Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 31: Εφαρμογές και η ακτινική εξίσωση του ατόμου του υδρογόνου

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να παραθέσει κάποιες εφαρμογές με τους τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης για την στροφορμή και να ξεκινήσει την μελέτη για την ακτινική εξίσωση του ατόμου του υδρογόνου.

Περιεχόμενα

- Εφαρμογές στην θεωρία της στροφορμής
- Εισαγωγή στην μελέτη της ακτινικής εξίσωσης σε κεντρικό δυναμικό

Εφαρμογή 1

- Με την βοήθεια των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής για την στροφορμή, να προσδιοριστεί η κατάσταση $|l, l\rangle$.
- Θα ισχύει ότι $l_+|l, l\rangle = 0$, διότι η τιμή l είναι η μεγαλύτερη τιμή που μπορεί να πάρει το m. (Ανάλογα θα έχουμε $l_-|l, -l\rangle = 0$).
- $l_+ = l_x + il_y$. Άρα σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$l_+ = e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right].$$

Ολοκλήρωση εφαρμογής

- Η γενική μορφή της $|l,l\rangle$ είναι $|l,l\rangle = \Theta(\theta)e^{il\varphi}$.
- Αντικαθιστώντας στην εξίσωση $l_+|l,l\rangle = 0$ τα παραπάνω, θα έχουμε

$$e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\Theta(\theta)e^{il\varphi} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d\Theta}{d\theta} - \frac{l}{tan\theta}\Theta = 0 \Rightarrow \frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{lcos\theta}{sin\theta}\Theta \Rightarrow$$

$$\frac{d\Theta}{d(sin\theta)} = \frac{l\Theta}{\sin\theta} \Longrightarrow \frac{d\Theta}{\Theta} = l\frac{d(sin\theta)}{sin\theta} \Longrightarrow$$

$$ln\Theta = l\ln sin\theta \Rightarrow \Theta(\theta) = sin^l\theta.$$

Εφαρμογή 2

- Έστω η κατάσταση $|l, m\rangle$. Να βρεθεί η μέση τιμή της συνιστώσας l_x, καθώς και η αντίστοιχη αβεβαιότητα.
- Από τις σχέσεις $l_+ = l_x + il_y, l_- = l_x - il_y$ συμπεραίνουμε ότι $l_x = \frac{l_+ + l_-}{2}$ (και $l_y = \frac{l_+ - l_-}{2i}$).
- Άρα $\langle l_x \rangle = \langle \psi | l_x | \psi \rangle = \langle l, m | l_x | l, m \rangle =$

$$= \left\langle l, m \left| \frac{l_+}{2} \right| l, m \right\rangle + \left\langle l, m \left| \frac{l_-}{2} \right| l, m \right\rangle =$$

$$\frac{1}{2} \langle l, m \left| \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \right| l, m+1 \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \langle l, m \left| \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \right| l, m-1 \rangle = 0.$$

$1^{ος}$ τρόπος υπολογισμού της αβεβαιότητας

- Η αβεβαιότητα θα είναι $\Delta l_x = \sqrt{\langle {l_x}^2 \rangle}$, αφού $\langle l_x \rangle = 0$.
- Ο πρώτος τρόπος υπολογισμού του $\langle {l_x}^2 \rangle$ είναι ο εξής:

$$\langle {l_x}^2 \rangle = \left\langle l, m \left| \frac{l_+ + l_-}{2} \frac{l_+ + l_-}{2} \right| l, m \right\rangle =$$

$$\frac{1}{4} \langle l, m | {l_+}^2 + {l_-}^2 + l_+ l_- + l_- l_+ | l, m \rangle =$$

$$\frac{1}{4} \langle l, m | l_+ l_- | l, m \rangle + \frac{1}{4} \langle l, m | l_- l_+ | l, m \rangle$$

- Για τον πρώτο όρο θα έχουμε

$$\langle l, m | l_+ l_- | l, m \rangle = \langle l, m | (l^2 - {l_z}^2 + l_z) | l, m \rangle =$$

$$l(l+1) - m^2 + m$$

Τελικό αποτέλεσμα

- Για τον δεύτερο όρο θα έχουμε

$$\langle l,m|l_{-}l_{+}|l,m\rangle = \left\langle l,m\middle|(l^2-{l_z}^2-l_z)\middle|l,m\right\rangle = l(l+1)-m^2-m$$

- Άρα το τελικό αποτέλεσμα είναι

$$\frac{1}{4}[l(l+1)-m^2+m\ +(l(l+1)-m^2-m\ )] = \frac{1}{4}[2l(l+1)-2m^2]$$

$2^{ος}$ τρόπος

- Στον δεύτερο τρόπο απλά εφραμόζουμε διαδοχικά τους τελεστές. Για παράδειγμα για τον πρώτο όρο θα έχουμε:

$$l_+ l_- |l, m\rangle = l_+ \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle \Rightarrow$$

$$l_+ l_- |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} l_+ |l, m-1\rangle \Rightarrow$$

$$l_+ l_- |l, m\rangle = [l(l+1) - m(m-1)] |l, m\rangle$$

- Ομοίως αντιμετωπίζουμε και τον δεύτερο όρο.

Ακτινική εξίσωση Schrödinger σε κεντρικό δυναμικό

- Στην ενότητα 29, είχαμε βρει με την μέθοδο χωριζομένων μεταβλητών ότι η ακτινική εξίσωση για κεντρικό δυναμικό είναι

$\frac{1}{\mathrm{Rr}}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR) - \frac{2\mu}{\hbar^2}V_r(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E_r$. (Θέσαμε $\lambda = l(l+1)$).

- Θέτουμε $u(r) = rR(r)$. Πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη με $-\frac{\hbar^2}{2\mu}u(r)$, οπότε παίρνουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left(V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)u = Eu.$$

- Για το άτομο του υδρογόνου συγκεκριμένα έχουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)u = Eu$$

Εισαγωγή ατομικού συστήματος μονάδων

- Ο λόγος που θα εισάγουμε το φυσικό σύστημα μονάδων είναι για να έχουμε πιο βολικές εκφράσεις.
- Η μεθοδολογία είναι ανάλογη με του αρμονικού ταλαντωτή. Κάνουμε την ενέργεια και την απόσταση αδιάστατα μεγέθη, διαιρώντας με τις αρχικά άγνωστες ποσότητες E_0, r_0.
- Έτσι γράφουμε

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu \mathrm{E}_0 {r_0}^2}\frac{d^2 u}{d\left(\frac{r}{r_0}\right)^2}+\left(-\frac{e^2}{\frac{r}{r_0}E_0 r_0}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu E_0 {r_0}^2\left(\frac{r}{r_0}\right)^2}\right)u=\frac{E}{E_0}u$$

- Θέτουμε τώρα $\frac{\hbar^2}{\mu \mathrm{E}_0 {r_0}^2}=1, \frac{e^2}{E_0 r_0}=1, \tilde{r}=\frac{r}{r_0}, \tilde{E}=\frac{E}{E_0}$

Η ακτινική εξίσωση στο φυσικό σύστημα μονάδων

- Διαιρώντας τις σχέσεις $\frac{\hbar^2}{\mu \mathrm{E}_0 {r_0}^2} = 1, \frac{e^2}{E_0 r_0} = 1$ κατά μέλη προσδιορίζουμε την ποσότητα r_0 ως $r_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$.

Αντικαθιστώντας σε μια από τις δύο σχέσεις βρίσκουμε ότι $E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$.

- Η ακτινική εξίσωση στο φυσικό σύστημα μονάδων γίνεται $u'' + \left(2E + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u = 0.$
- Τα E, r είναι αριθμοί κι αν θέλουμε να βρούμε τα αντίστοιχα μεγέθη, πολλαπλασιάζουμε με E_0, r_0 αντίστοιχα.

Συνοριακές συνθήκες

- Οι δέσμιες καταστάσεις για το άτομο του υδρογόνου είναι για $\mathrm{E} < 0$. Αυτό μπορούμε να το διαπιστώσουμε από την γραφική παράσταση του ενεργού δυναμικού $\left(-\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)$.
- Οι συνοριακές συνθήκες για την επίλυση της εξίσωσης για το άτομο του υδρογόνου είναι:

1. $u(r \to 0) = 0$, διότι $u = rR$.
2. $u(r \to \infty) = 0$, διότι το σωμάτιο δεν μπορεί να διαφύγει στο άπειρο.

Επίλυση ακτινικής εξίσωσης-Ασυμπτωτική λύση

- Αρχικά, όπως και στον αρμονικό ταλαντωτή, εκτιμούμε την μορφή της λύσης για πολύ μεγάλα $r(r \to \infty)$.
- Σ' αυτήν την περίπτωση, η ακτινική διαφορική εξίσωση παίρνει την μορφή $u'' + 2Eu = 0$, αφού $\frac{1}{r}, \frac{1}{r^2} \to 0$. Αφού $E < 0$, θέτουμε $2\mathrm{E} = -\gamma^2$. Έτσι η εξίσωση γίνεται $u'' - \gamma^2 u = 0$, με $u(r) = e^{\pm\gamma r}$ και αποδεκτή λύση την $e^{-\gamma r}$, καθώς θα πρέπει $u(r \to \infty) \to 0$.

Επίλυση ακτινικής εξίσωσης-Γενική μορφή λύσης

- Σε αναλογία με τον αρμονικό ταλαντωτή, η γενική μορφή της λύσης θα είναι $u(r) = e^{-\gamma r} f(r)$.
- Η συνάρτηση $f(r)$ είναι μια συνάρτηση που πρέπει να προσδιοριστεί. Αντικαθιστούμε αυτήν την μορφή της λύσης στην αρχική ακτινική εξίσωσή μας και παίρνουμε την εξίσωση που πρέπει να επαληθεύει η $f(r)$. Θα ισχύει δηλαδή ότι

$$f'' - 2\gamma f' + \frac{2}{r} f - \frac{l(l+1)}{r^2} f = 0.$$

Οριακές περιπτώσεις-Περίπτωση $r \to \infty$.

- Θα δούμε αρχικά τι πληροφορίες μπορούμε να έχουμε από την μελέτη της διαφορικής στις οριακές περιπτώσεις, δηλ. για $r \to 0, r \to \infty$.
- Θεωρούμε πολυωνυμική λύση για την $f(r)$ με μέγιστο όρο τον r^n. Για $r \to \infty$, οι όροι που επιβιώνουν είναι οι

$-2\gamma f' + \frac{2}{r} f = -2\gamma n r^{n-1} + 2r^{n-1} = 0$ (έχουμε κρατήσει τους όρους με την μεγαλύτερη δύναμη, καθώς $r \to \infty$).

- Έτσι προκύπτει ότι $-2\gamma n + 2 = 0 \Rightarrow \gamma = \frac{1}{n}$. Όμως $\gamma^2 = -2\mathrm{E}$. Άρα συμπεραίνουμε ότι $\mathrm{E} = -\frac{1}{2\mathrm{n}^2}$ με $n = 1{,}2 \ldots$ ο κύριος κβαντικός αριθμός.
- Σε περίπτωση που θέλουμε να μεταβούμε από το φυσικό σύστημα μονάδων σε οποιοδήποτε άλλο, γράφουμε $\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{E}_0} = -\frac{1}{2\mathrm{n}^2} \Rightarrow \mathrm{E} = -\frac{\mathrm{E}_0}{2n^2}$.
- Από την οριακή περίπτωση $r \to \infty$, εξάγαμε λοιπόν τις ιδιοτιμές της ενέργειας.

Οριακές περιπτώσεις-Περίπτωση $r \to 0$.

- Θεωρούμε ότι η πολυωνυμική συνάρτηση έχει ελάχιστο όρο τον r^s.
- Τότε από την διαφορική εξίσωση επιβιώνουν οι όροι με την μικρότερη δύναμη, δηλ. θα έχουμε

$$f'' - \frac{l(l+1)}{r^2} f = s(s-1)r^{s-2} - l(l+1)r^{s-2} = 0 \Rightarrow$$

$s(s-1) = l(l+1) \Rightarrow s = -l$ ή $s = l+1$.

- Η λύση $s = -l$ είναι μη αποδεκτή καθώς αν ίσχυε, $f(r \to 0) \to \infty$, που είναι άτοπο.
- Από αυτήν την διερεύνηση καταλαβαίνουμε ότι το $f(r)$ είναι ένα πολυώνυμο της μορφής

$$f(r) = a_{l+1}r^{l+1} + a_{l+2}r^{l+2} + \cdots + a_n r^n.$$

- Προφανώς ισχύει ο περιορισμός $l + 1 \leq n$.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Εφαρμογές και ακτινική εξίσωση του ατόμου του υδρογόνου». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης