8. predavanje

Vladimir Dananić

21. studenoga 2011.

Sadržaj

Centralnosimetrični potencijali

Centralnosimetrična je potencijalna energija ovisna samo o udaljenosti od jedne posebne točke–središta. Jasno je da takva potencijalna energija ima poseban značaj samo u dvije ili tri prostorne dimenzije. U jednoj dimenziji tome odgovara samo potencijalna energija koja je parna funkcija u odnosu na ishodište, odnosno središte. U jednoj dimenziji nije moguće gibanje takvo da se udaljenost čestice ne mijenja od središta potencijalne energije. U dvije, ili tri, dimenzije takvo je gibanje moguće. Pogledajmo najprije jednostavniji slučaj—centralnosimetrična potencijalna energija u dvije dimenzije. Ako položaj izrazimo kartezijevim koordinatama x, y, onda potencijalna energija ovisi samo o koordinati $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Dakle, $V(x, y) \equiv V(r)$. Budući da potencijalna energija ovisi samo o jednoj koordinati, koja je funkcija kartezijevih koordinata, možemo očekivati da će se Schrödingerova jednadžba moći svesti na oblik jednodimenzijske Schrödingerove jednadžbe. Da bismo to mogli učiniti moramo nekako kinetičku energiju čestice rastaviti na dio koji ovisi samo o udaljenosti od središta i na dio koji ovisi samo o kutnoj varijabli.

Centralnosimetrični potencijali

U klasičnoj se fizici rastavljanje kinetičke energije postiže s pomoću jednostavne matematičke jednakosti–zbroj kvadrata skalarnoga i vektorskoga umnoška dvaju vektora jednak je umnošku kvadrata tih vektora:

$$\left(\vec{a}\cdot\vec{b}\right)^2+\left(\vec{a}\times\vec{b}\right)^2=\vec{a}^2\vec{b}^2 \tag{1}$$

Ako uzmemo vektore položaja $\vec{r}$ i količine gibanja $\vec{p}$ onda imamo jednakost:

$$\vec{p}^2=\frac{1}{\vec{r}^2}\left[(\vec{r}\cdot\vec{p})^2+(\vec{r}\times\vec{p})^2\right] \tag{2}$$

No, jednadžbe (1) i (2) vrijede za klasične veličine, tj. za vektore kojih sastavnice nisu operatori. U kvantnoj mehanici operatori položaja i količine gibanja ne komutiraju, pa zato moramo u primjeni jednadžbe (2) uzeti u obzir komutacijsko pravilo $[p_i,x_j]=-i\hbar\delta_{ij}$. Osim toga imamo i povoljnu okolnost da operator kutne količine gibanja komutira s operatorom $\vec{r}^2$.

Centralnosimetrični potencijali

Možemo se lako uvjeriti da u dvije prostorne dimenzije jednadžba (2) vrijedi i onda kada su $\vec{r}$ i $\vec{p}$ kvantnomehanički operatori. U tri prostorne dimezije dobit ćemo sljedeću jednakost:

$$\vec{p}^2 = \frac{1}{\vec{r}^2}\left[\vec{L}^2 + (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 + i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}\right] \tag{3}$$

U jednadžbi (3) uz operatore udaljenosti $r = \sqrt{\vec{r}^2}$ i kutne količine gibanja $\vec{L}$ pojavljuje se operator $\vec{r}\cdot\vec{p}$. Pokažimo da taj operator djeluje samo na udaljenost, a ne i na kutne varijable. Naime, kutne se varijable nalaze u omjerima kartezijevih koordinata $\frac{x}{y}$, $\frac{x}{z}$ i $\frac{y}{z}$, koji očito ne ovise o udaljenosti r. Tako, naprimjer, imamo:

$$\begin{aligned}\vec{r}\cdot\vec{p}F\left(\frac{x}{y}\right) &= -i\hbar\vec{r}\cdot\vec{\nabla}F\left(\frac{x}{y}\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\right)F\left(\frac{x}{y}\right) = \\ &= -i\hbar\left(\frac{x}{y} - \frac{x}{y}\right)F'\left(\frac{x}{y}\right) = 0\end{aligned} \tag{4}$$

Centralnosimetrični potencijali

Očito je, dakle, da operator $\vec{r}\cdot\vec{p}$ djeluje samo na varijablu r. Imamo sljedeću jednakost:

$$\vec{r}\cdot\vec{p}F(r) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\right)F(r) = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}F(r) \tag{5}$$

Ovdje smo iskoristili jednakost $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$ i slično za y i z, te $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$. Dakle, možemo reći da vrijedi operatorska jednakost $\vec{r}\cdot\vec{p} = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$. Uvrštavanjem te jednakosti u jednadžbu (2) za dvije prostorne dimenzije, te u jednadžbu (3) za tri prostorne dimenzije, dobivamo izraze:

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \tag{6}$$

odnosno

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \tag{7}$$

Centralnosimetrični potencijali

Operator kinetičke energije u tri prostorne dimenzije možemo napisati u sljedećem obliku:

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} \tag{8}$$

Stacionarna Schrödingerova jednadžba u trodimenzijskom centralnosimetričnom polju potencijalne energije ima sljedeći oblik:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)\right]\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi) \tag{9}$$

Jednadžbu (9) možemo rastaviti na radijalni i kutni dio, tj. valnu funkciju $\Psi(r,\theta,\phi)$ možemo prikazati kao umnožak funkcije $R(r)$, koja ovisi samo o r, i funkcije $Y_l^m(\theta,\phi)$ koja ovisi o polarnom kutu θ i azimutnom kutu ϕ. Funkcija $Y_l^m(\theta,\phi)$ zove se kuglina funkcija.

Centralnosimetrični potencijali

Kuglina je funkcija vlastita funkcija operatora L_z, s vlastitom vrijednošću m i operatora $\vec{L}^2$ s vlastitom vrijedošću $\hbar^2 l(l+1)$. Pri tome vrijedi $l = 0, 1, 2..$ i $m = -l, -l+1, ..., l-1, l$. Radijalna funkcija $R(r)$ tada zadovoljava jednadžbu:

$$R''(r) + \frac{2}{r}R'(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r) = 0 \qquad (10)$$

Jednadžba se (10) zamjenom $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ svodi na oblik jednodimenzijske stacionarne Schrödingerove jednadžbe:

$$u''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u(r) = 0 \qquad (11)$$

U jednadžbi se (11) pojavljuje dodatni dio potencijalnoj energiji $V(r)$, naime $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$. Taj dio efektivno povisuje potencijalnu energiju, pa se zato zove **centrifugalna barijera**. Dakle, možemo reći da se čestica u centralnosimetričnom polju potencijalne energije nalazi u

Centralnosimetrični potencijali

efektivnom polju potencijalne energije $V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$.
Operator $-\hbar^2\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)$, koji sačinjava radijalni dio operatora kinetičke energije, mora biti hermitski zato što operator kinetičke energije mora biti hermitski i zato što je operator $\vec{L}^2$ hermitski. Također moramo uzeti u obzir da volumni element $d^3\vec{r}$ u sfernim koordinatama ima oblik $d^3\vec{r} = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$. Spomenuti radijalni dio kinetičke energije bit će hermitski operator ako vrijedi jednadžba:

$$\int_0^\infty R^*(r)\left(R''(r) + \frac{2}{r}R'(r)\right) r^2 dr = \int_0^\infty \left(R^{*''}(r) + \frac{2}{r}R^{*'}(r)\right) R(r) r^2 dr \tag{12}$$

Uvrštavanjem zamjene $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ u jednadžbu (12) dobivamo uvjet:

$$\int_0^\infty u*(r)u''(r)dr = \int_0^\infty u^{*''}(r)u(r)dr \tag{13}$$

Centralnosimetrični potencijali

Parcijalnim integriranjem lijeve i desne strane jednadžbe (13) dobivamo uvjet hermitičnosti:

$$u^*(r)u'(r)\,|_0^\infty = u^{*'}(r)u(r)\,|_0^\infty \tag{14}$$

Budući da valna funkcija mora iščezavati u beskonačnosti, zajedno sa svojom prvom derivacijom, uvjet (14) možemo ispuniti tako da zahtijevamo $u(0) = 0$. A zašto ne bismo zahtijevali $u'(0) = 0$, umjesto $u(0) = 0$? Razlog tomu nalazi se u potrebi da operator $-\hbar^2\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)$ prikažemo kao kvadrat nekakvog operatora radijalne količine gibanja. Zaista, možemo se jednostavno uvjeriti da se spomenuti operator može prikazati kao kvadrat operatora $p_r = -i\hbar\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right)$, Naime, vrijedi jednakost

$$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) \tag{15}$$

Centralnosimetrični potencijali

Zahtjev da operator p_r bude hermitski povlači zahtjev $u(0) = 0$. Dakle, radijalni dio operatora kinetičke energije zaista se može prikazati kao kvadrat operatora radijalne količine gibanja p_r, a uz uvjet da za radijalni dio valne funkcije vrijedi $rR(r) \mid_{r=0} = 0$, operator p_r je hermitski. Time smo u potpunosti rastavili trodimenzijski problem na jednodimenzijski, radijalni, dio, a preostali dvodimenzijski dio ovisi samo o kutnim varijablama θ, ϕ. Vrtnju čestice oko središta potencijalne energije možemo ugraditi u samu potencijalnu energiju kao dodatak koji povisuje potencijalnu energiju. Taj dodatak stvara centrifugalnu barijeru.

Zadatci

1. Dokažite operatorsku jednakost (2) za dvije prostorne dimenzije i jednakost (3) za tri prostorne dimenzije.
2. Napišite radijalnu jednadžbu za izotropni harmonički oscilator s potencijalnom energijom $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Kakav je energijski spektar toga oscilatora za stanja s $l = 0$?
3. Kakva je valna funkcija izotropnog trodimenzijskog harmoničkog oscilatora za općeniti l?