Wojciech Broniowski
Instytut Fizyki, Akademia Świętokrzyska

Mechanika kwantowa - zadania 4 (2007/2008)

1 Moment pędu

1. Wyprowadź wzór na składowe operatora momentu pędu, L_i, w reprezentacji współrzędnych sferycznych (Shankar, zad. 12.5.8). Następnie sprawdź jawnym rachunkiem (równ. 12.5.36), że

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

2. Pokaż, że w reprezentacji współrzędnych sferycznych

$$p^2 = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + L^2$$

.

3. Shankar, zad. 12.6.1,2,8,9.

2 Wielomiany ortogonalne (mini-wykład)

Rozważmy ciąg wielomianów rzeczywistych $p_n(x)$, $x \in [x_1, x_2$, o stopniu n: p_0, p_1, p_2, ... Wielomiany te tworzą przestrzeń Hilberta z iloczynem skalarnym zdefiniowanym jako

$$\langle f|g\rangle = \int_{x_1}^{x_2} dx w(x) f^*(x) g(x),$$

gdzie $w(x) > 0$ jest *funkcją wagową*. Dobór funkcji wagowej określa, a jakimi konkretnymi wielomianami mamy do czynienia. Wielomiany z definicji spełniają warunek ortogonalności,

$$\langle p_i|p_j\rangle = 0 \quad \text{dla } i \neq j.$$

Norma $N_i = \sqrt{\langle p_i|p_i\rangle}$ niekoniecznie jest równa 1, ale dobrana jest z pomocą pewnych konwencji tak, aby różne wzory były najprostsze. Konwencja ta nazywa się standardyzacją.

Tw. Przestrzeń wielomianów ortogonalnych $p_0, \ldots, p_n$ jest zupełna, tzn. każdy wielomian stopnia n można zapisać w postaci kombinacji liniowej $\alpha_0 p_0(x) + \ldots \alpha_n p_n(x)$.

Tw. p_n ma n pierwiastków rzeczywistych w przedziale (x_1, x_2).

Tw. Poszczególne pierwiastki p_n leżą pomiędzy kolejnymi pierwiastkami p_{n+1}, tzw. np. trzeci (licząc od najmniejszych) pierwiastek p_n leży między trzecim i czwartym pierwiastkiem p_{n+1}, itd.

W mechanice kwantowej b. istotna rola wielomianów ortogonalnych wynika z faktu, że wiele równań różniczkowych dla stanów związanych ma postać (typu Sturma-Liouville'a)

$$Q(x)f''(x) + L(x)f'(x) + \lambda f(x) = 0, \tag{1}$$

przy czym $Q(x)$ jest wielomianem stopnia co najwyżej 2, a $L(x)$ wielomianem stopnia 1. Funkcja $f(x)$ oraz stała λ (wartość własna) są szukane.

Tw. Rozwiązania równania (1)są normalizowalne dla dyskretnych przeliczalnych wartości λ_0, λ_1, λ_2, ..., i są wielomianami $p_0(x)$, $p_1(x)$, $p_2(x)$, ...

Tw. Zachodzi $\lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$.

Tw. Funkcja wagowa $w(x) = R(x)/Q(x)$, gdzie $R(x) = \exp(\int dx L(x)/Q(x))$ (z odpowiednio dobraną stałą całkowania, NB jej wartość nie ma znaczenia w problemach jednorodnych).

Wartości x_1 i x_2 są pierwiastkami $Q(x)$, jeśli jest to wielomian rzędu 2. Jeśli $Q(x)$ jest rzędu 1, to x_1 jest jego pierwiastkiem, a $x_2 = \infty$. Jeśli $Q(x)$ jest rzędu 0, to $x_1 = -\infty$, a $x_2 = \infty$.

1. Wielomiany Legendre'a, $P_n(x)$. Rozważ równanie

   $$(x^2 - 1)f'' + 2xf' - \lambda f = 0.$$

   Zidentyfikuj $Q(x)$ i $L(x)$, pokaż z powyższego wzoru, że $w(x) = 1$ (stałą całkowania w $R(x)$ przyjmij 0. Zatem $w(x) = 1$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$. Przyjmij standardyzację $P_i(1) = 1$. Z pomocą warunków ortogonalności skonstruuj wielomiany dla $i = 0, 1, 2$ (możesz korzystać z ortogonalizacji Gramma-Schmidta). Podstawiając $f_n(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_n x^n$ do równania Legendre'a i domagając się, by szereg się urywał, pokaż, że $\lambda = n(n + 1)$.

2. Wielomiany Hermite'a, $H_n(x)$. Rozważ równanie

   $$f'' - 2xf' + \lambda f = 0.$$

   Pokaż, że $w(x) = \exp(-x^2)$, $x_1 = -\infty$, $x_2 = \infty$. Przyjmij standardyzację, że w $H_n(x)$ współczynnik przy x^n wynosi 2^n. Z pomocą warunków ortogonalności skonstruuj wielomiany $H_i(x)$ dla $i = 0, 1, 2$. Podobnie jak wyżej, pokaż, że $\lambda = 2n$

3. Wielomiany Laguerra, $L_n(x)$. A teraz weź równanie

   $$xf'' + (1 - x)f' + \lambda f = 0.$$

   Pokaż, że $w(x) = \exp(-x)$, $x_1 = 0$, $x_2 = \infty$ i przyjmij standardyzację, że w $L_n(x)$ współczynnik przy x^n wynosi $(-1)^n/n!$. Z pomocą warunków ortogonalności skonstruuj wielomiany $L_i(x)$ dla $i = 0, 1, 2$. Podobnie jak wyżej, pokaż, że $\lambda = n$.

4. W poznanych dotąd problemach mechaniki kwantowej zidentyfikuj powyższe równania.

Oto kilka dalszych wiadomości:

Tw. (wzór Rodriguesa)

$$p_n(x) = \frac{1}{e_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n} \left(w(x) Q^n(x) \right),$$

gdzie stała e_n zależy od standaryzacji.

Tw.

$$\lambda_n = -n\left(\frac{n-1}{2}Q'' + L'\right)$$

Tw. Wielomiany ortogonalne spełniają związki rekurencyjne drugiego rzędu postaci $p_{n+1} = (a_n x + n_n) - c_n p_{n-1}$.

3 Oscylator trójwymiarowy

1. Przelicz dokładnie trójwymiarowy oscylator izotropowy, Shankar, s. 333-334. Uzupełnij brakujące rachunki między równaniami 12.6.49 i 12.6.50. Możesz użyć poprzednie wyniki dot. wielomianów ortogonalnych.

4 Atom wodoru

1. Przelicz dokładnie podrozdział 13.1.