פיסיקה קוונטית 1 (115203)
תרגול 7 - תנועת חבילת גלים ובור פוטינציאל סופי

הטכניון - הפקולטה לפיסיקה

סמסטר אביב 2024-25

1 פוטינציאל שאינו קבוע במרחב

משוואת שרדינגר של חלקיק בעל מסה m הנע בפוטינציאל $V(x)$ נתונה על ידי:

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

נניח פתרון מהצורה:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$$

ומקבלים כי $\psi(x)$ מקיימת את משוואת שרדינגר הסטציונרית (הלא תלויה בזמן):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

כאשר E - האנרגיה של החלקיק, ו- $T(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. נרשום שוב את (1) בצורה הבאה:

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

אנו רואים כי רגולריות הפוטינציאל משפיעה ישירות על רגולריות $\partial_x^2\psi(x)$:

- כאשר $V(x)$ רציף וסופי בתחום מסוים, הפתרון $\psi(x)$ צריך להיות מספיק רגולרי כך שמשוואת שרדינגר תהיה מוגדרת נקודתית בתחום זה. בפרט, עלינו לדרוש כי $\psi(x), \partial_x\psi(x)$ יהיו רציפות, ואז מתקבל שגם $\partial_x^2\psi(x)$ רציפה.
- כאשר הפוטינציאל רציף למקוטעין ויש לו קפיצות סופיות, אין סיבה לדרוש ש $\partial_x^2\psi(x)$ תהיה רציפה בנקודות הקפיצה של הפוטינציאל. להפך: ממשוואת שרדינגר רואים ש $\partial_x^2\psi(x)$ צריכה לקפוץ יחד עם $V(x)$. נרצה לבחון האם קפיצה סופית ב $\partial_x^2\psi(x)$ משרה תנאים על צורתה של $\partial_x\psi(x)$. כדי לבחון זאת, נבצע אינטגרציה על משוואת שרדינגר באזור נקודות הקפיצה (לשם פשטות נניח כי נקודת הקפיצה היא $x = 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\partial_x^2\psi(x)\mathrm{d}x + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\psi(x)\mathrm{d}x = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\mathrm{d}x \tag{2}$$

עבור:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\mathrm{d}x \xrightarrow{\epsilon\to 0} 0$$

היות ופונקצית הגל $\psi(x)$ רציפה. עבור:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\psi(x)\mathrm{d}x \xrightarrow{\epsilon\to 0} \lim_{\epsilon\to 0}\frac{V(0^+)\psi(0^+) - V(0^-)\psi(0^-)}{2\epsilon} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\psi(0)[V(0^+) - V(0^-)]}{2\epsilon} = 0$$

כאשר השתמשנו בעובדה כי $[V(0^+) - V(0^-)]$ הינה קפיצה סופית. בנוסף,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\partial_x^2\psi(x)\mathrm{d}x \xrightarrow{\epsilon\to 0} \lim_{\epsilon\to 0} -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\partial_x\psi(\epsilon) - \partial_x\psi(-\epsilon)\Big) = -\frac{\hbar^2}{2m}\big(\partial_x\psi(0^+) - \partial_x\psi(0^-)\big)$$

נציב חזרה הכל ב (2),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x\psi(0^+)-\partial_x\psi(0^-)\right)=0$$

כלומר, $\partial_x\psi(0^+)=\partial_x\psi(0^-)$ ולכן במקרה זה עלינו לוודא שהנגזרת $\partial_x\psi(x)$ רציפה בנקודת התפירה.

- במקרים בהם ישנה קפיצה לא סופית בפוטינציאל, נקבל כי יכולה להתקבל קפיצה ב $\partial_x\psi(x)$. נראה זאת בתרגיל הבא, כאשר נדבר על פוטינציאל שנראה כמו פונקציית דלתא.

2 פיזור מפונקצית דלתא

נניח מערכת המתוארת על ידי ההמילטוניאן:

$$H=\frac{P^2}{2m}+\lambda\delta(x)$$

כאשר $\lambda>0$.

השאלה הפיזיקלית שנרצה לשאול עבור מערכת זו היא הדבר הבא: אם חלקיק מתחיל מימין למחסום (כלומר מימין לפונקצית הדלתא בהצגת המקום), האם יש הסתברות לא אפס למצוא אותו משמאל למחסום עבור איזשהו זמן t? ואם יש הסתברות לא אפס כזו, מהי?

א. הראו כי הפתרונות הבלתי תלויים של משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן עם אנרגיה חיובית הם מהצורה:

$$\psi_{L;q}(x)=C\begin{cases}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}+R_{L;q}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x<0\\ T_{L;q}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx} & x>0\end{cases}$$

$$\psi_{R;q}(x)=C\begin{cases}T_{R;q}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x<0\\ \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx}+R_{R;q}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx} & x>0\end{cases}$$

כאשר C הינו קבוע נרמול. בטאו את R ואת T בעזרת q ונתוני הבעיה.

ב. הראו כי:

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{q^2t}{2m}}+R_{L;q}\tilde{\psi}(q)\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{q^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q\ , & x<0\\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)T_L\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{iq^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q\ , & x>0\end{cases}$$

הינו פתרון למשוואת שרדינגר.

ג. שרטטו באופן איכותי את צפיפות ההסתברות עבור:

$$\psi_I(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}-\frac{iq^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q$$

בתחום $-\infty<x<\infty$, עבור:

$$\tilde{\psi}(q)=\psi_{q_0}(q)\mathrm{e}^{\frac{iqx_0}{\hbar}}$$

כאשר $\psi_{q_0}(q)$ גאוסיאן ממורכז סביב $q=q_0>0$.

ד. שרטטו באופן איכותי את צפיפות ההסתברות עבור:

$$\psi_{II}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)R_{L,q}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}-\frac{iq^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q$$

$$\psi_{III}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)T_{L,q}\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{q^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q$$

בתחום $-\infty<x<\infty$, כאשר:

$$\tilde{\psi}(q)=\psi_{q_0}(q)\mathrm{e}^{\frac{iqx_0}{\hbar}}$$

והגאוסיאן צר מספיק, כך שניתן לקרב $R_{L,q}\sim R_{L,q_0}$, וגם $T_{L,q}\sim T_{L,q_0}$.

ה. שרטטו באופן איכותי את $|\psi(x,t)|^2$ מסעיף ב'.

פתרון:

סעיף א'

נפתור את משוואת שרדינגר בהצגת המקום:

$$\langle x|H|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_E(x) + \lambda\delta(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

נוכל להסתכל על משוואת שרדינגר בהצגת המקום בשני תחומים שונים: כאשר $x<0$ וכאשר $x>0$. בשני תחומים אלה, נקבל כי משוואת שרדינגר בהצגת המקום הינה

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_E(x) = E\psi_E(x) \tag{3}$$

עבור $E>0$, הפתרון עבור (3) כמד"ר נתון על ידי:

$$\psi_q(x) = c_1 \mathrm{e}^{i\frac{q}{\hbar}x} + c_2 \mathrm{e}^{-i\frac{q}{\hbar}x}$$

כאשר $E=\frac{q^2}{2m}$, ולכן, עבור כל תחום נכתוב פתרון כללי כנ"ל:

$$\psi_{l,q}(x) = c_{L+}\mathrm{e}^{i\frac{qx}{\hbar}} + c_{L-}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}}$$
$$\psi_{r,q}(x) = c_{R+}\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}} + c_{R-}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}}$$

כלומר, בתחום כולו:

$$\psi_q(x) = \begin{cases} c_{L+}\mathrm{e}^{i\frac{qx}{\hbar}} + c_{L-}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}} \ , & x<0 \\ c_{R+}\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}} + c_{R-}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}} \ , & x>0 \end{cases} \tag{4}$$

נרצה כעת להבין מהם התנאי הרציפות שפונקצית הגל $\psi(x)$ חייבת לקיים במקרה של הפוטינציאל בבעיה זו. התנאים האלו יתורגמו לאילוצים על המקדמים $c_{L+}, c_{L-}, c_{R+}, c_{R-}$. נדרוש תחילה את רציפות פונקצית הגל $\psi(x)$ בנקודה $x=0$:

$$\psi_{l,q}(0) = c_{L+} + c_{L-} \equiv c_{R+} + c_{R-} = \psi_{r,q}(0)$$

כעת נסתכל על התנאים עבור $\partial_x\psi(x)$. היות והפוטינציאל $V(x)$ אינו רציף ובעל קפיצה לא סופית, אין דרישה לרציפות של הנגזרת $\partial_x\psi(x)$. למעשה, עלינו לדרוש שבנקודה $x=0$ תהיה קפיצה בנגזרת $\partial_x\psi(x)$. על מנת להבין מהי הקפיצה בנגזרת, נתבונן על האינטגרציה ממשוואה (2) במקרה של פונקצית דלתא בנקודה $x=0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\partial_x^2\psi(x)\mathrm{d}x + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\lambda\delta(x)\psi(x)\mathrm{d}x = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\mathrm{d}x$$

השוני היחיד מתקבל עבור האינטגרל עם הפוטינציאל. נקבל: היות ו $\psi(x)$ רציפה, האינטגרל בצד ימין מתאפס כאשר $\epsilon\to 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\partial_x\psi(0^+) - \partial_x\psi(0^-)] + \lambda\psi(0) = 0$$

כלומר, התנאי על הקפיצה בנגזרת הוא:

$$\partial_x\psi(0^+) - \partial_x\psi(0^-) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$$

ובמקרה שלנו:

$$\partial_x\psi(0^+) = \partial_x\psi_{r,q}(0) = \frac{iq}{\hbar}c_{R+} - \frac{iq}{\hbar}c_{R-}$$
$$\partial_x\psi(0^-) = \partial_x\psi_{l,q}(0) = \frac{iq}{\hbar}c_{L+} - \frac{iq}{\hbar}c_{L-}$$

ולכן,

$$(\frac{iq}{\hbar}c_{R+}-\frac{iq}{\hbar}c_{R-})-(\frac{iq}{\hbar}c_{L+}-\frac{iq}{\hbar}c_{L-})=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}(c_{L+}+c_{L-})$$

סה"כ, קיבלנו 2 משוואות עבור ארבעת המקדמים:

$$\begin{cases} c_{L+}+c_{L-} &= c_{R+}+c_{R-} \\ c_{L+}-c_{L-} &= c_{R+}-c_{R-}+i\frac{2m\lambda\hbar}{p\hbar^2}(c_{L+}+c_{L-}) \end{cases}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} c_{L+}+c_{L-} & = c_{R+}+c_{R-} \\ c_{L+}(1-i\frac{2m\lambda}{p\hbar})-c_{L-}(1+i\frac{2m\lambda}{p\hbar}) & = c_{R+}-c_{R-} \end{cases}$$

נבטא למשל את c_{L-} ואת c_{R+} בעזרת c_{L+},c_{R-}:

$$c_{L-}=\frac{c_{R-}}{1+\frac{im\lambda}{\hbar p}}-\frac{c_{L+}}{1+\frac{\hbar p}{im\lambda}}$$
$$c_{R+}=\frac{c_{L+}}{1+\frac{im\lambda}{\hbar p}}-\frac{c_{R-}}{1+\frac{\hbar p}{im\lambda}}$$

נציב חזרה ב $\psi_q(x)$, ונקבל:

$$\psi_q(x)=\begin{cases} \psi_{l;q}(x)=c_{L+}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}+\left(\frac{c_{R-}}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}-\frac{c_{L+}}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}}\right)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x<0 \\ \psi_{r;q}(x)=\left(\frac{c_{L+}}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}-\frac{c_{R-}}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}}\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}+c_{R-}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x>0 \end{cases}$$

קיבלנו כי עבור האנרגיה $E=\frac{q^2}{2m}$, הפונקציה העצמית הכללית ביותר מתוארת על ידי שני מקדמים חופשיים, c_{L+},c_{R-}. זה למעשה אומר כי המרחב העצמי של האנרגיה הוא ממימד 2, ונוכל לתאר שני סוגי פתרונות סטציונריים בלתי תלויים המתאימים לערך האנרגיה הנ"ל.
נוכל לבחור למשל $c_{R-}=0,c_{L+}=1$ ולקבל פתרון מהצורה:

$$\psi_{L;q}(x)=C\begin{cases} \psi_{l;q}(x)=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}-\frac{1}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x<0 \\ \psi_{r;q}(x)=\frac{1}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx} & x>0 \end{cases}$$

כאשר הוספנו מקדם נרמול C כדי להבטיח את נרמול פונקצית הגל. זהו הפתרון $\psi_{L;q}(x)$ המבוקש, עם:

$$R_{L;q}=-\frac{1}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}} \quad , \quad T_{L;q}=\frac{1}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}$$

כמו כן, אם נבחר $c_{L+}=0,c_{R-}=1$ נקבל פתרון מהצורה:

$$\psi_{R;q}(x)=C\begin{cases} \psi_{l;q}(x)=\frac{1}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x<0 \\ \psi_{r;q}(x)=-\frac{1}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}+\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} & x>0 \end{cases}$$

זהו הפתרון $\psi_{R;q}(x)$ המבוקש, עם:

$$R_{R;q}=-\frac{1}{1+\frac{\hbar q}{im\lambda}} \quad , \quad T_{R;q}=\frac{1}{1+\frac{im\lambda}{\hbar q}}$$

סעיף ב'

בסעיף הקודם מצאנו כי עבור כל אנרגיה חיובית $E=\frac{q^2}{2m}$ קיים פתרון סטציונרי מהצורה:

$$\psi_{L,q}(x)=C\begin{cases} \mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}+R_{L,q}\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}} \ , & x<0 \\ T_{L,q}\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}} \ , & x>0 \end{cases}$$

היות וההמילטוניאן אינו תלוי ישירות בזמן, התלות בזמן של מצב עצמי כנ"ל היא:

$$\psi_{L,q}(x,t)=\psi_{L,q}(x)\mathrm{e}^{-\frac{iEt}{\hbar}}=\psi_{L,q}(x)\mathrm{e}^{-\frac{iq^2}{2m}t}$$

כעת נבנה חבילת גלים המורכבת מסופרפוזיציה (צירוף לינארי) של מצבים סטציונריים כנ"ל:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q\tilde{\psi}(q)\psi_{L,q}(x)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t}$$

או באופן מפורש:

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{q^2t}{2m}}+R_{L;q}\tilde{\psi}(q)\mathrm{e}^{-\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{q^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q\ , & x<0\\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(q)T_L\mathrm{e}^{\frac{iqx}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{iq^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}q\ , & x>0\end{cases}$$

וזו בדיוק הצורה המבוקשת. היות והפתרון הנ"ל הוא צירוף לינארי של פתרונות למשוואת שרדינגר, זהו פתרון למשוואת שרדינגר.

סעיף ג'

בתרגול הקודם ראינו את ההתפתחות של חבילת גל גאוסיאנית של חלקיק חופשי. בפרט, אם פונקציית הגל ההתחלתית בהצגת התנע היא גאוסיאן הממורכז סביב $q=0$, אז פונקצית הגל בהצגת המקום בזמן $t=0$ היא גאוסיאן הממורכז סביב $x=0$.
כלומר, במקרה הפשוט שבו:

$$\tilde{\psi}(q)=\tilde{\psi}_{q_0}(q)$$

כאשר $\tilde{\psi}_{q_0}(t)$ גאוסיאן סביב $q=0$, נקבל בזמן $t=0$:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}_0(q)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}\mathrm{d}q$$

ושגם $\psi(x,0)$ היא גאוסיאן סביב $x=0$ (כהתמרת פורייה של גאוסיאן). בנוסף, ראינו שבזמן מאוחר יותר:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}_0(q)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t}\mathrm{d}q$$

הפקטור $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t}$ הוא פאזה ריבועית ב q. פאזה זו גורמת לכך שרכיבי תנע שונים מקבלים פאזות שונות בזמן, ולכן חבילת הגל מתרחבת.
כעת אנו בוחנים מערכת דומה של התפתחות בזמן של חבילת גלים גאוסיאנית, אך כעת הגאוסיאן במרחב התנע ממורכז סביב $q=q_0$, וישנו פקטור נוסף בחבילת הגלים, $\mathrm{e}^{\frac{iqx_0}{\hbar}}$. ננסה לראות כיצד הפקטורים הללו משפיעים על ההתפתחות בזמן של $\psi_I(x,t)$.

- בתרגול הקודם חישבנו מהם ערכי התצפית של $\langle X\rangle,\langle P\rangle$ עבור פונקציות גל סימטריות סביב q_0 במרחב התנע. ראינו:

$$\langle\psi_{q_0}|\,P\,|\psi_{q_0}\rangle=q_0$$
$$\langle\psi_{q_0}|\,X\,|\psi_{q_0}\rangle=\langle\psi_0|\,X\,|\psi_0\rangle+\frac{q_0t}{m}$$

מכאן נוכל להסיק שבמקרה בו הגאוסיאן במרחב התנע ממורכז סביב q_0, מרכז הגאוסיאן במרחב המיקום נע לפי:

$$x_{\text{center}}(t)=x_{\text{center}}(0)+\frac{q_0t}{m}$$

- נבחן כעת את הפאזה הנוספת במקרה שלנו:

$$\tilde{\psi}(q)=\tilde{\psi}_{q_0}(q)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx_0}$$

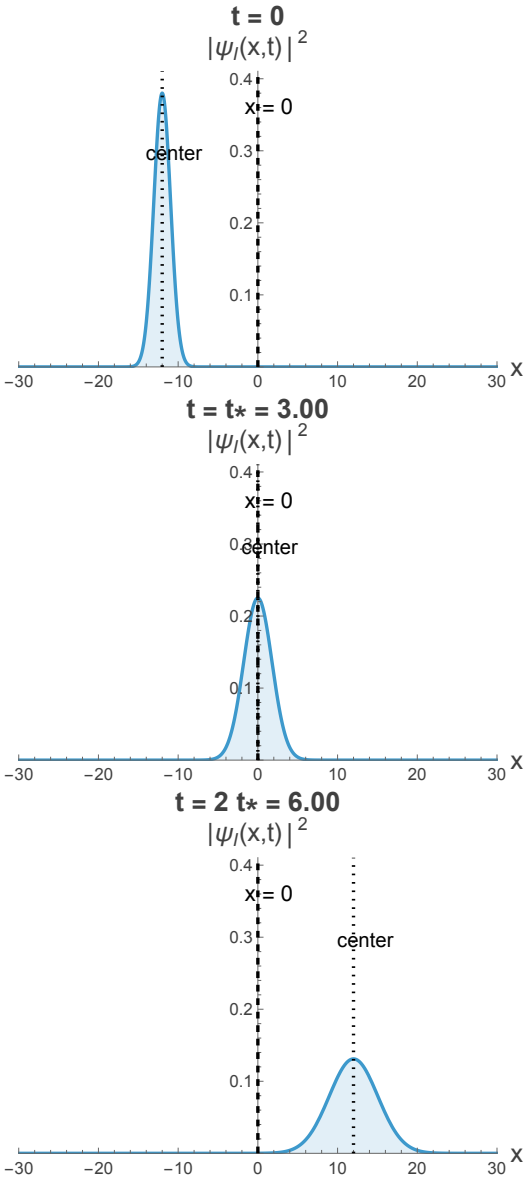
מתכונות של התמרת פורייה, הכפלה של פאזה במרחב התנע שקולה להזזה בפקטור x_0 במרחב המיקום. נקבל לכן

ש $\psi_I(x,0)$ היא גאוסיאן שממורכז סביב $x=-x_0$.

לסיכום, נסיק כי $\psi_I(x,t)$ היא גאוסיאן, עם רוחב גאוסיאן שמשתנה בזמן, ועם מרכז גאוסיאן שנע לפי:

$$x_{\text{center}}(t) = -x_0 + \frac{q_0}{m}t$$

נשים לב, שעבור $t^* = \frac{mx_0}{q_0}$ מרכז הגאוסיאן יגיע ל $x=0$, כלומר, למחסום הפוטינציאל. ציור איכותי של $|\psi_I(x,t)|^2$ בזמנים שונים מוצג באיור (1)



איור 1: צפיפות ההסתברות $|\psi_I(x,t)|^2$ בזמנים שונים.

אנו נתן אינטרפטציה פיזיקלית ל $\psi_I(x,t)$ כחבילת גלים התחלתית, שמתחילה בצד שמאל, מתקדמת ימינה בזמן ומרכזה פוגע במחסום הפוטינציאל בזמן $t^* = \frac{mx_0}{q_0}$.

סעיף ד'

באופן דומה לאינטרפטציה הפיזיקלית שנתנו ל $\psi_I(x,t)$, נוכל לחשוב על $\psi_{II}(x,t)$ כחבילת הגלים המוחזרת, ועל $\psi_{III}(x,t)$ כחבילת הגלים המועברת מעבר למחסום הפוטינציאל בכל זמן t. נרצה כעת להבין את חבילות גלים אלו.
נשתמש בכך שהגאוסיאן במרחב התנע צר וממורכז סביב q_0, ולכן בקירוב טוב ניתן להוציא את מקדמי הפיזור מתוך

האינטגרל. לכן נקבל:

$$\psi_{II}(x,t) \sim R_{L,q_0}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}_{q_0}(q)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx_0}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t}\mathrm{d}q$$

נכתוב את הפאזה הלינארית בצורה:

$$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}qx_0}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}qx} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}q(x-x_0)}$$

לכן, הביטוי של החבילה המוחזרת דומה לחבילת הגל מהסעיף הקודם, אבל מרכז החבילה בזמן $t=0$ הוא ב $x=x_0$. כלומר,

$$x_{II\text{center}}(t) = x_0 - \frac{q_0 t}{m}$$

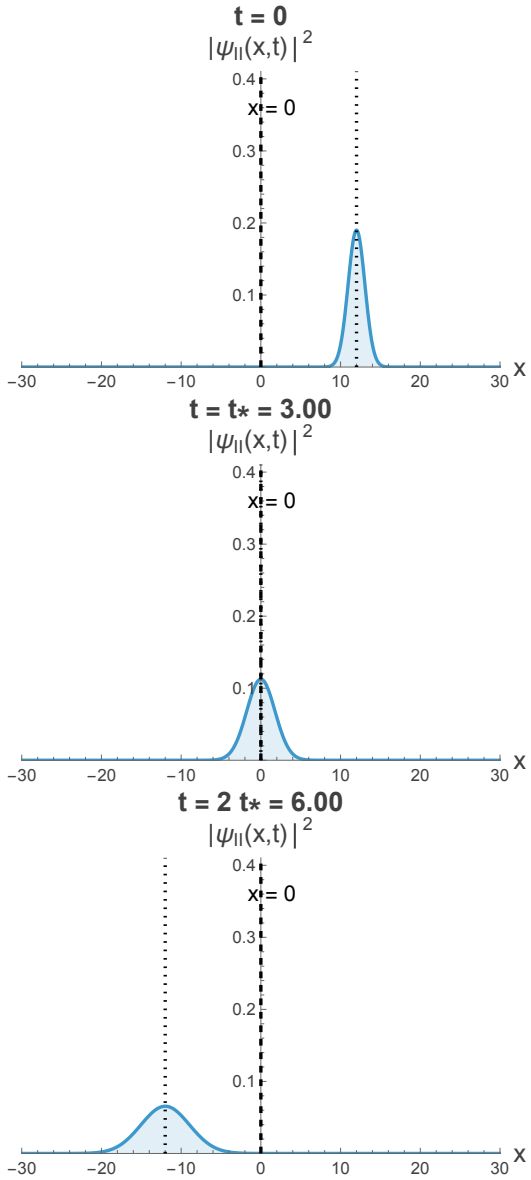
כמו כן, מהסימן עבור $e^{-\frac{iqx}{\hbar}}$ נסיק כי זוהי חבילת גלים הנעה שמאלה, ובפרט:

$$x_{II\text{center}}(t=t^*) = 0$$

וגם,

$$x_{II\text{center}}(2t^*) = -x_0$$

כלומר, לאחר שמרכז החבילה פוגע במחסום, המרכז ממשיך לצד שמאל. ציור איכותי של $|\psi_{II}(x,t)|^2$ בזמנים שונים מוצג באיור (2).



איור 2: צפיפות ההסתברות $|\psi_{II}(x,t)|^2$ בזמנים שונים.

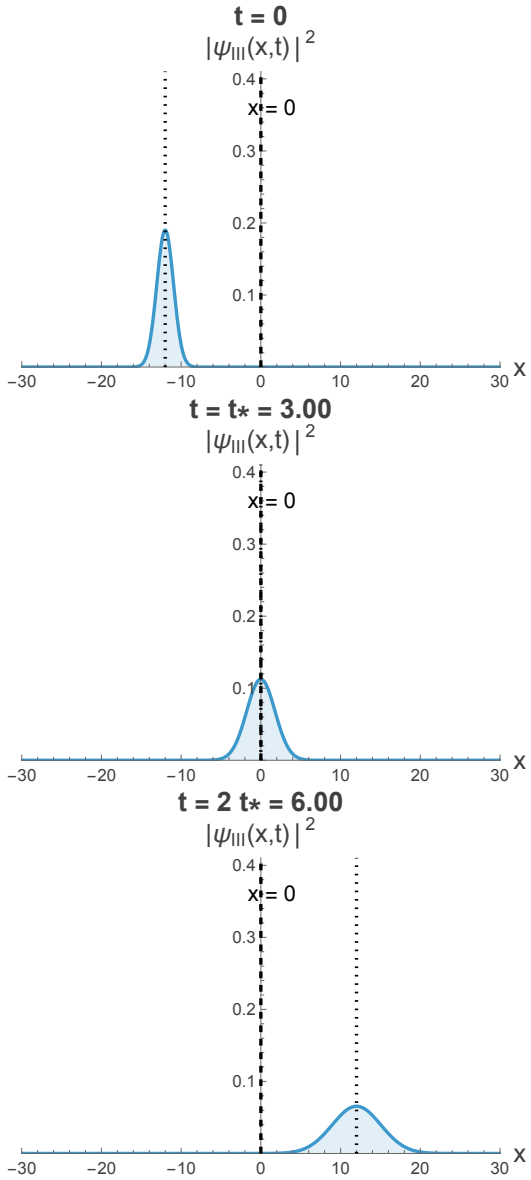
באופן דומה, עבור החבילה המועברת $\psi_{III}(x,t)$, נקבל:

$$\psi_{III}(x,t) \sim T_{L,q_0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}_{q_0}(q) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar} q(x+x_0)} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t} \mathrm{d}q$$

זהו בדיוק אותו מבנה כמו החבילה מהסעיף הקודם, עד כדי הכפלה במקדם ההעברה T_{L,q_0}. לכן, מרכז החבילה המועברת נע לפי:

$$x_{III\text{center}}(t) = -x_0 + \frac{q_0 t}{m}$$

כלומר, החבילה המועברת ממשיכה לנוע ימינה. בפרט, $x_{III\text{center}}(t^*) = 0$, $x_{III\text{center}}(2t^*) = x_0$. ציור איכותי של $|\psi_{III}(x,t)|^2$ בזמנים שונים מוצג באיור (3)



איור 3: צפיפות ההסתברות $|\psi_{III}(x,t)|^2$ בזמנים שונים.

סעיף ה'

הציור האיכותי של $|\psi(x,t)|^2$ מופיע באיור מספר (4). נסביר את האיור:

- תחילה נציין שעלינו לוודא בכל זמן שהוא שפונקצית הגל ועל כן גם צפיפות ההסתברות $|\psi(x,t)|^2$ רציפות בנקודת התפירה $x=0$. זה יהיה נכון, שכן:

$$\psi_I(0,t)+\psi_{II}(0,t)=\psi_{III}(0,t)$$

היות ומקדמי הפיזור מקיימים:

$$1+R_{L,q}=T_{L,q}$$

לכל q.

- מהצורה של $\psi(x,t)$ מסעיף ב', אנו צריכים בתחום של $x>0$ לצייר תרומה מ $\psi_{III}(x,t)$ בלבד, ובתחום בו $x<0$ נקבל תרומה גם מ $\psi_I(x,t)$ וגם מ $\psi_{II}(x,t)$. זה נכון לכל זמן שנבחר.

- ננתח את צפיפות ההסתברות עבור $t=0$. בתחום $x>0$ עלינו לצייר את $\psi_{III}(x,t=0)$. היות ובזמן $t=0$ התרומה של $\psi_{III}(x,0)$ בתחום של $x>0$ היא בעיקר זנב של גאוסיאן, נקבל צורה זו בציור. עבור $x<0$ ישנה

תרומה גם מ-ψ_I וגם מ-ψ_{II}, אך בזמן $t=0$ החבילה ψ_I ממורכזת סביב $-x_0$, בעוד שהחבילה ψ_{II} ממורכזת סביב $+x_0$, ולכן בתחום $x<0$ התרומה של ψ_{II} תהיה זניחה כמעט בכל האזור. לכן, הצורה המתקבלת דומה בעיקר לצורה של $|\psi_I(x,0)|^2$.

- בזמן $t=2t^*$, הפונקציה $\psi_{III}(x,2t^*)$ נראית כמו גאוסיאן ממורכז סביב x_0. זהו גאוסיאן עם אמפליטודה קטנה יותר מהגאוסיאן ההתחלתי $\psi_I(x,0)$, שכן $|T_{L,q}|^2<1$. לכן, זו הצורה שנצפה לקבל בתחום $x>0$. בתחום $x<0$, בזמן זה רוב התרומה תהיה מ $|\psi_{II}(x,2t^*)|^2$, שכן $|\psi_I(x,2t^*)|^2$ הוא גאוסיאן שממורכז ב $x_0>0$.

- עבור $t=t^*$, כל שלוש חבילות הגלים ממורכזות סביב $x=0$. בתחום $x>0$ מתקבלת התרומה של החבילה ψ_{III}, ואילו בתחום $x<0$ מתקבל סכום של החבילות:

$$\psi(x,t^*)=\psi_I(x,t^*)+\psi_{II}(x,t^*).$$

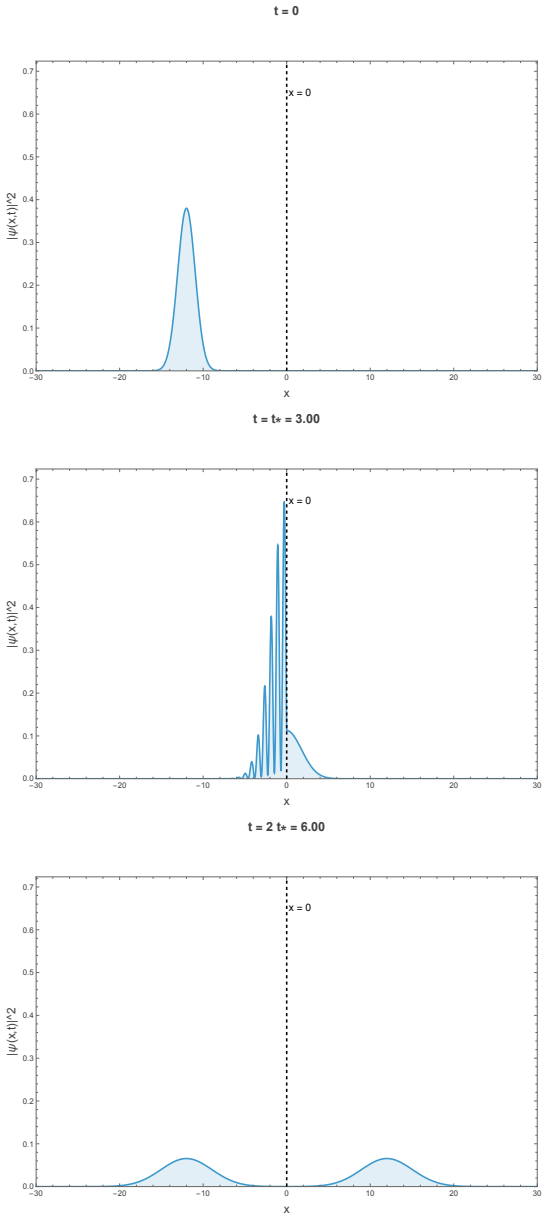
לכן צפיפות ההסתברות בתחום $x<0$ היא

$$|\psi(x,t^*)|^2=|\psi_I(x,t^*)+\psi_{II}(x,t^*)|^2=|\psi_I(x,t^*)|^2+|\psi_{II}(x,t^*)|^2+2\mathrm{Re}(\psi_I^*(x,t^*)\psi_{II}(x,t^*))\,.$$

האיבר $2\mathrm{Re}\big(\psi_I^*(x,t^*)\psi_{II}(x,t^*)\big)$ הוא איבר התאבכות. הוא זה שמייצר את האוסילציות שמוצגות באיור. מעטפת האמפליטודה של ההתאבכות נקבעת על ידי:

$$2|\psi_I(x,t)||\psi_{II}(x,t)|\cos(\Delta\phi)$$

כאשר $\cos(\Delta\phi)$ אחראי לאוסילציות, ומתקבל בעקבות הפרש הפאזה של חבילות הגלים. כלומר: ההתאבכות תהיה משמעותית רק באזורים שבהם שתי החבילות גדולות בו זמנית. במקרה שלנו, שתי חבילות הגלים ממורכזות בזמן $t=t^*$ סביב $x=0$, ולכן שתי חבילות הגלים חופפות באזור המחסום. היות ואלו שתי חבילות גלים המתקדמות בכיוונים שונים, אפשר לחשוב על אפקט של "גל עומד". הפרש הפאזות שקיים בין שתי חבילות הגלים הוא שגורם לאוסליציות.



איור 4: Caption

פתרון סטציונרי של משוואת שרדינגר באזור עם פוטינציאל קבוע $V(x) = U$

כאשר נפתור את משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן בתחום זה, נקבל עבור הפתרונות הסטציונריים:

$$\partial_x^2\psi(x) = \frac{2m}{\hbar}[U - E]\psi(x)$$

נקבל שהפתרון למשוואה תלוי בהפרש $E - U$:

עבור $E < U$: נקבל:

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{-qx} + B\mathrm{e}^{+qx}, \qquad q = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$$

עבור $E > U$: נקבל:

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{-ikx} + B\mathrm{e}^{+ikx}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}}$$

כאשר מדובר בקטע מסוים ולא במרחב כולו, אילוצים על המקדמים A, B וגם על q, k יכולים להתקבל כאשר אנו מבצעים תפירה של הפתרונות באזורים שונים.

3 תרגיל: בור פוטינציאל סופי:

נתון פוטינציאל מהצורה הבאה:

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

עבור $V_0 > 0$. מצאו את פונקציית הגל והאנרגיות עבור $-V_0 < E < 0$.

פתרון:

ניתן לחלק את המרחב לשלושה אזורים שבכל אחד מהם הפוטינציאל הוא קבוע. לכן, נוכל להשתמש בתוצאות עבור פוטינציאל קבוע, ויהיה עלינו 'לתפור' את תנאי השפה כך שיתקבלו פתרונות רציפים.
עבור התחום $x < -a$ פונקציית הגל פותרת את משוואת שרדינגר הסטציונרית:

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

ולכן צורתה הכללית:

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{qx} + B\mathrm{e}^{-qx}, \quad q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

נזכור כי פונקציית הגל חייבת לקיים: $\psi(-\infty) = 0$, ועל כן נדרוש $B = 0$.
באופן דומה, עבור $x > a$ נקבל את צורת פונקצית הגל הבאה:

$$\psi(x) = D\mathrm{e}^{-qx}$$

כעת נעבור לתחום שבו $-a < x < a$. בתחום זה פונקציית הגל פותרת את משוואת שרדינגר הסטציונרית:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E + V_0)\psi(x)$$
$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(-V_0 - E)\psi(x)$$

בתחום האנרגיות שאנו מעוניינים בו, $-V_0 < E < 0$, הפתרונות הכלליים למד"ר נתונים על ידי:

$$\psi(x) = B\mathrm{e}^{-ikx} + C\mathrm{e}^{+ikx}, \quad \text{where} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}}$$

נסכם עד כה:

$$\psi(x)=\begin{cases} A\mathrm{e}^{qx} & , \quad x<-a \\ B\mathrm{e}^{-ikx}+C\mathrm{e}^{+ikx} & , \quad -a<x<a \\ D\mathrm{e}^{-qx} & , \quad x>a \end{cases}$$

נרצה "לתפור" את הפתרונות שמצאנו כך שפונקצית הגל והנגזרת שלה יהיו רציפות.
נעזר בסימטרית הבעיה - היות וההמילטוניאן ואופרטור הזוגיות מתחלפים אנו יודעים כי קיים בסיס משותף של מצבים עצמיים. מתרגולים קודמים ראינו כי המצבים העצמיים של אופרטור הזוגיות הם פונקציות זוגיות ואי זוגיות. לכן, נסיק כי פונקציות הגל שנמצא הן בהכרח זוגיות או אי זוגיות.
הפתרון הזוגי אם כך יהיה:

$$\psi_{\text{even}}(x)=\begin{cases} A\mathrm{e}^{qx} & , \quad x<-a \\ B\cos(kx) & , \quad -a<x<a \\ A\mathrm{e}^{-qx} & , \quad x>a \end{cases}$$

$$\psi_{\text{odd}}(x)=\begin{cases} A\mathrm{e}^{qx} & , \quad x<-a \\ B\sin(kx) & , \quad -a<x<a \\ -A\mathrm{e}^{-qx} & , \quad x>a \end{cases}$$

נדרוש את רציפות פונקצית הגל והנגזרת שלה בנקודות $x=\pm a$:

- **עבור הפתרון הזוגי:**

$$\begin{aligned} x=a: \quad & A\mathrm{e}^{-qa} && =B\cos(ka) \\ & -qA\mathrm{e}^{-qa} && =-kB\sin(ka) \\ x=-a: \quad & A\mathrm{e}^{-qa} && =B\cos(ka) \\ & qA\mathrm{e}^{-qa} && =-kB\sin(-ka) \end{aligned}$$

קיבלנו שתי משוואות בלתי תלויות עבור A,B. עבור $A,B\neq 0$. כדי למצוא את A,B נוכל לרשום את מערכת המשוואות בצורה מטריצית:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-qa} & -\cos(ka) \\ q\mathrm{e}^{-qa} & -k\sin(ka) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ונדרוש כי הדטרמיננטה של המטריצה תתאפס על מנת לקבל פתרון לא טריוויאלי עבור A,B:

$$\begin{aligned} \det\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-qa} & -\cos(ka) \\ q\mathrm{e}^{-qa} & -k\sin(ka) \end{pmatrix} &= -k\mathrm{e}^{-qa}\sin(ka)+q\mathrm{e}^{-qa}\cos(ka)=0 \\ &\Rightarrow k\mathrm{e}^{-qa}\sin(ka)=q\mathrm{e}^{-qa}\cos(ka) \\ &\Rightarrow k\tan(ka)=q \\ &\Rightarrow ka\tan(ka)=qa \end{aligned} \tag{5}$$

כעת, נשתמש בקשר הבא בין k,q:

$$\begin{aligned} q^2+k^2 &= -\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}=\frac{2mV_0}{\hbar^2} \\ \Rightarrow qa &= \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}-k^2a^2} \end{aligned}$$

ולכן משוואה (5) יכולה להכתב בצורה הבאה:

$$\boxed{x\tan(x)=\sqrt{\lambda^2-x^2}}$$

כאשר:

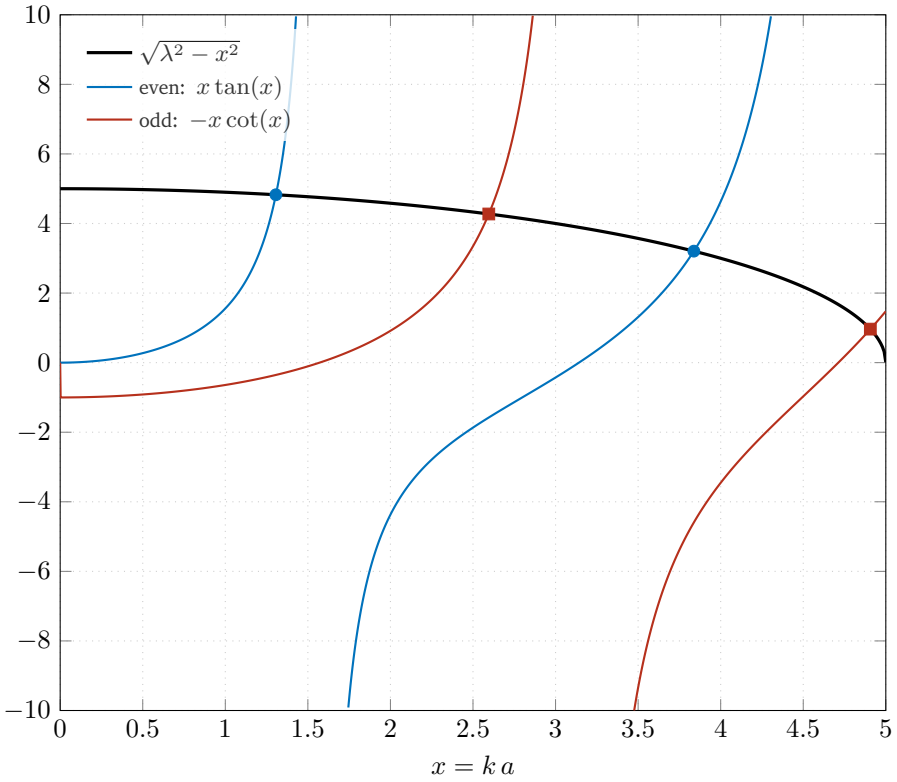
$$x = ka = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)a^2}{\hbar^2}} \quad , \quad \lambda = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$$

נבחין כי צד ימין של המשוואה מגדיר חצי מעגל ברדיוס הפרופורציוני ל V_0.
שימו לב: קיבלנו משוואה שהפתרונות שלה, x, הם למעשה ערכים של k שעבורם הקשר שדרשנו שהמקדמים A, B יקיימו אכן מתקיים. כלומר, פתרונות המשוואה נותנים לנו ערכי k (או באופן שקול, ערכי E) שעבורם קיים פתרון למשוואת שרדינגר בכל המרחב.

- באופן דומה, נוכל לקבל עבור הפתרון האי זוגי:

$$\boxed{-x\cot(x) = \sqrt{\lambda^2 - x^2}}$$

קיבלנו משוואה עבור פונקציות הגל הסימטריות, ועבור פונקציות הגל האנטי סימטריות. כדי לדעת לאלו ערכי x קיימים פתרונות למשוואות, נצייר את שני צדי המשוואה ונבדוק האם יש נקודות חיתוך בין הגרפים:



איור 5: מעגל המיצג את צד ימין של משוואות האילוץ שלנו, $\sqrt{\lambda^2 - x^2}$ וגרפים עבור צד שמאל של המשוואה המתארת את הפונקציות הזוגיות, ושל הפונקציות האי זוגיות. נקודות החיתוך מתארות ערכים בהם יש אפשרות לתפירת תנאי השפה ולפתרון המקיים את משוואת שרדינגר בכל המרחב.

תוצאות חשובות:

1. נבחין כי שינוי ערכו של הפוטינציאל ישנה את רדיוס המעגל המצויר, λ. ככל שרדיוס המעגל גדל, נקבל יותר חיתוכים ולכן יותר אנרגיות אפשריות. כמו כן, ניתן להסיק כי לא משנה כמה קטן הפוטינציאל, תמיד יהיה לפחות פתרון אחד!

2. סינגולריות עבור הפתרונות הזוגיים מתקיימת עבור ערכי $x = \frac{\pi}{2} + n\pi$ ועבור הפתרונות האי זוגיים עבור ערכי $x = n\pi$. כל נקודת חיתוך, x_j, תמצא בתוך התחום $x_j \in [\frac{\pi}{2}(j-1), \frac{\pi}{2}j]$. לכן, סך כל הפתרונות (מספר החיתוכים הזוגיים והאי זוגיים עם המעגל), N, נקבע על ידי חלוקת רדיוס המעגל במרווח שמתאים עבור כל פתרון, $\pi/2$:

$$N = \left\lfloor \frac{2\lambda}{\pi} \right\rfloor + 1 = \left\lceil \frac{2\lambda}{\pi} \right\rceil$$

כאשר הוספנו $+1$ לערך התחתון היות וכל עוד האינטרוול מתחיל בתוך רדיוס המעגל נקבל שקיים פתרון, ולכן עלינו להוסיף פתרון נוסף על הערך השלם התחתון שחישבנו.

3. עבור המקרה בו $a \to 0$, $V_0 \to \infty$ נקבל שרדיוס המעגל שואף ל-0. לכן, במקרה הזה יהיה בדיוק פתרון אחד. מקרה זה מתאים לפוטינציאל דלתא עם מקדם שלילי. המצב היחיד הוא המצב הקשור היחיד שקיים עבור פוטינציאל זה.

4. כאשר נקח את הגבול בו $V_0 \to \infty$ נשחזר את התוצאה של בור פוטינציאל אינסופי: כאשר $V_0 \to \infty$ זה משפיע באופן ישיר על רדיוס המעגל, ונקבל כי $\lambda \to \infty$. כמו כן, יש קשר בין x ל-λ דרך המשוואות שמצאנו:

$$x\tan(x) = \sqrt{\lambda^2 - x^2}$$
$$\frac{x^2}{\cos^2(x)} = \lambda^2 \to \infty$$

בשביל לקבל פתרון נדרוש כי $\cos^2(x) = 0$,

$$\cos(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = \frac{\pi}{2} + \pi n$$

כלומר לכל ערך של n סופי x סופי. מכאן,

$$qa = \sqrt{\lambda^2 - x^2} \to \infty$$

כאשר $V_0 \to \infty$. פונקציית הגל מחוץ לבור מתאפסת:

$$\psi(x)_{\text{outside}} = \begin{cases} A\mathrm{e}^{qx}, & x < -a, \\ D\mathrm{e}^{-qx}, & x > a \end{cases} \xrightarrow[q\to\infty]{} \begin{cases} 0, & x < -a, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

בתוך הבור נקבל כי $k = \frac{\pi + 2\pi n}{2a}$, כלומר

$$\psi(x)_{\text{inside}} = B\cos\left(\frac{\pi(2n+1)}{2a}\right),$$

ונוכל לבדוק במפורש כי פונקציית הגל נעלמת על שפת הבור האינסופי, $x = \pm a$. נשים לב כי תנאי הדיסקריטיזציה הזה על k לא מתאים עבור הפתרון האיזוגי (כלומר פונקצית הגל שנקבל בתוך הבור לא יתאפסו על קצות הבור, כלומר פונקצית הגל לא תהיה רציפה). זה הגיוני מאחר והסתכלנו על סוג הפתרונות שנקבל בבור אינסופי עבור הפתרונות הזוגיים. בצורה דומה, נוכל לראות מה הגבול של $\lambda \to \infty$ אומר עבור הפתרונות האיזוגיים (כלומר מה הדיסקריטיזציה על k) ולהמשיך כמו מקודם. סה"כ, כשניקח בחשבון גם את הפתרונות הזוגיים וגם את הפתרונות האי זוגיים נקבל את הספקטרום המלא עבור בור פוטינציאל אינסופי.