אופרטורים במכניקה הקוונטית

אופרטורים מהווים כלי מרכזי במכניקה הקוונטית.

הגדרת האופרטור הינה: פעולה שמתבצעת על פונקציה ומניבה פונקציה חדשה.

לדוגמא:

- אופרטור המיקום $\hat{X}$ הוא אופרטור טריוויאלי שהפעלתו על $\Psi(x)$ נותנת את המיקום x מוכפל ב- $\Psi(x)$:

$$\hat{X}\Psi(x)=x\Psi(x)$$

- אופרטור הנגזרת:

$$\frac{\hat{\partial}}{\partial x}\Psi(x)=\Psi'(x)$$

- אופרטור התנע:

$$\hat{P}_x\Psi(x)=-i\hbar\frac{\hat{\partial}}{\partial x}\Psi(x)=-i\hbar\Psi'(x)$$

- אופרטור היחידה:

$$\hat{1}\Psi(x)=\Psi(x)$$

- ההמילטוניאן:

$$\hat{H}\Psi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x)+V(x)\Psi(x)$$

האופרטור $\hat{V}(x)$ משמעו הכפלת פונקציית הגל $\Psi(x)$ בערך הפוטנציאל $V(x)$ בנקודה x: $\hat{V}(x)\Psi(x)=V(x)\Psi(x)$. אם הפוטנציאל קבוע $V(x)=V_0$ אזי נקבל $\hat{V}(x)\Psi(x)=V_0\Psi(x)$. עבור אוסצילטור הרמוני נקבל $\hat{V}(x)\Psi(x)=\frac{1}{2}k(x-x_0)^2\Psi(x)$.

בעיקרון הפעלת אופרטור גם מחזירה את הפונקציה בצורה אחרת אך במשוואת ערך עצמי כגון משוואת שרדינגר הבלתי-תלויה בזמן הפעלת $\hat{H}$ על Ψ מניבה את Ψ עצמה מוכפלת בקבוע: $\hat{H}\Psi=E\Psi$.

אופרטורים ליניאריים:

אנו נתמקד האופרטורים ליניאריים המייצגים גדלים פיזיקליים.

אופרטורים ליניאריים מקיימים את התכונות הבאות:

$$\hat{A}(c\Psi)=c\hat{A}\Psi$$

$$\hat{A}(\Psi_1+\Psi_2)=\hat{A}\Psi_1+\hat{A}\Psi_2$$

$$(\hat{A}+\hat{B})\Psi=\hat{A}\Psi+\hat{B}\Psi$$ סכום של אופ' ליניאריים

$$(\hat{A}\hat{B})\Psi=\hat{A}(\hat{B}\Psi)$$ מכפלה -"-

$$(\hat{A}\hat{B})\hat{C}=\hat{A}(\hat{B}\hat{C})$$ אסוציאטיביות -"-

נבדוק 2 מתוך תכונות אלו עבור אופרטור הנגזרת $\frac{\hat{\partial}}{\partial x}$:

$$\begin{cases} \frac{\hat{\partial}}{\partial x}(c\psi) = (c\psi)' \underset{c\ \text{קבוע}}{=} c\psi' = c\frac{\hat{\partial}}{\partial x}\psi \\ \frac{\hat{\partial}}{\partial x}(\psi_1+\psi_2) = (\psi_1+\psi_2)' = \psi_1'+\psi_2' = \frac{\hat{\partial}}{\partial x}\psi_1 + \frac{\hat{\partial}}{\partial x}\psi_2 \end{cases}$$

באופן דומה ניתן להראות את יתר התכונות של אופרטורים לינאריים נוספים כגון $\hat{X}, \hat{X}^2$.

נראה דוגמא לאופרטור לא לינארי:

$$\hat{A}\psi = \psi + 8$$

נשאל האם מתקיים: $\hat{A}(\psi_1+\psi_2) \overset{?}{=} \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2$

נבדוק:

$$\hat{A}(\psi_1+\psi_2) = \psi_1+\psi_2+8$$

$$\hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 = \psi_1+8+\psi_2+8 = \psi_1+\psi_2+16$$

$$\Rightarrow \hat{A}(\psi_1+\psi_2) \neq \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2$$

האופרטור $\hat{A}$ אינו לינארי.

חלופיות של אופרטורים.

בניגוד למספרים אופרטורים אינם בהכרח חלופיים כך שיכול להתקיים מצב בו: $\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi$ וסדר הפעלת האופרטורים משנה.

ניתן להגדיר את יחס החילוף באופן הבא:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

אם יחס החילוף מתאפס האופרטורים נקראים חלופיים אחרת האופרטורים אינם חלופיים.

נתבונן לדוגמא באופרטור המקום והתנע: $\hat{X}, \ \hat{P}_x = -i\hbar\frac{\hat{\partial}}{\partial x}$

בכדי לחשב את יחס החילוף כדאי להפעילו על פונקציה:

$$[\hat{X},\hat{P}_x]\psi(x) = \hat{X}\hat{P}_x\psi(x) - \hat{P}_x\hat{X}\psi(x)$$

נחשב כל איבר בנפרד:

$$\begin{cases} \hat{P}_x\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \Rightarrow \hat{X}\hat{P}_x\psi(x) = \hat{X}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) \overset{\text{לינאריות של } \hat{X}}{=} -i\hbar\hat{X}\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} \\ (\hat{P}_x\hat{X})\psi(x) = \hat{P}_x(\hat{X}\psi) = \hat{P}_x(x\psi) = -i\hbar\frac{\hat{\partial}}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow [\hat{X},\hat{P}_x]\psi(x) = \cancel{-i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}} + \cancel{i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}} + i\hbar\psi = i\hbar\psi$$

ובסה"כ מתקיים כי:

$$\boxed{[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar}$$

כאשר השמטנו כתיבת את פ' הגל ששימשה אותנו לצורך הוכחת הקומוטטור.
והקומוטטור עצמו הינו אופרטור.

נאמר כאן כי עקרון אי-הודאות של הייזנברג עבור מדידת התנע והמיקום של החלקיק קשור ישירות ליחס הקומוטטור. עקב חוסר החלופיות בין אופרטור המיקום $\hat{x}$ ואופרטור התנע $\hat{p}_x$ לא ניתן למדוד אותם בו זמנית לדיוק אינסופי ומתקיים $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$. גדלים פיזיקליים שמתקשרים לאופרטורים חלופיים ניתן למדוד בו זמנית עד לדיוק אינסופי.

רשימת אופרטורים שונים :

חד מימדיים :

שם האופרטור	סימון	הפעולה
מיקום	$\hat{x}$	מכפלה ב- x
תנע	$\hat{P}_x$	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
אנרגיה קינטית	$\hat{T}=\frac{\hat{P}_x^2}{2m}$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
אנרגיה פוטנציאלית	$\hat{V}$	מכפלה ב- V(x)
אנרגיה כללית	$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$

לינאריים.

רב מימדיים :

מקום	$\hat{\vec{r}}$	מכפלה בוקטור $\vec{r}$
תנע	$\hat{\vec{P}}$ $\hat{\vec{P}}=(\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z)$	$-i\hbar\vec{\nabla}$
אנרגיה קינטית	$\hat{T}$ $\hat{T}=\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m}$	$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2$ לפלסיאן.
תנע זויתי	$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{P}}$	
	$\hat{L}_x=\hat{y}\hat{P}_z-\hat{z}\hat{P}_y$	$-i\hbar y\frac{\partial}{\partial z}+i\hbar z\frac{\partial}{\partial y}$
	$\hat{L}_y=\hat{z}\hat{P}_x-\hat{x}\hat{P}_z$	$-i\hbar z\frac{\partial}{\partial x}+i\hbar x\frac{\partial}{\partial z}$
	$\hat{L}_z=\hat{x}\hat{P}_y-\hat{y}\hat{P}_x$	$-i\hbar x\frac{\partial}{\partial y}+i\hbar y\frac{\partial}{\partial x}$

אנרגיה פוטנציאלית $\hat{V}$ הכפלה ב - $V(x,y,z)$.

אופרטורים הרמיטיים.

נשאלת השאלה מה משמעות האופרטורים השונים שהגדרנו. איך מפיקים מהם מידע פיזיקאלי?

במכניקה הקלאסית בכדי לדעת מה מיקומו ומהירות החלקיק כל שעלינו לעשות הוא למדוד אותם. מתוך המהירות והמיקום ניתן לקבל את האנרגיה ע"י $E=\frac{1}{2}mv^2+V(x)$.

במכניקה הקוונטית לכל גודל פיזיקאלי מדיד במכניקה הקלאסית קיים אופרטור שמייצג אותו במכניקה הקוונטית עם ההתאמה הבאה:

$$x \to \hat{x}\ ,\quad P_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

אך כיצד מחשבים את הגודל הפיזיקאלי המתאים?

(*) הערכים הנמדדים של גודל פיזיקאלי הם הערכים העצמיים של האופרטור המתאים!

לדוגמא כשביצענו את ניסוי ה- spectral decomposition או שהפוטון עבר או שהפוטון לא עבר.

גודל פיזיקאלי חייב להיות גודל ממשי! ועל כן הערכים העצמיים של אופרטורים המתארים גדלים פיזיקאליים חייבים להיות ממשיים. מכאן שאופרטורים שמייצגים גדלים פיזיקאליים מדידים חייבים להיות הרמיטיים!

כיוון שלאופרטורים הרמיטיים ערכים עצמיים ממשיים.

$H\psi_n=E_n\psi_n$ כשנמדוד את האנרגיה תמיד נמדוד את אחד ה-E_nים. בעת המדידה כנ' הגל קורס לאחד ה-E_nים שהיו בו היה במצב עצמי היא תיאור בו.

אנו מחפשים אופרטורים שה"ע שלהם ממשיים כלומר - אופרטורים הרמיטיים מקיימים תנאי זה.

אופרטור הרמיטי הוא אופרטור שמקיים (במימד אחד):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\left[\hat{A}\psi(x)\right]^*dx$$

$\psi(x),\psi(x)$ - שתי פונקציות שהן "well behaved".

נראה כעת כי לאופרטור הרמיטי ערכים עצמיים ממשיים:

נתבונן באופרטור הרמיטי $\hat{A}$ שלו ע"ע a כך שמתקיים:

$$\hat{A}\psi(x)=a\psi(x)$$

נכפול משוואה זו משמאל ב- ψ^* ונאינטגרל לפי x: $\int dx$:

35

נקבל:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)(\hat A\psi(x))dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)(a\psi(x))dx = a\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx}_{\overset{\text{תנאי הנרמול}}{=1}} = a$$

|| הרמיטיות

מצד שני מתנאי ההרמיטיות מתקיים כי:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)[\hat A\psi(x)]^*dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)[a\psi(x)]^*dx = a^*\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx}_{=1} = a^*$$

ψ היא פונקציה וכן חילופיות

ולכן קיבלנו מתנאי ההרמיטיות כי $a=a^*$ ⇐ a ממשי.

לכן כל הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי הם ממשיים.

לכן אם גדלים פיזיקליים מדידים מיוצגים ע"י אופרטורים הרמיטיים ואם גדלים פיזיקליים הינם נתונים ע"י הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי אזי ערכים אלו יהיו ממשיים כנדרש.

~~נוכיח כי אופרטור התנע הוא הרמיטי:~~

$\hat P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left[-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right]dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}(x)dx = -i\hbar\underbrace{\psi^*(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x}dx$$

אינטגרציה בחלקים

הפונקציות מנורמלות ולכן מתאפסות באינסוף והסתברות למציאת החלקיק באינסוף היא 0.

$$= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x}dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\left[-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right]^*dx$$

מ.ש.ל.

טענו כי שפונקציות עצמיות השייכות לערכים עצמיים שונים הן אורתו-נורמליות. נוכיח כי תכונה זו מתקיימת עבור אופרטורים הרמיטיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

ניקח שתי פונקציות שהן עצמיות ל- $\hat A$:

$\hat A\psi_n = a_n\psi_n$; $\hat A\psi_m = a_m\psi_m$

$a_n \neq a_m$; $n\neq m$

נצמיד את המשוואה הראשונה ונקבל:

$$(\hat A\psi_n)^* = a_n^*\psi_n^* \overset{\text{הרמיטיות: ע"ע ממשיים.}}{=} a_n\psi_n^*$$

כעת נבצע אינטגרציה לאחר הכפלה משמאל ב ψ_m:

הרמיטי

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m (A\psi_n)^* dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \psi_n^* dx$$

כעת נכפול את המשוואה השנייה ב- ψ_n^* ונבצע אינטגרציה לפי x:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{A} \psi_m \, dx = a_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx$$

כיוון שהאופרטור הרמיטי אגף שמאל של שתי המשוואות זהה כך שמתקיים:

$$a_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \psi_n^* dx = a_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx$$

$$\Rightarrow (a_n - a_m) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx = 0$$

לכן כאשר $a_n \neq a_m$ מתחייב כי מתקיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m \, dx = 0$$

מ.ש.ל.

כאשר $m=n$ האינטגרל שווה ל-1 עקב תנאי הנרמול.

נוכיח כי אופרטור התנע הוא הרמיטי: $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

הפונקציות ברות נרמול ולכן מתאפסות באינסוף.

ההסתברות למציאת החלקיק באינסוף מתאפסת.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{P}_x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left[-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}\right] dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx = -i\hbar \, \psi^*(x)\psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} +$$

אינטגרציה בחלקים

$$+ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \left[-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}\right]^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \left[\hat{P}_x \psi(x)\right]^* dx$$

מ.ש.ל.

נראה דוגמא לאופרטור לא הרמיטי: $\frac{\partial}{\partial x}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \psi^*(x)\psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi\right)^* dx \neq$$

אינטגרציה בחלקים.

$$\neq \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi\right)^* dx$$

כלומר אופרטור הנגזרת אינו הרמיטי. המכפלה ב-$(-i)$ הופכת אותו להרמיטי, לכן לאופרטור הנגזרת אין בהכרח ע"ע ממשיים.

- נסכם את מה שאמרנו עד כה:

1. משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן הינה משוואת ערך עצמי: $\hat{H}\Psi=E\Psi$
2. למשוואה יש מס' רב של פתרונות $\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$
3. הפתרונות הם אורתונורמליים: $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_n^*(x)\Psi_m(x)\,dx=\delta_{nm}$
4. $\hat{H}$ - ההמילטוניאן הינו אופרטור האנרגיה.
5. גדלים פיזיקליים מיוצגים ע"י אופרטורים הרמיטיים (לינאריים) (כגון $\hat{H}$ שמייצגת האנרגיה) שלהם ערכים עצמיים ממשיים (כגון E_n).
6. הגדלים הפיזיקליים המדידים הם הערכים העצמיים של האופרטור ההרמיטי שמייצג את הגודל הנמדד.
7. עקרון ההתאמה - לכל גודל מדיד ניתן ליחס אופרטור שמייצג אותו:
בכדי לעבור מהאופרטור הקלאסי לקוונטי עלינו לבצע את ההמרה הבאה:

$x\rightarrow\hat{x}$; $p_x\rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

- ערכי תצפית - הקשר בין גודל מדיד לאופרטור המייצג אותו.

ערכי תצפית - הערכים הממוצעים של אופרטורים הרמיטיים.

ניתן לשאול שאלות רלוונטיות: מהו המיקום הממוצע של אלקטרון ברמה 1s באטום המימן? או מה המיקום הממוצע של $\bar{e}$ במולקולה הנמצא בין הגרעינים ואז יש קשר כימי או מחוץ למרחב בין האטומים ואז אין קשר. או מה המהירות הממוצעת של אלקטרון שנפלט ממתכת באפקט הפוטואלקטרי.

נניח שיש לנו גודל פיזיקלי מסוים (מיקום, תנע, ...) שמיוצג ע"י האופרטור $\hat{F}$ לו סט אורתו-נורמלי של מצבים עצמיים שמקיימים את הקשר הבא:

$\hat{F}\Psi_i=f_i\Psi_i \qquad i=1,2,3,\ldots$

נניח שהמערכת נמצאת במצב $\Psi(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_n,y_n,z_n)$ שאינו בהכרח אחד המצבים העצמיים של $\hat{F}$ - Ψ_i.

אנו רוצים למדוד את הערך הממוצע של הגודל F המיוצג ע"י האופרטור $\hat{F}$: $\langle\hat{F}\rangle$. לצורך כך מבצעים N מדידות שמניבות N תוצאות אותן נסמן באות g: $\{g_1,g_2,g_3,\ldots,g_N\}$

מכניקת הקוונטים אומרת שכל אחת מתוצאות המדידה g_j חייבת

לקבלת מאוסף המצבים העצמיים של $\hat{F}$ הלא הם $\{\phi_i\}$. כך שנקבל מדידה נקבל g_j שיהיה אחד מהערכים $\{\phi_i\}$. $g_j \in \{\phi_i\}$.

כשדנו בדוגמת ה-~~polarization~~ spectral decomposition ראינו כי למשל שפוטון מגיע עם פולריזציה $\vec{e}_p \neq \hat{e}_x, \hat{e}_y$, למשל המעבר ב-Analyzer או שהוא עובר או שהוא לא עובר - כך שהוא "קורס" לאחד המצבים העצמיים של $\hat{A}$ והתוצאות המתקבלת או שקיבלנו $\hat{e}_x$ או שקיבלנו $\hat{e}_y$.

<u>דוגמא:</u>

אנו מעוניינים למצוא את <u>האנרגיה הממוצעת</u> של המערכת. האנרגיה במכניקת הקוונטים מיוצגת ע"י אופרטור האנרגיה - <u>ההמילטוניאן $\hat{H}$</u>.

להמילטוניאן סט של ערכים עצמיים ומצבים עצמיים המתקבלים מפתרון משוואת שרדינגר הסטציונרית $\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i \; ; \; i=1,2,\dots,M$.

נניח כי המערכת נמצאת במצב Ψ שאינו מצב עצמי של המערכת כך ש $\Psi \notin \{\Psi_i\}$ ולכן $H\Psi \neq E\Psi$ ונבצע אוסף של מדידות.

ונקבל: $\{E_1, E_4, E_3, E_1, E_2, \dots\}$

N מדידות.

ממוצע האנרגיה יינתן ע"י ביטוי הממוצע הסטטיסטי:

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\overbrace{E_1 + E_4 + E_3 + E_1 + E_2 + \dots}^{N \text{ פעמים}}}{N} = \frac{2E_1 + 1E_2 + 1E_3 + 1E_4 + 0E_5 + \dots}{N}$$

ובאופן כללי:

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} E_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{M} n_i E_i = \sum_{i=1}^{M} P_i E_i \quad ; \quad P_i = \frac{n_i}{N}$$

מס' הפעמים שהערך E_i הופיע ב-N המדידות $0,1,2,\dots$

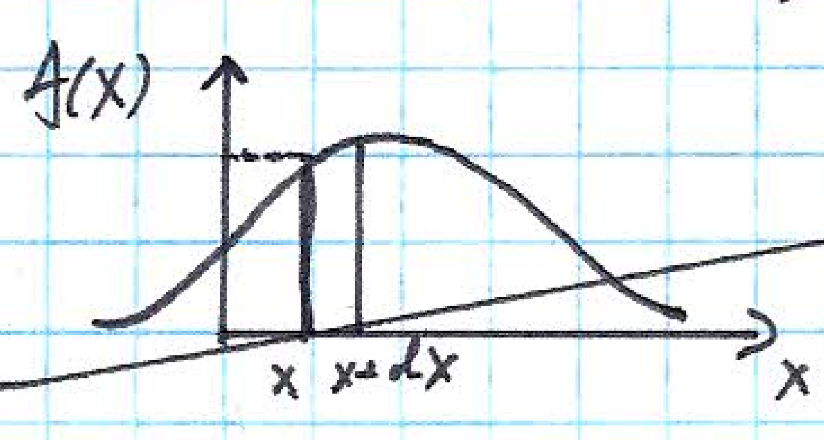
כממוצע משוקלל של זוגות.

המשקל של כל תוצאה.

ועבור האופרטור הכללי $\hat{F}$ נקבל כי:

$$\boxed{\langle \hat{F} \rangle = \sum_{i=1}^{M} P_i f_i \quad ; \quad P_i = \frac{n_i}{N}}$$

~~במכניקת הקוונטים הפונקציות הינן רציפות ולמשל ב- x: אזי $A(x)dx$ הינה ההסתברות למצוא החלקיק בין $[x, x+dx]$ $(A(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx)$~~



~~נראה באופן הבא:~~

הנוסחה שרשמנו מתארת את ממוצע המדידות בניסוי משוער.
בכדי לקבל את הממוצע לפי נוסחה זו עלינו לבצע את הניסוי בפועל. למעשה, כיוון שפונקצית הגל מכילה את כל המידע על המערכת ניתן לחשב את ממוצע המדידות. הנוסחה לחישוב ממוצע המדידות או ערך התצפית של האופרטור הינה:

$$\boxed{\langle \hat{F}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx}$$

אנו נוכיח מייד כי פעולה זו מניבה את התוצאה $\langle \hat{F}\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i f_i$ שהתקבלה משיקולים של ממוצעים משוקללים.

ננסה לתת הסבר אינטואיטיבי לנוסחה הזו באופן הבא:
נניח כי אנו דנים באופרטור המיקום $\hat{F}=\hat{X}$ אזי:

$$\langle \hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}x|\psi(x)|^2dx$$

כעת $|\psi(x)|^2dx$ הינה ההסתברות המנורמלת למציאת החלקיק בתחום dx סביב הנקודה x ולכן ההכפלה $\underbrace{x|\psi(x)|^2dx}_{\text{ההסתברות למציאת הערך x במדידה}}$ הינו הכפלת הערך x בהסתברות למצוא ערך זה במדידה $|\psi(x)|^2dx$ וכשנסכום על כל הערכים x ע"י האינטגרל נקבל את הממוצע $\langle \hat{x}\rangle$.

כמו ממוצע משוקלל של ציונים: סכום (ציון * המשקל) / סכום המשקלים

כעת, אם המערכת נמצאת במצב עצמי של האופרטור אותו אנו מודדים כך ש: $\hat{F}\psi = f\psi$ מהו ערך התצפית של האופרטור?
לדוגמא אם אנו מודדים את האנרגיה של אטום המימן שנמצא במצב 1s נקבל תמיד (גם במדידה הראשונה, גם בשניה וגם במדידה ה- 10,000) את הערך $-13.6eV$.
לכן ממוצע המדידות וערך התצפית של האנרגיה יהיו $-13.6eV$ - הע"ע המתאים למצב העצמי 1s. ובאופן כללי:

$$\langle \hat{F}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx \overset{\hat{F}\psi=f\psi}{=} \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)f\psi(x)dx = f\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx}_{1 \leftarrow \text{נירמול}} = f$$

לכן אם המערכת נמצאת במצב עצמי של האופרטור המתאר את הגודל הפיזיקלי אותו אנו מודדים אז ערך התצפית של האופרטור הוא הערך העצמי המתאים למצב העצמי בו נמצאת המערכת. בכל מדידה נקבל ערך זה - מצב סטציונרי.

אין שינוי במצב

לעתים ~~[illegible]~~ Ψ אינה עצמית לאופרטור $\hat{F}$ - לדוגמא אשר Ψ עצמית ל-$\hat{H}$

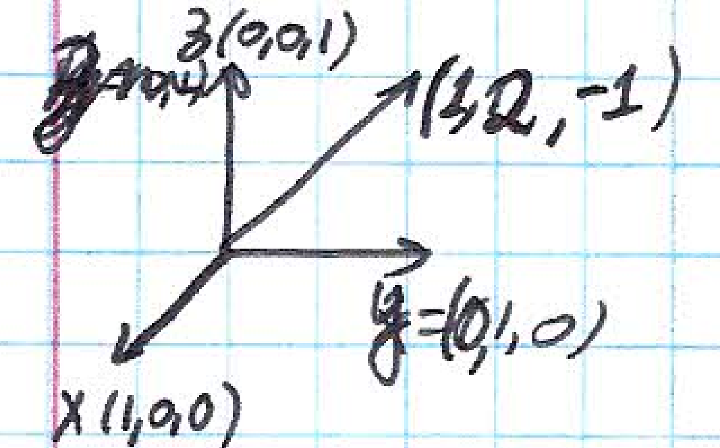
אבל אינה מתארת את התנע $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. במקרים כאלו ניתן לפרוש את

פונקציות הגל בבסיס שלם כאשר משתמשים בפונקציות בסיס בפונקציות

העצמיות של ~~[illegible]~~ ההרמיטי $\hat{F}$ המהוות בסיס שלם אורתונורמלי.

לדוגמא: טור טיילור - פרישה של פונקציה לפי טור חזקות.

טור פורייה - פרישה של פו' מחזורית בפונקציות פו' סין ו- קוס.



אלגברה ליניארית - פרישת וקטורים בבסיס:

$$\begin{pmatrix}1\\2\\-1\end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} + 2\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} - 1\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

וקטורי הבסיס.

כל וקטור במרחב 3D יכול להיכתב כהרכבה של וקטורים אלו ולכן הם בסיס שלם.

באופן דומה אנו פורסים את Ψ:

פונקציות עצמיות, ע"ע

מתקיים כי לאופרטור $\hat{F}$ יש סט של פונקציות עצמיות:
$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$$

(כמו הפתרונות בעמ' 15,25,26 בבעיית המתנד שהן עצמיות של $\hat{H}$ - של בעיית המתנד)

אז נפרוש את Ψ כקומבינציה ליניארית של ~~[illegible]~~ הפונקציות העצמיות של $\hat{F}$:

$$\boxed{\Psi = \sum_n c_n\psi_n}$$

עבור מצב עצמי כבר ראינו כי אנו יודעים לחשב את הממוצע וכי התוצאה היא הע"ע המתאים לכן אם עושים רדוקציה לחשבון הממוצע עם Ψ ע"י חשבון עם המצבים העצמיים ψ_n אותם אנו יודעים לחשב.

כאשר מבצעים פרישה שכזו עלינו לוודא כי תנאי השפה מתקיימים.

לדוגמא - אשר Ψ מתארת את מצב היסוד של בעיית המתנד אזי אם בעיית המתנד ממוקם על "הבור" אז ההסתברות למצוא את החלקיק על פני כדור הארץ היא אינפיניטסימלית קטנה מאוד כאשר המרחק סביב r ההסתברות $|\psi|^2$ צריכה להתאפס ולכן גם Ψ צריכה להתאפס. כאשר פורסים את Ψ עלינו לוודא שהפרישה מקיימת את תנאי השפה ולשם כך כל אחת מפונ' הבסיס צריכה לקיים את תנאי השפה.

אם נדרש כי יתקיים $\psi(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}0$ אזי נדרש להשתמש בבסיס המקיים $\psi_n(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}0$.

<u>לכן הבסיס צריך להיות שלם ולקיים את תנאי השפה והדרישה שיהיה אורתונורמלי.</u>

נשתמש בהגדרה:

$$\langle \hat{F} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\hat{F}\Psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Big[\sum_n c_n^* \varphi_n^*(x)\Big]\hat{F}\Big[\sum_m c_m \varphi_m(x)\Big]dx =$$

הצבת הפרישה.

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\hat{F}\varphi_m(x)\,dx = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) A_m \varphi_m(x)\,dx =$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m A_m \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)\,dx}_{\delta_{nm}} = \sum_n \sum_m c_n^* c_m A_m \delta_{nm} =$$

הבסיס אורתונורמלי

$$= \underline{\underline{\sum_n |c_n|^2 A_n}}$$

קיבלנו, אם כן, כי מתקיים:

$$\boxed{\langle \hat{F} \rangle = \sum_n |c_n|^2 A_n}$$

מתוך השוואה לביטוי הממוצע המשוקלל:

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_n P_n A_n$$

<u>ניתן לראות כי ההסתברות למדידת התוצאה A_n היא $|c_n|^2$.</u>

לכן, כשאנו מודדים גודל פיזיקלי נקבל תמיד את אחד הערכים העצמיים של האופרטור המתאים לגודל הפיזיקלי אותו אנו מודדים (כלומר קריסת פונקצית הגל) בהסתברות המתאימה ל-$|c_n|^2$ - ריבוע הערך המוחלט של המקדם של המצב העצמי המתאים בפרישת פו' הגל בבסיס השלם של המצבים העצמיים של האופרטור הרלוונטי.

<u>ניתן כעת למצוא את מקדמי הפיתוח בפרישה:</u>

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

בכדי למצוא את המקדם נבצע את הפעולה הבאה:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\Psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\Big[\sum_n c_n \varphi_n(x)\Big]dx =$$

Einstein liked inventing phrases such as "God does not play dice," "The Lord is subtle but not malicious." On one occasion Bohr answered, "Einstein, stop telling God what to do."

Photograph by Paul Ehrenfest. Image Source: AIP Emilio Segrè Visual Archives .

Previous: The Quantum and the Cosmos I **Next:** Einstein and Bohr Image

Exhibit Info | Exhibit Home

subtle- עדין, עוסק בפרטים הקטנים.
malicious- זדוני מרושע

$$= \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)\,dx = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$$

$$\Rightarrow \boxed{c_m = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\Psi(x)\,dx}$$

כלומר, אם נרצה לדעת מהו הממוצע של אופרטור מסויים עבור מצב מסויים של המערכת Ψ ניתן לפרוש את פונקציית הגל בבסיס המצבים העצמיים של אותו האופרטור $\Psi(x)=\sum_n a_n\psi_n(x)$ כאשר מקדמי הפרישה נתונים ע"י $c_m=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)\Psi(x)dx$ כך שהממוצע יינתן ע"י $\langle \hat{F}\rangle = \sum_n |c_n|^2 f_n$ ובכל מדידה בודדת של הגודל המדיד נקבל את אחד הערכים f_n עם ההסתברות המתאימה $|c_n|^2$. צריך בהתחלה כמובן לחשב את ψ_n, f_n.

במדידות בודדות נקבל תשובות שונות בהסתברויות שונות.

המקדמים של הגל בהסתברות $|c_n|^2$

אם המצב הוא עצמי אזי בכל מדידה שנבצע תמיד נקבל את הערך העצמי הרלוונטי.

כיוון ש- $|c_n|^2$ היא ההסתברות לקבל ערך מסויים אזי הסכום על כל ההסתברויות צריך להיות 1 שכן אחד הע"ע חייב להתקבל במדידה. נראה זאת:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\sum_n c_n^*\psi_n^*(x)\right)\left(\sum_m c_m\psi_m(x)\right)dx =$$

$$\cancel{= \sum_n\sum_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)}$$

$$= \sum_n\sum_m c_n^* c_m \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_m(x)\,dx = \sum_n\sum_m c_n^* c_m \delta_{nm} =$$

$$= \sum_n |c_n|^2 \quad \Rightarrow \quad \overset{\text{מש"ל}}{\boxed{\sum_n |c_n|^2 = 1}}$$