חלקיק קלאסי במימד 1

בשיעורים הקרובים נעסוק במספר דוגמאות פשוטות יחסית לפתרון משוואת שרדינגר עבור חלקיק במימד 1:
המרחב הוא ציר ה-x, ונחפש פתרונות ל-$\psi(x,t)$.
משוואת שרדינגר:

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

- נתחיל מהבנאה של חלקיק חופשי: $V(x)=0$. ראינו כבר מהם הפתרונות של משוואת שרדינגר הסטציונרית - הווקטורים העצמיים של $\hat{p}$

$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ עם ע"ע $p=\hbar k$.

$$\Rightarrow \hat{H}\psi_k = E_k\psi_k, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

הערה: מה נקבל אם הפוטנציאל לא אפס אבל קבוע $V(x)=V_0$?
- תשובה: אופי הפתרונות לא ישתנה - ע"י העברת אגף הפוטנציאל אל נקבל

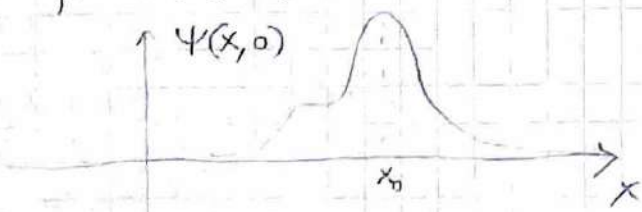
$$\boxed{\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = (E-V_0)\psi} \quad (*)$$

$\Leftarrow$ עדיין הפתרונות יהיו מהצורה ψ_k אבל האנרגיה מוכפלת בקבוע

$$E_k = V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

נשים לב שלמשוואה (*) יש פתרונות עם k ממשי רק בתנאי ש- $E_k > V_0$ (כי אגף שמאל חיובי). עקרונית, ל- $E < V_0$ יש פתרונות עם k מדומה $\Leftarrow$ $e^{\pm\kappa x}$ כאשר $\kappa = ik$.
אולם לא פונקציות ניתנות לנירמול במרחב אינסופי (מתבדרות ב- $x \to \pm\infty$).
אבל אם קטע סופי עם תנאי שפה מסוימים בהחלט אפשר למצוא פתרונות אלה - אלים בעתיד או היפרבוליים.

- נניח עכשיו שאנחנו מכינים חבילת גלים כלשהי, הנתונה פונקציה של מומנטה בזמן $t=0$:



משחררים אותה לתוך חופשי כו $V(x)=0$, ונשאל איך היא תתפתח עם הזמן? נוח לפתור את הבעיה בעזרת פונקציות גלאות

$\psi_k(x,t) = \psi_k(x) e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}}$, $\hat{H}$ של המצבים. עבור כל k,

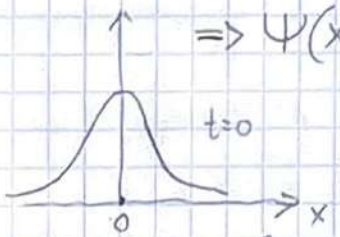
$$\Rightarrow \quad \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} a(k,0) e^{ikx} e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m}t}$$

כאשר המקדמים $a(k,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \psi(x,0) e^{-ikx}$

המקדמים הם, כל אחד לעצמו קובע את מקדמי הפיתוח $a(k,0)$ בצמן ההתחלתי, ואז האינטגרל על k נותן את הפ' הגלים בצמן לכל t.

- נראה בדוגמא הקונקרטית לעיל, כאשר תבנית הגלים שמבנים היא גאוסיאן (ממוקם סביב $x=0$) עם רוחב σ_0.

$$\Rightarrow \psi(x,0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_0^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_0^2}} \qquad \left[\int dx |\psi|^2 = 1\right]$$



נחשב את טרנספורם הפורייה (המקדמים $a(k,0)$):

$$a(k,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{1}{2\pi\sigma_0^2}\right)^{1/4} e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_0^2} - ikx\right)} =$$

$$\overset{\text{בשלמות ריבוע באקספוננט}}{=} \left(\frac{1}{(2\pi)^3\sigma_0^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{1}{4\sigma_0^2}(x + i2\sigma_0 k)^2} e^{-\sigma_0^2 k^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{a(k,0) = \left(\frac{1}{(2\pi)^{3/4}\sigma_0^{1/2}} (4\pi\sigma_0^2)^{1/2} e^{-\sigma_0^2 k^2}\right) = \left(\frac{2\sigma_0^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\sigma_0^2 k^2}}$$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{\sigma_0^2}{2\pi^3}\right)^{1/4} \int dk\, \underbrace{e^{-\sigma_0^2 k^2} e^{-\frac{i\hbar t}{2m}k^2}}_{e^{-\sigma^2(t)k^2}} e^{ikx}$$

$$\sigma^2(t) \equiv \sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m}$$

שוב נוכל להשתמש בנוסחת האינטגרל הגאוסיאני לקבל

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

(*) נעבור לייצוג מומנטום:

(41)

$$\boxed{\Psi(x,t)=\left(\frac{1}{2\pi\sigma^2(t)}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2(t)}}}$$

- לפאזה, נשמרה צורת הגאוסיאן כאשר הרוחב השתנה $\sigma_0 \leftarrow \sigma(t)$, כלומר הרוחב משתנה עם הזמן. אבל נשים לב ש- $\sigma(t)$ הוא ביטוי מהרוב. כדי לחלץ מכאן תוצאה עם משמעות פיזיקלית, צריך להסתכל על צפיפות ההסתברות

$$\rho(x,t)=\underbrace{|\Psi(x,t)|^2}_{4*4}=\left(\frac{1}{2\pi|\sigma(t)|^2}\right)^{1/2} e^{-\frac{x^2}{4}\left[\frac{1}{\sigma(t)}+\frac{1}{(\sigma^*(t))^2}\right]}$$

$$|\sigma(t)|^2=\left(\sigma_0^4+\frac{\hbar^2t^2}{(2m)^2}\right)^{1/2} \qquad \frac{1}{\sigma^2}+\frac{1}{(\sigma^*)^2}=\frac{2\sigma_0^2}{|\sigma(t)|^4}$$

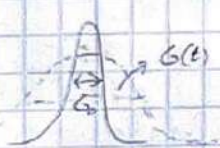
$$\Longrightarrow \rho(x,t)=\left[\frac{1}{(2\pi)\left(\sigma_0^4+\frac{\hbar^2t^2}{(2m)^2}\right)}\right]^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2(\tilde{\sigma}(t))^2}}$$

$$\boxed{\tilde{\sigma}^2(t)=\sigma_0^2+\left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0}\right)^2}$$

כאשר הרוחב האפקטיבי מקיים

כלומר, החבילה מתרחבת עם הזמן

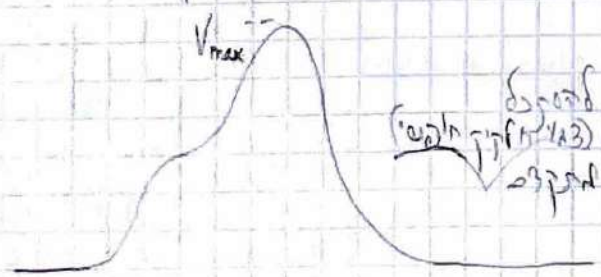
(מוך שמירת תנאי הנרמול).



עתה תוצאה אינטואיטיבית כזאת שפונקציית הגל שואפת להתקבץ על מקום עצמו אל אופרטור התנע $\hat{p}$ המאפיין את המרחב ההלפסי. למקום האסימפטוטי ב- $t\to\infty$ אי-ודאות אינסופית במיקום x.

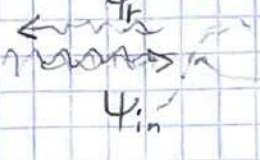
פוטנציאל חד-מימדי $V(x)\neq 0$

לפני שנכנס בדיוק לאותו סמלים, יש כמה דברים כלליים שאפשר להגיד על הפונקציות הקבועות וסמלרום האנרגיה של מערכות שרירותית עם פוטנציאל $V(x)\neq 0$. נבין בעיה מעל פוטנציאלים:



(1) מחסום פוטנציאל: אנשים לדבר על (בעיה לקיר הלפסי) עם כך בדרך כלל מעל מתקדם שפועל במחסום, חלקו עובר וחלקו מוחזר. מי הגל (להבדיל לגבור) תהיה מעל מתקדם מחוץ למחסום

או באנרגיה $E>V_{max}$, ואז גלים בתוך המחסום. לבעיה כזאת שלא אז פתרון נגיע מושאל, נוכל להשתמש מקדמי העברה והחזרה

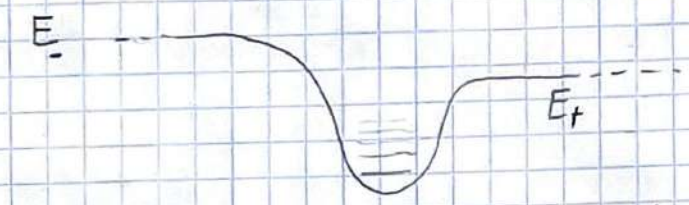


$\psi_L = \psi_{in} + \psi_r$ $\quad$ $\psi_R = \psi_t$

- ל- $E<V_{max}$ מקבלים מינהור (tunneling) דרך המחסום.

הסבקטרום בדגימה צריך להיות רציף: לכל $E>0$ יש פתרון

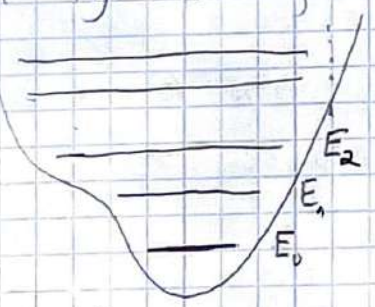
(2) בור פוטנציאל:



כאן יש 3 תחומי אנרגיה: עבור $E>E_-$, הספקטרום רציף והפתרונות דומים לתלקיק חופשי. ל- $E_->E>E_+$ יהיה מנהור דרך אם המרחק שאותו אינו גדול מקבלים עדיין פתרונות תלקיק חופשי בגלל שהם בין סבקטרום רציף, אבל לא מנהור - הפתרונות יהיו ~ גלים חופשיים בצד הימני ודועכים בתוך המחסום.

עבור $E<E_+$, נקבל ספקטרום בדיד ופונקציות הגל הן סוג של גלים עומדים (מלבים קשורים לבור).

- במקרה הפרטי ש- $E_-, E_+ \to \infty$: יתקבל ספקטרום בדיד לכל E , שהמרחק שלו תלוי בגודל הפוטנציאל.

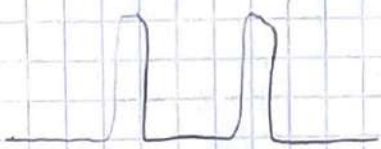


משפט חלוקי (שלא נוכיח אבל נראה דוגמאות): לפונקציות הגל של המצב ה- n ($n=0,1,2,\dots$) יש n צמתים (נקודות תיתוך עם ציר ה- x).

(3) פוטנציאל washboard: במקרה זה, נקבל ספקטרום רציף לכל E - לכאורה יש מלבים קשורים בתוך הבור (מינימום המקומי) אבל בגלל שהם יכולים לעשות מינהור דרך המחסום הסופי.

4) מתמטי בפלס (כמו אינטרפרומטר מיכלסון-מורלי באופטיקה):

- בספקטרום נראה רצועות, מלבדים באנרגיות בודדות מסוימות יהיו חלוקים בין המתמטיים.



פוטנציאלים סימטריים $V(x)=V(-x)$

מקרה פרטי שימושי נוסף לטיפול בו הוא כאשר לפוטנציאל יש סימטריה שיקולית סביב $x=0$: $V(x)=V(-x)$. טענה: לתבדים הקבועים יש צורות מוגדרות, או זוגיים או אי-זוגיים.

הוכחה: נגדיר אופרטור צורות (parity) / שיקוף

$$\hat{\Pi} f(x) = f(-x) \quad \forall \; f(x)$$ פונקציה

$\Leftarrow$ $\hat{\Pi}$ מתחלף עם ההמילטוניאן:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2}} + \underbrace{V(x)}_{=V(-x)} \Rightarrow (\hat{\Pi}\hat{H}) = \hat{H}$$

$$\Rightarrow \hat{\Pi}\hat{H}f(x) = \hat{\Pi}\left[\hat{H}f\right] = \hat{H}(-x)f(-x) = \hat{H}\underbrace{f(-x)}_{\hat{\Pi}f} = \hat{H}\hat{\Pi}f(x)$$

נפעיל אותם בסדר הפוך על פונקציה f כלשהי

$$\Rightarrow \hat{\Pi}\hat{H} = \hat{H}\hat{\Pi} \Rightarrow [\hat{\Pi},\hat{H}] = 0$$

מכאן, כפי שראינו, ניתן לבחור את $\hat{H}$ ו- $\hat{\Pi}$ בו-זמנית, כלומר המצבים הקבועים של $\hat{H}$ הם גם של $\hat{\Pi}$

$$\Rightarrow \underbrace{\hat{\Pi}\psi(x)}_{\psi(-x)} = \lambda\psi(x) \rightarrow$$ כיוון ש- $\hat{\Pi}$ הרמיטי, λ ממשי

$\Leftarrow$ $\lambda = \pm 1$

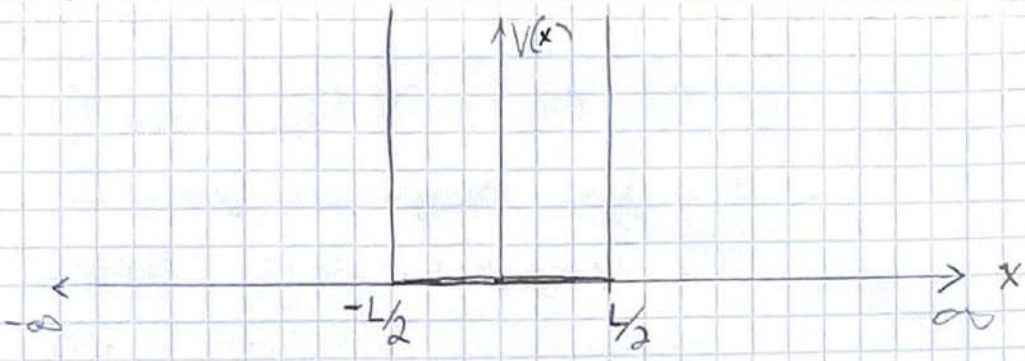
$\Rightarrow$ $\lambda=+1$, $\psi(-x)=\psi(x)$ (זוגי)

$\lambda=-1$, $\psi(-x)=-\psi(x)$ (אי זוגי)

- נבדוק עכשיו דוגמאות:

1) בור פוטנציאל רבועי (חלקיק בקופסא)

את הבוחן הקלאי בבאה כמו ראינו (בפיזיקה מודרנית/עליה), נתבונן בקבוה על התנודות



$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & |x| > L/2 \\ A_R e^{ikx} + A_L e^{-ikx} & |x| \le L/2 \end{cases}$$

בגלל הסימטריה, יש שני סוגי פתרונות: זוגיים $A_R = A_L$,

$A_R = -A_L$ <= קוסינוס וסינוס

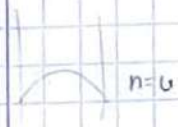
$\psi_e(x) = A\cos kx$ $\qquad$ $\psi_o(x) = A\sin kx$ $\qquad$ ($A=\sqrt{\frac{2}{L}}$ מתנאי הנרמול)

שני הסוגים צריכים לקיים את תנאי השפה

(e) $\cos(kL/2) = 0$ <= $\psi_i(L/2) = \psi_i(-L/2) = 0$

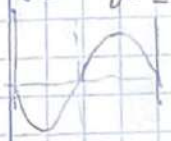
$\Rightarrow \boxed{k = \frac{\pi}{L}(2n+1)}$ $\qquad n = 0, 1, \ldots$

$n=0$: מתאפס 0 בקצוות ל $|x| < L/2$



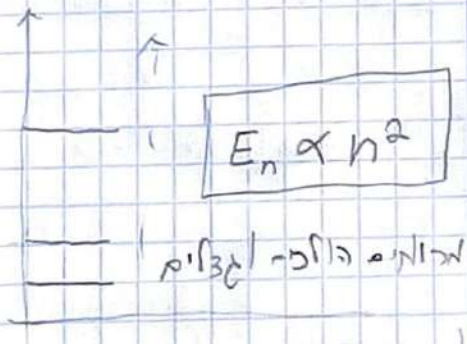
(o) $\sin(kL/2) = 0$ $\Rightarrow$ $\boxed{k = \frac{2\pi n}{L}}$ $\qquad n = 1, 2, \ldots$

$n=1$: מתאפס בשפה אחת

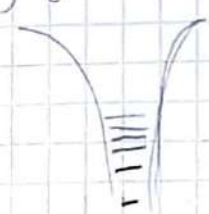


$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$ $\qquad$ האנרגיות צריכות לקיים:

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2 n^2}{L^2}$$



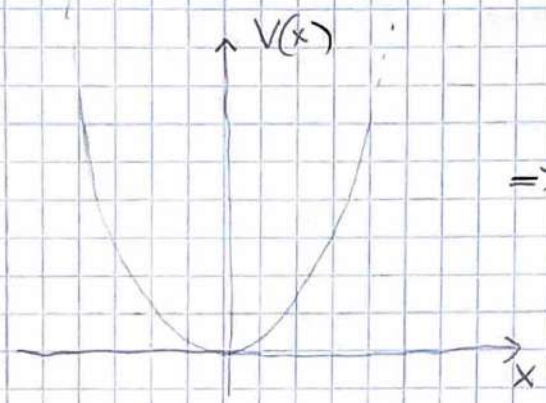
נשים לב שגם כאשר מדובר בפוטנציאל שבו תחום הבור הוא שואף ל $-\infty$



לצומת - אטום המימן $\qquad E_n \propto \frac{1}{n^2}$

2. אוסצילטור הרמוני

- הדוגמא הכי טובה היא קירוב מצוין לבריכה דומה של פוטנציאלים פיסיקליים – לדוגמא, הפוטנציאל האלקטרוסטטי שכולנו אלקטרונים בשכבות בקרות ברכיבים אלקטרוניים מלאים למחצה. נראה שיש למודל הזה תכונות מוזרות שהופכות אותו מעניין, אבל ממצבות אותו כמודל קרוב לתרומת הפונקציות הקוונטיים כפי שתראו בקרוסים יותר מתקדמים.



$$\hat{V}(x) = \frac{1}{2}K\hat{X}^2$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}K\hat{X}^2$$

המיוחדות של המודל היא שהקלות האופרטורים $\hat{x}$ ו- $\hat{p}$ היא אותו דבר. מכאן, שצ"ל התפלגות מושתנים מאוד (טרנספורמציות סימטריות של $\hat{x}, \hat{p}$ לבינתיים הקבועים) $\hat{x}', \hat{p}'$ מופיעים בצורה שוויונית – כלומר, במכניקה קלאסית (אילו לא היו אופרטורים לא-מתחלפים) הם מופיעים בשתי קואורדינטות בדיוק של אותו דבר. במכניקה קלאסית, אנחנו יודעים גם שהתנועה למשוואות התנועה היא תנועה הרמונית בתדרות $\omega = \sqrt{K/m}$. נבדוק מחדש את $\hat{H}$ תוך שימוש בפרמטר ω:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad , \quad \hat{p}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

אנחנו מתבוננים בפתרונות למשוואת שרדינגר $\hat{H}\psi = E\psi$. כאשר משוואה דיפרנציאלית (נקראת גם משוואת הגל) שיש לה מספר יחידה של פתרונות. אבל נראה קודם שניתן לפתור אותה בשיטה אלגברית, שמשקפת תכונות יסודיות של המודל (לעומת מבנה הספקטרום) תוך עקיפת הצורך למצוא פונקציות אנליטיות מפורשות לפונקציות הגל $\psi_n(x)$. בעזרת אותו, בכתיבה האלגברית $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ נמצא פונקציות מפורשות ל- E_n מבלי להתייחס ל- $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$.

- נגדיר קבוע סקאלה אורך [איך רואים? - מימדים] $l \equiv \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$

בעזרתם נגדיר שני אופרטורים חדשים מאד, המהווים קומבינציה של $\hat{x}$ ו- $\hat{p}$:

$$\boxed{\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\,l}\left(\hat{x} + \frac{i l^2}{\hbar}\hat{p}\right)}$$

שימו לב, $\hat{x}$ ו- $\hat{p}$ הם אופרטורים הרמיטיים אבל בגלל הפקטור i, $\hat{a}$ לא הרמיטי. הצמוד שלו יהיה האופרטור השני:

$$\boxed{\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}\,l}\left(\hat{x} - \frac{i l^2}{\hbar}\hat{p}\right)}$$

האופרטורים האלה ובאי לא יכולים לתאר שום פיסיקה מציאותית לא הרמיטיים, אבל נראה שיש להם משמעות פיסיקלית אינטואיטיבית מאד מעניינת. (נגדיר תמונה של חלקיקים) לשם מה הגדרנו אותם? נראה עכשיו בחישוב יפה שאם נגדיר אופרטור

$\hat{N} \equiv a^{+}a$ (אופרטור הרמיטי) שנקרא לו "אופרטור המספר", אזי $\hat{H}$ ניתן לכתיבה מאד פשוטה בעזרתו. נחשב את $\hat{N}$ מהגדרה:

$$\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a} = \frac{1}{2l^2}\left(\hat{x} - \frac{i l^2}{\hbar}\hat{p}\right)\left(\hat{x} + \frac{i l^2}{\hbar}\hat{p}\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{2l^2}\right)\hat{x}^2 + \frac{l^2}{2\hbar^2}\hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{\left(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\right)}_{\text{יחס הקומוטציה } [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar} =$$

$$= \underbrace{\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2}_{\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} \text{ לאלף שני}} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + 1/2\right)}$$