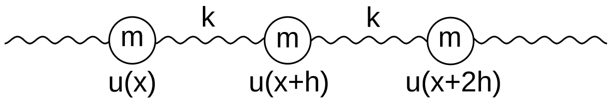
תרגול מספר 2

אורך גל דה־ברולי, אופרטורים וערכי תצפית

תוכן עניינים

1 גלים



אחת המערכות הפשוטות ביותר בהן ניתן לראות תופעות גליות ניתנת לתיאור כמסות m המחוברות בקפיצים ונעות במימד אחד בלבד. נניח כי מיקומי שיווי המשקל הם $x+nh$ (כאשר n מספר שלם), ונסמן את ההסטה של המסה ב־$x+nh$ ממיקום שיווי המשקל שלה ב־$u\left(x+nh\right)$. משוואות התנועה (הניוטוניות) יהיו

$$\begin{aligned} m\frac{\partial^2}{\partial t^2}u\left(x+nh\right) &= k\left[u\left(x+\left(n+1\right)h\right)-u\left(x+nh\right)\right]-k\left[u\left(x+nh\right)-u\left(x+\left(n-1\right)h\right)\right] \\ &= k\left[u\left(x+\left(n+1\right)h\right)+u\left(x+\left(n-1\right)h\right)-2u\left(x+nh\right)\right]. \end{aligned}$$

בגבול הרצף, המודל מתאים לחומר בצפיפות רוחבית $\rho=\frac{M}{L}$ על ידי N מסות $m=\frac{M}{N}$ במרחקים $h=\frac{L}{N}$ זו מזו ועם קשיחות $K=\frac{k}{N}$, כאשר $N\to\infty$. אם נעביר את m אגף במשוואה שקיבלנו, נקבל

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2}u\left(x+nh\right) &= \overbrace{\frac{k}{m}}^{\frac{KN}{M/N}}\left[u\left(x+\left(n+1\right)h\right)+u\left(x+\left(n-1\right)h\right)-2u\left(x+nh\right)\right] \\ &= \overbrace{N^2}^{L^2/h^2}\frac{K}{M}\left[u\left(x+\left(n+1\right)h\right)+u\left(x+\left(n-1\right)h\right)-2u\left(x+nh\right)\right] \\ &= \frac{KL^2}{M}\frac{\left[u\left(x+\left(n+1\right)h\right)+u\left(x+\left(n-1\right)h\right)-2u\left(x+nh\right)\right]}{h^2}. \end{aligned}$$

בגבול $N\to\infty$ או $h=\frac{L}{N}\to 0$, השבר בביטוי הקודם מבטא נגזרת שניה (מי שסקרן לגבי זה יכול לקרוא את המושג finite difference ב־Wikipedia). כלומר, המשוואה הדיפרנציאלית החלקית שמתקבלת היא:

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial t^2}u\left(x\right)=\frac{KL^2}{M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u\left(x\right)}.$$

המשוואה שגזרנו היא משוואת הגלים במימד אחד, ונתקלים בה גם במקרים רבים אחרים. קל לראות כי הפונקציות $u\left(x\right)=A\cos\left(\pm qx\pm\omega t\right)$ (q נקרא ווקטור הגל, ו־ω התדר הזוויתי. נהוג להגדיר גם תדר $f=\frac{\omega}{2\pi}$) הן פתרונות שלה, על ידי הצבה. נעשה זאת באופן מפורש:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2}A\cos\left(\pm qx\pm\omega t\right) &= \frac{KL^2}{M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}A\cos\left(\pm qx\pm\omega t\right) \\ &\Downarrow \\ -\omega^2A\cos\left(\pm qx\pm\omega t\right) &= -q^2\frac{KL^2}{M}A\cos\left(\pm qx\pm\omega t\right). \end{aligned}$$

אורנשטיין 206 · 03-6407229 גיא כהן · ביה"ס לכימיה · אוניברסיטת תל־אביב guy.cohen@gmail.com

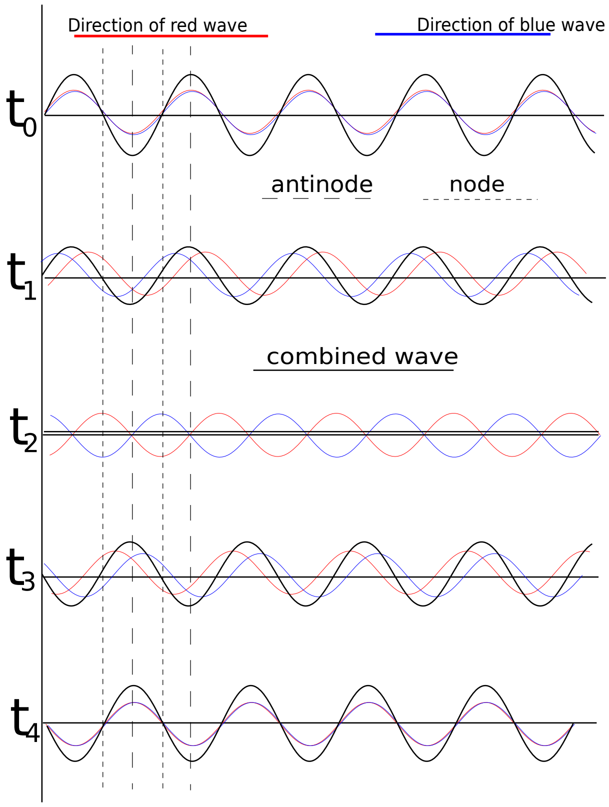
כדי שזה יהיה נכון, חייב להתקיים

$$\omega^2 = q^2 \frac{KL^2}{M} \Rightarrow \boxed{\omega = \sqrt{\frac{KL^2}{M}} q \equiv cq}.$$

הודות למחזוריות של הפונקציה $\cos(kx)$, הפתרונות שכתבנו מקיימים תנאי שפה מחזוריים במרחב: $u\left(x + \frac{2\pi}{q}\right) = u(x)$. המרחק $\lambda \equiv \frac{2\pi}{q}$ המאפיין את המחזוריות נקרא אורך הגל. שימו לב כי לאחר זמן t, הפונקציה שהתחלנו איתה מוזזת ב־$\pm\frac{\omega t}{q} = \pm ct$ - כלומר, היא נעה ימינה או שמאלה במהירות c. פיתרון כזה נקרא גל נע. שימו לב גם כי הבחירה ב־$\cos(kx)$ היא שרירותית - גם הפונקציה $\sin(kx)$ או כל קומבינציה ליניארית של השניים יפתרו את המשוואה באותו אופן. הקומבינציה המרוכבת $e^{\pm ikx} = \cos(kx) \pm i\sin(kx)$ היא שימושית במיוחד, ובהמשך נראה כי היא מתאימה לתיאור פונקציית הגל המרוכבת שפותרת את משוואת שרדינגר עבור חלקיק חופשי.

פתרונות אחרים, המתאימים לתנאי שפה בהם על הפונקציה להתאפס במיקומים מסוימים, הם הגלים העומדים $u(x) = A\cos(\pm qx)\cos(\pm\omega t)$. קל לראות באופן דומה לקודם כי הם פותרים את המשוואה, אך כעת מתקיים בכל זמן $u(x_n) = 0$ עבור $\pm qx_n = \frac{\pi}{2} + \pi n$ (בדקו זאת!).

בשרטוט הבא ניתן לראות גלים עומדים (בשחור) ונעים לשני הכיוונים (באדום וכחול), במספר זמנים. בנוסף, הוא מדגים באופן גרפי את העובדה כי ניתן ליצור גל עומד משילוב של שני גלים נעים (נסו להוכיח זאת באמצעות זהויות טריגונומטריות!).



2 אורך גל דה־ברולי והגבול הקלאסי

למדנו בכיתה כי ניתן להעריך את אורך הגל האופייני של פונקציית הגל של אובייקט על פי יחס de Broglie:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}.$$

התנע, p, הינו mv עבור גוף קלאסי בעל מסה m הנע במהירות v. קבוע פלנק נמצא גבוה ברשימת המספרים שכדאי לזכור:

$$\boxed{h \approx 6.62 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot sec};\ \hbar = \frac{\mathrm{h}}{2\pi} \approx 1.05 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot sec}}.$$

כאשר מימדיו של גוף גדולים בהרבה מאורך הגל המתאים לו, אנו מצפים כי ניתן יהיה לטפל בו בהצלחה בעזרת מכניקה ניוטונית חלקיקית. ככל שגוף מתקרב לסדר הגודל של אורך הגל שלו, כך יש חשיבות גדולה יותר לטבעו הגלי, עד שלבסוף נוצר צורך לתאר אותו באמצעות מכניקת הקוונטים.

חשבו את אורך גל דה־ברולי עבור
(א) אצן במשקל 70 ק"ג, הרץ 100 מטר ב־10 שניות.
(ב) אלקטרון המואץ דרך פוטנציאל של $100\mathrm{V}$ לתוך גביש.
פיתרון:
(א) מהירות האצן היא $v=\frac{100\mathrm{m}}{10\mathrm{s}}=10\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$. לכן (שימו לב ליחידות: $\mathrm{J}=\mathrm{Nm}=\mathrm{Kg}\cdot\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^2}$),

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}=\frac{6.62\times10^{-34}\mathrm{J{\cdot}sec}}{70\mathrm{Kg}\cdot10\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}}=\boxed{10.01\cdot10^{-37}\mathrm{m}}.$$

זהו אורך כל כך קטן שנכון למה שידוע למדע היום אין לו שום משמעות פיזיקלית, והאצן כמובן יתנהג לחלוטין כגוף קלאסי ולא כגל.
(ב) מסת האלקטרון היא $m=9.1\times10^{-31}\mathrm{Kg}$ ומטענו $q=1.6\times10^{-19}\mathrm{C}$. נמצא את האנרגיה הפוטנציאלית שקיבל האלקטרון כתוצאה מההאצה דרך הפוטנציאל, ונשווה אותה לאנרגיה הקינטית כדי למצוא את התנע:

$$\frac{mv^2}{2}=\frac{p^2}{2m}=qV\Rightarrow p=\sqrt{2mqV}=\sqrt{2\cdot9.1\times10^{-31}\mathrm{Kg}\cdot1.6\times10^{-19}\mathrm{C}\cdot100\mathrm{V}}=5.39{\times}10^{-24}\frac{\mathrm{Kg}\cdot\mathrm{m}}{\mathrm{s}}.$$

מכאן, אורך גל דה־ברולי הוא

$$\lambda=\frac{h}{p}=0.122\mathrm{nm}=\boxed{1.22}.$$

זהו סדר הגודל של האטומים בגביש והמרחקים ביניהם, ולכן אופיו הגלי של האלקטרון יבוא לידי ביטוי וזו בבירור מערכת הדורשת התייחסות קוונטית.

3 תכונות של אופרטורים

אופרטור הוא ליניארי אם

$$\boxed{\hat{O}\left(\alpha f\left(x\right)+\beta g\left(x\right)\right)=\alpha\hat{O}f\left(x\right)+\beta\hat{O}g\left(x\right)}.$$

זו עובדה אמפירית כי ההמילטוניאן המדוייק של כל מערכת במכניקת הקוונטים יהיה אופרטור ליניארי.

שאלה: האם האופרטור $\hat{x}$ הינו ליניארי? מה עם האופרטור $\hat{A}$, המוגדר על פי $\hat{A}f=f+8$?
פיתרון: בהצגת הקואורדינטה, האופרטור $\hat{x}$ פשוט מכפיל ב־x, כלומר:

$$\hat{x}\left(\alpha f+\beta g\right)=x\left(\alpha f+\beta g\right)=x\alpha f+x\beta g=\alpha xf+\beta xg\boxed{=\alpha\hat{x}f+\beta\hat{x}g}.$$

לעומת זאת,

$$\begin{aligned}\hat{A}\left(\alpha f+\beta g\right)&=\alpha f+\beta g+8,\\ \alpha\hat{A}f+\beta\hat{A}g&=\alpha\left(f+8\right)+\beta\left(g+8\right)=\alpha f+\beta g+8\left(\alpha+\beta\right)\boxed{\neq\alpha f+\beta g+8=\hat{A}\left(\alpha f+\beta g\right)}.\end{aligned}$$

אופרטור $\hat{O}$ הוא הרמיטי אם עבור כל שתי פונקציות בתחום ההגדרה של x המקיימות את תנאי השפה של הבעיה,

$$\boxed{\int\mathrm{d}x\psi^*\left(x\right)\hat{O}\varphi\left(x\right)=\int\mathrm{d}x\left(\hat{O}\psi\left(x\right)\right)^*\varphi\left(x\right)}.$$

שימו לב שההגדרה הזו תלויה בגבולות האינטגרל ובתנאי השפה. במסגרת הקורס, פונקציות גל חייבות להיות רציפות, אינטגרביליות (כלומר ניתנות לנירמול כך ש־$\int |\psi|^2 \, \mathrm{d}x = 1$) ולהעלם בגבול $x \to \pm\infty$.

תכונותיו החשובות ביותר של אופרטור הרמיטי לצרכינו הן כי הערכים העצמיים שלו ממשיים, וכי הפונקציות העצמיות שלו יוצרות בסיס שלם.

שאלה: האם אופרטור המקום $\hat{x}$, אופרטור הנגזרת $\frac{\partial}{\partial x}$ ואופרטור התנע $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ הרמיטיים?
פיתרון:

$$\int \mathrm{dx}\psi^*(x)\,\hat{x}\varphi(x) = \int \mathrm{dx}\psi^*(x)\,x\varphi(x) = \int \mathrm{dx}\,(x\psi(x))^*\,\varphi(x) \boxed{= \int \mathrm{dx}\,(\hat{x}\psi(x))^*\,\varphi(x)}.$$

כלומר, אופרטור המיקום הרמיטי.

$$\int \mathrm{dx}\psi^*(x)\,\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) = \overbrace{\left[\psi^*(x)\,\varphi(x)\right]\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty}}^{=0} - \int \mathrm{dx}\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x)\right]\varphi(x) \boxed{= -\int \mathrm{dx}\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]^*\varphi(x)}.$$

הודות למינוס, האופרטור אינו הרמיטי (אופרטור כזה, שהינו הרמיטי עד כדי סימן נקרא אנטי־הרמיטי). השתמשנו כאן באינטגרציה בחלקים ובתנאי השפה באינסוף. ההכפלה ב־i היא שהופכת, אם כך, את אופרטור התנע להרמיטי:

$$\begin{aligned}\int \mathrm{dx}\psi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) &= \overbrace{\left[\psi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\varphi(x)\right]\Bigg|_{x=-\infty}^{x=\infty}}^{=0} - \int \mathrm{dx}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x)\right]\varphi(x) \\ &= \boxed{\int \mathrm{dx}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]^*\varphi(x)}.\end{aligned}$$

שני אופרטורים $\hat{A}$ ו־$\hat{B}$ נקראים חילופיים/קומוטטיביים אם מתקיים

$$\boxed{\left[\hat{A},\hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0}.$$

כלומר, אם הם מקיימים את חוק החילוף $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

שאלה: האם אופרטור המקום $\hat{x}$ ואופרטור התנע $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ חילופיים אחד עם השני?
פיתרון: נשתמש בפונקציה כלשהי f כדי לבצע את הבדיקה:

$$\left[\hat{x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right] f(x) = \left(-i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\right) f(x) = -i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar f = i\hbar f,$$

או

$$\boxed{\left[\hat{x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right] = [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar}.$$

4 ערכים מדידים וערכי תצפית

ערכים מדידים מיוצגים במכניקת הקוונטים על ידי ערכים עצמיים של אופרטורים. כיוון שבאופן כללי למדי ערכים כאלו חייבים להיות ממשיים, הם בהכרח מיוצגים על ידי אופרטורים הרמיטיים. אם כך, עבור כל ערך קיים בסיס

שלם של פונקציות עצמיות אורתונורמליות $\varphi_i(x)$ של האופרטור $\hat{A}$ המייצג אותו, כך ש:

$$\begin{aligned}\hat{A}\varphi_i(x) &= a_i\varphi_i(x),\\ \int\varphi_i^*\varphi_j\mathrm{d}x &= \delta_{ij}\equiv\begin{cases}1 & i=j,\\ 0 & i\neq j.\end{cases}\end{aligned}$$

כיוון שהבסיס שלם, ניתן לפרוש כל פונקציית גל $\psi(x)$ בעזרת הפונקציות $\varphi_i(x)$:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_i u_i\varphi_i(x),\\ u_i &= \int\varphi_i^*\psi\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

אם i הוא משתנה רציף ולא בדיד, הסכום מובן כאינטגרל. ההסתברות למדוד את הערך a_i וערכו הממוצע של המשתנה $\left\langle\hat{A}\right\rangle$ יהיו בהתאמה:

$$\boxed{P(a_i)=|u_i|^2},$$

$$\boxed{\left\langle\hat{A}\right\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}x=\sum_i a_i|u_i|^2}.$$

מה קורה כאשר יש לנו שני אופרטורים או יותר? במקרה והם חילופיים ואך ורק במקרה זה, ניתן למצוא בסיס משותף לכולם כך שיתקיים:

$$\begin{aligned}\hat{A}\varphi_{ij} &= a_i\varphi_{ij},\\ \hat{B}\varphi_{ij} &= b_j\varphi_{ij}.\end{aligned}$$

שאלה: מצאו את האנרגיה הקינטית הממוצעת עבור המצב המעורר ה־n של חלקיק בקופסא חד־מימדית,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L},\ 0<x<L,\ n=1,2,3,...$$

פיתרון: אופרטור האנרגיה הקינטית הינו

$$\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

עלינו לחשב את האינטגרל:

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{T}\right\rangle_n &= \int_0^L\psi_n^*(x)\hat{T}\psi_n(x)\mathrm{d}x=\int_0^L\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x\\ &= -\frac{\hbar^2}{mL}\int_0^L\sin\frac{n\pi x}{L}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x\right)=\frac{\hbar^2}{mL}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\int_0^L\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

נבצע את החלפת המשתנים $y=\frac{n\pi x}{L}\Rightarrow\mathrm{d}y=\frac{n\pi}{L}\mathrm{d}x$, ונקבל:

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{T}\right\rangle_n &= \frac{\hbar^2}{mL}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\int_0^{n\pi}\sin^2 y\,\frac{L}{n\pi}\mathrm{d}y=\frac{n\pi\hbar^2}{mL^2}\int_0^{n\pi}\sin^2 y\,\mathrm{d}y\\ &= \frac{n\pi\hbar^2}{mL^2}\int_0^{n\pi}\frac{1}{2}\left[1-\cos 2y\right]\mathrm{d}y=\frac{n\pi\hbar^2}{2mL^2}\left[y-\frac{1}{2}\sin 2y\right]\Bigg|_0^{n\pi}\\ &= \boxed{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}=\frac{n^2h^2}{8mL^2}}.\end{aligned}$$