CAPÍTOL 9

MÉS SOBRE OPERADORS

Més informació sobre els operadors:

En aquest capítol considerem els operadors en una expressió matemàtica que s'aplica a una equació per obtenir un valor posterior (valor propi) numèric per a qualsevol propòsit. Aquests resultats, com aquest aïllament al misteri de les equacions, es poden equiparar a un entorn hospitalari on el metge i el pacient són l'equació de l'operador i el resultat en si mateix (o la salut traduïda a anys de vida).

Combinant les fórmules apreses fins ara, podem concebre l'equació de Schrödinger i resoldre'l mitjançant diferents *operadors*(que s'anomenen amb un ^ a sobre)

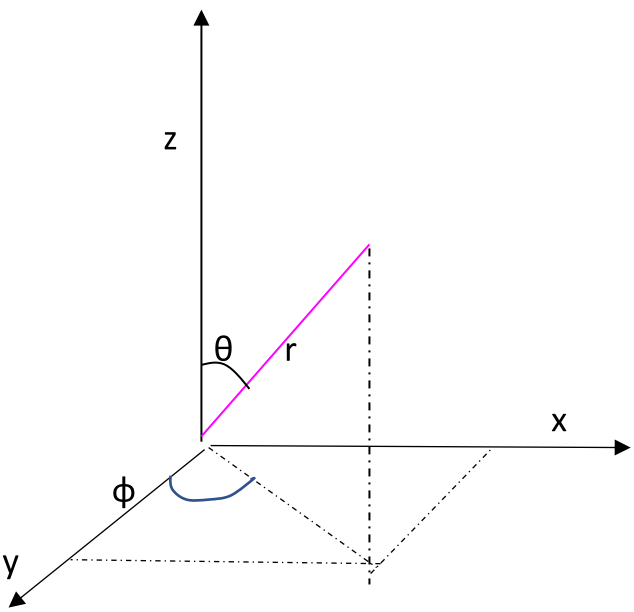
Primer passem l' **operador hamiltonià** (que correspon a l'energia cinètica representada per $\widehat{H}$) en 3-D:

$$\hat{H}.\psi = -(\hbar^2/2m).\left[\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2\right].\psi + \left[V(x,y,z)\right].\psi = E.\psi$$

On de moment no utilitzarem V (x, y, z).

Fig. 50:

Fig. 50:



de **Coordenada cartesiana** (x, y, z) a **polar** (r, θ, ϕ).)

$\hat{H}.\psi = E.\psi$

On deduir: x = r.Sinθ.Cos ϕ
y = r.Sin θ .Sin ϕ
z = r.Cosθ
(La deducció us la deixo).

Podrem solucionar dit "problema" de transcriure variables de cartesianes a polars (o angulars), prenent vistes a la publicació que trobarem en www.jordialemanysabater.cat sobre: "reduced mass in the expression of the energy of a rotor rígid".

Així:

$\hat{H}.\Psi=[(1/r^2)\partial/\partial r(r^2.\frac{\partial}{\partial r})]+[(1/(r^2.\mathrm{Sin}\,\theta)).\partial/\partial\theta(Sin\theta.\frac{\partial}{\partial\theta})]+$
$[(1/(r^2.\mathrm{Sin}^2\theta))\partial^2/\partial\phi^2] = -2m.E/\hbar^2.\Psi$

fem la segona derivada a ψ per tal de comprovar que una funció d'ona comuna (y = Sinx) obeeixi y '' = - y, de manera que l'equació de Schrödinger té sentit.

Com en les coordenades polars $1/r^2$ és comú en tots els termes de l'hamiltonià, podem concloure que:

$\lambda = h/p$ $2\pi r = n.\lambda$ $E = ½ .mv^2$

llavors: $-(2mr^2.E)/h^2$ és l'element constant (o *valor propi* ≡ *propi*).

Típicament, malgrat signar l'acord de signes, no he aplicat el signe al Hamiltoniano; sabem que augmentant "n", el valor de E també augmenta perquè és menys negatiu, així que apliquem **nº complex** i. $i=\sqrt{-1}$ mentre que $i^2= -1$.

Canviant de registres, mira això $\psi(q, t) = \varphi(q).\Phi(t)$, ja que els **estats fixos** no depenen de t [≠ f (t)]. Per tant, els representemcom 2 variables independents independents.

$H.\psi = H. (c_1.\varphi_1\ c_2.\varphi_2) = c_1 H. \varphi_1 + c_2 H. \varphi_2 = c_1 E_1 \varphi_1 + c_2 E_2{}_2 \varphi \neq (E_1 (c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2) = E. \psi$ cosa que seria igual si els dos estats amb el que es descriu ψ fóssin *degenerats*
(Vull dir: $E_1 = E_2$).

Ara, pel que fa als criteris de *normalització* , que han de concloure en:
$\int \psi i.\psi j * .dx = 1$ si $i = j$, és a dir, que hi ha **entrellaçament**; mentre que
$\int \psi i.\psi j * .dx = 0$ si $i \neq j$. indica que no hi **ha interconnexió**

Coneixem més operadors diferents als $\widehat{H}$ *i* $\widehat{P_x}$:

1. *Angular moment*: $\hat{L}$ = r× $m.v = r.m\,\partial/\partial x$
2. (quantitat de moviment) ≡ $\widehat{P_x}$
3. *moment d'spin:* $(\hbar/i).\partial/\partial\phi = \hat{M}$

Relació entre E i $\hat{l}$ (un moment angular):
s'obté eliminant E de les fórmules següents:
$E = 1 / 2.\mu.v^2$ $\mu = mM / (m + M)$ $I = \mu .a^2$ (on *a* és ctnt com els radis).

$(2\pi r)^2 = (n.\lambda)^2$ $\lambda = h / p$ $r^2 = (n^2 .h^2) / (4\pi^2 .p^2)$

i per tant ... $l^2 = n^2$. i $2.IE = l^2$ i $\hat{L}^2 \Psi = 2.IE\Psi$.

D'altra banda, donat que $\partial^2\Phi/\partial \phi^2 = m^2.\Phi$ té una solució:
$\Phi(\phi) = C. e^{-i.m.\phi}$ entenem més sobre les deduccions posteriors.
Afegiu també:

També afegiré : $\hat{M}_z.\psi = \hat{M}_z.\Theta\Phi = l_z.\Theta\Phi$

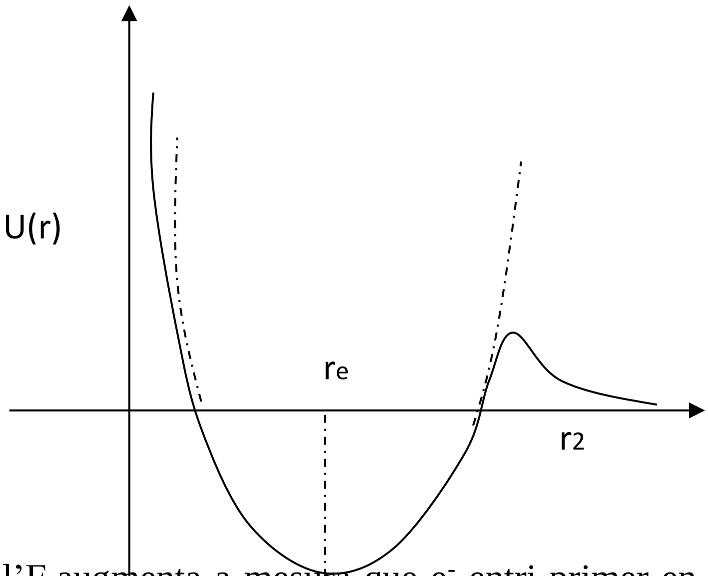
$\hat{M}_z \Phi = lz. \Phi$

Ja que: $\Theta \neq f(\phi)$.

i $\hat{M}_z \cdot \Phi = \hbar . m . \Phi$
on $\Phi(\phi) = C . e^{im\phi}$
ja que : $l_z = m . \hbar$

Si introduïm ara l'U **(energia potencial)** en acció, començarem analitzant la funció U (r) vs. r (o la distància "core-e^- ", que serà la mateixa): Fig.51:

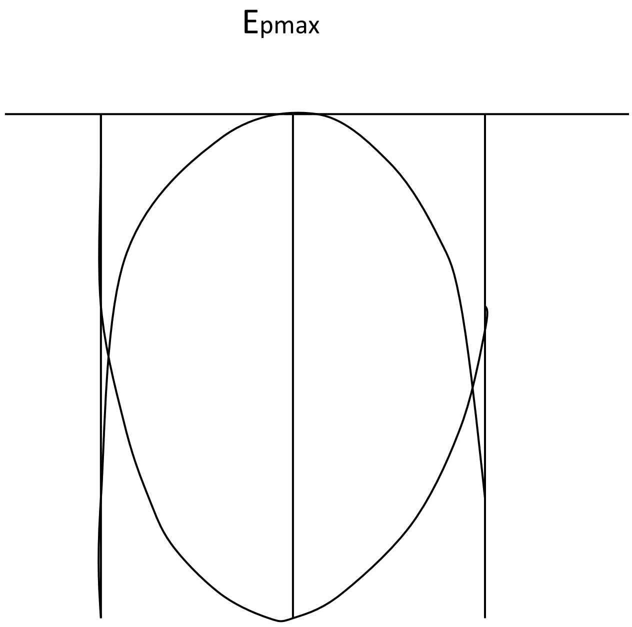
Fig. 51:



Al punt r2 l'E augmenta a mesura que e^- entri primer en contacte amb el camp electrònic i hi ha una oposició inicial que es converteix en una estabilitat més propera al nucli (p^+ i neutrons). Des de llavors tot es col·lapsa i el gràfic puja fins a l'infinit.

Ara dibuixeu una figura diferent (fig.52) per entendre com augmenta l'Ecinètica quan disminueix l'Epotencial:

Fig. 52:



Ecmax

Quan incloem l'operador d'energia potencial, trobem el primer cas: l' **oscil·lador harmònic,** és el cas més simple en què s'afegeixen l'operador V (x) (o V (r)), com el terme V (x, y, z) implica alguns càlculs avançats per trobar tan la funció d'ona com la seva *E associada.*

Tornant a la meva realitat, de vegades no sé qui va comentar el meu incident i vaig buidar els meus pares les vicissituds de la meva feina, que també donen un gir (ara també em fa mal). La meva presència no sembla equilibrar gaire enlloc, sinó la visió que altres extrets de mi.

Igual que els altres, no m'agrada perdre (però guanyar em fa respectar perquè no sé com podria, no sabria si he de canviar molts costums, forma de vida ...)
Tinc un estigma que em impedeix ser aquells que s'anomenen "fantasmes" (tant tens tan vals), o una mena de materialista o de xucladors de sang, que se'n riuen dels altres...); i l'altra és que "al món hi ha de tot i mal repartit".

ma = -kx sabent que F = kx (**llei de Hooke).**

$a = -kx / m = -\omega^2.x$ $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{k}{m}}$ i $V = kx^2/2$.

Llavors podem escriure sense por:

$$(-\hbar^2 / 2m).\left[\partial^2.\psi / \partial x^2\right] + \left[1/2.k.x^2.\psi\right] = E.\psi$$

i des d'aquí canviar les variables:

$$(-\hbar^2/2m).[\partial^2.\psi/\partial x^2] + [1/2.k.x^2 - E]\psi = 0$$

$\partial^2\psi/\partial x^2 + (\alpha - \beta^2 x^2).\psi = 0$ sabent que $\alpha = 2mE/\hbar^2$

$\hbar = h/2\pi$ i $\beta = \sqrt{mk}/\hbar = 2\pi m\nu/\hbar$

ν (freqüència) expressada en sg^{-1}
període (T) en sg
longitud d'ona (λ) en cm
c (velocitat de la llum) en cm / sg.

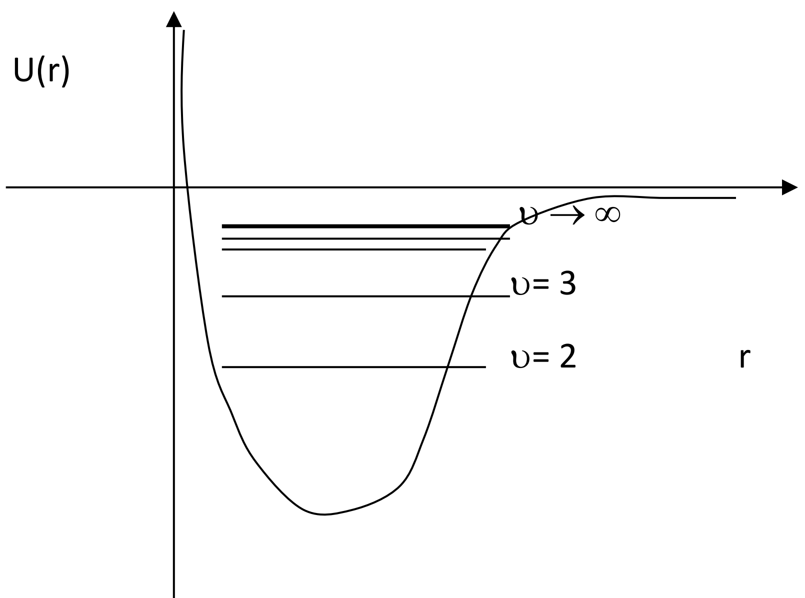
I ara, amb una gran comprensió, obtenim la fórmula d' E a través de la relació α / β: $\alpha/\beta = 2E / (h.\nu)$. dóna:
$E = (h.\ \nu\ / 2).\ (\ \alpha / \beta)$.

Perquè sabem que l'energia es quantifica mitjançant el quàntic nº (que va des de l'inicial fins al gir a través de l'acimut i el magnètic) i la fórmula d'E per la veu de Max Planck és $E = h.\nu$
podem veure que tots coincideixen si interpretem: $(\alpha / \beta) = (2\upsilon + 1)$ on υ = introduïu números enters= 0, 1, 2, 3 ...
ja que el **nº de divisió d'** energia és el mateix per a cada nivell amb o sense V (x).

La figura següent (Fig.53) veiem que el sistema **energètic** de l'oscil·lador harmònic es pot definir com a **vibracional** i val la pena:
$E = (2\upsilon + 1)\ h.\nu$

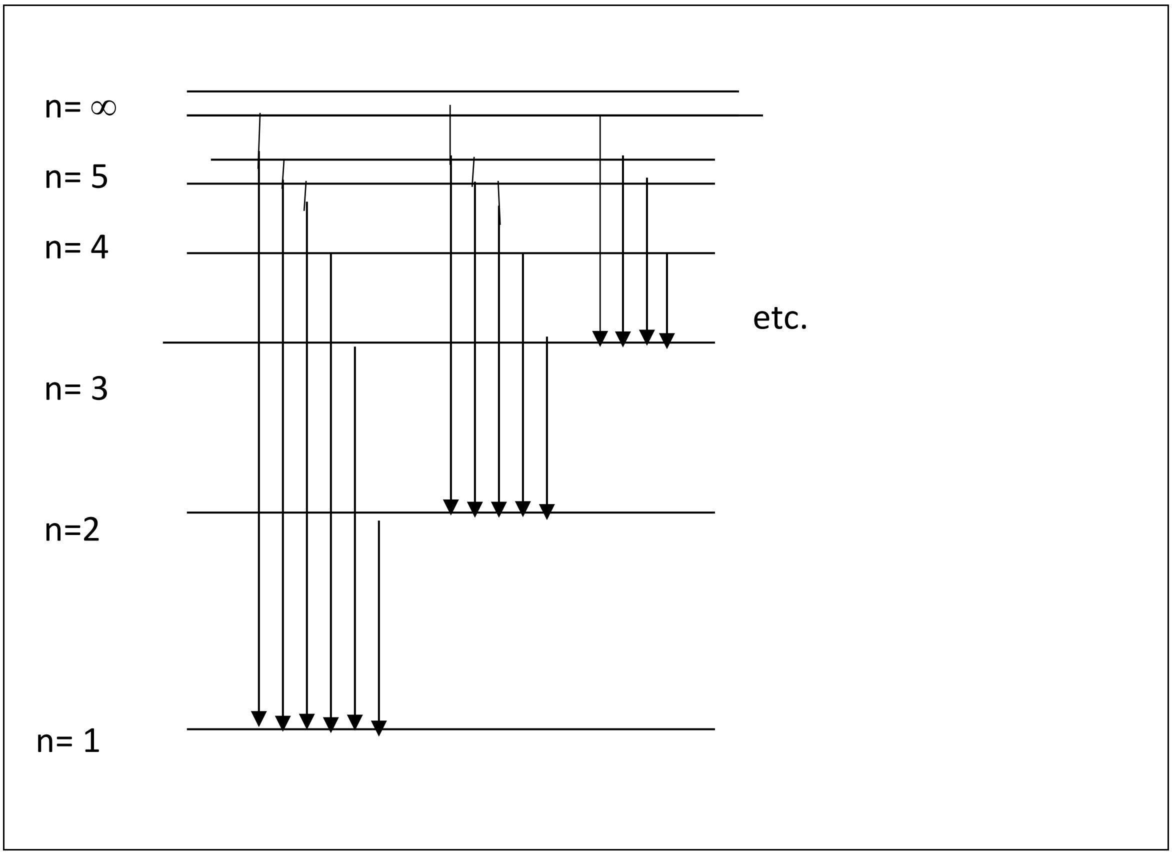
Energia que representa o neteja la quantitat de nivells dividits en una sola *línia* d'espectre

Fig.53:



$\upsilon = 1$

Com sabem que en el cas simple de l'espectre d'H_2 i de la partícula en un quadre tancat, la $E = - f(1/n^2)$ cosa que significa que com més ↑ la “n", la E té un valor cada vegada més gran, però ΔE és menor en relació exponencial (o dit d’una altra manera, parabòlicament). Això es pot veure en la imatge dels nivells d’energia següents; també es pot utilitzar per entendre el fenomen "cascada".



En altres molècules diatòmiques A- B fem servir la **massa reduïda** ($\mu = m_a . m_b / (m_a + m_b)$).

Quan es **gira,** prediuem que un cos que gira lliurement en els tres eixos té un $E\ 1/2.I_x.\omega_x{}^2 + 1/2.I_y.\omega_y{}^2 + 1/2.I_z.\omega_z{}^2$
$I_x = m.x^2$, $I_y = m.y^2$ ... on ω_x, ω_y ... són les velocitats angulars.

Si $L^2 = 2IE$ l'expressió d'E és la següent:
$E = L_x{}^2 / 2.I_x + L_y{}^2 / 2.I_y + L_z{}^2 / 2.I_z$.

En el cas d'una simple molècula diatòmica, s'utilitza "heteronuclear" (com A- B) s'usa la μ (la massa reduïda).

En rotors en els quals la **polaritat** és zero, $I_x = I_y = I_z$, de manera que $E = (1/2.I)(L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2)$

A més, si sospiteu que, com en el cas de la vibració, hi ha nivells amb $l^2 = n^2$. si acceptem que *n* →*n* +*1* o, d'altra manera, *n* tendeix a *n*+*1* ... benvinguts a la infinitum.