Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις IX: Κίνηση σε τρεις διαστάσεις, στροφορμή

1. Κίνηση σε τρεις διαστάσεις

Αποδεικνύεται (με τον ίδιο τρόπο όπως και για την $\hat{p}_x$) ότι οι τελεστές που αντιστοιχούν στις συνιστώσες της ορμής στον άξονα y και z, $\hat{p}_y$ και $\hat{p}_z$, δίδονται ως:

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{9.1}$$

Οι αντίστοιχες σχέσεις μετάθεσης είναι:

$$\left[\hat{y},\hat{p}_y\right] = \left[\hat{z},\hat{p}_z\right] = i\hbar$$

Είναι επίσης προφανές ότι $\left[\hat{x},\hat{y}\right]=\left[\hat{x},\hat{z}\right]=\left[\hat{y},\hat{z}\right]=0$ όπως επίσης $\left[\hat{p}_i,\hat{p}_j\right]=0$ για $i, j = x, y, z$. Τέλος, $\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=\left[\hat{x},\hat{p}_z\right]=0$. Όλες αυτές οι σχέσεις μπορούν να συμπτυχθούν στη μορφή

$$\left[\hat{r}_i,\hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \tag{9.2}$$

όπου εισαγάγουμε το συμβολισμό $\left(\hat{r}_1,\hat{r}_2,\hat{r}_3\right)=\left(\hat{x},\hat{y},\hat{z}\right)$ και $\left(\hat{p}_1,\hat{p}_2,\hat{p}_3\right)=\left(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z\right)$.

Έτσι, μπορούμε να γράψουμε την τρισδιάστατη ορμή ως άνυσμα:

$$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x\vec{e}_x + \hat{p}_y\vec{e}_y + \hat{p}_z\vec{e}_z = \vec{e}_x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) + \vec{e}_y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) + \vec{e}_z\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{9.3}$$

όπου $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ και $\vec{e}_z$ τα μοναδιαία ανύσματα στους άξονες x, y και z αντίστοιχα.

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$\hat{p}^2 = \hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

Η (9.3) μπορεί να γραφτεί και πιο σύντομα, χρησιμοποιώντας το ανάδελτα:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{9.4}$$

Οπότε, γενικότερα:

$$\hat{p}^2 = \left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\cdot\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right) = -\hbar^2\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = -\hbar^2\vec{\nabla}^2 \tag{9.5}$$

Η κυματοσυνάρτηση, πλέον, εξαρτάται από τις τρεις ανεξάρτητες μεταβλητές x, y, z δηλ:

$$\Psi\left(x,t\right) \to \Psi\left(x,y,z,t\right) = \Psi\left(\vec{r},t\right)$$

Αντίστοιχα, σε σφαιρικές συντεταγμένες,

$$\Psi(\vec{r},t)=\Psi(r,\theta,\phi,t)$$

και η ορμή γράφεται ως

$$\hat{\mathrm{p}}=-i\hbar\left(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{9.6}$$

Για δε την επίλυση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger, χρησιμοποιούμε την ίδια παραγοντοποίηση όπως και στην περίπτωση της μιας διάστασης (1D):

$$\Psi(x,t)=\varphi(x)T(t)\rightarrow\Psi(\vec{r},t)=\varphi(\vec{r})T(t) \tag{9.7}$$

Αντικαθιστώντας την (9.7) στην εξίσωση του Schrödinger, καταλήγουμε στο ίδιο αποτέλεσμα όπως και στην περίπτωση του 1D:

$$\hat{\mathrm{H}}\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\Rightarrow\hat{\mathrm{H}}\varphi(\vec{r})=E\varphi(\vec{r})\ \text{και}\ \mathrm{T}(t)=T(0)e^{-iEt/\hbar}$$

Προφανώς, η ερμηνεία της $|\Psi|^2$ παραμένει η ίδια, δηλαδή είναι η πυκνότητα πιθανότητας σε ένα τμήμα (dx,dy,dz) του χώρου. Επομένως, πρόκειται για την πυκνότητα πιθανότητας όγκου $dV=dxdydz$. Η δε πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο μέσα σε κάποιο όγκο V είναι τώρα

$$P_V=\int_V|\varphi(\vec{r})|^2\,dV$$

<u>Παράδειγμα 1: Κίνηση σε δυο διαστάσεις:</u>

$$\hat{\mathrm{H}}=\frac{\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{x}}^2}{2m}+\frac{\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{y}}^2}{2m}+V(x,y) \tag{9.8}$$

Αντικαθιστώντας τις (9.1) στην (9.8), παίρνουμε την εξής μορφή:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)+V(x,y)\varphi=E\varphi$$

Η πιο απλή περίπτωση: $V(x,y)=V_1(x)+V_2(y)$. Παράδειγμα τέτοιου δυναμικού είναι ο απλός αρμονικός ταλαντωτής σε 2D:

$$V(x,y)=\frac{1}{2}k_xx^2+\frac{1}{2}k_yy^2$$

Παρατηρούμε ότι οι όροι με x και y είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους, οπότε αναζητούμε λύση στη μορφή γινομένου $\varphi(x,y)=F(x)G(y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2F}{dx^2}G-\frac{\hbar^2}{2m}F\frac{d^2G}{dy^2}+\left(\frac{1}{2}k_xx^2+\frac{1}{2}k_yy^2\right)FG=EFG$$

Διαιρώντας και τα δύο μέλη με $F(x)G(y)$, παίρνουμε

$$\Rightarrow \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{F}\frac{d^2F}{dx^2}+\frac{1}{2}k_x x^2\right)}_{f(x)}+\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{G}\frac{d^2G}{dy^2}+\frac{1}{2}k_y y^2\right)}_{g(y)}=E \qquad (9.9)$$

Ο πρώτος όρος στην (9.9) είναι συνάρτηση του x (μόνο), ενώ η δεύτερη παρένθεση συνάρτηση του y (μόνο). Έστω $f(x)$ και $g(y)$ αυτές οι συναρτήσεις. Η εξίσωση (9.9) πλέον γράφεται

$$f(x)+g(y)=E$$

Ο μόνος τρόπος με τον οποίο το άθροισμα δυο συναρτήσεων που εξαρτώνται από διαφορετικές ανεξάρτητες μεταβλητές μπορεί να είναι σταθερό, είναι η κάθε συνάρτηση να είναι σταθερή. Και επομένως $f(x)=E_x$ και $g(y)=E_y$ όπου E_x, E_y δυο νέες σταθερές:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2F}{dx^2}+\frac{1}{2}k_x x^2 F=E_x F$$

και μια πανομοιότυπη εξίσωση με $x\to y, F(x)\to G(y)$.

Οι λύσεις μας είναι ήδη γνωστές: η $F(x)$ και η $G(y)$ είναι πολυώνυμα Hermite, ενώ οι σταθερές E_x και E_y δίδονται ως

$$E_x=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x \text{ όπου } k_x=m\omega_x{}^2$$
$$E_y=\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y \text{ όπου } k_y=m\omega_y{}^2$$

Στην ειδική περίπτωση που $k_x=k_y$ (και επομένως $\omega_x=\omega_y=\omega$) η ολική ενέργεια του σώματος δίδεται ως

$$E=E_x+E_y \Rightarrow E=\left(n_x+n_y+1\right)\hbar\omega$$

Παρατηρούμε ότι οι καταστάσεις συγκεκριμένης ενέργειας είναι εκφυλισμένες:

$$E_0=\hbar\omega$$
$$E_1=2\hbar\omega \begin{cases} n_x=1, n_y=0 \\ n_y=1, n_x=0 \end{cases} \leftarrow 2 \text{ καταστάσεις } (\text{εκφυλισμένες})$$
$$E_2=3\hbar\omega \begin{cases} n_x=2, n_y=0 \\ n_x=1, n_y=1 \\ n_x=0, n_y=2 \end{cases} \leftarrow 3 \text{ καταστάσεις (εκφυλισμένες)}$$

Σε τι διαφέρουν οι καταστάσεις που έχουν την ίδια ενέργεια; Η παράμετρος n_x χαρακτηρίζει την ορμή στον άξονα των x (και αντίστοιχα η n_y την ορμή στον άξονα των y. Και επομένως διαφέρουν ως προς την κίνηση στους δυο άξονες. Αργότερα θα δούμε ότι γραμμικοί συνδυασμοί τους αντιστοιχούν σε ιδιοσυναρτήσεις της στροφορμής.

Παράδειγμα 2: απειρόβαθο πηγάδι σε τρεις διαστάσεις.

Έστω κουτί με πλευρές με μήκος L_x, L_y, L_z στους άξονες x, y και z αντίστοιχα. Έστω ότι το δυναμικό είναι σταθερό (άρα μπορούμε να το ορίσουμε ως $V = 0$) μέσα στο κουτί, δηλ. $V = 0$ στο διάστημα $0 < x < L_x$ και $0 < y < L_y$ και $0 < z < L_z$ και $V = \infty$ σε όλες τις άλλες περιοχές.

Δοκιμάζουμε και πάλι λύσεις της μορφής:

$$\varphi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \Rightarrow \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}}_{E_x} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}}_{E_y} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}}_{E_z} = E$$

Έχουμε τρεις εξισώσεις της μορφής:

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} = -\frac{2mE_\xi}{\hbar^2} f, \quad {k_\xi}^2 = \frac{2mE_\xi}{\hbar^2} \Rightarrow f(\xi) = e^{\pm i k_\xi \xi}$$

$$f(\xi) = Ae^{ik_\xi \xi} + Be^{-ik_\xi \xi} = A' \cos k_\xi \xi + B' \sin k_\xi \xi$$

Εφαρμόζουμε τις συνοριακές συνθήκες. Ως παράδειγμα, στον άξονα x, $\xi = x$, θα έχουμε:

$$f(0) = f(L_x) = 0 \Rightarrow A' = 0;\ B' \sin kL = 0 \Rightarrow k_x L = n_x \pi \Rightarrow X(x) = N_x \sin \frac{n_x \pi x}{L}$$

όπου N_x μια σταθερά κανονικοποίησης.

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο βρίσκουμε ότι υπάρχουν θετικοί ακέραιοι n_y και n_z έτσι ώστε $k_y = \frac{n_y \pi}{L_y}$, $k_z = \frac{n_z \pi}{L_z}$. Η ολική κυματοσυνάρτηση γράφεται ως εξής:

$$\psi(x, y, z) = N \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}$$

όπου N η συνολική σταθερά κανονικοποίησης. Η ενέργεια δίδεται ως:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left\{ \frac{{n_x}^2}{{L_x}^2} + \frac{{n_y}^2}{{L_y}^2} + \frac{{n_z}^2}{{L_z}^2} \right\}$$

Στην περίπτωση που τα τρία μήκη είναι ίσα, δηλ $L_x = L_y = L_z$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left\{ {n_x}^2 + {n_y}^2 + {n_z}^2 \right\}$$

και έχουμε και πάλι εκφυλισμό των ενεργειακών σταθμών.

2. Σφαιρικές συντεταγμένες

Τα «πραγματικά» δυναμικά είναι συνάρτηση της απόστασης ανάμεσα σε δυο σημεία, και φυσικά η μορφή αυτή δεν μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα ανεξάρτητων συναρτήσεων:

$$V(r) \sim \frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \neq V_x(x)+V_y(y)+V_z(z)$$

Είναι λοιπόν προφανές ότι όταν το δυναμικό είναι συνάρτηση της απόστασης, π.χ. $V(\vec{r}) = \frac{k}{r}$, η Λαπλασιανή πρέπει να γραφτεί σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + \frac{k}{r}\varphi = E\varphi$$

Το ∇^2 σε σφαιρικές συντεταγμένες γράφεται ως

$$\nabla^2 = \left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right\} + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} = \hat{\Pi}_r + \frac{1}{r^2}\hat{\Pi}_{\theta\phi} \tag{9.10}$$

Η εξίσωση Schrödinger γράφεται ως εξής:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Pi}_r - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\hat{\Pi}_{\theta\phi} + V(r)\right\}\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \tag{9.11}$$

Σημειώνεται ότι μετονομάσαμε την $\varphi(\vec{r})$ σε $\psi(\vec{r})$, επειδή σε σφαιρικές συντεταγμένες η κυματοσυνάρτηση εξαρτάται από την γωνία ϕ. Για να αποφευχθεί οποιαδήποτε ανάμιξη, στις σφαιρικές συντεταγμένες, η (9.7) γράφεται

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})T(t)$$

Η εξίσωση (9.11) μας θυμίζει την μορφή της ενέργειας (στην Κλασσική Μηχανική) για σώμα σε κεντρικό δυναμικό:

$$\frac{{p_r}^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V = E \tag{9.12}$$

Στην (9.12), η ολική ορμή, p^2, γράφεται ως ${p_r}^2 + \frac{L^2}{r^2}$ όπου p_r η ακτινική ορμή και L η στροφορμή. Κατ' αντιστοιχία, στην Κβαντική Μηχανική γράφουμε την (9.12) ως:

$$\left(\frac{{\hat{\mathrm{p}}_\mathrm{r}}^2}{2m} + \frac{\hat{\mathrm{L}}^2}{2mr^2}\right)\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{9.13}$$

Συγκρίνοντας την (9.11) με την (9.13), συμπεραίνουμε ότι θα πρέπει να ισχύει:

$$-\hbar^2\hat{\Pi}_r = {\hat{\mathrm{p}}_\mathrm{r}}^2 \tag{9.14}$$

και

$$-\hbar^2\hat{\Pi}_{\theta\phi} = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] = \hat{\mathrm{L}}^2 \tag{9.15}$$

Η απόδειξη των (9.14) και (9.15) αποτελεί το θέμα της επόμενης ενότητας.

3. Σχέση ορμής-στροφορμής

Στην κλασσική μηχανική η (τροχιακή) στροφορμή ορίζεται ως εξής:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Επομένως, το τετράγωνο της στροφορμής γράφεται ως

$$L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \sum_i (\vec{r} \times \vec{p})_i (\vec{r} \times \vec{p})_i$$

Συμβολίζοντας τις συνιστώσες του $\vec{r}$ ως $r_i \, (r_1 = x,\, r_2 = y,\, r_3 = z)$ έχουμε:

$$L^2 = \sum_i \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} r_j p_k \sum_{lm} \varepsilon_{ilm} r_l p_m = \sum_{jk} r_j p_k \sum_{lm} r_l p_m \sum_i \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm}$$

$$= \sum_{jk} r_j p_k \sum_{lm} r_l p_m \left\{ \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \right\} = \sum_{jk} r_j p_k r_j p_k - \sum_{jk} r_j p_k r_k p_j = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$$

και έτσι, βρίσκουμε την κλασσική ανάλυση της ορμής σε ακτινική p_r και στροφορμή L:

$$p^2 = {p_r}^2 + \frac{L^2}{r^2} \tag{9.16}$$

Το κβαντομηχανικό ανάλογο της σχέσης αυτής βρίσκεται με τον ίδιο τρόπο μέχρι το σημείο όπου:

$$L^2 = \sum_{jk} r_j p_k r_j p_k - \sum_{jk} r_j p_k r_k p_j \tag{9.17}$$

Όταν αντικαταστήσουμε τις θέσεις και ορμές στην (9.17) με τους αντίστοιχους τελεστές, $r_i p_j \neq p_j r_i$, γενικά, δηλαδή:

$$\sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} - \sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{j} \neq \hat{\mathrm{r}}^2 \hat{\mathrm{p}}^2 - \left(\hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} \right)^2$$

Αντ' αυτού, πρέπει να αναλύσουμε τους όρους προσέχοντας τη σειρά με την οποία εμφανίζονται. Χρησιμοποιώντας τη σχέση μετάθεσης θέσης-ορμής $\left[\hat{\mathrm{r}}_\mathrm{i}, \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{j} \right] = i\hbar \delta_{ij}$ έχουμε:

$$\hat{\mathrm{L}}^2 = \sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \left(\hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} - i\hbar \delta_{jk} \right) \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} - \sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \left(\hat{\mathrm{r}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} - i\hbar \delta_{kk} \right) \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{j}$$

$$= \hat{\mathrm{r}}^2 \hat{\mathrm{p}}^2 - i\hbar \hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} - \sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{j} + 3i\hbar \hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathrm{L}}^2 = \hat{\mathrm{r}}^2 \hat{\mathrm{p}}^2 - \hat{\vec{\mathrm{r}}} \left(\hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} \right) \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} + 2i\hbar \hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} \tag{9.18}$$

Άσκηση: αποδείξτε ότι μπορεί να γραφεί και ως εξής:

$$\hat{\mathrm{L}}^2 = \hat{\mathrm{r}}^2 \hat{\mathrm{p}}^2 - \left(\hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} \right)^2 + i\hbar \hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} \tag{9.19}$$

$$\hat{\mathrm{L}}^2 = \hat{\mathrm{r}}^2 \hat{\mathrm{p}}^2 - \sum_{jk} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{j} \left(\hat{\mathrm{p}}_\mathrm{j} \hat{\mathrm{r}}_\mathrm{k} + i\hbar \delta_{jk} \right) \hat{\mathrm{p}}_\mathrm{k} + 2i\hbar \hat{\vec{\mathrm{r}}} \cdot \hat{\vec{\mathrm{p}}} = \ldots$$

Χρησιμοποιώντας την (9.18), μπορούμε να υπολογίσουμε τον τελεστή της ακτινικής ορμής, δηλ. τον (9.14). Το εσωτερικό γινόμενο στην (9.19) βρίσκεται εύκολα:

$$\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$$

Οπότε ο δεύτερος όρος στην (9.18) γίνεται:

$$-\hat{\vec{r}}\left(-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}\right) \cdot \hat{\vec{p}} = \hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

και ο τρίτος όρος στην (9.18) γίνεται:

$$2i\hbar \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} = 2\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r}$$

Προσθέτοντας τους όρους έχουμε:

$$\hat{L}^2 = \hat{r}^2 \hat{p}^2 + \underbrace{\hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r}}_{-r^2 \cdot \hat{p}_r^2} = r^2 \hat{p}^2 - r^2 \hat{p}_r{}^2$$

δηλαδή ανακτάμε την (9.16) σε μορφή τελεστών.

Είναι εύκολο να δείξετε ότι οι δυο όροι στον $\hat{p}_r{}^2$ μπορούν να γραφούν ως μια παράγωγος:

$$\hat{p}_r{}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\left\{r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r^2}\right\} = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left\{r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right\} \tag{9.20}$$

Ο άλλος τρόπος εξαγωγής του ίδιου αποτελέσματος είναι να ξεκινήσουμε από την κλασσική έκφραση:

$$p^2 = \left(\vec{e}_r \cdot \vec{p}\right)^2 + \frac{L^2}{r^2}$$

και να αντικαταστήσουμε τις φυσικές ποσότητες με τους αντίστοιχους τελεστές. Ωστόσο εδώ υπάρχει ένα νέο «φαινόμενο»: η απλή αντικατάσταση της θέσης και της ορμής με τους γνωστούς τελεστές δεν δίνει ερμιτιανό τελεστή. Ο λόγος είναι και πάλι ότι, κβαντομηχανικά, ισχύει η (9.2) και επομένως ο τελεστής $\vec{e}_r \cdot \vec{p}$ που περιέχει το εσωτερικό γινόμενο $\vec{r} \cdot \vec{p}$ δεν είναι ερμιτιανός:

$$\hat{\vec{e}}_r \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}}{r} = \frac{\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\left(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}\right)^\dagger = \hat{p}_x{}^\dagger \hat{x}^\dagger + \hat{p}_y{}^\dagger \hat{y}^\dagger + \hat{p}_z{}^\dagger \hat{z}^\dagger = \hat{p}_x \hat{x} + \hat{p}_y \hat{y} + \hat{p}_z \hat{z} = \left(\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{r}}\right) = \left(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}\right) - 3i\hbar \neq \left(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}\right)!$$

Γενικεύοντας το ερώτημα, έστω μια φυσική ποσότητα $q(x, p)$ που, με απλή αντικατάσταση των τελεστών θέσης και ορμής, δεν δίνει ερμιτιανό τελεστή, π.χ $q = x^2 p$. Ο αντίστοιχος ερμιτιανός τελεστής στην Κβαντομηχανική $\hat{q}_{H'}$ είναι:

$$q \to \hat{q}_H = \frac{\hat{q} + \hat{q}^\dagger}{2} \tag{9.21}$$

Ο τελεστής $\hat{q}$ στην (9.21) είναι, εξ'ορισμού, ερμιτιανός. Στο δε κλασσικό όριο, όπου θέση και ορμή μετατίθενται, ο νέος q είναι απλώς ίσος με τον παλιό.

Με αυτό το σκεπτικό , ο τελεστής της ακτινικής ορμής, $\hat{p}_r$, είναι:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}}{r}\right)+\left(\frac{\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{r}}}{r}\right)\right\} \tag{9.22}$$

Άσκηση: αποδείξτε ότι $\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$

Απόδειξη: Η (9.22) δίνει

$$\hat{p}_r f = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{r}r\vec{e}_r\cdot\vec{e}_r\frac{\partial f}{\partial r}+\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{r}}{r}f\right)\right\} = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial r}+f\vec{\nabla}\cdot\frac{\vec{r}}{r}+\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{\nabla}f\right] = \frac{\hbar}{2i}\left(2\frac{\partial f}{\partial r}+f\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\right)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα

$$\vec{\nabla}\cdot\left(f\vec{A}\right)=\left(\vec{\nabla}f\right)\cdot\vec{A}+f\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)$$

Ο δεύτερος όρος υπολογίζεται ως εξής:

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)=\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{x\vec{e}_x+y\vec{e}_y+z\vec{e}_z}{r}\right)=\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{2}\frac{2x^2}{r^3}\right)+\left(\frac{1}{r}-\frac{y^2}{r^3}\right)+\left(\frac{1}{r}-\frac{z^2}{r^3}\right)=\frac{3}{r}-\frac{x^2+y^2+z^2}{r^3}=\frac{2}{r}$$

$$\Rightarrow \hat{p}_r f = \frac{\hbar}{2i}\left(2\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{2f}{r}\right)=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)f$$

Και επομένως, ο τελεστής της ακτινικής ορμής είναι:

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{9.23}$$

Το τετράγωνο της (9.23) υπολογίζεται εύκολα:

$$\hat{p}_r^{\,2} f = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)f = -\hbar^2\left\{\frac{1}{r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}\right\}f = -\hbar^2\left\{\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right\}f$$

και επομένως,

$$\hat{p}_r^{\,2} = -\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right\}$$

που συμφωνεί με την (9.20).

4. <u>Λύση της εξίσωσης Schrödinger σε σφαιρικές συντεταγμένες</u>

Για να λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger σε σφαιρικές συντεταγμένες, δοκιμάζουμε το γινόμενο:

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\Upsilon(\theta,\phi)$$

Αντικαθιστώντας στην (9.13) και διαιρώντας με $\psi(r,\theta,\phi)$, παίρνουμε:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\hat{\Pi}_r R(r)\right\}\frac{1}{R(r)}-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left\{\hat{\Pi}_{\theta,\phi}\Upsilon(\theta,\phi)\right\}\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)}+V(r)=E$$

Σε αντιστοιχία με τα προηγούμενα βήματα θα υπάρχει σταθερά λ τέτοια ώστε

$$\hat{L}^2\Upsilon(\theta,\phi)=-\hbar^2\left[\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right]=\lambda\hbar^2\Upsilon(\theta,\phi) \tag{9.24}$$

Σημειώνουμε ότι το λ είναι αδιάστατο (επειδή βγάλαμε το $\hbar^2$ στην (9.24)). Επειδή και πάλι οι όροι της (9.24) εξαρτώνται είτε από το θ είτε από το ϕ, δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$\Upsilon(\theta,\phi)=P(\theta)Q(\phi)$$

Αντικαθιστώντας και διαιρώντας με $\Upsilon(\theta,\phi)$, παίρνουμε

$$\frac{1}{P}\frac{d^2P}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{1}{P}\frac{dP}{d\theta}+\frac{1}{Q}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2Q}{d\phi^2}+\lambda=0$$

Για ακόμα μια φορά, έχουμε το άθροισμα δυο συναρτήσεων ανεξάρτητων μεταβλητών

$$\underbrace{\frac{1}{Q}\frac{d^2Q}{d\phi^2}}_{g(\phi)}+\underbrace{\sin^2\theta\left\{\frac{1}{P}\frac{d^2P}{d\theta^2}+\frac{1}{P}\cot\theta\frac{dP}{d\theta}+\lambda\right\}}_{f(\theta)}=0 \tag{9.25}$$

$$g(\phi)+f(\theta)=0$$

Και πάλι, εφόσον οι δυο όροι εξαρτώνται από διαφορετικές ανεξάρτητες μεταβλητές, θα πρέπει να ισούνται με μια σταθερά, c. Αυτό μας δίνει

$$\frac{d^2Q}{d\phi^2}=cQ \tag{9.26}$$

Είναι προφανές ότι για $c>0$ οι λύσεις της (9.26) δεν είναι περιοδικές στο ϕ (και θα πρέπει, εξ' ορισμού, για να ορίζεται η κυματοσυνάρτηση «στη γωνία ϕ», να ισχύει $Q(\phi)=Q(\phi+2\pi)$). Άρα $c<0$ και γράφουμε $c=-m^2$. Οπότε έχουμε

$$\frac{d^2Q}{d\phi^2}=-m^2Q\Rightarrow Q\sim e^{\pm im\phi}$$

Εφαρμόζοντας τη συνοριακή συνθήκη $Q(\phi)=Q(\phi+2\pi)$ παίρνουμε

$e^{im\phi}=e^{im(\phi+2\pi)}\Rightarrow e^{2\pi mi}=1\Rightarrow m$: ακέραιος

Αντικαθιστώντας την (9.26) στην (9.25) έχουμε:

$$\frac{d^2P}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{dP}{d\theta}+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)P=0 \tag{9.27}$$

Κάνουμε την εξής αλλαγή μεταβλητής:

$$u = \cos\theta \Rightarrow du = -\sin\theta d\theta$$

Οπότε οι δυο πρώτοι όροι στην (9.27) γράφονται ως εξής:

$$\frac{d^2P}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{dP}{d\theta} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{dP}{d\theta}\right]$$

και η διαφορική εξίσωση (9.27) γράφεται

$$\frac{d}{du}\left\{\left(1-u^2\right)\frac{dP}{du}\right\} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-u^2}\right)P = 0 \tag{9.28}$$

Για $m = 0$, αποδεικνύεται εύκολα, μολονότι με αρκετή άλγεβρα (βλέπε Μαθηματικό Συμπλήρωμα του κεφαλαίου), ότι η (9.28) έχει λύσεις μόνο όταν η παράμετρος λ παίρνει τις τιμές $\ell\left(\ell+1\right)$ όπου ℓ φυσικός αριθμός (ή 0). Οι λύσεις της (9.28) είναι *πολυώνυμα βαθμού* ℓ, και ονομάζονται «πολυώνυμα Legendre». Το πολυώνυμο βαθμού ℓ δίδεται ως:

$$P_\ell\left(u\right) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{du^\ell}\left[\left(u^2-1\right)^\ell\right] \tag{9.29}$$

Σημειώνουμε ότι εφόσον η εξίσωση είναι συμμετρική ως προς u, οι $P_\ell\left(u\right)$ πρέπει να είναι *άρτιες* ή *περιττές* συναρτήσεις.

Είναι εύκολο, μολονότι χρειάζεται λίγη άλγεβρα, να αποδειχθεί ότι τα πολυώνυμα P_ℓ είναι, κάθετα μεταξύ τους και η κανονικοποίησή τους δίδεται ως

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell\left(\cos\theta\right)P_{\ell'}\left(\cos\theta\right)d\left(\cos\theta\right) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'} \tag{9.30}$$

Για $m \neq 0$ η γενίκευση της (9.29) δίνει τα συναφή πολυώνυμα Legendre[1]:

$$P_\ell^m\left(u\right) = \left(1-u^2\right)^{m/2}\frac{d^m P_\ell\left(u\right)}{du^m} = \frac{1}{2^\ell \ell!}\left(1-u^2\right)^{m/2}\frac{d^{\ell+m}}{du^{\ell+m}}\left(u^2-1\right)^\ell \tag{9.31}$$

Το $P_\ell^{-m}\left(u\right)$ ορίζεται ως εξής:

$$P_\ell^{-m}\left(u\right) = \left(-1\right)^m\frac{\left(\ell-m\right)!}{\left(\ell+m\right)!}P_\ell^m\left(u\right)$$

Η κανονικοποίηση των P_ℓ^m δίδεται από την εξής σύμβαση:

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^m\left(x\right)P_\ell^m\left(x\right)dx = \frac{2}{2\ell+1}\frac{\left(\ell+m\right)!}{\left(\ell-m\right)!} \tag{9.32}$$

[1] Associated Legendre polynomials

Από τις (9.31) και (9.32) βλέπουμε ότι $|m| \le \ell$. Τέλος, συνδυάζοντας τα $P_\ell^m(\cos\theta)$ με τα $Q_m(\phi)$, παίρνουμε τη μορφή των λύσεων $\Upsilon(\theta,\phi)$. Αυτές ονομάζονται σφαιρικές αρμονικές και δίδονται ως

$$\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi) = A_\ell^m (-1)^m e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta) \tag{9.33}$$

όπου A_ℓ^m η σταθερά κανονικοποίησης που δίδεται ως:

$$A_\ell^m = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

Έτσι έχουμε βρει τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις της $\vec{L}^2$:

$$\hat{\vec{L}}^2 \Upsilon_\ell^m(\theta,\phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 \Upsilon_\ell^m(\theta,\phi) \tag{9.34}$$

4.1 <u>Πολυώνυμα Legendre και Σφαιρικές Αρμονικές</u>

1) Κανονικοποίηση των Υ_ℓ^m :

$$\int \Upsilon_\ell^{m*}(\theta,\phi)\Upsilon_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi) d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

όπου $d\Omega = d(\cos\theta)d\phi$ και $|m| \le \ell$

2) Δυο σημαντικές ιδιότητες των σφαιρικών αρμονικών:

α) $\Upsilon_\ell^{m*}(\theta,\phi) = (-1)^m \Upsilon_\ell^{-m}(\theta,\phi)$

β) $\Upsilon_\ell^m(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^\ell \Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$

Απόδειξη β: $\theta \to \pi-\theta$

$\phi \to \phi+\pi$

$$\Upsilon_\ell^m(\pi-\theta,\phi+\pi) = A_{\ell m}(-1)^m \cdot e^{im\pi} \cdot (-1)^{\ell+m} \cdot e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta) = (-1)^\ell \Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$$

Η ιδιότητα αυτή είναι εξαιρετικά σημαντική για τα στοιχειώδη.

Οι πρώτες σφαιρικές αρμονικές δίδονται από τις εξής εκφράσεις:

$$\Upsilon_0^{\,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\Upsilon_1^{\,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r}$$

$$\Upsilon_1^{\,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{\pm i\phi}\sin\theta = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\frac{x\pm iy}{r}$$

$$\Upsilon_2^{\,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}\right) \qquad (9.35)$$

$$\Upsilon_2^{\,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}e^{\pm i\phi}\cos\theta\sin\theta = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\left(\frac{x\pm iy}{r^2}\right)\cdot z$$

$$\Upsilon_2^{\,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{\pm 2i\phi}\sin^2\theta = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\frac{\left(x\pm iy\right)^2}{r^2}$$

Οι εκφράσεις ως προς τα x, y, r βρίσκονται με απλή αντικατάσταση των σφαιρικών συντεταγμένων με τις αντίστοιχες καρτεσιανές, π.χ.:

$$e^{\pm 2i\phi}\sin^2\theta = \left(e^{\pm i\phi}\sin\theta\right)^2 = \left(\frac{x\pm iy}{r}\right)^2$$

Τέλος: οι $\Upsilon_\ell^{\,m}$ ορίζουν ένα χώρο Hilbert: οποιαδήποτε συνάρτηση των θ,ϕ, έστω $f\left(\theta,\phi\right)$ μπορεί να εκφρασθεί ως γραμμικός συνδυασμός τους:

$$f\left(\theta,\phi\right) = \sum_\ell\ \sum_m a_{\ell m}\Upsilon_\ell^{\,m}\left(\theta,\phi\right)$$

όπου $a_{\ell m}$ σταθερές που μπορούν να υπολογισθούν από την ορθοκανονικότητα των $\Upsilon_\ell^{\,m}$:

$$\int \Upsilon_{\ell'}^{\,m'*}\left(\theta,\phi\right) f\left(\theta,\phi\right) d\Omega = \sum_\ell\ \sum_m a_{\ell m}\int \Upsilon_{\ell'}^{\,m'*}\left(\theta,\phi\right)\Upsilon_\ell^{\,m}\left(\theta,\phi\right) d\Omega = \sum_\ell\ \sum_m a_{\ell m}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} = a_{\ell' m'}$$

Στην πράξη, οι συντελεστές $\alpha_{\ell m}$ μπορεί να υπολογισθούν και με το «μάτι», όπως δείχνει το παράδειγμα 1 πιο κάτω.

5. Στροφορμή, ιδιοσυναρτήσεις και ιδιοτιμές

Πώς βρίσκουμε τις συνιστώσες της $\vec{L}$; Υπάρχουν δυο μέθοδοι:

α) Με αλλαγή μεταβλητής από καρτεσιανές σε σφαιρικές, π.χ. για τη συνιστώσα x της στροφορμής, L_x:

$$\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{x}} = \hat{\mathrm{z}}\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{y}} - \hat{\mathrm{y}}\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{z}} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

και ακολούθως με αντικατάσταση των καρτεσιανών συντεταγμένων , π.χ

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

β) Από τον ορισμό του ανύσματος:

$$\hat{\vec{\mathrm{L}}} = \hat{\vec{\mathrm{r}}} \times \hat{\vec{\mathrm{p}}} = r\vec{e}_r \times \left\{-i\hbar\vec{\nabla}\right\} = \frac{\hbar}{i} r\vec{e}_r \times \left\{\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{\partial}{r\partial\theta} + \frac{\vec{e}_\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

Χρησιμοποιώντας τα εξωτερικά γινόμενα: $\vec{e}_r \times \vec{e}_\theta = \vec{e}_\phi$ και $\vec{e}_r \times \vec{e}_\phi = -\vec{e}_\theta$, παίρνουμε:

$$\hat{\vec{\mathrm{L}}} = \frac{\hbar}{i}\left\{\vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\} \tag{9.36}$$

Τώρα μπορούμε να βρούμε τις καρτεσιανές συνιστώσες της $\vec{L}$, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της με τα μοναδιαία ανύσματα $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$. Για παράδειγμα, η L_z υπολογίζεται ως εξής:

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z} = \vec{e}_z \cdot \hat{\vec{\mathrm{L}}} = \frac{\hbar}{i}\left\{\vec{e}_z \cdot \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_z \cdot \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right\} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

όπου στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι

$$\vec{e}_z \cdot \vec{e}_\theta = \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin\theta$$

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο και χρησιμοποιώντας

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_\phi = \cos\left(\phi + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin\phi \;\text{ και }\; \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_x = \cos\theta\cos\phi$$

βγάζουμε:

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x} = \vec{e}_x \cdot \hat{\vec{\mathrm{L}}} = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{9.37}$$

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y} = \vec{e}_y \cdot \hat{\vec{\mathrm{L}}} = \frac{\hbar}{i}\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{9.38}$$

Μπορείτε εύκολα (μολονότι με αρκετή άλγεβρα) να επιβεβαιώσετε ότι οι (9.36), (9.37), (9.38) δίνουν:

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x}{}^2 + \hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y}{}^2 + \hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}{}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

Παρατηρούμε ότι η $\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$ είναι ιδιοσυνάρτηση και του τελεστή $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}$:

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}\Upsilon_\ell^m = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\left\{A_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\phi}\right\} = m\hbar\Upsilon_\ell^m$$

Άρα η $\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$ είναι η κυματοσυνάρτηση σωματιδίου με ολική στροφορμή $\sqrt{\ell(\ell+1)\hbar^2}$ και προβολή $m\hbar$ στον άξονα z. Με την ευκαιρία, εδώ έχουμε τη δυνατότητα να αποδείξουμε ότι $|m| \le \ell$:

$$\langle L^2\rangle = \langle L_x{}^2\rangle + \langle L_y{}^2\rangle + \langle L_z{}^2\rangle \Rightarrow \ell(\ell+1)\hbar^2 \ge m^2\hbar^2 \tag{9.39}$$

και εφόσον ο m είναι ακέραιος και η (9.39) ισχύει για $m=\ell$ αλλά όχι για $m=\ell+1$, συμπεραίνουμε $|m|\le\ell$.

Οι συναρτήσεις $\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$ δεν είναι και ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x},\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y}$. Ως παράδειγμα, δρώντας με την (9.37) στην Υ_ℓ^m έχουμε:

$$\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x}\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)=\frac{\hbar}{i}\left[-\sin\phi\cdot(-1)^m A_\ell^m\frac{dP_\ell^m(\cos\theta)}{d\theta}e^{im\phi}-\cot\theta\cos\phi(im)\Upsilon_\ell^m\right]\neq(\text{αριθμός})\cdot\Upsilon_\ell^m(\theta,\phi)$$

Γενικά, οι τελεστές που αντιστοιχούν στις προβολές $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x}$, $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y}$ και $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}$ δεν μετατίθενται μεταξύ τους: π.χ. $\left[\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x},\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}\right]\neq 0$

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x},\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}\right]&=\frac{\hbar}{i}\frac{\hbar}{i}\left\{\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\phi}\right)+\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right\}\\&=\frac{\hbar}{i}\frac{\hbar}{i}\left\{-\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi}-\cot\theta\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}-\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}\\&=\frac{\hbar}{i}\frac{\hbar}{i}\left\{\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}=\frac{\hbar}{i}\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y}\Rightarrow\left[\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z},\hat{\mathrm{L}}_x\right]=i\hbar\hat{\mathrm{L}}_y\end{aligned}$$

Με τον ίδιο τρόπο υπολογίζουμε και τους άλλους δυο μεταθέτες:

$$\left[\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x},\hat{\mathrm{L}}_y\right]=i\hbar\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z},\quad\left[\hat{\mathrm{L}}_y,\hat{\mathrm{L}}_z\right]=i\hbar\hat{\mathrm{L}}_x \tag{9.40}$$

Αποδεικνύεται επίσης (με αρκετή άλγεβρα) ότι

$$\left[\hat{\mathrm{L}}^2,\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{x}\right]=\left[\hat{\mathrm{L}}^2,\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{y}\right],\left[\hat{\mathrm{L}}^2,\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{z}\right]=0$$

Από τις σχέσεις μετάθεσης των $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{i}$, συμπεραίνουμε ότι δεν μπορούμε να μετρήσουμε συγχρόνως πάνω από μια προβολή της στροφορμής, και άρα δεν μπορούμε να γνωρίζουμε το πλήρες άνυσμα της $\vec{L}$. Μόνο το μέγεθος του ανύσματος, και το πολύ μια συνιστώσα, μπορούμε να προσδιορίσουμε συγχρόνως.

<u>Παράδειγμα 1:</u> Βρείτε τις πιθανές τιμές της L_z και τις αντίστοιχες πιθανότητες εμφάνισης των, για σωμάτιο που έχει την εξής κυματοσυνάρτηση:

$$f(\theta,\phi)=A\sin^2\theta\cos 2\phi$$

Παρατηρώντας τη μορφή της $f(\theta,\phi)$, βλέπουμε ότι η εξάρτηση από την ϕ είναι της μορφής $\cos 2\phi$, και άρα, μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός σφαιρικών αρμονικών της μορφής

$$\Upsilon_2^{\pm 2}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$$

Αναπτύσσοντας τον εκθετικό όρο:

$$\Upsilon_2^{+2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\left(\cos 2\phi + i\sin 2\phi\right)$$
$$\Upsilon_2^{-2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\left(\cos 2\phi - i\sin 2\phi\right)$$

Και επομένως,

$$f\left(\theta,\phi\right) = 2A\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(\Upsilon_2^{+2} + \Upsilon_2^{-2}\right)$$

Άρα, υπάρχει μόνο μια δυνατή τιμή της ℓ, η $\ell = 2$. Και επομένως,

$$\left|\vec{L}\right| = \sqrt{2\cdot 3}\hbar$$

Η δε L_z παίρνει τις τιμές $+2\hbar$ και $-2\hbar$ με πιθανότητα $50\% - 50\%$.

<u>Παράδειγμα 2</u>: Σωμάτιο έχει κυματοσυνάρτηση

$$\psi\left(x,y,z\right) = c\left(xy + yz + zx\right)e^{-ar^2}$$

Βρείτε την πιθανότητα η στροφορμή του σωματίου να είναι 0. Επίσης, την πιθανότητα η $\left|\vec{L}\right|$ να είναι $\sqrt{6}\hbar$. Τι δίνει, και με ποια πιθανότητα, η μέτρηση της L_z;

Είναι προφανές ότι πρέπει να εκφράσουμε την $\psi\left(\vec{r}\right)$ σε σφαιρικές συντεταγμένες.

$$\left.\begin{array}{l} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \end{array}\right\} \Rightarrow \psi\left(\vec{r}\right) = cr^2\left\{\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi + \sin\theta\cos\theta\sin\phi + \sin\theta\cos\theta\cos\phi\right\}e^{-ar^2}$$

$$= cr^2\left\{\frac{1}{2}\sin^2\theta\sin 2\phi + \sin\theta\cos\theta\left(\sin\phi + \cos\phi\right)\right\}e^{-ar^2}$$

$$\left.\begin{array}{l} \Upsilon_2^{+1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}e^{+i\phi}\cos\theta\sin\theta \\ \Upsilon_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}e^{-i\phi}\cos\theta\sin\theta \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} \Upsilon_2^{+1} + \Upsilon_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cdot\cos\theta\sin\theta\left\{-2i\sin\phi\right\} \\ \Upsilon_2^{+1} - \Upsilon_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cdot\cos\theta\sin\theta\left\{-2\cos\phi\right\} \end{array}\right.$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{array}{l} \sin\theta\cos\theta\sin\phi = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}\cdot\frac{i}{2}\left(\Upsilon_2^{+1} + \Upsilon_2^{-1}\right) \\ \sin\theta\cos\theta\cos\phi = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}\cdot\frac{1}{2}\left(\Upsilon_2^{-1} - \Upsilon_2^{+1}\right) \end{array}\right.$$

$$\left.\begin{array}{l} \Upsilon_2^{+2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(\cos 2\phi + i\sin 2\phi\right)\sin^2\theta \\ \Upsilon_2^{-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(\cos 2\phi - i\sin 2\phi\right)\sin^2\theta \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} \Upsilon_2^{+2} + \Upsilon_2^{-2} = 2\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\cdot\cos 2\phi\sin^2\theta \\ \Upsilon_2^{+2} - \Upsilon_2^{-2} = 2i\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\cdot\sin 2\phi\sin^2\theta \end{array}\right.$$

$$\psi\left(\vec{r}\right)=cr^2e^{-ar^2}\left\{\frac{1}{4i}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}\cdot\left(\Upsilon_2^{+2}-\Upsilon_2^{-2}\right)+\frac{i}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}\left(\Upsilon_2^{+1}+\Upsilon_2^{-1}\right)+\sqrt{\frac{8\pi}{15}}\frac{1}{2}\left(\Upsilon_2^{-1}-\Upsilon_2^{+1}\right)\right\}$$

$$=\frac{c}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2e^{-ar^2}\left\{\frac{\Upsilon_2^{+2}}{i}-\frac{\Upsilon_2^{-2}}{i}+i\left(\Upsilon_2^{+1}+\Upsilon_2^{-1}\right)+\left(\Upsilon_2^{-1}-\Upsilon_2^{+1}\right)\right\}$$

$$=\frac{c}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2e^{-ar^2}\left\{-i\Upsilon_2^{+2}+i\Upsilon_2^{-2}-(1-i)\Upsilon_2^{+1}+(1+i)\Upsilon_2^{-1}\right\}=\frac{c}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2e^{-ar^2}F\left(\theta,\phi\right)$$

Κανονικοποίηση:

$$\int\left|\psi\right|^2dV\rightarrow\int drr^2r^4e^{-2ar^2}\int d\Omega\left|F\left(\theta,\phi\right)\right|^2\frac{\left|c\right|^2}{4}\frac{8\pi}{15}$$

$$\int d\Omega\left|F\left(\theta,\phi\right)\right|^2=\frac{\left(4a\right)^3}{\pi c^2}\sqrt{\frac{2a}{\pi}}$$

αφού

$$\int drr^6e^{-2ar^2}=\frac{15}{2\left(4\alpha\right)^3}\sqrt{\frac{\pi}{2a}}$$

Τέλος, από τη μορφή της $F\left(\theta,\phi\right)$ βρίσκουμε άμεσα:

$$p\left(\ell=0\right)=0\qquad p\left(\ell=\sqrt{6}\hbar\right)=100\%$$

$$p\left(m=2\right)=p\left(m=-2\right)=\frac{1}{6},\ p\left(m=+1\right)=p\left(m=-1\right)=\frac{1}{3},\ p\left(m=0\right)=0$$

6. <u>Εύρεση πολυωνύμων Legendre</u>

Υπάρχουν δυο τρόποι υπολογισμού των πολυωνύμων:

α) Με εφαρμογή του τύπου (9.29). Ως παράδειγμα, για το $P_2\left(u\right)$ έχουμε:

$$P_2\left(u\right)=\frac{1}{2^22!}\frac{d^2}{du^2}\left[\left(u^2-1\right)^2\right]=\frac{1}{8}\frac{d}{du}\left[4u^3-4u\right]=\frac{\left(3u^2-1\right)}{2}$$

β) Μέσω της διαφορικής εξίσωσης (9.28). Ως παράδειγμα, για το $P_2\left(\cos\theta\right)$ έχουμε:

$$\ell=2:P_2\left(u\right)=a_0+a_1u+a_2u^2\Rightarrow P_2'\left(u\right)=a_1+2a_2u$$

$$\frac{d}{du}\left[a_1+2a_2u-a_1u^2-2a_2u^3\right]+2\cdot3\cdot\left(a_0+a_1u+a_2u^2\right)=0$$

$$\Rightarrow 2a_2-2a_1u-6a_2u^2+6a_0+6a_1u+6a_2u^2=0$$

$$\Rightarrow 4a_1u+\left(6a_0+2a_2\right)=0\Rightarrow a_1=0,\ a_2=-3a_0$$

και άρα

$$P_2\left(u\right)=a_0\left(1-3u^2\right)$$

όπου η σταθερά a_0, υπολογίζεται από τη σχέση κανονικοποίησης (9.30).

Μερικά πολυώνυμα Legendre $P_\ell(\cos\theta) = P_\ell(u)$:

$$P_0(u) = 1 \qquad P_3(u) = \frac{1}{2}\left(5u^3 - 3u\right)$$

$$P_1(u) = u \qquad P_4(u) = \frac{1}{8}\left(35u^4 - 30u^2 + 3\right)$$

$$P_2(u) = \frac{1}{2}\left(3u^2 - 1\right) \qquad P_5(u) = \frac{1}{8}\left(63u^5 - 70u^3 + 15u\right)$$

7. Η στροφορμή ως γεννήτορας στροφών.

Ορίζουμε τον τελεστή στροφής κατά $\Delta\phi$ γύρω από τον άξονα z, ως $\hat{R}$:

$$f(\phi);\ \text{μετασχηματισμός},\ \mathrm{\hat{R}}f(\phi) = f(\phi + \Delta\phi);$$

Για μικρό $\Delta\phi$,

$$\mathrm{\hat{R}}f(\phi) = f(\phi + \Delta\phi) = f(\phi) + f'(\phi)\Delta\phi + \frac{1}{2!}f''(\phi)(\Delta\phi)^2 + \ldots$$

Όμως, $\hat{\mathrm{L}}_z = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \Rightarrow \dfrac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z f(\phi) = f'(\phi)$ και $\left(\dfrac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z\right)^2 f(\phi) = f''(\phi)$

$$\begin{aligned}
\mathrm{\hat{R}}f(\phi) &= f(\phi) + \left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z\Delta\phi\right)f(\phi) + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z\Delta\phi\right)^2 f(\phi) + \ldots \\
&= \left\{1 + \frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z\Delta\phi + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{L}}_z\Delta\phi\right)^2 + \ldots\right\} f(\phi) \\
&= \exp\left\{\frac{i\hat{\mathrm{L}}_z}{\hbar}\Delta\phi\right\} f(\phi)
\end{aligned}$$

Επομένως, ο τελεστής που μετασχηματίζει την $f(\phi)$ όταν η γωνία αλλάζει από ϕ σε $\phi + \Delta\phi$, (που αντιστοιχεί σε στροφή των αξόνων κατά $-\Delta\phi$), δίδεται ως

$$\mathrm{\hat{R}} = e^{i\Delta\phi\hat{\mathrm{L}}_z/\hbar}$$

Γενικότερα, για στροφή κατά γωνία ω γύρω από τον άξονα που δίνεται από το μοναδιαίο άνυσμα $\hat{\mathrm{n}}$:

$$\mathrm{\hat{R}} = e^{i\hat{\mathrm{n}}\cdot\hat{\mathrm{L}}\omega/\hbar}$$

Αν ο χώρος είναι ομογενής, τότε προφανώς όλα τα φυσικά φαινόμενα θα είναι αναλλοίωτα κάτω από στροφές των αξόνων κατά $\Delta\phi$ και η $\hat{R}f(\theta,\phi)$ είναι κυματοσυνάρτηση. Και επομένως,

$$\left[\mathrm{\hat{R}}, \mathrm{\hat{H}}\right] = 0 \Rightarrow \left[\vec{L}, \mathrm{\hat{H}}\right] = 0 \Rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} = 0$$

Παίρνοντας τις ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής, έστω $f(\theta,\phi)$, θα πρέπει:

$$\int \psi'^{*}\hat{\mathrm{H}}\psi' dV = \int \psi^{*}\hat{\mathrm{H}}\psi dV$$

και επομένως, εφόσον $\psi' = R\psi, \quad \hat{\mathrm{R}}^{\dagger}\hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{R}}=\hat{\mathrm{H}} \Rightarrow \left[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{R}}\right]=0$.

Και όντως, αν $V(\vec{r}) = f(r)$ μόνο, δηλαδή το δυναμικό είναι «αγνωστικό» ως προς θ,ϕ, $\left[\hat{\mathrm{H}},\vec{L}\right]=0$

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{r}}^{\,2}}{2m} + \frac{\hat{\vec{\mathrm{L}}}^{2}}{2mr^{2}} + V(r)$$

Πίσω στον 2D απλό αρμονικό ταλαντωτή:

$$\varphi_{nm}(x,y) = H_n(x)H_m(y)e^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2}$$

Επανερχόμαστε τώρα στις καταστάσεις με ολική ενέργεια $E = 2\hbar\omega$, που αντιστοιχούν στο $(n+m+1)=2$, δηλ. $n+m=1$. Όπως έχουμε ήδη δει, υπάρχουν δυο τέτοιες ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής:

$$n=1,\ m=0:\ \varphi_{1\,0}(x,y) = H_1(x)H_0(y)e^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2}$$
$$n=0,\ m=1:\ \varphi_{0\,1}(x,y) = H_0(x)H_1(y)e^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2}$$

Χρησιμοποιώντας τη μορφή των πολυωνύμων Hermite,

$$H_0 = c \qquad\qquad H_1 = 2x$$

και επομένως

$$\varphi_{10}(x,y) \sim xe^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2}$$
$$\varphi_{01}(x,y) \sim ye^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2}$$

Παίρνοντας τον εξής γραμμικό συνδυασμό των φ_{10} και φ_{01},

$$\psi_{1,2} = \frac{\varphi_{10} \pm i\varphi_{01}}{\sqrt{2}} = (x \pm iy)e^{-\beta^2x^2/2}e^{-\beta^2y^2/2} = r\sin\theta e^{\pm i\phi}e^{-\beta^2r^2} = \mp\sqrt{\frac{4\pi}{3}}r\mathrm{Y}_1^{\pm1}e^{-\beta^2r^2}$$

Και βλέπουμε ότι οι $\psi_{1,2}$ είναι καταστάσεις με $\ell = 1\left(L = \sqrt{2}\hbar\right)$ και $m = \pm1\hbar$.

Σημειώνουμε ότι οι φ_{nm} δεν είναι ιδιοκαταστάσεις του «άλλου τελεστή». Η «άλλη» φυσική ποσότητα, είναι η στροφορμή, και αντιστοιχεί σε γραμμικούς συνδυασμούς που διαφοροποιούν την εκφύλιση:

$$\psi(x,y) = a\varphi_{10}(x,y) + \beta\varphi_{01}(x,y) \qquad\qquad E_\psi = E_{10} = E_{01}$$

Βλέπουμε εδώ ότι μολονότι η $\hat{\mathrm{H}}$ και η $\hat{\mathrm{L}}_z$ μετατίθενται, οι ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{\mathrm{H}}$ δεν είναι αναγκαστικά και ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{\mathrm{L}}_z$. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το θεώρημα λέει ότι όταν δυο τελεστές $\left[\hat{\mathrm{A}},\hat{\mathrm{B}}\right]=0$, τότε υπάρχει ένα σύνολο κοινών ιδιοσυναρτήσεων. Δεν είναι, ωστόσο, *όλοι* οι δυνατοί γραμμικοί συνδυασμοί των ιδιοσυναρτήσεων του $\hat{A}$ και ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{B}$ (και το αντίθετο).

8. <u>Μαθηματικό συμπλήρωμα</u>

8.1 <u>Λύση της διαφορικής εξίσωσης Legendre</u>

Για $m=0$ η εξίσωση είναι

$$\frac{d}{du}\left[\left(1-u^2\right)\frac{dP}{du}\right]+\lambda P=0 \tag{9.41}$$

Αναπτύσσουμε σε σειρά:

$$P(u)=\sum_k a_k u^k \Rightarrow P'(u)=\sum_k k a_k u^{k-1} \tag{9.42}$$

Αντικαθιστώντας στην (9.41):

$$\frac{d}{du}\left[\sum_k k a_k u^{k-1}-\sum_k k a_k u^{k+1}\right]+\lambda\sum a_k u^k=0$$

$$\Rightarrow \sum_k k(k-1)a_k u^{k-2}-\sum_k k a_k (k+1)u^k+\lambda\sum a_k u^k=0$$

$$\Rightarrow \sum_n (n+2)(n+1)a_{n+2}u^n-\sum_n\left[n(n+1)-\lambda\right]a_n u^n=0$$

$$a_{n+2}=a_n\frac{n(n+1)-\lambda}{(n+2)(n+1)}$$

Εξετάζουμε αν συγκλίνει η σειρά (και επομένως κοιτάμε την ακολουθία):

$$\lim_{n\to\infty}\frac{a_{n+2}}{a_n}=\frac{n(n+1)}{(n+2)(n+1)}=\frac{n}{n+2}$$

και επομένως η (9.42) δεν συγκλίνει για

$$u=\pm1\ (\cos\theta=\pm1)$$

Επομένως η (9.42) δεν συγκλίνει, παρά μόνο αν η σειρά δεν είναι άπειρη, δηλαδή αν τερματίζεται. Αυτό σημαίνει ότι

$$a_{n+2}=0 \text{ για κάποια τιμή του } n\text{, έστω } n=\ell$$

Άρα υπάρχει ακέραιος ℓ τέτοιος ώστε $\ell(\ell+1)=\lambda$. Επομένως η εξίσωση έχει λύσεις μόνο για λ της μορφής $\ell(\ell+1)$.

Για $m\neq0$, η εξίσωση είναι

$$\frac{d}{du}\left[\left(1-u^2\right)\frac{dP}{du}\right]+\left[\lambda-\frac{m^2}{1-u^2}\right]P=0 \tag{9.43}$$

Η (9.43) προκύπτει από την (9.41) με m διαδοχικές παραγωγίσεις[2]. Έτσι καταλήγουμε στη μορφή

$$P_\ell^m(u) = \left(1-u^2\right)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_\ell(u)}{du^{|m|}}$$

Η γενικότερη συμπεριφορά της $P_\ell^m(u)$ εξάγεται ως εξής: Είναι προφανές, ότι λόγω του παράγοντα $\left(1-u^2\right)$ στον παρονομαστή του δεύτερου όρου, η συμπεριφορά του $P(u)$ θα πρέπει να είναι αντίστοιχη, δηλαδή θα πρέπει να μηδενίζεται:

$$P(u) \sim \left(1-u^2\right)^n$$

όπου n μια δύναμη που πρέπει να υπολογίσουμε. Αντικαθιστώντας στην (9.43), παίρνουμε

$$\frac{d}{du}\left[\left(1-u^2\right) n \left(1-u^2\right)^{n-1}(-2u)\right] + \lambda\left(1-u^2\right)^n - m^2\left(1-u^2\right)^{n-1} = 0$$

Κάνοντας τις πράξεις, καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\left[(\lambda-2n)\left(1-u^2\right) + 4n^2u^2 - m^2\right] = 0 \tag{9.44}$$

Εκείνο που μας ενδιαφέρει είναι η συμπεριφορά της $P(u)$ στο όριο $u \to \pm 1$. Επομένως η (9.44) γίνεται

$$4n^2 - m^2 = 0 \Rightarrow n = \frac{|m|}{2}$$

Άρα, στο όριο $u \to 1$, η $P(u)$ συμπεριφέρεται ως $\left(1-u^2\right)^{|m|/2}$. Και η πλήρης $P(u)$ γράφεται ως

$$P(u) = \left(1-u^2\right)^{|m|/2} F(u) \tag{9.45}$$

όπου $F(u)$ συνάρτηση που πρέπει να βρούμε. Αντικαθιστώντας την (9.45) στην (9.43), μας οδηγεί στην εξής έκφραση:

$$\left(1-u^2\right)\frac{d^2F}{du^2} - 2\left(|m|+1\right)u\frac{dF}{du} + \left[\lambda - |m|\left(|m|+1\right)\right]F = 0 \tag{9.46}$$

που είναι η εξίσωση Legendre (9.27). Με ακριβώς τον ίδιο τρόπο, όπως και στην περίπτωση $m=0$, μπορούμε να δείξουμε ότι η (9.46) έχει πεπερασμένη λύση μόνο για ειδικές τιμές του λ που δίδονται ως

$$\lambda = \left(n+|m|\right)\left(n+|m|+1\right)$$

Θέτοντας $\ell = n+|m|$, παίρνουμε την ίδια λύση δηλ. $\lambda = \ell(\ell+1)$ και εφόσον $n \geq 0 \Rightarrow \ell \geq |m|$.

8.2 <u>Λαπλασιανή σε σφαιρικές συντεταγμένες</u>

[2] Χρησιμοποιούμε απόδειξη δι' επαγωγής: για $m=1$ είναι εύκολο. Ακολούθως, θεωρούμε ότι ισχύει για $m=k$, και με μια παραγώγιση δείχνουμε ότι ισχύει για $m=k+1$.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad \begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}$$

$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{\partial f}{\partial x}\right\} \rightarrow$ τεράστια δουλειά

Αντ' αυτού, χρησιμοποιώντας τον ορισμό του αναδέλτα, $\vec{\nabla} f \cdot \vec{e}_n = \frac{df}{ds}$ για $d\vec{s} = ds\vec{e}_n$

$$\vec{e}_n = \vec{e}_r \Rightarrow ds = dr \Rightarrow \frac{df}{dr} = \vec{\nabla} f \cdot \vec{e}_r \Rightarrow \left(\vec{\nabla} f\right)_r = \frac{\partial f}{\partial r}$$

$$\vec{e}_n = \vec{e}_\theta \Rightarrow ds = rd\theta \Rightarrow \frac{df}{rd\theta} = \vec{\nabla} f \cdot \vec{e}_\theta \Rightarrow \left(\vec{\nabla} f\right)_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}$$

$$\vec{e}_n = \vec{e}_\phi \Rightarrow ds = r\sin\theta d\phi \Rightarrow \frac{df}{r\sin\theta d\phi} = \vec{\nabla} f \cdot \vec{e}_\phi \Rightarrow \left(\vec{\nabla} f\right)_\phi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \phi}$$

$$\vec{\nabla} f\left(r,\theta,\phi\right) = \vec{e}_r\frac{\partial f}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{\partial f}{r\partial \theta} + \vec{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \phi}$$

Στις σφαιρικές συντεταγμένες:

$$\left(\vec{\nabla} f\right)_r = \frac{\partial}{\partial r},\ \left(\vec{\nabla} f\right)_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta},\ \left(\vec{\nabla} f\right)_\phi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

Είναι ενδιαφέρον ότι οι τρεις αυτοί τελεστές δεν μετατίθενται:

$$\left[\left(\vec{\nabla} f\right)_r, \left(\vec{\nabla} f\right)_\theta\right] f\left(r,\theta,\phi\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial f}{\partial r} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 f}{\partial r\partial \theta} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial f}{\partial \theta}!$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι

$$\left[\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{r}}, \hat{\mathrm{L}}^2\right] = 0$$

(όπως και περιμέναμε).