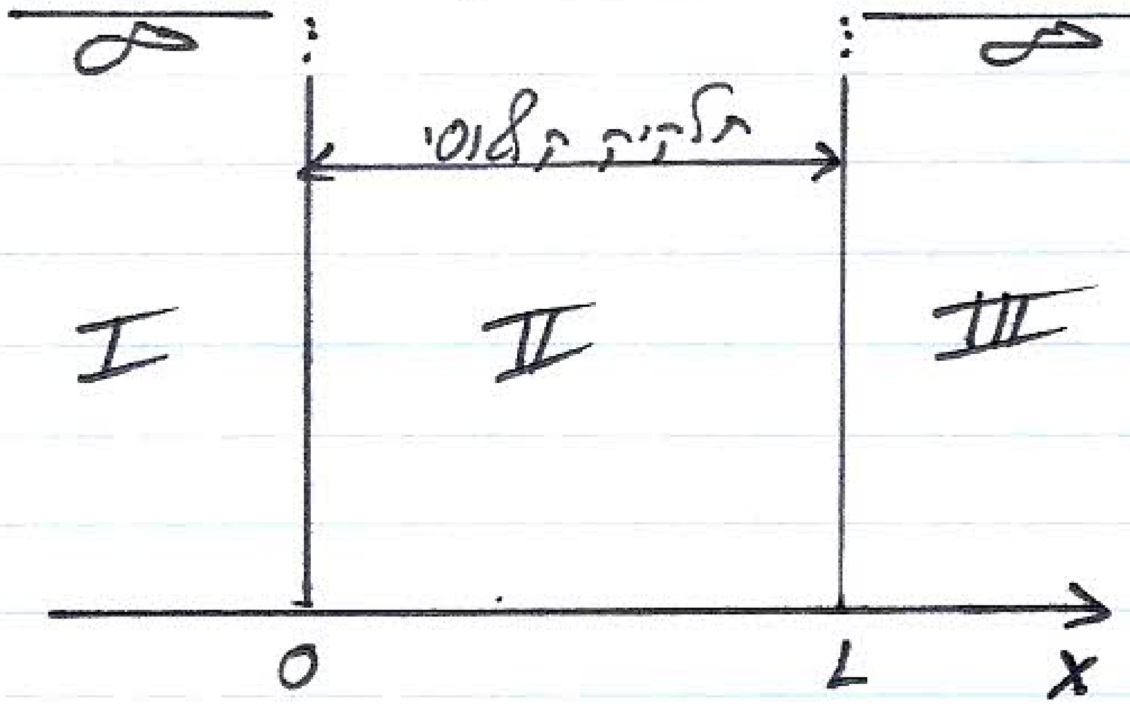
חלקיק בקופסא חד ממדית

- הנושא הראשון בו נעסוק הינו בעיה של חלקיק ~~חב~~ בקופסא במימד 1. הפתרון של בעיה זו הינו פשוט יחסית ויכול לתת תובנות בסיסיות להתנהגות של אלקטרונים ה-π במערכות פוליאניות (מתן תחזיות איכותיות נכונות) או להתנהגות של אלקטרונים בננו-חלקיקים (מודל של חלקיק בקופסא תלת-ממדית).



הקופסא ממוקמת בין $x=0$ לבין $x=L$ כך שהפוטנציאל מחוץ לקופסא הוא אינסופי ובתוך הקופסא הוא קבוע ואשר נבחר כ-0:

$$\hat{V}(x)=\begin{cases}0 & 0<x<L\\ \infty & \text{אחרת}\end{cases}$$

חלקיק חופשי שיהיה כלוא בקופסא נושא אנרגיה E ונוגע בדופן, שם התנע ישנה את כיוונו והוא ינוע תמיד עד לדופן השניה וחוזר חלילה. הסיכוי למציאת החלקיק במקום כלשהו בקופסא הינו אחיד (שאינו תלוי ב-x) והסיכוי למציאת החלקיק מחוץ לקופסא הינו 0. כל עוד אנרגיית החלקיק נמוכה מגובה מחסום הפוטנציאל הסיכוי שלו להיות מחוץ לקופסא מתאפס.

הסיכוי אחיד שכן המהירות שלו קבועה. באוסצילטור ההרמוני הסיכוי המקסימלי למציאת החלקיק הוא בנקודות התפנית. שם הוא ושבה המהירות הזמן ארוך ביותר.

עלינו לפתור את משוואת שרדינגר עבור החלקיק בקופסא:

$$\hat{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x)$$

אך הפוטנציאל אותו הגדרנו אינו רציף. בכדי להתגבר על אי-רציפות נחלק את הבעיה לשלושה אזורים. באזורים I ו-III הסיכוי למציאת החלקיק מתאפס שכן הפוטנציאל הוא אינסופי שם וברוחב אינסופי ולכן פונ' הגל חייבת להתאפס שם:

$$\Psi_I(x)=\Psi_{III}(x)=0$$

עלינו אם כן לפתור את משוואת שרדינגר רק באזור II: באזור זה הפוטנציאל מתאפס ולכן:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{II}(x)=E\Psi_{II}(x)$$

צריך פונ' שנגזרתה השניה נותנת אותה כמכפלה. נוכל באופן כללי לרשום פתרון לבעיה זו ע"י:

$$\psi_{II}(x) = A\cos(\alpha x) + B\sin(\alpha x)$$

נציב את הפתרון במשוואה בכדי לקבל את הקבועים:

$$\psi_{II}'(x) = -A\alpha\sin(\alpha x) + B\alpha\cos(\alpha x)$$

$$\psi_{II}''(x) = -\alpha^2 A\cos(\alpha x) - \alpha^2 B\sin(\alpha x) = -\alpha^2\psi_{II}(x)$$

ולכן:

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \Rightarrow \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

כעת נותר למצוא את המקדמים A ו-B. אותם אנו מקבלים מתוך תנאי השפה. אנו דורשים שפונקציית הגל תהיה הגיונית - כלומר עליה להיות חד-ערכית. לכן היא צריכה להיות רציפה בגבולות שבין אזור II לאזורים I ו-III אחרת יש לה 2 ערכים בנקודות המעבר בין האזורים השונים.

מכאן נדרוש כי פונ' הגל תהיה רציפה ב $x=0$ כך: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0$

כיוון שיש לנו שני מקדמים (A,B) נצטרך תנאי נוסף בכדי לקבוע אותם ולכן נדרוש רציפות הפונקציה ב- $x=L$: $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) = 0$

כעת:

$$\psi_{II}(x=0) = A\overset{1}{\cos(\alpha 0)} + B\overset{0}{\sin(\alpha 0)} = \boxed{A \overset{!}{=} 0} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \psi_{II}(x) = B\sin(\alpha x)$$

$$\psi_{II}(x=L) = B\sin(\alpha L) \overset{!}{=} 0$$

הפתרון טריוויאלי, לא מעניין.

אם נדרוש כי $B=0$ אזי פונ' הגל כולה מתאפסת ולא יהיה לנו חלקיק. מכאן, ~~אין משמעות פיזיקלית~~
מתוך תנאי השפה נקבל קוונטיזציה של האנרגיה:

$$\sin(\alpha L) = 0 \Rightarrow \alpha L = n\pi\ ;\ ~~\text{[illegible]}~~\ n = 1,2,\ldots$$

אך כיוון ש $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ נקבל כי:

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,L = n\pi$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

$\hbar = h/2\pi$

אפשרי פונ' הגל מתאפסת בנקודות אבל אין סיכוי למצוא את החלקיק בקופסא. אך שמצאנו חלקיק לכן זו סתירה.

מדוע לא בוחרים n שליליים?

קיבלנו אם כן שבבדיקת פתרון למשוואת שרדינגר שבו הפו' תלויה בזמן, האנרגיות החלקיק יכולה לקבל ערכים מסויימים בלבד - קוונטיזציה:

$$\boxed{E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \; ; \; n = 1,2,3,\ldots}$$

$n=0$ אינו פתרון שכן פו' הגל מתאפסת עבורו בכל נקודות.

במכניקה הקלאסית ניתן לספק לחלקיק כל אנרגיה שהיא. במכניקה הקוונטית במקרה הסטציונרי לא ניתן לקבל כל אנרגיה. האנרגיות המותרות ביותר הן:

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \; ; \; E_2 = \frac{h^2}{2mL^2} \; ; \; E_3 = \frac{9}{8}\frac{h^2}{mL^2} \; \ldots$$

האנרגיה מקוונטטת כתוצאה מתנאי השפה - רציפות פו' הגל או הנגזרת פו' הגל.

ניתן כעת לקבוע מהו המקדם B:

$$\Psi_n(x) = B\sin(\alpha x) = B\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

B נקבע מתנאי הנרמול:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1$$

כיוון שהפו' מתאפסת מחוץ לקופסא נדרוש כי:

$$\int_0^L B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \stackrel{!}{=} 1$$

כאשר הנחנו כי B ממשי.

נשתמש בזהות הטריגונומטרית הבאה:

$$\sin^2(x) = \frac{1}{2}\left[1-\cos(2x)\right]$$

ונקבל:

$$1 \stackrel{!}{=} \frac{B^2}{2}\int_0^L \left[1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right] dx = \frac{B^2 L}{2} - \frac{LB^2}{2\cdot 2n\pi}\underbrace{\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\Big|_0^L}_{0} =$$

$$= \frac{B^2 L}{2} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

ולכן:

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

$$\underset{\text{נרמול}}{1 \stackrel{!}{=}} \frac{B^2}{2}\int_0^L\left[1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]dx=\frac{B^2}{2}\left[x-\frac{L}{2\pi n}\underbrace{\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)}_{0}\right]_0^L=\frac{B^2L}{2}$$:ונקבל

ולכן: $\frac{B^2L}{2}=1 \Rightarrow B=\sqrt{\frac{2}{L}}$

ופונקציות הגל שמתקבלות הן:

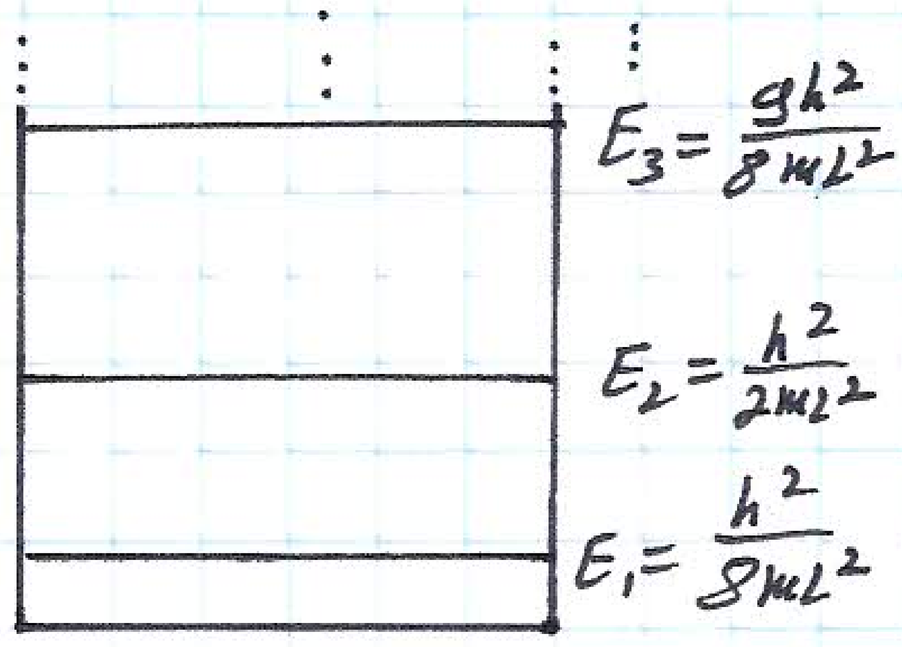
$$\boxed{\Psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$ – אוסף הפונקציות העצמיות: $0\le x\le L$

$$\boxed{E_n=\frac{n^2h^2}{8mL^2}\ ;\ n=1,2,3,\ldots}$$ – אוסף הערכים העצמיים:

$$\Psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & 0\le x\le L\\ 0 & \text{אחרת}\end{cases}$$

כאשר הקוונטיזציה נבעה מתנאי השפה (רציפות).

נצייר את הערכים העצמיים באופן הבא:



ניתן לראות כי עבור חלקיק קוונטי קיימת אנרגיה מינימלית ($\underset{=h^2/8mL^2}{E_1}$ במקרה של חלקיק בקופסא) אשר לא ניתן לרדת מתחתיה גם בטמפרטורת האפס המוחלט.

אנרגיה זו מכונה אנרגיית "האפס". חלקיק קלאסי במנוחה בתוך הקופסא (ב-$T=0K$) היה בעל אנרגיה שווה לאפס בעוד שחלקיק קוונטי גם ב-$T=0K$ תהיה לו אנרגיה סופית. זהו אפקט קוונטי מובהק.

המרווח בין שתי רמות שכנות הינו מדד לקוונטיזציה. אם המרווח קטן מאוד אזי שנקבל רצף של אנרגיות (ולא נבחין בקוונטיזציה של האנרגיה). עבור חלקיק בקופסא חד ממדית מרווח זה נתון ע"י:

$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=\frac{h^2}{8mL^2}\left[(n+1)^2-n^2\right]=\frac{h^2}{8mL^2}(2n+1)$$

בניגוד למצב באטום המימן ($E_n\sim\frac{1}{n^2}$) כאן הפרש הרמות הולך וגדל עם n.

כפי שכבר ציינו בעבר הגבול הקלאסי אמור להתקבל כאשר אורך גל דה-ברולי קטן מאוד ביחס לגודל האופייני של המערכת: $\lambda_{d.B.}=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}\ll L$.

תנאי זה יתקיים כאשר המסה של החלקיק תהייה גדולה מאוד. ואכן כאשר $m\to\infty$ אנו מקבלים כי $\Delta E\to 0$ ולכן מתקבל רצף של רמות.

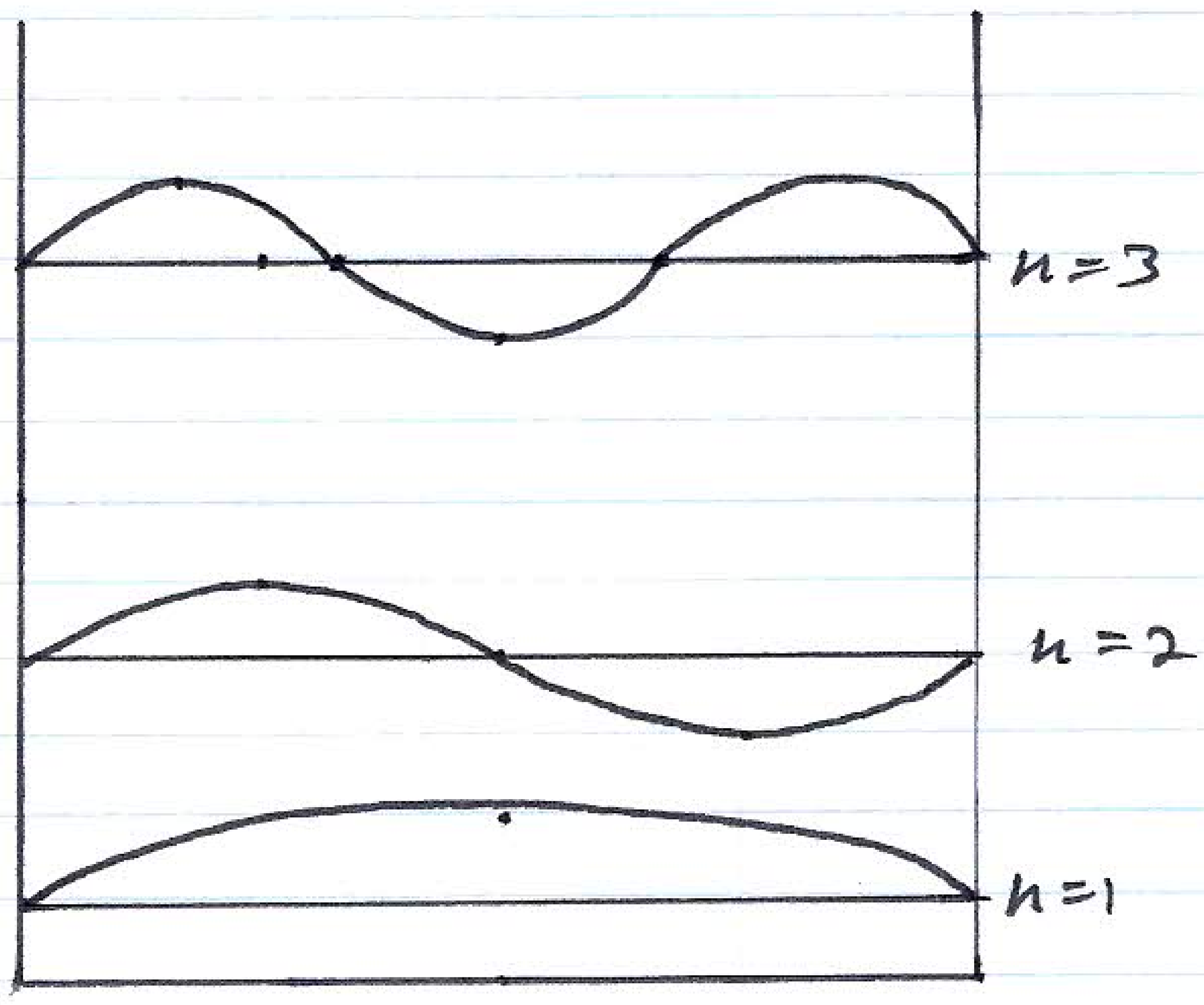
באופן דומה, התנאי ~~[illegible]~~ מתקיים כאשר אורך הקופסא גדול מאוד ואכן כאשר $L\to\infty$ $\Delta E\to 0$ ושוב מתקבל רצף של רמות.

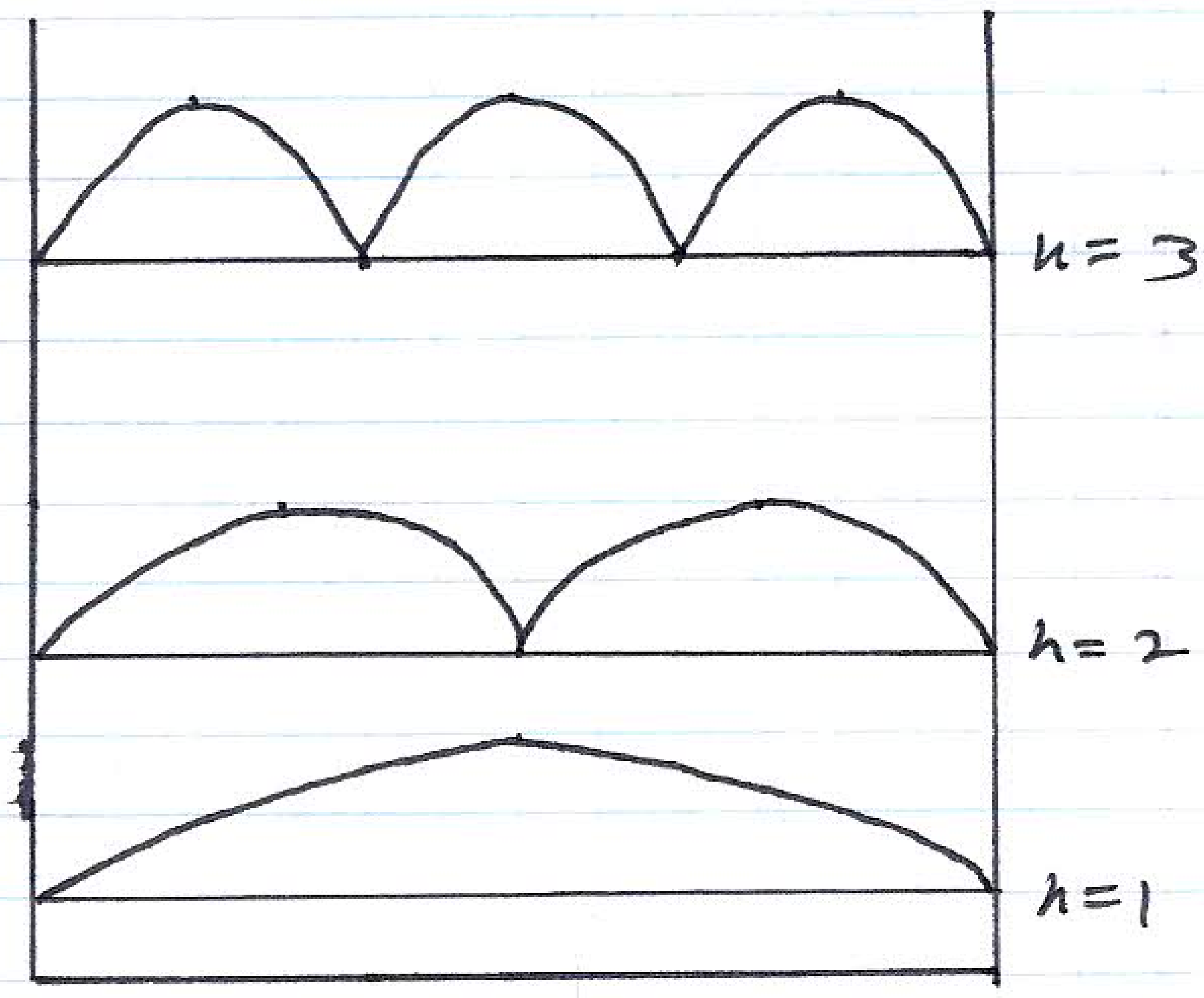
בגבולות אלה ($L\to\infty$ ו/או $m\to\infty$) גם אנרגיית "האפס" שואפת לאפס ושוב מתקבל הגבול הקלאסי.

אנרגיית האפס של אטום המימן היא $-13.6eV$.

אנרגיית האפס מוגדרת ביחס לתחתית הפוטנציאל בקופסא שבחרנו אותו כ-0. לו היינו בוחרים V_0 אזי אנרגיית האפס היתה $E_1=\frac{h^2}{8mL^2}+V_0$. בשום מקרה חלקיק קלאסי שהיה מקבל אנרגיה מינימלית של V_0.

נתבונן כעת בפונקציות הגל $\psi_n(x)$ ובצפיפות ההסתברות $|\psi_n(x)|^2$ כפונקציה של רמת האנרגיה:





עבור $n=1$ ניתן לראות כי בניגוד למכניקה הקלאסית ההסתברות למציאת החלקיק לאורך הקופסא אינה אחידה. הסתברות זו הינה מקסימלית במרכז ומתאפסת בקצוות. זוהי תופעה קוונטית מובהקת נוספת.

להזכיר "סוד" הקופסא.

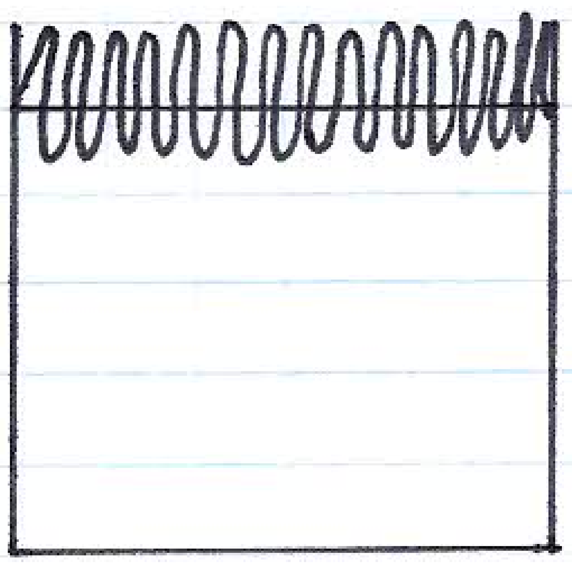
כאשר $n=2$ ההסתברות למציאת החלקיק בדיוק במרכז הקופסא מתאפסת.

אנו מסכמים את כלל העובדות הבאות:

* כאשר n הוא אי זוגי ψ_n הינה זוגית ביחס למרכז הקופסא.
* כאשר n הוא זוגי ψ_n הינה אי-זוגית ביחס למרכז הקופסא.
* עבור כל n מתקיים שההסתברות (צפיפות) למציאת החלקיק $|\psi_n(x)|^2$ הינה סימטרית ביחס למרכז הקופסא.

כמו כן ניתן לראות שככל ש-n גדל (האנרגיה עולה) מספר הצמתים בפונקציות הגל גדל, ולכן גדל מס' הנקודות וצפיפות הנקודות בהן לא ניתן למצוא את החלקיק (ההסתברות למציאת החלקיק בהן מתאפסת). פרט לנקודות הקצה ($x=0$ ו- $x=L$) מס' הצמתים בפונקציות הגל נתון ע"י $n-1$.

נתבונן בגבול של מספרים קוונטיים גדולים $n\to\infty$. בגבול זה פו"ג תהיה מאוד אוסצילטורית ובעלת נקודות צומת רבות:



ובשנעלה אותה בריבוע נקבל תמונה שבה ההסתברות למציאת החלקיק לאורך הקופסא הינה קבוע בהתאם לגבול הקלאסי.

זוהי דוגמא לעיקרון ההתאמה של בוהר Bohr's correspondence principle.

מספר דוגמאות מספריות:

אנרגיות האפס של אלקטרון בקופסא.

נבחר קופסא באורך $L=2A^\circ$ (סדר הגודל של אטום או של קשר כימי) ונציב בנוסחא: [illegible]

$$E_1=\frac{h^2}{8mL^2}=\frac{(6.6\cdot10^{-34}\,J\cdot sec)^2}{8\,(9.11\cdot10^{-31}\,kg)(2\cdot10^{-10}\,m)^2}\approx1.5\cdot10^{-18}\,J\approx900\,\frac{kJ}{mole}\approx$$

$$\approx 200\,kcal/mole\approx 9eV$$

זהו סדר הגודל של האנרגיה של קשר כימי וזוהי האנרגיה שנקבל כאשר נשבור קשרים (שבירת קשר כימי).

חשוב: כלוא האלקטרון עולה אנרגיה ולכן האנרגיות הנ"ל חיוביות ולכן הקשר הכימי צריך להיות מסדר הגודל של האנרגיה הנ"ל ובסימן הפוך בכדי שהקשר יהיה יציב.

- נקודה חשובה: האנרגיה שקיבלנו היתה חיובית כלומר אם ניקח חלקיק חופשי ($L\to\infty$ ולכן $E_1\to0$) ונגביל אותו לקופסא באורך L סופי התהליך ידרוש מאיתנו השקעת אנרגיה. לעומת זאת באטום המימן אנרגיית האפס (אנרגיית מצב היסוד 1s) היתה שלילית $-13.6eV$ כלומר הרווחנו אנרגיה מכך שלקחנו אלקטרון ופרוטון מרוחקים לאינסוף במנוחה ויצרנו מהם את אטום המימן. הסיבה להבדל הזה היא הפוטנציאל הקולומבי המושך בין ה-e לפרוטון. האופרטור רק של "כלוא" החלקיק באטום אלא גם של הפוטנציאל המושך. מכאן שהקשר הכימי מחייב כוחות משיכה שמתבססים על האינטראקציה הקולומבית בין האלקטרון לפרוטון.

אנרגיות האפס של פרוטון בקופסא.

נבחר קופסא באורך של $L=10^{-15}m$ (סדר גודל הגרעין) ונחשב:

$$E_1=\frac{(6.6\cdot10^{-34}\,J\cdot sec)^2}{8(1.6\cdot10^{-27}\,kg)\cdot(10^{-15}\,m)^2}\approx2\cdot10^{8}eV=200MeV$$

זהו סדר הגודל של האנרגיה הגרעינית - גדולה פי 10^8 מאנרגיות הקשר הכימי.

חשוב: האנרגיות הנ"ל חיוביות ולכן הקשר הגרעיני צריך להיות מסדר גודל האנרגיה הנ"ל ובסימן הפוך בכדי שהגרעין יהיה יציב.

האם יש לטפל באופן קלאסי או קוונטי באטומי He הכלואים בקופסא באורך $L=1$ ס"מ בטמפרטורת החדר ($T=300K$)?
[illegible]

נחשב את האנרגיה הקינטית הממוצעת ונגלה מהו המספר הקוונטי.

$$\langle E\rangle \underset{\text{לכל כיוון חופש}}{=}\frac{1}{2}k_BT=\frac{h^2n^2}{8mL^2}$$

$$\Rightarrow \bar{n}=\left(\frac{4k_BTmL^2}{h^2}\right)^{1/2}\underset{c.g.s.}{=}\left[\frac{4\cdot1.4\cdot10^{-16}\cdot300\cdot7\cdot10^{-24}\cdot1^2}{(6.6\cdot10^{-27})^2}\right]^{1/2}=1.7\cdot10^{8}$$

n גדול מאוד ולכן לפי עקרון ההתאמה החלקיקים מתנהגים קלאסית!

[illegible]

סטיית התקן היא ממוצע הסטיות מהממוצע (מדד לפיזור התוצאות):

$$\overline{x-\bar{x}} = \bar{x}-\bar{x} = 0$$

כיוון שהסטיות הן גם חיוביות וגם שליליות מצב זה מתאפס

לכן בוחנים את שורש ריבועי הסטיות מן הממוצע:

$$\Delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}} = \sqrt{\overline{x^2-2x\bar{x}+\bar{x}^2}} =$$

$$= \sqrt{\overline{x^2}-2\bar{x}\bar{x}+\bar{x}^2} = \sqrt{\overline{x^2}-\bar{x}^2} = \underline{\sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}}$$

האם מתקיים עקרון אי הודאות עבור חלקיק בקופסא חד ממדית.

$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$

Δx - הינה אי הודאות במדידת מיקום החלקיק.

ההגדרה הינה הגדרה הסתברותית בה פיזור תוצאות המדידה (אי הודאות) נמדד

ע"י סטיית התקן (השונות): $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2\rangle - \langle \hat{x}\rangle^2}$

מחשבים את שני ערכי התצפית:

$$\langle \hat{x}\rangle = \langle \psi_n|\hat{x}|\psi_n\rangle = \int_0^L \left[\sqrt{\tfrac{2}{L}}\sin\left(\tfrac{n\pi x}{L}\right)\right]^* x \left[\sqrt{\tfrac{2}{L}}\sin\left(\tfrac{n\pi x}{L}\right)\right] dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \underset{y=\frac{n\pi x}{L};\ dy=\frac{n\pi}{L}dx}{=} \frac{2}{L}\int_0^{n\pi} \underbrace{\left(\frac{L}{n\pi}\right) y}_{x} \sin^2(y) \underbrace{\left(\frac{L}{n\pi}\right) dy}_{dx} =$$

$$= \frac{2}{L}\frac{L^2}{n^2\pi^2}\underbrace{\int_0^{n\pi} y \sin^2(y)\, dy}_{\frac{n^2\pi^2}{4}} = \frac{\cancel{2}}{\cancel{L}}\frac{L^{\cancel{2}}}{\cancel{n^2\pi^2}}\cdot\frac{\cancel{n^2\pi^2}}{\cancel{4}\,2} = \underline{\underline{\frac{L}{2}}}$$

עבור $\langle \hat{x}^2\rangle$:

$$\langle \hat{x}^2\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L}\frac{L^3}{n^3\pi^3}\int_0^{n\pi} y^2 \sin^2(y)\, dy =$$

$$= \frac{2}{L}\frac{L^3}{n^3\pi^3}\cdot\frac{1}{24}\cdot\left[4n^3\pi^3 - 6n\pi\right] =$$

$$= \frac{1}{6}\left[2 - \frac{3}{n^2\pi^2}\right]L^2$$

ולכן:

$$\Delta x = \left[\frac{1}{6}\left(2 - \frac{3}{n^2\pi^2}\right)L^2 - \frac{L^2}{4}\right]^{1/2} = \underline{\underline{\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}\, L}}$$

Δp - אי הודאות במדידת תנע החלקיק.

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$$

$$\langle \hat{p}\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin^*\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = \underline{\underline{-i\hbar}}\,\frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx \ \underline{\underline{=0}}$$

אינטגרל זה מתאפס בתחום. ניתן להבין זאת מן משיקולי סימטריה (מכפלה של פונקציות בסינוס אוגנות שהן מחזוריות עם מחזור שלם) וכן מהשיקול הבא:

האינטגרל בשלם ימין הינו ממשי ולכן בכדי ש $\langle \hat{p}\rangle$ יהיה ממשי האינטגרל

$\langle \hat{p} \rangle = 0$ חייב להתאפס!

התוצאה זו הינה כללית - עבור מצבים סטציונריים ממוצע התנע מתאפס. אחרת המצב לא היה סטציונרי.

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx =$$

$$= \hbar^2\frac{2}{L}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx =$$

$y = \frac{n\pi x}{L}\ ;\ dy = \frac{n\pi}{L}dx$

$$= \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{L^3}\,\frac{L}{n\pi}\int_0^{n\pi}\sin^2(y)\,dy = \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}\cdot\frac{1}{n\pi}\cdot\frac{n\pi}{2} =$$

$$\int_0^{n\pi}\sin^2(y)\,dy = \frac{n\pi}{2}$$

$$= \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2} = \frac{n^2h^2}{4L^2} = 2m\,\frac{n^2h^2}{8mL^2} = \underline{\underline{2mE_n}}$$

זה לא יכול להתאפס אחרת נסתור את אי-הוודאות.

למרות שהתנע הממוצע מתאפס האנרגיה הקינטית לא מתאפסת. שכן היא פרופורציונית ל-$\langle \hat{p}^2 \rangle$ כך גם

באופן כללי עבור חלקיק קוונטי בבור התנע הממוצע מתאפס שכן הוא נע לשני הכיוונים בהסתברות שווה אך ה-E_k לא מתאפס שכן הגודל שמופיע בחישוב שלה $\langle \hat{p}^2 \rangle$.

ויכולנו לקבל תוצאה זו גם ללא חישוב האינטגרל שכן עבור חלקיק בקופסא ההמילטוניאן מכיל רק את האנרגיה הקינטית כך שמתקיים:

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle \overset{\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n}{=} \langle \psi_n | E_n | \psi_n \rangle = E_n \underbrace{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}_{1 \text{ נרמול}} = E_n$$

עבור חלקיק בקופסא $\hat{V}=0$, $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$

$$= \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{p}^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\langle \hat{p}^2 \rangle = 2mE_n}}$$

ובסה"כ נקבל כי:

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \underbrace{\langle \hat{p} \rangle^2}_{0}} = \sqrt{2mE_n}$$

ולכן:

$$\Delta x \Delta p_x = \Bigg[\underbrace{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)\cancel{L^2}}_{\Delta x}\cdot\frac{n^2h^2}{4\cancel{L^2}}\Bigg]^{1/2} = \left[\left(\frac{n^2}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)\frac{4\pi^2\hbar^2}{4}\right]^{1/2} =$$

$$= \left[\left(\frac{n^2}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)\cdot 4\pi^2\right]^{1/2}\cdot\frac{\hbar}{2}$$

כאשר $n=1$ נקבל במספרים הרבועיים - 1.13572 ועבור כל n גדול יותר המכפלה גדלה (ואי-הוודאות תגדל) כך שעקרון אי-הוודאות מתקיים!

האם הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן של חלקיק בקופסא 1D מקיימות את תנאי האורתוגונליות?

האורתוגונליות בפונקציות רציפות מוגדרת כ- $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx = 0$.

אנו דואגים שהפונקציות תהיינה מנורמלות ולכן רק נותר להוכיח אורתוגונליות.

$$\int_0^L \psi_n(x)\psi_m(x)dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)dx =$$

$$\sin\alpha\sin\beta = \frac{\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta)}{2}$$

$$= \frac{1}{L}\int_0^L \left\{\cos\left[\frac{(n-m)\pi x}{L}\right] - \cos\left[\frac{(n+m)\pi x}{L}\right]\right\}dx \underset{n\neq m}{=}$$

$$= \frac{1}{L}\left\{\frac{L}{\pi(n-m)}\sin\left[\frac{(n-m)\pi x}{L}\right] - \frac{L}{\pi(n+m)}\sin\left[\frac{(n+m)\pi x}{L}\right]\right\}_0^L =$$

$$= \frac{1}{\pi}\left\{\underset{0}{\underbrace{\frac{1}{(n-m)}\sin[\underbrace{(n-m)}_{\text{שלם}}\pi]}} - \underset{0}{\underbrace{\frac{1}{(n+m)}\sin[\underbrace{(n+m)}_{\text{שלם}}\pi]}}\right\} = 0$$

כאשר $n=m$ האיבר השני עדיין מתאפס אך האיבר הראשון הוא מהצורה:

$$\frac{1}{\pi}\frac{\sin[(n-m)\pi]}{(n-m)} \xrightarrow[n\to m]{} 1 \qquad \frac{\sin(x)}{x} \to 1$$

האפקטים הקוונטים בהם נתקלנו בבעיית החלקיק בקופסא החד ממדית הם:

1. קוונטיזציה של האנרגיה.
2. הסתברות לא אחידה למציאת החלקיק לאורך הקופסא.
3. נקודות צומת בהן ההסתברות למציאת החלקיק מתאפסת.
4. אנרגיית האפס.

העקרונות בהם השתמשנו במודל פשוט זה ישמשו אותנו גם בבואנו לטפל בבעיות ובמודלים מסובכים יותר ומציאותיים יותר.