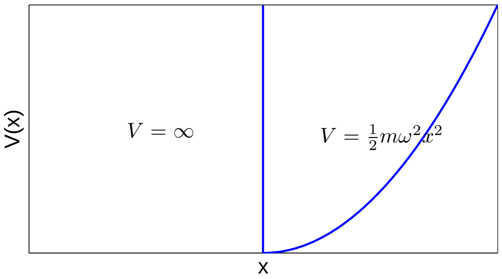
תרגול מספר 6

קופסא הרמונית ותנע זוויתי

תוכן עניינים

1 קופסא הרמונית/חצי אוסצילטור



נבחן את התנהגותו של חלקיק בפוטנציאל

$$V=\begin{cases}\infty & x\leq 0,\\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & x>0.\end{cases}$$

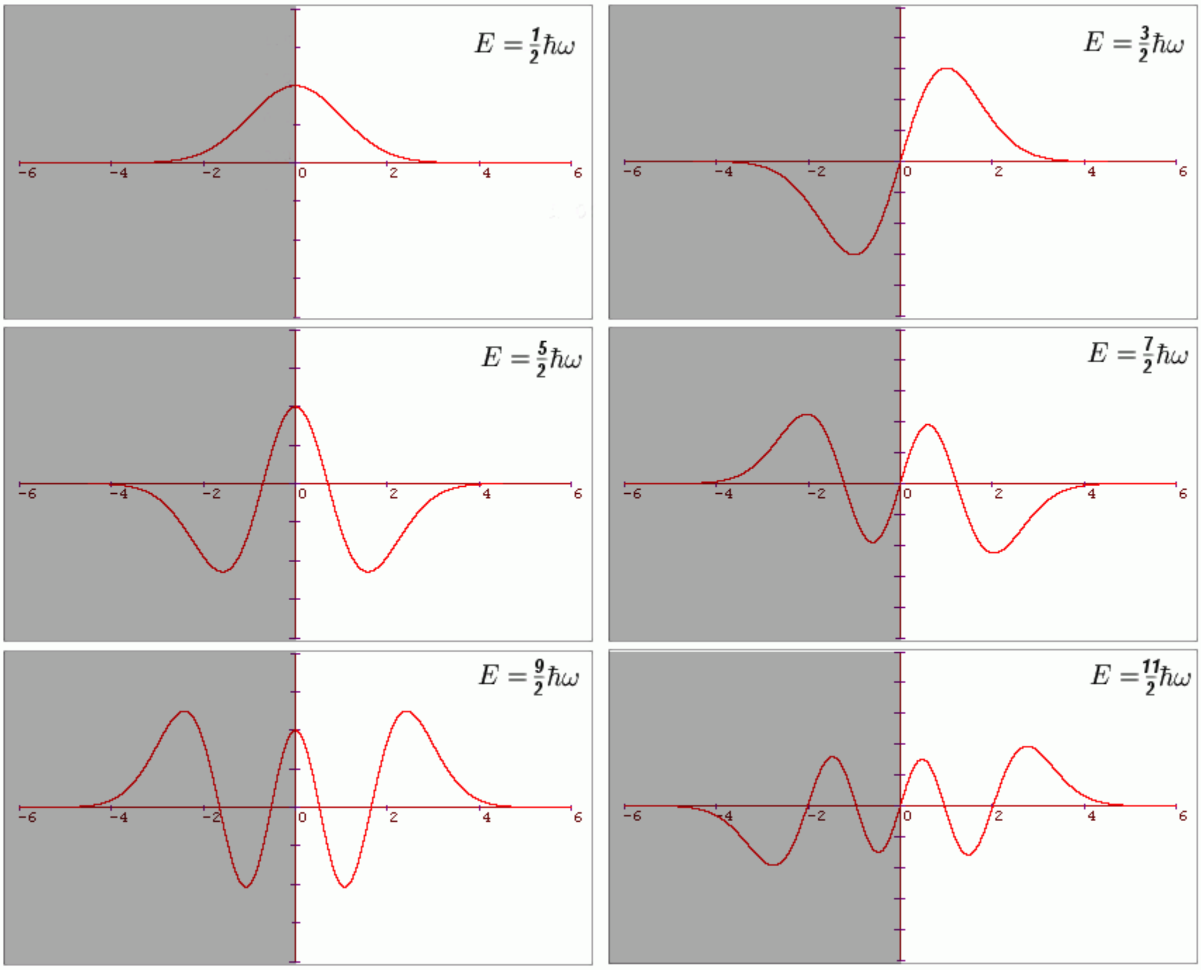
עבור האזור $x>0$, משוואת שרדינגר

$$\hat{H}\psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=E\psi$$

זהה למשוואה שקיבלנו עבור אוסצילטור הרמוני רגיל, ולכן באזור זה הפתרונות $\psi_\nu(x)=N_\nu H_\nu\left(\sqrt{\alpha}x\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ של אוסצילטור רגיל ישארו נכונים. עם זאת, תנאי השפה בבעיה החדשה מחייבים את כל הפתרונות להתאפס ב־$x=0$. נישאר, אם כך, אך ורק עם הפתרונות עם מספר קוונטי ν אי־זוגי:

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= N_{2n+1}H_{2n+1}\left(\sqrt{\alpha}x\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}},\ n\in(0,1,\ldots),\\ E_n(x) &= \hbar\omega\left[(2n+1)+\frac{1}{2}\right]=\hbar\omega\left(2n+\frac{3}{2}\right).\end{aligned}$$

המרווח החדש בין הרמות יהיה $2\hbar\omega$.



2 תנע זוויתי והרמוניות כדוריות

נתקלנו בהרמוניות הכדוריות במהלך פיתרון בעיית אטום המימן, אך למעשה הן יופיעו בכל בעיה עם פוטנציאל מרכזי. הן פותרות את החלק הזוויתי של משוואת שרדינגר עם פוטנציאל ספרי סימטרי, והן פונקציות עצמיות של אופרטורי התנע הזוויתי הבאים:

$$\boxed{\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l\,(l+1)\,Y_l^m},$$

$$\boxed{\hat{L}_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m},$$

והן מקיימות את תכונת האורתונורמליות

$$\boxed{\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \int_0^{\pi} \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi Y_l^{m*}\,(\vartheta,\phi)\,Y_{l'}^{m'}\,(\vartheta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}}.$$

את הפונקציות עצמן ניתן למצוא בקלות בספרים ובאינטרנט, ויש מספר דרכים לחשב אותן (כדי לקבל תחושה לגביהן באופן גרפי ואינטראקטיבי, מומלץ גם להיכנס ל־http://www.bpreid.com/poas.php ולבצע את התרגילים הקצרים שמוזכרים שם בעזרת האפליקציה). הביטויים שראיתם בינתיים הם בקואורדינטות ספריות, אך אפשר

להשתמש בקשרים $x = r\sin\vartheta\cos\varphi$, $y = r\sin\vartheta\sin\varphi$, ו־$z = r\cos\vartheta$ כדי להמיר אותם לקואורדינטות קרטזיות:

$$\begin{aligned}
Y_0^0(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}},\\
Y_1^0(\theta,\varphi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cdot\frac{z}{r}\\
Y_1^{-1}(\theta,\varphi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x-iy)}{r},\\
Y_1^{1}(\theta,\varphi) &= \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x+iy)}{r}.
\end{aligned}$$

עם ארבעת הפונקציות הללו, ניתן לייצג כל פונקציה ליניארית $f = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta$ של הקואורדינטות הקרטזיות כסכום על הרמוניות כדוריות הכפול ב־r. כדי לייצג פונקציות אחרות (למשל x^2) יש צורך בהרמוניות עם ערכי l גבוהים יותר.

שאלה: נתונה פונקציית הגל $\psi(\mathbf{r}) = N(x+y+z)\,e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{\alpha^2}}$ (N הוא פקטור נירמול). מהם ערכי התנע הזוויתי הכולל והתנע הזוויתי בכיוון z שניתן למדוד, ומה ההסתברות לקבל כל שילוב שלהם?

פיתרון: תחילה, נבצע מעבר לקואורדינטות כדוריות ונפרוש את פונקציית הגל בבסיס ההרמוניות הכדוריות. ניתן לכתוב מיד כי $x^2+y^2+z^2=r^2$, ואת x, y, z נמיר בעזרת הביטויים שהזכרנו לפני רגע:

$$\begin{cases}
x &= \frac{r}{2}\times 2\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}-Y_1^1\right),\\
y &= -\frac{r}{2i}\times 2\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}+Y_1^1\right),\\
z &= 2r\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0,
\end{cases}$$

או

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = N\overbrace{r\cdot e^{-\frac{r^2}{\alpha^2}}}^{R(r)}\times\overbrace{\left(\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}-Y_1^1\right)+i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}+Y_1^1\right)+2\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0\right)}^{T(\vartheta,\varphi)}$$

כדי לחשב הסתברויות, עלינו לנרמל את ψ. ניתן לפתור את האינטגרל ולעשות זאת באופן מלא, אך ניתן גם להתחמק מחישוב מקדם הנירמול של החלק הרדיאלי כל עוד אנו מעוניינים בתנע הזוויתי בלבד: נגדיר $N = N_R N_T$ כך שיתקיים $\int r^2 N_R^2 |R(r)|^2\,\mathrm{d}r = 1$ וגם $\int \sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\mathrm{d}\varphi N_T^2|T(\vartheta,\varphi)|^2 = 1$. אם כך, נוכל לראות בקלות כי ψ תהיה מנורמלת, כיוון ש:

$$\int \mathrm{d}^3r\,|\psi(r,\vartheta,\varphi)|^2 = \overbrace{\int_0^\infty r^2N_R^2|R(r)|^2\,\mathrm{d}r}^{=1}\times\overbrace{\int_0^\pi\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi N_T^2|T(\vartheta,\varphi)|^2}^{=1} = 1$$

את N_T נוכל למצוא בעזרת תכונת האורתונורמליות של ה־Y_l^m:

$$\begin{aligned}
1 &= N_T^2\int_0^\pi\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\left(\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)Y_1^{-1}+\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i-1)Y_1^1+2\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0\right)^*\\
&\quad\times\left(\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)Y_1^{-1}+\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i-1)Y_1^1+2\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0\right)\\
&= N_T^2\left[\frac{2\pi}{3}|i+1|^2\left\langle Y_1^{-1}\middle|Y_1^{-1}\right\rangle+\frac{2\pi}{3}|i-1|^2\left\langle Y_1^1\middle|Y_1^1\right\rangle+\frac{4\pi}{3}\left\langle Y_1^0\middle|Y_1^0\right\rangle\right]\\
&= N_T^2 4\pi \Rightarrow \boxed{N_T = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}.
\end{aligned}$$

כתוצאה מהתהליך, קיבלנו ביטוי מהצורה $\psi=\sum_{lm}u_l^mY_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)N_RR\left(r\right)$:

$$\psi\left(x,y,z\right)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}T\left(\vartheta,\varphi\right)N_RR\left(r\right)=\overbrace{\sqrt{\frac{1}{6}}\left(i+1\right)}^{u_1^{-1}}N_RR\left(r\right)Y_1^{-1}+\overbrace{\sqrt{\frac{1}{6}}\left(i-1\right)}^{u_1^{1}}N_RR\left(r\right)Y_1^{1}+\overbrace{\sqrt{\frac{1}{3}}}^{u_1^{0}}N_RR\left(r\right)Y_1^{0}.$$

היות וה־Y_l^m הן פונקציות עצמיות של האופרטורים בהם אנו מעוניינים, הסיכוי למדוד את הערך העצמי המתאים ל־m, l הוא

$$\begin{aligned}P_l^m &= \left|\int \mathrm{d}^3r\,\left(Y_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)N_RR\left(r\right)\right)^*\psi\right|^2\\ &= \left|\int \mathrm{d}^3r\,\left(Y_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)N_RR\left(r\right)\right)^*\sum_{l'm'}u_{l'}^{m'}Y_{l'}^{m'}\left(\vartheta,\varphi\right)N_RR\left(r\right)\right|^2\\ &= \overbrace{\int \mathrm{d}r\,N_R^2\left|R\left(r\right)\right|^2}^{=1}\left|\sum_{l'm'}u_{l'}^{m'}\overbrace{\int\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\int\mathrm{d}\varphi Y_{l'}^{m'*}\left(\vartheta,\varphi\right)Y_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)}^{=\delta_{mm'}\delta_{ll'}}\right|^2=\left|u_l^m\right|^2.\end{aligned}$$

כלומר, יש שלוש אפשרויות:

$$\begin{aligned}P\left(l=1,\,m=-1\right) &= P\left(L^2=2\hbar^2,\,L_z=-\hbar\right)=\left|u_1^{-1}\right|^2=\boxed{\frac{1}{3}},\\ P\left(l=1,\,m=1\right) &= P\left(L^2=2\hbar^2,\,L_z=\hbar\right)=\left|u_1^{1}\right|^2=\boxed{\frac{1}{3}},\\ P\left(l=1,\,m=0\right) &= P\left(L^2=2\hbar^2,\,L_z=0\right)=\left|u_1^{0}\right|^2=\boxed{\frac{1}{3}}.\end{aligned}$$

3 פולינומי לג'נדר והרמוניות כדוריות

ההרמוניות הכדוריות הן מהצורה $Y_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)=C_l^mP_l^m\left(\cos\vartheta\right)e^{im\varphi}$. המקדמים C_l^m מנרמלים את אינטגרל האורתוגונליות, והפונקציות P_l^m נקראות associated Legendre polynomials, כאשר $P_l=P_l^0$ הם ה־Legendre polynomials. ניתן לחשב אותם בדרך הבאה (שימו לב ־ בספרות יש מספר הגדרות):

$$\begin{aligned}P_l^m\left(x\right) &= P_l^{-m}\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}}P_l\left(x\right),\\ P_l\left(x\right) &= \frac{1}{2^ll!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}\left(x^2-1\right)^l.\end{aligned}$$

כל פולינום P_l הוא מסדר l, ויש לו l אפסים ממשיים שונים הנמצאים כולם בתחום $-1<x<1$ (שמתאים ל־$0<\vartheta<\pi$ כאשר $x=\cos\vartheta$). לפונקציות P_l^m יש $l-|m|$ אפסים באותו תחום (בנוסף, עבור $m\neq0$ הן מתאפסות ב־$x=\pm1$, ערכים המגדירים שתי נקודות בקטבי הכדור).

תרגיל: חשבו את קבועי הנירמול עבור Y_1^0, Y_1^{-1}.
פיתרון: נזדקק לפולינומים הבאים:

$$\begin{aligned}P_1^0\left(x\right) &= P_1\left(x\right)=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^2-1\right)=x,\\ P_1^1\left(x\right) &= P_1^{-1}\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_1\left(x\right)=\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x=\sqrt{1-x^2}.\end{aligned}$$

עלינו לדרוש כי אינטגרל הנורמליזציה יהיה שווה לאחד:

$$\begin{aligned}\int_0^{2\varphi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \left|Y_1^0\right|^2 &= \int_0^{2\varphi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \left(C_1^0\right)^2 \left[P_1^0\left(\cos\vartheta\right)\right]^2 \\ &= 2\pi \left(C_1^0\right)^2 \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x\, x^2 = 2\pi \left(C_1^0\right)^2 \times \frac{2}{3} = 1,\end{aligned}$$

או $\boxed{C_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}}$ (ביצענו את החלפת המשתנים $x = \cos\vartheta \Rightarrow \mathrm{d}x = -\sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta$). באותו אופן,

$$\begin{aligned}\int_0^{2\varphi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \left|Y_1^{\pm1}\right|^2 &= \int_0^{2\varphi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta \left(C_1^{\pm1}\right)^2 \left|P_1^1\left(\cos\vartheta\right)\right|^2 \overbrace{\left|e^{\pm i\varphi}\right|^2}^{=1} \\ &= 2\pi \left(C_1^{\pm1}\right)^2 \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \left(1 - x^2\right) = 2\pi \left(C_1^{\pm1}\right)^2 \times \left(2 - \frac{2}{3}\right) = 1,\end{aligned}$$

ומכאן $\boxed{C_1^{\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}}$.

קיבלנו בדיוק את ההרמוניות הכדוריות, עד כדי סימן (שהינו תלוי הגדרה).

תרגיל: אם מציירים את החלק הממשי של $Y_l^m\left(\vartheta,\varphi\right)$ על פני כדור, בזוויות ϑ או φ בהן הוא מתאפס נוצרים קווים נודליים. כמה מהקווים יהיו אנכיים וכמה אופקיים?

פיתרון: כיוון שפולינומי לג'נדר הם ממשיים, $\Re\left\{Y_l^m\right\} = C_l^m P_l^m\left(\cos\vartheta\right)\cos m\varphi$.

הפונקציות $P_l^m\left(\cos\vartheta\right)$, כאמור, מתאפסות $l - |m|$ פעמים עבור $\vartheta \neq 0, \pi$, וזה מספר הקווים האופקיים (כל זווית ϑ קבועה מגדירה קו אופקי על פני כדור, מלבד שתי הזוויות שהזכרנו המגדירות כאמור נקודות בקטבים). החלק התלוי ב־φ מתאפס כאשר $m\varphi = \frac{\pi}{2} \pm 2\pi n$: אם $m = 1$ זה קורה בשתי זוויות (במחזור שלם, φ נע בין 0 ל־2π), אם $|m| = 2$ זה קורה ארבע פעמים (כי 2φ נע בין 0 ל־4π) וכך הלאה. באופן כללי, פונקציית הגל מתאפסת עבור $2|m|$ ערכים של φ, ובכל אחד מהם נוצר קו נודלי. האיור הבא לקוח מוויקיפדיה, ואין להסתמך על הסימנים שמופיעים בו – בשיעורי הבית תתבקשו לצייר משהו דומה.