Eigen value and Eigen function

Eigen Value Equation:

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

a_n The eigen value to the operator $\hat{A}$

ψ_n The eigen function

Ex.① If $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ and $\psi_n(x) = e^{2ix}$ is ψ_n is an eigen function?

Sol $\hat{A}\psi = \frac{d}{dx} e^{2ix}$

$= 2i\, e^{2ix}$ $\quad 2i$ هو المعامل الناتج من التفاضل $\psi = e^{2ix}$

$\therefore \hat{A}\psi = a_n \psi_n$ yes $\psi = e^{2ix}$ is eigen function and the eigen value $a_n = 2i$

Ex.② If $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$ and $\psi_n(x) = \cos x$ find the eigen value?

Sol

$\therefore \hat{A}\psi = a_n \psi_n$

$= \frac{d^2}{dx^2} \cos x = \frac{d}{dx}(-\sin x) = -\cos x$

$\therefore$ The eigen value $a_n = -1$

Ex.③ Prove that the eigen function to the operator $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2$ is $\psi(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$ and find the eigen value?

Sol $\because \hat{A}\psi = a\psi$

$$\therefore \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2\right) e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= -x\left(-x e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) + e^{-\frac{1}{2}x^2}(-1) - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

$$= x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} - e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} = -e^{-\frac{1}{2}x^2} = -\psi$$

$\therefore$ The eigen value $= -1$

H.W: Prove that $\psi(x) = A e^{-\alpha x}$ eigen function to the operator $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} + \frac{2\alpha}{x}$ and then find the eigen value?

(Hint: Result $\alpha - \alpha^2$)

المؤثر الهرميتي Hermition Operator

يطلق على المؤثر $\hat{F}$ بالمؤثر الهرميتي الخطي إذا حقق العلاقة التالية:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dv$$

وهناك خاصيتان تتصف بها المؤثرات الهرميتية وهما:

① القيمة العظمى لأي مؤثر هرميتي هي قيمة حقيقية.

② الدالات العظمى للمؤثر الهرميتي هي دالات متعامدة.

* ولإثبات الخاصية الأولى

Let $\hat{F}$ Hermition Operator

$\therefore \hat{F}\psi = f\psi$ ... ①

$\therefore \hat{F}^*\psi^* = f^*\psi^*$ ... ② Complex Conjugate

نضرب المعادلة ① من اليسار بالدالة ψ^* ونضرب المعادلة ② من اليسار بالدالة ψ

$$\psi^* \hat{F} \psi = \psi^* f \psi$$

$$\psi \hat{F}^* \psi^* = \psi f^* \psi^*$$

بالتكامل ⇐

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dv = f \int \psi^* \psi \, dv$$

$$\int \psi \hat{F}^* \psi^* \, dv = f^* \int \psi \psi^* dv$$

وبتساوي طرفي المعادلتين الأخيرتين وحسب تعريف المؤثر الهرميتي

$$\int \psi^* \hat{F} \psi \, dv = \int \psi \hat{F}^* \psi^* dv$$

أي أن طرفي المعادلتين الأخيرتين متساويين

$$f \int \psi^* \psi \, dv = f^* \int \psi \psi^* dv$$

$\therefore \int \psi^* \psi \, dv = 1$ Normalization Condition

$\therefore f = f^*$

وهذا يدل على أن القيم العظمى للمؤثر الهرميتي هي قيم حقيقية.

* ولإثبات الخاصية الثانية (العلاقة العامة للدوال الخطية هي دوال متعامدة)

نفرض ψ_1, ψ_2 هما دالتان مميزتان للدالة الخطية $\hat{F}$ والقيمة المميزة f_1, f_2 على الترتيب وبتطبيق معادلة القيمة المميزة فإن:

$$\hat{F}\psi_1 = f_1\psi_1 \quad \text{--- (1)}$$

$$\hat{F}\psi_2 = f_2\psi_2 \quad \text{--- (2)}$$

$$\hat{F}^*\psi_1^* = f_1^*\psi_1^*$$

وبأخذ المرافق المعقد للمعادلة (1)

but $f_1^* = f_1$ (القيم الذاتية هي قيم حقيقية)

$$\therefore \hat{F}^*\psi_1^* = f_1\psi_1^* \quad \text{--- (3)}$$

نضرب معادلة (2) من اليسار بـ ψ_1^* ومعادلة (3) من اليسار بـ ψ_2 وأخذ التكامل:

$$\int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 \, dv = \int \psi_1^* f_2 \psi_2 \, dv$$

$$\int \psi_2 \hat{F}^*\psi_1^* \, dv = \int \psi_2 f_1 \psi_1^* \, dv$$

وبطرح المعادلتين الأخيرتين:

$$\int \psi_2 \hat{F}^*\psi_1^* \, dv - \int \psi_1^* \hat{F}\psi_2 \, dv = (f_1 - f_2)\int \psi_2 \psi_1^* \, dv$$

والطرف الأيسر يساوي صفراً (Hermitian Operator Condition) شرط الدوال الخطية:

$$\therefore (f_1 - f_2)\int \psi_2 \psi_1^* \, dv = 0$$

but $f_1 - f_2 \neq 0$ فيما معطى مختلفان

$$\therefore \int \psi_2 \psi_1^* \, dv = 0$$

وهذا يعني أن الدالتين ψ_1, ψ_2 والمناظرتين للقيم المميزة f_1, f_2 هما متعامدتان (الدوال المتعامدة هي دوال مستقلة خطياً أي لا تعتمد الواحدة على الأخرى)

Q: Prove that $\hat{P}_x$ is a Hermitian Operator?

Sol

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{P}_x \psi_m \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \hat{P}_x^* \psi_n^* \, dx$$ Hermitian operator Condition

$$\therefore \hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_m \, dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \, dx$$

Let $u = \psi_n^*$ and $dv = \frac{\partial}{\partial x} \psi_m$ $\therefore v = \psi_m$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} u\,dv = uv\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} v\,du$$

$$= -i\hbar \psi_n^* \psi_m \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^* \, dx$$

$x \Rightarrow \infty$ $\therefore \psi = 0$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_n^*\right) dx \quad \text{but } i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{P}_x^*$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{P}_x \psi_m \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m \hat{P}_x^* \psi_n^* \, dx$$

وهذا شرط الدالة الذاتية

$\therefore \hat{P}_x$ is a Hermitian Operator

Orthonormal Wave function الدوال الموجية المتعامدة والمعيارية Normalization و Orthogonal

لقد بينا أن تفسير الاحتمالية $P=|\psi|^2=\psi^*\psi$ يتطلب أن تكون ψ معيارية أي تحقق الشرط الآتي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,dv=1$$

وهذا الشرط يسمى بشرط المعيارية Normalization Condition.

ولقد ذكرنا أنه إذا كانت هناك دالتان موجيتان ψ_1 ، ψ_2 للجزئ الحرية والهيدروجينية وهما f_1 ، f_2 فتكون الدالتان متعامدتان أي تحققان شرط التعامد Orthogonal Condition أي أن:

$$\int\psi_1^*\psi_2\,dv=\int\psi_2^*\psi_1\,dv=0$$

فعندما تكون الدوال الموجية متعامدة مع بعضها البعض وكل منها معيارية فيقال عن مثل هذه الدوال بدوال معيارية متعامدة Orthonormal ويعبر عنها رياضياً بالشكل الآتي:

$$\int\psi_n^*\psi_m\,dv=\delta_{nm}=\begin{cases}0 & n\neq m\\ 1 & n=m\end{cases}$$

حيث أن الرمز δ يطلق عليه كرونكر دلتا

Kronker delta function

حيث يشير الى العلاقات بين القوسين أي أن:

$$\left.\begin{aligned}\int\psi_n^*\psi_n\,dv&=1\\ \int\psi_m^*\psi_m\,dv&=1\end{aligned}\right\}\ \text{when } n=m$$

أي أننا نشير الى أن الدالة تحقق شرط المعيارية

أما في حالة $n\neq m$ أي تكون ψ_n ، ψ_m دوال تحقق ويا للتالي تحقق شرط التعامد وكالتالي:

$$\left.\begin{aligned}\int\psi_n^*\psi_m\,dv&=0\\ \int\psi_m^*\psi_n\,dv&=0\end{aligned}\right\}\ \text{when } n\neq m$$

القيمة المتوقعة Expectation Value

لا يمكن التنبؤ بنتيجة عملية القياس للنظام الموجود في الحالة ψ ما في هذه الحالة نأخذ معدل القيمة والذي يسمى في ميكانيكا الكم بالقيمة المتوقعة .

نرمز للقيمة المتوقعة لمتغير ديناميكي وليكن A بالرمز $\langle A \rangle$ ولكيه $\langle A \rangle$ تمثل معدل عدد كبير من القياسات التي اجريت على المتغير A في الحالة ψ

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi \, dv}{\int \psi^* \psi \, dv} \quad \text{and for } \psi \text{ normalized } \int \psi^* \psi \, dv = 1$$

$$\therefore \langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi \, dv$$

For Examples

1 Position

$$\langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \psi \, dx$$

2 Momentum

$$\langle P_x \rangle = \int \psi^* \hat{P}_x \psi \, dx \quad \text{and} \quad \hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\therefore \langle P_x \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dx \Rightarrow \langle P_x \rangle = -i\hbar \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

3 Total energy

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{E} \psi \, dx \quad , \quad \therefore \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow$$

$$\therefore \langle E \rangle = \int \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \, dx \Rightarrow \langle E \rangle = i\hbar \int \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi \, dx$$

4 Kinetic energy

$$\langle T \rangle = \int \psi^* \hat{T} \psi \, dx \quad , \quad \therefore \hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \quad , \quad \hat{P}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\therefore \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\therefore \langle T \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi \, dx$$

$$\therefore \langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \, dx$$