אבנר סופר

אוניברסיטת תל אביב

מבוא לפיזיקה מודרנית

מבוא לתורת הקוונטים

משוואת שרדינגר

<u>משוואת שרדינגר</u>

כפי שהראינו,רעיון גלי החומר של דה ברוילי הצליח להסביר

- התאבכות של אלקטרונים
- קוונטיזציה של גדלים שונים (כגון תנע זויתי עבור אלקטרון סביב גרעין), באמצעות גלים עומדים (כמו גלים עומדים במיתר או גלים אלקטרומגנטים שמתאפסים על דפנות התא).

הצלחה זו הביאה לחיפוש אחר תורה גלית שתיתן את המכניקה הקלאסית בגבול הקלאסי (גופים גדולים, אנרגיות גבוהות).

היה ידוע כי

- פונקצית גל צריכה לקיים משוואת גלים כלשהי, שיש למצוא אותה
- פתרונות של משוואות דיפרנציאליות בתחום מוגבל מביאות לקוונטיזציה – רק פתרונות מסוימים מותרים, כמו במקרה של גל עומד שצריך להתאפס על קצות המיתר.

ב-1925 פרסם שרדינגר (Erwin Schrödinger) את המשוואה המפורסמת שלו.

באותו זמן בערך פרסם הייזנברג (Werner Heisenberg) תורה קוונטית אחרת, שמבוססת על מטריצות שאבריהן הם הסתברויות לקבל תוצאות של מדידות.

לאחר מכן הראו ששתי התיאוריות שקולות , וניתן לגזור אחת מהשניה.

כיום מלמדים קודם את התורה של שרדינגר, וממנה גוזרים את הרעיון של הייזנברג של "אלמנט מטריצה" כהסתברות למדידה.

באופן עקרוני, אי אפשר לגזור את משוואת שרדינגר מתוך עקרונות בסיסיים, כפי שאי אפשר לגזור את החוק השני של ניוטון או את משוואות מקסוול אלא מתוך השוואה לנסיון.

אך אפשר לתת מוטיבציה לצורה מסוימת של המשוואה, כאשר נתחיל ממשוואת הגלים במימד אחד:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}.$$

כאמור, פתרון חשוב, שממנו אפשר לבנות את כל שאר הפתרונות, הוא הפתרון ההרמוני.

נכתוב כאן 3 צורות של פתרונות הרמונים:

$$\begin{aligned}\psi_c&=\cos(kx-\omega t)\\ \psi_s&=\sin(kx-\omega t)\\ \psi_e&=e^{i(kx-\omega t)}\end{aligned}$$

שימו לב כי כאשר מציבים פתרונות אלה במשוואה, מקבלים בכל המקרים ש-

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}&=-k^2\psi\\ \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}&=-\omega^2\psi\end{aligned}$$

אנו נאמר שהנגזרת $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ "שולפת" מפוקנצית גל כזו את מינוס ריבוע התדירות $-\omega^2$.

ושהנגזרת $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ "שולפת" מפוקנצית גל כזו את מינוס ריבוע מספר הגל $-k^2$.

אז רואים שהמשוואה הדיפרנציאלית הופכת למשוואה האלגברית

$$-k^2=-\frac{\omega^2}{c^2},$$

שממנה מתקבלים יחסי הדיספרציה עבור פוטון בואקום,

$$\omega=ck.$$

כעת נשתמש ביחסי דה ברוילי

$$E = \hbar\omega$$

$$p = \hbar k$$

ונקבל

$$E = cp\,,$$

שהוא הקשר בין אנרגיה לתנע של פוטון.

שימו לב שיכולנו להתחיל מיחס אנרגיה-תנע זה, להוסיף את יחסי דה בוילי, ולטעון שמשוואה שנותנת את הקשר הרצוי בין מספר הגל לתדירות הזויתית היא משוואת הגלים.

נוכל להשתמש באותו הגיון כדי **להציע** את המשוואה שתתאים לחלקיקי חומר, ואז לבדוק אם היא מתאימה לניסוי.

מסתבר, שמשוואת שרדינגר אכן עונה על דרישות אלה ומוכחת ע"י אלפים רבים אם לא מיליונים של מדידות.

נתחיל מהקשר בין תנע לאנרגיה עבור חלקיק בעל מסה m שנמצא בפוטנציאל $V(x)$:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V\,.$$

מיחסי דה ברוילי נקבל

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V\,.$$

שימו לב ש- ω (בצד שמאל של משוואה זו) מתקבל מנגזרת ראשונה לפי t של פונקציה הרמונית,

ו- k^2 (בצד ימין של המשוואה) מתקבל מנגזרת שנייה לפי x.

אז נצפה שהמשוואה תהיה מהצורה

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} \propto \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\,.$$

שימו לב שנגזרת ראשונה של $\sin$ נותנת $\cos$ ולהיפך.

אז אם ניקח את אחת הפונקציות הבאות להיות הפתרון:

$$\psi_c = \cos(kx - \omega t)$$

$$\psi_s = \sin(kx - \omega t)$$

נקבל משהו מהצורה

$$\sin(kx-\omega t) \propto \cos(kx-\omega t),$$

ועבור ערך כללי של הארגומנט $(kx-\omega t)$, שוויון זה אינו נכון.

לכן פונקציות אלה לא תקיימנה את המשוואה הדיפרנציאלית.

לעומת זאת, הפתרון הקומפלקסי

$$\psi = e^{i(kx-\omega t)}$$

מקיים

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2\psi$$

שזה בדיוק מה שאנחנו צריכים.

נותר רק לארגן את המקדמים הקבועים בין האיברים השונים כך שהמשוואה תתקים.

אחרי שעושים זאת, המשוואה המלאה היא

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}.$$

ובשלושה מימדים:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}},$$

כאשר את אופרטור הלפלסיאן $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ כבר ראינו כשהצגנו את משוואת הגלים.

נהוג לכתוב את משוואת שרדינגר גם בצורה

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

שאלת בית: הראו שהצבת פונקצית הגל ההרמונית במשוואת שרדינגר במימד אחד וגם בשלושה מימדים נותנת את היחס הידוע $\frac{p^2}{2m} + V = E$ בין האנרגיה והתנע של חלקיק בעל מסה m.

שימו לב כי יחס התנע-אנרגיה שמתקבל ממשוואת שרדינגר הוא לא-יחסותי.

שרדינגר ניסה לקבל משוואה שפתרונותיה יהיו יחסותיים, אך נתקל בבעיות והיה עליו להסתפק במשוואה הלא יחסותית.

עם זאת, המשוואה שלו היא הצלחה גדולה, רלוונטית בכל המקרים של חלקיקים לא יחסותיים.

(זו דוגמה לכך שאין צורך לפתור את כל הבעיות בבת אחת. אפשר להתחיל ממה שמצליח ולהתקדם אח"כ.)

ב-1928 דיראק (Paul Dirac) ניסח את משוואת דיראק היחסותית.

משוואה זו והפיזיקה שלה מסובכות יותר, והן נלמדות בקורס מתקדם במכניקת הקוונטים.

צפיפות ההסתברות עבור פונקצית גל קומפלקסית

במסגרת הדיון על פוטונים, אמרנו שריבוע פונקצית הגל הוא צפיפות ההסתברות ל"מציאת" הפוטון במקום מסוים (כאשר "מציאה" פירושה שהפוטון יעבור אינטראקציה באותו מקום).

אבל ראינו שפתרונות של משוואת שרדינגר עשויים להיות פונקציות מרוכבות,

וריבוע של מספר מרוכב הוא מספר מרוכב, בשעה שהסתברות צריכה להיות מספר ממשי.

ניתן "לתקן" זאת ע"י זה שנאמר שריבוע הערך המוחלט של פונקצית הגל, $|\psi|^2 = \psi^*\psi$, הוא צפיפות ההסתברות.

אז פונקצית הגל **מנורמלת** כך ש- $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dxdydz = 1$.

מאחר שבמסגרת הלא-יחסותית של משוואת שרדינגר חלקיקים אינם נוצרים ואינם נעלמים,

סך כל ההסתברות "למצוא" את החלקיק היא גודל שנשמר.

כלומר, אם ההסתברות באזור מסוים הולכת וקטנה, אז על ההסתברות באזורים אחרים לגדול באותה מידה.

ניתן להראות (לא נעשה זאת כאן) כי ממשוואת שרדינגר נובע שהגודל $|\psi|^2$ מקיים חוק שימור זה.

הנה תמונה (שהופיעה על השער של Physics Today, נובמבר 1993) שהתקבלה באמצעות מיקרוסקופ אלקטרוני סורק (STM) ממשטח גבישי (סיליקון, כמדומני) שעליו סודרו במעגל אטומים (של ניקל).

ניתן לראות לא רק את האטומים השונים אלא גם את התפלגות האלקטרונים (ריבוע פונקצית הגל שלהם) בתוך "בור הפוטנציאל" שנוצר ע"י מעגל האטומים.

שימו לב לדמיון האיכותי לגלים ההרמונים שמצאנו עבור חלקיק בבור פוטנציאל חד-מימדי. למרות שתמונה זו "צולמה" כאשר היה ברור שהרעיונות והשיטות של מכניקת הקוונטים נכונים, אין כמו לראות את הדברים בפעולה: לפעמים תמונה אחת שווה אלף מלים.