

מכניקה קוונטית של אטומים

פרק 6 - אופרטורים בייצוג האלגברי

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגילים.....1
2. פרופוגטור ההתפחות בזמן.....9

הרצאות ותרגילים:

סיכום כללי:

-אופרטורים מיוצגים באמצעות מטריצות:

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \dots & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & \dots & Q_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Q_{n1} & Q_{n2} & \dots & Q_{nn} \end{pmatrix}$$

האיבר Q_{ij} מעביר את הוקטור e_j לוקטור e_i : $Q_{ij} = \langle e_i | \hat{Q} | e_j \rangle$ (כפול סקלר כלשהו).
 i שורה, j עמודה.

אם הבסיס הוא בסיס עצמי של אופרטור כלשהו אז המטריצה של האופרטור תהיה אלכסונית והערכים על האלכסון הם הערכים העצמיים של האופרטור.

$$\langle \psi_1 | \hat{Q} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{Q} \psi_2 \rangle$$

כתיב נוסף:

$$\langle \hat{Q} \psi | = (\hat{Q} | \psi \rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{Q}^\dagger$$

חזרה על אלגברה לינארית

- מציאת ערכים עצמיים (ע"ע): $\det(Q - \lambda I) = 0$

- מציאת וקטורים עצמיים (ו"ע) בסרטון:

מטריצה משוחלפת:

$$A^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

צמד הרמיטי :

$$A^\dagger = (A^*)^T = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \dots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \dots & A_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n}^* & A_{2n}^* & \dots & A_{nn}^* \end{pmatrix}$$

מטריצת יחידה :

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \sum |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

כפל מטריצות : $C = A \cdot B \Rightarrow C_{mn} = \sum A_{mi} B_{in}$ כפל מטריצות הוא לא חילופי : $AB \neq BA$ יחס חילוף בין מטריצות : $[A, B] = AB - BA$ מטריצה ההופכית : $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ מטריצה אוניטרית : $U^\dagger = U^{-1}$

- זהויות :

$$(\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger|\psi_2\rangle)^* = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle$$

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle$$

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$(AB)^T = B^T A^T$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$$

הגודל של ערך עצמי של אופרטור אוניטרי הוא תמיד 1.
 אופרטורים הרמיטים ואוניטרים הם אופרטורים נורמליים, כלומר : $[A, A^\dagger] = 0$.

שאלות:

(1) בניית אופרטורים ופעולות על פונקציות שונות

נתון כי: $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ מהווים בסיס אורתונורמאלי במרחב וקטורי דו מימדי. מגדירים את המצבים הבאים:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \alpha_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \beta_1 |v_1\rangle + \beta_2 |v_2\rangle \end{aligned}$$

כאשר: $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ הם סקלרים מורכבים.

א. רשמו את $\langle \psi_2 |$ בכתוב דיראק בבסיס הנייל.

ב. חשבו את המכפלה הפנימית $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$.

האם היא שווה למכפלה הפנימית $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$?

ג. רשמו את $\langle \psi_2 |$ ואת $\langle \psi_2 |$ כוקטורים בכתוב מטריוצי.

ד. מצאו את הנורמה של המצב $|\psi_2\rangle$.

ה. נגדיר אופרטור $\hat{Q} = c|v_1\rangle\langle v_2|$ כאשר c הוא סקלר מורכב שונה מאפס. חשבו את פעולת האופרטור על איברי הבסיס וכתבו את הייצוג המטריוצי של האופרטור בבסיס הנתון. האם האופרטור הרמיטי?

ו. חשבו את הפעולה של $\hat{Q}$ על המצב $|\psi_2\rangle$ פעם אחת דרך הייצוג המטריוצי ופעם שניה דרך כתיב דיראק.

ז. נגדיר אופרטור חדש $\hat{G} = c|\psi_1\rangle\langle \psi_2|$ מצאו את $\hat{G}$ בייצוג המטריוצי.

ח. נתון כי האופרטור $\hat{S}$ מבצע את הפעולה הבאה:

$$\begin{aligned} \hat{S}|v_1\rangle &= |v_2\rangle \\ \hat{S}|v_2\rangle &= |v_1\rangle \end{aligned}$$

מצאו את הייצוג המטריוצי של $\hat{S}$ וחשבו את הפעולה שלו על המצבים $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$.

(2) מציאת עע ווע

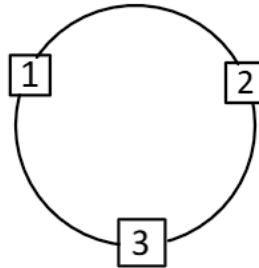
נתונה המטריצה הבאה: $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

א. האם המטריצה הרמיטית?

ב. מצאו את העי"ע וי"ע של A .

3 (3) אתרים על טבעת

נתונה מערכת ובה שלושה אתרים על טבעת:



נסמן את המצבים בהם נמצא החלקיק בכל אחד מהאתרים בצורה הבאה:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

הדינמיקה של המערכת מתוארת ע"י ההמילטוניאן: $H = \varepsilon \hat{D} + \varepsilon \hat{D}^\dagger$ כך שאופרטורי ההזזות מוגדרים:

$$\hat{D}|i\rangle = |i-1\rangle, \hat{D}|1\rangle = |3\rangle, \hat{D}^\dagger|i\rangle = |i+1\rangle, \hat{D}^\dagger|3\rangle = |1\rangle$$

אופרטור המיקום מוגדר כ- $\hat{x}|i\rangle = i|i\rangle$.

א. ייצגו את אופרטורי ההזזה ע"י מטריצה והראו כי אחד הוא צמוד הרמיטי של השני.

ב. ייצגו את אופרטור המיקום ע"י מטריצה. מהם הוקטורים והערכים העצמיים.

ג. מהם הוקטורים והערכים העצמיים של ההמילטוניאן?

שימו לב כי הו"ע אינם אורתוגונליים ויש לבצע תהליך גרהם שמידט.

פתרון המשוואה: $0 = -\lambda^3 + 3\varepsilon^2\lambda + 2\varepsilon^3$ הוא: $\lambda_{1,2} = -\varepsilon, \lambda_3 = 2\varepsilon$.

ד. מכינים את החלקיק בזמן 0 במצב $|2\rangle$, מהו מצב המערכת בזמן כלשהו?

ה. מה הסיכוי למצוא את החלקיק באתר 3 אחרי זמן כלשהו?

ו. מהו יחס החילוף $[D, x]$?

ז. **מצאו את המצבים העצמיים עבור מערכת עם אינסוף אתרים

(גבול הרצף) עבור $\hat{D}^\dagger, \hat{D}$ ועבור H .

הדרכה: כתבו את משוואת המצבים העצמיים בכתוב דיראק ונסו לחלץ

סדרה הנדסית עבור המקדמים. מתוך התנאי על האיבר האחרון מצאו

את הערכים העצמיים והפונקציות העצמיות.

(4) הוכחת זהויות 1

- א. הוכיחו כי: $\langle i | \hat{A} | j \rangle = (\langle j | \hat{A}^\dagger | i \rangle)^*$ כאשר: $|i\rangle, |j\rangle$ הן פונקציות בסיס אורתונורמאלי.
- ב. הוכיחו כי: $\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = (\langle \psi_1 | \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle)^*$ כאשר ψ_1, ψ_2 הן פונקציות כלשהן.
- ג. הוכיחו כי: $\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$.

(5) הוכחת זהויות 2

- הוכיחו את הטענות הבאות עבור אופרטורים כלשהם A ו- B :
- א. $(A^\dagger)^\dagger = A$.
- רמז: השתמשו בתכונות ההצמדה של מכפלה פנימית והראו
- כי: $\langle \psi_1 | (A^\dagger)^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle$
- ב. $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.
- ג. $AA^\dagger, i(A - A^\dagger), A + A^\dagger$ הם כולם אופרטורים הרמיטים.

(6) הוכחת זהויות 3

- נניח כי לאופרטור Q ישנם וקטורים עצמיים $|\phi_i\rangle$ עם ערכים עצמיים λ_i בהתאמה. הראו כי אם אין ניוון אז: $(\Pi_i(\hat{Q} - \lambda_i))|\psi\rangle = 0$
- כאשר: $\Pi_i(x_i) = x_1 x_2 x_3 \cdots x_n$.
- רמז: השתמשו בתכונת מטריצת היחידה: $I = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$.

(7) הוכחת זהויות 4

- הראו כי הגודל של ערך עצמי של אופרטור אוניטרי הוא תמיד 1.
- הנחייה: הניחו מצב עצמי של אופרטור אוניטרי שעבורו מתקיים: $U|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$.

(8) הוכחת זהויות 5

- הוכיחו שאופרטורים הרמיטים ואוניטרים הם אופרטורים נורמליים, כלומר שהם מקיים את התנאי: $[A, A^\dagger] = 0$.

(9) הוכחת זהויות 6

- הראו כי אופרטור אוניטרי הפועל על פונקציית גל אינו משנה את הנורמה של הפונקציה.

10) אופרטור סיבוב

נתון האופרטור הבא :

$$A = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

- א. הראו שהאופרטור אוניטרי.
 ב. מצאו את הערכים העצמיים והוקטורים העצמיים.
 ג. הראו שהוקטורים העצמיים אורתונורמאליים.
 ד. הראו שהמטריצה $U^\dagger A U$ היא מטריצה אלכסונית כאשר U מורכבת מהוקטורים העצמיים של A בעמודות.

11) חישוב אי הודאות בתנע ומיקום

- א. חשבו את אי הודאות במקום ובתנע של המצב $|\psi\rangle = |x_1\rangle$. הנחייה : בשביל לחשב את ערכי התצפית של התנע השתמשו בקשר : $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$ (או בטרנספורם פורייה) על מנת למצא את פונקציית הגל בבסיס התנע.
 ב. חשבו את אי הודאות במקום ובתנע של המצב $|\psi\rangle = \alpha|x_1\rangle + \beta|x_2\rangle$. (ממשיים β, α). מהו החסם על אי הודאות בתנע? (את אי הודאות בתנע ניתן להשאיר כאינטגרל).
 ג. מה יקרה לפונקציית הגל אם נערוך מדידה ונקבל שהחלקיק נמצא ב- x_1 ?

תשובות סופיות:

$$(1) \quad \text{א. } \beta_1^* < v_1 \mid + \beta_2^* < v_2 \mid \quad \text{ב. } \beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2 \mid, \text{ לא שווה.}$$

$$\text{ג. } L\psi_2 \mid = (\beta_1^*, \beta_2^*), \mid \psi_2 \rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad \text{ד. } \sqrt{|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2}$$

$$\text{ה. } \begin{pmatrix} 0 & c \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ לא הרמיטי.} \quad \text{ו. } c\beta_2 \mid v_1 \rangle \text{ או } \begin{pmatrix} c\beta_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{ז. } c \begin{pmatrix} \alpha_1 \beta_1^* & \alpha_1 \beta_2^* \\ \alpha_2 \beta_1^* & \alpha_2 \beta_2^* \end{pmatrix} \quad \text{ח. } \hat{S} \mid \psi_1 \rangle = \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \alpha_1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S} \mid \psi_2 \rangle = \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$

$$(2) \quad \text{א. כן.}$$

$$\text{ב. } \lambda_1 = 0, \lambda_2 = -1, \lambda_3 = 1 : \mid \lambda_1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mid \lambda_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \mid \lambda_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$(3) \quad \text{א. } D^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{ב. } \mid 1 \rangle, \mid 2 \rangle, \mid 3 \rangle, X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 2, \lambda_3 = 3$$

$$\lambda_1 = -\varepsilon, \mid \lambda_1 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2} \right)$$

$$\text{ג. } \lambda_2 = -\varepsilon, \mid \lambda_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 1, -1)$$

$$\lambda_3 = -2\varepsilon, \mid \lambda_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, 1, 1)$$

$$\text{ד. } \mid \psi(t) \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} e^{+i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \mid \lambda_1 \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \mid \lambda_2 \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{2\varepsilon}{\hbar}t} \mid \lambda_3 \rangle$$

$$\text{ה. } \left(-\frac{5}{6} \cos(\omega t) + \frac{1}{3} \cos(2\omega t) \right)^2 + \left(\frac{5}{6} \sin(\omega t) + \frac{1}{3} \sin(2\omega t) \right)^2$$

$$\text{ו. } [\hat{D}, \hat{X}] = \hat{D}$$

ז. הפונקציות העצמיות של שלושת האופרטורים הן :

$$-\infty < x < \infty \quad \phi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikx} \quad \text{או} \quad |\phi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \varepsilon e^{-i\frac{2\pi j}{N}n} |n\rangle \quad \text{כאשר } j \text{ מספר שלם בין } -\infty$$

$$k = \frac{2\pi}{N} j \quad j = 0, 1, \dots, N-1$$

$$E_j = 2\varepsilon\omega \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right) \quad \text{הן } H \quad \text{ושל } \lambda_j = e^{-i\frac{2\pi j}{N}} \quad \text{הן } D \quad \text{של } \lambda_j^+ = e^{i\frac{2\pi j}{N}} \quad \text{הן } D^+ \quad \text{הע"ע של}$$

(4) הוכחה.

(5) הוכחה.

(6) הוכחה.

(7) הוכחה.

(8) הוכחה.

(9) הוכחה.

$$\lambda_1 = e^{i\theta} \quad |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i) \quad \text{א. הוכחה.} \quad \text{ב.} \quad \lambda_2 = e^{-i\theta} \quad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i) \quad \text{ג. הוכחה.}$$

ד. הוכחה.

$$(11) \quad \Delta x = 0, \quad \Delta p = \infty$$

ב.

$$\Delta x = \alpha\beta |x_1 - x_2|, \quad \langle p \rangle = 0, \quad \langle p^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} p \left[1 + 2\alpha\beta \cos\left(\frac{p(x_1 - x_2)}{\hbar}\right) \right] dp = \infty$$

ג. פונקציית הגל תקרוס ונחזור למצב של סעיף א'.

פרופוגטור ההתפתחות בזמן:

סיכום כללי:

$$U(t)|\psi(t=0)\rangle = |\psi(t)\rangle$$

$$U(t) = \sum e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |E_n\rangle\langle E_n|$$

שאלות:

(1) הוכחה שהפרופוגטור אוניטרי

הראו כי הפרופוגטור הוא אופרטור אוניטרי וכי הנורמה של פונקציית הגל לא משתנה בזמן.

תשובות סופיות:

(1) הוכחה.