Kvantummechanika gyakorlat
(2013/14 őszi félév)

7. óra

1. feladat: Egy részecske olyan kvantumállapotban van, mely a z-tengely körüli forgatásokra nézve invariáns (a hullámfüggvény radiális részét adott $R(r)$ függvény írja le). Mekkora lehet a perdület hossznégyzetének átlagos értéke?

Megoldás: A feladat szerint

$$\psi \longrightarrow e^{i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\varphi}\psi = \psi.$$

Ez csak úgy teljesülhet, ha

$$\hat{L}_z\psi = 0 \cdot \psi \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = 0,$$

vagyis a hullámfüggvény nem függ a φ szögtől. Tekintsük ψ gömbfüggvények szerinti kifejtését:

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

mely kifejtésből csak azok a tagok számítanak, melyekben $m = 0$, hiszen csak az ilyen kvantumszámmal rendelkező gömbfüggvények φ függetlenek:

$$\psi(r,\theta) = \sum_l c_{l0}R(r)Y_l^0(\theta).$$

Az $\hat{L}^2$ operátor átlaga:

$$< \hat{L}^2 >= \int dV\psi^*\hat{L}^2\psi = \int_0^\infty drr^2|R(r)|^2\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\theta\sin\theta\sum_l c_{l0}^*(Y_l^0)^*\hat{L}^2\sum_{l'}c_{l'0}Y_{l'}^0 =$$

$$= \hbar^2\sum_{l,l'}c_{l0}^*c_{l'0}l'(l'+1)\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\theta\sin\theta(Y_l^0)^*Y_{l'}^0 = \hbar^2\sum_l|c_{l0}|^2l(l+1).$$

HF: Ellenőrizzük az utolsó egyenlőséget!

2. feladat: Javasoljunk az előző feladathoz $\{c_{l0}\}$ együtthatósorozatot és számítsuk ki rá expliciten az $\hat{L}^2$ operátor átlagát!

Megoldás: Ahhoz, hogy fizikai állapotról legyen szó, kell, hogy $\sum_{l=0}^\infty|c_{l0}|^2 = 1$ legyen.

1. példa:

$$c_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{i0} = 0 \quad (i = 2,3...).$$

Ekkor láthatóan $\sum_{l=0}^{\infty} |c_{l0}|^2 = 1$. A keresett átlag:

$$< \hat{L}^2 >= \hbar^2 \Big[|c_{00}|^2 \cdot 0 \cdot 1 + |c_{10}|^2 \cdot 1 \cdot 2 \Big] = \hbar^2.$$

2. példa:

$$c_{00} = 0, \quad c_{i0} = \frac{1}{\sqrt{i(i+1)}} \quad (i = 1, 2, ..).$$

Ez is fizikai állapot (azaz $\sum_{l=0}^{\infty} |c_{l0}|^2 = 1$), mert

$$\sum_{l=0}^{n} |c_{l0}|^2 = \sum_{l=1}^{n} \frac{1}{l(l+1)} = \sum_{l=1}^{n} \Big(\frac{1}{l} - \frac{1}{l+1} \Big) = 1 - \frac{1}{n+1} \longrightarrow 1 \quad (\text{ha} \;\; n \longrightarrow \infty).$$

Az $\hat{L}^2$ átlagos értéke:

$$< \hat{L}^2 >= \hbar^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l(l+1)} l(l+1) = \hbar^2 \sum_{l=1}^{\infty} 1 = \infty.$$

<u>3. feladat</u>: Hány különböző állapota lehet a hidrogénatomnak az m. energiaszintig bezáróan?

Megoldás: A hidrogénatom energia-sajátállapotok (melyek $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ sajátállapotok is) a következő hullámfüggvényekkel írhatóak le:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^l u_{nl}(r) e^{-\frac{r}{na_0}} Y_l^m(\theta, \varphi),$$

ahol az u_{nl} függvények az ún. Laguerre polinomok, melyekre teljesülnie kell, hogy $l < n$ ($a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{m_e e^2}\hbar^2$ a Bohr-sugár).

Rögzített n mellett $l = \{n-1, n-2, ..., 1, 0\}$, ami összesen n db állapot. Tudjuk továbbá, hogy minden l-hez tartozik $(2l+1)$ db m érték, így fix n esetén az állapotok száma

$$N_n = \sum_{j=0}^{n-1} (2j+1) = 2 \sum_{j=0}^{n-1} j + \sum_{j=0}^{n-1} 1 = (n-1)n + n = n^2.$$

Ahhoz, hogy az m. energiaszintig bezárólag megkapjuk az összes állapotot, képezni kell a $\sum_n N_n$ összeget. Kapjuk, hogy:

$$\sum_{n=1}^{m} n^2 = \frac{m^3}{3} + \frac{m^2}{2} + \frac{m}{6},$$

az első m négyzetszám összegének képlete alapján.

<u>4. feladat</u>: Adjuk meg az összes állapotát a hidrogén atomnak, melyben $L^2 = 12\hbar^2$ -t mérhetünk!

Megoldás: Tudjuk, hogy $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, így az $l = 3$ értékről van szó. Ennek megfelelően $n = \{4, 5, 6...\}$, és $m = \{3, 2, 1, 0, -1, -2, -3\}$. A szóbajövő hullámfüggvények:

$$\psi_{n3m}(r, \theta, \varphi) = r^3 u_{n3}(r) e^{-\frac{r}{na_0}} Y_3^m(\theta, \varphi),$$

ahol n és m a megadott értékeket vehetik fel. Ezek tetszőleges lineáris kombinációja is megfelel a feladat kritériumának.