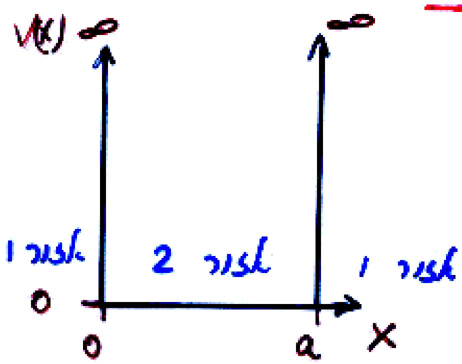
תזכורת - חלקיק בקופסא



חלקיק בעל מסה m הנתון בפוטנציאל:

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x\le 0 \quad x\ge a \\ 0 & 0<x<a\end{cases}$$

אזור 1
אזור 2

$$\hat{H}_1=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)=\infty$$ 1 "

$$\hat{H}_2=\frac{\hat{p}^2}{2m}$$ 2 "

$$\varphi_1=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}=E\cdot\varphi \quad + \quad \varphi(a)=\varphi(0)=0$$

תנאי השפה

ברישום מקוצר:

$$\varphi''+k^2\varphi=0$$

$$k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}$$

הפונקציות העצמיות הן:

$$\varphi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

והערכים העצמיים הם:

$$E_n=n^2\cdot\underbrace{\frac{\hbar^2}{2ma^2}}_{E_1}$$

האם φ_n הם הפתרונות היחידים?

לא!

נכפל במקדם:

$$\varphi_n\to \overset{\text{קבוע}}{e^{i\alpha}}\varphi_n$$

"גורם פאזה"

התוצאה:

הנרמול לא ישתנה:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha}\varphi^* e^{i\alpha}\varphi\, dx=1$$

הערכים העצמיים של כל גודל מדיד לא ישתנו.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha}\varphi^*\hat{A}e^{i\alpha}\varphi\, dx=\langle A\rangle$$

← הפתרון נקבע עד כדי גורם פאזה שרירותי.

(הפאזה היחסית כן חשובה בפתרון שהוא סכום פונ' גל)

הכתיב של דיראק (Dirac Notation) (11)

סימון מקוצר לאינטגרל של מכפלת פונקציות

$$\text{braket} - \langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\varphi(x)\,dx$$

bra וקטור

ket וקטור

$$|\varphi\rangle = \varphi \quad , \quad \langle\psi| = \psi^*$$

רק הצירוף של ה bra וה ket מסמן אינטגרציה.

מהגדרה למשל נובע:

$$\langle\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\psi\rangle$$

אם a קבוע

$$\langle a\psi|\varphi\rangle = a^*\langle\psi|\varphi\rangle$$

$$\langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle$$

נסמן ונקבל:

$$\langle\varphi+\psi| = \langle\varphi| + \langle\psi|$$

$$\langle\psi_1+\psi_2|\varphi_1+\varphi_2\rangle = \langle\psi_1|\varphi_1\rangle + \langle\psi_1|\varphi_2\rangle + \langle\psi_2|\varphi_1\rangle + \langle\psi_2|\varphi_2\rangle$$

תוחלת $\langle A\rangle$ מסומן ע"י:

$$\langle A\rangle = \int \psi^* A\psi\,dr \equiv \langle\psi|A\psi\rangle \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$$

משוואת ערכים עצמיים:

$$\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle$$

פונקציות אורתונורמליות:

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{n,m}$$

מרחב פונקציות (מרחב הילברט)

* מרחב רגיל "נפרש" ע"י וקטורי בסיס
  מרחב פונקציות " " פונקציות "

* כל וקטור במרחב ניתן לפיתוח כסכום של וקטורי בסיס
  כל פונקציה " " " " " פונקציות "

* מכפלה סקלרית $\vec{V}\cdot\vec{U} = V_xU_x+V_yU_y+V_zU_z$
  מכפלה סקלרית $\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*\psi\,dr$

* גודל וקטור $|\vec{V}|^2 = V_x^2+V_y^2+V_z^2$
  גודל וקטור - $\|\varphi\|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle$

* וקטורים מאונכים - $\vec{V}\cdot\vec{U}=0$
  פונקציות מאונכות - $\langle\psi|\varphi\rangle=0$

דוגמא 1

מרחב כל הפונקציות בעלות גודל סופי בתחום $[0,a]$

+ תנאי שפה: $\psi(a)=\psi(0)=0$ + $\|\psi\|^2=\int_0^a\psi^*\psi\,dx<\infty$

נפרש ע"י הפונקציות העצמיות של בור חד מימדי אינסופי

$$\varphi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

כלומר: $\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n\varphi_n(x)$ (טור פוריה)

או $\psi=\sum_n|a_n\varphi_n\rangle$

כיצד נמצא את a_n?

ההטל של ψ על φ_n - $\langle\varphi_n|\psi\rangle=\sum_m\langle\varphi_n|a_m\varphi_m\rangle=\sum_m a_m\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle}_{\delta_{n,m}}=a_n$

$\delta_{n,m}$ - פונקציות הבסיס הן אורתונורמליות

$$a_n=\langle\varphi_n|\psi\rangle$$

דוגמא 2

מרחב כל הפונקציות עם אלל סופי בתחום $-\infty<x<\infty$

$$\|\psi\|^2=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,dx<\infty \;\rightarrow\; \psi(x\to\pm\infty)\to 0$$

נפרש ע"י הפונקציות העצמיות של $\hat{p}$ עבור חלקיק חופשי

$$\varphi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}b(k)\varphi_k(x)\,dk \qquad \text{(התמרת פוריה)}$$

אינטגרל על x

$$b(k)=\langle\varphi_k|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\langle\varphi_k|b(k')\varphi_{k'}\rangle\,dk'$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{\langle\varphi_k|\varphi_{k'}\rangle}\,b(k')\,dk'=b(k)$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ix(k-k')}\,dx=\delta(k-k')$$

אופרטורים הרמיטיים

אם $\hat{A}$ הוא אופרטור המייצג גודל מדיד (מיקום, תנע, אנרגיה)

← ל $\hat{A}$ ערכים עצמיים <u>ממשיים</u>

תכונה זו מתקיימת תמיד באופרטורים הרמיטיים

מה זה אופרטור הרמיטי?

לכל אופרטור $\hat{A}$ קיים אופרטור צמוד הרמיטי $\hat{A}^+$

המוגדר כך שהוא מקיים:

לכל ψ ו φ $\quad \langle \hat{A}^+\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A\varphi\rangle$

<u>דוגמא 1</u>

אם $\hat{A}=a$ מספר מרוכב, מהו $\hat{A}^+$?

עפ"י הגדרת האופרטור: $\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle = \langle\psi|a\varphi\rangle$

מכיון ש a הוא קבוע: $\langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle$

מהגדרת ה bra-ket: $a\langle\psi|\varphi\rangle = \langle a^*\psi|\varphi\rangle$

מהגדרת $\hat{A}^+$: $\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle = \langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$

ולכן: $\rightarrow \langle a^*\psi|\varphi\rangle = \langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$

כלומר $\underline{\hat{A}^+ \equiv a^+ = a^*}$

אם a הוא מספר ממשי מהו a^+ ?

דוגמא 2

אם $\hat{A}=\frac{d}{dx}$ מהו $\hat{A}^+$?

נתחיל עפ"י ההגדרה של $\hat{A}^+$, כלומר מהשוויון

$$\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle=\langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$$

נרשום את הביטויים במפורש:

$$\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{d\varphi}{dx}dx$$

נשתמש ב? $\int u\,dv=u\cdot v-\int v\,du$ ובעובדה ש $d(\varphi)=\frac{d\varphi}{dx}dx$

ולכן

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi\,d\varphi=\psi^*\cdot\varphi\Big]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\,d\psi^*$$

מכיוון ש φ ו- ψ הן פונקציות הניתנות לנירמול $\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,dx<\infty\right]$

אזי בהכרח $\varphi,\psi\xrightarrow[x\to\pm\infty]{}0$

$$\to\quad\psi\cdot\varphi\Big]_{-\infty}^{\infty}=0$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\,d\psi^*=-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\frac{d\psi^*}{dx}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\left(-\frac{d}{dx}\psi^*\right)\cdot\varphi\,dx=\langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$$

מההגדרה של $\hat{A}^+$

$$\to\quad\underline{\hat{A}^+=-\frac{d}{dx}=-\hat{A}}$$

תזכורת: $\hat{A}^{+}=\hat{A}$ אז $\hat{A}$ הוא אופרטור הרמיטי.

כלומר מתקיים: $\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle=\langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle$

אם $\hat{A}$ ו $\hat{B}$ הם אופרטורים הרמיטיים,
האם גם $\hat{A}\hat{B}$ הוא אופרטור הרמיטי?

נבדוק,

$$\langle\psi|\hat{A}(\hat{B}\varphi)\rangle=\langle\hat{A}^{+}\psi|\hat{B}\varphi\rangle=\langle\hat{B}^{+}(\hat{A}^{+}\psi)|\varphi\rangle$$

עבור כל שני אופרטורים $\hat{A},\hat{B}$ כששהם

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}\varphi\rangle=\langle(\hat{A}\hat{B})^{+}\psi|\varphi\rangle$$

בד"כ

$$\longrightarrow\ (\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}=\hat{B}\hat{A}\neq\hat{A}\hat{B}$$

מכיון שהאופרטורים הרמיטיים

תשובה: $(\hat{A}\hat{B})^{+}\neq\hat{A}\hat{B}$, $\hat{A}\hat{B}$ אינו אופרטור הרמיטי.

איזה צירוף לינארי של אופרטורים הרמיטיים יתן
אופרטור הרמיטי?

תשובה: $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ - אופרטור הרמיטי

הוכחה:

$$(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}+\hat{A}^{+}\hat{B}^{+}=\hat{B}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$$

האם $\hat{A}^{2}$ אופרטור הרמיטי?

האם $\hat{P}$ הרמיטי? $\hat{X}$ הרמיטי?

תכונות אופרטורים הרמיטיים

1. הערכים העצמיים ממשיים.

הוכחה

נתון: $|\hat{A}\varphi_n\rangle = |a_n\varphi_n\rangle$

$$\langle\varphi_n|\hat{A}\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|a_n\varphi_n\rangle = a_n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle$$

מכיוון ש $\hat{A}$ הרמיטי -

$$= \langle\hat{A}\varphi_n|\varphi_n\rangle = \langle a_n\varphi_n|\varphi_n\rangle = a_n^*\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle$$

$$\rightarrow \quad a_n^* = a_n$$

ולכן a_n הנו ממשי.

2. הפונקציות העצמיות הן אורתוגונליות.

$$\langle\varphi_l|\hat{A}\varphi_n\rangle = a_n\langle\varphi_l|\varphi_n\rangle$$

מכיוון ש $\hat{A}$ הרמיטי -

$$= \langle\hat{A}\varphi_l|\varphi_n\rangle = a_l\langle\varphi_l|\varphi_n\rangle \qquad (a_l^* = a_l)$$

$$\rightarrow (a_l - a_n)\langle\varphi_l|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\rightarrow \langle\varphi_l|\varphi_n\rangle = 0$$

בתנאי ש $a_l \neq a_n$, כלומר הפונקציות העצמיות לא מנוונות