Kvantemekanik, afl. 7

Gorm Balle Feldstedt

Opgave 3, August 2006 Vi betragter et brintatom, hvor spin og finstruktureffekter negligeres. De normerede energiegenfunktioner betegnes $\phi_{nlm}(\vec{r})$. Vi indfører som ved hidtidig konventionel konvention

$$L_+ = L_x + iL_y$$

$$L_- = L_x - iL_y$$

1) Vis, at ϕ_{nlm} er en egenfunktion for L_+L_-, og bestem egenværdien.

Vi har pr. (4.112), at $L_+L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$, og vi ved pr. (4.118), at $L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m$; $L_z f_l^m = \hbar m f_l^m$, hvor $\phi_{nlm} = R_{nl} f_{lm}$, og R_{nl} ikke er en funktion af de variable, som de forskellige L-operatorer "arbejder med", og R_{nl} kan derfor behandles som en konstant. Det giver os

$$\begin{aligned} L_+L_-\phi_{nlm} &= R_{nl}(L^2 - L_z^2 + \hbar L_z) f_l^m \\ &= R_{nl}(\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 + \hbar^2 m) f_l^m \\ &= \hbar^2 (l(l+1) - m^2 + m)\phi_{nlm} \end{aligned}$$

Det vil sige, at L_+L_- er en egenværdi for ϕ_{nlm} med egenværdi $\hbar(l(l+1) - m^2 + m)$.

2) Gør rede for, at

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{21-1}(\vec{r}) + i\phi_{211}(\vec{r})$$

er en egenfunktion for energien samt L^2, men ikke for L_z.

Lader vi Hamilton-opratoren virke på ϕ får vi $E = E_2$ fra begge led i bølgefunktionen, da $n = 2$ for begge led. Man får derfor $\hat{H}\phi = E_2\phi$. Lader vi L^2 virke, får vi $\hbar^2 \cdot 2$ for begge led, da $l = 1$ for begge led. Det giver os $L^2\phi = 2\hbar\phi$. Lader vi L_z virke på ϕ, får vi to forskellige faktorer ud for de to led, idet $m \neq m'$, og derfor er $L_z\phi \neq \kappa\phi$.

3) Betragt det 3-dimensionale rum $\mathcal{H}$ udspændt af $e_1 = \phi_{21-1}, e_2 = \phi_{210}, e_3 = \phi_{211}$. Opskriv matrixrepæsentaionen af L^2, L_z, L_+ og L_-.

Vi lader de fire operatorer virke på basiselementerne:

$$
\begin{aligned}
[L^2]_{\mathcal{H}} &= \begin{pmatrix} \langle e_1|L^2 e_1\rangle & \langle e_2|L^2 e_1\rangle & \langle e_3|L^2 e_1\rangle \\ \langle e_1|L^2 e_2\rangle & \langle e_2|L^2 e_2\rangle & \langle e_3|L^2 e_2\rangle \\ \langle e_1|L^2 e_3\rangle & \langle e_2|L^2 e_3\rangle & \langle e_3|L^2 e_3\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix} \\
&= 2\hbar^2 I
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[L_z]_{\mathcal{H}} &= \begin{pmatrix} \langle e_1|L_z e_1\rangle & \langle e_2|L_z e_1\rangle & \langle e_3|L_z e_1\rangle \\ \langle e_1|L_z e_2\rangle & \langle e_2|L_z e_2\rangle & \langle e_3|L_z e_2\rangle \\ \langle e_1|L_z e_3\rangle & \langle e_2|L_z e_3\rangle & \langle e_3|L_z e_3\rangle \end{pmatrix} \\
&= \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

For L_+ og L_- kigger vi på resultaterne fra øvelse 4.21, der fortæller:

$$
L_+ f_l^m = A_l^m f_l^{m+1}, \; L_- f_l^m = B_l^m f_l^{m-1}
$$
$$
A_l^m = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}, \; B_l^m = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}
$$

Anvendelse af disse lader os rimelig nemt se, at

$$
\begin{aligned}
L_+\phi_{21-1} &= \hbar\sqrt{2}\phi_{210} \\
L_+\phi_{210} &= \hbar\sqrt{2}\phi_{211} \\
L_+\phi_{211} &= 0\hbar\phi_{212} = 0 \\
&\text{og} \\
L_-\phi_{21-1} &= 0\hbar\phi_{21-2} = 0 \\
L_-\phi_{210} &= \hbar\sqrt{2}\phi_{21-1} \\
L_-\phi_{211} &= \hbar\sqrt{2}\phi_{210}
\end{aligned}
$$

mens de resterende indgange er 0, da de er et indre produkt mellem forskellige tilstandes funktioner. Det giver, at

$$
[L_+]_{\mathcal{H}} = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}
$$
$$
[L_-]_{\mathcal{H}} = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

4) Bestem matrixrepræsentationen af L_x i $\mathcal{H}$.

Som sagt ved vi, at

$$
L_+ = L_x + iL_y
$$

$$L_- = L_x - iL_y$$

så $L_+ + L_- = 2L_x$, hvorfor

$$[L_x]_{\mathcal{H}} = \frac{L_+ + L_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

5) Bestem samtlige egenværdier og egenvektorer for L_x i $\mathcal{H}$

For at finde egenværdier skal vi løse ligningen

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} = 0$$

Vi finder, at

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda(\lambda^2 - 1) + \lambda = \lambda(-\lambda^2 + 2)$$

Hvilket fortæller os, at $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = \sqrt{2}, \lambda_3 = -\sqrt{2}$, så egenværdierne for L_x er $\Lambda_1 = 0, \Lambda_2 = \hbar, \Lambda_3 = -\hbar$.

Og vi går videre til at finde egenvektorerne:

$$\begin{aligned}
\operatorname{span}(v_1) &= N(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}) \\
&= N(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}) \\
&= \operatorname{span}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\operatorname{span}(v_2) &= N(\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{pmatrix}) \\
&= N(\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}) \\
&= \operatorname{span}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \\
\operatorname{span}(v_3) &= N(\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}) \\
&= N(\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}) \\
&= \operatorname{span}\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$