הפוסטולטים (הנחות היסוד) של המכניקה הקוונטית

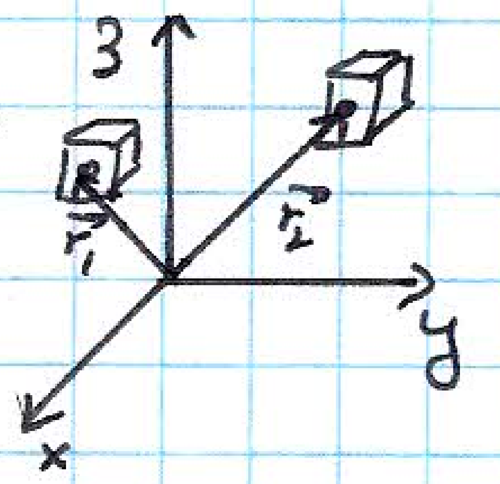
במכניקה הקלאסית הנחות היסוד הינן משוואות ניוטון (התמד, $F=ma$, חוק הפעולה והתגובה).

בדומה, במכניקת הקוונטים קיימות הנחות יסוד אשר מנסחות את המשוואות אותן עלינו לפתור ואת האופן בו ניתן להפיק גדלים פיזיקליים מדידים מתוך הפתרונות שהתקבלו. חלק גדול מהפוסטולטים כבר דנו בשיעורים הקודמים וכאן נסכם אותם באופן מסודר. נציין כי אין נוסח אחיד לפוסטולטים וכי בספרי לימוד שונים ניתן לראות ניסוחים שונים, סדר שונה ומספר שונה של הנחות יסוד.

1. מצב המערכת מתואר ע"י פונקציה, שנסמנה באות Ψ, אשר תלויה בזמן ובכל הקואורדינטות של החלקיקים במערכת:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t)$$

פונקציה זו, הקרויה לעתים גם פונקצית מצב (שכן היא מתארת את מצב המערכת), מכילה את כל האינפורמציה שניתן לצבור על מערכת נתונה. אנו דורשים כי Ψ תהיה חד ערכית, רציפה ובעלת אינטגרל ריבועי סופי (square integrable).



ההסתברות למצוא את המערכת בנפח קטן $d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \cdots d\vec{r}_N =$

$= dx_1 dy_1 dz_1 \cdot dx_2 dy_2 dz_2 \cdots dx_N dy_N dz_N$

סביב הקונפיגורציה $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N) = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N)$ בזמן נתון t נתונה ע"י

$$P = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \cdots d\vec{r}_N$$

עצמי של ההמילטוניאן

$\hat{H}$ במצב בעל אנרגיה שמתאימה לערך עצמי של ההמילטוניאן (כלומר מצב עצמי סטציונרי) המצב מתואר באופן מלא ע"י הפונקציה: $H\Psi = E\Psi$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t) = \underbrace{\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N)}_{\psi(x)} \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{\psi(t)}$$

הדבר נובע במעבר ממשוואת שרדינגר התלויה בזמן למשוואת שרדינגר הסטציונרית.

כעת ניתן להבין מדוע המצב נקרא סטציונרי. המצב אומנם תלוי בזמן אך ההסתברות למציאת החלקיק נתונה ע״י:

$$\Psi^*(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N;t)\,\Psi(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N;t)=\psi^*(\vec r_1,\dots,\vec r_N)\,e^{iEt/\hbar}\,\psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N)\,e^{-iEt/\hbar}=$$

$$=|\psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N)|^2\underbrace{e^{iEt/\hbar}e^{-iEt/\hbar}}_{1}=|\psi(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N)|^2.$$

וההסתברות הזו אינה תלויה בזמן.

(2). <u>לכל גודל פיזיקלי מדיד מתאים אופרטור ליניארי הרמיטי</u>. בכדי למצוא את הביטוי המתמטי של אופרטור זה עלינו לרשום את הביטוי הקלאסי של האופרטור ולהחליף את כל הקואורדינטות $\vec r$ באופרטור $\hat{\vec r}$ ואת כל התנעים $\vec p$ באופרטור $\hat{\vec p}$ המתאים:

$$\begin{cases}\vec r=(x,y,z)\longrightarrow \hat{\vec r}=(\hat x,\hat y,\hat z)\\ \vec p\longrightarrow -i\hbar\hat{\vec\nabla}=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)\end{cases}$$

<u>הערכים הנמדדים יהיו תמיד ערכים עצמיים של האופרטור המתאים</u>

(במדידה פו׳ הגל קורסת לאחד המצבים העצמיים של האופרטור ולכן המצבים העצמיים חייבים להיות well-behaved.)

כיוון שלאופרטורים הרמיטיים ערכים עצמיים ממשיים הם מתאימים לתאר גודל פיזיקלי מדיד וערכי התצפית שלהם יהיו ממשיים גם הם.

(3). אם $\hat A$ הוא אופרטור שמתאים לגודל דינאמי (פיזיקלי מדיד) A ונתון אוסף מערכות אשר כולן נמצאות במצב Ψ_s העצמי לאופרטור $\hat A$ כך ש

$$\hat A\Psi_s=a_s\Psi_s$$

אזי בכל מדידה שנבצע על המערכת נקבל תמיד את הערך העצמי <u>a_s ורק זה בלבד</u>.

(4). אם $\hat A$ הוא אופרטור ליניארי והרמיטי המייצג גודל פיזיקלי מתאים של המערכת אזי אוסף הפונקציות העצמיות של $\hat A$ $\{\Psi_s\}$ המקיימות $\hat A\Psi_s=a_s\Psi_s$ מהווה סט שלם. כלומר, ניתן לפתח כל פונקציה

באמצעות כל המצבים הללו.

$$\Psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec r_1,\dots,\vec r_N)$$

כאשר Ψ_n ו- Ψ מקיימות את אותם תנאי השפה.

הראנו כי מקדמי הפרישה ניתנים ע"י:

$$c_n = \int_{\text{כל המרחב}} \Psi_n^*(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N)\,\Psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N)\,d\tau$$

ונתנו דוגמאות (טור טיילור, פורייה, ואלגברה לינארית-פרישה וקטורית).

5. אם $\Psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N;t)$ היא פונקציית הגל המנורמלת של מערכת בזמן t אזי הערך הממוצע של גודל פיזיקלי A בזמן t נתון ע"י

$$\langle \hat A\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N)\,\hat A\,\Psi(\vec r_1,\vec r_2,\dots,\vec r_N)\,\underbrace{d\tau}_{dx_1dy_1dz_1\dots dx_Ndy_Ndz_N}$$

קיים סימון הנקרא סימון Dirac אשר מייצג אינטגרל זה באופן הבא (כתוב מקוצר).

$$\langle\Psi|\hat A|\Psi\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(\vec r_1,\dots,\vec r_N)\,\hat A\,\Psi(\vec r_1,\dots,\vec r_N)\,d\tau$$

$$\begin{cases}\langle\Psi| \longleftrightarrow \Psi^* & \text{Bra}\\ |\Psi\rangle \longleftrightarrow \Psi & \text{ket}\end{cases}$$

כמו כן מתקיים:

$$\hat A|\Psi_n\rangle = a_n|\Psi_n\rangle$$

ופרישה:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n|\Psi_n\rangle$$

ניתן לחשב את ערך התצפית באופן הבא:

$$\langle\hat A\rangle = \langle\Psi|\hat A|\Psi\rangle = \sum_n c_n^*\langle\Psi_n|\hat A\sum_m c_m|\Psi_m\rangle =$$

$$= \sum_n\sum_m c_n^* c_m\langle\Psi_n|\hat A|\Psi_m\rangle = \sum_n\sum_m c_n^* c_m\langle\Psi_n|a_m|\Psi_m\rangle =$$

$$= \sum_n\sum_m c_n^* c_m a_m\underbrace{\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

$$\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \int_{\text{כל המרחב}}\Psi_n^*(\vec r_1,\dots,\vec r_n)\,\Psi_m(\vec r_1,\dots,\vec r_n)\,d\tau = \delta_{nm}.$$

6. התפתחות המערכת בזמן מתוארת ע"י משוואות שרדינגר התלויה בזמן:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N; t)}{\partial t} = \underset{\text{המילטוניאן}}{\hat H}\, \Psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N; t)$$

ההמילטוניאן $\hat H$ הינו אופרטור שמייצג את האנרגיה. עד כה רשמנו אותו עבור מערכת בעלת חלקיק יחיד בחד- או תלת-מימד. באופן כללי ההמילטוניאן ניתן ע"י (ההמילטוניאן הקלאסי עם $\vec p \to -i\hbar\vec\nabla$):

$$\hat H = \sum_j -\frac{\hbar^2}{2m_j}\hat\nabla_j^2 + \hat V(\hat{\vec r}_1, \dots, \hat{\vec r}_N; t) \; ; \; \nabla_j^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_j^2}$$

כאשר $\hat V$ אינו תלוי בזמן ניתן לכתוב פתרון מהצורה

$$\Psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N; t) = \psi(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N)\,\varphi(t)$$

והצבה במשוואת שרדינגר התלויה בזמן נקבל את משוואת שרדינגר הבלתי-תלויה בזמן:

$$\hat H \psi_n(\vec r_1, \dots, \vec r_N) = E_n \psi_n(\vec r_1, \dots, \vec r_N)$$

והפתרון המלא של המערכת ניתן ע"י:

$$\Psi_n(\vec r_1, \vec r_2, \dots, \vec r_N; t) = \psi_n(\vec r_1, \dots, \vec r_N)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

כך ש $|\Psi|^2$ אינו תלוי בזמן והמצב הינו סטציונרי - ההסתברות אינה תלויה בזמן.