Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

6. óra

<u>1. feladat</u>: Határozzuk meg az összes gömbfüggvényt $l = 0, 1, 2$ -re!

Megoldás: A gömbfüggvények definíciója:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

ahol

$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-\cos^2\theta)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}}(\cos^2\theta - 1)^l$$

a Legendre-polinomok. Ezekre érvényes, hogy

$$P_l^{-m}(\cos\theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta),$$

így

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m (Y_l^m)^*(\theta, \varphi).$$

Ez azt jelenti, hogy elegendő pozitív m-re számolni, a fentiek szerint ebből már a negatív értékekre is adódik a megoldás (tudjuk, hogy fix l esetén $m = l, l-1, l-2, ..., -l$ lehet).

<u>l=0</u> $\longrightarrow m = 0$:

$$P_0^0(\cos\theta) = 1 \qquad \longrightarrow \qquad Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

<u>l=1</u> $\longrightarrow m = 1, 0, -1$:

$$P_1^1(\cos\theta) = -\sqrt{1-\cos^2\theta} \qquad \longrightarrow \qquad Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}.$$

$$P_0^1(\cos\theta) = \cos\theta \qquad \longrightarrow \qquad Y_0^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta.$$

<u>l=2</u> $\longrightarrow m = 2, 1, 0, -1, -2$: ($P_2^m$ részletezése nélkül)

$$Y_2^2(\theta, \varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{2i\varphi},$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi},$$

$$Y_2^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\Big(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Big).$$

HF1: Ellenőrizzük $Y_2^2(\theta,\varphi)$-t és $Y_2^1(\theta,\varphi)$-t!

2. feladat: Milyen értéket és mekkora valószínűséggel mérhetünk az impulzusmomentum abszolútérték-négyzetére a

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\kappa}\frac{e^{-\kappa r/2}}{r}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\sin^2\theta + \cos\theta + 2)\sqrt{\frac{15}{226}}$$

hullámfüggvénnyel leírható kvantumállapotban?

Megoldás: Kiszámítható, hogy $\int|\Psi|^2 dV = 1$, vagyis fizikai állapotról van szó. HF2: Ellenőrizzük a normát!

A megoldáshoz szükség van a Ψ hullámfüggvény impulzusmomentum sajátállapotok (gömbfüggvények) szerinti kifej-tésére:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{l,m} c_{lm}R(r)Y_l^m(\theta,\varphi),$$

ahol a c_{lm} számok a keresendő kifejtési együtthatók, melyek abszolútérték-négyzete adja a mérési valószínűségeket. Az $R(r)$ tetszőleges függvény (normálástól eltekintve), itt élhetünk az

$$R(r) = \sqrt{\kappa}\frac{e^{-\kappa r/2}}{r}$$

választással. Azonos átalakítások után könnyen látható, hogy

$$\sin^2\theta + \cos\theta + 2 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\cdot Y_1^0 - \frac{2}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\cdot Y_2^0 + \frac{8}{3}\sqrt{4\pi}\cdot Y_0^0,$$

vagyis

$$\Psi = \sqrt{\kappa}\frac{e^{-\kappa r/2}}{r}\Big[\frac{8}{3}\sqrt{\frac{30}{226}}\cdot Y_0^0 + \sqrt{\frac{10}{226}}\cdot Y_1^0 - \frac{2}{3}\sqrt{\frac{6}{226}}\cdot Y_2^0\Big].$$

L^2 -re $(l(l+1)\cdot\hbar^2)$ mérhetünk

$$\longrightarrow 0\cdot\hbar^2\text{-et}\quad P_0^0 = |c_{00}|^2 = \frac{64}{9}\frac{30}{226} \approx 94.4\%,$$

$$\longrightarrow 2\cdot\hbar^2\text{-et}\quad P_1^0 = |c_{10}|^2 = \frac{10}{226} \approx 4.42\%,$$

$$\longrightarrow 6\cdot\hbar^2\text{-et}\quad P_2^0 = |c_{20}|^2 = \frac{4}{9}\frac{6}{226} \approx 1.18\%$$

valószínűséggel. Megjegyzés: a gömbfüggvények az impulzusmomentum z komponensének is sajátállapotai ($m\cdot\hbar$ sajátértékkel), ezért látható, hogy 100% valószínűséggel $m=0$ mérhető.