קוונטים 2 – תרגול 1
חזרה על קוונטים 1

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

תוכן העניינים

1 הקדמה

1.1 פונקציית הגל ואופרטורים

במכניקת הקוונטים מצב המערכת בזמן t מתואר על-ידי **פונקציית הגל** $|\psi(t)\rangle$ (ket בכתיב דיראק), והיא וקטור (עמודה) במרחב הילברט. $\langle\chi| = [|\chi\rangle]^\dagger$ (bra בכתיב דיראק) הוא אופרטור לינארי שפועל משמאל על וקטורים $|\psi\rangle$ ונותן מספר מרוכב $\langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ (ומכאן השם $\mathrm{bra(c)ket}$), זו **המכפלה פנימית**, עם שלוש התכונות הבאות:

1. הצמדה: $\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*$.
2. לינאריות בארגומנט הימני: $\langle\chi|\phi + \lambda\psi\rangle = \langle\chi|\phi\rangle + \lambda\langle\chi|\psi\rangle$, $\forall\lambda\in\mathbb{C}$.
3. חיוביות: $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, כאשר $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff |\psi\rangle = 0$.

אנחנו מפרשים את פונקציית הגל כצפיפות הסתברות של המערכת, ולכן הוקטורים שיעניינו אותנו ויצייגו מצבים פיזיקליים הם בהכרח **מנורמלים**:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{1.1}$$

איך נמדוד גדלים של המערכת במצב $|\psi\rangle$? במכניקת הקוונטים כל הגדלים המדידים הם **אופרטורים** O במרחב הילברט (כלומר $O|\psi\rangle = |O\psi\rangle$ הוא גם וקטור). הגדלים המדידים הקלאסיים במרחב המקום (אופרטור הספין פועל במרחב נפרד) הם פונקציה של אופרטורי המיקום x והתנע p (המשתנים הקנוניים), ואולי גם של הזמן t:

$$O = O(x, p; t) \tag{1.2}$$

כשאנחנו מודדים את O בהרבה ניסויים זהים של מערכת במצב $|\psi\rangle$ (אנסמבל), הממוצע של כל המדידות הוא **ערך התצפית**,

$$\langle O\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle \tag{1.3}$$

גודל פיזיקלי מדיד הוא בהכרח אופרטור **הרמיטי** $O^\dagger = O$ (הע"ע שלו ממשיים).[1]

1.2 מדידות

עבור מצב $|\psi\rangle$ כללי ישנה חוסר וודאות לגבי תוצאת המדידה של $\langle A\rangle$ (המתבטאת בסטיית תקן σ_A), אבל עבור **המצבים העצמיים** של A אנחנו יודעים בוודאות מושלמת מה תוצאת המדידה – **הערך העצמי** $\langle A\rangle = a$ (כאשר $A|a\rangle = a|a\rangle$). לכן המ"ע והע"ע של כל אופרטור הם בעלי עניין רב לנו, ובפרט:

1. מ"ע של אופרטור המיקום, $x|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$
2. מ"ע של אופרטור התנע, $p|k_0\rangle = \hbar k_0|k_0\rangle$
3. מ"ע של ההמילטוניאן, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

[1] נזכיר שהצמוד ההרמיטי של O הוא האופרטור $O^\dagger$ כך ש-$\langle O^\dagger\chi|\psi\rangle = \langle\chi|O\psi\rangle$ לכל χ,ψ.

המ"ע של האופרטורים מהווים בסיס למרחב, ולכן כל מצב $\left|\psi\right\rangle$ אפשר לפרק לרכיבים בבסיסים שונים,

$$\left|\psi\right\rangle=\int\psi\left(x\right)\left|x\right\rangle\mathrm{d}x=\int\tilde{\psi}\left(p\right)\left|p\right\rangle\mathrm{d}p=\sum_{n}c_{n}\left|n\right\rangle \tag{1.4}$$

איך נמצא את הרכיבים של $\left|\psi\right\rangle$ בבסיס מסוים, למשל בסיס המיקום? נפעיל $\left\langle x\right|$ משמאל *(הטריק של פורייה)*:

$$\left\langle x|\psi\right\rangle=\int\psi\left(x'\right)\left\langle x|x'\right\rangle\mathrm{d}x'=\int\psi\left(x'\right)\delta\left(x-x'\right)\mathrm{d}x'=\psi\left(x\right) \tag{1.5}$$

גם ההצגות של האופרטורים תלויות בבסיס שבו אנחנו עובדים. בבסיס המיקום למשל:

$$\left\langle x|\hat{x}|\psi\right\rangle=x\left\langle x|\psi\right\rangle=x\psi\left(x\right),\qquad\left\langle x|\hat{p}|\psi\right\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left\langle x|\psi\right\rangle=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \tag{1.6}$$

אם נוכל למצוא מ"ע של כמה אופרטורים בו-זמנית, נוכל לדעת בוודאות את כל הגדלים שהם מייצגים בבת-אחת! האם זה אפשרי? כן, רק אם האופרטורים **מתחלפים** זה עם זה $[A,B]=0$ (להזכירם, $[A,B]=AB-BA$). בפיזיקה קלאסית כל האופרטורים מתחלפים, ואין חוסר וודאות. במכניקת הקוונטים המיקום והתנע לא מתחלפים, ומקיימים את יחס החילוף

$$[x,p]=i\hbar \tag{1.7}$$

זו **קוונטיזציה קנונית**. אחת מתוצאותיה היא עקרון אי-הוודאות של הייזנברג:

$$\sigma_{x}\sigma_{p}\geq\hbar/2 \tag{1.8}$$

אי-אפשר למדוד בוודאות מוחלטת את המיקום והתנע של חלקיק *בו-זמנית*.

1.3 משוואת שרדינגר

המשוואה הקובעת את הדינמיקה של המערכת, כלומר ההתפתחות בזמן של $\left|\psi\left(t\right)\right\rangle$, היא **משוואת שרדינגר**

$$H\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle \tag{1.9}$$

כאשר H הוא אופרטור ההמילטוניאן (הקלאסי)

$$H\left(x,p\right)=\frac{p^{2}}{2m}+V\left(x\right) \tag{1.10}$$

בתמונת שרדינגר, פונקצית הגל מתפתחת בזמן והאופטורים קבועים בזמן. אם H לא תלוי במפורשות בזמן ($\partial H/\partial t=0$), אנחנו יכולים לפתור את משוואת שרדינגר עם **אופרטור הקידום בזמן** (הפרופוגטור)

$$\mathcal{U}\left(t-t'\right)=e^{-\frac{i}{\hbar}H\left(t-t'\right)} \tag{1.11}$$

המקדם את פונקצית הגל מזמן t' לזמן t. בתמונת שרדינגר,

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=\mathcal{U}\left(t-t_{0}\right)\left|\psi\left(t_{0}\right)\right\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}H\left(t-t_{0}\right)}\left|\psi\left(t_{0}\right)\right\rangle \tag{1.12}$$

כדי לקדם בזמן את המערכת עלינו לכפול את המצב ψ באקספוננט של ההמילטוניאן H. פרקטית, כדי להפעיל את הפרופגטור על מצב כלשהו אנחנו קודם נפרק את המצב ההתחלתי לסופרפוזיציה של מ"ע של H ואז נפעיל את הפרופגטור:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \implies |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\sum_n c_n |n\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle \tag{1.13}$$

הערה: *זכרו שאם $|a\rangle$ הוא מ"ע של אופרטור A עם ע"ע a, אז כל פונקציה של האופרטור A תפעל על $|a\rangle$ כך*

$$f(A)|a\rangle = f(a)|a\rangle \tag{1.14}$$

כלומר רק החלפנו את A בע"ע a בפונקציה. זה נובע מפיתוח בטור טיילור של הפונקציה f.

2 זהויות שימושיות

קומוטטור של כפל:

$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B \tag{2.1}$$

קומטטור של פונקציה אם $[A,[A,B]] = 0$:

$$[f(A), B] = f'(A)[A,B] \tag{2.2}$$

נוסחת בייקר-קמפבל-האוסדורף Baker-Campbell-Hausdorff (BCH):

$$e^A B e^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \dots \tag{2.3}$$

נוסחת גלאובר Glauber אם $[A,B] = \text{const.}$:

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{2.4}$$

מכפלה של שני סימני לוי-צ'יויטה Levi-Civita ϵ_{ijk} עם אינדקס משותף:

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmk} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl} \tag{2.5}$$

3 תנע זוויתי

3.1 תנע זוויתי כללי J

נסמן ב-J **תנ"ז כללי** (מבלי להתחייב אם מדובר בתנ"ז מסלולי L, ספין S או חיבור שלהם). אלה שלושה אופרטורים $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ המקיימים את יחסי החילוף

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \qquad \left[J^2, \mathbf{J}\right] = 0 \tag{3.1}$$

אנחנו יכולים ללכסן בו"ז את התנ"ז הכולל J^2 ורק אחד מה-J_i, אותו לרוב נבחר להיות ההיטל של התנ"ז בכיוון z, J_z. המ"ע של שניהם הם $|jm\rangle$:

$$J^2\,|jm\rangle = \hbar^2 j\,(j+1)\,|jm\rangle\,, \qquad J_z\,|jm\rangle = \hbar m\,|jm\rangle \tag{3.2}$$

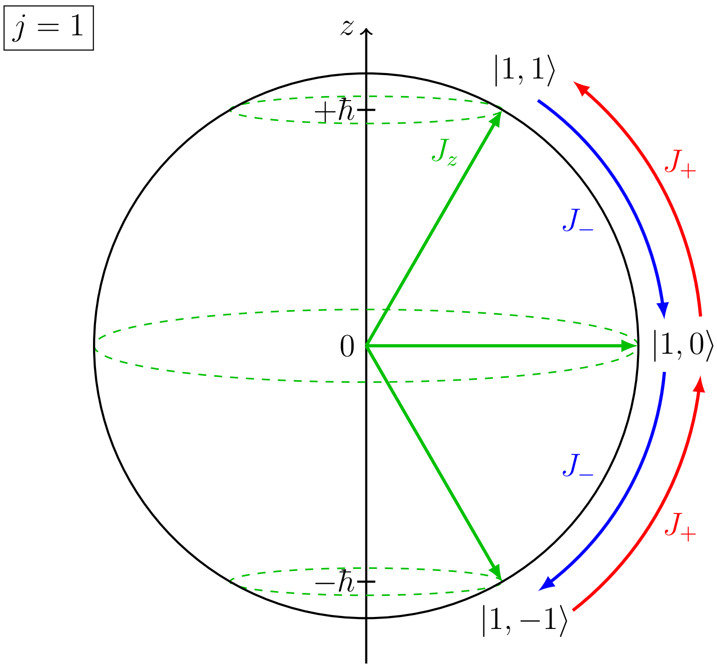
כאשר $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$ מספר חצי-שלם ו-$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$ (בסה"כ $2j+1$ ערכי m). מ-J_x ו-J_y ניצור **אופרטורי סולם** $J_\pm$ שמעלים ומורידים אותנו ביחידת $\hbar$ בין מצבי $|jm\rangle$ שונים,

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y, \qquad J_\pm\,|jm\rangle = \hbar\sqrt{j\,(j+1) - m\,(m\pm 1)}\,|j, m\pm 1\rangle \tag{3.3}$$

שימו לב ש-$J_\pm\,|j, \pm j\rangle = 0$. הם מקיימים את יחסי החילוף:

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \qquad [J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \tag{3.4}$$

ראו לדוגמא המחשה של התנ"ז $j=1$:



3.2 תנע זוויתי מסלולי L

התנ"ז המסלולי (או **אורביטלי**) מוגדר להיות

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}, \qquad L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k \tag{3.5}$$

L_i מקיימי את יחסי החילוף במשוואה (3.1), אבל רק עבור ערכי ℓ שלמים. המ"ע בהצגה המרחבית הם **ההרמוניות-ספריות**:

$$\langle\mathbf{r}|\ell m\rangle = Y_{\ell m}\,(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}e^{im\varphi}P_\ell^m\,(\cos\theta) \tag{3.6}$$

כאשר $P_\ell^m\,(x)$ הם פונקציות לז'נדר הנלוות:

$$P_\ell^m\,(x) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{\ell+m}\left(x^2-1\right)^\ell \tag{3.7}$$

בקואורדינטות כדוריות האופרטורים מיוצגים על-ידי

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) & L_\pm &= \pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_y &= -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) & L^2 &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\ L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \tag{3.8}$$

והאנרגיה הקינטית של חלקיק היא

$$T = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{L^2}{2mr^2} \tag{3.9}$$

כאשר התנ"ז נשמר הע"ע ℓ נשמר לכן ההמילטוניאן לא יכול לערבב מצבים עם ערכי ℓ שונים.

3.3 ספין S

הספין הוא תנ"ז אינטרינזי של כל חלקיק (מעין התנ"ז של סיבוב החלקיק סביב עצמו), ומקיים את אותם יחסי החילוף כמו במשוואה (3.1). בניגוד לתנ"ז המסלולי, הספין הכולל s יכול להיות גם מספר *חצי-שלם*,[2] וערכו *קבוע* ולא משתנה. אין לספין אנלוג קלאסי באמת, ומרחב הספין נפרד ממרחב המשתנים הקלאסיים שנפרש על-ידי x ו-p.

עבור $s = 1/2$, אופרטור הספין מוגדר

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \tag{3.10}$$

כאשר $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ הן **מטריצות פאולי**:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

כהרגלנו, נעבוד בבסיס המלכן את S_z כך שהמ"ע המתאימים לע"ע הם $m_s = \pm\frac{1}{2}\hbar$

$$\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = |+\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = |-\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

אופרטורי ההעלאה וההורדה הם

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

תכונות של מטריצות פאולי:

- אנטי-חילופיות: $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$, $(i \neq j)$

[2] רוב החלקיקים בטבע הם בעלי ספין חצי.

- לכל כיוון $\hat{\mathbf{n}}$,

$$\left(\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)^2=1 \tag{3.14}$$

ובפרט, לכל אחד מהכיוונים הקרטזיים $\left(\sigma_i\right)^2=1$. מכך נסיק כי הע"ע של כל אחת מהמטריצות (ולמעשה של כל מטריצת פאולי בכיוון כללי $\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$) הם ±1.

- יחס החילוף הוא

$$\left[\sigma_i,\sigma_j\right]=2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{3.15}$$

ולכן ניתן לכתוב באופן כללי שהמכפלה היא $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+i\epsilon_{ijk}\sigma_k$.

- הטרייס (עקבה) מתאפס, $\operatorname{tr}\sigma_i=1$
- האקספוננט בכיוון $\hat{\mathbf{n}}$ הוא $e^{i\theta(\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})}=1$
- עבור וקטורים $\mathbf{a},\mathbf{b}$ המתחלפים עם $\boldsymbol{\sigma}$: $\left(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\left(\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)=\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right)$

4 תזכורת: בעיות שפתרנו בקוונטים 1

4.1 בור פוטנציאל אינסופי

חלקיק עם מסה m כלוא בבור פוטנציאל באורך L עם קירות אינסופיים,

$$V\left(x\right)=\begin{cases}0 & 0\leq x\leq L\\ \infty & \text{otherwise}\end{cases} \tag{4.1}$$

הפוטנציאל סימטרי ביחס למרכזו ב-$x=L/2$, ואכן פונקציות הגל של המ"ע של H זוגיות ואי-זוגיות לסירוגין:

$$\left\langle x|n\right\rangle=\chi_n\left(x\right)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\qquad\left(n=1,2,\ldots\right) \tag{4.2}$$

(זו כמובן רק פונקצית הגל *בתוך* הבור – מחוץ לבור היא 0). התנע והאנרגיה של מצב $\left|n\right\rangle$ הן

$$k_n=\frac{n\pi}{L},\qquad E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \tag{4.3}$$

שימו לב שאנחנו יודעים את התנע ואת האנרגיה של המ"ע בו"ז, שכן $\left[p,H\right]=0$ במקרה זה.

4.2 אוסצילטור הרמוני (קוונטי)

חלקיק מרגיש את ההשפעה של אוסצילטור הרמוני בעל תדירות ω:

$$V\left(x\right)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{4.4}$$

פונקציות הגל של המ"ע והאנרגיות המתאימות הן (שימו לב שהספירה מתחילה מ-$n=0$):

$$\phi_n\left(x\right)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}H_n\left(\xi\right)e^{-\xi^2/2},\qquad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad\left(n=0,1,2,\ldots\right) \tag{4.5}$$

כאשר $\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ו-H_n הם פולינומי הרמיט,

$$H_n\left(\xi\right) = \left(-1\right)^n e^{\xi^2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{4.6}$$

הדרך האלגברית לפתור את הבעיה היא על-ידי הגדרת אופרטורי העלאה והורדה (סולם/יצירה והשמדה):

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) \tag{4.7}$$

יחס החילוף של x ו-p במשוואה (1.7) גורר את יחס החילוף

$$\left[a, a^\dagger\right] = 1 \tag{4.8}$$

אם נהפוך את ההגדרות במשוואה (4.7) נוכל לבטא את המיקום והתנע כך:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a^\dagger + a\right), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a^\dagger - a\right) \tag{4.9}$$

ולכתוב מחדש את ההמילטוניאן של האוסצילטור ההרמוני באמצעות a ו-$a^\dagger$,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \tag{4.10}$$

כאשר $N \equiv a^\dagger a$ **אופרטור המספר**. המ"ע של N ($N\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$) הם המ"ע של האנרגיה, ואופרטורי ההעלאה וההורדה מזיזים אותנו בין ערכי n שונים:

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle, \qquad a^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle \tag{4.11}$$

לכן ניתן לבנות את כל המ"ע באמצעות הפעלה חוזרת של $a^\dagger$ על מצב היסוד (שמקיים $a\left|0\right\rangle = 0$):

$$\left|n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\left|0\right\rangle \tag{4.12}$$

4.3 אטום המימן

אטום מימן מורכב מאלקטרון אחד ופרוטון אחד (אטום *דמוי-מימן* מורכב מ-Z פרוטונים). מסת הפרוטון $m_\mathrm{p} = 938.27\,\mathrm{MeV/c^2}$ גדולה פי $1800 \sim$ ממסת האלקטרון $m_\mathrm{e} = 0.51\,\mathrm{MeV/c^2}$, לכן ניתן לפתור את הבעיה בהנחה שהפרוטון נשאר במקומו והאלקטרון חג סביבו (מרכז המסה הוא בקירוב טוב מיקום הפרוטון). האלקטרון נמצא תחת השפעת הפוטנציאל

$$V\left(r\right) = -\frac{Ze^2}{r} \tag{4.13}$$

מכיוון שהפוטנציאל הזה ספרי-סימטרי, גם המ"ע יכבדו את הסימטריה הזו, וזה מתבטא בפירוק של פונקציות הגל לפתרון רדיאלי ופתרון זוויתי:

$$\left\langle \mathbf{r}|n\ell m\right\rangle = R_{n\ell}\left(r\right)Y_{\ell m}\left(\theta,\varphi\right), \qquad \left(n = 1, 2, \ldots; \ell = 0, \ldots, n-1\right) \tag{4.14}$$

החלק הזוויתי הם אותם המ"ע של התנ"ז המסלולי, ולא במקרה; בגלל הסימטריה הספרית $[H, \mathbf{L}] = 0$ (שימור תנ"ז) ולכן המ"ע של כל המערכת ביחד מאופיינים על-ידי מספר רמת האנרגיה (n), התנ"ז (ℓ) וההטלה על ציר z (m).

הפתרון הרדיאלי של המשוואה הוא

$$R_{n\ell}(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}}\rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho) \tag{4.15}$$

כאשר $\rho \equiv \frac{2Z}{n}\frac{r}{a_0}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53\,\text{Å}$ הוא **רדיוס בוהר** ו-$L_q^{(p)}(\rho)$ הם פולינומי לגר המוכללים,

$$L_q^{(p)}(\rho) = \frac{e^\rho \rho^{-p}}{q!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^q \left(e^{-\rho}\rho^{p+q}\right) \tag{4.16}$$

האנרגיות של המ"ע מאופיינים רק על-ידי n,

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2}13.6\,\mathrm{eV} \tag{4.17}$$

הניוון של האנרגיה ב-m נובע מהסימטריה הספרית של הבעיה, ולא צריך להפתיע אותנו: לא יכול להיות שבבעיה ספרי-סימטרית ההטלה על ציר z, שכיוונו שרירותי, תשפיע על ערך האנרגיה. הניוון ב-ℓ נובע מסימטריה *חבויה* שייחודית לפוטנציאלים קפלריים $(V \sim 1/r)$, ומתבטאת בגודל השמור **וקטור לפלס-רונגה-לנץ**,

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}}{2m_e} + V(r)\,\mathbf{r} \tag{4.18}$$

כמה פתרונות ראשונים של $R_{n\ell}$:

$$\begin{aligned}
R_{10}(r) &= 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} & R_{30}(r) &= 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2}\right)e^{-Zr/3a_0} \\
R_{20}(r) &= 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)e^{-Zr/2a_0} & R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}\left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right)e^{-Zr/3a_0} \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0} & R_{32}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

ערכי תצפית שימושיים לפי המ"ע $|n\ell m\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle r\rangle &= \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right] & \left\langle\frac{1}{r}\right\rangle &= \frac{Z}{a_0 n^2} \\
\left\langle r^2\right\rangle &= \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}\left[5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)\right] & \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle &= \frac{Z^2}{a_0^2 n^3\left(\ell+\frac{1}{2}\right)} \\
& & \left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle &= \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 \ell\left(\ell+\frac{1}{2}\right)(\ell+1)}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

הביטויים מחושבים לפי $\langle n\ell m|r^k|n\ell m\rangle = \int_0^\infty r^{k+2}R_{n\ell}^2(r)\,\mathrm{d}r$.

5 תרגילים

תרגיל 1 *(רמות לנדאו)*

חלקיק בעל מסה m ומטען q נמצא תחת השפעת שדה מגנטי אחיד $\mathbf{B} = B_0\hat{\mathbf{z}}$.

א. כתבו את ההמילטוניאן בכיול לנדאו, $\mathbf{A} = B_0 x\hat{\mathbf{y}}$.

ב. מהן הפונקציות העצמיות והאנרגיות העצמיות של המערכת?

ג. מהו הניוון במערכת?

א. נזכיר שבאלקטרומגנטיות התנע הקנוני הצמוד $\mathbf{p}$ *אינו* התנע הקינטי $m\mathbf{v}$, והמשתנים *הקנוניים* הם אלו שמקיימים את יחסי החילוף במשוואה (1.7). הלגראנז'יאן L של חלקיק טעון תחת השפעת שדה אלקטרומגנטי (פוטנציאל ϕ, וקטור פוטנציאל $\mathbf{A}$) הוא

$$L = \frac{1}{2}m\left(\mathbf{v}\right)^2 + \frac{q}{c}\mathbf{v}\cdot\mathbf{A} - q\phi \tag{5.1}$$

משוואות התנועה נותנות את כוח לורנץ. התנע הקנוני הצמוד הוא

$$\boxed{\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}} \tag{5.2}$$

נמצא את ההמילטוניאן ע"י טרנספורם לז'נדר,

$$H = \mathbf{p}\cdot\mathbf{v} - L = \frac{1}{2}m\left(\mathbf{v}\right)^2 + q\phi = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} + q\phi \tag{5.3}$$

מכיוון שיש לנו רק שדה מגנטי, אנחנו יכולים לאפס את ϕ בעזרת טרנספורמצית כיול. נעבוד בכיול לנדאו $\mathbf{A} = B_0 x\hat{\mathbf{y}}$ (אכן $\nabla\times\mathbf{A} = \frac{\partial A_z}{\partial x}\hat{\mathbf{z}} = B_0\hat{\mathbf{z}}$ כדרוש),

$$H_{\text{Landau}} = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{qB_0}{c}x\hat{\mathbf{y}}\right)^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\left(p_y - \frac{qB_0}{c}x\right)^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} \tag{5.4}$$

ב. H מתחלף עם p_y ו-p_z ולכן נוכל למצוא מ"ע של H שהם גם של p_y ו-p_z. אפשר להחליף את האופרטורים האלה בע"ע שלהם $p_{y(z)} \to \hbar k_{y(z)}$:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\left(\hbar k_y - \frac{qB_0}{c}x\right)^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\frac{qB_0}{c}\right)^2\left(x - \frac{\hbar k_y c}{qB_0}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{5.5}$$

נזהה את תדירות הציקלוטרון ונסמן ω_c:

$$x_0 \equiv \frac{\hbar k_y c}{qB_0}, \qquad \omega_c \equiv \frac{qB_0}{mc} \tag{5.6}$$

ההמילטוניאן הוא אוסצילטור הרמוני בציר x שמוזז ב-x_0 וחלקיק חופשי בציר z,

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(x - x_0\right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{5.7}$$

ההמילטוניאן הוא סכום של שני המילטוניאנים המתחלפים זה עם זה, ולכן הפונקציות העצמיות הן פשוט מכפלה של המ"ע הנפרדים והאנרגיות העצמיות הן סכום האנרגיות. כל מ"ע מתואר על-ידי רמת האנרגיה n_x של האוסצילטור ההרמוני בציר x ומספרי הגל k_y, k_z בצירים y, z:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | n_x, k_y, k_z \rangle &= \phi_{n_x}\left(x - x_0\left(k_y\right)\right) \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_y y} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_z z} \\ E_{n_x,k_y,k_z} &= \hbar\omega_c \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \end{aligned}} \tag{5.8}$$

ג. נשים לב שהפונקציות העצמיות תלויות במפורש ב-k_y (כלומר, לכל k_y יש פונקציה עצמית שונה) אך האנרגיות העצמיות לא תלויות כלל ב-k_y – יש ניוון *אינסופי* בבעיה, כי k_y יכול לקבל כל ערך $k_y \in (-\infty, \infty)$. עם זאת, בתיאור מציאותי יותר של הבעיה המערכת לא אינסופית ומוגבלת לתחום הסופי שבו מבוצע הניסוי, למשל קופסא (מחזורית) בעלת מימדים $L_x \times L_y \times L_z$. במקרה כזה k_y מקבל ערכים דיסקרטיים

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} N \tag{5.9}$$

בנוסף, מרכז האוסצילטור x_0 חייב להיות בתוך הקופסא $0 \leq x_0 \leq L_x$ (הבעיה מחזורית), ומכאן נקבל תנאי על N:

$$\frac{\hbar k_y c}{q B_0} = \frac{2\pi\hbar c}{q B_0 L_y} N \leq L_x \implies N_{\max} = \frac{q B_0}{2\pi\hbar c} L_x L_y \tag{5.10}$$

הניוון פרופרוציוני למימדי המערכת $A = L_x L_y$ וגדל עם שטחה. כל המטענים החופשיים הקיימים הם כפולות של מטען האלקטרון $q = Ze$ (Z שלם), ולכן נקבל

$$N_{\max} = Z \frac{e B_0}{hc} A \equiv Z \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{5.11}$$

כאשר זיהינו את השטף המגנטי $\Phi = \int \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{a} = B_0 A$ וסימנו $\Phi_0 \equiv hc/e$ (גודל זה מכונה *פלקסון* fluxon). השטף המגנטי מקוונטט ביחידות של שטף קוונטי Φ_0!

הערות:

אם לחלקיק ספין S יש פי $2S+1$ מצבים ונוכל לכתוב את הניוון באופן הכללי

$$D = Z\left(2S+1\right) \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{5.12}$$

אם גם ניקח בחשבון את העובדה ש-$\pm k_z$ (פרט ל-$k_z = 0$) מנוונים גם הם נקבל

$$D = 2Z\left(2S+1\right) \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{5.13}$$

ובפרט עבור אלקטרון ($Z = 1$ ו-$S = 1/2$) נקבל

$$D = 4 \frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{5.14}$$

תרגיל 2

בהינתן אוסצילטור הרמוני קוונטי, הראו כי $a^\dagger$ הוא אופרטור העלאה, וחשבו את $a^\dagger\left|n\right\rangle$ תוך שימוש ביחסי החילוף $\left[a,a^\dagger\right]=1$.

באופן כללי, אם רוצים להראות שאופרטור כלשהו O_+ הוא אופרטור העלאה ביחס למצב $\left|b\right\rangle$ שהוא מ"ע של אופרטור B, עלינו להוכיח ש-$O_+\left|b\right\rangle \propto \left|b+1\right\rangle$, כלומר $O_+\left|b\right\rangle$ בעל ע"ע $b+1$ ביחס ל-B. נוודא זאת על-ידי הפעלת B על $O_+\left|b\right\rangle$, ונבדוק האם מתקבל

$$B\left[O_+\left|b\right\rangle\right]=\left(b+1\right)O_+\left|b\right\rangle \tag{5.15}$$

נבדוק זאת עבור אופרטור ההעלאה $a^\dagger$ של האוסצילטור ההרמוני באופן אלגברי, רק על-ידי שימוש ביחס החילוף $\left[a,a^\dagger\right]=1$. המצבים $\left|n\right\rangle$ הם מ"ע של אופרטור המספר $N=a^\dagger a$, ולכן עלינו לבדוק האם $a^\dagger\left|n\right\rangle$ בעל ע"ע $n+1$ ביחס ל-N:

$$N\left[a^\dagger\left|n\right\rangle\right]=a^\dagger aa^\dagger\left|n\right\rangle=a^\dagger\left(a^\dagger a+1\right)\left|n\right\rangle=a^\dagger\left(N+1\right)\left|n\right\rangle=\left(n+1\right)a^\dagger\left|n\right\rangle \tag{5.16}$$

זה מוכיח ש-$a^\dagger$ אופרטור העלאה.

כדי למצוא את $a^\dagger\left|n\right\rangle$ נזכור שהוא פרופורציוני ל-$\left|n+1\right\rangle$ ולכן

$$a^\dagger\left|n\right\rangle=C\left|n+1\right\rangle \tag{5.17}$$

איך נמצא את קבוע הפרופורציה C? נירמול! נדרוש

$$1=\left\langle n+1|n+1\right\rangle=\frac{1}{\left|C\right|^2}\left\langle n|aa^\dagger|n\right\rangle=\frac{1}{\left|C\right|^2}\left\langle n|N+1|n\right\rangle=\frac{n+1}{\left|C\right|^2}\left\langle n|n\right\rangle=\frac{n+1}{\left|C\right|^2} \tag{5.18}$$

ולכן $C=\sqrt{n+1}$. לסיכום

$$\boxed{a^\dagger\left|n\right\rangle=\sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle} \tag{5.19}$$

תרגיל 3

ההמילטוניאן של ספין קוונטי הוא

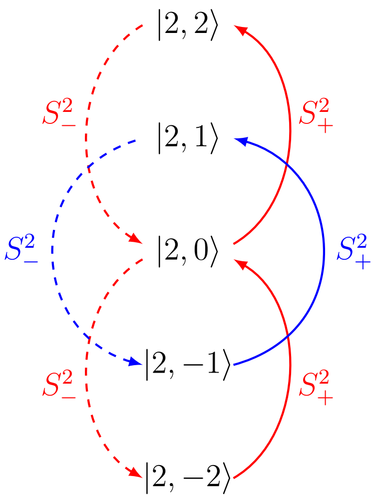
$$H=\frac{\omega}{\hbar}\left(S_+^2+S_-^2\right) \tag{5.20}$$

כאשר ω הוא קבוע חיובי.

א. מודדים את S^2 ומקבלים את התוצאה $6\hbar^2$. אם נמדוד כעת את האנרגיה, מהן תוצאות המדידה האפשריות?

ב. לאחר המדידה של $S^2=6\hbar^2$ בסעיף הקודם, מודדים את S_z ומתקבל הערך $\hbar$. מחכים זמן t_0 ומודדים שוב את S_z. מהן תוצאות המדידה האפשריות ומה ההסתברות לקבלן?

א. מדידה $S^2=6\hbar^2$ מספרת לנו ש-$s\left(s+1\right)=6$ ולכן $s=2$, ולכן מדובר במרחב 5-מימדי עם מ"ע $\left|2,-2\right\rangle,\ldots,\left|2,2\right\rangle$. נשים לב ש-$H$ הנתון מעלה או מוריד פעמיים, ולכן מקשר בין המצבים



תת-המרחב $s=2$ מתפרק לשני תתי-מרחבים $\left\{\left|2,1\right\rangle,\left|2,-1\right\rangle\right\}$ ו-$\left\{\left|2,2\right\rangle,\left|2,0\right\rangle,\left|2,-2\right\rangle\right\}$! אכן, אלמנטי המטריצה של H בתת-המרחב $s=2$ הם

$$\begin{aligned}\langle 2,m'|H|2,m\rangle &= \frac{\omega}{\hbar}\left(\langle 2,m'|S_+^2|2,m\rangle+\langle 2,m'|S_-^2|2,m\rangle\right)\\ &=\hbar\omega\sqrt{6-m\left(m+1\right)}\sqrt{6-\left(m+1\right)\left(m+2\right)}\delta_{m',m+2}\\ &+\hbar\omega\sqrt{6-m\left(m-1\right)}\sqrt{6-\left(m-1\right)\left(m-2\right)}\delta_{m',m-2}\end{aligned} \tag{5.21}$$

או בהצגה מטריצית (שימו לב לסדר הבסיסים),

$$H=\hbar\omega\left(\begin{array}{c|cc|ccc} & |2,1\rangle & |2,-1\rangle & |2,2\rangle & |2,0\rangle & |2,-2\rangle\\ \hline \langle 2,1| & 0 & 6 & 0 & 0 & 0\\ \langle 2,-1| & 6 & 0 & 0 & 0 & 0\\ \hline \langle 2,2| & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & 0\\ \langle 2,0| & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & 2\sqrt{6}\\ \langle 2,-2| & 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{6} & 0\end{array}\right) \tag{5.22}$$

התאפסות אלמנטי המטריצה המקשרים בין שני תתי-המרחבים היא ביטוי של הסימטריה בבעיה.

הע"ע של הבלוקים הם האנרגיות שניתן למדוד. בתת-מרחב $m=\pm 1$,

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 6 \\ 6 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda = \pm 6 \tag{5.23}$$

בתת-מרחב $m=0,\pm 2$,

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 2\sqrt{6} & 0 \\ 2\sqrt{6} & -\lambda & 2\sqrt{6} \\ 0 & 2\sqrt{6} & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda\left(\lambda^2-24\right)+24\lambda = 0 \implies \lambda = 0, \pm 4\sqrt{3} \tag{5.24}$$

ולכן האנרגיות שניתן למדוד הן

$$\boxed{E = 0, \pm 6\hbar\omega, \pm 4\sqrt{3}\hbar\omega} \tag{5.25}$$

ב. לאחר מדידה של $S_z=\hbar$ אנו נמצאים במצב $|\psi(0)\rangle = |2,1\rangle$ השייך לתת-המרחב $\{|2,1\rangle, |2,-1\rangle\}$. H לא יערבב בין תתי-המרחבים השונים, ולכן נוכל להתעלם מתת-המרחב השני. הוקטורים העצמיים בתת-מרחב זה הם

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1\rangle \pm |2,-1\rangle\right), \qquad E_\pm = \pm 6\hbar\omega \tag{5.26}$$

נבטא את $|\psi(0)\rangle$ במונחי המ"ע של המערכת,

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right) \tag{5.27}$$

כעת בקלות נוכל לקדם את המערכת בזמן t_0:

$$|\psi(t_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t_0}|+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t_0}|-\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-6i\omega t_0}|+\rangle + e^{6i\omega t_0}|-\rangle\right) \tag{5.28}$$

נחזור לבסיס המלכסן את S_z כדי לבצע שוב את המדידה,

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-6i\omega t_0}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1\rangle + |2,-1\rangle\right) + e^{6i\omega t_0}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1\rangle - |2,-1\rangle\right)\right] \\ &= \frac{e^{6i\omega t_0}+e^{-6i\omega t_0}}{2}|2,1\rangle - i\frac{e^{6i\omega t_0}-e^{-6i\omega t_0}}{2i}|2,-1\rangle \\ &= \cos(6\omega t_0)|2,1\rangle - i\sin(6\omega t_0)|2,-1\rangle \end{aligned} \tag{5.29}$$

כמובן שתוצאות המדידה האפשריות הן $\pm\hbar$ (נשארנו באותו תת-מרחב), וההסתברויות הן

$$\boxed{P(S_z=\hbar) = \cos^2(6\omega t_0), \qquad P(S_z=-\hbar) = \sin^2(6\omega t_0)} \tag{5.30}$$

ניתן לוודא שאכן $P_{\text{tot}} = P(\hbar)+P(-\hbar) = \cos^2(6\omega t_0)+\sin^2(6\omega t_0) = 1$.