פונקציית הגל

ראינו בתרגול הקודם כי לחלקיקים יש תכונות גליות: הם ניתנים לתיאור ע"י פונקצייה $\psi\left(x,t\right)$ שנקראת פונקציית הגל ומקיימת את משוואת שרדינגר. בנוסף חלקיקים יכולים "להתאבד". אולם מה המשמעות של פונקציית הגל? מה היא אומרת לנו על החלקיק?

צפיפות הסתברות

תורת הקוונטים נותנת לנו תיאור הסתברותי בלבד של המציאות. פונקציית הגל של חלקיק מאפשרת לנו לענות על השאלה הבאה: מה ההסתברות למדוד את החלקיק בתחום $a<x<b$ בזמן t?

$$P\left(a<x<b,t\right)=\int_{a}^{b}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx$$

כלומר, הנורמה בריבוע של פונקציית הגל היא צפיפות ההסתברות, $\rho\left(x,t\right)=\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}$.

הערה: כאשר אנחנו מודדים את החלקיק במקום מסויים אנחנו יודעים איפה הוא נמצא, כלומר ההסתברות שהוא יהיה איפה שמדדנו אותו היא 1 וההסתברות שהוא יהיה במקום אחר היא 0, במילים אחרות מדידה משנה את פונקציית הגל של החלקיק. ע"פ תורת הקוונטים מדידת חלקיק **משנה את מצבו**.

על מנת שהנורמה של פונקציית הגל בריבוע תשמש צפיפות הסתברות היא חייבת לקיים $\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx=1$, זאת כיוון שההסתברות למצוא את החלקיק במקום כלשהו חייבת להיות 1.

דוגמא: פונקציית גל גיאוסיאנית

קשר לאלגברה לינארית

ראיתם בכיתה ובשיעורי הבית כי עבור פוטנציאל שאינו תלוי בזמן ניתן לכתוב את פונקציית הגל ע"י $\psi\left(x\right)e^{-i\omega t}$ כאשר $E=\hbar\omega$, האנרגיה הכוללת של החלקיק. $\psi\left(x\right)$ מקיימת את משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}\psi\left(x\right)}{\partial x^{2}}+U\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\psi\left(x\right)$$

בשפה של אלגברה לינארית, צד שמאל של המשוואה הינו אופרטור לינארי שפועל על ψ, נסמן $\hat{\mathcal{H}}=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}+U\left(x\right)$. ונקבל כי המשוואה היא בעצם משוואת ערכים עצמיים:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi=E\psi$$

כאשר הפונקציות ψ_{n} שפותרות את המשוואה הן הוקטורים העצמיים של $\hat{\mathcal{H}}$ (נקראות בדרך כלל המצבים העצמיים של החלקיק) והאנרגיות המתאימות להן E_{n} הם הערכים העצמיים של $\hat{\mathcal{H}}$.

מרחב הילברט

המרחב הוקטורי שהגדרנו נקרא מרחב הילברט. ניתן להוכיח כי המצבים העצמיים מהווים בסיס למרחב, כלומר אם $\{\psi_n\}$ קבוצת כל המצבים העצמיים של החלקיק אז פוקנציית גל כלשהי של החלקיק, $\phi(x)$, ניתנת לכתיבה ע"י:

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

כלומר ניתן לפרוש כל פונקציית גל בעזרת המצבים העצמיים. c_n הם מקדמי הפריסה. בנוסף ניתן להגדיר מכפלה פנימית במרחב הוקטורי שלנו:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\phi(x)\,dx$$

על פי ההגדרה הזו למכפלה פנימית, המצבים העצמיים תמיד יהיו בסיס אורתונורמלי, כלומר אם ψ_n ו ψ_m מצבים עצמיים אז:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_m(x)\,dx = \delta_{nm}$$

הסימון δ_{nm} נקרא הדלתא של קרוניקל ומשמעותו $\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n=m \\ 0 & n\neq m \end{cases}$.
בפרט זה אומר שהמצבים העצמיים מקיימים את התנאי שראינו קודם לגבי ההסתברות:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2\,dx = 1$$

נוכל להשתמש באורתונורמליות של המצבים העצמיים בכדי למצוא את מקדמי הפריסה של פונקציית גל כלשהי. נניח שנתונה לנו פונקציית גל $\phi(x)$. נפרוש אותה ע"י המצבים העצמיים:

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

בכדי למצוא את c_m נרשום את המכפלה הפנימית של ψ_m עם ϕ:

$$\langle\psi_m|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta_{nm} = c_m$$

דוגמה: בור פוטנציאל אינסופי

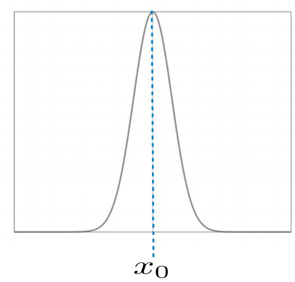
נתון חלקיק חופשי אשר מצבו בזמן t=0 מתואר ע"י פונקציית הגל:

$$\Psi(x, t=0) = Ae^{-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2}}$$

1. חשב את A
2. מצא את ערך התוחלת של מיקום החלקיק ב t=0 - $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t=0)^* x \Psi(x,t=0) dx$
3. מצא את אי הודאות במיקום החלקיק - $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$
4. מצא את התמרת הפורייה עבור פונקציה זו
5. חשב את Δk
6. חשב את המכפלה $\Delta x \times \Delta k$

<u>תשובה</u>

א. על מנת לחשב את A אנו צריכים לנרמל את הפונקציה



כך ש:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}} dx$$

* אינטגרלים שימושיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a^2x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^6}}$$

נגדיר $y = (x - x_0)$, כך ש $dy = dx$, ולכן אנו יכולים לעשות החלפת משתנה אינטגרציה ולקבל

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}} dy = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}} dy = A^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2d^2}}}$$

$$A = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi} d}}$$

ב) ערך התוחלת של המיקום של החלקיק מוגדר בצורה הבאה:

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t=0)^*x\Psi(x,t=0)dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\left|\Psi(x,t=0)\right|^2dx$$

במקרה שלנו אנו מקבלים

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}x\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}}dx$$

ניתן לעשות שוב את החלפת המשתנה אינטגרציה $y=(x-x_0)$ (נשים לב שצריך לשנות ל $x=y+x_0$), כך שאנו מקבלים

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}(y+x_0)\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy\\&=\int_{-\infty}^{\infty}(y)\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy+\int_{-\infty}^{\infty}(x_0)\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy\\&=0+\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}x_0\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2d^2}}}\end{aligned}$$

כך שאנו מקבלים $\langle x\rangle=x_0$

ג) את האי-ודאות מחשבים לפי המשוואה $\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}$. חישבנו $\langle x\rangle$ בחלק הקודם ולכן עלינו לחשב $\langle x^2\rangle$

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t=o)^*x^2\Psi(x,t=0)dx=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\left|\Psi(x,t=0)\right|^2dx\\&=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2d^2}}dx\\&=\int_{-\infty}^{\infty}(y+x_0)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy\\&=\int_{-\infty}^{\infty}(y)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy+\int_{-\infty}^{\infty}(2yx_0)\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy+\int_{-\infty}^{\infty}(x_0)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}e^{-\frac{(y)^2}{2d^2}}dy\\&=d^2+x_0^2\end{aligned}$$

ולכן אי-הודאות המתקבלת היא - $\Delta x=\sqrt{d^2+x_0^2-x_0^2}=d$

ד) על מנת לחשב את אי הודאות במרחב k עלינו לעשות התמרת פורייה של פונקציית הגל, נשתמש בשיטה של השלמה לריבוע על מנת לחשב זאת:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(k)&=\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-ikx}\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}Ae^{-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2}}e^{-ikx}dx\\&=\int_{-\infty}^{\infty}Ae^{-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2}-ikx}dx\end{aligned}$$

השלמה לריבוע - אנחנו בוחרים את הפרמטרים a ו b כך ש:

$$-\frac{(x-x_0)^2}{4d^2}-ikx=-\frac{x^2-2xx_0+x_0^2}{4d^2}-ikx=-\frac{1}{4d^2}(x+a)^2+b$$

כעת אנחנו משווים מקדמים – אנחנו לוקחים את כל האיברים שמכפילים את x בצד שמאל, ומשווים לכל האיברים שמכפילים את x בצד ימין:

$$\frac{2x_0}{4d^2}-ik=-\frac{2a}{4d^2}$$

$$2x_0-i4d^2k=2a$$

$$x_0-i2d^2k=a$$

כעת אנחנו יכולים לקחת את כל האיברים משני הצדדים אשר לא מכפילים את x ולקבל את הפרמטר b :

$$-\frac{x_0^2}{4d^2}=-\frac{a^2}{4d^2}+b$$

$$b=\frac{a^2}{4d^2}-\frac{x_0^2}{4d^2}$$

$$b=\frac{\left(x_0-i2d^2k\right)^2}{4d^2}-\frac{x_0^2}{4d^2}$$

$$b=-\frac{x_0^2}{4d^2}+\frac{\frac{\left(-i2d^2\right)^2}{\left(-i2d^2\right)^2}\left(x_0-i2d^2k\right)^2}{4d^2}$$

$$b=-\frac{x_0^2}{4d^2}+\frac{\left(-i2d^2\right)^2\left(\frac{x_0}{(-i2d^2)}-\frac{i2d^2k}{(-i2d^2)}\right)^2}{4d^2}$$

$$b=-\frac{x_0^2}{4d^2}+\frac{-4d^4\left(k-\frac{x_0}{(i2d^2)}\right)^2}{4d^2}$$

$$b=-\frac{x_0^2}{4d^2}+\frac{-\left(k-ix_0/2d^2\right)^2}{1/d^2}$$

הפרמטר b אינו תלוי ב x , ולכן יוצא לנו מהאינטגרציה על x בהתמרת פורייה, כך שהתמרת פורייה נותנת לנו:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx}\psi(x)\\ &= Ae^{b}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4d^2}(x+a)^2}dx\\ &= \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}d}}e^{-\frac{x_0^2}{4d^2}}e^{\frac{-\left(k-ix_0/2d^2\right)^2}{1/d^2}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4d^2}\left(x+x_0-i2d^2k\right)^2}dx\end{aligned}$$

את האינטגרל אנחנו פותרים שוב על ידי החלפת משתנים ושימוש בנוסחה לאינטגרל גאוסיאני שקיבלנו, כך שאנו מקבלים:

$$\tilde{\psi}(k) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}}\sqrt{d}e^{-\frac{x_0^2}{4d^2}}e^{-\frac{\left(k-ix_0/2d^2\right)^2}{1/d^2}}$$

ה) אי-הודאות המתקבלת ל k בחישוב דומה לאי-הודאות שחישבנו ל x . עלינו לחשב את צפיפות ההסתברות על k שיוצאת :

$$\begin{aligned}\rho(k) &= \tilde{\psi(k)}^*\tilde{\psi(k)}\\ &= \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}}\sqrt{d}e^{-\frac{x_0^2}{4d^2}}e^{-\frac{\left(k+ix_0/2d^2\right)^2}{1/d^2}}\sqrt[4]{\frac{2}{\pi}}\sqrt{d}e^{-\frac{x_0^2}{4d^2}}e^{-\frac{\left(k-ix_0/2d^2\right)^2}{1/d^2}}\\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}de^{-\frac{x_0^2}{2d^2}}e^{\frac{x_0^2}{2d^2}}e^{-\frac{k^2}{1/2d^2}}\\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}de^{-\frac{k^2}{1/2d^2}}\end{aligned}$$

כל שאנחנו יכולים "לקרוא" את האי-ודאות מהמכנה של הגאוסיאן, עלינו להביא אותו לצורה $2\sigma^2$ כך שאנחנו מקבלים ש σ היא האי-ודאות:

$$\frac{1}{2d^2} = \frac{2}{4d^2} = 2\sigma^2 \Rightarrow \sigma = \frac{1}{2d}$$

ולכן:

$$\Delta k = \frac{1}{2d}$$

ו) המכפלה $\Delta x \times \Delta k$ נותנת לנו

$$\Delta x \times \Delta k = d \times \frac{1}{2d} = \frac{1}{2}$$

חלקיק בבור פוטנציאל אינסופי חד מימדי

נתון חלקיק שמסתו m הנמצא בבור פוטנציאל אינסופי באורך L.

א) מצא/י פונקציות עצמיות וערכים עצמיים של אנרגיית החלקיק.

ב) הראה שהמצבים העצמיים של החלקיק מהווים בסיס אורטוגונלי. נרמל/י את המצבים.

ג) צייר/י את שלושת המצבים בעלי האנרגיה הנמוכה ביותר וכתוב/כתבי ביטוי כללי למצב החלקיק בזמן כלשהו $\psi\left(x,t\right)$.

ד) מצא/י את ערכי התוחלת של x עבור מצב עצמי מסוים.

פתרון

א) נתאר את הבור ע"י פוטנציאל $U\left(x\right)=\begin{cases} 0 & 0<x<L\\ \infty & else \end{cases}$

משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן עבור החלקיק בתחום $0<x<L$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi\left(x\right)}{\partial x^2}=E\psi\left(x\right)\Rightarrow\frac{\partial^2\psi\left(x\right)}{\partial x^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi\left(x\right)$$

נסמן $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ ונקבל את המשוואה המוכרת של מתנד הרמוני:

$$\frac{\partial^2\psi\left(x\right)}{\partial x^2}=-k^2\psi\left(x\right)$$

שפתרונותיה:

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

אנחנו יודעים שהחלקיק לא יכול להיות מחוץ לבור ולכן יש לנו תנאי שפה:

$$\psi\left(0\right)=\psi\left(L\right)=0$$

מהצבת תנאי השפה נקבל:

$$B=0$$

ו

$$A\sin\left(kL\right)=0$$

תנאי שפה זה מתקיים רק אם $A=0$ (הפתרון הטריוויאלי) או:

$$kL=\pi n$$

כלומר, מצאנו את מספרי הגל המותרים:

$$k_n=\frac{\pi n}{L}$$

ואת האנרגיות המותרות (מההגדרה של k שהגדרנו קודם):

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

אם כך, הפונקציות העצמיות הן:

$$\psi_n\left(x\right)=\begin{cases}A\sin\left(k_nx\right) & 0<x<L\\ 0 & else\end{cases},\ k_n=\frac{\pi n}{L}$$

ב) הבסיס אורתוגונאלי אם המכפלה הפנימית בין כל שתי פונקציות גל שונות מתאפסת, נבדוק זאת:

$$\left\langle \psi_n,\psi_m\right\rangle=\int_0^L\psi_n^*\left(x\right)\psi_m\left(x\right)dx=\left|A\right|^2\int_0^L\sin\left(k_nx\right)\sin\left(k_mx\right)dx=$$

$$\frac{\left|A\right|^2}{2}\int_0^L\left[\cos\left(\left(k_n-k_m\right)x\right)-\cos\left(\left(k_n+k_m\right)x\right)\right]dx=$$

$$\frac{\left|A\right|^2}{2}\left[\frac{\sin\left(\left(k_n-k_m\right)L\right)}{k_n-k_m}-\sin\left(\frac{\left(k_n+k_m\right)}{k_n+k_m}L\right)\right]=$$

$$\frac{\left|A\right|^2}{2}\left[\frac{\sin\left(\pi\left(n-m\right)\right)}{k_n-k_m}-\frac{\sin\left(\pi\left(n+m\right)\right)}{k_n+k_m}\right]=0$$

ננרמל את המצבים כך שהמכפלה הפנימית של מצב עצמי עם עצמו תהיה 1 :

$$1 = \langle \psi_n, \psi_n \rangle = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 = |A|^2 \int_0^L \sin^2(k_n x)\, dx =$$

$$\frac{|A|^2}{2} \int_0^L [1 - \cos(2k_n x)]\, dx = \frac{|A|^2}{2} \left[L - \frac{1}{2k_n} \sin(2k_n L) \right] =$$

$$\frac{|A|^2}{2} \left[L - \frac{1}{2k_n} \sin(2\pi n) \right] = \frac{|A|^2}{2} L$$

לכן, בכדי שהמצבים העצמיים יהיו מנורמלים:

$$|A|^2 = \frac{2}{L}$$

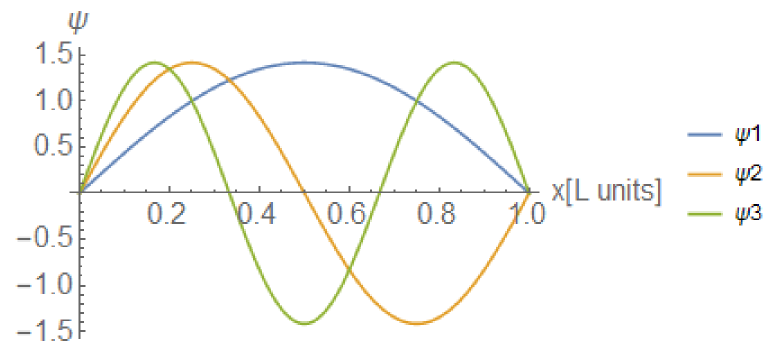
למשל ניתן לבחור $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ (שימו לב שכל בחירה מהצורה $A = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\varphi}$ תעבוד).

ג) שלושת המצבים בעלי האנרגיה הנמוכה ביותר מופיעים באיור 1. מצב החלקיק הכללי ביותר יהיה סופרפוזיציה של מצבים:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-i\omega_n t},\ \omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

בכדי שהנרמול של המצב יהיה תקין:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} c_n^* c_m \langle \psi_n, \psi_m \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \langle \psi_n, \psi_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2$$



איור 1: שלושת המצבים העצמיים בעלי האנרגיות הנמוכות ביותר של חלקיק בבור חד מימדי אינסופי

ד) ערך התוחלת של x עבור מצב עצמי ψ_n:

$$\langle x\rangle = \int_0^L x\left|\psi_n\left(x\right)\right|^2 dx = \frac{2}{L}\int_0^L x\sin^2\left(k_n x\right)dx =$$

$$\frac{1}{L}\int_0^L \left[x - x\cos\left(2k_n x\right)\right]dx = \frac{L}{2} - \frac{1}{2k_n}\sin\left(2k_n L\right) + \frac{1}{2Lk_n}\int_0^L \sin\left(2k_n x\right)dx =$$

$$\frac{L}{2} - \frac{1}{2k_n}\sin\left(2\pi n\right) - \frac{1}{4Lk_n^2}\left[\cos\left(2k_n L\right) - 1\right] = \frac{L}{2} - \frac{1}{4Lk_n^2}\left[\cos\left(2\pi n\right) - 1\right] = \frac{L}{2}$$

כלומר, המיקום הממוצע של החלקיק הינו במרכז הבור.