# Izotropní oscilátor, částice v coulombickém poli, zobecněné vlastní funkce

Martin Štefaňák

20. října 2020

# Přehled

# Přehled

# Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

- Společné vlastní funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned} \psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi) &= g(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \hat{L}_3\psi_{E,l,m} &= m\hbar\psi_{E,l,m}, \quad \hat{L}^2\psi_{E,l,m} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{E,l,m} \end{aligned}$$

- Zbývá určit radiální funkci $g(r)$

$$\hat{H}\psi_{E,l,m} = E\psi_{E,l,m}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2Mr^2} + V(r)$$

- $g(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ — částice na polopřímce v efektivním potenciálu

$$\hat{H}_{ef}\chi = E\chi, \quad \hat{H}_{ef} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}$$

# Izotropní harmonický oscilátor

- Potenciál tvaru $V(r) = \frac{1}{2}M\omega^2 r^2$
- Substituce $\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}r$, $\chi(r) = \Phi(\xi)$

$$\Phi'' - \left(\xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi^2}\right)\Phi + \frac{2E}{\hbar\omega}\Phi = 0, \quad \Phi(0) = 0, \quad \int_0^\infty |\Phi(\xi)|^2 d\xi < \infty$$

- Chování řešení v nekonečnu

$$\Phi'' \approx \xi^2\Phi \implies \Phi(\xi) \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

- Chování řešení v nule

$$\Phi'' \approx \frac{l(l+1)}{\xi^2}\Phi \implies \Phi(\xi) \sim \xi^{l+1}$$

# Izotropní harmonický oscilátor

- Ansatz

$$\Phi(\xi) = \xi^{l+1} e^{-\frac{\xi^2}{2}} w(\xi^2)$$

- Rovnice pro $w(z)$, $z = \xi^2$

$$z w'' + (\gamma - z) w' - \alpha w = 0, \quad \gamma = l + \frac{3}{2}, \quad \alpha = \frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}$$

- Řešení pomocí degenerovaných hypergeometrických funkcí

$$\begin{aligned} F(\alpha,\gamma,z) &= 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z^1}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots \\ \alpha \neq -n, n \in \mathbb{Z}_+ \quad &\Longrightarrow \quad F(\alpha,\gamma,z) \sim e^z \end{aligned}$$

# Izotropní harmonický oscilátor

- Řešení rovnice konečné v $\xi = 0$

$$w(\xi^2) = A\,F(\alpha, \gamma, \xi^2)$$

- $\Phi(\xi)$ je kvadraticky integrabilní $\Longleftrightarrow$ $F(\alpha, \gamma, \xi^2)$ je polynom

$$\alpha = \frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega} = -n, \quad n \in \mathbb{Z}_+$$

- Vlastní hodnoty energie

$$E_{n,l} = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n, l \in \mathbb{Z}_+$$

- Hlavní kvantové číslo $N = 2n + l$, degenerace hladiny $D_N$

$$D_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

# Izotropní harmonický oscilátor

- $F$ přejde v zobecněný Lagguerův polynom

$$F(-n,\gamma,z) \sim L_n^{\gamma-1}(z), \quad L_n^{\beta}(z) = \frac{1}{n!}\, e^z z^{-\beta}\, \frac{d^n}{dz^n}\,(e^{-z} z^{n+\beta})$$

- Společné vlastní funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned}
\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) &= K_{nl}\, \xi^l\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}\, L_n^{l+\frac{1}{2}}(\xi^2)\, Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad \xi = r\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \\
\hat{L}_3\psi_{n,l,m} &= m\hbar\psi_{n,l,m}, \quad \hat{L}^2\psi_{n,l,m} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{n,l,m} \\
\hat{H}\psi_{n,l,m} &= E_{n,l}\psi_{n,l,m}, \quad n,l \in \mathbb{Z}_+, \quad m = l, l-1, \ldots -l
\end{aligned}$$

- Množina vlastních funkcí $\{\psi_{n,l,m}\}$ tvoří ON bázi
- Jiná ON báze než $\{\psi_{n_1,n_2,n_3}\}$
- Kvantová čísla $n, l, m$ odpovídají měření pozorovatelných

# Přehled

# Částice v coulombickém poli

- Potenciál tvaru $V(r) = -\frac{Q}{r}$, $Q > 0$
- Rovnice pro radiální funkci

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\chi'' + \left(-\frac{Q}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}\right)\chi = E\chi$$

- Chování řešení v nekonečnu

$$\chi'' \approx \underbrace{-\frac{2ME}{\hbar^2}}_{\kappa^2>0}\chi \implies \chi(r) \sim e^{\kappa r}, \quad \kappa < 0, \quad E < 0$$

- Chování řešení v nule

$$\chi'' \approx \frac{l(l+1)}{r^2}\chi \implies \chi(r) \sim r^{l+1}$$

# Částice v coulombickém poli

- Ansatz

$$\chi(r) = r^{l+1} e^{\kappa r} w(r)$$

- Rovnice pro $w(r)$

$$\begin{aligned} rw'' + (ar + b)w' + cw &= 0 \\ a = 2\kappa, \quad b = 2l + 2 \quad , \quad & c = 2\left[(l+1)\kappa + \frac{MQ}{\hbar^2}\right] \end{aligned}$$

- Řešení konečné v nule

$$w(r) = A\,F\left(\frac{c}{a}, b, -ar\right) = A\,F\left(l + 1 + \frac{MQ}{\hbar^2 \kappa}, 2l + 2, -2\kappa r\right)$$

# Částice v coulombickém poli

- $\chi(r)$ je kvadraticky integrabilní $\Longleftrightarrow$ $F$ je polynom

$$l + 1 + \frac{MQ}{\hbar^2 \kappa} = -n, \quad n \in \mathbb{Z}_+$$

- Vlastní hodnoty energie

$$E_{n,l} = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2(n + l + 1)^2}$$

- Hlavní kvantové číslo $N = n + l + 1$

$$E_N = -\frac{R}{N^2}, \quad N \in \mathbb{N}, \quad R = \frac{MQ^2}{2\hbar^2}$$

# Částice v coulombickém poli

- Společné vlastní funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$

$$
\begin{aligned}
\psi_{N,l,m}(r,\theta,\varphi) &= K_{Nl}\left(\frac{2r}{Na}\right)^{l} e^{-\frac{r}{Na}} L_{N-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{Na}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad a = \frac{\hbar^2}{MQ} \\
\hat{L}_3\psi_{N,l,m} &= m\hbar\psi_{N,l,m}, \quad \hat{L}^2\psi_{N,l,m} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{N,l,m} \\
\hat{H}\psi_{N,l,m} &= E_N\psi_{N,l,m}, \quad N\in\mathbb{N}, \quad l<N, \quad |m|\leq l
\end{aligned}
$$

- Degenerace podprostoru s energií $E_N$

$$
D_N = N^2
$$

- Množina vlastních funkcí $\{\psi_{N,l,m}\}$ netvoří ON bázi
- Hamiltonián má i spojité spektrum — $\sigma_c(\hat{H}) = \langle 0, +\infty)$

# Částice v coulombickém poli

- Model odpovídá e$^-$ v atomu vodíku s $\infty$-těžkým jádrem

$$Q = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}, \quad R \doteq 13.6\ \mathrm{eV}$$

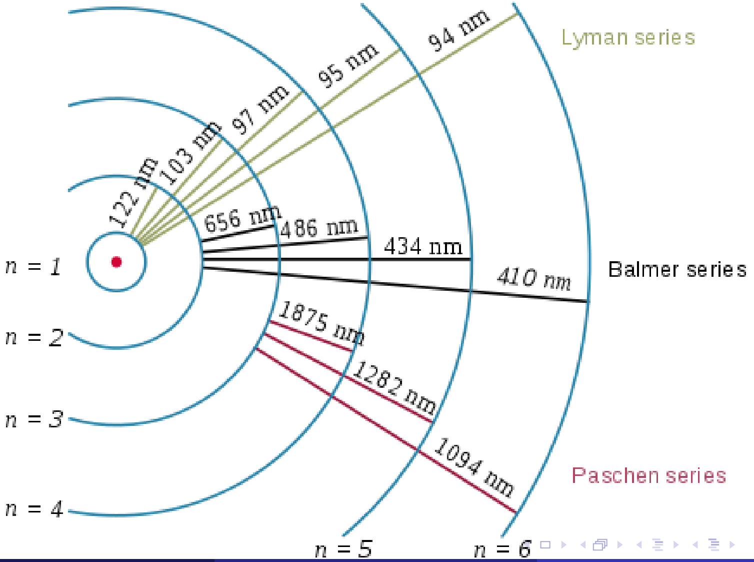
- Stabilita elektronového obalu vodíku — existuje základní stav

$$E_1 = -R \doteq -13.6\ \mathrm{eV}$$

- Čárové spektrum vodíku — Rydberg-Ritzův kombinační princip

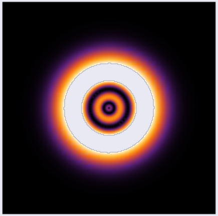
$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_{N_2} - E_{N_1}}{h} = \nu_R \left( \frac{1}{N_1^2} - \frac{1}{N_2^2} \right)$$

# Čárové spektrum vodíku

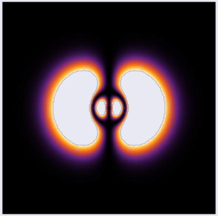


# Elektronové orbitaly ve vodíku

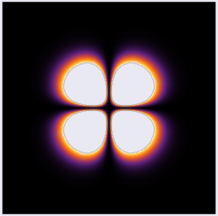
$N, l, m = 3, 0, 0$



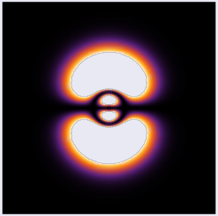
$N, l, m = 3, 1, 1$



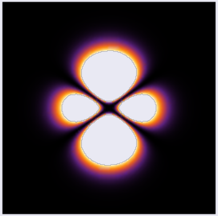
$N, l, m = 3, 2, 1$



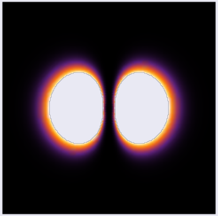
$N, l, m = 3, 1, 0$



$N, l, m = 3, 2, 0$



$N, l, m = 3, 2, 2$



# Přehled

1. Izotropní harmonický oscilátor
2. Částice v coulombickém poli
3. Zobecněné vlastní funkce hybnosti a polohy

# Zobecněné vlastní funkce hybnosti

- Složky hybnosti mají spojité spektrum — $\sigma_c(\hat{P}_j) = \mathbb{R}$
- Formální řešení r-ce na vlastní funkce není kvadraticky integrabilní

$$\hat{P}_j\psi = p_j\psi \implies \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}, \quad |\psi_{\vec{p}}(\vec{x})|^2 = |A|^2$$

- Přesto lze dobře definovat $(\psi_{\vec{p}}, \phi)$ pro $\phi$ ze Schwartzova prostoru
- Pro volbu $A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$ — Fourierova transformace

$$(\psi_{\vec{p}}, \phi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\phi(\vec{x})d^3x = (F\phi)(\vec{p}) = \tilde{\phi}(\vec{p})$$

- $F$ je bijekce na $\mathscr{S}(\mathbb{R}^3)$

# Zobecněné vlastní funkce hybnosti

- $\psi_{\vec{p}}$ lze chápat jako temperovanou distribuci — $\psi_{\vec{p}} \in \mathscr{S}^*(\mathbb{R}^3)$

$$(\psi_{\vec{p}}, \hat{P}_j \phi) = p_j(\psi_{\vec{p}}, \phi), \quad \forall \phi \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^3) \implies \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

- Inverzní Fourierova transformace

$$(F^{-1}\tilde{\phi})(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\phi}(\vec{p}) d^3p = \phi(\vec{x})$$

- Integrální vyjádření Diracovy $\delta$-funkce

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} d^3p = \delta(\vec{x}-\vec{y}) = \delta_{\vec{y}}(\vec{x}), \quad (\delta_{\vec{y}}, \phi) = \phi(\vec{y})$$

# Zobecněné vlastní funkce hybnosti

- $\psi_{\vec{p}}$ lze normalizovat k $\delta$-funkci — analogie relací ortogonality

$$(\psi_{\vec{p}'}, \psi_{\vec{p}}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

- Rozvoj $\phi$ pomocí $\psi_{\vec{p}}$ — analogie Fourierova rozvoje

$$\phi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (\psi_{\vec{p}}, \phi)\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) d^3p$$

- Zobecněné vlastní funkce hybnosti lze chápat jako spojitou bázi

# Zobecněné vlastní funkce hybnosti

- $\psi_{\vec{p}}$ jsou i zobecněné vlastní funkce hamiltoniánu volné částice

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{P}^2}{2M} \Longrightarrow \left[\hat{H}, \hat{P}_j\right] = 0 \\ \hat{H}\psi_{\vec{p}} &= \frac{p^2}{2M}\psi_{\vec{p}}, \quad \sigma_c(\hat{H}) = \langle 0, +\infty) \end{aligned}$$

# Zobecněné vlastní funkce hybnosti

- $\psi_{\vec{p}}$ lze libovolně přesně aproximovat kvadraticky integrabilní funkcí

$$\psi_{p,\varepsilon}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \frac{\hbar}{\varepsilon x} \sin\left(\frac{\varepsilon x}{\hbar}\right)$$
$$\forall \varepsilon > 0 \quad , \quad \psi_{p,\varepsilon} \in L^2(\mathbb{R}, dx), \quad \lim_{\varepsilon \to 0} (\hat{P} - p)\psi_{p,\varepsilon} = 0$$

- Čím menší $\varepsilon$, tím přesněji je určená hybnost částice

$$\langle \hat{P} \rangle_{\psi_{p,\varepsilon}} = p, \quad \Delta_{\psi_{p,\varepsilon}} \hat{P} \sim \varepsilon$$

# Zobecněné vlastní funkce polohy

- Rovnice na vlastní funkce nemá řešení

$$\hat{Q}_j\psi = y_j\psi \Longrightarrow (x_j - y_j)\psi(\vec{x}) = 0 \Longrightarrow \psi \sim 0$$

- Ve smyslu distribucí rovnice má řešení — Diracova $\delta$-funkce

$$\begin{aligned}
(\delta_{\vec{y}}, \hat{Q}_j\phi) &= y_j(\delta_{\vec{y}}, \phi), \quad \forall\phi \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^3) \\
\delta_{\vec{y}}(\vec{x}) &= \delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad (\delta_{\vec{y}}, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\vec{x} - \vec{y})\psi(\vec{x})d^3x = \psi(\vec{y})
\end{aligned}$$

# Zobecněné vlastní funkce polohy

- $\delta_{\vec{y}}$ lze libovolně přesně aproximovat kvadraticky integrabilní funkcí

$$\delta_{y,\varepsilon}(x) = \begin{cases} 0 & , \; |x-y| > \varepsilon \\ \frac{1}{2\varepsilon} & , \; |x-y| \leq \varepsilon \end{cases}$$

$$\forall \varepsilon > 0 \quad , \quad \delta_{y,\varepsilon} \in L^2(\mathbb{R}, dx), \quad \lim_{\varepsilon \to 0} (\hat{Q} - y)\delta_{y,\varepsilon} = 0$$

- Čím menší $\varepsilon$, tím přesněji je určená poloha částice

$$\langle \hat{Q} \rangle_{\delta_{y,\varepsilon}} = y, \quad \Delta_{\delta_{y,\varepsilon}} \hat{Q} \sim \varepsilon$$

# Zápis pomocí bra-ketů

## Poloha

- Kety $|\vec{x}\rangle$ určené rovnicemi

$$\langle\vec{x}|\hat{Q}_j|\psi\rangle = x_j\langle\vec{x}|\psi\rangle$$

- Normalizace k $\delta$-funkci

$$\langle\vec{x}'|\vec{x}\rangle = \delta(\vec{x}-\vec{x}')$$

- Rozklad jednotky

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \hat{I}$$

## Hybnost

- Kety $|\vec{p}\rangle$ určené rovnicemi

$$\langle\vec{p}|\hat{P}_j|\psi\rangle = p_j\langle\vec{p}|\psi\rangle$$

- Normalizace k $\delta$-funkci

$$\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

- Rozklad jednotky

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3p|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \hat{I}$$

# Zápis pomocí bra-ketů

## Poloha

- Rozvoj $|\psi\rangle$ do spojité báze

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \underbrace{\langle\vec{x}|\psi\rangle}_{\psi(\vec{x})} \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \psi(\vec{x})|\vec{x}\rangle
\end{aligned}
$$

- Amplituda pr. přechodu $|\psi\rangle \to |\vec{x}\rangle$

$$\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle$$

- Souhlas s Bornovou interpretací vlnové funkce

## Hybnost

- Rozvoj $|\psi\rangle$ do spojité báze

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle \underbrace{\langle\vec{p}|\psi\rangle}_{\tilde{\psi}(\vec{p})} \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, \tilde{\psi}(\vec{p})|\vec{p}\rangle
\end{aligned}
$$

- Amplituda pr. přechodu $|\psi\rangle \to |\vec{p}\rangle$

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle$$

- $\tilde{\psi}$ je Fourierova transformace $\psi$