Stări staționare

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

Ptr o particulă liberă descrisă de ec. Schrödinger

$$i\hbar \cdot \partial_t \Psi(x,t) = H \cdot \Psi(x,t) \qquad H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

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

O soluție:

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

H - Hamiltonianul sistemului este independent de timp.

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

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

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

Partea st. conține doar o dependență de timp.
Partea dr. conține doar o dependență de poziție.

1.
$$\frac{i\hbar\, \partial_t f(t)}{f(t)} = E \Rightarrow \frac{\partial_t f(t)}{f(t)} = -\frac{iE}{\hbar}$$

$$f(t) = c\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Leftarrow \ln f(t) = \frac{-iEt}{\hbar} + C$$

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 staționară:

$$P(x,t) = |\vec{\Psi}_E(x,t)|^2 = |u_E(x)|^2 \quad \Big(\underbrace{e^{-iEt/\hbar} \cdot e^{iEt/\hbar}}_{1}\Big)$$

$$|f(t)|^2 = 1$$

O stare staționară satisface ecuația lui Schrödinger independentă de timp

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

Vectorii și valorile proprii

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

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

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

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

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

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

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

a_n - valori proprii

$u_n(x)$ - funcții (vectori) proprii.

↳ ec. de vectori și valori proprii

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

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

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

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

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

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

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

$$\partial_x 2x e^{-x^2/2} = 2e^{-x^2/2} - 2x^2 e^{-x^2/2}$$
$$\partial_x^2 \left(2x e^{-x^2/2}\right) = -2x e^{-x^2/2} - 4x e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2}$$
$$= -6x e^{-x^2/2} + 2x^3 e^{-x^2/2}$$

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

$A \cdot v(x) = 3 \cdot v(x)$ $\begin{cases} b = 3 \\ v(x) = 2x e^{-x^2/2} \end{cases}$ - al doilea set de vectori și fct proprii a 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:

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

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\bar{r})\, \hat{A}\, \psi(\bar{r})\, d\bar{r} \qquad (3D)$$

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

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

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

Proprietăți ale operatorilor

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

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

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

$\hat{A}\cdot\Psi(x)$ - $\hat{A}$ acționează asupra $\Psi(x)$

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

Valoarea medie a unei observabile este:

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

Conjugata hermitică sau adjunctul operatorului A

A^+ - notație ptr conj. hermitică.

$$(\phi, A\Psi) = (A^+\phi, \Psi)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\, \hat{A}\cdot\Psi(x)\, dx = \int (A^+\phi(x))^* \cdot \Psi(x)\, dx$$

Un operator se numește Hermitic dacă $\boxed{A = A^+}$. În mecanica cuantică fiecărei observabile corespunde un operator hermitic.

$\boxed{A = A^+}$ - def. op. Hermitic;

$\Updownarrow$

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

Obs: Operatorii Hermitici au valori proprii reale.

(demonstrație în 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)
$$\hat{A}_1 \psi(x) = (\partial_x + x)^2 \psi(x) = (\partial_x + x)\underbrace{(\partial_x + x)\psi}_{\partial_x(x\psi)}$$

$$= (\partial_x + x)(\partial_x \psi + x \cdot \psi)$$

$$= \partial_x^2 \psi + x \cdot \partial_x \psi + \partial_x x \cdot \psi + x\,\partial_x \psi + x^2 \cdot \psi$$

$$= \partial_x^2 \psi + 2x\,\partial_x \psi + \psi + x^2 \cdot \psi$$

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

$$A_1 = (\partial_x + x)^2 \rightarrow \underbrace{(\partial_x^2 + 2x\partial_x + x^2 + 1)}_{\text{operatorul explicit}}$$

$$(x \cdot \psi)' = \partial_x(x\psi) = x' \cdot \psi + x\psi' = \psi + x \cdot \psi'$$
$$= \psi + x\,\partial_x \psi$$

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

$$A_2 = (x \cdot \partial_x)^2 \psi = (x \cdot \partial_x) \cdot (x \cdot \partial_x)\psi = x \cdot \partial_x (x \cdot \partial_x \psi)$$

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

c)
$$A_3 = (x + \partial_x)(x\partial_x) \quad - \text{ forma explită.}$$

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

$$(x'\cdot\psi')' = x' \cdot \psi' + x\psi''$$
$$\psi' + x\psi''$$

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

$$= x^2 \partial_x \psi + \partial_x \psi + x\,\partial_x^2 \psi$$

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

2.1.4 Să se determine valorile proprii ale operatorilor:

a. d/dx

b. id/dx

Se rezolvă ecuația de vectori și valori proprii:

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

λ - notație standard ptr valori proprii.

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

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

(x)

$\psi(x) =$

ptr det. valorii proprii:

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

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

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