אטום המימן

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\varphi = E\cdot\varphi$$ ← פונקצית הגל של אלקטרון באטום המימן נתונה ע"י

נציב $\varphi = R(r)Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ - הפרדת משתנים

ונקבל

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} - E\right)R = 0$$

מטען הגרעין

מסה מצומצמת $\rightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{M} \leftarrow$ מסת הגרעין

מסת האלקטרון

נציב $U = r\cdot R$ ונקבל

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{2\mu}{\hbar^2}E\right)U = 0$$

נסמן $k^2 \equiv -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ ונעבור למשתנה חסר מימד $\rho \equiv 2kr$

$$\left(-4k^2\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{4k^2}{\rho^2}\ell(\ell+1) - \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{\rho}2k + k^2\right)U = 0$$

נסמן $\lambda \equiv \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 k}$ ונקבל:

$$U'' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}U + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)U = 0$$

התנהגות אסימפטוטית

$\rho \to \infty$ אז $\rho^2 \gg \ell(\ell+1)$! $\rho \gg \lambda$

$$\rightarrow U'' - \frac{U}{4} = 0 \rightarrow \underline{U = Ae^{-\rho/2}}$$

$\rho \to 0$

$$\rightarrow U'' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}U = 0$$

ננסה פתרון מהצורה $U = \rho^q$ ונקבל ←

$$U = A\rho^{-\ell} + B\rho^{\ell+1}$$

ומהתנאי $U \xrightarrow[\rho\to0]{} 0$ נקבל

$$\underline{U = B\rho^{\ell+1}}$$

ננסה פתרון כללי מהצורה

$$U = e^{-\rho/2}\rho^{\ell+1}F(\rho)$$

כאשר $F(\rho)$ אינה מתבדרת

תנאי מק' עבור $\rho\to 0$; $\rho\to\infty$.

נניח צורה פולינומית ל F :

$$F(\rho)=\sum_{i=0}^{\infty} c_i\rho^i$$

ומהצבה במשוואת שרדינגר נקבל :

$$U' = -\frac{1}{2}U + (\ell+1)\frac{U}{\rho} + e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{\ell+1}F'$$

$$U'' = -\frac{U'}{2} - \frac{1}{2}U' + \frac{(\ell+1)}{\rho}U' - (\ell+1)\frac{U}{\rho^2} - \frac{1}{2}e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{\ell+1}F' + (\ell+1)e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{\ell}F' + e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{\ell+1}F''$$

$$\longrightarrow\ \rho F'' + (2\ell+2-\rho)F' - (\ell+1-\lambda)F = 0$$

המשוואה ל F

ומהדרישה שהצורה פולינומית נקבל קשר בין ה c_i השונים:
(השוואת מקדמים של ρ^i)

$$c_{i+1} = \frac{i+\ell+1-\lambda}{(i+1)(i+2\ell+2)}\,c_i$$

למה שווה האיבר הראשון בסכום c_0 ?

מהם הערכים האפשריים ל λ ?

בגבול $i\to\infty$ נקבל

$$\frac{c_{i+1}}{c_i}\approx\frac{1}{i}$$

והסדרה מתבדרת כמו e^{ρ}

$$\left(e^{\rho}=\sum\frac{\rho^i}{i!}\ ,\quad \frac{c_{i+1}}{c_i}=\frac{1}{(i+1)!}\cdot i!\ \xrightarrow[i\to\infty]{}\ \frac{1}{i}\right)$$

כלומר U יתבדר.

על מנת שהסדרה תהיה סופית, צריך להתקיים

מספר שלם

$$\lambda = n \equiv i_{max}+\ell+1$$

אזי $c_i=0$ עבור $i>i_{max}$ ← פולינום סופי

מכיוון ש $k^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$, $\lambda^2 = \frac{z^2 e^4 \mu^2}{\hbar^4 k^2}$

נקבל

$$E = -\frac{z^2}{\lambda^2}\cdot\underbrace{\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}}$$

אז

$$\underline{E_n = -\frac{z^2}{n^2}\cdot R_{yd}}$$

קבוע רידברג

קוונטיזציה של λ ← קוונטיזציה של אנרגיית האלקטרון באטום המימן.

הפתרון הרדיאלי

$$U_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2}\rho^{l+1} A_{nl}\underbrace{\sum_{i=0}^{n-l-1} c_i\rho^i}$$

מקדם נירמול

$F_{nl}(\rho)$ - Associated Laguerre polynomials
(L^{2l+1}_{n-l-1})

$$F_{nl}(\rho) = \sum_{i=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^i[(n+l)!]^2\rho^i}{i!\,(n-l-1-i)!\,(2l+1+i)!} = L^{2l+1}_{n-l-1}$$

הפתרונות הרדיאליים אורתוגונליים

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{q+1} L_{p'}^{q} L_p^q\, d\rho = \frac{[(p+q)!]^3}{p!}\delta_{pp'}$$

ניוון

אינדקס הסכום המקסימלי בפולינום Laguerre – $i_{max} = n-l-1 \geq 0$

$\rightarrow \underline{l \leq n-1}$ $\quad$ $\underline{l_{max} = n-1}$

עבור n נתון יש n פתרונות: $U_{nl} = U_{n0}, U_{n1}, \dots U_{n,n-1}$

ועבור כולם $E = E_n$.

עבור כל U_{nl} יש $2l+1$ פתרונות: $Y_l^m = Y_l^{-l} \dots Y_l^0 \dots Y_l^l$

עם אותו $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$

הניוון של E_n $= \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = \underline{n^2}$

פונקצית הגל המלאה לאטום המימן

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)=R_{n\ell}(r)\,Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$E_n=-\frac{Z^2}{n^2}\cdot Ryd$$

הפתרונות מבוים C_0 מתוך דרישת נורמול

$$\langle\psi_{n\ell m}|\psi_{n\ell m}\rangle=1 \qquad \langle\psi_{n\ell m}|\psi_{n'\ell'm'}\rangle=\delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

דוגמא: רמת היסוד

$n=1,\ \ell=0,\ m=0$

$$F_{1,0}(\rho)=\sum_{i=0}^{n-\ell-1}C_i\rho^i=1$$

$$U_{1,0}=A_{1,0}\,e^{-\rho/2}\cdot\rho^{0+1}\cdot 1$$

נקבע $A_{1,0}$ מתנאי הנירמול

$$A_{1,0}^2\frac{1}{2k_1}\int_0^\infty\rho^2e^{-\rho}d\rho=1$$

עבור $Z=1$

$$\rightarrow A_{1,0}^2=k_1 \qquad k_1^2=\frac{-2\mu E_1}{\hbar^2}=\frac{2\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{1}\cdot\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}=\left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^2=\left(\frac{1}{a_0}\right)^2$$

מקדם הנירמול $\rightarrow A_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{a_0}}$ $\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ – רדיוס בוהר

$$\rho\equiv 2k_1r=2r/a_0 \longrightarrow U_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{a_0}}\rho e^{-\rho/2}=\frac{2r}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$$

$$R_{1,0}=\frac{U_{1,0}}{r}=\frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}}, \qquad Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_{100}=\frac{2}{\sqrt{4\pi}\,a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}}$$

פונקצית הגל המלאה ברמת היסוד:

ובאופן דומה

$$\psi_{2,0,0}=\frac{2}{(2a_0)^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}\,Y_0^0(\theta,\varphi)$$

$$\psi_{2,1,m}=\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\,Y_1^m(\theta,\varphi)$$

וכו'

תכונות כלליות של $R(r)$

.1 $R_{nl}(r) \propto r^{l}$ for $r \ll K^{-1}$

ככל ש l גדל הסיכוי להמצא ב r קטן יורד.

התרומה של התנע הזויתי ל V_{eff} מלאה "ומונעת" מהחלקיק לחדור ל r קטן.

$$V_{eff} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

.2 $F_{nl}(r)$ – פולינום מסדר $N = n-l-1$

← ל $|R_{nl}|^2$ יש N אפסים ! $N-1$ מקסימה

עבור $l_{max} = n-1$, $F_{n,n-1} \to const$

לכן $R_{n,n-1} \propto r^{n-1} e^{-\frac{r}{a_0 n}}$

$$K_n = \frac{K_1}{n} = \frac{1}{n a_0}$$

← ל $R(r)$ יהיה רק מקסימום אחד

$P(r) = r^2 |R_{nl}|^2$ הרדיוס בו צפיפות ההסתברות מקסימלית - מתקבל ב?

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \cdot r^{2(n-1)} e^{-\frac{2r}{a_0 n}}\right) = 0$$

$$\to \left(2n r^{2n-1} - \frac{2}{a_0 n} r^{2n}\right) e^{-\frac{2r}{a_0 n}} = 0 \to \underline{r = n^2 a_0}$$

זהה לרדיוסים המתקבלים מהמודל הסמי-קלאסי של בוהר.

.3 המומנטים השונים של r נתונים ע"י

$$\langle r_{nl}^{k} \rangle = \int_0^\infty r^{2+k} |R_{nl}|^2 dr$$

שימושי לחישוב ערכי תצפית שונים.

$$\langle r_{nl} \rangle = \frac{a_0}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$$

$$\langle r_{nl}^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right]$$

$$\left\langle \frac{1}{r_{nl}} \right\rangle = \frac{1}{a_0 n^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r_{nl}^2} \right\rangle = \frac{1}{a_0^2 n^3 (l+\frac{1}{2})}$$

סיכום גרפי

תלות רדיאלית

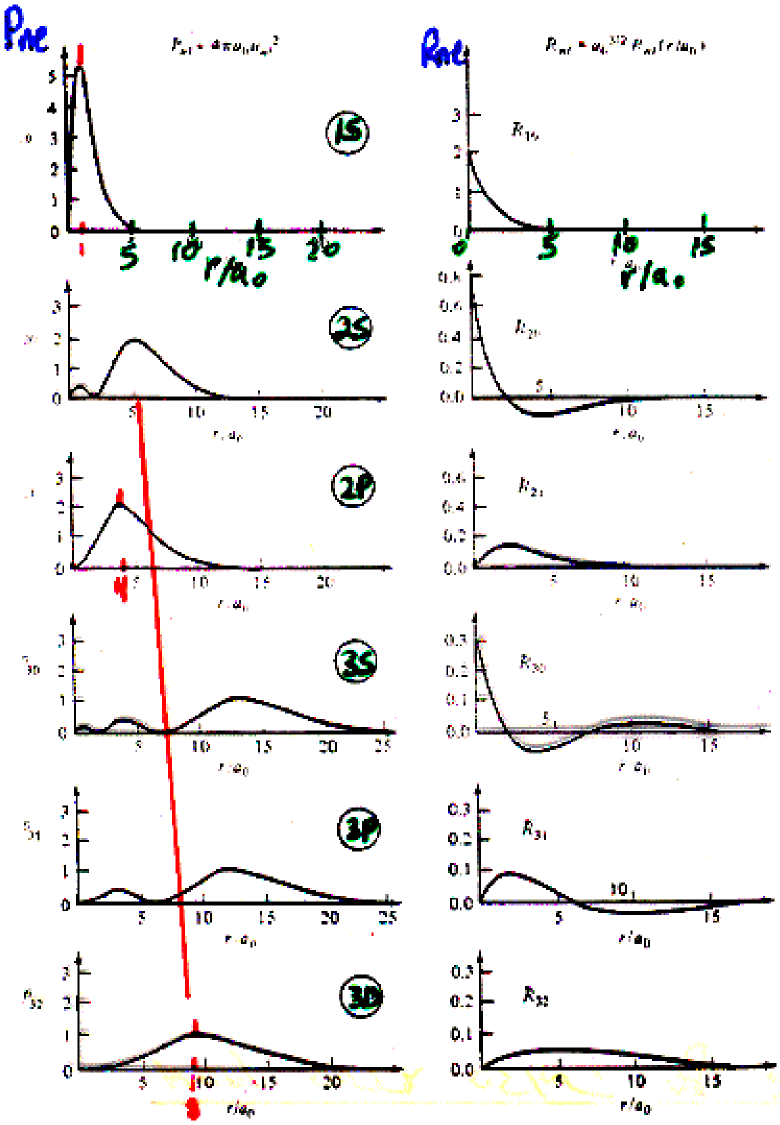


FIGURE 10.16 Nondimensional radial probability density $\bar{P}$ and nondimensional radial wavefunction $\bar{R}$, versus nondimensional radius r/a_0 for hydrogen. Note that the probability density $\bar{P}$ exhibits the shell structure of the atom.

168

תלות זוויתית

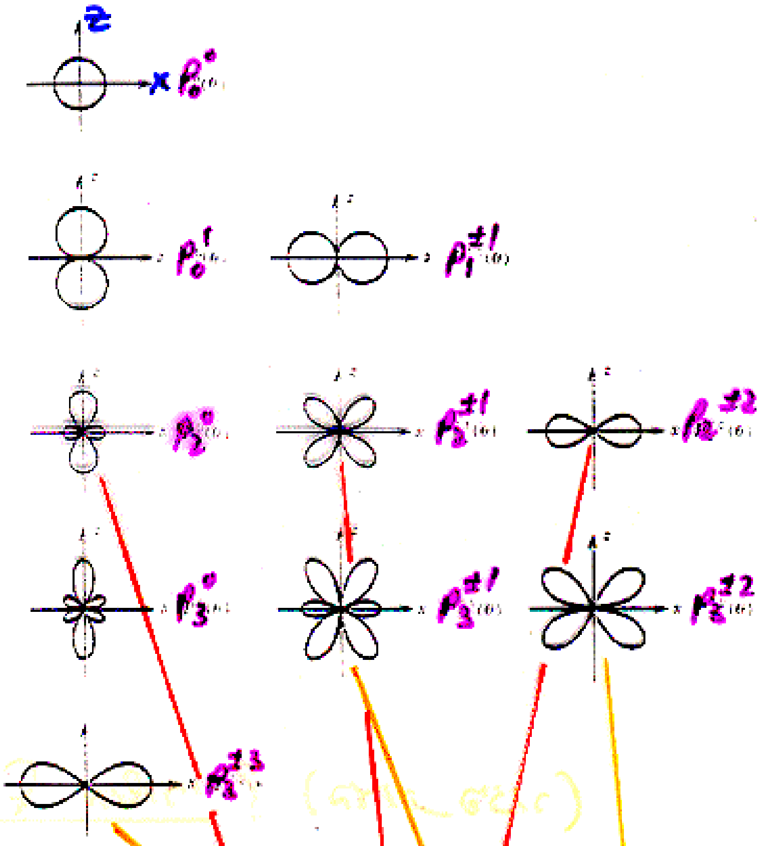
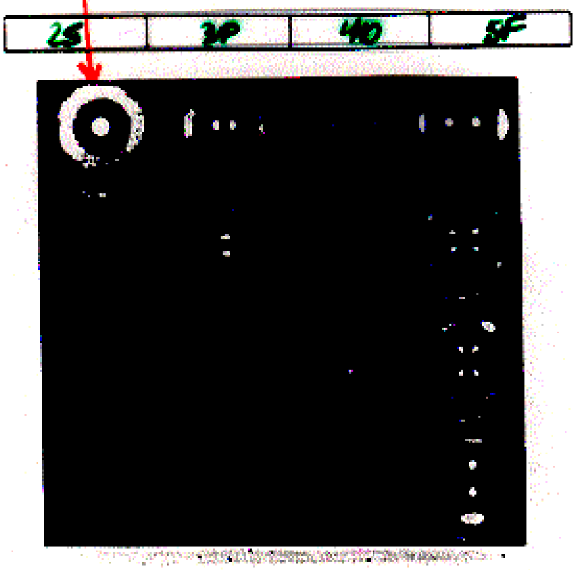
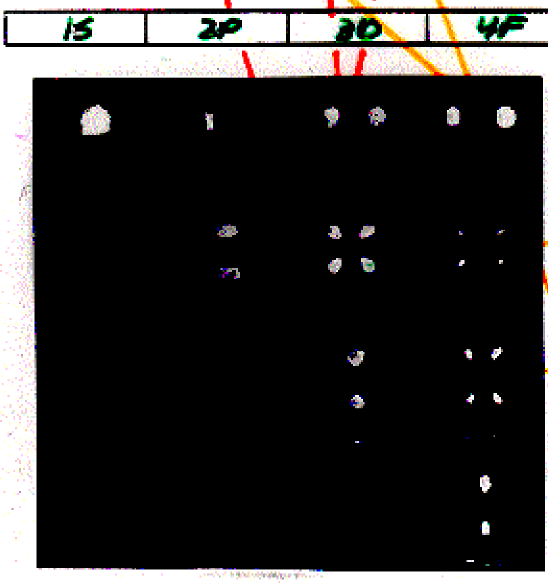


Figure 12-3. Shapes of the associated Legendre polynomials as a function of θ, the angle between the z-axis and the equatorial plane, denoted by the x-axis.

צפיפות ההסתברות המרחבית





הצגה באמצעות מטריצות

פונקציה כלשהי - $\psi = \sum_n \varphi_n a_n$

פונקציות הבסיס , מקדמים

הסט $\{a_n\}$ מגדיר חד ערכית את ψ בבסיס φ_n

← ניתן לייצג את ψ כוקטור:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

באופן דומה ניתן לייצג אופרטור כמטריצה

$$|\psi\rangle = \hat F|\psi'\rangle$$

$$|\psi\rangle = \hat F \sum_n |\varphi_n\rangle \underbrace{\langle\varphi_n|\psi'\rangle}_{a'_n}$$

$$\langle\varphi_q|\psi\rangle = \sum_n \langle\varphi_q|\hat F\varphi_n\rangle a'_n$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \underset{\text{וקטור}}{a_q} = \sum_n \underset{\text{מטריצה}}{F_{qn}} \underset{\text{וקטור}}{a'_n}$$

$F_{qn} \equiv \langle\varphi_q|\hat F|\varphi_n\rangle = \int \varphi_q^* \hat F \varphi_n \, dr$ – איברי המטריצה המייצגים את $\hat F$.

במרחב הפונקציות העצמיות

$$\hat G|\varphi_n\rangle = g_n|\varphi_n\rangle$$

$$\to \quad G_{qn} = \langle\varphi_q|\hat G|\varphi_n\rangle = g_n\langle\varphi_q|\varphi_n\rangle = g_n\delta_{qn}$$

G_{qn} היא מטריצה אלכסונית, ואיברי המטריצה הם הערכים העצמיים.

$$\hat G = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & g_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & g_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

כיצד נראים הוקטורים העצמיים?

$$|\varphi_n\rangle = \sum_q a_q^n |\varphi_q\rangle$$

$$\to \overbrace{\langle\varphi_p|\varphi_n\rangle}^{\delta_{pn}} = \sum_q a_q^n \delta_{pq} = a_p^{(n)} \quad \to \quad a_p^{(n)} = \delta_{pn} \qquad |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

האיבר ה-p של φ_n

Closure Relation

$$\sum_n |\varphi_n(r)\rangle\langle\varphi_n(r')| = \int \delta(r-r')[\ \ ]dr$$

אופרטור ; פונקציה כלשהי

- מתקיים עבור בסיס שלם

הוכחה

$$\psi(r) = \sum_n a_n|\varphi_n(r)\rangle = \sum |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle$$

$$\psi(r) = \sum \varphi_n(r)\cdot\int \varphi_n^*(r')\,\psi(r')\,dr'$$

$\int\Sigma = \Sigma\int$ (בגבולות שלמים)

$$\psi(r) = \int\left\{\sum \varphi_n^*(r')\,\varphi_n(r)\right\}\psi(r')\,dr'$$

עפ"י הגדרת $\delta(r-r')$

$$\psi(r) = \int \delta(r-r')\,\psi(r')\,dr'$$

בניסוח מטריצי

$$\hat{I} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \quad - \quad \text{אופרטור יחידה}$$

$$\hat{I}_{pq} = \langle\varphi_p|\hat{I}|\varphi_q\rangle = \sum_n \langle\varphi_p|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\varphi_q\rangle$$

$$= \sum_n \delta_{pn}\,\delta_{nq} = \delta_{pq}$$

כלומר:

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \ddots \end{pmatrix}$$

ניתן לכן תמיד לרשום:

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\psi'\rangle$$

$$= \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi'\rangle = \sum_n a_n^* a_n'$$

ברישום מפורש

באופן כללי:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \langle\psi| = (a_1^*\ a_2^* \ldots)$$

לכן:

$$\langle\psi|\psi\rangle = (\quad)(\ ) = \sum_i a_i^* a_i \quad - \quad \text{אורך הוקטור (מספר)}$$

לעומת זאת:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}(a_1^*\ a_2^* \ldots) = \begin{pmatrix} a_1a_1^* & a_1a_2^* & \cdots \\ a_2a_1^* & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

כלומר הפעולה $|\psi\rangle\langle\psi|$ נותנת מטריצה = אופרטור

$$|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots \\ & & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ 0 & 1 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

האיבר a_{nn}

תזכורת: תכונות מטריצות

מטריצה סימטרית

$$\hat{A} = \tilde{\hat{A}}$$

מטריצה מוחלפת (transpose) $\tilde{A}_{nq} \equiv A_{qn}$

כלומר $A_{nq} = A_{qn}$

מטריצה הרמיטית

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$$

כאשר $\hat{A}^{\dagger} \equiv \tilde{\hat{A}}^{*}$ כלומר $A^{\dagger}_{nq} = A^{*}_{qn}$ (← איברי האלכסון ממשיים)

ולכן $\langle \varphi_n | \hat{A}^{\dagger} \varphi_q \rangle = \langle \varphi_q | \hat{A}^{\dagger} \varphi_n \rangle^{*} = \langle \hat{A} \varphi_n | \varphi_q \rangle$

← אופרטור הרמיטי מיוצג ע"י מטריצה הרמיטית.

מטריצה אוניטרית

$$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{-1}$$ ← מטריצה הפוכה

הגדרת מטריצה הפוכה ← $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$

כאשר: $\hat{A}^{-1} = \frac{1}{D(A)} \tilde{\hat{A}}_c$ ← מטריצת הקו-פקטורים

$D(A)$ ← דטרמיננטה של A

כלומר $A^{*}_{nq} = A^{-1}_{qn}$

בד"כ מסמנים מטריצה אוניטרית באות U, ומתקיים

$$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{I} \longrightarrow \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = I$$

$$(\hat{U}\hat{U}^{\dagger})_{nq} = \delta_{nq}$$

או, אם נרשום את המכפלה בצורה מפורשת $\sum_p U_{np} U^{*}_{qp} = \delta_{nq}$

הערכים העצמיים של אופרטור אוניטרי הם בגודל יחידה.

הוכחה:

$$\hat{U}\varphi_n = a_n \varphi_n$$

$$\langle \hat{U}\varphi_n | \hat{U}\varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \hat{U}^{\dagger}\hat{U}\varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \hat{I} \varphi_n \rangle = 1$$

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

$$\longrightarrow \underline{|a_n|^2 = 1}$$

מעבר בסיס

נתון בסיס אורתונורמלי שלם $\{\varphi_n\}$, ובסיס נוסף כנ"ל $\{f_n\}$
המעבר מבסיס אחד לשני נתון ע"י

$$|f_n\rangle = \sum_p \langle\varphi_p|f_n\rangle|\varphi_p\rangle$$

$$= \sum_p U^*_{np}|\varphi_p\rangle \qquad U_{np} \equiv \langle f_n|\varphi_p\rangle$$

$$U^*_{np} = \langle\varphi_p|f_n\rangle$$

המטריצה $\hat{U}$ המקשרת באמצעות שני הבסיסים $\{f_n\}, \{\varphi_n\}$
היא אוניטרית.

הוכחה

נראה ש $\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I}$, כלומר ש $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$.

האבר qp נתון ע"י: $(\hat{U}\hat{U}^+)_{qp} = (\hat{U}\hat{U}^+)_{qp} = \sum_n U_{qn}U^*_{pn}$

$$= \sum_n \langle f_q|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|f_p\rangle$$

החלפת סדר ה $\int$ וה Σ. $\rightarrow$ $= \langle f_q|\sum_n|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\,|f_p\rangle$

$$= \langle f_q|f_p\rangle = \delta_{qp} \rightarrow \underline{\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I}}$$

טרנספורמציה של וקטור מבסיס לבסיס

נתון וקטור (פונקציית מצב) כלשהו $|\psi\rangle$ המתואר
בבסיס $\{f_n\}$ ע"י הרכיבים

$$a'_n = \langle f_n|\psi\rangle$$

כיצד קשורים הרכיבים a'_n לרכיבים a_n בבסיס $\{\varphi_n\}$?

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

נשתמש בקשר בין $\{f_n\}$ ל $\{\varphi_n\}$

$$\langle f_n| = \sum_p U_{np}\langle\varphi_p|$$

$$\rightarrow \quad a'_n = \sum_p U_{np}\langle\varphi_p|\psi\rangle = \sum_p U_{np}\,a_p$$

כלומר

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$$

הצגה של $|\psi\rangle$ בבסיס $\{\psi_n\}$ הצגה של $|\psi\rangle$ בבסיס $\{\varphi_n\}$

המכפלה הסקלרית נשמרת

הוכחה: נסמן,

$$|\psi_1'\rangle \equiv \hat{U}|\psi_1\rangle$$
$$|\psi_2'\rangle \equiv \hat{U}|\psi_2\rangle$$

$$\langle\psi_1'|\psi_2'\rangle = \langle\hat{U}\psi_1|\hat{U}\psi_2\rangle$$
$$= \langle\psi_1|\hat{U}^{+}\hat{U}\psi_2\rangle$$
$$= \langle\psi_1|\hat{U}^{-1}\hat{U}\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

← טרנספורמציה יוניטרית משמרת את אורך הוקטורים $(\langle\psi_1|\psi_2\rangle)$ ואת הזווית ביניהם.

טרנספורמציה של אופרטור מבסיס לבסיס

נתון אופרטור כלשהו המקיים $\hat{F}|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ בבסיס הראשון.

בבסיס השני $|\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle$, $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$,

והמשוואה האופרטורית תהי"ה $F'|\varphi'\rangle = |\psi'\rangle$

מהו $\hat{F}'$?

נרשום את המשוואה האופרטורית באמצעות $|\varphi'\rangle$! $|\psi'\rangle$

$$|\varphi\rangle = \hat{U}^{-1}|\varphi'\rangle \quad , \quad |\psi\rangle = \hat{U}^{-1}|\psi'\rangle$$

$$\hat{F}|\varphi\rangle = |\psi\rangle \rightarrow \hat{F}\hat{U}^{-1}|\varphi'\rangle = \hat{U}^{-1}|\psi'\rangle$$
$$\hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1}|\varphi'\rangle = |\psi'\rangle$$
$$\rightarrow \underline{\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1}}$$

$\hat{A}' = \vec{S}\hat{A}\vec{S}^{-1}$ – טרנספורמציית דמיון, $\vec{\text{ט}}$רנספורמציית דמיון יוניטרית

טרנספורמציה של ערכים עצמיים מבסיס לבסיס

נניח ש $|\varphi\rangle$ הן הפונקציות העצמיות של $\hat F$

$$\hat F|\varphi_n\rangle = b_n|\varphi_n\rangle$$

מהן הפונקציות העצמיות והערכים העצמיים לאחר הטרנספורמציה?

$$\hat F = \hat U^{-1}\hat F'\hat U\,,\quad |\varphi_n\rangle = \hat U^{-1}|\varphi_n'\rangle$$

נכפול משמאל ב $\hat U$ $\rightarrow$ $\hat U^{-1}\hat F'\hat U\cdot\hat U^{-1}|\varphi_n'\rangle = b_n\,\hat U^{-1}|\varphi_n'\rangle$

ונקבל $F'|\varphi_n'\rangle = b_n|\varphi_n'\rangle$

הפונקציות העצמיות הן $\hat U|\varphi_n\rangle$ והערכים העצמיים ללא שינוי.

טרנספורמציות הזזה במרחב, הזזה בזמן וסיבוב

אם $\hat F$ הוא אופרטור הרמיטי ← $e^{i\hat F}$ - אופרטור יוניטרי

[הוכחה: $(e^{i\hat F})^\dagger = \sum_n\left[\frac{(i\hat F)^n}{n!}\right]^\dagger = \sum\frac{1}{n!}(-i)^n(\hat F^\dagger)^n = e^{-i\hat F^\dagger} = e^{-i\hat F}$]

מסקנה:

אופרטור הזזה במרחב - $\hat D(\vec a)\psi(\vec r) = \psi(\vec r+\vec a)$

$\hat D(\vec a) = e^{i\vec a\cdot\frac{\hat{\vec p}}{\hbar}}$ - אופרטור יוניטרי

אופרטור סיבוב $\hat R(\Delta\vec\varphi)\psi(\vec\varphi) = \psi(\vec\varphi+\Delta\vec\varphi)$

$\vec R(\Delta\vec\varphi) = e^{i\Delta\vec\varphi\cdot\frac{\hat{\vec L}}{\hbar}}$ - אופרטור יוניטרי

אופרטור הזזה בזמן $\hat T(\Delta t)\psi(t) = \psi(t+\Delta t)$

$\hat T = e^{-i\frac{\hat H\Delta t}{\hbar}}$ - אופרטור יוניטרי

הצגה מטריצית במרחב הפונקציות העצמיות של $\hat H$

$$\hat H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

$$\to \quad \hat H_{n,m} = E_n\,\delta_{n,m}$$

דוגמאות: עבור בור חד מימדי אינסופי

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

$$E_n=E_1\cdot n^2 \quad \to \quad \hat H = E_1\begin{pmatrix}1&&&0\\&4&&\\&&9&\\0&&&\ddots\end{pmatrix}$$

מהי המטריצה של $\hat x$ ושל $\hat p$?

מתנד הרמוני חד מימדי

$$|\varphi_n\rangle = A_n e^{-\xi^2/2}\underline{H_n(\xi)} \leftarrow \text{פולינום הרמיט מסדר } n$$

$$\xi\equiv\beta x \qquad \beta\equiv\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

$$E_n=\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \quad \to \quad \hat H=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1/2&&&0\\&3/2&&\\&&5/2&\\0&&&\ddots\end{pmatrix}$$

מהי המטריצה של $\hat x$?

נשתמש בקשר

$$\hat x=\frac{1}{\sqrt2\,\beta}\left(\hat a+\hat a^+\right)$$

$$\to \quad \hat x_{nk}=\frac{1}{\sqrt2\,\beta}\langle n|\hat a+\hat a^+|k\rangle$$

$n,k=0,1,2,\dots$

$|k\rangle\equiv|\varphi_k\rangle$

$|n\rangle\equiv|\varphi_n\rangle$

$$\hat x_{nk}=\frac{1}{\sqrt2\,\beta}\left(\sqrt{k}\,\delta_{n,k-1}+\sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}\right)$$

$$\to \quad \hat x=\frac{1}{\sqrt2\,\beta}\begin{array}{c} k\to\;0\quad 1\quad 2\quad 3\quad 4\;\cdots \\ \begin{pmatrix}0&\sqrt1&0&0&0&\cdots\\ \sqrt1&0&\sqrt2&0&0&\cdots\\ 0&\sqrt2&0&\sqrt3&0&\cdots\\ 0&0&\sqrt3&0&\sqrt4&\cdots\\ 0&0&0&\sqrt4&0&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\end{pmatrix}\end{array}\begin{array}{c} n\downarrow\\0\\1\\2\\3\\4\\\vdots\end{array}$$

ועבור $\hat p$

$$\hat p_{nk}=\frac{m\omega_0}{\sqrt2\,i\beta}\left(\sqrt{k}\,\delta_{n,k-1}-\sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}\right)$$

$$\hat p=\frac{m\omega_0}{\sqrt2\,i\beta}\begin{pmatrix}0&\sqrt1&0&0&0&\cdots\\ -\sqrt1&0&\sqrt2&0&0&\cdots\\ 0&-\sqrt2&0&\sqrt3&0&\cdots\\ 0&0&-\sqrt3&0&\sqrt4&\cdots\\ 0&0&0&-\sqrt4&0&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\end{pmatrix}$$

המטריצות ל $\hat a$ ו $\hat a^{+}$

$$\hat a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle \;\longrightarrow\; \hat a_{nk}\equiv\langle n|\hat a|k\rangle=\sqrt{k}\,\langle n|k-1\rangle=\sqrt{k}\,\delta_{n,k-1}$$

$$\hat a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \;\longrightarrow\; \hat a^{+}_{nk}\equiv\langle n|\hat a^{+}|k\rangle=\sqrt{k+1}\,\langle n|k+1\rangle=\sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}$$

$$\hat a=\begin{pmatrix}0&\sqrt1&0&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt2&0&0&\cdots\\0&0&0&\sqrt3&0&\cdots\\0&0&0&0&\sqrt4&\cdots\\\vdots&&&&&\end{pmatrix}\qquad \hat a^{+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&\cdots\\\sqrt1&0&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt2&0&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt3&0&0&\cdots\\\vdots&&&&&\end{pmatrix}$$

נבדוק את פעולת האופרטורים בצורה מפורשת, למשל

$$\hat a|2\rangle=\sqrt2\,|1\rangle$$

$$\begin{pmatrix}0&\sqrt1&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt2&0&\cdots\\0&0&0&\sqrt3&\cdots\\\vdots&&&&\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\\sqrt2\\0\\0\end{pmatrix}=\sqrt2\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}$$

$$\hat a^{+}|2\rangle=\sqrt3\,|3\rangle$$

$$\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdots\\\sqrt1&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt2&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt3&0&\cdots\\\vdots&&&&\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\\sqrt3\\0\\\vdots\end{pmatrix}=\sqrt3\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\\vdots\end{pmatrix}$$

נקבל את אופרטור המספר $\hat N=\hat a^{+}\hat a$ בצורה מפורשת

$$\hat N|n\rangle=n|n\rangle$$

$$\hat N=\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdots\\\sqrt1&0&0&0&\cdots\\0&\sqrt2&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt3&0&\cdots\\\vdots&&&&\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0&\sqrt1&0&0&\cdots\\0&0&\sqrt2&0&\cdots\\0&0&0&\sqrt3&\cdots\\0&0&0&0&\cdots\\\vdots&&&&\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdots\\0&1&0&0&\cdots\\0&0&2&0&\cdots\\0&0&0&3&\cdots\\\vdots&&&&\end{pmatrix}$$

$\hat N_{n,k}=n\,\delta_{n,k}$ ברור מצורת המטריצה !