Isotropt potensial $V(r)$ i to dimensjoner

[PCH 5.3]

Realiserbart: Hvis systemets romlige utstrekning L_z i z-retningen er så liten at

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_z^2} \gg k_B T,$$

er alle partiklene i tilstander med $n_z = 1$.

Da er z-frihetsgraden "frosset ut", og systemet er å betrakte som 2-dimensjonalt.

TUSL for partikkel med masse μ: [Trenger nå "m" som kvantetall!]

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(r,\varphi) + V(r)\Psi(r,\varphi) = E\,\Psi(r,\varphi)$$

$$x = r\cos\varphi, \quad y = r\sin\varphi, \quad r = \sqrt{x^2+y^2}, \quad \varphi = \arctan(y/x)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{y/x^2}{1+(y/x)^2}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$= \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

osv. osv. med kjerneregel

$$\Rightarrow \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$\Rightarrow$ Vi ser nå at TUSL separerer når vi setter $\Psi(r,\varphi) = R(r)\,\Phi(\varphi)$ og ganger ligningen med $-2\mu r^2/\hbar^2 \Psi$:

$$\frac{1}{R}r^2\left\{\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]R\right\} = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$$

$\Rightarrow$ Begge sider er lik en konstant, som settes lik m^2

$$\Rightarrow \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\Phi = 0$$

[Fokuserer ikke på lign. for $R(r)$; løsningen av den avh. selvsagt av $V(r)$]

Løsning: $\Phi(\varphi)\sim e^{im\varphi}$. Entydig løsn. $\Rightarrow$ $\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)$

$$\Rightarrow e^{im\cdot 2\pi}=1 \Rightarrow m=0,\pm1,\pm2,----$$

$$\Rightarrow \Psi(r,\varphi)=R(r)\cdot e^{im\varphi}$$

[Lar R ta seg av normeringen]

Dreieimpuls:

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p} = (x\hat{x}+y\hat{y})\times(p_x\hat{x}+p_y\hat{y}) = (xp_y-yp_x)\hat{z} = L_z\hat{z}$$

"Kvantisering": $p_x\to\hat{p}_x=(\hbar/i)\partial/\partial x$, $\quad p_y\to\hat{p}_y=(\hbar/i)\partial/\partial y$

$$\Rightarrow L_z\to\hat{L}_z = x\hat{p}_y-y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

I polarkoordinater:

$$x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x} = r\cos\varphi\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - r\sin\varphi\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

$$\hat{L}_z\Psi(r,\varphi) = R(r)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi} = R(r)\,m\hbar\,e^{im\varphi} = m\hbar\,\Psi(r,\varphi)$$

$\Rightarrow$ $\Psi(r,\varphi)=R(r)e^{im\varphi}$ er egenfunksjoner til $\hat{L}_z$

med egenverdier $m\hbar$

$\Rightarrow$ Partikkel i 2D rotasjonssymmetrisk potensial $V(r)$ har kvantisert dreieimpuls, $L_z=0,\pm\hbar,\pm2\hbar,----$

Kompatible fysiske størrelser og simultane egenfunksjoner:

[PCH 4.1 ; DJG 3.5 IØ 4.1]

A og B er kompatible størrelser dersom vi kan ha $\Delta A = \Delta B = 0$, dvs skarpt definerte verdier for A og B samtidig.

Da vet vi at $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$.

Og da må partikkelen være i en tilstand Ψ som er egentilstand til både $\hat{A}$ og $\hat{B}$, dvs $\hat{A}\Psi = A\Psi$ og $\hat{B}\Psi = B\Psi$; [jf Målepostulatet]

funksjonen Ψ er simultan egenfunksjon til $\hat{A}$ og $\hat{B}$.

Vi ser at med isotropt potensial $V(r)$ i 2D er $\Psi(r,\varphi) = R(r)\exp(im\varphi)$ simultane egenfunksjoner til $\hat{H}$ og $\hat{L}_z$, og at $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$. Da kan E og L_z ha skarpe verdier samtidig ; de er kompatible størrelser.

Symmetriegenskaper og paritet

[PCH 4.2 ; DJG — IØ 4.2]

Paritetsoperatoren $\hat{P}$ "speiler" en funksjon gjennom origo:

$$\boxed{\hat{\mathcal{P}}\,\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})}$$

1D : $x \to -x$

2D : $x, y \to -x, -y$ evt $r, \varphi \to r, \varphi + \pi$

3D : $x, y, z \longrightarrow -x, -y, -z$

evt. $r, \theta, \varphi \longrightarrow r, \pi - \theta, \varphi + \pi$

(evt. $\rho, \varphi, z \longrightarrow \rho, \varphi + \pi, -z$)

Dermed,

hvis $\Psi(-\vec{r}) = \Psi(\vec{r})$: $\hat{P}\,\Psi(\vec{r}) = +1\,\Psi(\vec{r})$; like paritet

hvis $\Psi(-\vec{r}) = -\Psi(\vec{r})$: $\hat{P}\,\Psi(\vec{r}) = -1\,\Psi(\vec{r})$; odde paritet

Dvs,

mulige egenverdier til $\hat{P}$ er $p = \pm 1$, og egenfunksjoner er alle funksjoner med bestemt paritet, slik at $\Psi(-\vec{r}) = \pm\Psi(\vec{r})$.

For løsninger av TUSL med isotropt $V(r)$ i 2D:

$$e^{im(\varphi+\pi)} = e^{im\varphi}\cdot\left(e^{i\pi}\right)^m = e^{im\varphi}\cdot(-1)^m$$

$\Rightarrow$ Like paritet hvis $m = 0, \pm 2, \pm 4, \ldots$; odde hvis $m = \pm 1, \pm 3, \ldots$:

$$\hat{P}\,\Phi_m = (-1)^m\,\Phi_m$$

Eks: Isotrop harmonisk osc. i 2D, $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$, $r^2 = x^2 + y^2$.

For 1. eksiterte energinivå $E_1 = 2\hbar\omega$, bestem simultane egenfunksjoner til $\hat{H}$ og $\hat{L}_z$ og tilhørende egenverdier L_z.

Løsn: $E = (n_x + 1/2 + n_y + 1/2)\hbar\omega = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$

$\Rightarrow$ vi kan bruke $\Psi_{10} = C\,x\,e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}$ og $\Psi_{01} = C\,y\,e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}$,

men Ψ_{10} og Ψ_{01} er ikke egenfunksjoner til $\hat{L}_z$:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}r\cos\varphi = -\frac{\hbar}{i}r\sin\varphi = -\frac{\hbar}{i}y$$

$\Rightarrow$ vi kan bruke $\Psi_{10} \pm i\,\Psi_{01} = C\,r\underbrace{(\cos\varphi \pm i\sin\varphi)}_{=e^{\pm i\varphi}}e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}$

Da er $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}(\Psi_{10} \pm i\Psi_{01}) = \pm\hbar(\Psi_{10} \pm i\Psi_{01}) \Rightarrow L_z = \pm\hbar$

Dreieimpuls i tre dimensjoner

[PCH 5.4 ; DJG 4.3 ; IØ 5.2]

Som i 2D spiller dreieimpulsen en sentral rolle også i 3D når potensialet $V(r)$ er isotropt.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Åpenbart hensiktsmessig med kulekoordinater her.
Vi har, med $f = f(r, \theta, \varphi)$:

$$df = \nabla f \cdot d\vec{s} = \nabla f \cdot (\hat{r}\, dr + \hat{\theta}\, r\, d\theta + \hat{\varphi}\, r \sin\theta\, d\varphi)$$

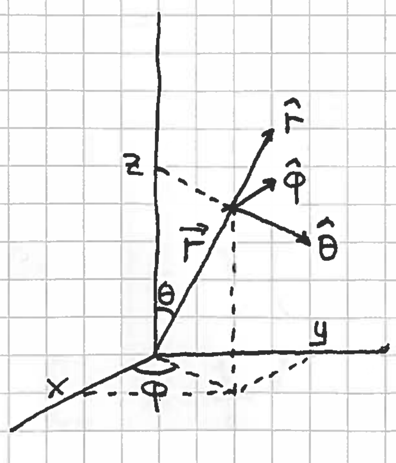
og dessuten $df = (\partial f/\partial r)\, dr + (\partial f/\partial \theta)\, d\theta + (\partial f/\partial \varphi)\, d\varphi$

Direkte sammenligning $(df = df)$ gir nå

$$\nabla f = \hat{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi}$$

Dvs, gradientoperatoren er i kulekoordinater

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$



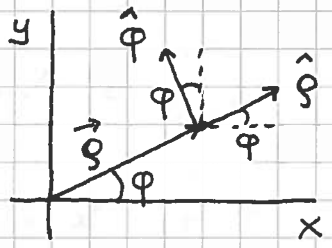
$$\hat{r} \times \hat{r} = 0 \qquad (\vec{r} = r\hat{r})$$
$$\hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\varphi}$$
$$\hat{r} \times \hat{\varphi} = -\hat{\theta}$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

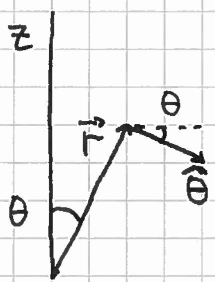
Vi trenger operator for $L = |\vec{L}|$, evt. $L^2 = \vec{L}\cdot\vec{L}$.
Da kan vi kvadrere $\hat{\vec{L}}$ fra forrige side, men må huske at $\hat{\varphi}$ og $\hat{\theta}$ begge er funksjoner av φ og θ.

Like enkelt å finne $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ og $\hat{L}_z$ og deretter regne ut $\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$.

Trenger da $\hat{\varphi}$ og $\hat{\theta}$ uttrykt ved $\hat{x}$, $\hat{y}$ og $\hat{z}$:



$$\hat{\varphi} = -\hat{x}\sin\varphi + \hat{y}\cos\varphi$$
$$\hat{\rho} = \hat{x}\cos\varphi + \hat{y}\sin\varphi$$



$$\hat{\theta} = \hat{\rho}\cos\theta - \hat{z}\sin\theta$$
$$= \hat{x}\cos\varphi\cos\theta + \hat{y}\sin\varphi\cos\theta - \hat{z}\sin\theta$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left(-\hat{x}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{y}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{x}\cos\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \hat{y}\sin\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad \text{(som vi visste fra før)}$$

Nå er $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$, men ved utregning av $\hat{L}_x^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x$ og $\hat{L}_y^2 = \hat{L}_y \hat{L}_y$ må vi passe på å derivere alt som deriveres skal, og bruke produkt- og kjerneregel riktig. [Se notater 2016 s. 95 for detaljer.] Resultatet er:

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\}$$

På tilsvarende måte kan vi regne ut

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2}$$

slik at $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$ kan uttrykkes på formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$= \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$$

Hva er nå <u>kompatible</u> størrelser? (Dvs: Mulighet for samtidig skarpe verdier og simultane egenfunksjoner.)

Må sjekke om operatorene kommuterer.

- E og L, evt. E og L^2:

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = [\underbrace{\hat{K}_r + V(r)}_{\text{"angår" kun } r} + \underbrace{\hat{K}_L}_{\sim \hat{\vec{L}}^2}, \underbrace{\hat{\vec{L}}^2}_{\text{kun } \theta, \varphi}]$$

$$= 0$$

$\Rightarrow$ E og L kan måles skarpt samtidig

• L_i og L_j $\quad (i,j = x,y,z)$:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \left[y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y},\ z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \right]$$

disse kommuterer

$$= -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial z} z\frac{\partial}{\partial x} - z\frac{\partial}{\partial x} y\frac{\partial}{\partial z} + z\frac{\partial}{\partial y} x\frac{\partial}{\partial z} - x\frac{\partial}{\partial z} z\frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$= -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right) = -\hbar^2 \cdot \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_z$$

Tilsvarende: $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar L_x$, $\quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$

Konklusjon: Dreieimpulsen $\vec{L}$, absoluttverdi og retning, kan ikke måles skarpt! Bare en komponent L_j kan være skarp til enhver tid!

• L_j og L, evt. L_j og L^2 :

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] + \underbrace{[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x]}_{=0}$$

$$[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_x \overbrace{- \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x \hat{L}_y}^{\text{Legger her til null}} - \hat{L}_x \hat{L}_y \hat{L}_y$$

$$= \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{L}_y$$

$$= \hat{L}_y \cdot (-i\hbar) \hat{L}_z + (-i\hbar) \hat{L}_z \hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \text{.... tilsvarende triks...} = \hat{L}_z i\hbar \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z = -[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x]$$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] = 0, \quad \text{og tilsvarende} \quad [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_y] = 0 = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z]$$

Konklusjon: $L = |\vec{L}|$ og en av komponentene til $\vec{L}$ kan måles skarpt samtidig.

Alt i alt:

> Med isotropt potensial $V(r)$ er E, L^2 og (f.eks.) L_z kompatible størrelser som kan være skarpt definert samtidig. Da kan vi også finne simultane egenfunksjoner for $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$.

Egenverdier og egenfunksjoner til $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$

Fra $V(r)$ i 2D (s. 83) vet vi at

$$\hat{L}_z \Phi = L_z \Phi \quad \text{med} \quad \Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad L_z^m = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Fra s. 88:

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Da innser vi at produktløsninger

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi) = \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi}$$

må være egenfunksjoner til både $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}_z Y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Theta(\theta) e^{im\varphi} = \Theta(\theta) \frac{\hbar}{i} im e^{im\varphi} = m\hbar Y$$

$$\hat{\vec{L}}^2 Y = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta(\theta) e^{im\varphi}$$

Siden $[L^2] = [\hbar^2]$, kan vi skrive

$$\hat{\vec{L}}^2 Y = L^2 Y \quad \text{med} \quad L^2 = \hbar^2 \cdot l(l+1), \quad \text{der } l$$

foreløpig er en ukjent konstant. Ligningen for Θ blir da:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1) \right\} \Theta = 0 \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$