Kompatible størrelser

Fra før (s. 39): $\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$

$\Rightarrow$ A og B kan ha skarpe verdier samtidig ($\Delta A = 0$ og $\Delta B = 0$) hvis $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer. Da er A og B <u>kompatible størrelser</u>.

Hvis $\Delta A = 0$ og $\Delta B = 0$, er partikkelen i en stasjonær tilstand Ψ som er egenfunksjon til $\hat{A}$ og $\hat{B}$:

$$\hat{A}\Psi = A\Psi \quad \text{og} \quad \hat{B}\Psi = B\Psi$$

Dvs: Når $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer, har de <u>felles egenfunksjoner</u>.

Eks: Isotrop $V(r)$ i 2D

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + V(r)$$

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

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$\Rightarrow$ Partikkelen kan ha skarp E og L_z samtidig.

Felles egenfunksjoner for $\hat{H}$ og $\hat{L}_z$:

$$\psi(r, \varphi) = R(r)\,\Phi(\varphi) = R(r)\,e^{im\varphi}$$

Symmetri og paritet

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

dvs paritetsoperatoren $\hat{P}$ speiler Ψ gjennom origo.

Hvis $\hat{P}\,\Psi(\vec{r}) = p\,\Psi(\vec{r})$ med $p = 1$ (like paritet) eller $p = -1$ (odde paritet), er Ψ egenfunksjon til $\hat{P}$.

Speiling gjennom origo:

1D : $x \rightarrow -x$

2D : $x, y \rightarrow -x, -y$

$r, \varphi \rightarrow r, \varphi + \pi$ (polarkoord.)

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

$r, \theta, \varphi \rightarrow r, \pi - \theta, \varphi + \pi$ (kulekoord.)

$\rho, \varphi, z \rightarrow \rho, \varphi + \pi, -z$ (sylinderkoord.)

Eks: Isotrop $V(r)$ i 2D

$$\hat{P}\,\Psi_m(r,\varphi) = \Psi_m(r, \varphi+\pi) = R(r)\, e^{im(\varphi+\pi)}$$

$$= (-1)^m R(r)\, e^{im\varphi}$$

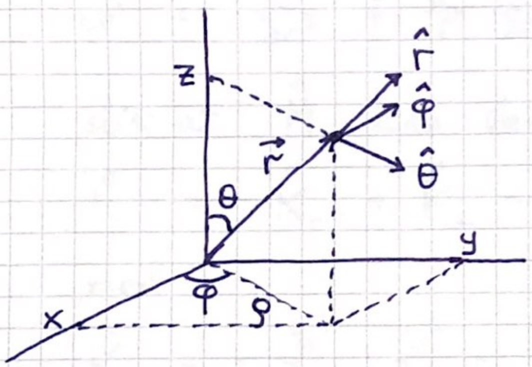
$$= p\,\Psi_m(r,\varphi)$$

dvs like paritet for $m = 0, \pm 2, \pm 4, \ldots$

odde —"— $m = \pm 1, \pm 3, \ldots$

Dreieimpuls i 3D

Fokus på isotrop $V(r)$ $\Rightarrow$ bruker kulekoordinater



$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$
$$\hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\varphi}, \quad \hat{r} \times \hat{\varphi} = -\hat{\theta}$$

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

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

$$\vec{r} = r \hat{r}$$

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

som med (bruk figuren ovenfor!)

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

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

gir

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad \text{(som i 2D)}$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

(evt. med $\cot\theta = \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}$)

Med produktregel for derivasjon får vi nå:

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

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

slik at $\hat{H}$ kan skrives slik:

$$\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V$$

med

$$\hat{K}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = \text{oper. knyttet til radiell bevegelse}$$

$$\hat{K}_L = \frac{1}{2\mu r^2}\hat{\vec{L}}^2 = \text{oper. knyttet til angulær bevegelse}$$

Anta <u>isotrop $V(r)$</u>. Da ser vi at hvert ledd i $\hat{H}$ kommuterer med $\hat{L}_z$ og $\hat{\vec{L}}^2$, samt at $\hat{L}_z$ og $\hat{\vec{L}}^2$ kommuterer. Dvs:

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$$

og dermed også

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_y] = 0,$$

siden ingenting gjør z-aksen "spesiell" med isotrop $V(r)$.

Men da er E, L^2 og L_z (<u>eller</u> L_x, <u>eller</u> L_y) <u>kompatible</u> størrelser og kan ha skarpe verdier samtidig, og vi kan finne felles egenfunksjoner for $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ (eller $\hat{L}_x$, eller $\hat{L}_y$).

Men $\vec{L}$ kan ikke være skarp; bare en komponent om gangen. (Unntaket er $L = 0$.)

Dette fordi $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ og $\hat{L}_z$ ikke kommuterer:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] f = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y},\ z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right] f$$

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

dvs

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

og med syklisk ombytte av komponentene ($x \to y$, $y \to z$, $z \to x$)

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad \text{og} \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

Så med f. eks. skarp L_z er L_x og L_y uskarpe.

Men hvis også L^2 er skarp, er selvsagt

$$L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$$

skarp.

Eks: Hva er $[\hat{L}_\varphi, \hat{L}_\theta]$?

Løsn: $\hat{L}_\varphi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \theta}$, $\hat{L}_\theta = -\frac{\hbar}{i \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\Rightarrow [\hat{L}_\varphi, \hat{L}_\theta] f = \hbar^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} f$$

$$= \hbar^2 \cdot \left(-\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} f$$

$$= \underline{\underline{i\hbar \cot\theta \, \hat{L}_\theta f}}$$

Eks 2: Hva er $[\hat{L}_\varphi, \hat{L}_r]$? Løsn: $\hat{L}_r = 0$

Så, hvor skal vi egentlig?

Jo, vi skal løse TUSL, $\hat{H}\Psi = E\Psi$, med
$\hat{H} = \hat{K}_r + \hat{K}_L + V(r)$ (og spesifikt $V(r) = -Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$)

Vi vet at vi <u>kan</u> finne egenfunksjoner Ψ som er felles for $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ og $\hat{L}_z$.

Vi prøver (som vanlig!) om produktløsninger fungerer,

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi),$$

og det vil gå fint.

Fra før (2D isotrop $V(r)$) vet vi at

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi} \qquad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$

er egenfunk. til $\hat{L}_z$ med egenverdier $L_z = m\hbar$.

Egenverdilign. for $\hat{\vec{L}}^2$ er i utgangspunktet

$$\hat{\vec{L}}^2 \Psi = L^2 \Psi$$

Her er $R(r)$ å oppfatte som en konstant (ingen $\frac{\partial}{\partial r}$ i $\hat{\vec{L}}^2$), så vi kan fokusere på <u>vinkeldelen</u>

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$
$$= \Theta(\theta) \cdot e^{im\varphi} \qquad \text{for gitt } m$$

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

Av dimensjonsmessige grunner er $L^2 \sim \hbar^2$.

$\Rightarrow$ Vi setter $L^2 = \hbar^2 \cdot \ell \cdot (\ell + 1)$ med ℓ = konstant