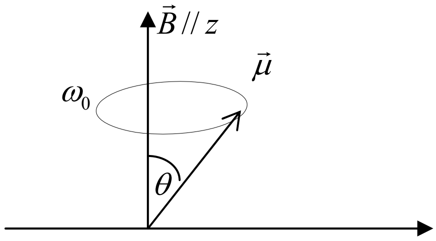
בניסוי האחרון מדדנו $\left|+\right\rangle_x$ בכיוון ציר y וקיבלנו $-\mu_{0y}, +\mu_{0y}$, אולם כעת שינינו את $\left|+\right\rangle_x$ (המצב שיצאנו ממנו).

עקרון אי הודאות וניסוי *Stern-Gerlach* :

(כאשר שני אופרטורים לא מתחלפים הם מקיימים את יחסי אי הודאות של אייזנברג)



T – זמן מעבר של האטומים במגנט.



- על מנת לתאר את תוצאות ניסוי שטרן גרלך חייבים להניח שיש דרגות חופש פנימיות במערכת.
- מדידה של $\pm\mu_0 = \hat{\mu}_z$:

צריך שמרחק  יהיה גדול בהרבה מאי הודאות בתנע.
במילים אחרות: שינוי בתנע $\Delta p_z \ll p_z$.

$$\int F dt = \mu_0 \frac{\partial B}{\partial z} T \gg \Delta p_z$$

- נניח ש $\hat{\mu}_x$ ו $\hat{\mu}_y$ נתונים למדידה.

$$\theta = T\omega_0$$

$$\underbrace{\Delta\omega_0 = \gamma_0 \frac{\partial B}{\partial z}\Delta z}_{\text{קוונטי}}$$

$$\left(\underbrace{\omega_0 = \gamma_0 B}_{\text{בקלאסי}}\right)$$

$$\Delta\theta = T\Delta\omega_0$$

$$\Delta\theta \ll 2\pi$$

(אם לא אי הודאות בזוית כל כך גדולה שלא ניתן להפריד בין $\hat{\mu}_x$ ו $\hat{\mu}_y$ ולא ניתן למדוד אותם בו זמנית)

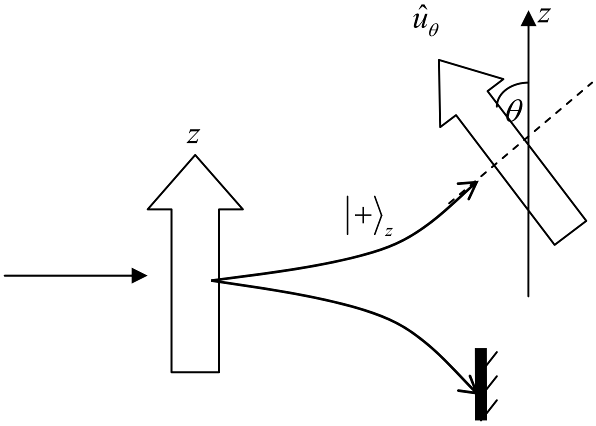
$$\left(\gamma_0 = \frac{\mu_0}{\hbar}\right)$$

$$\begin{cases} T\gamma_0 \frac{\partial B}{\partial z}\Delta z \ll 2\pi \\ \mu_0 \frac{\partial B}{\partial z} T \gg \Delta p_z \end{cases}$$

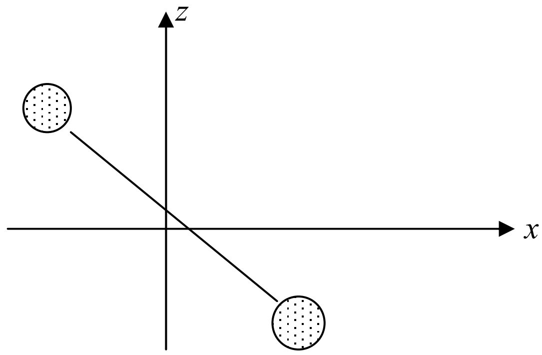
$$\begin{cases} T\mu_0 \frac{\partial B}{\partial z}\frac{\Delta z}{\hbar} \ll 2\pi \\ T\mu_0 \frac{\partial B}{\partial z} \gg \Delta p_z \end{cases} \Rightarrow \Delta p_z \ll \frac{2\pi\hbar}{\Delta z} \Rightarrow \underbrace{\boxed{\Delta p_z \Delta z \ll 2\pi\hbar}}_{\substack{\text{וזה מצב שלא יתכן זה צריך} \\ \text{להיות יותר גדול} \\ \text{כלומר לא ניתן למדוד בו זמנית} \\ \text{שני מצבים} \\ \hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y}}$$

$\hat{\mu}_x$ ו $\hat{\mu}_y$ מתחלפים.

מדידה לאורך ציר כלשהו:



$$\hat{u}_\theta = \hat{u}_x \sin\theta + \hat{u}_y \cos\theta$$



$$\mu_\theta = \mu_x \sin\theta + \mu_z \cos\theta$$

$$\hat{\mu}_\theta = \hat{\mu}_z \sin\theta + \hat{\mu}_z \cos\theta = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & +\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} |+\rangle_\theta = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle_z \\ |-\rangle_\theta = -\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle_z + \cos\frac{\theta}{2}|-\rangle_z \end{cases}$$

$$\begin{cases} p_+ = \left|{}_\theta\langle + | + \rangle_z\right|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2} \\ p_- = \left|{}_\theta\langle - | + \rangle_z\right|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2} \end{cases}$$

תאור שלם של האטומים:

מרחב הילברט הכולל מוגדר על ידי: $E_H = \ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)\otimes E_{\text{int}}$.

$$\forall|\psi\rangle\in E_H\ ,\ |\psi\rangle=|\psi_+\rangle\otimes|+\rangle+|\psi_-\rangle\otimes|-\rangle$$

$$\left\{|\psi_+\rangle,|\psi_-\rangle\right\}\in\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$$

$$\left\{|+\rangle,|-\rangle\right\}\in E_{\text{int}}$$

אופרטורים $\hat{A}_{ext}$ מוגדרים ב- $\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$.

אופרטורים $\hat{\mu}_x,\hat{\mu}_y$ מוגדרים ב- E_{int} לכן אופרטורים $\hat{A}_{ext}$ ו $\hat{\mu}_i$ מתחלפים ←

$$\left(\hat{A}_{ext}\otimes\hat{\mu}_i\right)\left(|\psi_\varepsilon\rangle\otimes|\varepsilon\rangle\right)_{\varepsilon=\pm}=\left(\hat{A}_{ext}|\psi_\varepsilon\rangle\right)\otimes\left(\hat{\mu}_i|\varepsilon\rangle\right)$$

הצגה מעורבת:

$$|\psi(t)\rangle\in E_H\ \ ,\ \psi_\pm(r,t)=\langle r|\psi_\pm\rangle$$

$$\underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{ב-EXT}}=\underbrace{\psi_+(r,t)}_{\text{פונקצית גל}}|+\rangle+\underbrace{\psi_-(r,t)}_{\text{פונקצית גל}}|-\rangle$$

ניקח שני מצבים בהצגה מעורבת ונגדיר מכפלה שלהם:

$$\forall\left(|\psi\rangle,|\chi\rangle\right)\ ,\langle\psi(t)|\chi(t)\rangle=\int\left(\psi_+{}^*\chi_++\psi_-{}^*\chi_-\right)d^3r$$

$\left|\psi_\pm(r,t)\right|^2 d^3r$: ההסתברות למצוא את החלקיק בנפח הנתון בעל מומנט מגנטי: $\pm\mu_0$.

חייבת להתקיים דרישת הנרמול: $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=\int\left(\left|\psi_+(r,t)\right|^2+\left|\psi_-(r,t)\right|^2\right)d^3r=1$

פונקציית גל בעלת שני רכיבים:

$$\boxed{\left|\left|\psi(t)\right\rangle\right\rangle=\begin{pmatrix}\psi_+(r,t)\\ \psi_-(r,t)\end{pmatrix}\ ;;\ \left\langle\left\langle\psi(t)\right|\right|=\left(\psi_+{}^*(r,t),\psi_-{}^*(r,t)\right)}$$

אופרטורים מוגדרים במרחב $\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$, כיצד כותבים בשני רכיבים?

לדוגמא – אנרגיה קינטית $\frac{\hat{p}^2}{2m}$:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}=\begin{pmatrix}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 & 0\\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\end{pmatrix}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\otimes I_{E_{\text{int}}}$$

התפתחות בזמן של מצבים אטומים בשדה מגנטי:

ממשוואת שרדינגר אנו מקבלים שלחלקיק יש אנרגיה קינטית ואנרגיה פוטנציאלית שנובעת מראיקציה של מומנט מגנטי של החלקיק עם השדה החשמלי.

אנרגיה פוטנציאלית:

$$W=-\underbrace{\hat{\vec{\mu}}}_{\substack{\text{אופרטור}\\ \text{המוגדר ב}\\ \text{E}_{\text{int}}}}\vec{B}\left(\underbrace{\hat{\vec{r}}}_{\substack{\text{אופרטור ב}\\ \ell_2}}\right)=-\hat{\mu}_xB_x-\mu_yB_y-\mu_zB_z$$

ההדרה המדויקת של המרחבים: $\left(-\mu\otimes I_{E_{\text{int}}}\right)\cdot\left(B\otimes I_{E_{\text{int}}}\right)$

W – היא מטריצה (לא בהכרח אלכסונית).

$$\hat{H}=\hat{H}_{ext}\otimes I_{\text{int}}+\hat{W}$$

$$\hat{H}_{\exp} = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_+(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi_+(r,t) + \left\langle + \right|\hat{W}\left| + \right\rangle\psi_+(r,t) + \left\langle + \right|\hat{W}\left| - \right\rangle\psi_-(r,t) \qquad (1)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_-(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi_-(r,t) + \left\langle - \right|\hat{W}\left| + \right\rangle\psi_+(r,t) + \left\langle - \right|\hat{W}\left| - \right\rangle\psi_-(r,t) \qquad (2)$$

$(1)+(2) \Leftarrow$ מקבלים שתי משוות מצומצמות:

$$\boxed{\underbrace{\hat{W}}_{\substack{\text{בהצגה} \\ \psi_+,\psi_- \\ \text{מבסיס} \\ +,-}} = \begin{pmatrix} \left\langle + \right|W\left| + \right\rangle & \left\langle + \right|W\left| - \right\rangle \\ \left\langle - \right|W\left| + \right\rangle & \left\langle - \right|W\left| - \right\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+ \\ \psi_-\end{pmatrix}}$$

שדה מגנטי אחיד $(V=0)$:

מצב של אטומי כסף בזמן $t=0$.

$$\psi(r,0)\cdot\left(\alpha_0\left|+\right\rangle + \beta_0\left|-\right\rangle\right)$$

ההמילטוניאן במצב זה הוא:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hat{\mu}\cdot\vec{B}$$

מצב בזמן t :

$$\psi(r,t)\cdot\left(\alpha(t)\left|+\right\rangle + \beta(t)\left|-\right\rangle\right)$$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \\ i\hbar\dfrac{d}{dt}\left(\alpha(t)\left|+\right\rangle + \beta(t)\left|-\right\rangle\right) = -\hat{\mu}\vec{B}\left(\alpha(t)\left|+\right\rangle + \beta(t)\left|-\right\rangle\right) \end{cases}$$

נניח ש $\vec{B} \parallel \hat{z}$: $\quad \hat{\mu}\cdot\vec{B} = \hat{\mu}_z\cdot B \quad\quad \mu_z = \mu_0\cdot\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{d}{dt}\alpha(t) = -\mu_0 B\alpha(t) \\ i\hbar\dfrac{d}{dt}\beta(t) = +\mu_0 B\beta(t) \end{cases}$$

נגדיר $\omega_0 \equiv -2\mu_0\dfrac{B}{\hbar}$:

$$\begin{cases} \alpha(t) = \alpha_0 e^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \\ \beta(t) = \beta_0 e^{+\frac{i\omega_0 t}{2}} \end{cases}$$

נגדיר ערכי תצפית:

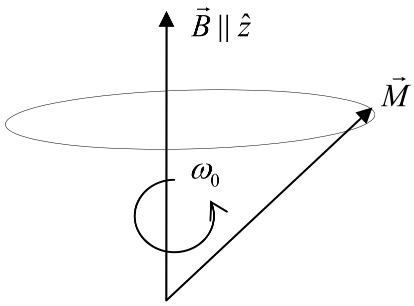
$$\begin{cases} \left\langle\hat{\mu}_x\right\rangle \equiv M_x(t) \\ \left\langle\hat{\mu}_y\right\rangle \equiv M_y(t) \\ \left\langle\hat{\mu}_z\right\rangle \equiv M_z(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} M_x(t)=\langle\psi(t)|\hat{\mu}_x|\psi(t)\rangle \underbrace{=}_{|\psi(t)\rangle=\psi(r,t)\begin{pmatrix}\alpha(t)\\ \beta(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\psi_+(r,t)\\ \psi_-(r.t)\end{pmatrix}} 2\mu_0\alpha_0\beta_0\cos\omega_0 t \\ M_y(t)=\langle\psi(t)|\hat{\mu}_y|\psi(t)\rangle=2\mu_0\alpha_0\beta_0\sin\omega_0 t \\ \underbrace{M_z(t)=\langle\psi(t)|\hat{\mu}_z|\psi(t)\rangle=\mu_0\left(|\alpha_0|^2-|\beta_0|^2\right)}_{\mu_z} \end{cases}$$

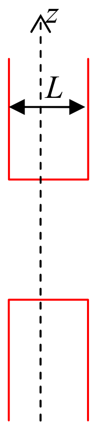
מתחלף עם ההמילטוניאן ועל כן גם ללא
חישוב צריך להבין שנקבל משהו קבוע בזמן

$$\begin{cases}\dot{M}_x(t)=-\omega_0 M_y(t)\\ \dot{M}_y(t)=\omega_0 M_x(t)\\ \dot{M}_z(t)=0\end{cases}\Leftrightarrow\begin{cases}\frac{d}{dt}\vec{M}=\vec{\Omega}\times\vec{M}\\ \vec{\Omega}\equiv\omega_0\cdot\hat{u}_z\end{cases}$$

$\hat{u}_z$ - וקטור יחידה בכיוון ציר z.



Sterin-Garlach : שדה לא אחיד.



$$\vec{B}=B_z(r)\hat{u}_z$$
$$B_z(r)\equiv B_0+b'z$$
$$\left(div\vec{B}=0!\right)$$

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_+(r,t)=\left(\frac{p^2}{2m}-\mu_0 B(\hat{z})\right)\psi_+(r,t)\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_-(r,t)=\left(\frac{p^2}{2m}+\mu_0 B(\hat{z})\right)\psi_-(r,t)\end{cases}$$

$$\pi_\pm=\int|\psi_\pm(r,t)|^2 d^3r$$
$$\pi_+ + \pi_- = 1$$
$$\phi_\pm(r,t)\equiv\frac{\psi_\pm(r,t)}{\sqrt{\pi_\pm}}$$
$$\langle\vec{r}_\pm\rangle=\int\vec{r}\,|\phi_\pm(r,t)|^2 d^3r$$

$$\langle\vec{p}_\pm\rangle=\int\phi_\pm^*(r,t)\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\phi_\pm(r,t)d^3r$$

משפט Ehrenfest :

באופן כללי :

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{d}{dt}\langle\vec{r}\rangle=\frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}\\ \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle=-\langle\vec{\nabla}V(r)\rangle\end{gathered}}$$

במקרה שלנו :

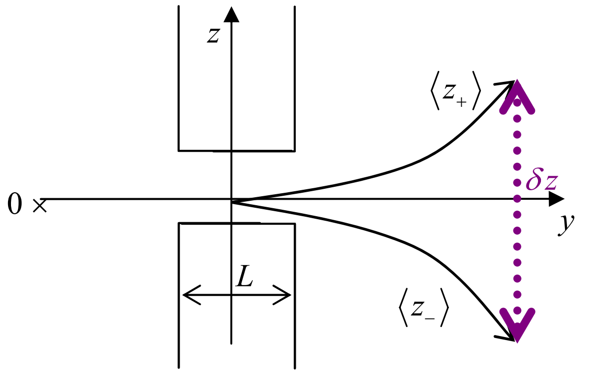
$$\frac{d}{dt}\langle\vec{r}_\pm\rangle=\frac{1}{m}\langle p_\pm\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle=-\langle\vec{\nabla}V(r)\rangle\to\frac{d}{dt}\langle p_{x\pm}\rangle=\frac{d}{dt}\langle p_{y\pm}\rangle=0$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_{z\pm}\rangle=\pm\mu_0\cdot b'$$

בזמן $t=0$: $\langle\vec{r}_\pm\rangle=0$ ו $0=\langle p_{x\pm}\rangle=\langle p_{z\pm}\rangle$; $\langle p_{y\pm}\rangle=mv$, v - מהירות של אטומי הכסף.

בזמן t כלשהו : $0\Rightarrow\langle x_\pm\rangle=0\underbrace{=}_{\substack{\frac{d}{dt}\langle p_{x\pm}\rangle=0\Rightarrow\langle p_{x\pm}\rangle=const.\\ 0=\langle p_{x\pm}\rangle(t=0)=const.}}\frac{d}{dt}\langle x_\pm\rangle=\frac{1}{m}\langle p_{x\pm}\rangle$; $\langle y_\pm\rangle=vt$; $\langle z_\pm\rangle=\pm\mu_0\frac{b't^2}{2m}$.



$$t\approx\frac{L}{v}$$

$$\delta z=\langle z_+\rangle-\langle z_-\rangle=\frac{\mu_0 b'}{2m}\left(2\left(\frac{L}{v}\right)^2\right)\Rightarrow\boxed{\delta z=\frac{\mu_0 b'}{m}\left(\frac{L}{\underbrace{v}_{\sim t}}\right)^2}>\Delta z$$

- $\delta z>\Delta z$ תנאי ראשון לפיצול לשתי אלומות,כלומר, δz יהיה גדול מרוחב חבורת הגלים..
- תנאי נוסף הוא ש- L יהיה סופי, t זמן המדידה של שתי האלומות, מכאן שעל מנת לבצע מדידה קוונטית אנו צריכים זמן מדידה **סופי.**

תנע זוויתי במכניקה קוונטית:

תנע זוויתי של חלקיק בודד (מרחב Hilbert: $\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$):

באופן קלאסי:

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

הכללה קוונטית:

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

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \ ; \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \ ; \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y \Leftrightarrow \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}}}$$

מערכת של N חלקיקים קוונטים, $i = 1,...,N$:

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

$$\boxed{\hat{\vec{L}}^{(tot.)} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{L}}_i = \sum_{i=1}^{N}\left(\hat{\vec{r}}_i \times \hat{\vec{p}}_i\right)}$$

$$\boxed{\hat{\vec{L}}^{(tot.)} \times \hat{\vec{L}}^{(tot.)} = i\hbar\hat{\vec{L}}^{(tot.)}}$$

(כל חלקיק במרחב שלו)

הגדרה כללית של תנע זוויתי $\hat{\vec{J}}$ במכניקה קוונטית:

$$\hat{\vec{J}} = \left(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\right)$$

$$\underbrace{\boxed{\hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar\vec{J}}}_{\text{סדרה של 3אופרטורים שמקיימים תנאי זה נגיד שזו מערכת של תנע זוויתי}}$$

מוגדר להיות במרחב E_H .

נגדיר מערכת שלמה:

$$\begin{cases} \hat{\vec{J}}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\ \hat{J}_z \end{cases}$$

$\left\{\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z\right\}$ - מערכת שלמה של אופרטורים הרמיטיים שמתחלפים.

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{\vec{J}}\right] \stackrel{?}{=} 0$$

$$-\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_x\right] = \left[J_x, J_x^2 + J_y^2 + J_z^2\right] = \left[J_x, J_y^2 + J_z^2\right] = \left[J_x, J_y^2\right] + \left[J_x, J_z^2\right] \stackrel{?}{=} 0$$

$$\left[J_x,J_y^2\right]=J_xJ_y^2-J_y^2J_x=\left(J_xJ_y\right)J_y-J_y\cdot\left(J_y\cdot J_x\right)=\left(i\hbar J_z+J_yJ_x\right)\cdot J_y-J_y\left(J_yJ_x\right)=$$
$$=i\hbar J_zJ_y+\underbrace{J_yJ_xJ_y}_{=J_y\left(J_xJ_y-J_yJ_x\right)}=i\hbar J_zJ_y+J_y\left(i\hbar J_z\right)=i\hbar\left(J_zJ_y+J_yJ_z\right)=\left[J_x,J_y^2\right]$$
$$\left[J_x,J_z^2\right]=\left(J_xJ_z\right)J_z-J_z\left(J_zJ_x\right)=\ldots=-i\hbar\left(J_zJ_y+J_yJ_z\right)$$
$$\Rightarrow\left[\vec{J}^2,J_x\right]=0\Rightarrow\left[\vec{J}^2,\vec{J}\right]=0$$

נגדיר בסיס על ידי וקטורים עצמיים של $\hat{\vec{J}}^2$ | $\hat{J}_z$: $\left\{\left|im\right\rangle\right\}$:

$$\begin{cases}\hat{J}^2\left|jm\right\rangle=\hbar^2j\left(j+1\right)\left|jm\right\rangle\\ \hat{J}_z\left|jm\right\rangle=\hbar m\left|jm\right\rangle\end{cases}$$

$\hbar^2j\left(j+1\right)$ הוא מספר ממשי וחיובי.

m הוא מספר ממשי חיובי ושלילי.

$$\left\langle jm\middle|j'm'\right\rangle=\delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

חישוב של j ושל m :

הגדרה של שני אופרטורי סולם : $J_\pm$.

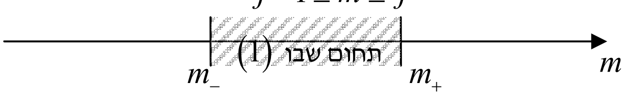
$$\begin{cases}\hat{J}_+\equiv\hat{J}_x+i\hat{J}_y\\ \hat{J}_-\equiv\hat{J}_x-i\hat{J}_y\end{cases}$$
$$J_x^\dagger=J_-\ ;\ J_-^\dagger=J_+$$
$$\boxed{\begin{gathered}\left[\hat{J}^2,\hat{J}_\pm\right]=0\\ \left[\hat{J}_z,\hat{J}_\pm\right]=\pm\hbar\hat{J}_\pm\end{gathered}}$$
$$\hat{J}^2\hat{J}_\pm m=\hat{J}_\pm\hat{J}^2\left|jm\right\rangle=\hbar^2j\left(j+1\right)\left(\hat{J}_\pm\left|jm\right\rangle\right)$$
$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_\pm\left|jm\right\rangle\right)=\left(J_\pm J_z\pm\hbar J_\pm\right)\left|jm\right\rangle=\hbar mJ_\pm\left|jm\right\rangle\pm\hbar J_\pm\left|jm\right\rangle=\hbar\left(m\pm1\right)J_\pm\left|jm\right\rangle$$

(חשוב לזכור m הוא מספר ממשי!)

$$\underbrace{\left\|J_\pm\left|jm\right\rangle\right\|^2}_{\geq0}=\left\langle jm\middle|J_\pm^\dagger J_\pm\middle|jm\right\rangle=\left\langle jm\middle|J_\mp J_\pm\middle|jm\right\rangle\geq0$$
$$J_\mp J_\pm=\left(J_x\mp iJ_y\right)\left(J_x\pm iJ_y\right)=J_x^2+J_y^2\pm i\left(i\hbar J_z\right)=J^2-J_z^2\mp\hbar J_z$$
$$\left\|J_\pm\left|jm\right\rangle\right\|^2=\hbar^2j\left(j+1\right)-\hbar^2m^2\mp\hbar^2m=\hbar^2\left(j\left(j+1\right)-m\left(m\pm1\right)\right)\geq0$$
$$\Leftrightarrow\begin{cases}m\left(m+1\right)-j\left(j+1\right)\leq0 & (1)\\ m\left(m-1\right)-j\left(j+1\right)\leq0 & (2)\end{cases}$$

<u>(1):</u>

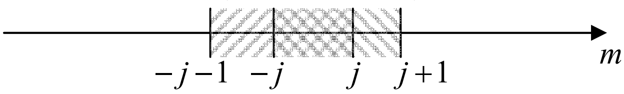
$$m^2+m-j\left(j+1\right)\leq0$$
$$\Rightarrow\begin{cases}m_+=j\\ m_-=-j-1\end{cases}$$
$$-j-1\leq m\leq j$$



<u>:(2)</u>

$$m^2-m-j\left(j+1\right)\le 0$$

$$\boxed{-j\le m\le j+1}$$



סיכום-חישוב המספרים הקוונטים m ו j - קווטיזציה:

$$\begin{cases}\hat{J}\left|jm\right\rangle=\hbar^2 j\left(j+1\right)\left|jm\right\rangle\\ \hat{J}_z\left|jm\right\rangle=\hbar m\left|jm\right\rangle\end{cases}$$

$\left\{\hat{J}^2,\hat{J}_z\right\}$ היא מערכת שלמה של אופרטורים מתחלפים.

$$\boxed{-j\le m\le j}$$

עבור m נתון,

$$J_+\left|jm\right\rangle=\left|jm+1\right\rangle,\left|jm+2\right\rangle$$

$$m_{\max}\ ;\ J_+\left|jm_{\max}\right\rangle=0$$

$$J_+\left|jm_{\max}\right\rangle=\underbrace{\left[j\left(j+1\right)-m_{\max}\left(m_{\max}+1\right)\right]}_{=0}\left|jm_{\max}+1\right\rangle$$

$m_{\max}$ מוגדר כך שהוא מקיים את הקשר:

$$j\left(j+1\right)-m_{\max}\left(m_{\max}+1\right)=0$$

$$\Rightarrow m_{\max}=\begin{cases}j\\-j-1\end{cases}$$

<u>$m_{\max}=-j-1$:</u>

$$\left|jm_{\max}\right\rangle=\left|j-j-1\right\rangle$$

$$J_+\left|j-j-1\right\rangle=\left|j-j\right\rangle$$

לכן, $m_{\max}\ne -j-1$

$$\Rightarrow\boxed{m_{\max}=j}$$

$J_+\left|jm\right\rangle$, מספר שלם $N\in\mathbb{N}$ (מספר הפעמים שמפעילים את J_+):

$$m+N=m_{\max}=j\Rightarrow\boxed{m+N=j}$$

$$J_-\left|jm\right\rangle$$

$$\left|jm-1\right\rangle,\left|jm-2\right\rangle,....,\left|jm_{\min}\right\rangle$$

$$J_-\left|jm_{\min}\right\rangle=0\Rightarrow j\left(j+1\right)-m_{\min}\left(m_{\min}-1\right)=0$$

$$\Rightarrow\begin{cases}-j\\j+1\end{cases}$$

נניח ש $m_{\min}=j+1$.

$$J_-\left|jm_{\min}\right\rangle=J_-\left|jj+1\right\rangle\propto\left|jj\right\rangle$$

$\left|jj\right\rangle$ הוא מצב שמותר לנו להיות בו ועל כן זה לא $m_{\min}$ כי אז לא מתקיים $J_-\left|jm_{\min}\right\rangle=0$

$$\Rightarrow\boxed{m_{\min}=-j}.$$

$$J_-\left|jm\right\rangle$$

$$m-\underbrace{N}_{\in\mathbb{N}}'=m_{\min}=-j\Rightarrow\boxed{m-N'=-j}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}m-N'=-j\\ m+N=j\end{cases}\Rightarrow j-N=-J+N'\Rightarrow 2j=N+N'\in\mathbb{N}\Rightarrow\underbrace{\boxed{j\in\frac{\mathbb{N}}{2}}}_{\text{כלומר } j \text{ הוא מספר שלם או חצי שלם}}$$

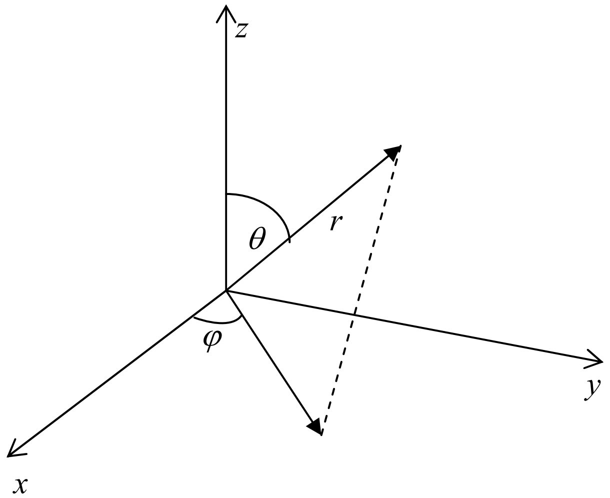
קוונטיזציה של תנע זוויתי אורביטלי:

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}\qquad\qquad,\ell_2\left(\mathbb{R}^3\right)$$

מערכת שלמה: $\left\{L^2,L_z\right\}$.

$$\begin{cases}L^2\left|\ell m\right\rangle=\hbar^2\ell\left(\ell+1\right)\left|\ell m\right\rangle\\ L_z\left|\ell m\right\rangle=\hbar m\left|\ell m\right\rangle\end{cases}$$

$$L_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$



$$\text{קאורדינטות כדוריות}\begin{cases}x=r\sin\theta cos\varphi\\ y=r\sin\theta\sin\varphi\\ z=r\cos\theta\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}dx=....dr...d\theta...d\varphi\\ dy=....\\ dz=....\end{cases}$$

$$\boxed{\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

$$\hat{L}_z\underbrace{\psi_m\left(\vec{r}\right)}_{\text{מצב עצמי של } \hat{L}_z}=\hbar m\psi_m\left(\vec{r}\right)$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_m\left(\vec{r}\right)}{\partial\varphi}=\hbar m\psi_m\left(\vec{r}\right)$$

$$\frac{\partial\psi_m\left(\vec{r}\right)}{\partial\varphi}=im\psi_m\left(\vec{r}\right)$$

$$\boxed{\psi_m\left(\vec{r}\right)=\phi_m\left(r,\theta\right)e^{im\varphi}}$$

$:m=?$

$$\underbrace{\psi_m(r,\theta,\varphi)=\psi_m(r,\theta,\varphi+2\pi)}_{\text{תנאי שפה}}$$

נפעיל את תנאי השפה ונקבל:

$$e^{im\varphi}=e^{im(\varphi+2\pi)}\Rightarrow 1=e^{2i\pi m}\Rightarrow 2\pi m=2\pi p\ \ ,p\in\mathbb{N}\Rightarrow\boxed{m\in\mathbb{N}}$$

בתנע זוויתי כולל, m יכול להיות שלם או חצי שלם. עבור תנע זוויתי אורביטלי של חלקיק בודדm **לא יכול חצי שלם אלה שלם בלבד!!**

$$j-m\in\mathbb{N}\Rightarrow\ell-m\in\mathbb{N}\Rightarrow\frac{\boxed{\ell\in\mathbb{N}}}{\boxed{-\ell\le m\le+\ell}}$$

קורדינטות כדוריות ופונקציות הרמוניות כדוריות:

$$\hat{L}^2=\hat{L}_x^{\,2}+\hat{L}_y^{\,2}+\hat{L}_z^{\,2}$$

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

$$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y=\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

מצבים עצמיים של L^2 ושל $\hat{L}_z$: $y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$

$$\begin{cases}\hat{L}^2y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\hbar^2\ell(\ell+1)y_{\ell,m}(\theta,\varphi)\\ \hat{L}_zy_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\hbar my_{\ell,m}(\theta,\varphi)\end{cases}$$

$\{y_{\ell,m}(\theta,\varphi)\}$ בסיס של מרחב Hilbert

$$\begin{cases}\ell\in\mathbb{N}\\-\ell\le m\le\ell\end{cases}$$

$$\begin{cases}\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}\underbrace{\sin\theta}_{\text{יעקוביאן}}y^*_{\ell,m}(\theta,\varphi)y_{\ell',m'}(\theta,\varphi)d\varphi=\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\\ L_\pm y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m\pm1)}y_{\ell,m\pm1}(\theta,\varphi)\\ L_+y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)=0\end{cases}$$

$$y_{\ell,m}(\theta,\varphi)=F_{\ell m}(\theta)e^{im\varphi}$$

$$L_+y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)=0\Rightarrow\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)F_{\ell\ell}(\theta)e^{i\ell\ell}=0\Rightarrow\frac{\partial F_{\ell\ell}}{\partial\theta}-\ell\cot\theta F_{\ell\ell}(\theta)=0$$

$$\frac{dF_{\ell\ell}}{F_{\ell\ell}}=\ell\cot\theta d\theta=\ell\frac{\cos\theta}{\sin\theta}d\theta\Rightarrow\ln\left(\frac{F_{\ell\ell}}{\underbrace{C}_{\text{קבוע}}}\right)=\ell\ln(\sin\theta)\Rightarrow F_{\ell\ell}(\theta)=C\sin^\ell(\theta)$$

$$\boxed{y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)=C\sin^\ell(\theta)e^{i\ell\varphi}}$$

$\underline{\underline{\ell = 0}}$:

$$F_{00}(\theta) = Const.$$

נירמול:

$$\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} \underbrace{\sin\theta}_{\text{יקוביאן חשוב לא לשכוח}} |C|^2 \, d\varphi \Rightarrow 2\pi(2)|C|^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\Rightarrow F_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$\underline{\underline{\ell = 1}}$:

$$\Rightarrow m = 0, \pm 1$$
$$y_{11}(\theta,\varphi) = C \sin\theta e^{i\varphi}$$

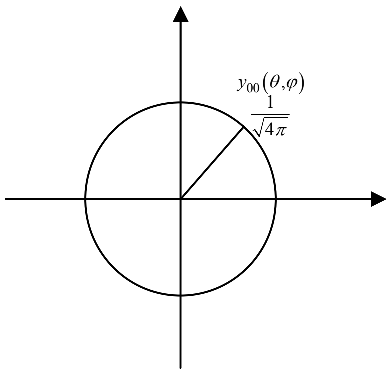
נירמול נותן ש: $C = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$.

$$\underline{m=1}: \quad y_{11}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}$$

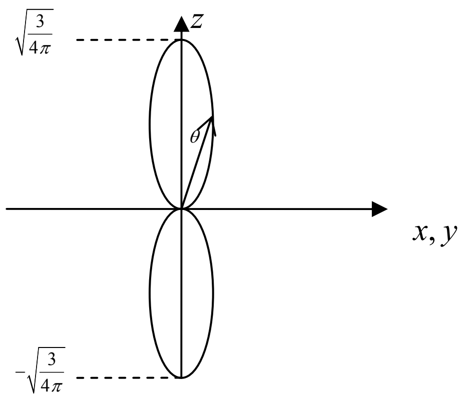
$$\underline{m=0}: \quad y_{1,0} = +\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

(ברגע שמצאנו את $m=1$ אנו יכולים לקבל את $m=0$ על ידי הפעלת L_-)

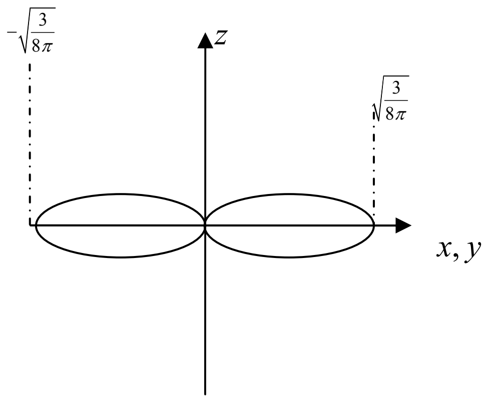
$\boxed{m=0}$



$\boxed{m=0, \ell=1}$



$\boxed{m=1, \ell=1}$



:Stern-Gerlach

$$\vec{\mu} \underset{\text{קלאסי}}{=} \gamma_0 \vec{L} \quad , \quad \gamma_0 = -\frac{q}{2m} \xrightarrow[\text{קוונטי}]{\text{שדרוג}} \hat{\vec{\mu}} = \gamma_0 \hat{\vec{J}}$$

$$W = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(r) \underbrace{=}_{\vec{B} \| \hat{z}} -\mu_z B = -\gamma_0 B J_z$$

הערכים העצמיים של J_z הם m , $-j \le m \le j \Leftarrow \underbrace{2j+1}_{\text{ע"ע של J}}$.

רואים שיהיו לנו כתמים כמספר הע"ע של J , כלומר מספר ה m'ים
(לא ניתן להסביר את ניסוי סטרן גרלך על ידי קוונטיזציה, יש להתייחס לדרגות חופש אחרות).
(זו בעם הוכחה לכך שספין קיים)

תורת ההפרעות :

(מרצה מחליף : פרופ' בוריס שפירא)

דוגמא מאלגברה:

λ קטן מאוד, $x^2+x+\lambda=0$

עבור $\lambda=0$, ישנו פתרון $x=0$.

נחפש פתרון בצורה $x=a\lambda+b\lambda^2+c\lambda^3+O\left(\lambda^4\right)$, $x^2=a^2\lambda^2+2ab\lambda^3+O\left(\lambda^4\right)$.

נציב את הפתרון במשוואה:

$$\Rightarrow a^2\lambda^2+2ab\lambda^3+a\lambda+b\lambda^2+c\lambda^3+\lambda=0\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\begin{cases}(a+1)\lambda=0\Rightarrow a=-1\\ \left(a^2+b\right)\lambda^2=0\Rightarrow b=-a^2=-1\\ (2ab+c)\lambda^3=0\Rightarrow c=-2ab=-2\end{cases}$$

$$\Rightarrow\boxed{x=-\lambda-\lambda^2-2\lambda^3}$$

תוצאה זו ניתן לקבל מהפתרון המדויק:

$$x=-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}-\lambda}=-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1-4\lambda}\cong-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\left[1-2\lambda-\frac{1}{2!}\frac{1}{4}(4\lambda)^2-\frac{1}{3!}\frac{3}{8}(4\lambda)^3\right]=-\lambda-\lambda^2-2\lambda^3$$

חזרה לקוונטים:

ניקח המילטוניאן: $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{V}$.

כאשר,

$\hat{H}_0$ - ההמילטוניאן הלא מופרע (למשל, אוסילטור הרמוני $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$).

$\lambda\hat{V}$ - ההפרעה (למשל, תיקון אנהרמוני).

המטרה – למצוא אנרגיות עצמיות והפונקציות העצמיות של $\hat{H}$, בחזקות של λ .

$$\underbrace{\left(\hat{H}_0+\lambda\hat{V}\right)\left|\psi_n\right\rangle=E_n\left|\psi_n\right\rangle}_{\text{זו הבעיה שאנו רוצים לפתור}}$$

הפתרונות של $\hat{H}_0$ ידועים (הפתרונות הלא מופרעים): $\hat{H}_0\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$.

הפונקציות הלא מופרעות: $n=1,2,3,...$, $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ מהוות בסיס ועל כן ניתן לפתח אותן לפי הפיתוח הבא:

$$\left|\psi_n\right\rangle=\sum_m c_{nm}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$$

$$\Rightarrow\left(\hat{H}_0+\lambda\hat{V}\right)\sum_m c_{nm}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle=E_n\sum_m c_{nm}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\to$$

$$\to\sum_m c_{nm}\left(E_m^{(0)}+\lambda\hat{V}\right)\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle=E_n\sum_m c_{nm}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$$

נכפיל בצד שמאל בוקטור: $\left\langle\psi_s^{(0)}\right|$ ונעשה שימוש האורטונרמליות , כלומר, $\left\langle\psi_s^{(0)}\middle|\psi_m^{(0)}\right\rangle=\delta_{sm}$.

$$\Rightarrow c_{ns}E_s^{(0)}+\lambda\sum_m c_{nm}\overbrace{\left\langle\psi_s^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_m^{(0)}\right\rangle}^{\equiv V_{sm}}=E_nc_{ns}\to$$

$$\to\underbrace{\boxed{\left(E_n-E_s^{(0)}\right)c_{ns}=\lambda\sum_m V_{sm}c_{nm}}}_{\text{זו בעצם משוואת שרדינגר בבסיס ללא הפרעות}}\Rightarrow$$

$s=1,2,...$ עבור כל n נתון.

צורת הפתרון תהיה:

$$E_n=E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+....$$
$$c_{nm}=c_{nm}^{(0)}+\lambda c_{nm}^{(1)}+\lambda^2c_{nm}^{(2)}+...$$

בבעיה הלא מופרעת האנרגיה $E_n^{(0)}$, ו $c_{nm}^{(0)}=\delta_{nm}$.

הפרעה מסדר ראשון ב λ:

$$\Rightarrow\left(\underbrace{E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}}_{E_n}-E_s^{(0)}\right)\left(c_{nm}^{(0)}+\lambda c_{nm}^{(1)}\right)=\lambda\sum_m V_{sm}\overbrace{\left(c_{nm}^{(0)}\right)}^{\text{כאן לא מוסיפים תיקון}}\rightarrow$$

$$\rightarrow\underbrace{\left(E_n^{(0)}-E_s^{(0)}\right)c_{ns}^{(0)}}_{\substack{=0\\ \text{(הפתרון של הלא מופרע)}\\ \left(c_{ns}^{(0)}=\delta_{ns}\right)}}+\cancel{\lambda}\left(E_n^{(0)}-E_s^{(0)}\right)c_{ns}^{(1)}+\cancel{\lambda}E_n^{(1)}c_{nm}^{(0)}=\cancel{\lambda}\sum_m V_{sm}c_{nm}^{(0)}\rightarrow$$

$$\rightarrow\boxed{\left(E_n^{(0)}-E_s^{(0)}\right)c_{ns}^{(1)}+E_n^{(1)}\delta_{ns}=V_{sn}}$$

ניקח $s=n$:

$$E_n^{(1)}=V_{nn}=\left\langle\psi_n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

מצאנו אם כן, תיקון, $\lambda E_n^{(1)}$, מסדר ראשון לאנרגית הרמה מספר n. (λ -הוא כלי עזר בלבד)

$s\neq n$,

$$\left(E_n^{(0)}-E_s^{(0)}\right)c_{ns}^{(1)}=V_{sn}\Rightarrow\boxed{c_{ns}^{(1)}=\frac{V_{sn}}{E_n^{(0)}-E_s^{(0)}}}\ .$$

הערה: הנחנו שאין ניוון.

$$\left|\psi_n\right\rangle=\sum c_{ns}\left|\psi_s^{(0)}\right\rangle$$

בעזרת המקדמים ניתן לחשב את $\left|\psi_n\right\rangle$.

מאיפה נמצא את $c_{nn}^{(1)}$?

את $c_{nn}^{(1)}$ מוצאים מהנרמול:

$$\sum_s\left|c_{ns}\right|^2=1\Rightarrow\left|1+\lambda c_{nn}^{(1)}\right|^2=1$$

אם נבחר c_{nn}^1 ממשי אזי הוא חייב להיות אפס.

$$\Rightarrow\left(1+\lambda c_{nn}^{(1)}\right)^2=1\rightarrow1+2\lambda c_{nn}^{(1)}=1\rightarrow\boxed{c_{nn}^{(1)}=0}$$

<u>$s\neq n$</u>:

$s=1,2,...$

$$c_{ns}=\lambda c_{ns}^{(1)}$$

דוגמא-אוסילטור אנהרמוני:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2+\lambda\hbar\omega\left(\frac{x}{\ell}\right)^4\quad,\ell\equiv\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

תיקון מסדר ראשון $\sim \lambda$, לאנרגית מצב היסוד:

$$n=0,\ E_0^{(0)}=\frac{1}{2}\omega\hbar$$

תיקון:

$$\Delta E_0^{(1)}=\lambda\left\langle\psi_0^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_0^{(0)}\right\rangle=$$

$$\left\{\psi_0^{(0)}=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\}$$

$$=\lambda\hbar\omega\frac{1}{\ell^4}\int\psi_0^2(x)x^4dx=\lambda\hbar\omega\frac{1}{\ell^4}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\ell}\int x^4e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx\underbrace{=}_{\substack{\text{נסמן}\\ \frac{m\omega x^2}{\hbar}\equiv y^2\\ x=\ell y}}\lambda\hbar\omega\frac{1}{\ell^4}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\ell}\ell^5\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}y^4e^{-y^2}dy}_{=\frac{3}{4}\sqrt{\pi}}=\frac{3}{4}\lambda\hbar\omega$$

(תנאי לחישוב $\lambda\ll 1$)

אם $\hat{H}=\hat{H}_0+\eta x^4$, כל התהליך נשאר רק שנגיע לתוצאה:

$$\Delta E_0^{(1)}=\frac{3}{4}\eta\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2$$

ואז נשאל מתי זה נכון, כלומר מה הדרישה על η.

תנאי לחישוב בתורת ההפרעות זה לדרוש: $\boxed{\eta\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\ll\hbar\omega}$.

הפרעה מסדר שני:

$$\left(E_n-E_s^{(0)}\right)c_{ns}=\lambda\sum_m V_{sm}c_{nm}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\left(E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}-E_s^{(0)}\right)\left(c_{ns}^{(0)}+\lambda c_{ns}^{(1)}+\lambda^2c_{ns}^{(2)}\right)=\lambda\sum_m V_{sm}\left(c_{nm}^{(0)}+\lambda c_{nm}^{(1)}\right)$$

יש "לצוד" את האיברים $\sim\lambda^2$:

$$\Rightarrow\left(E_n^{(0)}-E_s^{(0)}\right)c_{ns}^{(2)}+E_n^{(1)}c_{ns}^{(1)}+E_n^{(2)}c_{ns}^{(0)}=\sum_m V_{sm}c_{nm}^{(1)}$$

ניקח $s=n$:

$$\underbrace{E_n^{(1)}c_{nn}^{(1)}}_{=0}+E_n^{(2)}\underbrace{c_{nn}^{(0)}}_{=1}=\sum_m V_{nm}c_{nm}^{(1)}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)}=\sum_m V_{nm}c_{nm}^{(1)}=\sum_{m\neq n}V_{nm}\frac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}=\sum_{m\neq n}\frac{\left|V_{nm}\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

$$\Rightarrow\boxed{\begin{matrix}E_n^{(1)}=\left\langle\psi_n^{(0)}\middle|V\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle=V_{nn}\\ E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\left|V_{nm}\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\end{matrix}}$$

תזכורת:

$|n\rangle$ - מצב עצמי של $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$.

ההפרעה תהיה איבר שאינו הרמוני.

$\langle n|\hat{x}|m\rangle$ **שונה מאפס רק אם**, $\underline{n=m\pm1}$.

$$\boxed{\langle n|\hat{x}|n-1\rangle=\langle n-1|\hat{x}|n\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{n}}$$

מתי לא נקבל אפס עבור $\langle 0|x^2|n\rangle$?

$$\underline{n=2}:\ \langle 0|x^2|2\rangle=\sum_\ell\langle 0|x|\ell\rangle\langle\ell|x|2\rangle=\langle 0|x|1\rangle\langle 1|x|2\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\underline{n=0}:\ \langle 0|x^2|0\rangle=\sum_\ell\langle 0|x|\ell\rangle\langle\ell|x|0\rangle=\langle 0|x|1\rangle\langle 1|x|0\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}$$

מה עם $\langle 0|x^3|n\rangle$? מתי זה שונה מאפס?

$$\underline{n=3}:\quad \langle 0|x^3|3\rangle=\sum_\ell\langle 0|x^2|\ell\rangle\langle\ell|x|3\rangle=\langle 0|x^2|2\rangle\langle 2|x|3\rangle=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}=\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\underline{n=1}:\ \langle 0|x^3|1\rangle=\sum_\ell\langle 0|x^2|0\rangle\langle 0|x|1\rangle+\langle 0|x^2|2\rangle\langle 2|x|1\rangle=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}=\frac{3}{2\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}$$

עוד דוגמא:

$$\langle 0|x^4|0\rangle=\int\psi_0^2(x)x^4dx=\frac{3}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2$$

$$\langle 0|x^4|0\rangle=\sum_\ell\langle 0|x^3|\ell\rangle\langle\ell|x|0\rangle=\langle 0|x^3|1\rangle\langle 1|x|0\rangle=\frac{3}{2\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}=\frac{3}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2$$

שתי צורות שונות המביאות לאותו הפתרון.

דוגמא-אוסילטור אנהרמוני:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\alpha x^3\quad,\ \hat{H}_0\equiv\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

תיקון סדר ראשון לאנרגית מצב היסוד.

$$E_n^{(0)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$E_0^{(0)}=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\Rightarrow E_{\underbrace{0}_{\text{מצב}}}^{\overbrace{(1)}^{\text{תיקון מסדר}}}=\langle 0|\alpha x^3|0\rangle=0$$

תיקון מסדר שני:

$$E_0^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{0m}|^2}{E_0^{(0)}-E_m^{(0)}} \underbrace{=}_{\left\{E_m^{(0)}=\hbar\omega\left(m+\frac{1}{2}\right)\right\}} \alpha^2\sum_{m\neq n}\frac{|\langle 0|x^3|m\rangle|^2}{\hbar\omega(0-m)} = -\frac{\alpha}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(\frac{9}{8}\frac{1}{\underbrace{1}_{m=1}}+\frac{3}{4}\frac{1}{\underbrace{3}_{m=3}}\right)=$$

$$=-\frac{11}{8}\alpha^2\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3$$

(תיקון מסדר שני למצב יסוד הוא תמיד שלילי (יורד מרמת היסוד)

תנאי לתקיפות תורת ההפרעות:

$$\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \ll \hbar\omega \Rightarrow \alpha \ll (\hbar\omega)^2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3 \Leftrightarrow$$

$$[\alpha]=\left[\frac{Enegy}{(Length)^3}\right]$$

$$\Leftrightarrow \frac{\alpha^2}{(\hbar\omega)^2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 \equiv \lambda \ll 1$$

דוגמא נוספת:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hbar\omega\left(\frac{x}{\ell}\right)^4 \quad ,\lambda \ll 1$$

בתורת ההפרעות ניתן לחשב את אנרגית מצב היסוד:

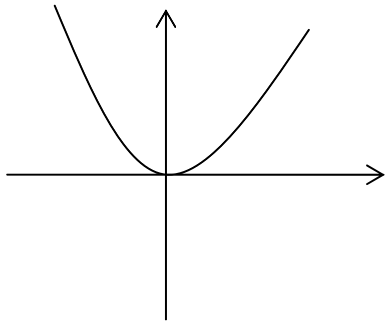
$$E_0=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\lambda+B\lambda^2+C\lambda^3+....\right)$$

האם טור זה מתכנס עבור λ קטן מאוד?

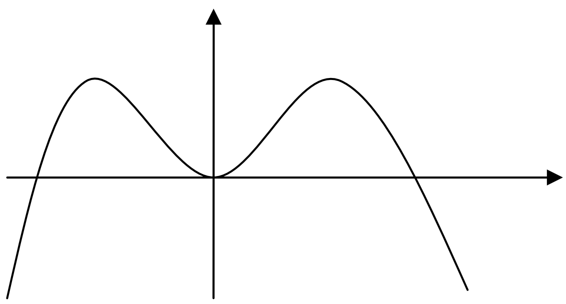
התשובה היא לא!!

ניקח λ קטן שלילי:

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\lambda\hbar\omega\left(\frac{x}{\ell}\right)^4$$



$\lambda > 0$



$\lambda < 0$