Mechanika kwantowa III

Opracowanie:
Barbara Pac, Piotr Petelenz

Powtórzenie

Moment pędu jest wielkością pojęciowo bardzo istotną, gdyż dla wszystkich pól o symetrii sferycznej operator jego kwadratu ($\hat{M}^2$) komutuje z hamiltonianem ($\hat{H}$). (Pole o symetrii sferycznej to takie pole, którego potencjał, wyrażony we współrzędnych sferycznych, zależy tylko od promienia, a nie zależy od kątów ϑ, φ).

$$[\hat{M}^2, \hat{H}] = 0 \qquad \text{[W.3.61]}$$

Zgodnie z regułami Jordana ([W.3.4] i [W.3.5]), operatory składowych momentu pędu są zdefiniowane jako:

$$\hat{M}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad \text{[W.3.62a]}$$

$$\hat{M}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad \text{[W.3.62b]}$$

$$\hat{M}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad \text{[W.3.62c]}$$

Spełniają one związki komutacyjne:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar\hat{M}_z \qquad \text{[W.3.63a]}$$

$$[\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar\hat{M}_x \qquad \text{[W.3.63b]}$$

$$[\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_y \qquad \text{[W.3.63c]}$$

oraz

$$[\hat{M}_i, \hat{M}^2] = 0 \qquad i = x,y,z \qquad \text{[W.3.64]}$$

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \qquad \text{[W.3.65]}$$

W dalszych rozważaniach przydatna będzie postać operatora kwadratu składowej momentu pędu i składowej zetowej momentu pędu we współrzędnych sferycznych:

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \qquad \text{[W.3.66]}$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad \text{[W.3.67]}$$

Rotator sztywny

Rotator sztywny to układ dwóch związanych ze sobą cząstek o masach m_1 i m_2. W trakcie ich ruchu odległość R między cząstkami nie ulega zmianie.
Równanie Schrödingera dla rotatora sztywnego w układzie środka mas ma postać:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V\right)Y = EY \qquad \text{[W.3.68]}$$

gdzie Δ oznacza operator Laplace'a:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad \text{[W.3.69]}$$

a μ masę zredukowaną układu:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \qquad \text{[W.3.70]}$$

We współrzędnych sferycznych operator Δ ma postać:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad \text{[W.3.71]}$$

W przypadku rotatora sztywnego $r = R = const$ więc postać operatora Laplace'a redukuje się do postaci:

$$\Delta = \frac{1}{R^2\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{R^2\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad \text{[W.3.72]}$$

Równanie [W.3.68] ma zatem postać:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right)Y = EY \qquad \text{[W.3.73]}$$

gdzie

$$I = \mu R^2 \qquad \text{[W.3.74]}$$

Funkcje $Y(\vartheta,\varphi)$ (tzw. *funkcje kuliste*) będące rozwiązaniami równania [W.3.68] można przedstawić w postaci iloczynu dwóch funkcji Θ *i* Φ, z których każda zależy od jednej zmiennej:

$$Y_{J,M}(\vartheta,\varphi) = \Theta_{J,|M|}(\vartheta)\Phi_M(\varphi) \qquad \text{[W.3.75]}$$

gdzie:

$$\Phi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi} \qquad M = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm J \qquad \text{[W.3.76ab]}$$

$$\Theta_{J,|M|}(\vartheta) = N_{J,|M|} P_J^{|M|}(\cos\vartheta) \qquad J = 0, 1, 2, \ldots. \qquad \text{[W.3.77]}$$

przy czym:

$$N_{J,|M|} = \left(\frac{2J+1}{2} \cdot \frac{(J-|M|)!}{(J+|M|)!}\right)^{1/2} \qquad \text{[W.3.78]}$$

a (oznaczając we wzorze [W.3.77] $\cos\vartheta$ przez *x)* dla $m \le n$ mamy:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \qquad \text{[W.3.79]}$$

$$P_n^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \qquad \text{[W.3.80]}$$

Występujące w powyższych wzorach liczby kwantowe J i M to (odpowiednio) *rotacyjna* i *magnetyczna rotacyjna liczba kwantowa*.
Energia własna rotatora sztywnego zależy wyłącznie od liczby *J:*

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \qquad \text{[W.3.81]}$$

Funkcje kuliste $Y(\vartheta,\varphi)$ są równocześnie ([W.3.61]) funkcjami własnymi hamiltonianu, operatora kwadratu składowej momentu pędu i składowej zetowej momentu pędu. Odpowiadające im ich wartości własne są następujące:

$$M^2 = \hbar^2 J(J+1) \qquad \text{[W.3.82]}$$

$$M_z = \hbar M \qquad \text{[W.3.83]}$$

Przykład 5

1. Podaj postać jawną wszystkich funkcji kulistych w stanach o J=1.
2. Jaki wynik i z jakim prawdopodobieństwem można otrzymać w pomiarze:
a) energii
b) kwadratu momentu pędu
c) składowej zetowej momentu pędu
w stanach, którym odpowiadają funkcje wyprowadzone w punkcie 1?
3. Podaj unormowaną postać jawną funkcji ψ będącej liniową kombinacją funkcji kulistych wyprowadzonych w punkcie 1. Załóż, że udział wszystkich funkcji w tej kombinacji jest taki sam.
4. Jaki wynik pomiaru i z jakim prawdopodobieństwem można otrzymać w wyniku pomiaru:
a) energii
b) kwadratu momentu pędu
c) składowej zetowej momentu pędu
w stanie opisanym wyprowadzoną w punkcie 3 funkcją ψ ?
5. Obliczyć wartość spodziewaną: $\langle \psi | \hat{M}_z \varphi \hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2 \varphi \hat{M}_z | \psi \rangle$.

Ad. 1
Z informacji [W.3.76ab] wynika, że dla przy zadanej wartości J=1 magnetyczna kwantowa liczba rotacji M może przyjmować trzy wartości: 1,0,-1. W takim razie (niejawne) postaci funkcji kulistych ([W.3.75]) zapiszemy jako:

$$Y_{11}(\vartheta,\varphi) = \Theta_{11}(\vartheta)\Phi_1(\varphi) \qquad [3.5.1a]$$
$$Y_{10}(\vartheta,\varphi) = \Theta_{10}(\vartheta)\Phi_0(\varphi) \qquad [3.5.1b]$$
$$Y_{1,-1}(\vartheta,\varphi) = \Theta_{11}(\vartheta)\Phi_{-1}(\varphi) \qquad [3.5.1c]$$

gdzie (wzór [W.3.77]):

$$\Theta_{10}(\vartheta) = N_{10}P_1^0(\cos\vartheta) \qquad [3.5.2a]$$
$$\Theta_{11}(\vartheta) = N_{11}P_1^1(\cos\vartheta) \qquad [3.5.2b]$$

Wielomiany $P_n(x)$ i $P_n^m(x)$ są zdefiniowane wzorami [W.3.79] i [W.3.80]. Dla n=1 mamy:

$$P_1(x) = \tfrac{1}{2\cdot 1!}\tfrac{d}{dx}(x^2-1) \quad = x \qquad [3.5.3]$$

a dla m=0 i m=1 otrzymujemy odpowiednio:

$$P_1^0(x) = (1-x^2)^0 P_1(x) = x \qquad [3.5.4a]$$
$$P_1^1(x) = (1-x^2)^{1/2}\tfrac{d}{dx}P_1(x) = (1-x^2)^{1/2} \qquad [3.5.4b]$$

Stałe normujące funkcji $\Theta_{10}(\vartheta)$ i $\Theta_{11}(\vartheta)$ (określone wzorem [W.3.78]) przyjmują wartości:

$$N_{10} = \sqrt{\tfrac{3}{2}} \qquad \text{i} \qquad N_{11} = \tfrac{\sqrt{3}}{2} \qquad [3.5.5ab]$$

W takim razie:

$$\Theta_{10}(\vartheta) = \sqrt{\tfrac{3}{2}}\cos\vartheta \qquad [3.5.6a]$$
$$\Theta_{11}(\vartheta) = \tfrac{\sqrt{3}}{2}(1-\cos^2\vartheta)^{1/2} = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\sin\vartheta \qquad [3.5.6b]$$

W skład funkcji kulistych wchodzą również funkcje $\Phi_1(\varphi)$, $\Phi_0(\varphi)$ i $\Phi_{-1}(\varphi)$, których postaci są określone wzorem [W.3.76ab]:

$$\Phi_1(\varphi) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi} \qquad [3.5.7a]$$
$$\Phi_0(\varphi) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad [3.5.7b]$$
$$\Phi_{-1}(\varphi) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\varphi} \qquad [3.5.7c]$$

Ostateczna postać funkcji kulistych w stanach o J=1 jest więc następująca:

$$Y_{11}(\vartheta,\varphi) = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin\vartheta e^{i\varphi} = \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\vartheta e^{i\varphi} \qquad [3.5.8a]$$
$$Y_{1,-1}(\vartheta,\varphi) = \tfrac{\sqrt{3}}{2}\tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin\vartheta e^{-i\varphi} = \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\vartheta e^{-i\varphi} \qquad [3.5.8b]$$
$$Y_{10}(\vartheta,\varphi) = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\cos\vartheta = \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{\pi}}\cos\vartheta \qquad [3.5.8c]$$

Ad.2a

Energia rotatora sztywnego zależy od wartości liczby kwantowej *J* i nie zależy od wartości liczby kwantowej *M* [W.3.81]. We wszystkich stanach kwantowych, którym odpowiada *J*=1 (czyli stanach opisywanych funkcjami $Y_{11}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{10}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{1-1}(\vartheta,\varphi)$) energia rotatora jest więc taka sama i równa:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{I} \qquad [3.5.9]$$

Pomiar energii daje powyższą wartość z prawdopodobieństwem 100%.

Ad.2b

Kwadrat momentu pędu, podobnie jak energia, jest kwantowany przez liczbę *J* (wzór [W.3.82]). We wszystkich stanach o *J*=1 mamy:

$$M^2 = 2\hbar^2 \qquad [3.5.10]$$

Pomiar kwadratu momentu pędu daje wartość $2\hbar^2$ z prawdopodobieństwem 100%.

Ad.2c

Wartość składowej *zetowej* momentu pędu jest kwantowana przez liczbę kwantową *M* i nie zależy od liczby *J*. Magnetyczna kwantowa liczba rotacji M może przyjmować w interesujących nas stanach wartości: 1,0,-1. Składowa *zetowa* momentu pędu (wzór [W.3.83]) będzie, odpowiednio, przyjmować wartości: $\hbar,\ 0,\ -\hbar$.

W każdym ze stanów opisanych funkcjami $Y_{11}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{10}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{1-1}(\vartheta,\varphi)$ możemy w wyniku pomiaru uzyskać tylko jedną wartość składowej *zetowej* momentu pędu i będzie ona uzyskana z prawdopodobieństwem 100%.

Ad. 3

Analogiczny problem był już rozwiązywany w przykładzie I. Unormowaną postać naszej funkcji zapiszemy jako:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{11}(\vartheta,\varphi) + Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{1-1}(\vartheta,\varphi)) \qquad [3.5.11]$$

Ad.4

Funkcja ψ jest liniową kombinacją trzech funkcji kulistych, którym odpowiada taka sama (równa 1) wartość liczby kwantowej *J*. Pomiar kwantowanych wyłącznie przez liczbę *J* wielkości, czyli energii i momentu pędu, da zatem (ze 100%-owym prawdopodobieństwem) obliczone już poprzednio wartości (odpowiednio [3.5.9] i [3.5.10]).

Funkcja ψ jest liniową kombinacją trzech funkcji kulistych, którym odpowiadają różne wartości liczby kwantowej *M* (równe: 1,0, -1). Pomiar kwantowanej przez liczbę *M* składowej *zetowej* momentu pędu nie da zatem jednej lecz trzy wartości: $\hbar,\ 0,\ -\hbar$. Ponieważ udział wszystkich trzech funkcji $Y_{11}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{10}(\vartheta,\varphi)$, $Y_{1-1}(\vartheta,\varphi)$ w kombinacji jest taki sam, to prawdopodobieństwo uzyskania każdej z wartości $\hbar,\ 0,\ -\hbar$ jest takie samo i równe 33,3%.

Ad.5

Występujący w całce $\langle\psi|\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z|\psi\rangle$ operator $\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z$ można dość łatwo doprowadzić do prostszej postaci:

$$\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z = [\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z, \hat{M}_z] = \hat{M}_z[\varphi\hat{M}_z, \hat{M}_z] + [\hat{M}_z, \hat{M}_z]\varphi\hat{M}_z = \hat{M}_z\varphi[\hat{M}_z, \hat{M}_z] + \hat{M}_z[\varphi, \hat{M}_z]\hat{M}_z =$$
$$= \hat{M}_z[\varphi, \hat{M}_z]\hat{M}_z \qquad [3.5.11]$$

Wartość komutatora $[\varphi, \hat{M}_z]$ wynosi:

$$[\varphi, \hat{M}_z]\chi = [\varphi, -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}]\chi = -i\hbar\left(\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\chi - \frac{\partial}{\partial\varphi}\varphi\chi\right) = -i\hbar\left(\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\chi - \chi - \varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\chi\right) = i\hbar\chi \qquad [3.5.12]$$

Wstawiając powyższą wartość do zależności [3.5.11] mamy:

$$\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z = \hat{M}_z[\varphi, \hat{M}_z]\hat{M}_z = i\hbar\hat{M}_z^2 \qquad [3.5.13]$$

W takim razie postać naszej całki można zapisać jako:

$$\langle\psi|\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z|\psi\rangle = i\hbar\langle\psi|\hat{M}_z^2|\psi\rangle \qquad [3.5.14]$$

gdzie:

$$\hat{M}_z^2|\psi\rangle = \hat{M}_z^2\left(\frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{11}(\vartheta,\varphi) + Y_{10}(\vartheta,\varphi) + Y_{1-1}(\vartheta,\varphi))\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\hbar^2 + 0 + \hbar^2\right) = \frac{2}{\sqrt{3}}\hbar^2 \qquad [3.5.15]$$

W takim razie:

$$\langle\psi|\hat{M}_z\varphi\hat{M}_z^2 - \hat{M}_z^2\varphi\hat{M}_z|\psi\rangle = i\hbar\frac{2}{\sqrt{3}}\hbar^2\langle\psi|\psi\rangle = \frac{2}{\sqrt{3}}i\hbar^3 \qquad [3.5.16]$$

Zadania do samodzielnego rozwiązania:

Zadanie 6

W pewnym stanie stacjonarnym rotatora sztywnego o momencie bezwładności I wartość własna kwadratu momentu pędu wynosi $6\hbar^2$.

1. Podaj postać jawną wszystkich funkcji kulistych, które mogą odpowiadać opisanemu stanowi stacjonarnemu.
2. Jaki wynik i z jakim prawdopodobieństwem można otrzymać w pomiarze:
   - energii
   - składowej zetowej momentu pędu

   w stanach, którym odpowiadają funkcje wyprowadzone w punkcie 1?
3. Załóżmy, że utworzymy unormowaną kombinację liniową funkcji wyprowadzonych w punkcie 1. Niech *a* oznacza maksymalną a *b* minimalną, możliwą do uzyskania w tym stanie wartość składowej *zetowej* momentu pędu.

   Jakie wartości musiałyby mieć współczynniki w tej kombinacji, aby prawdopodobieństwo uzyskania w wyniku pomiaru składowej *zetowej* momentu pędu wartości *a* wynosiło 20%, wartości *b*- 33,3% a każdej z pozostałych wartości było takie samo?

Zadanie 7

Dane są operatory $\hat{M}_+ = \hat{M}_x + i\hat{M}_y$ oraz $\hat{M}_- = \hat{M}_x - i\hat{M}_y$, gdzie M jest operatorem momentu pędu.

1. Zapisać postać jawną powyższych operatorów, wyrażając je poprzez odpowiednie operatory różniczkowe.
2. Wiedząc, że operatory składowych momentu pędu są hermitowskie sprawdzić, czy operatory $\hat{M}_+$ i $\hat{M}_-$ są:

   a) liniowe,

   b) hermitowskie
3. Obliczyć komutatory:

   a) $[\hat{M}_+, \hat{M}_-]$

   b) $[\hat{M}_+, \hat{M}_z]$

   c) $[[\hat{M}_+, \hat{M}_-], \hat{M}_z]$

   d) $[[\hat{M}_+, \hat{M}_z], \hat{M}_-]$

   e) $[[\hat{M}_+, \hat{M}_z], \hat{M}_+]$

Wskazówka: Wykorzystaj reguły komutacyjne [W.3.63a,b,c] dla składowych momentu pędu.