Kvantummechanika A – gyakorlat

6. gyakorlat

3-dimenziós problémák és az impulzusmomentum operátor

1. feladat (folytatása a múlt heti feladatnak)

A múlt héten megkerestük a centrális véges mély potenciálgödörben a lehetséges kötött állapotokat (felírtuk a hullámfüggvények alakját és az energiát megadó transzcendens egyenletet) az $l = 0$ és véges $V_0 > 0$ esetben. A feladatot az motiválja, hogy egy ilyen potenciál durva közelítése lehetne a nukleon-nukloen potenciálnak. Most oldjuk meg általános $l = 0, 1, 2, \ldots$ mellett a $V_0 \to \infty$ esetben a feladatot! Az effektív 1D Schrödinger-egyenlet, amit centrális potenciál esetén a gömbfüggvények kiredukálása után meg kell oldanunk, az alábbi alakot ölti:

$$\frac{\mathrm{d}^2 U(r)}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \underbrace{\left(V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)}_{V_{\mathrm{eff}}(r)}\right] U(r) = 0\ ,$$

ahol $U(r)$-et továbbra is az eredeti differenciálegyenlet szeparálható megoldása definiálja mint $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi) = U(r)/r\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)$. Fontos, hogy $U(r=0) \overset{!}{=} 0$, mivel így nem kapunk az origóban divergáló eredményt[1]. Emlékeztetőül a centrális potenciálunk

$$V(r) = \begin{cases} -V_0\ , & \text{ha } r < a \\ 0\ , & \text{ha } r > a \end{cases}\ .$$

Vizsgáljuk az egyenletet az $r < a$ esetben: ekkor

$$\frac{\mathrm{d}^2 U(r)}{\mathrm{d}r^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\big(-|E| + V_0\big)}_{k^2 > 0} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} U(r) = 0\ .$$

Legyen $\varrho = kr$, ekkor ezzel a változócserével a fenti egyenlet

$$\frac{\mathrm{d}^2 U(\varrho)}{\mathrm{d}\varrho^2} + U(\varrho) - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} U(\varrho) = 0\ .$$

Ezt követően legyen $R(\varrho) = kU(\varrho)/\varrho = kf(\varrho)$, azaz (jelölje a ϱ-szerinti eriváltat $(.)'$)

- $U(\varrho) = \varrho f(\varrho)$,
- $U'(\varrho) = f(\varrho) + \varrho f'(\varrho)$,
- $U''(\varrho) = 2f'(\varrho) + \varrho f''(\varrho)$.

[1] Ezen divergencia forrása, nem (csak) az $R(r) = U(r)/r$ alakból ered. Ha gömbi koordinátákban írjuk fel a Laplace-operátort, akkor lesz $\Delta(1/r) \propto \delta^{(3)}(\mathbf{r})$ tag, azaz megjelenik egy Dirac-delta (ahogy pl. *Elektrodinamika* órán láthattátok már). Ezt a divergenciát csak az $U(0) = 0$ határfeltétel ejti ki; továbbá remélem ezzel megválaszoltam egy a gyakorlaton felmerülő kérdést is a megoldások négyzetesen integrálhatóságáról.

Ennélfogva az egyenlet az $f(\varrho)$ függvényre felírva:

$$\varrho^2 f''(\varrho) + 2\varrho f'(\varrho) + \big(\varrho^2 - l(l+1)\big) f(\varrho) = 0 \ .$$

Ha kellően sok ideig nézi az ember a fenti egyenletet, akkor észreveheti, hogy megoldják az ún. szférikus Bessel-függvények, azaz az általnos megoldásunk felírható mint

$$f(\varrho) = c_1 j_l(\varrho) + c_2 y_l(\varrho) \ ,$$

ahol j_l az elsőfajú, míg a y_l a másodfajú szférikus Bessel-függvényeket jelöli, melyek legyárthatók a „normális” Bessel-függvényekből mint

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x) \qquad \text{és} \qquad y_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) \ .$$

Az első két elsőfajú szférikus Bessel-függvény:

- $j_0(x) = \sin(x)/x$,
- $j_1(x) = \sin(x)/x^2 - \cos(x)/x$.

Vegyük észre, hogy $j_0(x)$ éppen a múltheti feladat megoldása. Illetve az első két másodfajú szférikus Bessel-függvény:

- $y_0(x) = -\cos(x)/x$,
- $y_1(x) = -\cos(x)/x^2 - \sin(x)/x$.

Láthatjuk (vagy ha nem látjuk, akkor rajzoljuk fel), hogy a $j_n(x)$ függvények az $x \to 0$ esetben végesek maradnak, míg az $y_n(x)$-ek divergálni fognak, így az $U(0) = 0$ határfeltétel miatt el kell dobnunk őket, azaz $c_2 \stackrel{!}{=} 0$.

Most használjuk ki, hogy a $V_0 \to \infty$ esetben, azaz ha a potenciál végtelen nagyot ugrik, a hullámfüggvény eltűnik:

$$j_l(\varrho = ka) \stackrel{!}{=} 0 \ .$$

A fenti egyenlet minden l-re egy egyenletet ad meg, melynek megoldása az adott kötött állapot energiáját adja. Grafikus megoldásért ld. az 1. ábrát!

2. feladat (impulzusmomentum algebra)

Az előadáson a (pálya-)impulzusmomentumot az

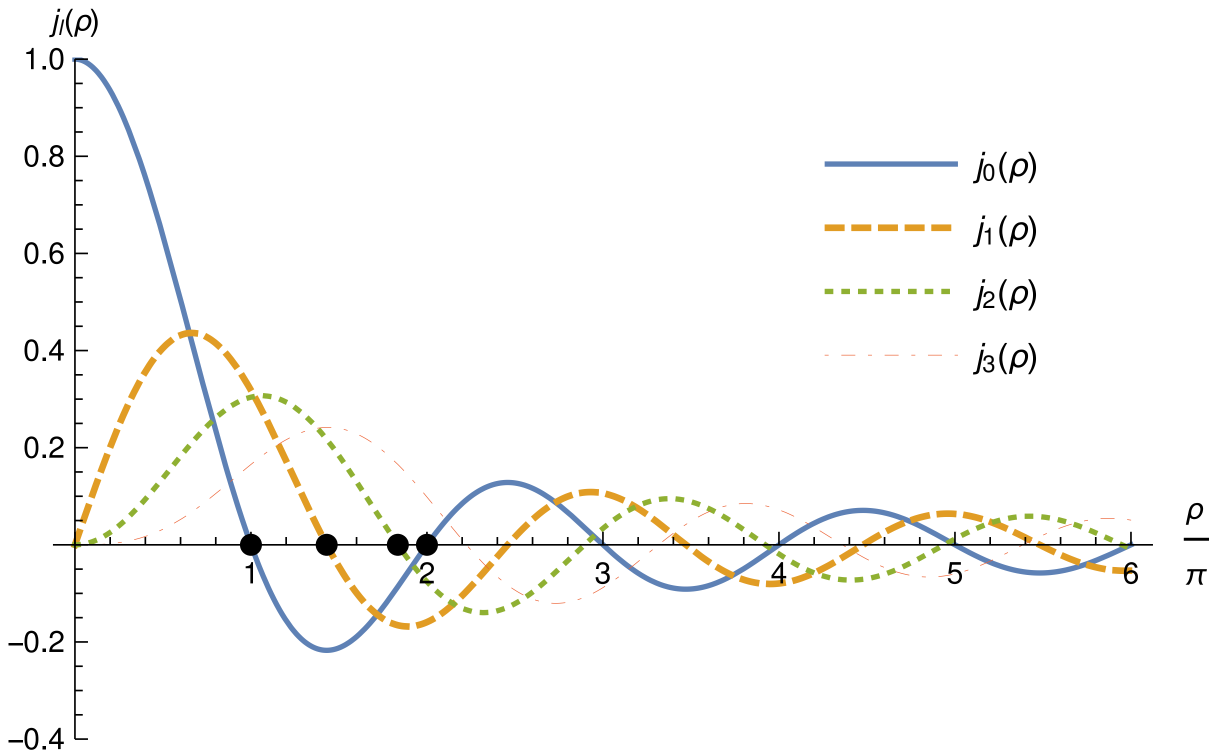
$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

képlet szerint definiáltuk, ahol $\hat{\mathbf{x}}$ és $\hat{\mathbf{p}}$ rendre a koordináta és az impulzus (vektor)operátor. Az impulzusmomentum operátor egy komponense indexesen a Levi-Civita-szimbólum segítségével könnyen felírható mint

$$\hat{L}_i = -i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \ .$$

Az egyszerűség kedvéért hagyjuk el a „kalap”-jelölést ebben a feladatban.

Számítsuk az alábbi kommutátorokat:



1. ábra. A fenti egyenlet grafikus megoldása különböző l-ekre. Az l kvantumszámok ebben az esetben is értelmezhetők mint „pályák”, azaz $l = 0 : s$, $l = 1 : p$, $l = 2 : d$, stb.

1. $[L_i, x_l] = ?$
   Hattassuk a kommutátort egy $f(x)$ segédfüggvényre!
   $$\begin{aligned}[L_i, x_l]f(x) &= (-i\hbar\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k)x_l f(x) - x_l(-i\hbar\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k)f(x) \\ &= -i\hbar\varepsilon_{ijk}x_j\big(\delta_{kl}f(x) + \cancel{x_l\partial_k f(x)}\big) + \cancel{i\hbar x_l\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k f(x)} = -i\hbar\varepsilon_{ijl}x_j f(x)\ ,\end{aligned}$$
   azaz $[L_i, x_l] = i\hbar\varepsilon_{ilj}x_j$. Vegyük észre, hogy kihasználtuk, hogy a Levi-Civita-szimbólum indexeit nyugodtan permutálhatjuk ciklikusan, de ha szomszédos indexeket felcserélünk, akkor előjelet kell váltanunk.

2. $[L_i, p_l] = ?$
   Újra hattassuk a kommutátort valamilyen $f(x)$ segédfüggvényre!
   $$\begin{aligned}[L_i, p_l]f(x) &= (-i\hbar\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k)(-i\hbar\partial_l)f(x) - (-i\hbar\partial_l)(-i\hbar\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k)f(x) \\ &= \cancel{-\hbar^2\varepsilon_{ijk}x_j\partial_k\partial_l f(x)} + \hbar^2\varepsilon_{ijk}\big(\delta_{lj}\partial_k f(x) + \cancel{x_j\partial_l\partial_k f(x)}\big) \\ &= i\hbar\varepsilon_{ilk}(-i\hbar\partial_k)f(x) = i\hbar\varepsilon_{ilk}p_k f(x)\ ,\end{aligned}$$
   azaz $[L_i, p_l] = i\hbar\varepsilon_{ilk}p_k$. Látható, hogy az impulzusmomentum operátor „ugyanúgy” kommutál az impulzus és a koordináta operátorokkal (ahogy az előadáson láthatáttok).

3. $[L_i, x^2] = ?$
   $$\begin{aligned}[L_i, x^2] &= L_i x_k x_k - x_k x_k L_i = L_i x_k x_k \underbrace{-x_k L_i x_k + x_k L_i x_k}_{0} - x_k x_k L_i \\ &= [L_i, x_k]x_k + x_k[L_i, x_k] = i\hbar\varepsilon_{ikl}[x_l x_k + x_k x_l] = 0\ .\end{aligned}$$

Az utolsó egyenlőségjel után azért írhatunk 0-át, mert a Levi-Civita-szimbólum antiszimmetrikus indexeinek cseréjére, míg a zárójeles kifejezés szimmetrikus, így szorzatuk csak 0 lehet.

4. $[L_i, p^2] = 0$, teljesen analóg módon belátható a 3. ponttal. A fentieknek az a következmény, hogy az impulzusmomentum kommutál a Hamilton-operátorral centrális potenciál ($V(r) = V(x^2)$ és analitikus) esetén, azaz

$$[L_i, H] = \frac{1}{2m} \underbrace{[L_i, p^2]}_{=0} + \underbrace{[L_i, V(r)]}_{=0} = 0 \ .$$

3. feladat (gömbfüggvények továbbra is...)

Legyen a hidrogénatomunk a

$$\psi(x, y, z) = R(r) \frac{z(x-y)}{x^2 + y^2 + z^2}$$

állapotban, és azt szeretnénk megtudni, hogy ekkor milyen valószínűséggel vesz fel $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ operátor meghatározott értékeket, azaz mik a lehetséges (l, m) kvantumszámok és azok mérési valószínűségei.

Tudjuk, hogy centrális potenciál esetén

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi(x, y, z) &= \hat{L}_z \psi(r, \vartheta, \varphi) = \hat{L}_z R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) \ , \\ \hat{L}^2 \psi(x, y, z) &= \hat{L}^2 \psi(r, \vartheta, \varphi) = \hat{L}^2 R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) \ . \end{aligned}$$

Írjuk fel gömbi koordinátákban a $\psi(x, y, z)$ állapotunkat! A nevező felírása egyszerű, mivel $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$, azaz tisztán sugárfüggő. A számláló

$$\begin{aligned} z(x-y) &= r\cos\vartheta \big[r\sin\vartheta\cos\varphi - r\sin\vartheta\sin\varphi \big] = r^2 \cos\vartheta \sin\vartheta \left[\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} - \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \right] \\ &= \frac{r^2 \cos\vartheta \sin\vartheta}{2} \big[(1+i) e^{i\varphi} + (1-i) e^{-i\varphi} \big] \ . \end{aligned}$$

A Wikipédiáról tudhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} Y_2^1(\vartheta, \varphi) &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{i\varphi} \\ Y_2^{-1}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{-i\varphi} \ , \end{aligned}$$

és észre is vehetjük, hogy ezek a gömbfüggvények jelennek meg a számlálóban. A normálási faktorokat lekövetve behelyettesíthetünk a teljes hullámfüggvénybe:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{R(r)}{\cancel{r^2}} \cancel{r^2} \sqrt{\frac{2\pi}{15}} \left[(1-i) Y_2^{-1}(\vartheta, \varphi) - (1+i) Y_2^1(\vartheta, \varphi) \right] \ .$$

Ezáltal a $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ hullámfüggvény szögfüggő részét kifejtettük a gömbfüggvények bázisán, amin már pontosan tudjuk, hogy hogyan hatnak a $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ operátorok. Leolvashatjuk, hogy az egyetlen lehetséges $\hat{L}^2$ sajátérték a $\hbar^2 l(l+1) = 6\hbar^2$ lesz, míg az $\hat{L}_z$ sajétérték $\hbar m = \pm\hbar$ lehet azonos valószínűséggel, mivel $|1+i|^2/|1-i|^2 = 1$.

4. feladat (rotátor)

Határozzuk meg a rögzített tengely körül forgó, Θ tehetetlenségi nyomatékú merev test stacionárius állapotainak hullámfüggvényeit és energianívóit. A Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2\Theta} \, .$$

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenletbe beírhatjuk $\hat{L}_z = -i\hbar\partial_\varphi$ explicit alakját, azaz

$$\hat{H}\Phi = -\frac{\hbar^2}{2\Theta}\partial_\varphi^2\Phi = E\Phi \, .$$

Ekkor a Schrödinger-egyenlet a klasszikus harmonikus oszcillátor egyenletét adja, így az általános hullámfüggvény egyszerűen

$$\Phi(\varphi) = Ae^{ik\varphi} + Be^{-ik\varphi} \, ,$$

ahol $k = 2\Theta/\hbar^2$. Mivel a rotátor körmozgást végez, így a $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ egyenlőségnek teljesülnie kell, azaz

$$e^{\pm ik2\pi} = 1 \, ,$$

ennélfogva a k „hullámszám" csak egész szám lehet. Ekkor az energia

$$E_k = \frac{k^2\hbar^2}{2\Theta} \, ,$$

míg a normált hullámfüggvény

$$\Phi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\varphi}$$

lesz.

Utolsó lépésként vizsgáljuk meg egy $\psi(t=0,\varphi) = A\cos^2\varphi$ alakú hullámfüggvény időfejlődését! Az A normálási konstans kiszámítható mint

$$\langle\psi|\psi\rangle = |A|^2\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \; |\psi|^2 = |A|^2\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \; \cos^2\varphi = |A|^2\frac{3\pi}{4} \stackrel{!}{=} 1 \, ,$$

ahonnan (valós és pozitív fázis megválasztásával) $A = 2/\sqrt{3\pi}$. Az időfejlesztő operátor (mint mindig) $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$. Az időfejlesztett $\psi(t,\varphi)$ felírásához fejtsük ki a $\psi(0,\varphi)$-t a $\Phi_k(\varphi)$ sajátfüggvények bázisán:

$$\begin{aligned}\psi(0) &= \frac{2}{\sqrt{3\pi}}\cos^2\varphi = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}\left[\frac{e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}}{2}\right]^2 = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}\left[\frac{1}{4}e^{2i\varphi} + \frac{1}{4}e^{-2i\varphi} + \frac{1}{2}\right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{3\pi}}\left[\frac{\sqrt{2\pi}}{4}\Phi_2 + \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\Phi_{-2} + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\Phi_0\right] \, .\end{aligned}$$

Tudjuk, hogy $\hat{U}(t)\Phi_k(\varphi) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\Phi_k(\varphi) = e^{-ik^2\hbar t/(2\Theta)}\Phi_k(\varphi)$, ennélfogva

$$\begin{aligned}\psi(t,\varphi) = \hat{U}(t)\psi(t=0,\varphi) &= \frac{2}{\sqrt{3\pi}}\left[\frac{1}{4}e^{-i2\hbar t/\Theta}e^{2i\varphi} + \frac{1}{4}e^{-i2\hbar t/\Theta}e^{-2i\varphi} + \frac{1}{2}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left[e^{-i2\hbar t/\Theta}\cos(2\varphi) + 1\right] \, .\end{aligned}$$