Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 33: Εφαρμογές στο άτομο του υδρογόνου

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοποί ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να παρουσιάσει κάποιες εφαρμογές που αφορούν το άτομο του υδρογόνου και ν' αναφέρει τις έννοιες του μοναδιαίου τελεστή και του τελεστή χρονικής εξέλιξης.

Περιεχόμενα ενότητας

- Εφαρμογές στο άτομο του υδρογόνου
- Ο μοναδιαίος τελεστής
- Ο τελεστής χρονικής εξέλιξης

Εφαρμογή 1

- Ένα άτομο υδρογόνου βρίσκεται στην θεμελιώδη του κατάσταση, όπου η κυματοσυνάρτηση έχει την μορφή $\psi = \mathrm{N}e^{-r}$. Να προσδιορίσετε την μέση θέση, $\langle r \rangle$, την μέση τιμή δυναμικής ενέργειας, $\langle V \rangle$ και την μέση κινητική ενέργεια $\langle \mathrm{T} \rangle$.
- Κανονικοποιούμε αρχικά την κυματοσυνάρτηση προκειμένου να προσδιορίσουμε τον συντελεστή N. Έχουμε λοιπόν $\int \psi_{100}{}^{*} \psi_{100} dV = 1 \Rightarrow$
$$\int N^2 e^{-2r} r^2 dr d\Omega = 4\pi \mathrm{N}^2 \int_0^\infty e^{-2r} r^2\, dr = 1 \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{\pi}}.$$
- Έχουμε χρησιμοποιήσει το ολοκλήρωμα
$$\int_0^\infty r^n\, e^{-\lambda r} dr = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}.$$

Μέσες τιμές

- Για την μέση θέση θα έχουμε
$$\langle r\rangle = \int_0^{\infty} \psi_{100}{}^{*}\, r\psi_{100} dV = 4\pi\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} e^{-2r} r^2 dr = \frac{3}{2}.$$
- Στο ατομικό σύστημα μονάδων η δυναμική ενέργεια είναι $V = -\frac{1}{r}$.
- Άρα $\langle V\rangle = \int \psi_{100}{}^{*}\, V\psi_{100} dV = -\int_0^{\infty} \frac{1}{\pi} e^{-2r} \frac{1}{r} 4\pi r^2 dr =$
$$-4\int_0^{\infty} r e^{-2r}\, dr = -1.$$

Η ατομική μονάδα ενέργειας λέγεται “Hartree” και είναι 27.2eV. Έτσι το αποτέλεσμα γίνεται $\langle V\rangle = -27.2eV$.

- Για την κινητική ενέργεια ισχύει ότι $E = \langle T\rangle + \langle \mathrm{V}\rangle \Rightarrow$
$$\langle T\rangle = -13.6 - (-27.2) = 13.6eV.$$

Εφαρμογή 2

- Η κατάσταση του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο του υδρογόνου περιγράφεται σε μια ορισμένη στιγμή, από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi = N(\psi_{100} + 2\psi_{211} + \psi_{32-1}),$$

όπου $\psi_{100,}\psi_{211}, \psi_{32-1}$ κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις.

1. Υπολογίστε τον συντελεστή κανονικοποίησης N, έτσι ώστε η ψ να είναι επίσης μια κανονικοποιημένη κατάσταση.
2. Υπολογίστε τις μέσες τιμές $\langle l^2 \rangle, \langle l_z \rangle, \langle E \rangle$ και την αβεβαιότητα Δl_z.

Συντελεστής κανονικοποίησης και $\langle l^2 \rangle$

- Για να είναι η ψ κανονικοποιημένη, θα πρέπει το άθροισμα των τετραγώνων των συντελεστών να είναι ίσο με την μονάδα. Δηλαδή,

$\mathrm{N}^2 + (2\mathrm{N})^2 + \mathrm{N}^2 = 1 \Rightarrow \mathrm{N} = \frac{1}{\sqrt{6}}$. Η κατάσταση υπέρθεσης θα γράφεται επομένως ως

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{100} + \frac{2}{\sqrt{6}}\psi_{211} + \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{32-1}.$$

- Βλέπουμε ότι οι καταστάσεις έχουν διαδοχικά $l = 0, l = 1, l = 2$. (Διότι ακολουθούμε τον συμβολισμό ψ_{nlm}). Άρα οι δυνατές τιμές του

$l^2 = \hbar^2 l(l+1)$ θα είναι οι $l^2 = 0, l^2 = 2\hbar^2, l^2 = 6\hbar^2$ με αντίστοιχες πιθανότητες

$$P = \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)^2 = \frac{1}{6}, P = \left(\frac{2}{\sqrt{6}}\right)^2, P = \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)^2 = \frac{1}{6}.$$

- Οπότε $\langle l^2 \rangle = 0 \cdot \frac{1}{6} + 2\hbar^2 \cdot \frac{2}{3} + 6\hbar^2 \cdot \frac{1}{6} = \frac{7}{3}\hbar^2$.

Υπολογισμός $\langle l^2 \rangle, \langle l_z \rangle, \langle E \rangle, \Delta l_z$

- Για την προβολή l_z, οι δυνατές τιμές που μπορούν να προκύψουν από τις μετρήσεις είναι οι

$l_z = m\hbar, \mu\varepsilon\ m = 0,1,-1.$

- Επομένως $\langle l_z \rangle = 0 \cdot \frac{1}{6} + \hbar \cdot \frac{2}{3} + (-\hbar)\frac{1}{6} = \frac{\hbar}{2}$.
- Για την ενέργεια όπου οι δυνατές τιμές είναι $\mathrm{E}_n = -\frac{\varepsilon}{n^2}, n = 1,2,3\ \kappa\alpha\iota\ \varepsilon = 13.6eV$, θα έχουμε

$$\langle \mathrm{E} \rangle = (-\varepsilon)\frac{1}{6} + \left(-\frac{\varepsilon}{4}\right)\frac{2}{3} + \left(-\frac{\varepsilon}{9}\right)\frac{1}{6} = -\frac{19\varepsilon}{54}$$

- Για την αβεβαιότητα Δl_z θα έχουμε

$$\langle {l_z}^2 \rangle = 0\frac{1}{6} + \hbar^2\frac{2}{3} + (-\hbar)^2\frac{1}{6} = \frac{5}{6}\hbar^2,$$

$$(\Delta l_z)^2 = \langle {l_z}^2 \rangle - \langle l_z \rangle^2 = \frac{7}{12}\hbar^2 \Rightarrow \Delta l_z = \hbar\sqrt{\frac{7}{12}}.$$

Μοναδιαίος τελεστής

- Στην κβαντομηχανική, αυτό που έχει άμεση φυσική δεν είναι τα καταστασιακά διανύσματα και οι τελεστές, αλλά οι μέσες τιμές που προκύπτουν από αυτά.
- Μπορούμε λοιπόν, να αλλάξουμε τον τρόπο περιγραφής και στην θέση των καταστάσεων $|\psi\rangle$ να χρησιμοποιήσουμε τις $|\psi'\rangle = \mathrm{U}|\psi\rangle$ και στην θέση των τελεστών A τους $\mathrm{A}' = \mathrm{UA}U^\dagger$, όπου U ένας μοναδιαίος τελεστής, δηλ. ένας τελεστής για τον οποίο ισχύει $\mathrm{U}^\dagger U = 1$.
- Οι σχέσεις $|\psi'\rangle = \mathrm{U}|\psi\rangle$ και $\mathrm{U}^\dagger U = 1$ εξασφαλίζουν ότι οι μέσες τιμές στην παλιά και νέα περιγραφή θα είναι οι ίδιες. Πράγματι,

$$\langle \mathrm{A}'\rangle = \langle\psi'|\mathrm{A}'|\psi'\rangle = \left\langle\psi\middle|\mathrm{U}^\dagger A' U\middle|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\middle|\mathrm{U}^\dagger\left(\mathrm{UA}U^\dagger\right)U\middle|\psi\right\rangle =$$

$$\left\langle\psi\middle|\mathrm{U}^\dagger\mathrm{UAU}^\dagger U\middle|\psi\right\rangle = \langle\psi|\mathrm{A}|\Psi\rangle = \langle\mathrm{A}\rangle.$$

Ο τελεστής της χρονικής εξέλιξης

- Στην κβαντομηχανική η εξέλιξη μιας κατάστασης μπορεί να εκφραστεί ως

$\psi(x,t) = U(t)\psi(x,0)$, όπου $U(t)$ μοναδιαίος τελεστής.

- Η κατάσταση $\psi(x,t)$ (εκφρασμένη με την παραπάνω μορφή) θα πρέπει να επαληθεύει την εξίσωση Schrödinger, δηλαδή θα ισχύει

$i\hbar \frac{\partial U\psi(x,0)}{\partial t} = HU\psi(x,0) \rightarrow i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$, διότι αφού η εξίσωση ισχύει για κάθε κατάσταση ψ θα πρέπει να ισχύει και για τους ίδιους τους τελεστές.

- Η εξίσωση $i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$ δίνει λύση την $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$.
- Ο $U(t)$ είναι μοναδιαίος, όπως επιθυμούμε, δηλ.

$$U^{\dagger}U = e^{iHt/\hbar}e^{-iHt/\hbar} = 1.$$

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.

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών, Ανδρέας Τερζής. Ανδρέας Τερζής «Κβαντική Φυσική Ι. Εφαρμογές στο άτομο του υδρογόνου». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης