הנחות היסוד במכניקה הקוונטית

1. מצב המערכת מתואר ע"י פונקציה Ψ התלויה בזמן ובכל הקואורדינטות של החלקיקים במערכת. $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N, t)$

פונקציה זו , הקרויה פונקצית מצב, מכילה את כל האינפורמציה שניתן לצבור על מערכת נתונה. אנו דורשים ש- Ψ תהיה חד ערכית , רציפה ובעלת אינטגרל ריבועי סופי. צפיפות ההסתברות למצוא את המערכת בקונפיגורציה $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N$ בזמן t נתונה ע"י:

$P = |\Psi|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \ldots\ldots d\vec{r}_N$, ניתן לראות כי הסיכוי למצוא את המערכת כך אינו תלוי בזמן. במצב בעל אנרגיה שהיא ערך עצמי של ההמילאוניאן , המצב מתואר ע"י $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N, t) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N) e^{iEt/\hbar}$, למצב כזה אנו קוראים מצב עמיד (סטציונרי).

2. לכל גודל פיסיקלי מדיד מתאים אופרטור ליניארי הרמיטי. במציאת הביטוי עבור אופרטור זה נכתוב את הביטוי הקלאסי עבור הגודל הפיסיקלי הנתון ונחליף כל קואורדינטה $\vec{r}$ באופרטור $\hat{\vec{r}}$, וכל תקופה (מומנט) $\vec{P}$ באופרטור $-i\hbar\hat{\vec{\nabla}}$.

לאופרטור המיטי תמיד ערכים עצמיים ממשיים ולכן ערכי התצפית של הגודל הפיסיקלי ממשיים.

3. אם $\hat{A}$ הוא אופרטור המתאים לגודל דינמי A , ונתון אוסף מערכות אשר כולן במצב Ψ_s שהוא מצב עצמי של $\hat{A}$, כלומר $\hat{A}\Psi_s = a_s\Psi_s$, אזי בכל מדידה של הגודל A נקבל תמיד את הערך העצמי a_s , וערך זה בלבד.

4. אם $\hat{A}$ הוא אופרטור ליניארי הרמיטי המייצג גודל פיסיקלי מתאים של מערכת כלשהי, אז סט הפונקציות העצמיות $\{\Psi_s\}$ המקיימות $\hat{A}\Psi_s = a_s\Psi_s$, מהווה סט שלם, כלומר ניתן לייצג פונקציה הגונה כלשהי ע"י $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N) = \sum c_n \Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots\ldots, \vec{r}_N)$

שימוש בעיקרון זה נח ע"מ לפתור בעיות שאנו לא יודעים פתרון אנליטי עבורם:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\hat{\partial}^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \gamma\hat{x}^4$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \gamma\hat{x}^4$$

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\hat{\partial}^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

$$\Psi(x)=\sum_n c_n\varphi_n(x)$$

$$\hat{H}_0\varphi_v(x)=\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right)\varphi_v(x)\quad\rightarrow\quad \hat{H}\Psi=E\Psi\rightarrow\left(\hat{H}_0+\gamma\hat{x}^4\right)\sum_n c_n\varphi_n=E\sum_n c_n\varphi_n$$

$$\sum_n c_n\left(\hat{H}_0+\gamma\hat{x}^4\right)\varphi_n=\sum_n c_nE\varphi_n\quad\rightarrow\quad\sum_n c_n\left(\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\varphi_n+\gamma\hat{x}^4\varphi_n\right)=\sum_n c_nE\varphi_n$$

נכפול את שני אגפי המשוואה ב- φ_m^* ונבצע אינטגרציה:

$$\sum_n c_n\left(\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\int\varphi_m^*\varphi_n dx+\gamma\int\varphi_m^*x^4\varphi_n dx\right)=\sum_n c_nE\int\varphi_m^*\varphi_n dx\quad\rightarrow\quad\gamma\int\varphi_m^*x^4\varphi_n dx\equiv\gamma_{mn}$$

$$\sum_n c_n\left(\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{mn}+\gamma_{mn}\right)=E\sum_n c_n\delta_{mn}\quad\rightarrow\quad\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{mn}+\gamma_{mn}\equiv H_{mn}$$

$$\sum_n c_nH_{mn}=E\sum_n c_n\delta_{mn}=Ec_m$$

$$\tilde{H}\vec{c}=E\vec{c}$$

$$\tilde{H}=\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}\qquad\qquad \vec{c}=\begin{pmatrix}c_1\\ .\\ .\\ c_n\end{pmatrix}$$

קיבלנו משוואת ערך עצמי עבור המצבים האלו, וזו למעשה משוואה מטריציונית אלגברית שכל שצריך להחליט זה כמה איברים נשתמש בטור.

יש לנו פונקציות עצמיות שפורשות סט שלם וזו דוגמה איך לנצל דבר זה כדי לפתור מערכת שקשה לפתור אותה ע"י פתרון משוואה שאנו יודעים לפתור בעזרת אלגברה לינארית. טיב הפתרון יהיה תלוי במספר האיברים שלקחנו.

5. אם $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,......,\vec{r}_N)$ היא פונקצית הגל המנורמלת בזמן t, אזי הערך הממוצע של גודל פיסיקלי בזמן t נתון ע"י:

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle\Psi/A/\Psi\rangle=\int\Psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2,......,\vec{r}_N)\hat{A}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,......,\vec{r}_N)d\vec{r}_1d\vec{r}_2......d\vec{r}_N$$

$$bra:\langle\Psi|\quad\equiv\Psi^*(x)$$

$$ket:|\Psi\rangle\equiv\Psi(x)$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle=\int\Psi^*(x)\Psi(x)dx$$

וזהו הכתיב של דיראק.

$$\left\langle \Psi \middle| A \middle| B \middle| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \middle| \Psi \right\rangle = \int \Psi^* \hat{A}\hat{B}\Psi d\tau \int \Psi^* \hat{A}\Psi d\tau$$

$$\Psi = \sum_n c_n \varphi_n$$

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \left\langle \Psi \middle| A \middle| \Psi \right\rangle = \left\langle \sum_n c_n \varphi_n \middle| A \middle| \sum_n c_n \varphi_n \right\rangle = \sum_{nm} c_n^* c_m \left\langle \varphi_n \middle| A \middle| \varphi_m \right\rangle = \sum_{nm} c_n^* c_m \int \varphi_n^* \hat{A} \varphi_m d\tau$$

$$if : \hat{A}\varphi_n = a_n \varphi_n$$

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \sum_{nm} c_n^* c_m a_m \int \varphi_n^* \varphi_m d\tau = \sum_{nm} c_n^* c_m a_m \left\langle \varphi_n \middle| \varphi_m \right\rangle = \sum_{nm} c_n^* c_m a_m \delta_{nm}$$

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \sum_n \left| c_n \right|^2 a_n$$

$$A\left| \varphi_n \right\rangle = a_n \varphi_n \rangle$$

$$\langle \varphi_n \left| A = a_n \langle \varphi_n \right.$$

$$\left\langle \Psi \middle| P^2 \middle| \Psi \right\rangle = \int \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) d\tau = \int \left(-\hbar \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^* \right) \Psi d\tau$$

כלומר ניתן להפעיל את האופרטור על הפונקציה הימנית או להפעיל את צמוד האופרטור על הפונקציה השמאלית.

6. התפתחותן בזמן של מערכות קוונטיות מתוארות ע"י משוואת שרדינגר התלויה בזמן:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$$

עבור חלקיק הקופסא:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$