

Stări staționare

- printr-o stare staționară se înțelege o stare care are energia constantă în timp.

Ptr o particulă liberă descrie de ec. Schrödinger

$$i\hbar \cdot \partial_t \Psi(x,t) = H \cdot \Psi(x,t)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \partial_x$$

O soluție:

$$\Psi(x,t) = u(x) \cdot f(t)$$

H - Hamiltonianul sistemului este independent de timp.

$$i\hbar \partial_t u(x) \cdot f(t) = H \cdot u(x) \cdot f(t)$$

$$(i\hbar \partial_t f(t)) \cdot u(x) = (H \cdot u(x)) \cdot f(t) \quad | : u(x) f(t)$$

$$\frac{i\hbar \partial_t f(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H} \cdot u(x)}{u(x)} = E = \text{constantă}$$

Partea st. conține doar o dependență de timp.

Partea dr. conține doar o dependență de poziție.

1.

$$\frac{i\hbar \partial_t f(t)}{f(t)} = E \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial_t f(t)}{f(t)} = - \frac{iE}{\hbar}$$

$$f(t) = C e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad \Leftrightarrow \quad \ln f(t) = \frac{-iEt}{\hbar} + C$$

2.

$\hat{H} u(x) = E \cdot u(x)$ - reprezintă ecuația de vectori și valori proprii a operatorului Hamiltonian.

E - reprezintă energia sistemului, și este o valoare proprie a op. Hamiltonian.

ptr o anumită energie: $\Psi_E(x,t) = u_E(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$

Ptr o stare stationară:

$$P(x,t) = |\Psi_E(x,t)|^2 = |u_E(x)|^2 \cdot \underbrace{\left(e^{-iEt/\hbar} \cdot e^{iEt/\hbar} \right)}_{|f(t)|^2 = 1}$$

O stare stationară satisface ecuația lui Schrödinger independentă de timp

$$\hat{H} \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

Vectorii și valorile proprii

\hat{A} - operator - acționind asupra unei funcții $f(x)$ are ca rezultat tot o funcție $g(x)$

$$f(x) = 3x + 2$$

$$\hat{A} = x \quad \hat{A} \cdot f(x) = x(3x+2) = 3x^2 + 2x = g(x)$$

$$\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x} = \partial_x \quad \hat{A} \cdot f(x) = \partial_x(3x+2) = 3 = g(x)$$

$$\hat{A} = \hat{A}(x, \partial_x, \partial_x^2, \dots)$$

Ptr fiecare operator \hat{A} există un set de numere $\{a_n\}$ și un set de funcții $u_n(x)$ a.î.

$$\hat{A} \cdot u_n(x) = a_n \cdot u_n(x)$$

a_n - valori proprii
 $u_n(x)$ - funcții (vectori) proprii

↳ ec. de vectori și valori proprii

$$\hat{A} = \partial_x \quad A e^{\alpha x} = \partial_x e^{\alpha x} = \alpha \cdot e^{\alpha x} \quad u_\alpha(x) = e^{\alpha x}$$

$$A \cdot u_\alpha(x) = a_\alpha \cdot u_\alpha(x) \quad a_\alpha = \alpha$$

Ex:

Să se arate că $u(x) = e^{-x^2/2}$ și $v(x) = 2x e^{-x^2/2}$ sunt fct proprii ale operatorului $\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$.

$$a) \quad A \cdot u(x) = (-\partial_x^2 + x^2) e^{-x^2/2} = -\partial_x^2 e^{-x^2/2} + x^2 e^{-x^2/2}$$

$$\partial_x e^{-x^2/2} = -x e^{-x^2/2}$$

$$\partial_x^2 e^{-x^2/2} = x^2 e^{-x^2/2} - e^{-x^2/2}$$

$$A \cdot u(x) = -x^2 e^{-x^2/2} + e^{-x^2/2} + x^2 e^{-x^2/2} = e^{-x^2/2}$$

$$A \cdot u(x) = u(x) \Rightarrow \begin{cases} a = 1 \\ u(x) = e^{-x^2/2} \end{cases} \text{ set de valoare/} \\ \text{vector proprii.}$$

$$b) \quad A \cdot v(x) = (-\partial_x^2 + x^2) 2x e^{-x^2/2} = -\partial_x^2 2x e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2}$$

$$\partial_x 2x e^{-x^2/2} = 2e^{-x^2/2} - 2x^2 e^{-x^2/2}$$

$$\partial_x^2 (2x e^{-x^2/2}) = -2x e^{-x^2/2} - 4x e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2}$$

$$= -6x e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2}$$

$$A \cdot v(x) = 6x e^{-x^2/2} - 2x^3 e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2} = 3 \cdot \underbrace{2x e^{-x^2/2}}_{v(x)}$$

$$A \cdot v(x) = 3 \cdot v(x)$$

$$\begin{cases} b = 3 \\ v(x) = 2x e^{-x^2/2} \end{cases}$$

- al doilea set de vectori \hat{A} fct proprii la lui \hat{A} .

Postulatele de bază ale mecanicii cuantice

P1 Starea unui sistem cuantic este descrisă de funcția de undă iar fiecărei mărimi observabile îi corespunde un operator \hat{A} .

P2 Rezultatul posibil al unei măsurători a unei observabile descrise de operatorul A este o valoare proprie a_n a op. A .

$$A \cdot u_n(x) = a_n \cdot u_n(x)$$

u_n - fct. proprie coresp. val. proprii a_n .

Dacă în urma măsurătorii se găsește v.p. a_n atunci starea sistemului este descrisă de $u_n(x)$.

P3 Valoarea medie a unei observabile într-un sistem descris de fct. de undă $\psi(x)$ este:

$$\langle A \rangle = \bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \hat{A} \cdot \psi(x) dx \quad (1D)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}) \cdot \hat{A} \cdot \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3D)$$

Ex: $\hat{A} = \hat{x} = x \quad \langle x \rangle = \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x) dx$
 $= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int x P(x) dx$

$\hat{A} = \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \partial_x: \quad \langle p \rangle = \bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) \right) dx$

Proprietăți ale operatorilor

Produsul scalar : $\psi(x), \phi(x)$

$$(\phi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot dx \quad - \text{definiția în } L^2.$$

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

$\hat{A} \cdot \psi(x)$ - \hat{A} acțiunea asupra $\psi(x)$

$$(\phi, \underbrace{A\psi}_{\text{fct.}}) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \cdot (A \cdot \psi(x)) dx = \int \phi^*(x) A \cdot \psi(x) dx.$$

Valoarea medie a unei observabile este:

$$\bar{A} = \langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot A \cdot \psi(x) dx.$$

Conjugata hermitică sau adjunțul operatorului A

A^\dagger - notatie ptr conj. hermitică.

$$(\phi, A\psi) = (A^\dagger \phi, \psi)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{A} \cdot \psi(x) dx = \int (A^\dagger \phi(x))^* \cdot \psi(x) dx$$

Un operator se numește Hermitic dacă $A = A^\dagger$. În mecanica cuantică, fiecărei observabile corespunde un operator hermitic.

$$\boxed{A = A^\dagger} \quad - \quad \text{def. op. Hermitic};$$

$\hat{=}$

$$\boxed{(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi)}$$

Obs: Operatorii Hermitici au valori proprii reale.

(demonstratie in curs)

2.1.1 Să se găsească expresiile explicite ale operatorilor:

a. $\hat{A}_1 = (d/dx + x)^2$

b. $\hat{A}_2 = (xd/dx)^2$

a)

$$\begin{aligned}\hat{A}_1 \psi(x) &= (\partial_x + x)^2 \psi(x) = (\partial_x + x) \underbrace{(\partial_x + x) \psi}_{\partial_x(x\psi)} \\ &= (\partial_x + x) (\partial_x \psi + x \cdot \psi) \\ &= \partial_x^2 \psi + x \cdot \partial_x \psi + \underbrace{\partial_x x \cdot \psi}_{\psi} + x \partial_x \psi + x^2 \cdot \psi \\ &= \partial_x^2 \psi + 2x \partial_x \psi + \psi + x^2 \cdot \psi\end{aligned}$$

$$\hat{A}_1 \cdot \psi = (\partial_x^2 + 2x \partial_x + x^2 + 1) \psi$$

$$A_1 = (\partial_x + x)^2 \rightarrow (\partial_x^2 + 2x \partial_x + x^2 + 1)$$

operatorul explicit

$$\begin{aligned}(x \cdot \psi)' &= \partial_x (x\psi) = x' \cdot \psi + x \psi' = \psi + x \cdot \psi' \\ &= \psi + x \partial_x \psi\end{aligned}$$

b) $A_2 = x^2 \cdot \partial_x^2 + x \cdot \partial_x \quad \checkmark$

$$\begin{aligned}A_2 &= (x \cdot \partial_x)^2 \psi = \underbrace{(x \cdot \partial_x)} \cdot \underbrace{(x \cdot \partial_x) \psi} = x \cdot \partial_x (x \cdot \partial_x \psi) \\ &= x \cdot \partial_x \psi + x^2 \cdot \partial_x^2 \psi = \underbrace{(x^2 \cdot \partial_x^2 + x \cdot \partial_x)}_{A_2 \text{ - explicit}} \psi\end{aligned}$$

c) $A_3 = \underbrace{(x + \partial_x)} \cdot \underbrace{(x \partial_x)}$ - forma explicită.

$$A_3 : x^2 \partial_x + x \partial_x^2 + \partial_x$$

$$\underbrace{(x + \partial_x)} \cdot \underbrace{(x \partial_x \psi)} = x^2 \partial_x \psi + \partial_x (x \cdot \partial_x \psi)$$

$$= x^2 \partial_x \psi + \underbrace{\partial_x \psi + x \partial_x^2 \psi}$$

$$= (x^2 \partial_x + x \partial_x^2 + \partial_x) \psi$$

$$\begin{aligned}(x \cdot \psi')' &= x' \cdot \psi' + x \psi'' \\ &= \psi' + x \psi''\end{aligned}$$

2.1.4 Să se determine valorile proprii ale operatorilor:

a. d/dx

b. id/dx

a)

Se rezolvă ecuația de vectori și valori proprii:

$$A \cdot \Psi(x) = \lambda \Psi(x)$$

λ - notație standard ptr
valori proprii.

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \lambda \Psi(x)$$

- ec. dif. cu variabile separabile

$$\frac{d\Psi(x)}{\Psi(x)} = \lambda \cdot dx$$

$$e \int \ln \Psi = \lambda \cdot x + C$$

$$\Psi(x) = C \cdot e^{\lambda x}$$

$\Psi(x) = e^{\lambda x}$ ptr det. valorii proprii:

$$A \Psi(x) = (e^{\lambda x})' = \frac{d}{dx} (e^{\lambda x}) = \lambda \cdot e^{\lambda x}$$

\Rightarrow valoarea proprie este λ și fct. proprie este $e^{\lambda x}$.

$$\begin{cases} \lambda & - \text{v.p.} \\ e^{\lambda x} & - \text{f.p.} \end{cases}$$

Din pct. de vedere fizic $\frac{d}{dx}$ nu este un operator care corespunde unei observabile.

b) $i \cdot \frac{d\Psi}{dx} = \lambda \Psi$

$$i(e^{-i\lambda x})' = i(-i\lambda e^{-i\lambda x}) = \lambda e^{-i\lambda x}$$

$$i \frac{d\Psi}{\Psi} = \lambda dx \quad (-i)$$

$$\int \frac{d\Psi}{\Psi} = -i\lambda dx$$

$$\ln \Psi = -i\lambda x$$

$$\Psi = e^{-i\lambda x}$$

$$\begin{cases} \lambda & - \text{v.p.} \\ e^{-i\lambda x} & - \text{f.p.} \end{cases}$$

v.p. este λ și fct. proprie este $e^{-i\lambda x}$