

תרגול מספר 2

אורך גל דה-ברולי, אופרטורים וערכי תצפית

תוכן עניינים

1	אורך גל דה-ברולי והגבול הקלאסי	1
2	תכונות של אופרטורים	2
3	ערכים מדידים וערכי תצפית	3

1 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:

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

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

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

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 100V לתוך גביש.

פיתרון:

(א) מהירות האצן היא $v = \frac{100\text{m}}{10\text{s}} = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. לכן (שימו לב ליחידות: $\text{J} = \text{Nm} = \text{Kg} \cdot \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$),

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{sec}}{70 \text{ Kg} \cdot 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = 10.01 \cdot 10^{-37} \text{ m}.$$

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 $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ ומטענו $q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$. נמצא את האנרגיה הפוטנציאלית שקיבל האלקטרון כתוצאה מההאצה דרך הפוטנציאל, ונשווה אותה לאנרגיה הקינטית כדי למצוא את התנע:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = qV \Rightarrow p = \sqrt{2mqV} = \sqrt{2 \cdot 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg} \cdot 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 100 \text{ V}} = 5.39 \times 10^{-24} \frac{\text{Kg} \cdot \text{m}}{\text{s}}.$$

מכאן, אורך גל דה-ברולי הוא

$$\lambda = \frac{h}{p} = 0.122 \text{ nm} = 1.22 \text{ \AA}.$$

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

2 תכונות של אופרטורים

אופרטור הוא ליניארי אם

$$\hat{O}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{O}f + \beta \hat{O}g.$$

זו עובדה אמפירית כי ההמילטוניאן המדויק 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:

$$\hat{x}(\alpha f + \beta g) = x(\alpha f + \beta g) = x\alpha f + x\beta g = \alpha x f + \beta x g = \alpha \hat{x}f + \beta \hat{x}g.$$

לעומת זאת,

$$\hat{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha f + \beta g + 8,$$

$$\alpha \hat{A}f + \beta \hat{A}g = \alpha(f + 8) + \beta(g + 8) = \alpha f + \beta g + 8(\alpha + \beta) \neq \alpha f + \beta g + 8 = \hat{A}(\alpha f + \beta g).$$

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

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

שימו לב שההגדרה הזו תלויה בגבולות האינטגרל ובתנאי השפה. במסגרת הקורס, פונקציות גל חייבות להיות אינטגרביליות (כלומר ניתנות לנירמול כך ש- $\int |\psi|^2 dx = 1$) ולהעלם בגבול $x \rightarrow \pm\infty$. תכונותיו החשובות ביותר של אופרטור הרמיטי לצרכינו הן כי הערכים העצמיים שלו ממשיים, וכי הפונקציות העצמיות שלו יוצרות

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

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

כלומר, אופרטור המיקום הרמיטי.

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

אודות 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:

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

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

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

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

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

3 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:

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

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

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

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

$$P(a_i) = |u_i|^2,$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx = \sum_i a_i |u_i|^2.$$

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,

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

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:

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

נבצע את החלפת המשתנים $y = \frac{n\pi x}{L} \Rightarrow dy = \frac{n\pi}{L} dx$ ונקבל:

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