תרגול מספר 4

חלקיק בקופסא רב־מימדית וחלקיק בטבעת

תוכן עניינים

1 קופסא תלת־מימדית ורמות מנוונות

עבור חלקיק הנמצא בקופסא שצורתה תיבה במימדים L_x, L_y, L_z, פונקציות הגל העצמיות האורתונורמליות של ההמילטוניאן הן

$$\boxed{\psi_{nlm}\left(x,y,z\right)=\psi_n\left(x\right)\psi_l\left(y\right)\psi_m\left(z\right)},$$

$$\boxed{\psi_n\left(x\right)=\sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\frac{n\pi x}{L_x},\;\psi_l\left(y\right)=\sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\frac{l\pi y}{L_y},\;\psi_m\left(z\right)=\sqrt{\frac{2}{L_z}}\sin\frac{m\pi z}{L_z}}.$$

האנרגיות ניתנות על ידי הערכים העצמיים:

$$\hat{H}\psi_{nlm}\left(x,y,z\right)=\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_{nlm}\left(x,y,z\right)=E_{nlm}\psi_{nlm}\left(x,y,z\right),$$

$$\boxed{E_{nlm}=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n^2}{L_x^2}+\frac{l^2}{L_y^2}+\frac{m^2}{L_z^2}\right)}.$$

אם הקופסא היא גם קוביה, אזי $L_x=L_y=L_z=L$. האינדקסים n, l ו־m, המכונים המספרים הקוונטיים, כוללים בתוכם את כל המידע הנחוץ כדי לתאר רמה. ה־ket המתאים לרמה כזו הוא $|nlm\rangle$.

שאלה: נתון המצב $\psi\left(x,y,z\right)=\psi_{112}\left(x,y,z\right)-2\psi_{123}\left(x,y,z\right)$. מצאו את ה־ket המנורמל המתאים לו ואת ערך התצפית של האנרגיה. מה היא ההסתברות שיתקבל ערך זה בניסוי? מה ההסתברות לקבל כל ערך אחר?

פיתרון: נוח מאוד לעבוד כאן בנוטציית דיראק, בה $|\psi\rangle=|112\rangle-2\,|123\rangle$. שימו לב כי היות והמצבים $|nlm\rangle$ אורתונורמליים, מכפלה מהסוג $\langle nlm\,|ijk\rangle$ מתאפסת אלא אם כן $i=j$, $l=m$ ו־$m=k$ ־ כלומר, אלא אם כן היא בין מצבים זהים. אם המצבים זהים, היא שווה ל־1. נתחיל בנירמול

$$\begin{aligned}\langle\psi|\,\psi\rangle &= \left(\langle112|-2\,\langle123|\right)\left(|112\rangle-2\,|123\rangle\right)=\overbrace{\langle112|\,112\rangle}^{=1}-2\overbrace{\langle123|\,112\rangle}^{=0}-2\overbrace{\langle112|\,123\rangle}^{=0}+4\overbrace{\langle123|\,123\rangle}^{=1}\\ &= 5.\end{aligned}$$

מכאן, פונקציית הגל המנורמלת היא

$$\boxed{|\psi\rangle\to\frac{1}{\sqrt{5}}\,|112\rangle-\frac{2}{\sqrt{5}}\,|123\rangle}.$$

את האנרגיה הממוצעת ניתן לחשב על פי:

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle &= \langle\psi|\,\hat{H}\,|\psi\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\langle 112| - \frac{2}{\sqrt{5}}\langle 123|\right)\hat{H}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}|112\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}}|123\rangle\right)\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\langle 112| - \frac{2}{\sqrt{5}}\langle 123|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\hat{H}\,|112\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}}\hat{H}\,|123\rangle\right)\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\langle 112| - \frac{2}{\sqrt{5}}\langle 123|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\frac{h^2\overbrace{\left(1^2+1^2+2^2\right)}^{=6}}{8mL^2}|112\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}}\frac{h^2\overbrace{\left(1^2+2^2+3^2\right)}^{=14}}{8mL^2}|123\rangle\right)\\
&= \frac{1}{5}\overbrace{\langle 112|\,112\rangle}^{=1}\frac{6h^2}{8mL^2} + \frac{4}{5}\overbrace{\langle 123|\,123\rangle}^{=1}\frac{14h^2}{8mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(\frac{6}{5}+\frac{4\times 14}{5}\right) = \boxed{\frac{31h^2}{20mL^2}}.
\end{aligned}$$

למעשה, לעולם לא נמדוד את האנרגיה הזו בניסוי: נמדוד $E=\frac{6h^2}{8mL^2}$ בהסתברות של $\frac{1}{5}$ ו־$E=\frac{14h^2}{8mL^2}$ בהסתברות של $\frac{4}{5}$. האנרגיה שחישבנו תתקבל רק בממוצע, עבור מספר רב של חזרות על הניסוי או מערכות זהות.

שאלה: כמה מהרמות של חלקיק בקוביה קטנות מ־$\frac{15h^2}{8mL^2}$? מהו הניוון של כל אנרגיה?

פיתרון: כל רמה אמנם מתוארת על ידי שלושת המספרים הקוונטיים, אך האנרגיה $E_{nlm}=\frac{h^2}{8mL^2}\left(n^2+l^2+m^2\right)$ נקבעת לחלוטין על ידי $N^2=n^2+l^2+m^2$. נכתוב, אם כך, את כל השילובים של המספרים הקוונטיים הנותנים רמות מהאנרגיה הקטנה ביותר ועד הגבול העליון הנתון, $N^2=15$:

n	l	m	$n^2+l^2+m^2$
1	1	1	3
1	1	2	6
1	2	1	6
2	1	1	6
1	2	2	9
2	1	2	9
2	2	1	9
1	1	3	11
1	3	1	11
3	1	1	11
2	2	2	12
1	2	3	14
1	3	2	14
3	1	2	14
3	2	1	14
2	3	1	14
2	1	3	14

2 חלקיק ב־nanotube

נדון באלקטרון במעטפת של מולקולה גלילית ברדיוס R ובאורך L, כגון carbon nanotube. מסיבות שלא נדון בהן כאן (אבל אלו מכן שיקחו את הקורס "מבוא למצב מוצק" ילמדו עליהן יותר לעומק), אלקטרונים כאלו מתנהגים כמו אלקטרונים חופשיים בקופסא בצורת המעטפת, אך עם מסה אפקטיבית μ השונה ממסת האלקטרון הרגילה.

בהרצאה ראיתם כי עבור חלקיק במישור, ניתן לבצע את הטרנספורמציה

$$\hat{H}_{xy} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}\right) \overset{r=R}{=} -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}.$$

כמו בהרצאה, השתמשנו בכך שהאלקטרון לכוד ברדיוס $r = R$ כדי להזניח את באיבר בראשון, הכולל נגזרות לפי r. בדיוק באותו אופן, אם נוסיף תלות ב־z נקבל:

$$\hat{H} = \overbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2}}^{=\hat{H}_{xy}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \hat{H}_\vartheta + \hat{H}_z.$$

ההמילטוניאן פריק בקואורדינטות, ולכן מובטח לנו כי פונקציית הגל היא מהצורה $\psi(\vartheta, z) = \varphi(\vartheta)\phi(z)$, ונוכל לפתור את משוואת שרדינגר באמצעות הפרדת משתנים.

שאלה: מצאו את הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן ואת האנרגיות המתאימות להן עבור הבעיה שתוארה כאן.

פיתרון: נכתוב את משוואת שרדינגר:

$$\hat{H}\psi(\vartheta, z) = \left(\hat{H}_\vartheta + \hat{H}_z\right)\varphi(\vartheta)\phi(z) = \phi(z)\hat{H}_\vartheta\varphi(\vartheta) + \varphi(\vartheta)\hat{H}_z\phi(z) = E\varphi(\vartheta)\phi(z).$$

כעת, אם נכתוב

$$\begin{aligned}\hat{H}_z\phi(z) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(z) = E_z\phi(z),\ 0 < z < L,\\ \hat{H}_\vartheta\varphi(\vartheta) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}\varphi(\vartheta) = E_\vartheta\varphi(\vartheta),\ 0 < \vartheta < 2\pi.\end{aligned}$$

אזי המשוואה הקודמת ניתנת לכתיבה באופן

$$\phi(z)E_\vartheta\varphi(\vartheta) + \varphi(\vartheta)E_z\phi(z) = E\varphi(\vartheta)\phi(z) \Rightarrow E = E_z + E_\vartheta.$$

הפרדנו את הבעיה לשתי בעיות חד־מימדיות. יותר מכך, אלו בעיות שכבר פתרנו: בציר z חלקיק בקופסא, וב־ϑ חלקיק בטבעת. נוכל לרשום את הפתרונות מיד:

$$\begin{aligned}\phi_n(z) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi z}{L},\ E_{zn} = \frac{n^2h^2}{8\mu L^2},\\ \varphi_m(\vartheta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\vartheta},\ E_{\vartheta m} = \frac{m^2h^2}{8\pi^2\mu R^2}.\end{aligned}$$

בעזרתם, פונקציית הגל המלאה והאנרגיות שלה יהיו

$$\boxed{\psi_{nm}(\vartheta, z) = \varphi_n(\vartheta)\phi_m(z) = \sqrt{\frac{1}{\pi L}}e^{im\vartheta}\sin\frac{n\pi z}{L}},$$

$$\boxed{E_{nm} = E_{zn} + E_{\vartheta m} = \frac{n^2h^2}{8\mu L^2} + \frac{m^2h^2}{8\pi^2\mu R^2}}.$$

3 אופרטורים כמטריצות

אם פונקציית הגל של המערכת ניתנת תמיד לכתיבה באופן $\psi(x) = \sum_{i=0}^{n} u_i\varphi_i(x)$ (הנחנו כאן לצורך פשטות כי למערכת יש מספר סופי ובדיד של פונקציות עצמיות, אך ניתן להכליל את הרעיונות בהם נדון למקרה הכללי), נוכל לתאר אותה בעזרת הווקטור

$$\begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}.$$

אנו יכולים תמיד לקבל עבור כל פונקציית גל נתונה את הרכיב ה־j שלה באמצעות הפעולה הבאה (הפונקציות $\{\varphi_j(x)\}$ אורתונורמליות אחת לשניה):

$$\int \varphi_j^*(x)\,\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int \varphi_j^*(x)\sum_i u_i\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x = \sum_i u_i \overbrace{\int \varphi_j^*(x)\,\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x}^{=\delta_{ij}} = u_j.$$

כעת, נבחן את פעולתו של אופרטור ליניארי כלשהו $\hat{A}$ על המצב הזה. הודות לליניאריות של האופרטור אנו יודעים כי

$$\hat{A}\psi(x) = \sum_{i=0}^{n} u_i\hat{A}\varphi_i(x).$$

אם נכפיל את שני צידי המשוואה ב־$\varphi_j^*(x)$ ונבצע אינטגרציה כדי לקבל את הרכיב ה־j של $\hat{A}\psi(x) = \sum_{i=0}^{n} u_i'\varphi_i(x)$, נקבל

$$u_j' = \int \varphi_j^*(x)\,\hat{A}\psi(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} u_i \overbrace{\int \varphi_j^*(x)\,\hat{A}\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x}^{\equiv A_{ji}} = \sum_{i=0}^{n} A_{ji}u_i.$$

באגף ימין התקבל משהו בעל המבנה של מכפלת מטריצה בווקטור. כלומר, ניתן לייצג אופרטור ליניארי כמטריצה:

$$\boxed{\begin{pmatrix} A_{00} & \cdots & A_{0n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n0} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} = A_{ij} = \int \varphi_i^*(x)\,\hat{A}\varphi_j(x)\,\mathrm{d}x},$$

$$\boxed{\left(\hat{A}\psi\right)_i = \left(\begin{pmatrix} A_{00} & \cdots & A_{0n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n0} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}\right)_i = \sum_j A_{ij}u_j}.$$

שאלה: נתונות הפונקציות $\varphi_0(x) = 1$, $\varphi_1(x) = \sqrt{3}x$ ו־$\varphi_2(x) = \sqrt{5}x^2$ בתחום $0 \le x \le 1$. מצאו את הייצוג המטריצי של האופרטור $\hat{D} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ בבסיס של הפונקציות האלו, והשתמשו בו כדי למצוא את הנגזרת של $\psi = x + 2x^2$ (האם אפשר להשתמש בנוסחא שגזרנו?). השוו את התוצאה לגזירה ישירה.

פיתרון: אם ננסה לחשב את אלמנטי המטריצה D_{ij} מהנוסחא, נקבל משהו נכון חלקית בלבד:

$$\begin{aligned} D &\neq \begin{pmatrix} \int_0^1 1\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}1\mathrm{d}x & \int_0^1 1\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{3}x\mathrm{d}x & \int_0^1 1\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{5}x^2\mathrm{d}x \\ \int_0^1 \sqrt{3}x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}1\mathrm{d}x & \int_0^1 \sqrt{3}x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{3}x\mathrm{d}x & \int_0^1 \sqrt{3}x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{5}x^2\mathrm{d}x \\ \int_0^1 \sqrt{5}x^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}1\mathrm{d}x & \int_0^1 \sqrt{5}x^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{3}x\mathrm{d}x & \int_0^1 \sqrt{5}x^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{5}x^2\mathrm{d}x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \int_0^1 3\mathrm{d}x & \sqrt{20}\int_0^1 x\mathrm{d}x \\ 0 & 3\int_0^1 x\mathrm{d}x & \sqrt{60}\int_0^1 x^2\mathrm{d}x \\ 0 & \int_0^1 15x^2\mathrm{d}x & 10\int_0^1 x^3\mathrm{d}x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & \sqrt{5} \\ 0 & 1.5 & \sqrt{15} \\ 0 & 7.5 & 12.5 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

זוהי תשובה לא נכונה (חלקית), כיוון שהפונקציות הנתונות אינן אורתוגונליות זו לזו. את התשובה הנכונה $D = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$ נוכל לקבל במקרה זה מבדיקת השפעת המטריצה על ווקטורי הבסיס:

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}1 = 0 & \Rightarrow D\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\d\\g\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{3}x = \sqrt{3}\cdot 1 & \Rightarrow D\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}b\\e\\h\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sqrt{3}\\0\\0\end{pmatrix}, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sqrt{5}x^2 = \sqrt{20}x = \sqrt{\frac{20}{3}}\cdot\sqrt{3}x & \Rightarrow D\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}c\\f\\i\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\sqrt{\frac{20}{3}}\\0\end{pmatrix}. \end{cases}$$

מכאן,

$$D = \begin{pmatrix}0 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{20}{3}}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\ \hat{D}\psi = \begin{pmatrix}0 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{20}{3}}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{2}{\sqrt{5}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\4\\0\end{pmatrix} = \boxed{1+4x}.$$