Kvantummechanika VII.

Impulzusmomentum

→ Klasszikusan az impulzusmomentum: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, azaz:

$$L_x = yp_z - zp_y \; ; \quad L_y = zp_x - xp_z \; ; \quad L_z = xp_y - yp_x$$

→ A megfelelő kvantum operátorok a $p_n = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial n}$ operátorokkal kaphatók meg. A következőkben az operátorok sajátértékeit, majd a sajátfüggvényeket fogjuk keresni:

A sajátértékek

→ Az L_x és L_y operátorok nem kommutálnak:

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]$$

/ $[A, B+C] = [A,B] + [A,C]$ teljesül a kvantummechanikai operátorokra/

→ Tudjuk, hogy a hely koordinátái csak a hozzájuk tartozó impulzus operátorokkal nem kommutálnak, így a középső két tag kapásból nulla.

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + p_y x[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z$$

→ A többi kommutátor L_x, L_y, L_z ciklikus permutációjával előállítható:

$$\boxed{[L_x, L_y] = i\hbar L_z \; ; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \; ; \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y}$$

→ Mivel L_x, L_y és L_z inkompatibilis operátorok:

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle i\hbar L_z\rangle\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\langle L_z\rangle^2 \longrightarrow \sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}|\langle L_z\rangle|$$

→ Nem lenne értelme tehát közös sajátfüggvényeket keresni. A teljes impulzusmomentum négyzete azonban kommutál L_x, L_y, L_z-vel! Pl:

$$[L^2, L_x] = [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_y] + [L_z^2, L_z]$$

→ felh. hogy: $[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$ ↳

$$[L^2, L_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z =$$

$$= L_y(-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z)L_y + L_z(i\hbar L_y) + (i\hbar L_y)L_z = 0$$

→ Hasonlóan: $[L^2, L_x] = 0$; $[L^2, L_y] = 0$ és $[L^2, L_z] = 0$

→ Komponentekben: $[L^2, \vec{L}] = 0$

→ Mivel L^2 minden $\vec{L}$ komponenssel kompatibilis, kereshetünk közös sajátállapotokat (reménykedhetünk, hogy találunk is)

→ Pl: L^2 és L_z -re:

$$L^2 f = \lambda f \qquad \text{és} \qquad L_z f = \mu f$$

→ A harmonikus oszcillátornál megismert léptetőoperátorokat vezetünk be:

$$\boxed{L_\pm = L_x \pm i L_y}$$

→ Az L_z-vel vett kommutátora:

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm\hbar(L_x \pm i L_y) =$$

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm \qquad \text{és persze} \qquad [L^2, L_\pm] = 0$$

→ Feltételezzük, hogy ha f sajátfüggvénye L^2-nek, ~~akkor~~ és L_z-nek, akkor $L_\pm f$ is az.

→ Az $[L^2, L_\pm] = 0$ -ból:

$$L^2(L_\pm f) = L_\pm(L^2 f) = L_\pm(\lambda f) = \lambda(L_\pm f)$$

→ Tehát $L_\pm f$ valóban sajátfüggvénye L^2-nek, méghozzá ugyanazzal a sajátfüggvénnyel.

↳

Az $[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$ -ból:

$$L_z(L_\pm f) = \pm\hbar L_\pm f + L_\pm(\mu f) = (\mu \pm \hbar)(L_\pm f)$$

→ Tehát $L_\pm f$ L_z-nek is sajátfüggvénye, de $(\mu \pm \hbar)$ sajátértékkel. L_+-t felfelé léptető, L_--t lefelé léptető operátornak nevezzük ezért.

→ Ez a léptetés persze nem mehet akármeddig, hiszen lenne egy olyan léptetés, melynek hatására L_z meghaladná L értékét, ami nem lehetséges. Tehát:

$$L_+ f_t = 0$$

→ Ebben a top-állapotban legyen L_z sajátértéke $\hbar l$:

$$L_z f_t = \hbar l f_t \; ; \qquad L^2 f_t = \lambda f_t$$

→ Most képezzük az $L_\pm L_\mp$ operátort:

$$L_\pm L_\mp = (L_x \pm i L_y)(L_x \mp i L_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_x L_y - L_y L_x) =$$

$$= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z)$$

→ Más „szóval": $\boxed{L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp L_z \hbar}$

→ Ebből következik, hogy

$$L^2 f_t = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_t = (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) f_t = \hbar^2 l(l+1) f_t$$

$$\hookrightarrow \lambda = \hbar^2 l(l+1)$$

→ Kell lennie azonban egy legalacsonyabb „fokú" is:

$$L_- f_b = 0$$

→ Itt L_z sajátértékét $\hbar \bar{l}$-nek vesszük:

$$L_z f_b = \hbar \bar{l} f_b \; ; \qquad L^2 f_b = \lambda f_b$$

$\rightarrow L^2 f_b = (L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b = (0 + \hbar^2 \bar{l}^2 - \hbar^2 \bar{l}) f_b = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) f_b$

$\hookrightarrow \lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1)$

$\rightarrow$ Amit kaptunk: $\lambda = \hbar^2 \bar{l}(\bar{l}-1) = \hbar^2 l(l+1)$

$\bar{l} = l+1$ (abszurd)

$\boxed{\bar{l} = -l}$

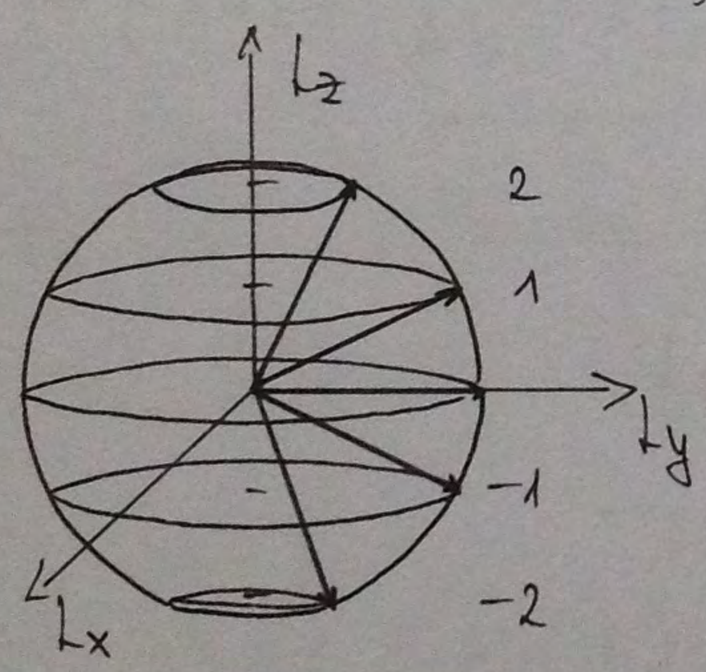
$\rightarrow L_z$ sajátértékei $m\hbar$, ahol m $-l$-től l-ig változhat, N egész lépésben.

$\rightarrow l = \frac{N}{2} \rightarrow$ tehát l-nek egésznek v. fél-egésznek kell lennie.

A sajátfüggvényeket l és m határozza meg:

$$\boxed{L^2 f_l^m = \hbar^2 l(l+1) f_l^m \quad ; \quad L_z f_l^m = \hbar m f_l^m}$$

$\rightarrow$ Ahol $l = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$; $m = -l, -l+1, \dots l-1, l$



$\rightarrow$ Szokásos ábrázolásmód. A nyilak a lehetséges momentumokat reprezentálnak $\hbar$ egységekben ($l=2$)

$\rightarrow$ Mindegyik nyíl hossza $\sqrt{l(l+1)}$

$\rightarrow$ Vegyük észre, hogy nem mutathat az impulzusmomentum pont z irányba.

$\rightarrow$ Ez elsőre abszurdnak hat $\rightarrow$ Ahhoz, hogy ez megtörténhessen, mindkettőn komponenst szimultán ismerni kellene, amit a határozatlansági reláció tilt.

$\hookrightarrow$ Egy rénenszre nem rendelkezhet határozott imp.-momentum vektorral.

A sajátfüggvények

→ Első lépésben át kell írnunk L_x, L_y és L_z-t gömbi poláskoordinátákba

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)$$

→ A gradiens → nabla operátor gömbi pol. koord. rendszerben:

$$\vec{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

→ Mivel $\vec{r} = r\hat{r}$, elvégezve a behelyettesítést:

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left[r(\hat{r}\times\hat{r})\frac{\partial}{\partial r} + (\hat{r}\times\hat{\theta})\frac{\partial}{\partial\theta} + (\hat{r}\times\hat{\phi})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

→ De $(\hat{r}\times\hat{r}) = 0$, $(\hat{r}\times\hat{\theta}) = \hat{\phi}$ és $(\hat{r}\times\hat{\phi}) = -\hat{\theta}$, ∴ így:

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

→ A $\hat{\phi}$ és $\hat{\theta}$ egységvektorok Descartes-koordinátákkal kifejezve:

$$\hat{\phi} = -\sin\phi\,\hat{x} + \cos\phi\,\hat{y}$$

$$\hat{\theta} = (\cos\theta\cos\phi)\hat{x} + (\cos\theta\sin\phi)\hat{y} - (\sin\theta)\hat{z}$$

→ Behelyettesítve:

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left[(-\sin\phi\,\hat{x} + \cos\phi\,\hat{y})\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\theta\cos\phi\,\hat{x} + \cos\theta\sin\phi\,\hat{y} - \sin\theta\,\hat{z})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

→ Ebből pedig:

$$\boxed{\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned}}$$

↳

→ Kellenek még a léptető operátorok is:

$$L_\pm = L_x \pm i L_y = \frac{\hbar}{i}\left[(-\sin\phi \pm i\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\phi \pm i\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \text{ de}$$

$\cos\phi \pm i\sin\phi = e^{\pm i\phi}$, tehát:

$$\boxed{L_\pm = \pm\hbar e^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)}$$

$$L_+L_- = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + i\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\boxed{L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]}$$

→ Most meghatározhatjuk $f_\ell^m(\theta,\phi)$-t, ami L^2 sajátfüggvénye $\hbar^2\ell(\ell+1)$ sajátértékkel.

$$L^2 f_\ell^m = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] f_\ell^m = \hbar^2\ell(\ell+1) f_\ell^m$$

→ Ez a centrális erőtér angulláris egyenlete! (VIII. tétel)

→ L_z-nek is sajátfüggvénye $L_z f_\ell^m = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} f_\ell^m = \hbar m f_\ell^m$, $m\hbar$ sajátértékkel.

↳ A megoldás: gömbi harmonikusok $Y_\ell^m(\theta,\phi)$

<u>Konklúzió</u>: A gömbi harmonikusok L^2 és L_z sajátfüggvényei. Amikor a Schrödinger egyenletet a változók szétválasztásával oldottuk meg, véletlenül ~~három szimultán~~ előállítottuk a szimultán sajátfüggvényeit a három kommutáló operátornak: H, L^2, L_z.

$$H\psi = E\psi \quad ; \quad L^2\psi = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi \quad ; \quad L_z\psi = \hbar m\psi$$

→ A Schrödinger-egyenletet át is írhatjuk:

$$\frac{1}{2m_1r^2}\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + L^2\right]\psi + V\psi = E\psi$$

→ ? teles-egészes ℓ és m eltérés ??? → Válan: SPIN-nél