קוונטים 1: סיכום ודף נוסחאות

גרסה 1.0, יולי 2011

ברק שושני
baraksh@gmail.com | http://baraksh.co.il/

לא לשכוח לנרמל!!

1 אופרטורים

1.1 מדידות וערך התצפית

יהי $\hat{A}$ אופרטור הרמיטי המייצג גודל מדיד A, ויהיו $|\Psi_n\rangle$ הקטים העצמיים (המנורמלים) של $\hat{A}$. אנו מניחים כי לפני ש-A נמדד, המערכת נמצאת במצב שהוא צירוף לינארי (**סופרפוזיציה**) של הקטים העצמיים:

$$|\Phi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|\Phi\rangle$$

כאשר מבצעים את המדידה, המערכת "קורסת" לאחד מהמצבים העצמיים $|\Psi_n\rangle$ ותוצאת המדידה תהיה הערך העצמי λ_n המתאים. אין שום דרך לדעת מראש מה תהיה תוצאת המדידה, אך אנו יודעים כי ההסתברות לקבלת התוצאה λ_n היא $|\langle\Psi_n|\Phi\rangle|^2$.
ערך התצפית של A, המייצג את ממוצע המדידות, הוא:

$$\langle A\rangle \equiv \langle\Phi|\hat{A}|\Phi\rangle \equiv \int \Phi^*(x)\,\hat{A}\Phi(x)\,\mathrm{d}x$$

ערך התצפית של אופרטור הרמיטי הוא תמיד ממשי, וערך התצפית של אופרטור אנטי-הרמיטי הוא תמיד מדומה. אם ידועה לנו ההתפלגות של A, ניתן לחשב את ערך התצפית לפי הגדרת התוחלת:

$$\langle A\rangle \equiv \sum_n \lambda_n P(A=\lambda_n) = \sum_n \lambda_n |\langle\Psi_n|\Phi\rangle|^2$$

1.2 קומוטטורים וגדלים תואמים

נגדיר את **הקומוטטור** של שני אופרטורים כך:

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

שני גדלים מדידים A ו-B נקראים **תואמים** אם האופרטורים המייצגים שלהם מתחלפים, $[\hat{A},\hat{B}]=0$, ולא-תואמים אם $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$. אם A ו-B הם גדלים תואמים, ו-$|\Psi_n\rangle$ הם קטים עצמיים של $\hat{A}$, אז הייצוג של $\hat{B}$ לפי $|\Psi_n\rangle$ יהיה מטריצה אלכסונית. כלומר, הקט העצמי $|\Psi_n\rangle$ של $\hat{A}$ הוא גם קט עצמי של $\hat{B}$, עם הערך העצמי $\mu_n \equiv \langle\Psi_n|\hat{B}|\Psi_n\rangle$.
הקומוטטור מקיים את הזהויות הבאות:

$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger]$$

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$$

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}] = \hat{A}\hat{C}[\hat{B},\hat{D}] + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B} + [\hat{A},\hat{C}]\hat{D}\hat{B}$$

$$[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = 0 \Longrightarrow [f(\hat{A}),\hat{B}] = f'(\hat{A})[\hat{A},\hat{B}]$$

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$$

כמו כן, אם $\hat{A},\hat{B}$ הרמיטיים אז גם $\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]$ הרמיטי.

1.3 סטיית התקן ועקרון האי-וודאות

בהינתן גודל מדיד A, נגדיר את **סטיית התקן**:

$$\Delta A \equiv \sigma_A \equiv \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

אם A ו-B הם גדלים מדידים לא תואמים, אז מתקיים **עקרון האי-וודאות**:

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

במקרה של המיקום והתנע ושל האנרגיה והזמן, למשל, נקבל:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

כאשר את הגודל Δt יש להבין בתור הזמן שלוקח לערך התצפית של הגודל הנמדד Q להשתנות בסטיית תקן אחת.

1.4 המעריך של אופרטור

נגדיר את **המעריך** של אופרטור:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{1}{2}\hat{A}^2 + \cdots$$

לפי **נוסחת בייקר-קמפבל-האוסדורף** מתקיים:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \frac{1}{3!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right] + \cdots$$

עבור אופרטורים $\hat{A}$ ו-$\hat{B}$ אשר מתחלפים עם הקומוטטור שלהם, כלומר $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = [\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$, מתקיים: (הזהות האחרונה נקראת **נוסחת גלאובר**.)

$$[\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}] = [\hat{A},\hat{B}]\lambda\,\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}, \qquad \mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\,\hat{A}\,\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{A},\hat{B}]\lambda$$

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{B}}\,\mathrm{e}^{\hat{A}}\,\mathrm{e}^{[\hat{A},\hat{B}]}, \qquad \mathrm{e}^{\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}\,\mathrm{e}^{[\hat{A},\hat{B}]/2}$$

2 מכניקה קוונטית בממד אחד

2.1 אופרטורי המיקום והתנע

אופרטור המיקום הוא $\hat{x} \equiv x$. לאופרטור זה יש ספקטרום רציף, והפונקציה העצמית המתאימה לערך העצמי x' היא $\delta(x-x')$. אם נמדוד את המיקום של חלקיק במצב $|\Psi\rangle$, ההסתברות לקבל תוצאה בתחום $[a,b]$ תהיה:

$$\int_a^b |\langle x|\Psi\rangle|^2\,\mathrm{d}x = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$$

אופרטור התנע מוגדר כך:

$$\hat{p} \equiv -\mathrm{i}\,\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

גם לו יש ספקטרום רציף, והפונקציות העצמיות המנורמלות שלו (עבור ערכים עצמיים ממשיים בלבד) הן $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,px/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$. נשים לב כי מתקיימים יחס האורתונורמליות $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ ויחס השלמות $|f\rangle = \int |p\rangle\langle p|f\rangle\,\mathrm{d}p$. אנו רואים כי הפונקציות העצמיות מייצגות תנועה הרמונית עם אורך גל $\lambda = 2\pi\hbar/p$. ניתן להמיר גודל פיזיקלי קלאסי $Q(x,p)$, כאשר x הוא המיקום ו-p הוא התנע, לאופרטור קוונטי $\hat{Q}(\hat{x},\hat{p})$ באמצעות החלפת התנע p באופרטור התנע $\hat{p}$. אופרטורי המיקום והתנע מקיימים את **יחס החילוף הקנוני**:

$$[\hat{x},\hat{p}] \equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = \mathrm{i}\,\hbar$$

כמו כן, מתקיים הקשר $[f(\hat{x}),\hat{p}] = \mathrm{i}\,\hbar f'(\hat{x})$.

2.2 מרחבי המיקום והתנע

יהיו $|p\rangle$ הפונקציות העצמיות של $\hat{p}$. נגדיר:

$$\Phi(p,t) \equiv \langle p|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,px/\hbar}\,\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

זוהי **פונקציית הגל במרחב התנע**, והיא **טרנספורם פורייה** (ראו סעיף 4.1) של **פונקציית הגל במרחב המיקום** $\Psi(x,t)$. הטרנספורם עובד, כמובן, גם בכיוון ההפוך:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,px/\hbar}\,\Phi(p,t)\,\mathrm{d}p$$

ההסתברות לקבל תוצאה בתחום $[a,b]$ במדידת התנע תהיה:

$$\int_a^b |\langle p|\Phi\rangle|^2\,\mathrm{d}p = \int_a^b |\Phi(p,t)|^2\,\mathrm{d}p$$

ניתן להגדיר את **אופרטורי המיקום והתנע במרחב התנע** כך:

$$\hat{x} \equiv \mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial p}, \qquad \hat{p} \equiv p$$

והחישובים יהיו אנלוגיים לחלוטין לאלה שעשינו במרחב המיקום.

2.3 הזזות במרחב ובזמן

אם הפונקציה $\psi(x)$ ניתנת לפיתוח בטור טיילור, מתקיים:

$$\psi(x+x_0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\hat{p}x_0/\hbar}\,\psi(x)$$

לפיכך אופרטור התנע יוצר הזזות במרחב. בדומה:

$$\Psi(x,t+t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\hat{H}t_0/\hbar}\,\Psi(x,t)$$

לפיכך אופרטור האנרגיה יוצר הזזות בזמן. נגדיר $\hat{U} \equiv \exp\left(-\mathrm{i}\,\hat{H}t/\hbar\right)$, אז מתקיים:

$$\langle Q(t)\rangle = \langle\Psi(x,t)|\hat{Q}|\Psi(x,t)\rangle = \langle\Psi(x,0)|\hat{U}^{-1}\hat{Q}\hat{U}|\Psi(x,0)\rangle$$

המקרה השמאלי, בו התלות בזמן מגיעה מפונקציית הגל, נקרא **תמונת שרדינגר**; המקרה הימני, בו התלות בזמן מגיעה מהאופרטור, נקרא **תמונת הייזנברג**. בתמונת הייזנברג מתקיימת המשוואה:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{Q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{H},\hat{Q}(t)] + \frac{\partial\hat{Q}(t)}{\partial t}$$

2.4 משוואת שרדינגר

נתבונן בחלקיק בעל מסה m הנע בממד אחד בהשפעת פוטנציאל $V(x,t)$. **פונקציית הגל** $\Psi(x,t)$ של החלקיק היא הפתרון של **משוואת שרדינגר**:

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle, \qquad \mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\,\Psi$$

אם הפוטנציאל אינו תלוי ב-t ניתן, באמצעות הפרדת המשתנים $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$, לקבל את **משוואת שרדינגר הבלתי-תלויה בזמן**:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\,\psi = E\psi$$

לאחר שמצאנו את הפתרון $\psi(x)$, פונקציית הגל המלאה המתאימה תהיה $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,Et/\hbar}$. נשים לב כי מתקיים $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$, ובאופן כללי, כל ערך תצפית הוא קבוע בזמן, כי התלות בזמן מתבטלת כאשר מכפילים בצמוד. לפיכך פתרונות אלו מכונים **מצבים יציבים**. כמו כן ניתן לראות כי עבור פתרון כזה $\langle H\rangle = E$ ו-$\Delta H = 0$, כלומר, כל מדידה של האנרגיה תחזיר בוודאות את הערך E.
למשוואת שרדינגר הבלתי-תלויה בזמן יש אינסוף פתרונות $\psi_1(x),\psi_2(x),\ldots$ המתאימים לערכים שונים של אנרגיה $E_1,E_2,\ldots$. בהינתן תנאי התחלה $\Psi(x,0)$, נרשום אותו כצירוף לינארי של כל הפתרונות:

$$|\Psi(x,0)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n(x)\rangle\langle\psi_n(x)|\Psi(x,0)\rangle$$

כעת, כדי למצוא את פונקציית הגל המלאה פשוט נצמיד לכל פתרון את התלות בזמן, עם האנרגיה המתאימה:

$$|\Psi(x,t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n(x)\rangle\langle\psi_n(x)|\Psi(x,0)\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,E_nt/\hbar}$$

2.5 בור פוטנציאל אינסופי

הפוטנציאל של **בור פוטנציאל אינסופי** בתחום $[0,a]$ הוא:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

ברור כי $\psi(x) = 0$ מחוץ לבור. בתוך הבור, הפתרון הכללי הוא:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

מרציפות מתקיים בשפת הבור $\psi(0) = \psi(a) = 0$. מכאן, ומדרישת הנורמליזציה, נקבל:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

כאשר $n \in \mathbb{N}$. הפתרון ψ_1 נקרא **מצב היסוד**, והאחרים נקראים **מצבים מעוררים**.

2.6 האוסילטור ההרמוני

2.6.1 אופרטורי הסולם

הפוטנציאל של **אוסילטור הרמוני** הוא:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

נגדיר את **אופרטור היצירה** $\hat{a}_+$ ואת **אופרטור ההשמדה** $\hat{a}_-$ כך:

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x} \mp \mathrm{i}\,\hat{p})$$

אופרטורים אלה נקראים גם **אופרטורי הסולם**. נשים לב כי הם מקיימים את יחס החילוף $[\hat{a}_-,\hat{a}_+] = 1$. בנוסף, $\hat{a}_+$ הוא הצמוד ההרמיטי של $\hat{a}_-$, כלומר $\hat{a}_+^\dagger = \hat{a}_-$, ולהפך. לכן מסמנים לעתים $\hat{a} \equiv \hat{a}_-$ ו-$\hat{a}^\dagger \equiv \hat{a}_+$. כעת ניתן לרשום את ההמילטוניאן בצורה הבאה:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_\pm\hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2}\right)$$

ואז, אם פונקציית הגל $|\psi\rangle$ מקיימת את משוואת שרדינגר $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, נקבל:

$$\hat{H}(\hat{a}_\pm|\psi\rangle) = (E \pm \hbar\omega)(\hat{a}_\pm|\psi\rangle)$$

לפיכך, ברגע שידוע לנו פתרון אחד $|\psi\rangle$, נוכל לקבל ממנו פתרונות עם אנרגיה גבוהה ונמוכה יותר. **מצב היסוד** $|0\rangle$ הוא, בהצגת המיקום:

$$\langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

והוא מקיים $\hat{a}_-|0\rangle = 0 = \langle 0|\hat{a}_+$. ממנו ניתן ליצור את **המצבים המעוררים**:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n|0\rangle, \qquad E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

כמו כן מתקיים:

$$\hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \qquad \hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

(כדי לזכור את הנוסחאות, נשים לב כי תמיד המספר הגדול יותר מופיע בתוך השורש.)
לחישוב אינטגרלים עם $\hat{x}$ ו-$\hat{p}$ נוכל להשתמש בקשרים:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \qquad \hat{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

אלמנטי המטריצה אשר נובעים מקשרים אלה הם:

$$\langle n|\hat{x}|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{k+1}\delta_{n,k+1} + \sqrt{k}\delta_{n,k-1}\right)$$

$$\langle n|\hat{p}|k\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\sqrt{k+1}\delta_{n,k+1} - \sqrt{k}\delta_{n,k-1}\right)$$

בנוסף, מנוסחת גלאובר (סעיף 1.4) נקבל:

$$\mathrm{e}^{\gamma\hat{a}_-}\,\mathrm{e}^{\delta\hat{a}_+} = \mathrm{e}^{\gamma\hat{a}_- + \delta\hat{a}_+}\,\mathrm{e}^{\gamma\delta/2}, \qquad \mathrm{e}^{\gamma\hat{a}_+}\,\mathrm{e}^{\delta\hat{a}_-} = \mathrm{e}^{\gamma\hat{a}_+ + \delta\hat{a}_-}\,\mathrm{e}^{-\gamma\delta/2}$$

מכאן ניתן להראות כי:

$$\langle 0|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\hat{x}}\,|0\rangle = \exp\left(-\frac{\hbar k^2}{4m\omega}\right)\langle 0|0\rangle = \exp\left(-\frac{\hbar k^2}{4m\omega}\right)$$

לבסוף, באמצעות הצבת פתרון בצורת טור חזקות נוכל לקבל את הפתרון המפורש:

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}H_n(y)\,\mathrm{e}^{-y^2/2}$$

כאשר H_n הם **פולינומי הרמיט**, והגדרנו $y \equiv x\sqrt{m\omega/\hbar}$ (משתנה חסר יחידות). כפונקציה של y, הנורמליזציה פשוטה יותר:

$$\langle y|n\rangle = \psi_n(y) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^nn!}}H_n(y)\,\mathrm{e}^{-y^2/2}$$

וגם אופרטורי הסולם פשוטים יותר:

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y \mp \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\right), \qquad \hat{y} = \frac{\hat{a}_+ + \hat{a}_-}{\sqrt{2}}$$

2.6.2 מצבים קוהרנטיים

מצב קוהרנטי $|\alpha\rangle$ הוא קט עצמי של אופרטור ההשמדה:

$$\hat{a}_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \Longleftrightarrow \langle\alpha|\alpha^* = \langle\alpha|\hat{a}_+$$

כאשר $\alpha \in \mathbb{C}$. מצב זה מתאר, למשל, לייזר, ואי-הוודאות בו היא מינימלית. נגדיר את **אופרטור העתקה במרחב הפאזה** $\hat{D}(\alpha) \equiv \mathrm{e}^{\alpha\hat{a}_+ - \alpha^*\hat{a}_-}$. אופרטור זה הוא אוניטרי ומקיים $\hat{D}^\dagger(\alpha)\,\hat{a}_-\hat{D}(\alpha) = \hat{a}_- + \alpha$. בנוסף, $\hat{D}(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ כאשר $|\alpha\rangle$ הוא מצב קוהרנטי. כדי להראות זאת, יש להשתמש בקשר:

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\,\mathrm{e}^{\alpha\hat{a}_+}|0\rangle$$

טריק שימושי הוא:

$$\hat{a}_-f(\hat{a}_+)|0\rangle = [\hat{a}_-,f(\hat{a}_+)]|0\rangle = f'(\hat{a}_+)[\hat{a}_-,\hat{a}_+]|0\rangle = f'(\hat{a}_+)|0\rangle$$

כאשר השתמשנו בזהות מסעיף 1.2. ההסתברות שיהיו בדיוק n עירורים במצב $|\alpha\rangle$ היא:

$$|\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{\langle n\rangle^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-\langle n\rangle}$$

כאשר $\langle n\rangle = \langle\alpha|\hat{a}_+\hat{a}_-|\alpha\rangle = |\alpha|^2$. זוהי התפלגות פואסון. עבור שני מצבים קוהרנטיים $|\alpha\rangle,|\beta\rangle$ מתקיים:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \mathrm{e}^{-\left(|\alpha|^2 - 2\alpha^*\beta + |\beta|^2\right)/2}$$

2.7 החלקיק החופשי

הפוטנציאל של חלקיק חופשי הוא $V(x) \equiv 0$. משוואת שרדינגר מקבלת את הצורה:

$$\psi''(x) = -k^2\psi(x), \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

ופתרונה, לאחר שהוספנו את התלות בזמן, הוא:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}, \qquad \omega \equiv \frac{\hbar k^2}{2m}$$

כאשר **מספר הגל** k יכול לקבל גם ערכים שליליים: $k>0$ הוא גל שנע ימינה ואילו $k<0$ הוא גל שנע שמאלה. אורך הגל הוא $\lambda = 2\pi/|k|$ והתנע שלו הוא $p = \hbar k$ (**יחס דה-ברוי**).
פונקציית הגל שקיבלנו לא ניתנת לנרמול, ולפיכך חלקיק חופשי לא יכול להתקיים במצב יציב; במילים אחרות, אין חלקיק חופשי בעל אנרגיה מוגדרת. הפתרון הכללי למשוואת שרדינגר יהיה **חבילת גלים - צירוף לינארי רציף** של הפתרונות לעיל, עבור כל הערכים האפשריים של k:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}\,\mathrm{d}k$$

בהינתן $\Psi(x,0)$, ניתן למצוא את המקדמים $\phi(k)$ באמצעות טרנספורם פורייה:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,kx}\,\mathrm{d}x$$

נשים לב כי **מהירות הפאזה** היא $v_{\mathrm{ph}} = \omega/k$ ואילו **מהירות החבורה**, המהירות שמתאימה למהירות של חלקיק קלאסי, היא $v_{\mathrm{gr}} = \mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k = 2v_{\mathrm{ph}}$. כמו כן, מתקיים **יחס האורתוגונליות הרציף**:

$$\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\,\psi_{k'}(x)\,\mathrm{d}x = 2\pi\delta(k-k')$$

2.8 פוטנציאל פונקציית דלתא

הפתרונות למשוואת שרדינגר מתחלקים לשני סוגים. כאשר האנרגיה E קטנה מהפוטנציאל ב-$+\infty$ <u>וגם</u> ב-$-\infty$, החלקיק יהיה **במצב קשור**; כאשר היא גדולה מהפוטנציאל ב-$+\infty$ <u>או</u> ב-$-\infty$, החלקיק יהיה **במצב פיזור**. רוב הפוטנציאלים מתאפסים באינסוף, לכן $E<0$ מתאימה למצב קשור ו-$E>0$ למצב פיזור. בור הפוטנציאל והאוסילטור ההרמוני הם שני מקרים בהם הפוטנציאל הוא אינסופי באינסוף, לכן נקבל בהם מצבים קשורים בלבד; פוטנציאל החלקיק החופשי הוא אפס בכל מקום, לכן נקבל בו מצבי פיזור בלבד. פוטנציאל פונקציית דלתא, בו נעסוק בסעיף זה, ובור הפוטנציאל הסופי, בו נעסוק בסעיף הבא, מניבים את שני סוגי המצבים.
פוטנציאל פונקציית דלתא הוא:

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

כאשר $\alpha > 0$. בפתרון משוואת שרדינגר נשתמש בשני תנאי שפה. הראשון הוא ש-$\psi(x)$ חייבת להיות רציפה תמיד, גם ב-$x=0$. הנגזרת $\psi'(x)$ חייבת להיות רציפה בכל נקודה בה הפוטנציאל סופי, לכן אין תנאי רציפות בנקודה $x=0$, אך באמצעות אינטגרציה של משוואת שרדינגר ניתן להראות כי הקפיצה בנקודת האי-רציפות היא:

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

כאשר נפתור את משוואת שרדינגר עבור $E<0$ נקבל מצב קשור אחד בלבד:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\exp\left(-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|\right), \qquad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

כאשר נפתור אותה עבור $E>0$ נקבל:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,kx} & x<0 \\ F\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,kx} + G\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,kx} & x>0 \end{cases}$$

כאשר $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$. מהרציפות של $\psi(x)$ ב-$x=0$ נקבל $A+B = F+G$, ומהקפיצה בנקודת האי-רציפות של הנגזרת נקבל:

$$F - G = A(1+2\mathrm{i}\,\beta) - B(1-2\mathrm{i}\,\beta)$$

כאשר $\beta \equiv m\alpha/\hbar^2k$. נשים לב כי $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,kx}$ מתאים לפונקציית גל הנעה <u>ימינה</u>, ואילו $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,kx}$ מתאים לפונקציית גל הנעה <u>שמאלה</u>. נניח כי החלקיק מגיע משמאל, ונקבע $G=0$. אז A היא אמפליטודת הגל הנכנס משמאל (**הגל הפוגע**), B היא אמפליטודת הגל החוזר שמאלה (**הגל המוחזר**) ו-F היא אמפליטודת הגל אשר ממשיך ימינה (**הגל המועבר**). מתנאי השפה נקבל:

$$B = \frac{\mathrm{i}\,\beta}{1-\mathrm{i}\,\beta}A, \qquad F = \frac{1}{1-\mathrm{i}\,\beta}A$$

ההסתברות שהחלקיק יוחזר ניתנת ע"י **מקדם ההחזרה**:

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+2\hbar^2E/m\alpha^2}$$

וההסתברות שהוא יועבר ניתנת ע"י **מקדם ההעברה**:

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+m\alpha^2/2\hbar^2E}$$

כמובן, $R+T=1$, וככל שהאנרגיה גבוהה יותר כך גדולה ההסתברות שהחלקיק יועבר.
נתבונן כעת **במחסום פונקציית דלתא**:

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

מאחר שהאנרגיה E חייבת להיות גדולה יותר מהערך המינימלי של $V(x)$, לא קיים מצב קשור. במצב פיזור, מקדמי ההחזרה וההעברה לא משתנים. אנו רואים כי במכניקת הקוונטים, בניגוד למכניקה הקלאסית, החלקיק יכול לעבור דרך המחסום האינסופי (ובמקרה הכללי, דרך מחסום סופי, אפילו אם $E < V_{\max}$). תופעה זו נקראת **מנהור**. בדומה, אנו רואים כי אפילו אם $E > V_{\max}$ יש אפשרות שהחלקיק יוחזר.

2.9 בור פוטנציאל סופי

הפוטנציאל הוא:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

כאשר $V_0 > 0$. כמו בפוטנציאל פונקציית דלתא, גם כאן קיימים מצבים קשורים ($E<0$) ומצבי פיזור ($E>0$). עבור מצבים קשורים, פתרון משוואת שרדינגר הוא:

$$\psi(x) = \begin{cases} B\,\mathrm{e}^{\kappa x} & x < -a \\ C\sin(\ell x) + D\cos(\ell x) & -a < x < a \\ F\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & x > a \end{cases}$$

כאשר:

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \qquad \ell \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

מכיוון שהפוטנציאל הוא סימטרי, ניתן להניח שהפתרונות הם זוגיים או אי-זוגיים. <u>במקרה הזוגי</u> נקבל:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi(-x) & x<0 \\ D\cos(\ell x) & 0<x<a \\ F\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & x>a \end{cases}$$

$$D = \frac{1}{\sqrt{a+1/\kappa}}, \qquad F = \frac{\mathrm{e}^{\kappa a}\cos(\ell a)}{\sqrt{a+1/\kappa}}$$

מתנאי השפה על ψ ו־ψ' נקבל $\kappa = \ell\tan(\ell a)$. נגדיר $z \equiv \ell a$ ו־$z_0 \equiv a\sqrt{2mV_0}/\hbar$, ונקבל $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$. זוהי משוואה טרנסנדנטלית עבור z (ולכן עבור E), אותה ניתן לפתור נומרית. אם z_0 גדול מאוד, הפתרונות יהיו בקירוב $z_n \approx n\pi/2$, ונקבל:

$$E_n + V_0 \approx \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m\,(2a)^2}$$

המשמעות היא שהאנרגיה מעל תחתית הבור זהה לאנרגיה של בור פוטנציאל אינסופי ברוחב $2a$. עם זאת, ל־V_0 סופי יש רק מספר סופי של מצבים קשורים. כעת, כאשר z_0 קטן, נקבל פחות ופחות מצבים קשורים, עד שלבסוף (כאשר $z_0 < \pi/2$) רק אחד מהם ישרוד.

במקרה האי־זוגי נקבל:

$$\psi(x) = \begin{cases} -\psi(-x) & x < 0 \\ D\sin(\ell x) & 0 < x < a \\ F\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & x > a \end{cases}$$

מתנאי השפה נקבל $\kappa = -\ell\cot(\ell a)$ ולכן $\cot z = -\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$. אם z_0 גדול מאוד, נקבל את אותם ערכי אנרגיה אותם מצאנו למעלה (אך הפעם עבור n זוגי). אם $z_0 < \pi/2$, לא יהיה מצב קשור.

עבור מצבי פיזור ($E > 0$) נקבל, בהנחה כי לא מגיע גל נכנס מימין:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,kx} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,kx} & x < -a \\ C\sin(\ell x) + D\cos(\ell x) & -a < x < a \\ F\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,kx} & x > a \end{cases}$$

כאשר $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$. A היא האמפליטודה הפוגעת, B המוחזרת, ו־F המועברת. מתנאי השפה נקבל:

$$B = \mathrm{i}\,\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}\left(\ell^2 - k^2\right)F$$

$$F = \frac{\mathrm{e}^{-2\,\mathrm{i}\,ka}A}{\cos(2\ell a) - \mathrm{i}\left(k^2 + \ell^2\right)\sin(2\ell a)/2k\ell}$$

ומקדם ההעברה יהיה:

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E\,(E+V_0)}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\,(E+V_0)}\right)$$

האנרגיות בהן $T = 1$ (העברה מושלמת) הן בדיוק האנרגיות שמצאנו למעלה.

הערה: הצורה הנכונה לחשב מקדמי העברה והחזרה היא לחשב את היחס בין צפיפות זרם ההסתברות (סעיף 3.6) של הגלים הנעים בכיוונים הרלוונטיים.

3 מכניקה קוונטית בשלושה ממדים

3.1 משוואת שרדינגר בשלושה ממדים

בשלושה ממדים אופרטור התנע יהיה $\mathbf{p} = -\mathrm{i}\,\hbar\boldsymbol{\nabla}$, ולכן **משוואת שרדינגר התלויה בזמן** תהיה:

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

ההסתברות למצוא את החלקיק באלמנט נפח $\mathrm{d}^3\mathbf{r} \equiv \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ תהיה $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}$, ותנאי הנורמליזציה יהיה:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \iiint |\Psi|^2\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} = 1$$

אם הפוטנציאל בלתי־תלוי בזמן, תהיה מערכת שלמה של מצבים יציבים:

$$\Psi_n(\mathbf{r},t) = \psi_n(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,E_n t/\hbar}$$

כאשר פונקציית הגל המרחבית ψ_n מקיימת את **משוואת שרדינגר הבלתי־תלויה בזמן**:

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

הפתרון הכללי למשוואת שרדינגר התלויה בזמן יהיה, לפיכך:

$$|\Psi(\mathbf{r},t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}|\psi_n(\mathbf{r})\rangle\langle\psi_n(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r},0)\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,E_n t/\hbar}$$

יחסי החילוף הקנוניים יהיו:

$$[\hat{r}_i,\hat{p}_j] = -[\hat{p}_i,\hat{r}_j] = \mathrm{i}\,\hbar\delta_{ij}, \qquad [\hat{r}_i,\hat{r}_j] = [\hat{p}_i,\hat{p}_j] = 0$$

ועקרון האי־וודאות יהיה:

$$\Delta r_i\Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2}$$

כאשר אין הגבלה על $\Delta r_i\Delta p_j$. **ממשפט ארנפסט** (סעיף 3.7) נסיק:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\mathbf{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle\mathbf{p}\rangle, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\mathbf{p}\rangle = \langle-\boldsymbol{\nabla}V\rangle$$

3.2 חלקיק בתיבה

חלקיק מצוי בפוטנציאל:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & x,y,z \in [0,a] \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

באמצעות הפרדת משתנים במשוואת שרדינגר בקואורדינטות קרטזיות, נקבל את הפונקציות העצמיות:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\sin\left(\pi n_x\frac{x}{a}\right)\sin\left(\pi n_y\frac{y}{a}\right)\sin\left(\pi n_z\frac{z}{a}\right)$$

עם האנרגיות העצמיות:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

3.3 הפרדת משתנים בקואורדינטות כדוריות

בקואורדינטות כדוריות, הלפלסיאן הוא:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

נניח כי הפוטנציאל תלוי רק במרחק מהראשית, $V = V(r)$. נבצע הפרדת משתנים $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi)$ ונקבל את המשוואות:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right)R = l\,(l+1)\,R$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = -l\,(l+1)\,Y$$

כאשר l הוא קבוע ההפרדה. עבור המשוואה הזוויתית נבצע שוב הפרדת משתנים $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$ ונקבל את המשוואות:

$$\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left(l\,(l+1)\sin^2\theta - m^2\right)\Theta = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} = -m^2\Phi$$

כאשר m הוא קבוע ההפרדה. הפתרון למשוואה האחרונה הוא $\Phi(\phi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,m\phi}$ כאשר $m \in \mathbb{Z}$ (מדרישת המחזוריות). הפתרון למשוואה עבור Θ הוא $\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos\theta)$, כאשר P_l^m היא **פונקציית לג'נדר המוכללת**. בסה"כ הפתרון הזוויתי יהיה בצורת **הרמוניות כדוריות** $Y_l^m(\theta,\phi)$.

בניגוד למשוואה הזוויתית, המשוואה הרדיאלית תלויה בפוטנציאל $V(r)$. נפשט אותה:

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right) + \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right)R = 0$$

לחלופין, נבצע בה החלפת משתנים $u(r) \equiv rR(r)$ ונקבל את המשוואה:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\,(l+1)}{r^2}\right)u = Eu$$

נשים לב כי משוואה זו זהה למשוואת שרדינגר החד־ממדית, עם **הפוטנציאל האפקטיבי**:

$$V_{\text{eff}}(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\,(l+1)}{r^2}$$

אם כן, בהצגת המקום, פונקציית הגל הכללית ביותר תהיה:

$$\langle\mathbf{r}|E,l,m\rangle = \Psi_{E,l,m}(\mathbf{r},t) = R_{E,l}(r)\,Y_l^m(\theta,\phi)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,Et/\hbar}$$

כאשר תנאי הנורמליזציה הוא: ($\mathrm{d}\Omega \equiv \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$)

$$\begin{aligned}\langle E,l,m|E,l,m\rangle &= \iiint\left|R_{E,l}(r)\,Y_l^m(\theta,\phi)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,Et/\hbar}\right|^2\mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &= \int_0^\infty|R_{E,l}(r)|^2\,r^2\,\mathrm{d}r\iint_{S^2}|Y_l^m(\theta,\phi)|^2\,\mathrm{d}\Omega = 1\end{aligned}$$

3.4 בור פוטנציאל כדורי

נתבונן בפוטנציאל:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases}$$

עבור $r > a$, פונקציית הגל מתאפסת. עבור $r \leq a$, נציב במשוואה הרדיאלית ונקבל:

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} = \left(\frac{l\,(l+1)}{r^2} - k^2\right)u, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

פתרון המשוואה הוא $u(r) = Arj_l(kr)$, כאשר j_l הן **פונקציות בסל הכדוריות**. למעשה, גם פונקציות נוימן הכדוריות $n_l(kr)$ פותרות את המשוואה, אך הן מתבדרות בראשית ולכן נפסול אותן. אם $\beta_{n,l}$ היא האפס ה־n של פונקציית בסל ה־l, נקבל מתנאי השפה $R(a) = 0$:

$$k = \frac{1}{a}\beta_{n,l}, \qquad E_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{n,l}^2$$

ופונקציית הגל תהיה:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = A_{n,l}\,j_l\left(\beta_{n,l}\frac{r}{a}\right)Y_l^m(\theta,\phi)$$

3.5 תנע זוויתי

3.5.1 אופרטור התנע הזוויתי

אופרטור התנע הזוויתי של חלקיק ביחס לראשית הצירים הוא:

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r}\times\mathbf{p} \equiv -\mathrm{i}\,\hbar\,(\hat{\mathbf{r}}\times\boldsymbol{\nabla})$$

הרכיבים מקיימים את יחסי האי־וודאות:

$$\Delta L_x\Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_z\rangle\right|, \quad \text{etc.}$$

רכיבי התנע הזוויתי אינם תואמים (סעיף 1.2), ולכן אין מצבים שהם פונקציות עצמיות של L_x וגם של L_y (למשל). לעומת זאת, ריבוע התנע הזוויתי הכולל:

$$\hat{L}^2 \equiv |\hat{\mathbf{L}}|^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

מתחלף עם $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ ו־$\hat{L}_z$:

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x] = [\hat{L}^2,\hat{L}_y] = [\hat{L}^2,\hat{L}_z] = 0$$

למעשה, ריבוע התנע זוויתי מתחלף עם וקטור התנע הזוויתי כולו: $[\hat{L}^2,\hat{\mathbf{L}}] = \mathbf{0}$. נגדיר $\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\,\hat{L}_y$, אז מתקיים:

$$[\hat{L}_z,\hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm, \qquad [\hat{L}^2,\hat{L}_\pm] = 0$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \qquad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2\,\mathrm{i}}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_\pm\hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z$$

3.5.2 הפונקציות העצמיות

בקואורדינטות כדוריות, הגרדיאנט הוא:

$$\boldsymbol{\nabla} = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

(כאן $\hat{\mathbf{r}},\hat{\boldsymbol{\theta}},\hat{\boldsymbol{\phi}}$ הם וקטורי יחידה, לא אופרטורים). לכן אופרטור התנע הזוויתי הוא:

$$\hat{\mathbf{L}} = -\mathrm{i}\,\hbar\,(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\nabla}) = -\mathrm{i}\,\hbar\left(\hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

למציאת הפונקציות העצמיות נדרוש $\hat{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2 l\,(l+1)|l,m\rangle$ ו־$\hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$, ונקבל את המשוואה הזוויתית מסעיף 3.3. לפיכך ההרמוניות הכדוריות $Y_l^m(\theta,\phi)$ הן הפונקציות העצמיות $|l,m\rangle$.

3.5.3 ייצוג כמטריצות

עבור $l = 1$, נסמן:

$$|1,+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |1,0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |1,-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

אז ניתן לרשום כל פונקציית גל בצורה:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_{+1} \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix} = c_{+1}|1,+1\rangle + c_0|1,0\rangle + c_{-1}|1,-1\rangle$$

למציאת ייצוגי המטריצות של אופרטורי התנע הזוויתי למיניהם, נשתמש בנוסחה לאלמנט מטריצה $M_{m',m} = \langle 1,m'|\hat{A}|1,m\rangle$ ונקבל:

$$\hat{L}_+ = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{L}_- = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{L}_y = \frac{\mathrm{i}\,\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{L}^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3.5.4 אופרטורי המיקום והתנע בסימון וקטורי

$$\hat{L}^2 = \hat{r}^2\hat{p}^2 - (\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2 + \mathrm{i}\,\hbar\,(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})$$

$$\hat{p}^2 \equiv |\mathbf{p}|^2 = -\hbar^2\nabla^2, \qquad \mathbf{r}\cdot\mathbf{p} = -\mathrm{i}\,\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\mathbf{r}\cdot\mathbf{p} - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = [\mathbf{r},\mathbf{p}] = \sum_{n=1}^{3}[\hat{r}_n,\hat{p}_n] = 3\,\mathrm{i}\,\hbar$$

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = -\mathrm{i}\,\hbar\left(r\frac{\partial}{\partial r} + 3\right)$$

3.6 צפיפות זרם ההסתברות

צפיפות ההסתברות מוגדרת כך:

$$\rho(\mathbf{r},t) \equiv |\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$$

צפיפות זרם ההסתברות מוגדרת כך:

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2m}\left(\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi\right) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi\right)$$

ומתקיימת **משוואת הרציפות**:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla^2\Psi^* - \Psi^*\nabla^2\Psi\right) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j}$$

3.7 המשפט הוויריאלי

עבור גודל מדיד Q מתקיים **משפט ארנפסט**:

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

בפרט, אם $\hat{Q}$ אינו תלוי במפורש בזמן והוא תואם ל־$\hat{H}$, אז $\langle Q\rangle$ יהיה גודל קבוע. חלקיק בעל מסה m נתון תחת השפעת פוטנציאל מרכזי $V(r)$. החלקיק מצוי במצב עצמי קשור $|E,l,m\rangle$ של האנרגיה ושל התנע הזוויתי. נגדיר את האופרטור ההרמיטי $\hat{G} \equiv \mathbf{r}\cdot\mathbf{p} + \mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = -\mathrm{i}\,\hbar\left(2r\frac{\partial}{\partial r} + 3\right)$, אז לפי משפט ארנפסט מתקיים עבור מצב כללי כלשהו:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle G\rangle = 4\left\langle\frac{\hat{p}^2}{2m}\right\rangle - 2\left\langle r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle$$

בפרט, עבור המצב העצמי $|E,l,m\rangle$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle G\rangle = \langle E,l,m|\hat{G}|E,l,m\rangle = 0$$

ומכאן נקבל את **המשפט הוויריאלי**:

$$2\langle T\rangle = 2\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle = \left\langle r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle = \langle\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V\rangle$$

כאשר T היא האנרגיה הקינטית, ואופרטור האנרגיה הקינטית הוא $\hat{T} \equiv \hat{p}^2/2m$.

3.8 הצגת התנע

ניתן להגדיר את **הצגת התנע בשלושה ממדים** של המצב $|\psi\rangle$ באמצעות טרנספורם פורייה, כך:

$$\langle\mathbf{p}|\psi\rangle \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar}\langle\mathbf{r}|\psi\rangle\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}$$

למשל, הצגת התנע של מצב היסוד של אטום המימן היא:

$$\langle\mathbf{p}|1,0,0\rangle = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2}\left(1 + \left(\frac{ap}{\hbar}\right)^2\right)^{-2}$$

3.9 אוסילטור הרמוני איזוטרופי

עבור אוסילטור הרמוני בשלושה ממדים, בעל הפוטנציאל $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$, ניתן לבצע הפרדת משתנים בקואורדינטות קרטזיות ולקבל שלושה אוסילטורים הרמוניים חד־ממדיים בלתי־תלויים. לפיכך האנרגיות המותרות יהיו:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n \equiv n_x + n_y + n_z$$

והניוון של כל רמת אנרגיה יהיה:

$$\binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

3.10 ספין

הספין הוא התנע הזוויתי הפנימי של החלקיק. **אופרטור הספין** הוא:

$$\mathbf{S} = \left(\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z\right)$$

ומתקיים:

$$[\hat{S}_x,\hat{S}_y] = \mathrm{i}\,\hbar\hat{S}_z, \qquad [\hat{S}_y,\hat{S}_z] = \mathrm{i}\,\hbar\hat{S}_x, \qquad [\hat{S}_z,\hat{S}_x] = \mathrm{i}\,\hbar\hat{S}_y$$

$$\hat{S}^2|s,m\rangle = \hbar^2 s\,(s+1), \qquad \hat{S}_z|s,m\rangle = \hbar m|s,m\rangle$$

$$\hat{S}_\pm|s,m\rangle = \hbar\sqrt{s\,(s+1) - m\,(m\pm 1)}\,|s,m\pm 1\rangle$$

$$\hat{S}_\pm \equiv \hat{S}_x \pm \mathrm{i}\,\hat{S}_y, \qquad \hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2}, \qquad \hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2\,\mathrm{i}}$$

בניגוד לתנע הזוויתי המסלולי, הפעם המצבים העצמיים אינם הרמוניות כדוריות (או בכלל, פונקציות של θ ו־ϕ) ו־s ו־m יכולים לקבל גם ערכים חצי־שלמים, $s = 0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\ldots$ ו־$m = -s,-s+1,\ldots,s-1,s$.

כאשר $s = 1/2$ נקבל שני מצבים, **ספין למעלה** ($m = +1/2$) **וספין למטה** ($m = -1/2$), אותם נסמן באמצעות וקטורים:

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

אופרטורי הספין יהיו מטריצות, $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$, כאשר $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ הן **מטריצות פאולי**. בנוסף:

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

נשים לב כי $|\uparrow\rangle$ ו־$|\downarrow\rangle$ הם מצבים עצמיים של $\hat{S}_z$. המצבים העצמיים של $\hat{S}_x$ ו־$\hat{S}_y$ הם:

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$|\uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

חלקיק טעון מסתובב יוצר דיפול מגנטי. **מומנט הדיפול המגנטי**, $\boldsymbol{\mu}$, הוא פרופורציונלי לספין $\mathbf{S}$: $\boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{S}$, כאשר γ נקרא **היחס הגירומגנטי**. ההמילטוניאן יהיה $\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = -\gamma\mathbf{B}\cdot\mathbf{S}$.

4 נספחים

4.1 טרנספורם פורייה

טרנספורם פורייה של פונקציית הגל $\psi(x)$ ממרחב המיקום x למרחב התנע p הוא:

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \mathcal{F}\{\psi(x)\}(p) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,px/\hbar}\,\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

ומתקיימות התכונות:

$$\tilde{\psi}(p - p_0) = \mathcal{F}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,p_0x/\hbar}\,\psi(x)\right\}(p)$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,px_0/\hbar}\,\tilde{\psi}(p) = \mathcal{F}\{\psi(x - x_0)\}(p)$$

$$\mathcal{F}\left\{\psi^{(n)}(x)\right\}(p) = \left(\frac{\mathrm{i}\,p}{\hbar}\right)^n\tilde{\psi}(p)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathcal{F}\{1\}(x - x_0) = \delta(x - x_0)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\tilde{\psi}(p)|^2\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1$$

4.2 סימון לוי־צ'יוויטה

$$\epsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} +1 & ijk \in \{123,231,312\} \\ -1 & ijk \in \{132,321,213\} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} = \frac{(i-j)(k-i)(j-k)}{2}$$

$$\det\mathbf{A} = \sum_{i,j,k}\epsilon_{ijk}A_{1i}A_{2i}A_{3i}, \qquad \mathbf{a}\times\mathbf{b} = \sum_{i,j,k}\epsilon_{ijk}\hat{\mathbf{e}}_i a_j b_k$$

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix}$$

$$\sum_i\epsilon_{ijk}\epsilon_{inm} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}, \qquad \sum_{i,j}\epsilon_{ijm}\epsilon_{ijn} = 2\delta_{mn}$$