Afleveringsopgave 7

Martin Mikkelsen

Studienummer: 201706771

12. oktober 2018

I denne opgave betragtes et brintatom, idet spin og finstruktureffekter negligeres. De normede energiegenfunktioner betegnes $\phi_{nlm}(\vec{r})$. Hvor n er hovedkvantetallet, og l og m er de sædvanlige kvantetal hørende til henholdsvis $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Som sædvanlig indfører vi tillige operatorene

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \tag{1}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y \tag{2}$$

1. Vis, at ϕ_{nlm} er en egenfunktion for operatoren $\hat{L}_+\hat{L}_-$, og bestem egenværdien

Operatoren $\hat{L}_+\hat{L}_-$ omskrives ud fra (1) og (2). Der gælder også at $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+\hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - i(i\hbar\hat{L}_z) \end{aligned}$$

Operatorene har følgende egenværdier

$$\hat{L}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi \tag{3}$$

$$\hat{L}_z\psi = \hbar m\psi \tag{4}$$

Disse egenværdier indsættes i det omskrevne udtryk og energiegenfunktionen indsættes på hvert led (linearitet)

$$\begin{aligned} \hat{L}^2\psi - \hat{L}_z^2\psi - i(i\hbar\hat{L}_z)\psi &= \hbar^2 l(l+1)\psi - (\hbar m)^2\psi - i(i\hbar^2 m)\psi \\ &= (\hbar^2 l(l+1) - (\hbar m)^2 - i(i\hbar^2 m))\psi \\ &= \hbar^2(l^2 + l - m^2 - m)\psi \end{aligned}$$

2. Betragt tilstanden

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

Gør rede for at ψ er en egenfunktion for energien, samt for $\hat{L}^2$, men ikke for $\hat{L}_z$

Operatorenes egenfunktioner opskrives

$$\hat{L}^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m \tag{5}$$

$$\hat{L}_z f_l^m = \hbar m f_l^m \tag{6}$$

$$H f_l^m = E f_l^m \tag{7}$$

For $\hat{L}^2$: lineært da operatoren ganger og differentierer

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2\psi(\vec{r}) &= \hat{L}^2(\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{21-1}(\vec{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}} i\phi_{211}(\vec{r})) \\
&= \hat{L}^2\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{22-1} + \hat{L}^2\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_{211} \\
&= \hbar^2 l(l+1)\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{22-1} + \hbar^2 l(l+1)\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_{211} \\
&= \frac{2\hbar^2}{\sqrt{2}}(\phi_{22-1} + i\phi_{211})
\end{aligned}$$

ψ er en egenfunktion da kvantetallet l er det samme for begge ϕ For $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\psi &= \hat{L}_z(\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{21-1} + \frac{1}{\sqrt{2}} i\phi_{211}) \\
&= \hat{L}_z\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{21-1} + \hat{L}_z\frac{i}{\sqrt{2}}\phi_{211} \\
&= \hbar m\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{21-1} + \hbar m\frac{1}{\sqrt{2}} i\phi_{211}
\end{aligned}$$

ϕ er ikke en egenfunktion for $\hat{L}_z$ da m for $\phi_{21-1} \neq m$ for ϕ_{211}. Det følger heraf at ψ er en egenfunktion for energien da energien er egenværdi for Hamiltonoperatoren (7) og n for ϕ_{21-1} og ϕ_{211} er den samme.

3. Betragt nu det 3-dimensionale underrum,$\mathcal{H}$, udspændt at ϕ_{21-1}, ϕ_{210} og ϕ_{211}. Opskriv matrixrepræsentationen af $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ i underrummet $\mathcal{H}$
Basis for underrummet er givet ved $\{\phi_{21-1}, \phi_{210}, \phi_{211}\}$ For at bestemme matrixrepræsentationen anvendes

$$Q_{m',m} = \left\langle l, m' | \hat{Q} | l, m \right\rangle \tag{8}$$

For $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned} \hat{L}_z m', m &= \left\langle l, m' | \hat{L}_z | l, m \right\rangle \\ &= \hbar m \{l, m' | l, m\} \\ &= \hbar m \delta_{m',m} \end{aligned}$$

Dette kan opskrives som en matrix med søjlerne $m = 1, m = 0, m = -1$ og rækkerne $m' = -1, m' = 0, m' = 1$

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \}$$

Det samme gentages for $\hat{L}_+$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ m', m &= \left\langle l, m' | \hat{L}_+ | l, m \right\rangle \\ &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \delta_{m',m+1} \end{aligned}$$

Som matrix

$$\hat{L}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

For at bestemme $\hat{L}^2$ anvendes det at

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \tag{9}$$

$$\hat{L}^2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \left(\hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right)^2 - \hbar^2 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4. Bestem matrixrepresentationen af $\hat{L}_x$ i $\mathcal{H}$ $\hat{L}_x$ kan skrives som

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}$$

Derfor er matrixrepresentationen for operatoren

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

5. Bestem samtlige egenværdier og egenvektorer for $\hat{L}_x$ i underrummet $\mathcal{H}$

Egenværdierne for matricen bestemmes ved at trække egenværdien fra på diagonalen bestemme det karakteristiske polynomium. Polynomiet sættes lig 0 og løses for m. Egenværdien for $\hat{L}_x$ er $\hbar m_x$

$$\hat{L}_x - \lambda I = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\hbar m_x & 1 & 0 \\ 1 & -\hbar m_x & 1 \\ 0 & 1 & -\hbar m_x \end{pmatrix}$$

$$p_k = -\hbar^3 \cdot m(m^2 - 1) = 0$$

$$\Rightarrow m = -1, m = 0, m = 1$$

For $m_x = 1$ bestemmes egenvektoren:

$$[\hat{L}_x - \hbar]v = \hbar \begin{pmatrix} -1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} v = 0$$

$$v = \alpha \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

For $m_x = -1$

$$v = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

For $m_x = 0$

$$v = \gamma \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$