קוונטים וקשר כימי קורס חלקי

פרק 3 - תורת הקוונטים חלק 2

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגילים 1

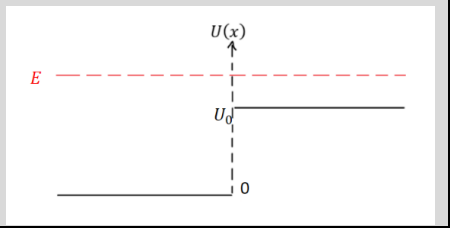
מהירות הפאזה, יחס דיספרסיה ומהירות החבורה

סיכום כללי

שם	נוסחה	הערות
מהירות הפאזה	$v_{ph}=\frac{\omega}{k}$	המהירות של אורך גל מסוים
מהירות החבורה	$v_g=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$	מהירות של כל הפונקציה או סכום כל הגלים (חבילת הגלים)
יחס הדיספרסיה	הקשר בין ω ל-k	

פיזור

סיכום כללי

שם	נוסחה	הערות
מקדם ההעברה	$T=\frac{\lvert C\rvert^2}{\lvert A\rvert^2}$	ההסתברות שהחלקיק יעבור את המחסום במקרה שבו k_2 בתחום אליו החלקיק עובר שונה מ-k_1 בתחום ממנו החלקיק הגיע $T=\frac{\lvert C\rvert^2}{\lvert A\rvert^2}\frac{k_2}{k_1}$
מקדם החזרה	$R=\frac{\lvert B\rvert^2}{\lvert A\rvert^2}$	ההסתברות שהחלקיק יוחזר מהמחסום
עבור מדרגת פוטנציאל וכאשר $E > U_0$ 	$T=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$; $R=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2$	

- כאשר $E < U(\pm\infty)$ נקבל מצבים קשורים, החלקיק "כלוא" ורמות האנרגיה בדידות.
- כאשר $E > U(\pm\infty)$ נקבל פיזור, החלקיק יגיע לאינסוף ורמות האנרגיה רציפות.

שאלות

1) פיזור מפוטנציאל מלבני

חלקיק חופשי בעל מסה m נע משמאל לימין ונתקל בפוטנציאל מלבני בגובה U_0 וברוחב L המתחיל ב-$x=0$. אנרגית החלקיק היא E וקטנה מ-U_0.

א. הראו כי הפתרון הכללי לפונקציית הגל הוא מצורה:

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0\\ Ce^{\alpha x}+De^{-\alpha x} & 0<x<L\\ Fe^{ikx} & L<x\end{cases}$$

כאשר: $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ו- $\alpha=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$.

ב. רשמו את תנאי השפה והראו כי הקשר בין הקבועים נתון לפי המשוואות:

$$A+B=C+D$$
$$ik\left(A-B\right)=\alpha\left(C-d\right)$$
$$Ce^{\alpha L}+De^{-\alpha L}=Fe^{ikL}$$
$$\alpha\left(Ce^{\alpha L}-De^{-\alpha L}\right)=ikFe^{ikL}$$

ג. פתרו את המשוואות (רצוי באמצעות מחשב) והראו כי:

$$T=\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{1}{\cosh^2(\alpha L)+\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2\sinh^2(\alpha L)}$$

כאשר: $\gamma=\frac{\alpha}{k}-\frac{k}{\alpha}$.

ד. הראו כי במקרה של $e^{-\alpha L}\ll 1$ מקדם ההעברה הוא בקירוב:

$$T\approx 16\frac{E}{U_0}\left(1-\frac{E}{U_0}\right)e^{-2\alpha l}$$

ה. כעת הניחו ש-$E>U_0$, מצאו את מקדם ההעברה במקרה זה.

הדרכה: חזרו על השלבים שבסעיפים א - ג עבור מקרה זה.

רמז: $\cosh(ik)=\cos(k)$ ו- $\sinh(ik)=i\sin(k)$.

2) חלקיק עובר מעל בור פוטנציאל סופי

חלקיק בעל מסה m נע משמאל בהשפעת הפוטנציאל: $U(x)=\begin{cases}U_0 & x<0\\ 0 & 0<x<L\\ U_0 & L<x\end{cases}$

כאשר אנרגיית החלקיק E נתונה וגדולה מ-U_0.

א. מצאו את מקדם ההעברה.

ב. עבור אילו מצבים הבור "שקוף" לתנועת החלקיק?
האם המצבים מוכרים לכם?

3) מקדם החזרה בפגיעת אלקטרון בשפת מתכת

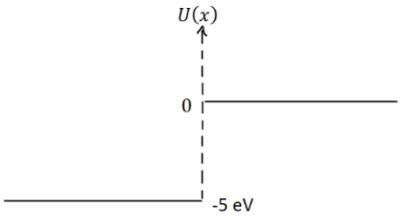
במקרה של פליטת אלקטרונים ממתכת, חלק מהאלקטרונים עם אנרגיה מספיקה ליציאה מהמתכת עדיין יכולים להיות מוחזרים משפת המתכת.

במודל חד מימדי נניח כי פוטנציאל האלקטרון בתוך המתכת $(x<0)$ שווה ל- $-5eV$ והפוטנציאל הוא אפס מחוץ למתכת $(x>0)$.

מהו מקדם ההחזרה של האלקטרון משפת המתכת אם אנרגיית האלקטרון היא

א. $90eV$

ב. $0.4eV$



תשובות סופיות

1) א-ד. שאלות הוכחה.

ה. $T=\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{1}{\cos^2\left(k_2L\right)+\left(\frac{\tilde{\gamma}}{2}\right)^2\sin^2\left(k_2L\right)}$

כאשר: $\tilde{\gamma}=\frac{k_z}{k}+\frac{k}{k_2}$ ו- $k_2=\frac{\sqrt{2m\left(E-v_0\right)}}{\hbar}$.

2) א. $T=\frac{1}{\cos^2\left(k_2L\right)+\left(\frac{\tilde{\gamma}}{2}\right)^2\sin^2\left(k_2L\right)}$ כאשר: $\tilde{\gamma}=\frac{k_1}{k_2}+\frac{k_2}{k_1}$ ו- $k_2=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

ב. $n=1,2,3,...$, $E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}$ כן.

3) א. $1.83\cdot10^{-4}$ ב. 0.328

פונקציית דלתא של דיראק

סיכום כללי

הגדרת הפונקציה:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$$

או

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

או

$$\delta_a(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-x^2/a^2}$$

כאשר a הולך לאפס.

תכונה:

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a)$$

פיזור מפונקציית דלתא:

עבור:

$$V(x) = -a\delta(x)$$

כאשר $E < 0$:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{am}}{\hbar} \mathrm{e}^{-\frac{am}{\hbar^2}|x|}$$

$$\mathrm{E} = -\frac{a^2 m}{2\hbar^2}$$

מקבלים מצב אחד בלבד, לא משנה מה הערך של a (גודל הבור).

כאשר $E > 0$ וחלקיק שמגיע משמאל:

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

$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{\beta^2}{1+\beta^2}$$

$$T=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\frac{1}{1+\beta^2}$$

$$\beta=\frac{am}{\hbar^2 k}$$

עבור:

$$V(x)=+a\delta(x)$$

E חייב להיות גדול מאפס והפתרון זהה לפתרון במקרה של הפוטנציאל השלילי כאשר $E>0$.

שאלות

1) פוטנציאל דלתא בתוך בור אינסופי**

אלקטרון נמצא בבור פוטנציאל ברמה השנייה. הבור הוא אינסופי אך במרכזו יש פוטנציאל דלתא, כלומר:

$$V(x)=\infty,\ |x|>\frac{l}{2}$$
$$V(x)=a\delta(x),\ |x|<l/2$$

א. מצאו את הפתרונות עבור משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן. הפרידו בין הפתרונות הסימטריים לאנטי סימטריים ומצאו את האנרגיות המתאימות לכל פתרון. עבור הפתרונות הסימטריים הראו רק כי המשוואה ממנה ניתן לקבל את רמות האנרגיה היא מהצורה: $\tan\left(k\frac{l}{2}\right)=-\frac{\hbar^2 k}{am}$ וציירו פתרון גרפי כללי למשוואה. בשני המקרים אין צורך לנרמל את הפתרונות.

ב. דונו במקרה ש- $a\ll\frac{\hbar^2}{ml}$ ובמקרה ש- $a\gg\frac{\hbar^2}{ml}$.

ג. האלקטרון יורד לרמת היסוד ופולט פוטון, מהי האנרגיה של הפוטון הנפלט ב-eV אם: $a=2\cdot10^{-27}j\cdot m$ ו- $l=2.7nm$.

2) קרן אלקטרונים עוברת שתי דלתות

קרן אלקטרונים מפוזרת על ידי מחסום פוטנציאל המורכב שתי פונקציות דלתא זהות במרחק l. כלומר: $V(x)=a\delta(x)+a\delta(x-l)$.

חשבו בקירוב את האנרגיה הכי נמוכה של אלקטרון עבורה אין החזרה של הקרן (כל האלקטרונים עוברים דרך המחסום).

$a=1.9\cdot10^{-27}j\cdot m, l=4.2nm$

3) קרן עוברת דרך שתי דלתות ומדרגה

קרן אלקטרונים מגיעה משמאל לפוטנציאל הבא:

$$V(x)=U(x)+a\delta(x)+a\delta(x-l)$$

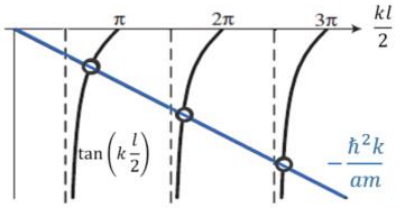
$$U(x)=\begin{cases}U_0 & 0<x<l\\ 0 & \text{אחרת}\end{cases}$$

מצאו את רמת האנרגיה הרביעית עבורה אין החזרה של הקרן, יש להשתמש בפתרון גרפי ולבטא ב-eV.

נתון: $a=0.63\cdot10^{-28}j\cdot m$, $U_0=4.7eV$, $l=0.2nm$

תשובות סופיות

1) א. פתרון גרפי למצבים הסימטריים:



האנרגיות של המצבים האנטי סימטריים: $n=2,4,6,...$ $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2$.

ב. האנרגיות של הפונקציות האנטי סימטריות לא מושפעות מ- a עבור $a\ll\frac{\hbar^2}{ml}$ האנרגיות של הפונקציות הסימטריות שואפות לאנרגיות שלהם בבור אינסופי (ללא דלתא). עבור $a\gg\frac{\hbar^2}{ml}$ האנרגיות של הפונקציות הסימטריות שואפות לאנרגיות של בור אינסופי **ברוחב** $\frac{l}{2}$.

ג. $0.3eV$

2) $0.02eV$

3) $125eV$

פוטנציאלים תלת מימדים

סיכום כללי

פונקציית הגל והאנרגיות של תיבה תלת מימדית:

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{b}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{c}z\right)$$

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

אוסילטור הרמוני תלת מימדי:

$$v(x,y,z)=\frac{1}{2}k_yx^2+\frac{1}{2}k_yy^2+\frac{1}{2}k_zz^2$$

האנרגיה של אוסילטור תלת מימדי:

$$E=\left(n_x-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x+\left(n_y-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y+\left(n_z-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z$$

ניוון - כאשר לכמה מצבים (פונקציות גל) שונים יש את אותה האנרגיה.
אי אפשר לדעת את המצב של החלקיק מהאנרגיה בלבד.

ניוון היא תופעה שלא מתרחשת במימד אחד

דרגת הניוון מוגדרת לפי מספר המצבים הקוונטים שיש לאנרגיה.

שאלות

1) אוסילטור ב-Z בור ב-X ו-Y

חלקיק בעל מסה m נמצא תחת הפוטנציאל הבא:

$$V(x,y,z)=V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)$$

כאשר:

$$V_1(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2\ ,+\ V_2(y)=\begin{cases}0, & 0<y<a\\ \infty, & otherwise\end{cases}\ ,\ V_3(Z)=\begin{cases}0, & 0<z<b\\ \infty, & otherwise\end{cases}$$

כמו כן נתון כי:

$$\hbar\omega=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$b=2a$$

א. מהי האנרגיה של הרמה המעוררת החמישית?
ב. מהי דרגת הניוון של רמה זו?
ג. מהי פונקציית הגל של חלקיק שנמצא ברמת אנרגיה זו?

תשובות סופיות

1) א. $E=2.75\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ רמה 5. ב. 2

ג. $$\psi(x,y,z)=\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-\frac{z^2\pi^2\hbar}{4L^2}}\left[\alpha\sin\left(\frac{\pi}{2L}y\right)\left(1-\left(\frac{\pi z}{L}\right)^2\right)+\beta\sin\left(\frac{3\pi}{2L}y\right)\right]$$

פונקציית הגל כתלות בזמן

סיכום כללי

ניתן לקבל את פונקציית הגל הכללית ,הפותרת את משוואת שרדינגר התלויה בזמן על ידי קומבינציה לינארית של פונקציות הגל המתקבלות במצבים עמידים (מתוך פתרון משוואת שרדינגר הבלתי תלוי בזמן).

$$\Psi(x,t)=\sum_{n}\alpha_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}$$

כאשר - הן פתרונות המצבים העמידים ו - היא האנרגיה של כל מצב.

את המקדמים ניתן למצוא לפי (בהנחה שהפונקציות שמתקבלות מהמצב העמיד הן אורתונורמליות).

$$\alpha_n=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\Psi(x,0)\,\mathrm{d}x$$

ו - $|\alpha_n|^2$ הן ההסתברות להיות במצב מסוים.

יוצא גם שאם $\Psi(x,0)$ מנורמלת אז $\Psi(x,t)$ מנורמלת לכל t.

שאלות

1) רשמו פונקציית גל

חלקיק בעל מסה m נמצא תחת פוטנציאל מהצורה $\frac{1}{2}kx^2$.

ב- $t=0$ לחלקי הסתברות של 75% להיות במצב ייסוד ו- 25% להיות במצב המעורר הראשון. רשמו את פונקציית הגל של החלקיק כתלות בזמן.

פונקציות הגל של מצב היסוד והמצב המעורר הראשון הן:

$$\psi_1(x)=\left(\pi b^2\right)^{-\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

$$\psi_2(x)=\left(\pi b^2\right)^{-\frac{1}{4}}\frac{x}{b}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

כאשר $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$, $b=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

והאנרגיות הן:

$$E_n=\left(n-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n=1,2,3\ldots$$

2) מסת חלקיק מפונקציית הגל

נתונה פונקציית גל (חד מימדית) של חלקיק חופשי

$$\Psi(x,t)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{x}{L}-\frac{t}{\tau}\right)}$$

כאשר A , L , τ קבועים חיוביים נתונים.

מהי מסת החלקיק?

תשובות סופיות

1) $\psi(x,t)=\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x)e^{-i\frac{1}{2}\omega t}+\frac{1}{2}\psi_2(x)e^{-i\frac{3}{2}\omega t}$

2) $m=\frac{\hbar\tau}{2L^2}$

אופרטורים

סיכום כללי

אופרטור - לכל גודל פיזיקאלי ניתן לשייך אופרטור.
כאשר שמים את האופרטור בין Ψ ל-Ψ^* ועושים אינטגרל על כל המרחב (סנוויץ) הוא נותן את ערך התוחלת של הגודל הפיזיקאלי אליו הוא שייך.

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi \, dx$$

אופרטור המיקום: $\hat{x} = x$

אופרטור התנע במימד אחד: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

כל אופרטור אחר יהיה פונקציה של אופרטור המיקום והתנע:

$$Q(x,p,t) \to \hat{Q}\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} t\right)$$

כאשר מכפילים אופרטור בפונקציה אומרים שהאופרטור "פועל" על הפונקציה.
אם $\hat{Q}\psi = \lambda\psi$, אז ψ היא פונקציה עצמית של האופרטור ו- λ הוא ערך עצמי (ע"ע) של האופרטור.
הפונקציות העצמיות של אופרטור התנע הן: $\psi(x) = Ae^{ikx}$ והערכים העצמיים הם: $\hbar k$.

הפונקציות העצמיות של אופרטור המיקום הן: $\delta(x-a)$
והערכים העצמיים הם a (המיקום עצמו).

אופרטור ההמילטוניאן (מודד את האנרגיה):

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

אפשר לכתוב את משוואת שרידנגר הבלתי תלויה בזמן באמצעות ההמילטוניאן.
הפונקציות העצמיות של ההמלטוניאן הן הפתרונות של משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן והאנרגיות הן הערכים העצמיים של ההמילטוניאן.

שאלות

1) המילטוניאן ומדידת אנרגיה בבור פוטנציאל

חלקיק בעל מסה m נמצא בבור פוטנציאל ברוחב $0 < x < l$.

א. מצאו את המצבים העצמיים ואת הערכים העצמיים של ההמלטוניאן.

כעת נניח כי פונקציית הגל של החלקיק ברגע מסוים היא:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_2(x)$$

כאשר $\psi_1(x)$ ו-$\psi_2(x)$ הן פונקציות הגל של האנרגיות E_1 ו-E_2 בבור בהתאמה.

ב. האם פונקציה זו היא פונקציה עצמית של ההמילטוניאן?

ג. מהי האנרגיה הממוצעת של החלקיק במצב הנ"ל?
האם ניתן למצא את החלקיק באנרגיה זו?

2) חלקיק בצד ימין של בור פוטנציאל

חלקיק בעל מסה m נמצא בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב l.

נתון כי בזמן $t = 0$ לחלקיק הסתברות שווה להיות בחצי הימני של הבור.

א. מהי פונקציית הגל של החלקיק ב-$t = 0$?

ב. מצאו את פונקציית הגל של החלקיק כתלות בזמן.
שערו ללא חישוב האם החלקיק יישאר בחצי הימני של הבור?

ג. מהי ההסתברות שהחלקיק יהיה במצב היסוד ב-$t = 2sec$?

ד. ב-$t = 3\ sec$ נעשתה מדידה והתגלה שהחלקיק אכן במצב היסוד.
מהי פונקציית הגל של החלקיק מרגע זה והילך, ניתן לקבוע רגע זה כ-$t = 0$ חדש.

ה. מהו ערך התוחלת של התנע של החלקיק מסעיף ד'?

3) מוסיפים פאזות למקדמים

חלקיק נמצא בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב l.

א. מצאו את ההסתברות כתלות בזמן של החלקיק להיות בחצי השמאלי של הבור אם ידוע שהוא נמצא במצב עמיד כלשהו (או מצב עצמי של ההמילטוניאן).

כעת נתון שפונקציית הגל של החלקיק היא:

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_2\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_2 t}{\hbar}}$$

כאשר $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, ψ_1 ו-ψ_2 הן פונקציות הגל של מצב היסוד והמצב המעורר הראשון בבור, ו-E_1, E_2 הן האנרגיות של אותם מצבים.

ב. הראו כי $\Psi(x,t)$ מנורמלת.

ג. מהי ההסתברות למצא את החלקיק בחצי השמאלי של הבור כתלות בזמן?

ד. חזרו על סעיף ג כאשר $c_1 = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}}{\sqrt{2}}$, $c_2 = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}}{\sqrt{2}}$.

4) אופרטור האנרגיה הקינטית

אופרטור האנרגיה הקינטית הוא:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

הראו כי הפונקציות העצמיות של אופרטור התנע $\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}$
הן גם פונקציות עצמיות של אופרטור האנרגיה הקינטית ומצאו את הערכים העצמיים של אופרטור זה.

תשובות סופיות

1) א. $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$, $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} n^2$ ב. לא. ג. לא, $\langle E \rangle = \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2}$

2) א. $\psi(x,t=0) = \begin{cases} 0 & 0 \le x < \frac{l}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{l}} & \frac{l}{2} \le x \le l \end{cases}$ ב.

$$\psi(x,t) = \sum \alpha_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$$
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} n^2$$
$$\alpha_n = \frac{2}{\pi n}\left[\cos\left(\frac{\pi n}{2}\right) - (-1)^n\right]$$

, לא יישאר.

ג. $\left(\frac{2}{\pi}\right)^2$ ד. $\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi}{l} x\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$, $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$ ה. אפס.

3) א. 0.5 ב. הוכחה. ג. $\frac{1}{2} + \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \frac{4}{3\pi}$

ד. $P\left(0 \le x \le \frac{l}{2}\right) = \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t - \Delta\varphi\right)$, $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$.

4) $\lambda = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

אופרטורים הרמיטיים

סיכום כללי

גודל פיזיקאלי מדיד חייב להיות מספר ממשי .
כל הגדלים הפיזיקאלי מיוצגים ע״י אופרטורים הרמיטיים.

הגדרה:

$$\left(\hat{A}\Psi\right)^{*} = \Psi^{*}\hat{A}$$

לכל הפונקציות במרחב.

או:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^{*}\hat{A}\Psi_2 \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{A}\Psi_1\right)^{*}\Psi_2 \, \mathrm{d}x$$

תכונות של אופרטור הרמיטי:

1. ערך התוחלת של אופרטור הרמטי תמיד ממשי.
2. הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי תמיד ממשיים.
3. הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמטי הן אורתוגונליות.
4. הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי מהוות סט שלם.*

* אם ניתן לתאר את כל הפונקציות במרחב באמצעות קומבינציה לינארית של סט מסוים של פונקציות אז אותו סט נקרא סט שלם.

הפירוש הסטטיסטי המוכלל והסבר מסכם על צורת העבודה בתורת הקוונטים

סיכום כללי

הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי מהוות סט שלם של פונקציות (או בסיס). אפשר לכתוב כל פונקציית גל כקומבינציה לינארית של הבסיס העצמי של כל אופרטור.

כלומר, אם ϕ_n ו- λ_n הן הפונקציות העצמיות והערכים העצמיים של האופרטור $\hat{A}$

אז אפשר לרשום כל פונקציית גל בצורה: $\omega(x,t)=\sum \alpha_n \phi_n$.

$|\alpha_n|^2$ זה ההסתברות להיות במצב ϕ_n או ההסתברות למדוד את הערך λ_n.

הערכים המדידים היחידים של גודל מסוים הם הערכים העצמיים של האופרטור השייך לאותו גודל.

בשביל למצא את α_n:

$$\alpha_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^* \Psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

במקרה הרציף:

$$\lambda_n = \lambda(k)$$
$$\phi_n \to \phi(k)$$

$$\sum \alpha_n \phi_n \to \int_{-\infty}^{\infty} \alpha\,(k,\mathrm{t})\phi(k)\,\mathrm{d}k$$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha\,(k,\mathrm{t})\phi(k)\,\mathrm{d}k$$

$$|\alpha_n|^2 \to |\alpha(k,t)|^2\,\mathrm{d}k$$

שאלות

1) פונקציה משולשת

נתון חלקיק בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב L. כזכור, המצבים העצמיים עבור בור שכזה נתונים ע"י הפונקציות: $\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ והאנרגיות העצמיות הן: $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$. נתון שפונקציית הגל ההתחלתית בה הוכנה המערכת היא פונקציה משולשת מהצורה:

$$\psi(x,0) = \begin{cases} \frac{A}{L}x & for \quad 0 < x < \frac{L}{2} \\ A(1-\frac{x}{L}) & for \quad \frac{L}{2} < x < L \end{cases}$$

א. מצאו את A.

ב. מהי ההסתברות שבמדידת אנרגיית החלקיק ימדדו הערכים: E_1, E_2, E_3, E_4, E_5?

ג. חשבו את ערך התוחלת של אנרגיית החלקיק $\langle E \rangle$.

ייתכן ותזדקקו לטור הבא: $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\pi^2}{8}$.

2) פונקציית גאוסייאן ומעבר לתדר

פונקציית הגל (מנורמלת) של חלקיק חופשי ב-$t=0$ נתונה לפי:

$$\Psi(x, t=0) = (2\pi a^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}}$$

א. מצאו את פונקציית הגל של החלקיק במרחב התדר: $\Psi(k, t=0)$.

ב. מצאו את אי הודאות של מספר הגל של החלקיק Δk.

השתמשו ב:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2-bx-c}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2-4ac}{4a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\alpha x^2}dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

תשובות סופיות

1) א. $A=\sqrt{\frac{12}{11L}}$

ב. $P(E_1)=0.09\ ,\ P(E_3)=1.1\cdot10^{-3}\ ,\ P(E_5)=1.4\cdot10^{-4}\ ,\ P(E_2)=P(E_4)=0$

ג. $\langle E\rangle=\frac{6\hbar^2}{11mL^2}$

2) א. $\sqrt{2}\left(2\pi\varphi^2\right)^{\frac{1}{4}}e^{-ikx_0}e^{-a^2k^2}$ ב. $\sqrt{\frac{\pi}{2a^2}}$

יחס החילוף

סיכום כללי

יחס החילוף (או הקומוטטור) מוגדר להיות:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

יחס החילוף הוא אופרטור בפני עצמו.
אם סדר הפעולה של האופרטורים לא משנה אז יחס החילוף שלהם שווה לאפס ואם הסדר כן משנה אז הפעלה של יחס החילוף תיתן ערך מורכב כלשהו לאופרטורים שיחס החילוף שלהם מתאפס אנחנו קוראים חילופיים.
יחס החילוף של המיקום עם התנע:

$$\langle[\hat{x},\hat{p}_x]\rangle = i\hbar$$

אם האופרטורים $\hat{A}$ ו-$\hat{B}$ מתחלפים אז קיים סט של פונקציות עצמיות משותפות לשניהם ולהפך (אם הם לא מתחלפים אז לא ניתן למצא סט של פונקציות עצמיות משותפות).
אם שני אופרטורים מתחלפים אז ניתן למדוד את שניהם בו זמנית בדיוק אינסופי.
אם הם לא מתחלפים אז ניתן לרשום את יחס אי הודאות בניהם לפי:

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

שאלות

1) פירוק יחס חילוף מורכב

א. הראו כי: $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$

ב. הראו כי: $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$

ג. מצאו את $[\hat{x},\hat{p}^2]$ ובדקו האם אופרטור המיקום מתחלף עם ההמילטוניאן של חלקיק חופשי במימד אחד.

2) **הוכחת זהות**

הוכיחו כי: $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}]$.

תשובות סופיות

1) א-ב. הוכחה. ג. $2i\hbar\hat{P}$, לא מתחלף.

2) הוכחה.

משפט ארנפס

סיכום כללי

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

אם אופרטור מתחלף עם ההמילטוניאן אז ערך התוחלת של הגודל הפיזיקאלי קבוע בזמן.

שאלות

1) הקשרים הקלאסיים

א. הראו באמצעות משפט ארנפסט כי: $\langle p\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle$.

ב. הראו כי: $[\hat{p},U(\hat{x})] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial U}{\partial x}$.

ג. הראו באמצעות משפט ארנפסט כי: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle = -\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle$.

תשובות סופיות

1) הוכחה.

תרגילים נוספים

שאלות

1) התפתחות בזמן בבור אינסופי

נתון חלקיק בעל מסה m אשר כלוא בבור פוטנציאל אינסופי חד-מימדי בעל אורך L אשר מרכזו ב-$x=\frac{L}{2}$. פונקציית הגל של החלקיק ברגע $t=0$ הינה סופרפוזיציה של שני מצבים עצמיים של בור פוטנציאל אינסופי:

$$\psi(x,t=0)=A\left[\phi_1(x)+\phi_2(x)\right].$$

כאשר ϕ_1 הוא מצב היסוד (בעל אנרגיה E_1) ו-ϕ_2 הוא המצב המעורר הראשון (בעל אנרגיה E_2).

שני המצבים בעלי הסתברות זהה.

א. מצאו את הנרמול של פונקציית הגל.

ב. מצאו את $\psi(x,t)$. ודאו כי $\psi(x,t)$ מקיימת את משוואת שרדינגר.

ג. מצאו את $|\psi(x,t)|^2$, בטאו את פונקציית צפיפות ההסתברות כפונקציה סינוסיאדלית בזמן.

ד. חשבו את ערך התצפית של המקום. שימו לב כי ערך התצפית עושה אוסילציות בזמן. מהי תדירות האוסילציות?

ה. חשבו את ערך התצפית של התנע לפי הגדרה. הראו כי מתקיים: $\left(\langle p\rangle=m\frac{d}{dt}(\langle x\rangle)\right)$.

ו. חשבו את ערך התצפית של האנרגיה של החלקיק לפי הגדרה. הסבירו את תשובתכם.

ז. הניחו כי אי הודאות באנרגיה היא: $\Delta E=(E_2-E_1)$ והשתמשו בעיקרון אי הודאות של הייזנברג על מנת למצוא את Δt.
השוו לזמן המחזור של האוסילציות שמצאתם בסעיף ד' והסבירו.

תשובות סופיות

1) א. $A=\frac{1}{\sqrt{2}}$ ב. $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_1 e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+\phi_2 e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\right)$

ג. $\left|\psi(x,t)\right|^2=\frac{1}{2}\left(\left|\phi_1\right|^2+\left|\phi_2\right|^2+2\phi_1+\phi_2\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)\right)$

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

$\omega=\frac{E_2-E_1}{\hbar}=2\pi F$

ה. $\langle P\rangle=\frac{8\hbar}{3L}\sin\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)$

ו. $\langle E\rangle=\frac{1}{2}E_1+\frac{1}{2}E_2$, חישוב התוחלת של האנרגיה הוא ההסתברות להיות בכל מצב עצמי של האנרגיה כפול האנרגיה של המצב.

ז. $\Delta t\simeq\frac{\hbar}{2(E_2-E_1)}$