# SERIA 6
# ROZWIĄZANIA

MECHANIKA KWANTOWA '26

**Zadanie 1**

*Treść*: Rozważ równanie Schrödingera dla cząstki o masie $\mu$ bytującej w potencjale centralnym $V(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2\mu} + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

Posługując się metodą rozdzielenia zmiennych, przedyskutuj ogólne własności rozwiązania.

*Rozwiązanie*: Zacznijmy od napisania równania Schrödingera w jednostkach bezwymiarowych, czyli dzielimy stronami przez $-\hbar^2/(2\mu)$ i dostajemy

$$\left[\nabla^2 + \epsilon - v(r)\right]\psi(\vec{r}). \tag{1}$$

Następnie dokonujemy separacji zmiennych

$$\psi(\vec{r}) = R(r)P(\theta)\Phi(\phi) \tag{2}$$

i rozpisujemy laplasjan w zmiennych sferycznych, co daje nam rozdzielone równania

$$r^2\left[\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \epsilon - v\right] + \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{1}{P}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP}{d\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right] = 0. \tag{3}$$

Zatem każda z tych części musi być osobno stała, gdyż zmienne nie "mieszają się". Załóżmy, że część radialna spełnia równanie

$$r^2\left[\frac{1}{r^2}\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \epsilon - v\right] = \alpha(\alpha+1), \quad \alpha \in \mathbb{R}. \tag{4}$$

Wtedy, jako że część radialna i kątowa muszą dodawać się do zera, otrzymujemy

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{1}{P}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP}{d\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right] = -\alpha(\alpha+1). \tag{5}$$

Mnożąc to równanie stronami przez $\sin^2\theta$ dostajemy ponownie rozdzielenie zmiennych, tym razem kątowych od siebie, czyli

$$\frac{\sin\theta}{P}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP}{d\theta}\right) + \sin^2\theta\alpha(\alpha+1) + \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = 0. \tag{6}$$

Otrzymujemy zatem, wprowadzając $m \in \mathbb{R}$,

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dP}{d\theta}\right) + \left[\alpha(\alpha+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right] = 0, \quad \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi. \tag{7}$$

To drugie równanie z łatwością rozwiązujemy, otrzymując

$$\Phi(\phi) = Ae^{i|m|\phi} + Be^{-i|m|\phi}. \tag{8}$$

Rozwiązanie to jest periodyczne, jeżeli funkcja i jej pochodna są periodyczne, zatem mamy

$$Ae^{2\pi i|m|} + Be^{-2\pi i|m|} = A + B, \quad Ae^{2\pi i|m|} - Be^{-2\pi i|m|} = A - B. \tag{9}$$

Stąd otrzymujemy, że $m \in \mathbb{Z}$ oraz, na przykład $B = 0$, czyli

$$\Phi(\phi) \propto e^{im\phi}. \tag{10}$$

Następnie wprowadzamy zmienną $x = \cos\theta$ ($x \in [-1, 1]$), zatem zamiana zmiennych daje

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx} = -\sin\theta\frac{d}{dx} \tag{11}$$

Trzeba teraz pozbyć się sinusa z prawej strony, ale jego wyrażenie przez $x$ nie jest jednoznaczne, niemniej jednoznaczne jest

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) = \frac{d}{dx}\left[(1-x)^2\frac{d}{dx}\right]. \tag{12}$$

Zatem równanie na zmienną $x$ przyjmuje postać

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x)^2\frac{dP_l^m(x)}{dx}\right] + \left[\alpha(\alpha+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]P_l^m(x) = 0. \tag{13}$$

Funkcje $P_l^m(x)$ nazywamy stowarzyszonymi wielomianami Legendre'a.

## Zadanie 2

*Treść*: Rozważ równanie Schrödingera dla cząstki o masie $m$ w dwu wymiarach w potencjale centralnym $V(\rho)$. Przedyskutuj ogólne własności rozwiązania.

*Rozwiązanie*:

Symetria zagadnienia znów nakazuje, byśmy rozpisali laplasjan w stosownych zmiennych (tym razem będą to zmienne cylindryczne). Mamy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{14a}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial\rho}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} = \sin\theta\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{14b}$$

Następnie podnosimy każdy z tych operatorów do kwadratu (do przeliczenia na tablicy), co daje

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left[\cos\theta\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta}\right]^2 + \left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta}\right]^2 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}. \tag{15}$$

W kolejnym kroku zapisujemy równanie Schrödingera i, jak poprzednio, dzielimy je stronami przez $-\hbar^2/(2m)$, wprowadzając wielkości $\epsilon$ oraz $v(\rho)$. Mamy

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - v(\rho) + \epsilon\right]\psi(\rho,\theta) = 0. \tag{16}$$

Kolejnym krokiem jest rozdzielenie zmiennych

$$\psi(\rho,\theta) = f(\rho)t(\theta), \tag{17}$$

które po zastosowaniu chwytów analogicznych do tych z poprzedniego zadania, daje parę równań

$$\frac{t''}{t} = -\mu^2 \tag{18a}$$

$$\frac{f''}{f} + \frac{1}{\rho}\frac{f'}{f} + \epsilon - v(\rho) = \frac{\mu^2}{\rho^2}. \tag{18b}$$

Rozwiązanie równania kątowego daje funkcję wykładniczą, która musi być okresowa $t(\theta) = t(\theta+2\pi)$, stąd $\mu = n \in \mathbb{Z}$. Pełne rozwiązanie jest postaci

$$\psi(\rho,\theta) = f_{n,\epsilon}(\rho)e^{in\theta}. \tag{19}$$

Przeanalizujemy teraz rozwiązanie radialne w przypadku cząstki swobodnej ($v(\rho) = 0$).

- cząstka swobodna w dwu wymiarach

W tym przypadku równanie radialne przyjmuje postać

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{n^2}{\rho^2}+k^2\right]f_{k,n}(\rho)=0, \tag{20}$$

gdzie $k^2=\epsilon$. Wprowadzamy zmienną bezwymiarową $x=k\rho$ i dzieląc równanie Schrödingera stronami przez $k^2$ otrzymujemy tzw. równanie Bessela

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{n^2}{x^2}+1\right]f_{k,n}(x)=0. \tag{21}$$

By z identyfikować postać funkcji $f$, zapisujemy ją w postaci szeregu potęgowego, dopuszczając, by w ogólności "zaczynał się" on od potęgi $s$

$$f_{k,n}(x)=\sum_{p=0}^{\infty}a_p x^{p+s}. \tag{22}$$

Podstawiwszy to wyrażenie do równania Bessela, dostajemy

$$\sum_{p=0}^{\infty}a_p\left[(s+p)(s+p-1)+(s+p)-n^2\right]x^{p+s-2}=-\sum_{p=0}^{\infty}a_p x^{p+s} \tag{23}$$

zaś dzieląc stronami przez $x^s$:

$$\sum_{p=0}^{\infty}a_p\left[(s+p)^2-n^2\right]x^{p-2}=-\sum_{p=0}^{\infty}a_p x^{p}. \tag{24}$$

Stąd otrzymujemy związek rekurencyjny

$$a_p=-\frac{1}{(s+p)^2-n^2}a_{p-2} \tag{25}$$

z warunkami startowymi

$$x^{-2}:\quad a_0(s^2-n^2)=0,\quad x^{-1}:\quad a_0[(s+1)^2-n^2)=0. \tag{26}$$

Jako że warunkiem, by rekurencja ruszyła z kopyta, jest $a_0\neq 0$, stąd $s=\pm|n|$ zatem $a_1=0$. Stąd w szeregu wszystkie nieparzyste potęgi znikają. Rozwiązania możemy podzielić na dwa typy: gdy $s=|n|$, jest ono regularne (zachowuje się kulturalnie w $x=0$) oraz nieregularne $s=-|n|$. Dla rozwiązania regularnego mamy, wprowadzając $p=2\nu$, $\nu\in\mathbb{N}$,

$$f_{k,n}=x^{|n|}\sum_{\nu=0}^{\infty}a_{2\nu}x^{2\nu},\quad a_{2\nu}=-\frac{1}{4\nu(\nu+|n|)}a_{2\nu-2}. \tag{27}$$

Ten związek rekurencyjny można rozwikłać, otrzymując

$$a_{2\nu}=\frac{(-1)^\nu}{4^\nu\nu!}\frac{|n|!}{(|n|+\nu)!}a_0. \tag{28}$$

Stąd otrzymujemy

$$f_{k,n}=x^{|n|}|n|!a_0\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{(-1)^\nu}{4^\nu\nu!}\frac{1}{(|n|+\nu)!}x^{2\nu}. \tag{29}$$

Dla szczególnego wyboru

$$a_0=\frac{1}{2^{|}n||n|!} \tag{30}$$

otrzymujemy rozwiązanie w postaci funkcji Bessela $J_n(x)$.

**Zadanie 3**

*Treść*: Cząstka o masie $m$ bytuje w trójwymiarowej stundi potencjału

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leqslant r_0 \\ +\infty & r > r_0 \end{cases} .$$

Znajdź wyrażenie na energie i stany własne fali $s$.

*Rozwiązanie*: Po separacji zmiennych otrzymujemy równanie radialne

$$u_l''(r) + \left[\epsilon + v_0 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0, \quad v_0 = 2mV_0/\hbar^2 > 0, \quad \epsilon = 2mE/\hbar^2 > -v_0. \tag{31}$$

W fali $s$ mamy $l = 0$ i równanie

$$u_0''(r) = -k^2 u_0(r), \quad k^2 = \epsilon + v_0. \tag{32}$$

Zauważmy, że musi zachodzić, na mocy równania Schrödingera , $u_l(r) \sim r^{l+1}$ dla małych $r$, zatem $u_0$ musi znikać dla $r \to 0$, zatem z dwu rozwiązań odrzucamy $\cos(kr)$. Nakładając warunek znikania funkcji falowej dla $r = r_0$, otrzymujemy

$$u_0(r) \propto \sin(kr), \quad kr_0 = n\pi \quad \Rightarrow \quad E_n = -V_0 + \frac{(n\pi)^2\hbar^2}{2mr_0^2}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{33}$$

Zatem nawet w fali $s$ mamy nieskonćzenie wiele rozwiązań. Inne $l$ można ewentualnie omówić, wprowadzając pojęcie regularnej ($j_l(\rho)$) i nieregularnej ($n_l(\rho)$) radialnej funkcji Bessela.

noindent **Zadanie 4**

*Treść*: Wyznacz prawdopodobieństwo tego, że elektron w stanie podstawowym atomu wodoru zostanie znaleziony w odległości od jądra atomowego większej niż pozwala na to klasyczny bilans energii.

*Rozwiązanie*: Klasyczny punkt powrotu dany jest przez związek

$$\frac{Kq^2}{r} = |E|, \tag{34}$$

gdzie $E < 0$ jest energią stanu związanego. Stąd

$$r_0 = \frac{Kq^2}{|E|}. \tag{35}$$

W stanie podstawowym atomu wodoru, podstawiając energię daną przez stałą Rydberga, otrzymujemy $r_0 = 2a_0$, gdzie $a_0$ jest promieniem Bohra. Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w obszarze klasycznie wzbrodnionym wynosi

$$p(1s) = \int_{r_0}^{\infty} |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 13e^{-4} \simeq 0.24. \tag{36}$$