KAPITTEL 6 :
LØSNINGER AV 3D TIDSUAVHENGIG SCHRÖDINGERLIKNING

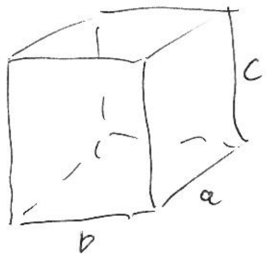
Likninga er, som kjent,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (6.1)$$

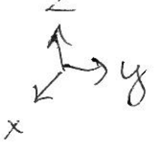
Alle typer koordinatsystemer kan i prinsippet brukes ved løsninga.
Vi velger selvsagt i praksis den som drar mest fordel av symmetriene i problemet.

6.1 Løsning i rektangulære koordinater (oppvarming!)

Se på "partikkel i boks":



$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{for } \{(0<x<a)\cap(0<y<b)\cap(0<z<c)\} \\ \infty & \text{ellers} \end{cases}$$



I boksen:
Antat separasjon av variable kan brukes

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \qquad (6.2)$$

$$\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \qquad (6.3)$$

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}\psi_2\psi_3 + \psi_1\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2}\psi_3 + \psi_1\psi_2\frac{\partial^2\psi_3}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1\psi_2\psi_3$$

$$\underbrace{\frac{1}{\psi_1}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}}_{\text{funksjon av bare } x!} + \underbrace{\frac{1}{\psi_2}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2}}_{\text{funksjon av bare } y!} + \underbrace{\frac{1}{\psi_3}\frac{\partial^2\psi_3}{\partial z^2}}_{\text{funksjon av bare } z!} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (6.4)$$

Hver av de tre kombinasjonene må da være lik en konstant:

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} = C_x \qquad (6.6)$$

$$\frac{1}{\psi_2}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2} = C_y \qquad (6.7)$$

$$\frac{1}{\psi_3}\frac{\partial^2\psi_3}{\partial z^2} = C_z \qquad (6.8)$$

hvor

$$C_x + C_y + C_z = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\underbrace{C_x}_{\frac{2mE_x}{\hbar^2}} + \underbrace{C_y}_{\frac{2mE_y}{\hbar^2}} + \underbrace{C_z}_{\frac{2mE_z}{\hbar^2}}$$

$$E_x + E_y + E_z = E$$

Tre likninger:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

(og tilsvarende for ψ_2 og ψ_3) (6.9)

Løsninger kjent fra avsnitt 4.2:

$$\psi_1(x) \propto \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n_x^2$$

(og tilsvarende i y og z); dvs. vi har:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x,y,z) &= A\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{b}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{c}\right) \\ E = E_x+E_y+E_z &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)\end{aligned}}$$

n_x, n_y, n_z positive heltall

Normaliseringskonstanten er selvsagt

$$A = \sqrt{\frac{8}{V}}, \quad V = abc$$

For kuber, $a=b=c$:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)$$

Se på for eksempel tilstandene

$$(1,1,2) \quad \text{og} \quad (1,2,1)$$

I begge tilfelle er

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6$$

så det er snakk om to forskjellige egentilstander for H med samme energi!

Et eksempel på degenerasjon.

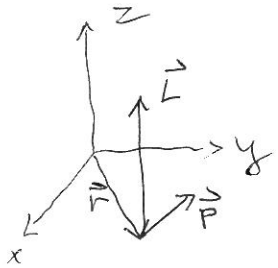
Slik degenerasjon oppstår ofte pga. symmetrier.

6.2 Dreieimpuls

Dette er et begrep vi må kunne behandle kvantemekanisk, før vi betrakter systemer med sfærisk symmetri.

Klassisk:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$



(Eksempel med $\vec{r}$ og $\vec{p}$ i xy-planet)

Kvantemekanisk:
Her innfører vi operatorene $\vec{R}$ og $\vec{P}$,

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \qquad (6.12)$$

Komponentform:

$$L_x = YP_z - ZP_y$$
$$L_y = ZP_x - XP_z$$
$$L_z = XP_y - YP_x$$

<u>Eksempel 6.1</u>

L_z er hermitesk: (Og det samme er selvsagt tilfelle for L_x og L_y!)

$$L_z^\dagger = (XP_y)^\dagger - (YP_x)^\dagger$$
$$= P_y^\dagger X^\dagger - P_x^\dagger Y^\dagger \quad \text{(hermitisitet, se forrige kapittel)}$$
$$= P_y X - P_x Y \quad \text{(kommutativitet)}$$
$$= XP_y - YP_x$$
$$= L_z$$

*

Hvor godt kan vi måle dreieimpuls?
Anta at vi skulle målt $\vec{L}$ <u>eksakt</u> for en egentilstand med L_x, L_y, L_z komponenter –
Det er bare mulig såfremt alle kommuterer med hverandre.

Betrakt

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y\,,\; ZP_x - XP_z] \qquad (6.13)$$

Fra før (og tilsvarende for $[Y, P_y]$ og $[Z, P_z]$):

$$[X, P_x] = i\hbar$$

Men for de andre komponentene, for eksempel:

$$[X, P_y]\psi = x(-i\hbar)\frac{\partial\psi}{\partial y} - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial y}(x\psi) = 0$$

Samlet:

$$\boxed{[R_\alpha, P_\beta] = i\hbar\,\delta_{\alpha\beta}\ , \quad \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \alpha \neq \beta \end{cases}}$$

Der $\delta_{\alpha\beta}$ er en <u>Kronecker-delta</u>.

Tilsvarende finner vi:

$$[X, Y] = [X, Z] = [Y, Z] = 0$$

$$[P_x, P_y] = [P_x, P_z] = [P_y, P_z] = 0$$

Innsetting:

$$[L_x, L_y] = [YP_z, ZP_x] - \underbrace{\underbrace{[ZP_y, ZP_x]}_{=0} - \underbrace{[YP_z, XP_z]}_{=0}}_{\text{(bare kommuterende faktorer)}} + [ZP_y, XP_z]$$

$$= YP_zZP_x - ZP_xYP_z + ZP_yXP_z - XP_zZP_y$$

$$= YP_xP_zZ - YP_xZP_z + XP_yZP_z - XP_yP_zZ$$

$$= YP_x[P_z, Z] - XP_y[P_z, Z]$$

$$= -i\hbar(YP_x - XP_y)$$

$$= i\hbar L_z$$

og generelt:

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}L_k}$$

der ε_{ijk} er <u>Levi-Civita-symbolet</u>:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) = (xyz) \text{ syklisk permutert} \\ -1 & (ijk) = (yxz) \quad \text{"} \quad \text{"} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

VI KAN IKKE MÅLE TO KOMPONENTER AV $\vec{L}$ SAMTIDIG!

Derimot, som vi skal se nedenfor:

$\boxed{\text{VI KAN MÅLE KVADRATET AV } \vec{L} \text{ OG EN KOMPONENT SAMTIDIG!}}$

Vi velger gjerne denne komponenten til å være L_z. Dette fordi polarvinkelen θ omkring z-aksen vanligvis velges i egenfunksjoner i sfæriske polarkoordinater.

Men det er ingenting spesielt ved z-komponenten!

Lag kommutator:

$$[L^2, L_z] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z]$$

$$= [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + \overbrace{\cancel{[L_z^2, L_z]}}^{=0}$$

$$= L_x L_x L_z - \underbrace{L_z L_x L_x}_{L_x L_z L_x + i\hbar L_y L_x} + L_y L_y L_z - \underbrace{L_z L_y L_y}_{L_y L_z L_y - i\hbar L_x L_y}$$

Her kunne også relasjonen $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ (forelesningene samt forrige kapittel) vært brukt.

$$= L_x \underbrace{[L_x, L_z]}_{-i\hbar L_y} - i\hbar L_y L_x + L_y \underbrace{[L_y, L_z]}_{i\hbar L_x} + i\hbar L_x L_y$$

Disse kansellerer

Disse kansellerer også.

$$= 0$$

$\boxed{\begin{array}{l}\text{EN PARTIKKEL KAN VÆRE I EN} \\ \text{EGETILSTAND FOR } L^2 \text{ OG } L_z \\ \text{SAMTIDIG:} \\ \qquad [L^2, L_z] = 0\end{array}}$

Egenverdiene er begrenset til en liten klasse av mulige verdier, som vi straks skal få se!

To slags dreieimpuls med forskjellig notasjon:

- Banedreieimpuls, $\vec{L}$
- Spinn ("indre" dreieimpuls), $\vec{S}$

Disse adderer seg til total dreieimpuls, $\vec{J}$.

Vi skal anta at

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$$
$$[J^2, J_i] = 0$$

ψ egenfunksjon for J^2 og J_z

og vi skal definere <u>stigeoperatorer</u> for å finne tillatte egenverdier, <u>uten</u> først å finne hvordan bølgefunksjonen ser ut!

Definisjoner:

$$\boxed{\begin{aligned} J_+ &= J_x + i J_y \\ J_- &= J_x - i J_y \end{aligned}}$$

løfteoperator
senkeoperator

(Disse er <u>ikke</u> hermiteske)

Anta nå

$$\left.\begin{aligned} J^2\psi &= \alpha\psi \\ J_z\psi &= \beta\psi \end{aligned}\right\}$$ felles egenfunksjon for J^2 og J_z

hvor

$$J_+\psi = \phi$$

Pga. kommuteringer:

$$J^2\phi = J^2(J_+\psi) = J_+(J^2\psi) = \alpha J_+\psi = \alpha\phi$$

Men J_+ og J_z kommuterer ikke:

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] &= [J_z, J_x + i J_y] \\ &= [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] \\ &= i\hbar J_y + \hbar J_x \\ &= \hbar J_+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_z\phi &= J_z(J_+\psi) \\ &= J_+ J_z\psi + \hbar J_+\psi \\ &= (\beta + \hbar)\phi \end{aligned}$$

J_+ transformerer ψ med egenverdiene α og β til en ny bølgefunksjon med egenverdier α og $(\beta + \hbar)$!

Tilsvarende ville vi funnet for J_-:

$$J_-\psi = \phi'$$

der

$$J_z\phi' = (\beta - \hbar)\phi'$$

Men, de mulige egenverdiene for J_z har en øvre grense, og tilsvarende, de for J_- en nedre grense:

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \Rightarrow$$

$$\underbrace{(\psi, J^2\psi) - (\psi, J_z\psi)}_{=\alpha-\beta^2} = \underbrace{(\psi, J_x^2\psi)}_{\substack{(J_x\psi, J_x\psi)\\ \geq 0}} + \underbrace{(\psi, J_y^2\psi)}_{\substack{(J_y\psi, J_y\psi)\\ \geq 0}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\beta^2 \leq \alpha}$$

En vektors z-komponent kan ikke være større enn vektoren sjøl!

For å få dette konsistent, må vi kreve at det fins egenfunksjoner ψ_{maks} og ψ_{min} hvor

$$\left.\begin{aligned} J_+\psi_{maks} &= 0 \\ J_-\psi_{min} &= 0 \end{aligned}\right\}$$

de kan ikke fortsette å virke ubegrenset mange ganger!

Kjedelig men enkelt å vise:

$$J^2 = J_-J_+ + J_z^2 + \hbar J_z \qquad (6.14)$$

$$J^2 = J_+J_- + J_z^2 - \hbar J_z \qquad (6.15)$$

Fra den første:

$$J^2\psi_{maks} = J_-J_+\psi_{maks} + J_z^2\psi_{maks} + \hbar J_z\psi_{maks}$$

$$\alpha\,\psi_{maks} = 0 + \beta^2\psi_{maks} + \hbar\,\beta_{maks}\psi_{maks}$$

$$\alpha = \beta_{maks}^2 + \hbar\beta_{maks} \qquad (6.16)$$

Tilsvarende, fra den andre:

$$\alpha = \beta_{min}^2 - \hbar\beta_{min} \qquad (6.17)$$

Subtraher:

$$0 = \beta_{maks}^2 - \beta_{min}^2 + \hbar(\beta_{maks} + \beta_{min})$$

Løsning (den andre er ufysisk):

$$\beta_{min} = -\beta_{maks} \qquad (6.18)$$

Men man kommer fra den ene til den andre ved å anvende J_+ et antall n ganger:

$$\beta_{maks} = \beta_{min} + n\hbar \qquad (6.19)$$

De to siste likningene gir til sammen:

$$\beta_{maks} = n\frac{\hbar}{2} \qquad (6.20)$$

Sett så et nytt tall, j: $\quad j = \frac{n}{2}$

$\Rightarrow$

$$j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \qquad (6.21)$$

(6.16) og (6.20) gir:

$$\alpha = j^2\hbar^2 + j\hbar^2 = j(j+1)\hbar$$

Samtidig, fra (6.19)/(6.20):

$$\beta = -j\hbar, -j\hbar+\hbar, \ldots, (j-1)\hbar, j\hbar$$

eller $\qquad \beta = m_j\hbar, \quad m_j \in \{-j, -j+1, \ldots, j-1, j\}$

Samla:

Med ψ egenfunksjon for J^2 og J_z, så er

$$\boxed{\begin{aligned} &J^2\psi = \hbar^2 j(j+1) && (6.22)\\ &j \in \{0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots\} && (6.23)\\ &J_z\psi = m_j\hbar\psi && (6.24)\\ &m_j \in \{-j, -j+1, \ldots, j-1, j\} && (6.25) \end{aligned}}$$

Vi har utleda dette uten å bruke eksplisitte bølgefunksjoner!

I neste avsnitt:

Forberedelse av anvendelse på hydrogenatomet!