<u>Wykład IX</u> Mechanika kwantowa

<u>Moment pędu</u>

Operator momentu pędu definiujemy jako

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}} \equiv \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\, \mathbf{r} \times \nabla}$$

więc składowe $\hat{\mathbf{L}}$ we współrzędnych kartezjańskich równe są

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \qquad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \qquad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Obliczamy komutator

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= -\hbar^2 \left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right] \\
&= -\hbar^2 \left(\left[y\frac{\partial}{\partial z}, z\frac{\partial}{\partial x}\right] - \underbrace{\left[y\frac{\partial}{\partial z}, x\frac{\partial}{\partial z}\right]}_{=0} - \underbrace{\left[z\frac{\partial}{\partial y}, z\frac{\partial}{\partial x}\right]}_{=0} + \left[z\frac{\partial}{\partial y}, x\frac{\partial}{\partial z}\right] \right) \\
&= -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar(-i\hbar)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = i\hbar\, \hat{L}_z
\end{aligned}$$

Podobnie znajdujemy $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\, \hat{L}_x$ oraz $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\, \hat{L}_y$, co ogólnie zapisujemy

$$\boxed{[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k\,, \quad i, j, k, = x, y, z}$$

Ponieważ poszczególne składowe operatora momentu $\hat{\mathbf{L}}$ pędu <u>nie komutują</u> ze sobą, nie mają więc tych samych funkcji własnych, nie mogą być jednocześnie znane.

Wprowadzamy operator $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ i obliczamy komutator

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \underbrace{[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x]}_{=0} + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \left(\hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 \right) + \left(\hat{L}_z^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 \right).$$

Ponieważ $\hat{L}_y\, \hat{L}_x = \hat{L}_x\, \hat{L}_y + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] = \hat{L}_x\, \hat{L}_y - i\hbar\, \hat{L}_z$, mamy

$$[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 = \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 = \hat{L}_y \left(\hat{L}_x \hat{L}_y - i\hbar \hat{L}_z \right) - \hat{L}_x \hat{L}_y^2 = -i\hbar \left(\hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_z \right).$$

Natomiast $\hat{L}_z\, \hat{L}_x = \hat{L}_x\, \hat{L}_z + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \hat{L}_x\, \hat{L}_z + i\hbar\, \hat{L}_y$, co daje

$$[\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_z^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 = \hat{L}_z \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 = \hat{L}_z \left(\hat{L}_x \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_y \right) - \hat{L}_x \hat{L}_z^2 = i\hbar \left(\hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_z \right).$$

Ostatecznie znajdujemy $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0$. Podobnie wyliczamy $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$.

$$\boxed{[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] = 0, \quad i = x, y, z}$$

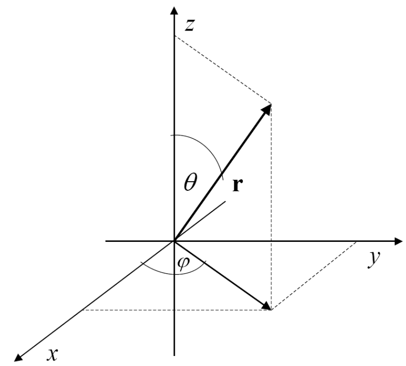
Wykład IX cd. Mechanika kwantowa

Funkcje własne moment pędu

Ponieważ operator $\hat{\mathbf{L}}^2$ komutuje ze składowymi operatora $\hat{\mathbf{L}}$, więc operator $\hat{\mathbf{L}}^2$ i, powiedzmy, $\hat{L}_z$ mają wspólny zbiór funkcji własnych.

Wprowadzamy <u>współrzędne sferyczne</u> (r,θ,φ)

$$\begin{cases} r=\sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \cos\theta=\dfrac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \\ \cos\varphi=\dfrac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \end{cases} \qquad \begin{cases} x=r\sin\theta\cos\varphi \\ y=r\sin\theta\sin\varphi \\ z=r\cos\theta \end{cases}$$



We współrzędnych sferycznych składowe momentu pędu wrażają się:

$$\begin{cases} \hat{L}_x=i\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_y=-i\hbar\left(\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

Najłatwiej znaleźć funkcje własne $\hat{L}_z=-i\hbar\partial/\partial\varphi$ określone równaniem

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi)=L_z\Phi(\varphi),$$

gdzie L_z jest wartością własną $\hat{L}_z$, a $\Phi(\varphi)$ funkcja własną, którą natychmiast znajdujemy jako $\Phi(\varphi)=C\,e^{i\frac{L_z\varphi}{\hbar}}$. Należy pamiętać, że φ jest kątem azymutalnym, więc musi zachodzić $\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)$. Sprawia to, że

$$L_z=\hbar m,\quad m=\pm1,\pm2,\pm3,\ldots$$

A zatem

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},$$

gdzie stała normalizacyjna C została tak wybrana, że $\int_0^{2\pi}d\varphi|\Phi(\varphi)|^2=1$.

Rachunek pokazuje, że

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right),$$

równanie na funkcje własne operatora $\hat{\mathbf{L}}^2$ ma postać

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y(\theta,\varphi) = \mathbf{L}^2 Y(\theta,\varphi),$$

gdzie $\mathbf{L}^2$ jest wartością własną operatora $\hat{\mathbf{L}}^2$ odpowiadającą funkcji własnej $Y(\theta,\varphi)$. Ponieważ $\hat{\mathbf{L}}^2$ i $\hat{L}_z$ komutują i dzięki temu mają wspólny zbiór funkcji własnych, więc przyjmujemy $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi_m(\varphi)$. Po podstawieniu do ostatniego równania mamy

$$-\hbar^2\Phi_m(\varphi)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta(\theta) - \hbar^2\Theta(\theta)\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi_m(\varphi) = \mathbf{L}^2\Theta(\theta)\Phi_m(\varphi),$$

co daje

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2}\right)\Theta(\theta) = 0.$$

Wprowadzając zmienną $z \equiv \cos\theta$ oraz $\lambda \equiv \mathbf{L}^2/\hbar^2$ i $P(z) \equiv \Theta(\theta)$, równanie przybiera postać

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} = -\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\left(\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz} - \frac{m^2}{1-z^2} + \lambda\right)P(z) = 0,$$

gdzie $z \in [-1,1]$. Równanie ma rozwiązanie skończone dla $z = \pm 1$ tylko wtedy, gdy $\lambda = l(l+1)$, przy czym $l = 0,1,2,3,\ldots$ Równanie

$$\left(\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz} - \frac{m^2}{1-z^2} + l(l+1)\right)P_l^{|m|}(z) = 0,$$

jest równaniem na stowarzyszone funkcje Legendre'a[1] $P_l^{|m|}(z)$ wyrażające się poprzez wielomiany Legendre'a $P_l(z)$ następująco:

$$P_l^{|m|}(z) = (1-z^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}}P_l(z), \qquad P_l(z) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l, \qquad |m| \le l.$$

$$P_0(z) = 1 \qquad\qquad P_1^1(z) = \sqrt{1-z^2}$$

$$P_1(z) = z \qquad P_l^0(z) = P_l(z) \qquad P_2^1(z) = 3z\sqrt{1-z^2}$$

$$P_2(z) = \frac{3}{2}z^2 - \frac{1}{2} \qquad\qquad P_2^2(z) = 3(1-z^2)$$

[1] Adrien-Marie Legendre 1752 – 1833

Podsumowując

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)\,, \quad l = 0,1,2,3,\ldots$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi)\,, \quad m = -l, -(l-1),\ldots,-1,0,1,\ldots,l-1,l$$

Funkcje $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ nazywane <u>harmonikami sferycznymi</u> wyrażają się wzorem

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \varepsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi}\,,$$

gdzie $\varepsilon = (-1)^m$ dla $m > 0$ i $\varepsilon = 1$ dla $m \le 0$. Współczynnik normalizacyjny jest tak wybrany, że

$$\int d^2\Omega \left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 = 1\,.$$

Harmoniki sferyczne tworzą zbiór funkcji <u>ortonormalnych</u> tzn.

$$\int d^2\Omega\, Y_{lm}^*(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = \delta^{ll'}\delta^{mm'}\,.$$

Pierwszych kilka harmonik wyraża się następująco:

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad Y_{20}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \qquad Y_{2\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{1\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \qquad Y_{2\pm2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi}$$