תורת הקוונטים - מצבים ואופרטורים

דיברנו כבר על כך שתורת הקוונטים מבוססת על אלגברה לינארית ובפרט על מרחב וקטורי מעל שדה המספרים המרוכבים, $\mathbb{C}$, שנקרא מרחב הילברט. כעת נראה כיצד ניתן להשתמש בעובדה זו לחישובים שונים.

עד עכשיו דיברנו על פונקציות הגל, $\phi\left(x\right)$, שמתארות את מצב החלקיק ב**בסיס המקום**, ראינו גם דוגמה למעבר בין בסיסים כאשר טרנספורם פורייה מעביר אותנו לפוקציית גל שתלויה ב k, $\phi\left(k\right)$, כלומר לבסיס התנע.

אנחנו רוצים להתנתק מהתלות בבסיס ולתאר את מצבו של החלקיק במונחים אבסטרקטיים יותר, כוקטור במרחב הילברט. לצורך כך נשתמש בסימון דיראק.

הסתברויות ומכפלה פנימית

מצב החלקיק מתואר ע"י הוקטור $\left|\phi\right\rangle$. (מקביל לפונקציית הגל בהצגת המקום $\phi\left(x\right)$)

המצב הצמוד של המצב $\left|\phi\right\rangle$ הינו המצב $\left\langle \phi\right|$ (מקביל לפונקצייה הצמודה $\phi^{*}\left(x\right)$)

ההסתברות למצוא את החלקיק במצב $\left|\psi\right\rangle$ אם ידוע שהוא במצב $\left|\phi\right\rangle$ היא הערך המוחלט בריבוע של המכפלה הפנימית בין המצבים $\left|\left\langle \phi|\psi\right\rangle \right|^{2}$(מקביל ל $\left|\int_{-\infty}^{\infty}\phi^{*}\left(x\right)\psi\left(x\right)dx\right|^{2}$)

בפרט ההסתברות למצוא את החלקיק במצב $\left|\phi\right\rangle$ אם ידוע שהוא במצב $\left|\phi\right\rangle$ צריכה להיות 1: $\left|\left\langle \phi|\phi\right\rangle \right|^{2}=1$(מקביל ל $\left|\int_{-\infty}^{\infty}\phi^{*}\left(x\right)\phi\left(x\right)dx\right|^{2}$)

אופרטורים

ראינו כבר שההמילטוניאן הוא האופרטור שהערכים העצמיים שלו הם האנרגיות, כלומר: אם $\left|\psi\right\rangle$ מצב עצמי של האופרטור $\mathcal{H}$ אז $\mathcal{H}\left|\psi\right\rangle =E\left|\psi\right\rangle$(זוהי למעשה משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן,כפי שראינו לפני שני תרגולים).

באופן דומה אנחנו יכולים להגדיר אופרטור עבור כל גודל שניתן למדוד, כך שהערכים העצמיים של האופרטור יהיו הערכים הנמדדים.[1] לדוגמא:

$\hat{X}$- אופרטור המיקום, הערכים העצמיים שלו הם מיקום החלקיק, אם $\left|x\right\rangle$ מצב עצמי של $\hat{X}$ אז $\hat{X}\left|x\right\rangle =x$.

$\hat{P}$- אופרטור התנע, הערכים העצמיים שלו הם תנע החלקיק, אם $\left|p\right\rangle$ מצב עצמי של $\hat{P}$ אז $\hat{P}\left|p\right\rangle =p$.

$\hat{L}_{z}$- אופרטור התנע הזויתי, הערכים העצמיים שלו הם התנע הזוויתי בציר z של החלקיק, אם $\left|m\right\rangle$ מצב עצמי של $\hat{L}_{z}$ אז $\hat{L}\left|m\right\rangle =m\hbar\left|m\right\rangle$ כאשר נהוג שm הוא הערך של התנע הזויתי בכיוון z).

לבסוף $\hat{\boldsymbol{L}}^{2}$ הוא ריבוע אופרטור התנע הזויתי הכולל בריבוע, שלו ערכים עצמיים פחות אינטואטיביים. נהוג לסמן ב$\left|l\right\rangle$ את המצבים העצמיים של $\hat{\boldsymbol{L}}^{2}$ ומתקיים $\hat{\boldsymbol{L}}^{2}\left|l\right\rangle =l\left(l+1\right)\hbar^{2}$.

ערכי תצפית

בכדי לחשב את הערך הממוצע של גודל מדיד כלשהו (מיקום, תנע, אנרגיה וכו'). אנחנו צרכים לסכום את הערכים האפשריים כפול ההסתברות למדוד כל ערך.

[1] הערה לבעלי ידע מתקדם באלגברה לינארית, אופרטורים אלו צריכים להיות הרמיטיים, על מנת שהערכים העצמיים שלהם יהיו מספרים ממשיים

כתיב דיראק נותן לנו דרך קלה לזכור את הפעולה הנדרשת, אם החלקיק שלנו נמצא במצב $\left|\psi\right\rangle$ אז ערך התצפית של אופרטור $\hat{O}$ (יכול להיות מיקום, תנע, תנע זויתי, אנרגיה וכו') הוא $\left\langle\psi\right|\hat{O}\left|\psi\right\rangle$.

נבין מדוע זה נכון ע"י דוגמה:

דוגמה־ ערך תצפית של האנרגיה

נניח שנתונים לנו 3 מצבים עצמיים של ההמילטוניאן עבור חלקיק כלשהו, שמקיימים $\mathcal{H}\left|\psi_1\right\rangle = E_1\left|\psi_1\right\rangle, \mathcal{H}\left|\psi_2\right\rangle = E_2\left|\psi_2\right\rangle, \mathcal{H}\left|\psi_3\right\rangle = E_3\left|\psi_3\right\rangle$,

נתון לנו בנוסף כי החלקיק נמצא במצב $\left|\phi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_1\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\psi_2\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\left|\psi_3\right\rangle$ (שימו לב שהמצב תקין כי $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{6} = 1$)

כדי לחשב את ערך התצפית של האנרגיה נחשב מה ההסתברות למדוד את 3 האנרגיות האפשריות.

ההסתברות למדוד את E_1 היא ההסתברות למצוא את החלקיק במצב $\left|\psi_1\right\rangle$ שהיא (אנחנו משתמשים בכך שהמצבים העצמיים הם אורתונורמליים)

$$\left|\left\langle\psi_1|\phi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle\psi_1|\psi_1\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle\psi_1|\psi_2\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\left\langle\psi_1|\psi_3\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle\psi_1|\psi_1\right\rangle\right|^2 = \frac{1}{2}$$

באופן דומה ההסתברות למצוא את החלקיק באנרגיה E_2 היא $\left|\frac{1}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1}{3}$ וב E_3 $\left|\frac{1}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{6}$.

לכן האנרגיה הממוצעת היא:

$$\left\langle E\right\rangle = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{3}E_2 + \frac{1}{6}E_3$$

היינו מקבלי את זה הרבה יותר בקלות ע"י כתיב דיראק:

$$\left\langle E\right\rangle = \left\langle\phi\right|\mathcal{H}\left|\phi\right\rangle = \left\langle\phi\right|\left(\mathcal{H}\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_1\right\rangle + \mathcal{H}\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\psi_2\right\rangle + \mathcal{H}\frac{1}{\sqrt{6}}\left|\psi_3\right\rangle\right) =$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle\psi_1\right| + \frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle\psi_2\right| + \frac{1}{\sqrt{6}}\left\langle\psi_3\right|\right)\left(E_1\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_1\right\rangle + E_2\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_2\right\rangle + E_3\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\psi_3\right\rangle\right) =$$

$$\frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{3}E_2 + \frac{1}{6}E_3$$

אטום המימן

משוואת שרדינגר עבור אלקטרון שנע בהשפעת פרוטון שנמצא בראשית הצירים:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi\left(\boldsymbol{r}\right)-k\frac{e^2}{r}\psi\left(\boldsymbol{r}\right)=E\psi\left(\boldsymbol{r}\right)$$

כאשר $k\frac{e^2}{r}$ פוטנציאל קולון בין אלקטרון לפרוטון, r המרחק של האלקטרון מהפרוטון, k קבוע קולון ו $\mu=\frac{m_e m_p}{m_e+m_p}\approx m_e$ המסה המצומצמת.

פתרון משוואה זו נותן לנו את פונקציות הגל (המצבים העצמיים של המילטוניאן זה) בקואורדינאטות כדוריות:

$$\psi_{nlm}\left(r,\theta,\varphi\right)=N\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)F_{nl}\left(\frac{r}{a_0}\right)Y_{lm}\left(\theta,\phi\right)$$

כאשר $a_0=\frac{\hbar^2}{ke^2\mu}\approx 5.29\cdot 10^{-11}m$ הוא רדיוס בוהר

F_{nl} הוא פולינום עם המשתנה $\frac{r}{a_0}$ (נקרא פולינום $Laguerre$)

Y_{lm} נקראות הרמוניות ספריות.

בפונקציית הגל נוכל להשתמש, כרגיל, למציאת צפיפות ההסתברות עבור המיקום, למשל ההסתברות למצוא את האלקטרון המרחק r מהגרעין היא:

$$\rho\left(r\right)=\int\left|\psi_{nlm}\left(r,\theta,\varphi\right)\right|^2 r^2dr\sin\theta d\theta d\varphi$$

ישנם שלושה מספרים שמתארים לנו את פונקציות הגל.

n מתאר את האנרגיה:

$$\mathcal{H}\left|\psi_{nlm}\right\rangle=E_n\left|\psi_{nlm}\right\rangle \qquad E_n=\frac{\mu k^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\approx\frac{13.6eV}{n^2}$$

l מתאר את התנע הזוויתי הכולל:

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\left|\psi_{nlm}\right\rangle=l\left(l+1\right)\hbar^2$$

m מתאר את התנע הזוויתי בכיוון z:

$$\hat{L}_z\left|\psi_{nlm}\right\rangle=m\hbar$$

בנוסף פתרון המשוואה נותן לנו מגבלות על המספרים האלו:

$$n = 1, 2, 3, 4, ...$$

$$l = 0, 1, 2, ..., n - 1$$

$$m = -l, -l + 1, -l + 2, ..., l - 2, l - 1, l$$

בטמפרטורת החדר אטומים יהיו בדרך כלל במצבים הקרובים למצב היסוד. לכן למצבים בעלי n, l נמוכים יש שמות מיוחדים.

נהוג לקרוא למצבים עצמיים בעלי n, l זהים "אורביטלה" ולסמן את l בעזרת אותיות: s עבור $l = 0$, p עבור $l = 1$, d עבור $l = 2$ ו f עבור $l = 3$.

בכל אורביטלה כזו יש $2l + 1$ פונקציות גל אפשריות (זהו מספר ערכי m השונים עבור l נתון). מספר זה חשוב כיוון שהאלקטרונים הם פרמיונים, כלומר מתקיים עבורם חוק האיסור של פאולי שקובע ששני אלקטרונים לא יכולים להיות באותו מצב קוונטי (לא יכולה להיות להם אותה פונקציית גל) לכן בכל אורביטלה יהיו לכל היותר $2\left(2l + 1\right)$ אלקטרונים. הכפל ב2 הוא בגלל שאלקטרון יכול להיות בשני מצבי ספין שונים, נלמד על זה בתרגול האחרון.

לדוגמה: האורביטלה $3d$ מכילה את כל האלקטרונים בעלי אנרגיה E_3 ותנע זוויתי כולל $l = 2$ ויש בה לכל היותר $2\left(2 \cdot 2 + 1\right) = 10$ אלקטרונים.

דוגמה: אטום מימן במצב מעורב

1 Hydrogen atom mixed state

באטום מימן ישנו אלקטרון אחד בפוטנציאל מרכזי

א. מהי משוואת שרדינגר שיש לפתור?

ב. יש לתאר את המצבים העצמיים (לא במפורש), האנרגיות והתנעים בכל מצב.

חלקיק הוכן במצב מעורב: $\psi = A\left(3\psi_{100} + \psi_{210} + \psi_{21-1}\right)$

ג. מהו ממוצע ואי־הודאות האנרגיה?

ד. מהו ממוצע ואי־הודאות תנע זויתי כולל?

1.0.1 פתרון

עבור אטום מימן בעל אלקטרון אחד בפוטנציאל מרכזי יש לפתור את מש' שרדינג בקואורדינטות פולריות,

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) \tag{1}$$

כאשר הפוטנציאל הוא: $Z = 1$

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{2}$$

ב. מצב עצמי מתאור עלידי פונקציה עצמית מהצורה: Ψ_{nlm} כאשר n מציין את הרמה, l מציין את התנע הכולל, ו m מציין את התנע בציר z. הפעלת האופרטורים על המצב העצמי: אנרגיה,

$$E|\Psi_{nlm}\rangle = -\frac{13.6}{n^2}|\Psi_{nlm}\rangle \tag{3}$$

תנע כולל,

$$L|\Psi_{nlm}\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)}|\Psi_{nlm}\rangle \tag{4}$$

תנע בציר z,

$$L_z|\Psi_{nlm}\rangle = \hbar m|\Psi_{nlm}\rangle \tag{5}$$

הסתברות החלקיק להמצא במצב שבו הוא הוכן היא 1.

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \tag{6}$$

$$A^*(3\langle\psi_{100}| + \langle\psi_{210}| + \langle\psi_{21-1}|)A(3|\psi_{100}\rangle + |\psi_{210}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle) = 1 \tag{7}$$

המצבים $|\psi_{nlm}\rangle$, הם מצבים עצמיים, כלומר מתקיים $\langle\psi_{nlm}|\psi_{n'l'm'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$.

$$|A|^2(9\langle\psi_{100}|\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{210}|\psi_{210}\rangle + \langle\psi_{21-1}|\psi_{21-1}\rangle = 1 \tag{8}$$

בצורה מפורשת $A = \frac{1}{\sqrt{11}}$.

ג. מציאת $\langle E\rangle$ ו $\langle\triangle E\rangle$.

נתחיל מ $\langle E\rangle$, כזכור הביטוי לאנרגיה של מצב עצמי כלשהו $E_n = -\frac{13.6}{n^2}$

$$\langle E\rangle = A^*(3\langle\psi_{100}| + \langle\psi_{210}| + \langle\psi_{21-1}|)E_n A(3|\psi_{100}\rangle + |\psi_{210}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle) = \tag{9}$$

$$|A|^2\left[9\langle\psi_{100}|E_n|\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{210}|E_n|\psi_{210}\rangle + \langle\psi_{21-1}|E_n|\psi_{21-1}\rangle\right] = \tag{10}$$

$$|A|^2\left[9\frac{-13.6}{1^2}\langle\psi_{100}|\psi_{100}\rangle + \frac{-13.6}{2^2}\langle\psi_{210}|\psi_{210}\rangle + \frac{-13.6}{2^2}\langle\psi_{21-1}|\psi_{21-1}\rangle\right] = -\frac{13.6}{11}\frac{19}{2} \tag{11}$$

נמצא את המומנט השני של ממוצע האנרגיה)לצואך חישוב אי־הודעות באנרגיה(

$$\langle E^2\rangle = A^*(3\langle\psi_{100}| + \langle\psi_{210}| + \langle\psi_{21-1}|)E_n^2 A(3|\psi_{100}\rangle + |\psi_{210}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle) = \tag{12}$$

$$|A|^2\left[9\frac{13.6^2}{1^4}\langle\psi_{100}|\psi_{100}\rangle + \frac{13.6^2}{2^4}\langle\psi_{210}|\psi_{210}\rangle + \frac{13.6^2}{2^4}\langle\psi_{21-1}|\psi_{21-1}\rangle\right] = \frac{13.6^2}{11}\frac{73}{8} \tag{13}$$

אי־ודאות באנרגיה

$$\triangle E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2} \approx 3.934 \tag{14}$$

ד. כעת נחשב את הממוצע ואי־הודעות של התנע הזויתי הכולל $\langle L\rangle$ ו $\langle\triangle L\rangle$.

$$\langle L\rangle = A^*(3\langle\psi_{100}| + \langle\psi_{210}| + \langle\psi_{21-1}|)LA(3|\psi_{100}\rangle + |\psi_{210}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle) = \tag{15}$$

$$|A|^2\left[9\langle\psi_{100}|\hbar\sqrt{0}|\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{210}|\hbar\sqrt{2}|\psi_{210}\rangle + \langle\psi_{21-1}|\hbar\sqrt{2}|\psi_{21-1}\rangle\right] = \tag{16}$$

$$|A|^2\left[\hbar\sqrt{2}\langle\psi_{210}|\psi_{210}\rangle + \hbar\sqrt{2}\langle\psi_{21-1}|\psi_{21-1}\rangle\right] = \hbar\frac{2\sqrt{2}}{11} \tag{17}$$

והמומנט השני של התנע הזויתי הכולל

$$\langle L^2\rangle = A^*(3\langle\psi_{100}| + \langle\psi_{210}| + \langle\psi_{21-1}|)L^2A(3|\psi_{100}\rangle + |\psi_{210}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle) = \tag{18}$$

$$|A|^2\left[9\langle\psi_{100}|\hbar^20|\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{210}|\hbar^22|\psi_{210}\rangle + \langle\psi_{21-1}|\hbar^22|\psi_{21-1}\rangle\right] = \frac{4\hbar^2}{11} \tag{19}$$

אי־ודאות בתנע הזויתי הכולל

$$\triangle L = \sqrt{\langle L^2\rangle - \langle L\rangle^2} = \frac{6\hbar}{11} \tag{20}$$