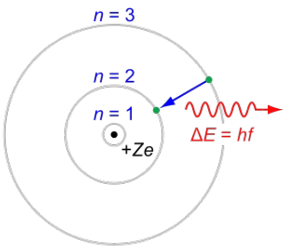
<u>תרגילים בסיסיים במכניקת הקוונטים</u>

<u>מודל האטום של בוהר</u>

<u>עקרונות היסוד של המודל</u>



1. האלקטרונים נעים בתנועה מעגלית סביב הגרעין. הם נתונים למשיכה החשמלית של הגרעין (לפי חוק קולון) ונמצאים בשיווי משקל בהתאם לחוקי המכניקה הקלאסית.
2. האלקטרונים אינם יכולים לנוע בכל מסלול מעגלי סביב הגרעין, אלא רק באלו בהם התנע הזוויתי של האלקטרונים הוא כפולה שלמה של קבוע פלאנק המצומצם (לכל תנע זוויתי נתון יש מסלול יחיד שמקיים שיווי משקל בין הכוח הצנטריפוגלי לכוח קולון): $L = n \cdot \hbar$
3. על אף שהאלקטרון מואץ בתנועה סיבובית, הוא איננו פולט קרינה (בניגוד לתחזית של תורת האלקטרומגנטיות של מקסוול, לפיה מטען מואץ פולט קרינה אלקטרומגנטית)
4. האלקטרון יכול לעבור בין מסלולים מותרים. בתהליך המעבר נקלט או נפלט קוונטום של קרינה אלקטרומגנטית - פוטון. הקרינה נקלטת עבור מעבר למסלול בו האנרגיה גדולה מהאנרגיה במסלול הנוכחי, ונפלטת עבור מעבר למסלול בו האנרגיה קטנה יותר. תדירות הקרינה, נקבעת על פי הפרש האנרגיה בין המסלולים השונים:
$$f \cdot h = E_{photon} = |E_i - E_f|$$

מודל האטום של בוהר נתן הסבר תיאורטי ל[נוסחה אשר מצא רידברג] שמתארת את אורך הגל שנפלט מאטום מימן כהפרש בין שתי רמות אנרגיה

$$\frac{1}{\lambda_{\text{vac}}} = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

כאשר R הוא קבוע רידברג.
בוהר מצא שרמות האנרגיה של אלקטרון באטום מימן מתקבלות על ידי הנוסחה

$$E_n = \frac{-m_e q_e^4}{8h^2\epsilon_0^2}\frac{1}{n^2}$$

ולכן הפוטון שמתקבל במעבר מרמת אנרגיה אחת לשניה באטום מימן ניתנת לנו על ידי ההפרש

$$E = E_i - E_f = \frac{-m_e q_e^4}{8h^2\epsilon_0^2}\frac{1}{n_i^2} - \frac{-m_e q_e^4}{8h^2\epsilon_0^2}\frac{1}{n_f^2} = \frac{m_e q_e^4}{8h^2\epsilon_0^2}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

לאלקטרון **<u>בודד</u>** הנע סביב גרעין אשר יש בו Z פרוטונים, רמת האנרגיה של האלקטרון ברמה ה-n מתקבלת על ידי הנוסחה

$$E = -\frac{Z(k_e e^2)^2 m_e}{2\hbar^2 n^2} \approx -\frac{13.6Z^2}{n^2}eV$$

כאשר k_e - קבוע קולון , Z - המספר האטומי, m_e - המסה של האלקטרון ו e - מטען האלקטרון.

**** נוסחה זו היינה מדוייקת רק במערכות בהן קיים אלקטרון אחד!!***

לקריאה נוספת :
http://en.wikipedia.org/wiki/Bohr_model

http://en.wikipedia.org/wiki/Rydberg_formula

<u>נירמול של פונקציה וחישובים סטטיסטיים</u>

קיימת הפונקציה הגאוסיאנית הבאה $p(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2}$

א) נרמלו את הפונקציה הזו על מנת לקבל $\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = 1$

ב) מצאו את $\langle x \rangle$, $\left\langle x^2 \right\rangle$ ו $\sigma \equiv \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$

<u>פתרון</u>

א)

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx \ . \ \ u \equiv x-a \ , \ du = dx$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-\lambda u^2} dx = A\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \ \Rightarrow \ A = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

ב)

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\lambda(x-a)^2} dx \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \int_{-\infty}^{+\infty} (u+a)e^{-\lambda u^2} du \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} ue^{-\lambda u^2} du + \int_{-\infty}^{+\infty} ae^{-\lambda u^2} du \right] \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} (0 + a\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}) = a \\
\left\langle x^2 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\lambda(x-a)^2} dx \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-\lambda u^2} du + \int_{-\infty}^{+\infty} 2aue^{-\lambda u^2} du + \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 e^{-\lambda u^2} du \right] \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \left[\frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} + 0 + a^2\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \right] = a^2 + \frac{1}{2\lambda} \\
\sigma &\equiv \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{2\lambda}
\end{aligned}$$

אופרטור התנע

ערך התוחלת של משתנה מסויים (הערך שאנחנו מצפים מערך אשר יש לו התפלגות של הסתברות מסויימת) אנו מחשבים על ידי הנוסחה

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x)dx$$

כאשר $P(x)$ היא צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק בנקודה x.

ולכן אם נתונה לנו פונקצית גל של חלקיק אנו יכולים לחשב את הערך בו אנו מצפים למצוא את החלקיק בזמן t מסוים לפי הנוסחה

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,t)|^2dx$$

עם התקדמות הזמן, ערך התוחלת $\langle x\rangle$ ישתנה, ולכן ניתן לשאול את השאלה מהו קצב השינוי של $\langle x\rangle$?

$$\begin{aligned}\frac{d\langle x\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,t)|^2dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\right)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(x,t)\right)\Psi(x,t)+\Psi^*(x,t)\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\right)\right]dx\end{aligned}$$

שימוש במשוואת שרדינגר $\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi$ והצמודה שלה $\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*$ נותנת לנו את המשוואה

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi^*(x,t)\right)\Psi(x,t)+\Psi^*(x,t)\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right)\right]dx$$

על ידי שימוש באינטגרציה בחלקים אנו מקבלים את התוצאה הסופית

$$\langle v\rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$$

ולכן אנו יכולים לקחת את $\langle p\rangle = m\langle v\rangle$ בתור

$$\langle p\rangle = \int \Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx$$

משפט ארנפסט

משפט ארנפסט, בקצרה אומר שהערכי התוחלת "מתנהגים" כמו הגדלים הפיזיקליים התואמים להם במכניקה קלאסית.

חשב\י את $\frac{d\left<p\right>}{dt}=\left<-\frac{\partial V}{\partial x}\right>$

<u>פתרון</u>

$$\left<p\right>=\int\Psi^*\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left<p\right>&=\int\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right]dx\\&=\int\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi+\Psi^*\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right]dx\end{aligned}$$

ממשוואת שרדינגר אנו יודעים ש

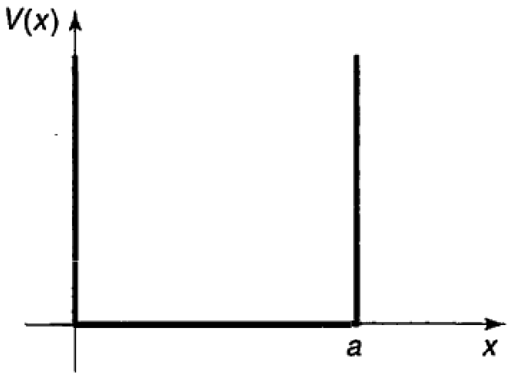
$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{i}{\hbar}V\Psi$$

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

לכן

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left<p\right>=&\int\left[\left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}+\frac{i}{\hbar}V\Psi\right]\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right.\\&\left.+\ \Psi^*\left(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{i}{\hbar}V\Psi\right]\right]dx\\=&-i\hbar\int\left[\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]+\frac{i}{\hbar}\left[V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi)\right]dx\right]\\=&-i\hbar\frac{i}{\hbar}\int\Psi^*V\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dx=\left<-\frac{\partial V}{\partial x}\right>\end{aligned}$$

חלקיק בבור פוטנציאלי אינסופי



נתון פוטנציאל

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

מצב זה אנלוגי לחלקיק על מסילה נתולת חיכוך הנתון בין שני קירות אנכיים, כך שהחלקיק נע הלוך ושוב בין הקירות אם יש לו מהירות התחלתית כלשהי.

נחשב את המצבים העצמיים של פונקציית הגל שמתקבלת

מחוץ לפוטנציאל אנו לוקחים כי הסבירות למצוא את החלקיק היא אפסית, ולכן $\psi(x) = x$

בתוך בור הפוטנציאל, איפה ש $V = 0$, משוואת שרדינגר שלא תלויה בזמן המתקבלת היא

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

אם אנו לוקחים $k \equiv \frac{2mE}{\hbar}$, אנו יכולים לרשום את משוואת שרדינגר בצורה הבאה

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

משוואה זו מתארת את המתנד ההרמוני הקלאסי
(אנו יוצאים כאן מתוך ההנחה ש $E > 0$, מדוע אנו יכולים להניח זאת?)

ולכן הפתרונות של פונקצית הגל הן

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

תנאי השפה שלנו נותנים לנו $\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0$, ולכן אנו נישארים עם הפתרון

$$\psi(x) = A\sin(kx)$$

כאשר אנו צריכים $kx = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, ...$

ולכן רמות האנרגיה המתקבלות לנו הן

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

ונירמול פונקצית הגל

$$1 = |A|^2 \int_0^a (\sin(kx))^* \sin(kx) dx = |A|^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx$$

שימוש בנוסחה

$$\int \sin^2 ax \, \mathrm{d}x = \frac{x}{2} - \frac{1}{4a}\sin 2ax + C = \frac{x}{2} - \frac{1}{2a}\sin ax \cos ax + C$$

נותן לנו $|A|^2 = \frac{2}{a} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

** לפאזה של A אין משמעות, ולכן אנו יכולים לקחת את A כמספר ממשי ופשוט לקחת שורש ריבועי

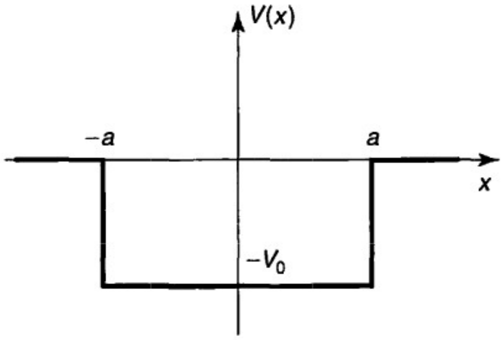
מכיוון שפונקצית הגל היא אפס מחוץ לבור הפוטנציאל אנחנו יכולים לעשות אינטגרציה מ $x = 0$ ל $x = a$, ולכן

הצורה הסופית של פונקצית הגל

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

<u>חלקיק בבור פוטנציאלי</u>

נמצא את הפתרונות למשוואת שרדינגר
לפוטנציאל בצורה הבאה



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

באזור $x < -a$ הפוטנציאל הוא אפס, לכן משוואת שרדינגר היא

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

נגדיר

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

כך שנוכל לכתוב

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$$

אנו מתייחסים כעת למצבים קשורים בהם $E < 0$, הפתרון הכללי למשוואה זו הוא

$$\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$$

מכיוון שהחלק e^{-kx} שואף לאינסוף כאשר $x \to -\infty$ אנו לוקחים את A שווה לאפס על מנת שהפונקצית גל שלנו תוכל להיות מנורמלת. לכן ניקח $\psi(x) = Be^{kx}$ עבור $x < -a$.

באזור $-a < x < a$ הפוטנציאל הוא לא אפסי, ולכן משוואת שרדינגר המתקבלת היא

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$$

נגדיר

$$l \equiv \frac{2m(E + V_0)}{\hbar}$$

כך שניתן לכתוב את משוואת שרדינגר בצורה הבאה

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi$$

הפתרון הכללי למשוואה זו הוא

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx)$$

ובאופן דומה, לאזור $x > a$ אנו מקבלים

$$\psi(x) = Fe^{-kx}$$