אופרטורים במכאניקה הקוונטית

ההגדרה של אופרטור היא פעולה שמתבצעת על פונקציה ונותנת פונקציה בחזרה. לדוגמה:

$$\hat{x}: \qquad \hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x)$$

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

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

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

בתורת הקוונטים האופרטורים הם תמיד **ליניאריים**, כלומר הם מקיימים את התכונות הבאות:

$$\hat{A}(cf) = c\hat{A}f$$
$$\hat{A}(f+g) = \hat{A}f + \hat{A}g$$
$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)f = \hat{A}f + \hat{B}f$$
$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)f = \hat{A}\left(\hat{B}f\right)$$
$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C} = \hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right)$$
$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

התכונה האחרונה נכונה לכל האופרטורים שהם לא חילופיים. נראה ש- $\hat{x}$ הוא אופרטור ליניארי:

$$\hat{x}cf = c\hat{x}f \qquad\qquad cf = g$$
$$\hat{x}g = xg = xcf = cxf = c\hat{x}f$$

$\hat{x}^2, \frac{\hat{\partial}}{\partial x}$ גם כן אופרטורים ליניאריים.

נבחן את האופרטור הבא: $\hat{O}f = f + 8$. אופרטור זה הוא לא ליניארי. ע"מ להוכיח זאת נתבונן בתנאים של אופרטורים ליניאריים:

$$\hat{O}(f+g) = \hat{O}f + \hat{O}g$$
$$\hat{O}(f+g) = f + g + 8$$
$$\hat{O}f + \hat{O}g = f + 8 + g + 8 = f + g + 16$$
$$\Rightarrow \hat{O}(f+g) \neq \hat{O}f + \hat{O}g$$

נרצה לבחון את התכונה האחרונה עבור מספר אופרטורים:

$$\hat{x}\hat{x}^2 \stackrel{?}{=} \hat{x}^2\hat{x}$$
$$\hat{x}\hat{x}^2 f = \hat{x}x^2 f = x^3 f$$
$$\hat{x}^2\hat{x}f = \hat{x}^2 xf = x^3 f$$
$$\Rightarrow \hat{x}\hat{x}^2 = \hat{x}^2\hat{x}$$

יחס חילוף בין אופרטורים מסמנים בצורה הבאה: $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. ניתן לראות כי עבור האופרטורים שבדקנו יחס החילוף הוא 0 ולכן אלו הם אופרטורים חילופיים. *כשיש שני אופרטורים חילופיים זה אומר שניתן לקבל את ערך התצפית של כל אחד מהם בעת ובעונה אחת.* נדגים מצב בו האופרטורים לא חילופיים, כלומר לא ניתן לדעת את הערך העצמי של שניהם ביחד:

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

נפעיל את האופרטורים על פונקציה כלשהי f:

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

ומכאן ניתן לראות כי יחס החילוף בין שני אופרטורים אלו לא שווה לאפס ולכן לא חילופיים:

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

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

רב מימדיים:

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

אופרטורים הרמיטיים

ראינו כבר כי משואת שרדינגר היא משוואת ערך עצמי , כלומר לכל בעיה הפתרון שלה. אופרטור המשוואה הוא ההמילטוניאן – אופרטור האנרגיה, ומה שמבדיל בין הבעיות השונות הוא איבר הפוטנציאל. המשוואה מתארת גל עומד – לא תלוי בזמן , משוואה סטציונרית.

במכאניקה הקלאסית יש לנו פונקציות של X ו- P, והפונקציות מתארות גדלים פיזיקאליים. במכאניקה הקוונטית יש לנו אופרטורים. הערכים הנמדדים של גודל פיזיקאלי הם הערכים העצמיים של האופרטור המתאים. ערך עצמי יכול להיות מרוכב, אולם גדלים פיזיקליים הם תמיד ממשיים. האופרטורים של גדלים פיזיקאליים תמיד יהיו *הרמיטים*.

<u>טענה</u> לאופרטורים הרמיטיים יש רק ערכים עצמיים ממשיים.

אופרטור הרמיט הוא אופרטור המקיים את התנאי הבא :

$$\int \psi \hat{A} \varphi d\tau = \int \varphi \left(\hat{A} \psi\right)^* d\tau$$

נוכיח את הטענה :

$$\hat{A}\psi = a\psi$$
$$\int \psi^* \hat{A}\psi d\tau = a\int \psi^* \psi d\tau = a$$
$$\hat{A}^* \psi^* = a^* \psi^*$$
$$\int \psi \hat{A}^* \psi^* d\tau = a^* \int \psi\psi^* d\tau = a^* = \int \psi^* \hat{A}\psi d\tau = a$$
$$a = a^*$$

נבחן את אופרטור התנע $-i\hbar\frac{\hat{\partial}}{\partial x}$:

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

נציין כי האיבר $-i\hbar\psi^*\varphi\Big|_{-\infty}^{\infty}$ מתאפס, שכן על מנת לנרמל את הפונקציות, הן צריכות להתאפס בגבולות. וכך הוכחנו שאופרטור התנע הוא הרמיטי.

נבחן את אופרטור הנגזרת $\frac{\hat{\partial}}{\partial x}$:

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

<u>טענה :</u> שתי פונקציות עצמיות השייכות לערכים עצמיים שונים – אורטוגונליות!

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$
$$\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m$$
$$\int \psi_n^* \psi_m = 0 \qquad a_n \neq a_m$$

כל זה בתנאי שהאופרטור הוא הרמיטי שכן :

$$\int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau = a_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau$$
$$\int \psi_n^* \hat{A} \psi_m d\tau = a_m \int \psi_n^* \psi_m d\tau$$

היות והאופרטור שלנו הוא אופרטור הרמיטי :

$$\left(\hat{A}\psi_n\right)^* = a_n \psi_n^* \qquad \left(\hat{A}\psi_m\right)^* = a_m \psi_m^*$$
$$\Rightarrow \int \psi_m \left(\hat{A}\psi_n\right)^* d\tau = a_n \int \psi_m \psi_n^* d\tau \qquad \int \psi_n \left(\hat{A}\psi_m\right)^* d\tau = a_m \int \psi_n \psi_m^* d\tau$$
$$\Downarrow$$
$$a_m \int \psi_n^* \psi_m d\tau = a_n \int \psi_n^* \psi_m d\tau$$
$$(a_m - a_n) \int \psi_n^* \psi_m d\tau = 0$$
$$\Rightarrow \int \psi_n^* \psi_m d\tau = 0$$

בגלל שאופרטור הרמיטי נותן פתרונות ממשיים , האופרטורים בכימיה הקוונטית חייבים להיות הרמיטיים.

נראה כי יש פונקציות עצמיות של אופרטור אחד שהן לא פונקציות עצמיות של אופרטור אחר :

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$
$$f = \psi_n = \sin kx$$
$$\hat{F} \equiv \hat{P} = -i\hbar \frac{\hat{\partial}}{\partial x}$$
$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sin kx) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sin kx = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

וכך הראנו כי הפונקציה $\sin(kx)$ היא פונקציה עצמית להמילטוניאן. נבדוק האם פונקציה זו עצמית לאופרטור התנע:

$$\hat{P}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\sin kx) = -i\hbar k\cos kx \neq c\psi$$

ערכי תצפית של אופרטורים הרמיטיים

נתמקד כעת בגודל פיזיקאלי המיוצג על ידי האופרטור $\hat{F}$. אם הפונקציה f **אינה** פונקציה עצמית של האופרטור $\hat{F}$, אזי עבור N מדידות של $\hat{F}$ נקבל $\{f_1.............f_N\}$ ערכים כאשר f_i הוא אחד מהערכים העצמיים של האופרטור $\hat{F}$.

במכניקת הקוונטים ניתן לדווח על גדלים ממוצעים. הערך הממוצע של האופרטור $\hat{F}$ יהיה הסכום האריטמטרי של הערכים $\{f_1.............f_N\}$ שהתקבלו בניסיון, כלומר:

כאשר n_i הוא מספר הפעמים שהערך f_i התקבל.

$$<\hat{F}>=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}f_j=\sum_{i=1}^{N}\frac{n_i}{N}f_i$$

עבור פונקצית התפלגות רציפה, קיים מושג של הסתברות $f(x)$ שמשמעו הסיכוי למצוא את המערכת בין a ל- b, והסתברות זו ניתנת לחישוב ע"י הנוסחה הבאה בתנאי שהפונקציה מנורמלת:

$$\int_a^b f(x)dx$$

במכניקת הקוונטים, כפי שכבר ראינו, צפיפות ההסתברות נתונה על ידי $\psi^*\psi$, ולכן הגודל הממוצע של f עפ"י מכניקת הקוונטים ניתן ע"י:

$$<\hat{F}>=\int\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx$$

על מנת לקבוע ערכים פיזיקאליים במכניקת הקוונטים יש להשתמש בתורה ההסתברותית. כל תוצאה פיזיקאלית נמדדת ע"י ממוצע.

נבחן שני מקרים:

אם ψ היא פונקציה עצמית של $\hat{F}$ אזי הערך העצמי הוא גם הממוצע:

$$<\hat{F}>=\int\psi^*\hat{F}\psi d\tau=\int\psi^* a\psi d\tau=a\int\psi^*\psi d\tau=a$$

ההוכחה לכל היא ע"י חישוב השונות $\left(<\hat{F}^2>-<\hat{F}>^2\right)$:

$$< \hat{F}^2 >= \int \psi^* \hat{F}^2 \psi d\tau = a \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = a^2 \int \psi^* \psi d\tau = a^2$$

$$< \hat{F}^2 > - < \hat{F} >^2 = a^2 - a^2 = 0$$

אם ψ אינה פונקציה עצמית של $\hat{F}$:

$$\hat{F}\psi \neq a\psi$$

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n \qquad \hat{F}\varphi_n = a_n \varphi_n$$

$$< \hat{F} >= \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = \int \left(\sum_n c_n^* \varphi_n^* \right) \hat{F} \left(\sum_m c_m \varphi_m \right) d\tau = \sum_n c_n^* \sum_m c_m \int \varphi_n^* \hat{F} \varphi_m d\tau = \sum_{nm} \left(c_n^* c_m \right) a_m \int \varphi_n^* \varphi_m d\tau$$

$$< \hat{F} >= \sum_{nm} \left(c_n^* c_m \right) a_m \delta_{nm} = \sum_n \left(c_n^* c_n \right) a_n = \sum_n \left(\left| c_n \right|^2 \right) a_n$$

בכל ניסיון נמדוד את אחד הערכים העצמיים a_n . הסיכוי לקבל את הערך a_n הוא $\left| c_n \right|^2$