

Rozdział 12

Kwantowa teoria momentu pędu

UWAGA : Począwszy od tego rozdziału będziemy na ogół pomijać "daszki" nad operatorami. Matematyczny sens wielkości pojawiających się w równaniach powinien wynikać z kontekstu.

12.1 Orbitalny moment pędu – wstęp

Kwantowo-mechaniczna teoria momentu pędu może być wprowadzana na różne sposoby. W *Uzupełnieniach* omawiamy związek pomiędzy zwykłymi obrotami w przestrzeni $\mathbb{R}^3$ – przestrzeni położeń, a odpowiednimi transformacjami w przestrzeni $\mathcal{H}$ stanów układu fizycznego, czyli w przestrzeni Hilberta. Pokazujemy tam, że operator momentu pędu jest generatorem transformacji w przestrzeni Hilberta, a także wyprowadzamy jego postać wynikającą z własności obrotów geometrycznych. Tutaj jednak wybieramy prostą i intuicyjną drogę, wynikającą z fizyki klasycznej.

12.1.1 Podstawowe definicje

Klasyczny moment pędu cząstki dany jest wyrażeniem $\vec{L}_{kl} = \vec{r}_{kl} \times \vec{p}_{kl}$. W myśl zasady odpowiedniości kwantowo-mechaniczny operator momentu pędu konstruujemy zastępując wielkości klasyczne operatorami

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{P}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla. \quad (12.1)$$

Z definicji tej, w oczywisty sposób, wynikają wyrażenia dla poszczególnych składowych operatora momentu pędu

$$L_1 \equiv L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (12.2a)$$

$$L_2 \equiv L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (12.2b)$$

$$L_3 \equiv L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (12.2c)$$

Składowe operatorów położenia i pędu spełniają kanoniczne relacje komutacyjne

$$[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}, \quad j, k = 1, 2, 3. \quad (12.3)$$

Zwróćmy uwagę, że składowe operatora momentu pędu (orbitalnego) (12.2) są utworzone przez różne składowe operatorów położenia i pędu, które komutują ze sobą. Dlatego też niepotrzebna

jest tu procedura symetryzacyjna, o której wspominaliśmy przy omawianiu zasady odpowiedniości.

Wygodnie jest zapisać definicję składowych operatora momentu pędu za pomocą standardowych reguł obliczania iloczynu wektorowego

$$L_m = \varepsilon_{mnq} x_n p_q, \quad (12.4)$$

gdzie zawsze obowiązuje konwencja sumacyjna (sumujemy po powtarzających się wskaźnikach od 1 do 3).

Jak wiemy, kwantowo-mechaniczne operatory na ogół są nieprzemienne, zaś relacje komutacyjne odgrywają zasadniczą rolę. Dlatego badanie momentu pędu rozpoczniemy od znalezienia różnych relacji komutacyjnych przydatnych w dalszych rozważaniach.

12.1.2 Relacje komutacyjne

Wprowadzone definicje wystarczą do zbadania podstawowych relacji komutacyjnych, które ujmujemy jako kolejne lematy.

Lemat 12.1 *Składowe operatorów orbitalnego momentu pędu L_m , położenia x_n i pędu p_q , spełniają następujące reguły komutacyjne*

$$[L_m, x_n] = i\hbar \varepsilon_{mnq} x_q, \quad (12.5a)$$

$$[L_m, p_n] = i\hbar \varepsilon_{mnq} p_q, \quad (12.5b)$$

$$[L_m, L_n] = i\hbar \varepsilon_{mnq} L_q. \quad (12.5c)$$

Dowód. Relację (12.5a) dowodzimy prostym rachunkiem, wprost z definicji (12.4)

$$\begin{aligned} [L_m, x_n] &= [\varepsilon_{mjk} x_j p_k, x_n] \\ &= \varepsilon_{mjk} \{ x_j [p_k, x_n] + [x_j, x_n] p_k \} \\ &= \varepsilon_{mjk} \{ x_j (-i\hbar) \delta_{kn} + 0 \} = -i\hbar \varepsilon_{mjn} x_j \\ &= i\hbar \varepsilon_{mnj} x_j. \end{aligned} \quad (12.6)$$

co kończy dowód pierwszej z relacji. Dowód drugiej przebiega całkiem analogicznie, więc go ominiemy. Dowód trzeciej relacji niestety jest nieco dłuższy

$$\begin{aligned} [L_m, L_n] &= [L_m, \varepsilon_{nqs} x_q p_s] \\ &= \varepsilon_{nqs} \{ x_q [L_m, p_s] + [L_m, x_q] p_s \} \\ &= \varepsilon_{nqs} (i\hbar \varepsilon_{msb} x_q p_b + i\hbar \varepsilon_{mqb} x_b p_s) \\ &= i\hbar (-\varepsilon_{snq} \varepsilon_{smb} x_q p_b + \varepsilon_{qns} \varepsilon_{qmb} x_b p_s). \end{aligned} \quad (12.7)$$

Ponieważ zachodzi relacja

$$\varepsilon_{abc} \varepsilon_{ade} = \delta_{bd} \delta_{ce} - \delta_{be} \delta_{cd}, \quad (12.8)$$

więc dalej otrzymujemy

$$\begin{aligned} [L_m, L_n] &= -i\hbar (\delta_{nm} \delta_{qb} - \delta_{nb} \delta_{qm}) x_q p_b \\ &\quad + i\hbar (\delta_{nm} \delta_{sb} - \delta_{nb} \delta_{sm}) x_b p_s \\ &= -i\hbar (\delta_{nm} x_q p_q - x_m p_n) + i\hbar (\delta_{nm} x_s p_s - x_n p_m). \end{aligned}$$

Pierwszy i trzeci składnik są takie same – znoszą się. Idąc dalej mamy

$$\begin{aligned} [L_m, L_n] &= i\hbar (x_m p_n - x_n p_m) \\ &= i\hbar (\delta_{am} \delta_{bn} x_a p_b - \delta_{an} \delta_{mb} x_a p_b) \\ &= i\hbar (\delta_{ma} \delta_{nb} - \delta_{na} \delta_{mb}) x_a p_b \end{aligned} \quad (12.9)$$

Korzystamy ponownie z (12.8) i dostajemy

$$[L_m, L_n] = i\hbar \varepsilon_{qmn} \varepsilon_{qab} x_a p_b = i\hbar \varepsilon_{qmn} L_q, \quad (12.10)$$

co kończy dowód trzeciej relacji komutacyjnej. ■

Uzyskane relacje komutacyjne dotyczą operatora tzw. orbitalnego momentu pędu, mimo to jednak grają pierwszorzędną rolę w dalszych rozważaniach.

12.2 Ogólny operator moment pędu

12.2.1 Definicje i uwagi wstępne

Zdefiniowany powyżej operator $\vec{L}$ jest tzw. orbitalnym momentem pędu pojedynczej cząstki (nazwa ta wynika z analogii klasycznej). Układy fizyczne mogą jednak składać się z więcej niż tylko jednej cząstki. Może być wtedy potrzebny całkowity moment pędu układu. Co więcej (jak to omówimy później) cząstki mogą mieć spin, tzw. wewnętrzny moment pędu, całkowicie niezależny od stanu jej ruchu (a więc niezależny od $\vec{L}$). Widać więc, że pojęcie momentu pędu jest ogólniejsze, nie jest ograniczone do orbitalnego momentu pędu pojedynczej cząstki. Dlatego też uogólnimy nasze rozważania wprowadzając operator $\vec{J}$ składający się z trzech składowych (operatorowych) $\vec{J} = (J_1, J_2, J_3)$. Na te trzy operatory narzucamy dwa warunki. Po pierwsze żądamy aby były to obserwowalne – operatory hermitowskie, których wektory własne rozpinają przestrzeń stanów. Po drugie, żądamy aby spełniały one relacje komutacyjne, formalnie identyczne z relacjami komutacyjnymi dla składowych operatora orbitalnego momentu pędu, a mianowicie, żądamy aby zachodziły relacje

$$[J_m, J_n] = i\hbar \varepsilon_{mnq} J_q. \quad (12.11)$$

Operatory J_k nazwiemy operatorami momentu pędu (ale już bez przymiotnika) i nie precyzujemy ich konkretnego sensu fizycznego. Stała Plancka $\hbar$ występuje tu po to, aby zgadzały się wymiary. Operatorowi $\vec{J}$ przysługuje wymiar stałej Plancka, a więc wymiar momentu pędu (co dodatkowo uzasadnia nazwę). Oczywiście z faktu, że składowe momentu pędu nie komutują wynika, że niemożliwy jest jednoczesny pomiar trzech składowych operatora $\vec{J}$. Wprowadzamy także operator całkowitego momentu pędu zdefiniowany jako

$$\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2, \quad (12.12)$$

oraz dwa operatory pomocnicze

$$J_{\pm} = J_1 \pm i J_2, \quad \hat{J}_+^\dagger = J_-. \quad (12.13)$$

Operatory $J_{\pm}$ nie są hermitowskie, lecz są swoimi wzajemnymi sprzężeniami. J_+ bywa nazywany operatorem podnoszącym, zaś J_- obniżającym. Pochodzenie tej terminologii wyjaśni się w trakcie naszej dyskusji.

Podkreślmy, że w prowadzonych tu rozważaniach relacja komutacyjna (12.11) jest w gruncie rzeczy postulatem. Nie wynika ona tu z jakichś definicji, lecz jest z góry narzuconym warunkiem (wynikającym z analogii do orbitalnego momentu pędu). W *Uzupełnieniach* pokazujemy,

że relacja ta jest ściśle powiązana z własnościami obrotów w $\mathbb{R}^3$ i z indukowanymi przez nie transformacjami w przestrzeni Hilberta. Mimo to jednak, przyjmujemy (12.11) jako postulat i przebadamy jego najważniejsze konsekwencje, tj. wynikające z (12.11) inne reguły komutacyjne, a także własności operatorów momentu pędu.

12.2.2 Relacje komutacyjne

Lemat 12.2 *Operator całkowitego momentu pędu $\vec{J}^2$ i składowa J_k spełniają relację komutacyjną*

$$[\vec{J}^2, J_k] = 0, \quad \text{dla } k = 1, 2, 3. \quad (12.14)$$

Dowód. Stosując regułę sumacyjną, z relacji (12.11) otrzymujemy

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_k] &= [J_n J_n, J_k] \\ &= J_n [J_n, J_k] + [J_n, J_k] J_n \\ &= i\hbar \varepsilon_{nkp} J_n J_p + i\hbar \varepsilon_{nkp} J_p J_n. \end{aligned} \quad (12.15)$$

W drugim składniku zamieniamy miejscami wskaźniki $p \leftrightarrow n$

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_k] &= i\hbar \varepsilon_{nkp} J_n J_p + i\hbar \varepsilon_{pkn} J_n J_p \\ &= i\hbar (\varepsilon_{nkp} + \varepsilon_{pkn}) J_n J_p \\ &= i\hbar (-\varepsilon_{knp} + \varepsilon_{knp}) J_n J_p = 0. \end{aligned} \quad (12.16)$$

co należało wykazać. ■

Naturalnym wnioskiem z powyższego lematu jest stwierdzenie, że możliwy jest jednoczesny pomiar całkowitego momentu pędu i jednej (dowolnie wybranej) składowej. Zazwyczaj wybieramy (z przyczyn historycznych) składową J_3 jako współmierzalną z $\vec{J}^2$.

Lemat 12.3 *Składowa operatora momentu pędu J_3 i operatory $J_{\pm}$ spełniają relację*

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}. \quad (12.17)$$

Dowód. Przeprowadzamy bezpośredni rachunek, w którym korzystamy z kanonicznej relacji (12.11). A zatem

$$\begin{aligned} [J_3, J_{\pm}] &= [J_3, J_1 \pm iJ_2] = i\hbar \varepsilon_{31k} J_k \pm i^2 \hbar \varepsilon_{32k} J_k \\ &= i\hbar \varepsilon_{312} J_2 \mp \hbar \varepsilon_{321} J_1 = i\hbar J_2 \pm \hbar J_1 \\ &= \pm \hbar (J_1 \pm i\hbar J_2) = \pm \hbar J_{\pm}, \end{aligned} \quad (12.18)$$

co było do wykazania. ■

Lemat 12.4 *Operatory J_+ oraz J_- spełniają relację komutacyjną*

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_3. \quad (12.19)$$

Dowód. Znowu przez bezpośredni rachunek dostajemy

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= [J_1 + iJ_2, J_1 - iJ_2] \\ &= -i [J_1, J_2] + i [J_2, J_1] \\ &= 2i [J_2, J_1] \\ &= 2i^2 \hbar \varepsilon_{21p} J_p = -2\hbar \varepsilon_{213} J_3 = 2\hbar J_3, \end{aligned} \quad (12.20)$$

co było do wykazania. ■

Lemat 12.5 *Operator całkowitego momentu pędu $\vec{J}^2$ i operatory $J_{\pm}$ spełniają relację*

$$[\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0. \quad (12.21)$$

Dowód. Na mocy lematu (12.14) mamy

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_{\pm}] &= [\vec{J}^2, J_1 \pm iJ_2] \\ &= [\vec{J}^2, J_1] \pm i[\vec{J}^2, J_2] = 0. \end{aligned} \quad (12.22)$$

co kończy dowód. ■

Lemat 12.6 *Operator całkowitego momentu pędu $\vec{J}^2$ można wyrazić w postaci*

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2. \quad (12.23)$$

Dowód. Bezpośrednio sprawdzamy (pamiętamy, że składowe J_k nie komutują)

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= \frac{1}{2}((J_1 + iJ_2)(J_1 - iJ_2) + (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2)) + J_3^2 \\ &= \frac{1}{2}(J_1^2 - iJ_1J_2 + iJ_2J_1 + J_2^2 + J_1^2 + iJ_1J_2 - iJ_2J_1 + J_2^2) + J_3^2 \\ &= \frac{1}{2}(2J_1^2 + 2J_2^2) + J_3^2 \end{aligned} \quad (12.24)$$

co, na mocy definicji (12.12) oczywiście kończy dowód. ■

Lemat 12.7 *Dla operatorów $J_{\pm}$ zachodzi następująca relacja*

$$J_{\mp}J_{\pm} = \vec{J}^2 - J_3(J_3 \pm \hbar). \quad (12.25)$$

Dowód. Bezpośrednio sprawdzamy (składowe J_k nie komutują)

$$\begin{aligned} J_{\mp}J_{\pm} &= (J_1 \mp iJ_2)(J_1 \pm iJ_2) \\ &= J_1^2 \pm iJ_1J_2 \mp iJ_2J_1 - i^2J_2^2 \\ &= J_1^2 + J_2^2 \pm i(J_1J_2 - J_2J_1) \\ &= \vec{J}^2 - J_3^2 \pm i^2\hbar\epsilon_{12p}J_p \\ &= \vec{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar\epsilon_{123}J_3 \\ &= \vec{J}^2 - J_3(J_3 \pm \hbar). \end{aligned} \quad (12.26)$$

co należało pokazać. ■

12.3 Wartości własne operatorów $\vec{J}^2$ oraz $J_3 = J_z$

12.3.1 Wprowadzenie

Operatory $\vec{J}^2$ i J_3 komutują, a więc z jednej strony są jednocześnie mierzalne, zaś z drugiej strony mają wspólny zbiór wektorów własnych. Wektor własny operatorów $\vec{J}^2$ i J_3 oznaczmy przez $|j\ m\rangle$ i napiszemy odpowiednie zagadnienia własne

$$\vec{J}^2 |j\ m\rangle = \hbar^2 \lambda_j |j\ m\rangle, \quad (12.27a)$$

$$J_3 |j\ m\rangle = \hbar m |j\ m\rangle, \quad (12.27b)$$

gdzie $\hbar$ po prawej wprowadziliśmy dla zgodności wymiarów. Rozważane operatory są hermitowskie, więc bezwymiarowe liczby $\lambda_j, m \in \mathbb{R}$. Poprawny wymiar uwzględnia stała Plancka, zatem liczby λ_j, m będziemy nazywać wartościami własnymi operatorów $\vec{J}^2$ i J_3 , odpowiednio. Może się tak zdarzyć, że operatory $\vec{J}^2$ i J_3 nie wystarczają do utworzenia zupełnego zbioru obserwabli komutujących. Wówczas może istnieć kilka stanów spełniających powyższe zagadnienie własne. Wtedy będą się one różnić dodatkowym indeksem numerującym stany własne jakiejś trzeciej obserwabli, którą trzeba dołączyć, aby zbudować ZZOK. Na razie pominiemy ten ewentualny trzeci indeks, ale do dyskusji tego problemu wrócimy później. Stany $|j m\rangle$ i $|j' m'\rangle$ odpowiadają różnym wartościom własnym operatorów hermitowskich, są więc ortogonalne. Można je unormować, więc przyjmujemy

$$\langle j m | j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (12.28)$$

Oczywiście z (12.27) wynikają wartości oczekiwane

$$\langle j m | \vec{J}^2 | j m \rangle = \hbar^2 \lambda_j, \quad (12.29a)$$

$$\langle j m | J_3 | j m \rangle = \hbar m. \quad (12.29b)$$

Operator $\vec{J}$ jest z założenia obserwabłą, jest więc hermitowski, wobec tego operator $\vec{J}^2$ jest dodatnio określony, co oznacza że

$$\hbar^2 \lambda_j = \langle j m | \vec{J}^2 | j m \rangle = \|\vec{J} | j m \rangle\|^2 \geq 0, \quad \implies \lambda_j \geq 0. \quad (12.30)$$

Wobec tego zawsze znajdziemy taką liczbę nieujemną j , że możemy napisać

$$\lambda_j = j(j+1), \quad j \geq 0, \quad \text{oraz} \quad \vec{J}^2 | j m \rangle = \hbar^2 j(j+1) | j m \rangle. \quad (12.31)$$

Wprowadzenie liczby j na tym etapie rozważań jest możliwe, choć na razie niekonieczne. Później, wyniknie nam ona w sposób naturalny.

12.3.2 Wartość własna m jest ograniczona

Wartość oczekiwana operatora J_k^2 jest nieujemna, bowiem

$$\langle j m | J_k^2 | j m \rangle = \|J_k | j m \rangle\|^2 \geq 0. \quad (12.32)$$

Suma dwóch liczb nieujemnych też jest nieujemna. Zatem stosując (12.27) otrzymujemy

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle j m | J_1^2 | j m \rangle + \langle j m | J_2^2 | j m \rangle \\ &= \langle j m | (J_1^2 + J_2^2) | j m \rangle \\ &= \langle j m | (\vec{J}^2 - J_3^2) | j m \rangle = \hbar^2 (\lambda_j - m^2). \end{aligned} \quad (12.33)$$

Wnioskujemy stąd, że po pierwsze stan $|j m\rangle$ jest stanem własnym operatora $(J_1^2 + J_2^2)$, a po drugie, że

$$\lambda_j - m^2 \geq 0. \quad (12.34)$$

To zaś oznacza, że liczba kwantowa m jest ograniczona, gdy tylko λ_j jest znane. Wobec tego, stwierdzamy, że

$$\text{dla danego (określonego) } \lambda_j : \quad m_{\min} \leq m \leq m_{\max} \quad (12.35)$$

12.3.3 Własności $J_{\pm}|j m\rangle$

Rozważymy teraz działanie operatora podnoszącego J_+ i obniżającego J_- na stany $|j m\rangle$. Ponieważ operatory $J_{\pm}$ komutują z $\vec{J}^2$ (por. (12.21)), więc

$$\vec{J}^2(J_{\pm}|j m\rangle) = \vec{J}^2 J_{\pm}|j m\rangle = J_{\pm}\vec{J}^2|j m\rangle = \hbar^2 \lambda_j J_{\pm}|j m\rangle. \quad (12.36)$$

Wektor $J_{\pm}|j m\rangle$ jest więc stanem własnym operatora $\vec{J}^2$ z wartością własną λ_j . Co więcej, z relacji komutacyjnej (12.17) wynika, że

$$\begin{aligned} J_3 J_{\pm}|j m\rangle &= (J_{\pm} J_3 \pm \hbar J_{\pm})|j m\rangle \\ &= J_{\pm}(\hbar m \pm \hbar)|j m\rangle = \hbar(m \pm 1)J_{\pm}|j m\rangle. \end{aligned} \quad (12.37)$$

Oznacza to, że wektor $J_{\pm}|j m\rangle$ jest stanem własnym operatora J_3 odpowiadającym wartości własnej $(m \pm 1)$. Własności te posiada też stan $|j, m \pm 1\rangle$. Wnioskujemy więc, że musi zachodzić proporcjonalność

$$J_{\pm}|j m\rangle = C_{\pm}|j, m \pm 1\rangle. \quad (12.38)$$

Stałe proporcjonalności trzeba oczywiście wyznaczyć, czym zajmiemy się dalej. Własność podnoszenia lub obniżania liczby kwantowej m wyjaśnia dlaczego operatory $J_{\pm}$ nazywamy podnoszącym lub obniżającym.

Lemat 12.8 Operatory $J_{\pm}$ działając na stan $|j m\rangle$ dają

$$J_+|j m\rangle = \hbar \sqrt{\lambda_j - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \quad (12.39a)$$

$$J_-|j m\rangle = \hbar \sqrt{\lambda_j - m(m-1)} |j, m-1\rangle, \quad (12.39b)$$

Dowód. Na mocy relacji (12.25) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle j m | J_{\mp} J_{\pm} | j m \rangle &= \langle j m | [\vec{J}^2 - J_3(J_3 \pm \hbar)] | j m \rangle \\ &= [\hbar^2 \lambda_j - m \hbar(m \pm \hbar)] \langle j m | j m \rangle \\ &= \hbar^2 [\lambda_j - m(m \pm 1)]. \end{aligned} \quad (12.40)$$

Z drugiej strony, z (12.38) mamy od razu

$$\langle j m | J_{\mp} J_{\pm} | j m \rangle = \|C_{\pm}|j, m \pm 1\rangle\|^2 = |C_{\pm}|^2, \quad (12.41)$$

bowiem stany $|j, m \pm 1\rangle$ są z założenia unormowane. Zestawiając dwie powyższe równości piszemy

$$C_{\pm} = \hbar \sqrt{\lambda_j - m(m \pm 1)}. \quad (12.42)$$

Podstawiając ten wynik do (12.38) otrzymujemy tezę. ■

12.3.4 Wartości własne $\vec{J}^2$ oraz $J_3 = J_z$

W naszych poprzednich rozważaniach stwierdziliśmy, że wartość własna m jest ograniczona, patrz (12.35). Wiemy także, że operator J_+ podnosi liczbę kwantową m o 1. Ponieważ m nie może przekroczyć m_{max} , więc musi zachodzić relacja

$$J_+|j, m_{max}\rangle = 0. \quad (12.43)$$

Analogicznie, operator J_- obniża liczbę kwantową m o 1, lecz m nie może spaść poniżej m_{min} , więc musi też być

$$J_- |j, m_{min}\rangle = 0. \quad (12.44)$$

Podziałajmy operatorem J_- na obie strony relacji (12.43) i skorzystajmy z (12.25) biorąc pod uwagę, że stan $|j, m_{max}\rangle$ jest stanem własnym operatorów $\vec{J}^2$ i J_3 . Otrzymujemy

$$\begin{aligned} 0 &= J_- J_+ |j, m_{max}\rangle \\ &= [\vec{J}^2 - J_3 (J_3 + \hbar)] |j, m_{max}\rangle \\ &= \hbar^2 [\lambda_j - m_{max} (m_{max} + 1)] |j, m_{max}\rangle \end{aligned} \quad (12.45)$$

W podobny sposób działamy operatorem J_+ na obie strony (12.44) i mamy teraz

$$\begin{aligned} 0 &= J_+ J_- |j, m_{min}\rangle \\ &= [\vec{J}^2 - J_3 (J_3 - \hbar)] |j, m_{min}\rangle \\ &= \hbar^2 [\lambda_j - m_{min} (m_{min} - 1)] |j, m_{min}\rangle \end{aligned} \quad (12.46)$$

Z uzyskanych wyrażeń wynika więc układ równań

$$\begin{cases} \lambda_j - m_{max} (m_{max} + 1) = 0 \\ \lambda_j - m_{min} (m_{min} - 1) = 0. \end{cases} \quad (12.47)$$

Z równań tych eliminujemy λ_j , i w kolejnych krokach otrzymujemy

$$\begin{aligned} m_{max} (m_{max} + 1) &= m_{min} (m_{min} - 1), \\ m_{max}^2 + m_{max} - m_{min}^2 + m_{min} &= 0, \\ (m_{max} + m_{min})(m_{max} - m_{min}) + (m_{max} + m_{min}) &= 0, \\ (m_{max} + m_{min})(m_{max} - m_{min} + 1) &= 0, \end{aligned} \quad (12.48)$$

Ponieważ $m_{max} \geq m_{min}$ więc powyższe równanie może być spełnione tylko wtedy, gdy zeruje się pierwszy czynnik. Wnioskujemy więc, że

$$m_{max} = -m_{min}. \quad (12.49)$$

Stan $|j, m_{min}\rangle$ ma najmniejszą możliwą liczbę kwantową $m = m_{min}$. Na mocy relacji (12.39a) wnioskujemy, że działając na ten stan operatorem J_+ otrzymamy nowy stan z liczbą kwantową m podniesioną o jeden, tzn $m = m_{min} + 1$. Stosując sukcesywnie operator J_+ zwiększamy liczbę m , aż wreszcie natrafimy na m_{max} . Dalsze stosowanie J_+ produkuje zera. A więc m_{min} i m_{max} muszą różnić się o liczbę całkowitą (o tyle, ile razy stosowaliśmy operator J_+). A zatem piszemy

$$m_{max} - m_{min} = 2j, \quad (12.50)$$

gdzie j jest nieujemną liczbą całkowitą lub połówkową. Liczby kwantowe m_{max} i m_{min} spełniają więc równania (12.49) i (12.50). Wynika z nich oczywisty wniosek

$$m_{max} = j \quad \text{oraz} \quad m_{min} = -j. \quad (12.51)$$

Wobec tego wnioskujemy, że dopuszczalne wartości liczby kwantowej m to

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, \dots, j-2, j-1, j. \quad (12.52)$$

Natomiast na mocy pierwszego z równań (12.47) otrzymujemy

$$\lambda_j = j(j+1), \quad (12.53)$$

przy czym wiemy, że j jest liczbą nieujemną całkowitą lub połówkową. Liczba ta, wprowadzona w (12.31), wynikała teraz w sposób naturalny z całego formalizmu, a ponadto został sprecyzowany jej charakter.

12.3.5 Podsumowanie

Operatory $\vec{J}^2$ i J_3 komutują, mają więc wspólny zbiór (ortonormalnych) wektorów własnych $\{|j m\rangle\}$, spełniających

$$\vec{J}^2 |j m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j m\rangle, \quad (12.54a)$$

$$J_3 |j m\rangle = \hbar m |j m\rangle, \quad (12.54b)$$

gdzie liczba kwantowa m może przyjmować $(2j+1)$ wartości

$$m = -j, -j+1, -j+2, \dots, \dots, j-2, j-1, j. \quad (12.55)$$

Liczba kwantowa j jest nieujemna całkowita lub połówkowa

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots, \dots, \quad (12.56)$$

Z własności operatorów $J_{\pm}$ wynika, że liczba kwantowa m zmienia się krokami o wielkości jednostkowej. Wobec tego

- jeśli j – połówkowa, to m też połówkowa;
- jeśli j – całkowita, to m też całkowita.

Widzimy więc, że zbiory wartości własnych $\{j, m\}$ rozpadają się na dwie klasy, liczb całkowitych (tzw. przypadek bozonowy) i połówkowych (przypadek fermionowy).

Warto także przypomnieć działanie operatorów $J_{\pm}$ na stany $|j m\rangle$:

$$\begin{aligned} J_+ |j m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle, \end{aligned} \quad (12.57a)$$

$$\begin{aligned} J_- |j m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (12.57b)$$

12.4 Wektory własne operatorów $\vec{J}^2$ oraz $J_3 = J_z$

12.4.1 Konstrukcja stanów $|j m\rangle$

Niech $\mathcal{E}$ oznacza pewną przestrzeń wektorową, w której działają operatory $\vec{J}^2$ i J_3 . Weźmy pod uwagę wartości własne j i m , którym odpowiada unormowany wektor $|j m\rangle$. Wektor ten tworzy podprzestrzeń $\mathcal{E}(j, m)$. Mamy teraz dwie możliwości:

- $\vec{J}^2$ i J_3 tworzą ZZOK. Wektor $|j m\rangle$ jest wyznaczony jednoznacznie, $\dim \mathcal{E}(j, m) = 1$.
- $\vec{J}^2$ i J_3 nie tworzą ZZOK. Trzeba dobrać jakiś inny operator, który komutuje z $\vec{J}^2$ i z J_3 tworząc wspólnie z nimi ZZOK. Wówczas podprzestrzeń $\mathcal{E}(j, m)$ ma wymiar $\dim \mathcal{E}(j, m) = g(j, m)$, odpowiadający ilości różnych wartości własnych dodatkowego operatora (mówimy tu skrótowo o jednym operatorze, ale w razie potrzeby dobieramy ich tyle, żeby utworzyć ZZOK). W tej podprzestrzeni budujemy bazę $|\alpha, j, m\rangle$, gdzie α numeruje wartości własne dodatkowego operatora. Baza ta jest ortonormalna

$$\langle \alpha', j, m | \alpha, j, m \rangle = \delta_{\alpha' \alpha} \quad (12.58)$$

Dowolny wektor z podprzestrzeni $\mathcal{E}(j, m)$ można więc przedstawić w bazie

$$|\phi\rangle \in \mathcal{E}(j, m) \quad \Longrightarrow \quad \sum_{\alpha=1}^{g(j, m)} C(\alpha) |\alpha, j, m\rangle, \quad (12.59)$$

gdzie zwracamy uwagę, że zakres zmienności parametru α zależy na ogół od j .

Idąc dalej, stosujemy do wektorów $|\alpha, j, m\rangle$ operatory $J_{\pm}$. W ten sposób (po unormowaniu) dostajemy wektory $|\alpha, j, m \pm 1\rangle$ należące do odpowiednio do podprzestrzeni $\mathcal{E}(j, m \pm 1)$ i tworzące bazę w tych podprzestrzeniach. Ponieważ operatory $J_{\pm}$ przyporządkowują wektorom $|\alpha, j, m\rangle$ wektory $|\alpha, j, m \pm 1\rangle$ w sposób jednoznaczny, więc wnioskujemy, że wymiar podprzestrzeni $\mathcal{E}(j, m \pm 1)$ nie ulega zmianie: $\dim \mathcal{E}(j, m \pm 1) = g(j, m)$. Oczywiście możemy dalej stosować $J_{\pm}$ tworząc $\mathcal{E}(j, m \pm 2)$. Kontynuując taką procedurę dojdziemy do $\mathcal{E}(j, \pm j)$, każda o wymiarze $g(j, m)$. Wynika stąd, że wymiar podprzestrzeni $\mathcal{E}(j, m)$ nie zależy od liczby kwantowej m

$$\dim \mathcal{E}(j, m) = g(j). \quad (12.60)$$

Rozważania te ilustruje poniższa tabela. Każdą kolumnę stanowią wektory z jednej podprzestrzeni $\mathcal{E}(j, m)$. Wektory te mają te same liczby kwantowe j i m zaś różnią się liczbami $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{g_j}$.

$\mathcal{E}(j, -j)$	$\mathcal{E}(j, -j + 1)$	$\dots$	$\mathcal{E}(j, j)$
$ \alpha_1, j, -j\rangle$	$\xrightarrow{J_+}$	$ \alpha_1, j, -j + 1\rangle$	$\xrightarrow{J_+} \dots \xrightarrow{J_+} \alpha_1, j, j\rangle$
$ \alpha_2, j, -j\rangle$	$\xrightarrow{J_+}$	$ \alpha_2, j, -j + 1\rangle$	$\xrightarrow{J_+} \dots \xrightarrow{J_+} \alpha_2, j, j\rangle$
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$ \alpha_{g(j)}, j, -j\rangle$	$\xrightarrow{J_+}$	$ \alpha_{g(j)}, j, -j + 1\rangle$	$\xrightarrow{J_+} \dots \xrightarrow{J_+} \alpha_{g(j)}, j, j\rangle$

Liczba kwantowa m zmienia się (co jeden) od $m_{\min} = -j$ do $m_{\max} = j$, a więc przyjmuje $(2j + 1)$ wartości. Fakt ten ilustruje liczba kolumn w tabeli, których jest właśnie $(2j + 1)$.

12.4.2 Reprezentacja standardowa

W powyższych rozważaniach podprzestrzenie $\mathcal{E}(j, m)$ składały się z wektorów tworzących kolumny w tabeli. Równie dobrze możemy zbudować podprzestrzenie $\mathcal{E}_{\alpha}(j)$, które są rozpięte przez wektory różniące się liczbą m . Wiersze tabeli przedstawiają więc zbiory wektorów tworzących podprzestrzenie $\mathcal{E}_{\alpha}(j)$. Ponieważ α i j są ustalone, więc

$$\dim \mathcal{E}_{\alpha}(j) = 2j + 1. \quad (12.61)$$

Podprzestrzenie te są niezmiennicze względem operatora $\vec{J}$. Operator $\vec{J}^2$ nie zmienia liczb kwantowych j i m . Operatory $J_1, J_2, J_3, J_{\pm}$ mogą mieszać wektory o różnych m , lecz nie zmieniają j . A więc działanie tych operatorów na wektory z $\mathcal{E}_{\alpha}(j)$ przekształca je w inne wektory z tej samej podprzestrzeni

$$\mathcal{E}_{\alpha}(j) \xrightarrow{J_1, J_2, J_3, J_{\pm}} \mathcal{E}_{\alpha}(j). \quad (12.62)$$

W związku z tym operatory $\vec{J}$ (i ich kombinacje) działające na tej podprzestrzeni można reprezentować za pomocą macierzy $(2j + 1) \times (2j + 1)$.

Podprzestrzeń $\mathcal{E}_{\alpha}(j)$ jest więc rozpięta przez wektory $|\alpha, j, m\rangle$ o ustalonych α i j . Cała przestrzeń $\mathcal{E}$ będzie więc sumą takich podprzestrzeni

$$\mathcal{E} = \oplus_j \oplus_{\alpha=1}^{g(j)} \mathcal{E}_{\alpha}(j) \quad (12.63)$$

Jeszcze raz podkreślamy, że zakres zmienności parametru α zależy od konkretnej wartości j . Wektory rozpinające całą przestrzeń tworzą bazę ortonormalną, zatem

$$\langle \alpha', j', m' | \alpha, j, m \rangle = \delta_{\alpha' \alpha} \delta_{j' j} \delta_{m' m}, \quad (12.64)$$

bowiem indeksy α , j i m numerują wartości własne obserwabli (operatorów hermitowskich). Wektory $|\alpha, j, m\rangle$ spełniają także relację zupełności.

$$\sum_j \sum_{\alpha=1}^{g(j)} \sum_{m=-j}^j |\alpha, j, m\rangle \langle \alpha, j, m| = \hat{1}. \quad (12.65)$$

Dowolny wektor $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ można w sposób jednoznaczny rozłożyć na wektory bazy

$$|\psi\rangle = \sum_j \sum_{\alpha=1}^{g(j)} \sum_{m=-j}^j C_{jm}(\alpha) |\alpha, j, m\rangle. \quad (12.66)$$

gdzie $C_{jm}(\alpha) = \langle \alpha, j, m | \psi \rangle$. Wektory $|\alpha, j, m\rangle$ są wektorami własnymi obserwabli $\vec{J}^2$, J_3 oraz pewnego $\hat{A}$ (które komutują parami i tworzą ZZOK). Zatem

$$\vec{J}^2 |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\alpha, j, m\rangle \quad (12.67a)$$

$$J_3 |\alpha, j, m\rangle = m \hbar |\alpha, j, m\rangle \quad (12.67b)$$

$$\hat{A} |\alpha, j, m\rangle = a_{\alpha j} |\alpha, j, m\rangle \quad (12.67c)$$

Wartości własne $a_{\alpha j}$ obserwabli $\hat{A}$ numerujemy indeksami α , j , co jest wyrazem zależności tego, ile wartości własnych $a_{\alpha j}$ odpowiada danemu j . Sens fizyczny obserwabli $\hat{A}$ zależy od kontekstu fizycznego. Jeżeli $\vec{J}^2$ i J_3 stanowią ZZOK, to wówczas $\alpha \equiv 1$ i $g(j) \equiv_j 1$, co oznacza, że dodatkowy parametr jest zbędny i nie wnosi żadnych informacji.

Rozdział 13

Orbitalny momentu pędu

13.1 Ogólne własności orbitalnego momentu pędu

13.1.1 Przypomnienie wyników

W poprzednim rozdziale wprowadziliśmy orbitalny moment pędu cząstki poprzez odwołanie się do fizyki klasycznej i do zasady odpowiedniości. W *Uzupełnieniach* omówiliśmy natomiast jego związek z obrotami. Zbierzemy teraz uzyskane uprzednio rezultaty.

Operator orbitalnego momentu pędu jest operatorem wektorowym mającym trzy składowe

$$\vec{L} = (L_1, L_2, L_3) \quad \text{gdzie} \quad L_k = \varepsilon_{kmn} x_m p_n, \quad (13.1)$$

utworzonych za pomocą operatorów położenia i pędu. Składowe L_k spełniają kanoniczną relację komutacyjną

$$[L_m, L_n] = i\hbar \varepsilon_{mnp} L_p, \quad (13.2)$$

Relacja ta, z jednej strony, wynika z kanonicznej relacji komutacyjnej dla położenia i pędu $[x_m, p_n] = i\hbar \delta_{mn}$, a z drugiej strony, jest konsekwencją własności obrotów.

Wszystkie własności operatora $\vec{J}$ omówione w poprzednim rozdziale zostały wyprowadzone w oparciu o identyczną relację komutacyjną. Dlatego też wszystkie wyniki poprzedniego rozdziału możemy prawie automatycznie zastosować do orbitalnego momentu pędu. Wystarczy tylko dopasować notację. Definiujemy więc operator całkowitego orbitalnego momentu pędu oraz operatory podnoszący i obniżający

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, \quad L_{\pm} = L_1 \pm iL_2. \quad (13.3)$$

Wszelkie relacje komutacyjne przenosimy bez trudu, zmieniając w odpowiedni sposób notację. Dowody przebiegają zupełnie analogicznie. A zatem mamy teraz

$$[\vec{L}^2, L_m] = 0, \quad [L_3, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm}, \quad (13.4a)$$

$$[L_{\pm}, L_{\mp}] = 2\hbar L_3, \quad [\vec{L}^2, L_{\pm}] = 0. \quad (13.4b)$$

Obowiązują też podobne relacje operatorowe

$$\vec{L}^2 = \frac{1}{2} (L_{\pm} L_{\mp} + L_{\mp} L_{\pm}) + L_3^2, \quad (13.5a)$$

$$L_{\mp} L_{\pm} = \vec{L}^2 - L_3(L_3 \pm \hbar), \quad (13.5b)$$

które można sprawdzić takimi samymi rachunkami jak w poprzednim rozdziale.

13.2 Wartości własne i wektory własne

Wyprowadzenie wartości i stanów własnych operatora momentu pędu $\vec{J}$ bazowało wyłącznie na regułach komutacyjnych. Wobec tego, że tutaj mamy te same reguły, więc znów przenosimy wyniki zmieniając jedynie w odpowiedni sposób notację.

Niech $|l, m\rangle$ oznacza unormowany stan własny operatorów $\vec{L}^2$ oraz L_3 , wówczas

$$\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad (13.6a)$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad (13.6b)$$

Układ fizyczny po obrocie o kąt 2π musi wracać do stanu wyjściowego. Stąd też wynika, że liczby kwantowe l oraz m są liczbami całkowitymi. Wniosek ten, nie mający na razie żadnego uzasadnienia, wyprowadzimy w dalszym ciągu wykładu.

Konstrukcja stanów własnych przebiega analogicznie jak w ogólnym przypadku. Podprzestrzeń $\mathcal{E}(\alpha, l)$ zawiera $(2l+1)$ wektorów odpowiadających różnym dopuszczalnym wartościom liczby m . Liczba α numeruje stany własne, jakieś innej obserwacji, jeśli dwa operatory $\vec{L}^2$ oraz L_3 nie wystarczają do utworzenia zupełnego układu komutujących obserwacji. Stany $|\alpha, l, m\rangle$ tworzą zbiór zupełny i ortonormalny

$$\langle \alpha, l, m | \beta, l', m' \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (13.7)$$

Co więcej, omawiana podprzestrzeń jest inwariantna względem operatorów $\vec{L}$, a także nieredukowalna, tzn. nie ma mniejszej podprzestrzeni zawartej w $\mathcal{E}(\alpha, l)$, która byłaby inwariantna względem operatorów orbitalnego momentu pędu.

13.2.1 Elementy macierzowe

Zebrane tu rezultaty łatwo wynikają z poprzedniego rozdziału.

$$\langle l, m | \vec{L}^2 | l', m' \rangle = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (13.8a)$$

$$\langle l, m | L_3 | l', m' \rangle = \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (13.8b)$$

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_{\pm} | l', m' \rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1} \\ &= \hbar \sqrt{(l \mp m')(l \pm m' + 1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1}. \end{aligned} \quad (13.8c)$$

Z definicji $L_{\pm}$ w (13.3) oraz z (13.8c) wynikają dwa dalsze elementy macierzowe

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_1 | l', m' \rangle &= \frac{\hbar}{2} \delta_{ll'} [\sqrt{l(l+1) - m'(m' + 1)} \delta_{m, m'+1} \\ &\quad + \sqrt{l(l+1) - m'(m' - 1)} \delta_{m, m'-1}], \end{aligned} \quad (13.9a)$$

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_2 | l', m' \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \delta_{ll'} [\sqrt{l(l+1) - m'(m' + 1)} \delta_{m, m'+1} \\ &\quad - \sqrt{l(l+1) - m'(m' - 1)} \delta_{m, m'-1}], \end{aligned} \quad (13.9b)$$

które wynikają z dodania i odjęcia stronami formuł (13.8c) dla operatorów L_+ oraz L_- .

13.3 Orbitalny moment pędu w reprezentacji położeniowej

Zarówno w poprzednim rozdziale, jak i w *Uzupełnieniach* znaleźliśmy jawną postać składowych operatora $\vec{L}$ w reprezentacji położeniowej:

$$L_1 = L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (13.10a)$$

$$L_2 = L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (13.10b)$$

$$L_3 = L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (13.10c)$$

Formuły te zapisane są we współrzędnych kartezjańskich, które jak się okazuje w praktyce, nie są zbyt wygodne. Jak wspominaliśmy, dyskutując zasadę odpowiedniości, operatory powinny być konstruowane we współrzędnych kartezjańskich, a dopiero potem można przejść do innych współrzędnych. Tak też teraz zrobimy, transformując składowe (13.10) orbitalnego momentu pędu do współrzędnych sferycznych.

13.3.1 Współrzędne kartezjańskie i sferyczne

Przypominamy związek między współrzędnymi kartezjańskimi i sferycznymi

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (13.11)$$

oraz relacje odwrotne

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \cos \theta = \frac{z}{r} = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}. \quad (13.12)$$

Zamiana zmiennych

Przejście we wzorach (13.10) od współrzędnych kartezjańskich do sferycznych jest raczej ćwiczeniem w różniczkowaniu. Zbierzemy ważne rezultaty pośrednie, podając ich wyprowadzenia jedynie w skrócie.

Macierz zamiany współrzędnych jest następująca

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi, & \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \theta, \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (13.13)$$

Obliczenia dziewięciu pochodnych tworzących powyższą macierz są bardzo proste. Naszkicujemy jednak sposób obliczania niektórych z nich. A mianowicie, z (13.12) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} 2x = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi. \end{aligned} \quad (13.14)$$

Analogicznie obliczamy pozostałe dwa elementy pierwszego wiersza macierzy (13.13). Bierzemy teraz drugą z relacji (13.12), przy czym po lewej stronie stosujemy reguły różniczkowania dla funkcji złożonej $\cos \theta = \cos[\theta(x)]$. W ten sposób mamy

$$\begin{aligned} -\sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} = -\frac{1}{2} z (x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} 2x \\ &= -\frac{zx}{r^3} = -\frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi, \end{aligned} \quad (13.15)$$

gdzie skorzystaliśmy również ze związków (13.11). Otrzymaliśmy więc pierwszy wyraz w drugim wierszu macierzy (13.13). Postępując całkiem analogicznie z trzecią relacją w (13.12) dostajemy

$$\frac{1}{\cos^2 \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{y}{x} = -\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin \varphi \sin \theta}{r \cos^2 \varphi \sin^2 \theta}, \quad (13.16)$$

skąd po uproszczeniu dostajemy pierwszy człon trzeciego wiersza macierzy (13.13).

Otrzymana wyżej tablica pochodnych pozwala wyrazić pochodne obliczane względem współrzędnych kartezjańskich przez pochodne we współrzędnych sferycznych. I tak, w myśl zasad różniczkowania funkcji złożonych otrzymujemy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.17)$$

Korzystając z pochodnych zebranych w tablicy (13.13) dostajemy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.18)$$

W ten sam sposób obliczamy pozostałe operatory różniczkowania względem zmiennych kartezjańskich przez odpowiednie operatory we współrzędnych sferycznych. Wyniki są następujące

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (13.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (13.20)$$

13.3.2 Operatory L_k we współrzędnych sferycznych

Obliczenia składowych L_k operatora orbitalnego momentu pędu we współrzędnych sferycznych polegają na podstawieniu wzorów (13.17,13.19,13.20) do formuł (13.10). Wygląda to skomplikowanie, jednak wiele członów znosi się parami. Wykorzystanie elementarnych relacji trygonometrycznych także daje znaczne uproszczenia. Nie ma tu więc żadnych trudności koncepcyjnych, a jedynie mamy do czynienia z dość żmudnymi rachunkami. Pokażemy tutaj jak obliczać jedną ze składowych operatora momentu pędu. Pozostałe oblicza się bardzo podobnie i dlatego podamy tylko gotowe rezultaty.

Na podstawie wzoru (13.10), do którego podstawiamy odpowiednie formuły (13.11) oraz (13.20) i (13.19), dla pierwszej składowej operatora momentu pędu mamy

$$\begin{aligned} L_1 &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -i\hbar \left[r \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]. \end{aligned} \quad (13.21)$$

Wyrazy zawierające $\partial/\partial r$ skracają się,

$$\begin{aligned} L_1 &= -i\hbar \left[-\sin^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \end{aligned} \quad (13.22)$$

co kończy obliczenia. W analogiczny sposób obliczamy dwie pozostałe składowe operatora $\vec{L}$ we współrzędnych sferycznych. Rezultaty wyrażają się wzorami

$$L_1 = L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.23a)$$

$$L_2 = L_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.23b)$$

$$L_3 = L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.23c)$$

Ponieważ składowe podnosząca i obniżająca wyrażają się jako kombinacje L_1 oraz L_2 , więc z powyższych wzorów łatwo uzyskujemy

$$\begin{aligned} L_+ &= \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_- &= \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (13.24)$$

Warto przypomnieć, że sprzężenie operatora różniczkowania zmienia jego znak, to znaczy

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \text{oraz} \quad \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (13.25)$$

dzięki czemu, z relacji (13.24) widzimy, że operatory L_+ oraz L_- są swymi sprzężeniami, tj. $L_+^\dagger = L_-$, i na odwrót.

13.3.3 Operator $\vec{L}^2$ we współrzędnych sferycznych

W tym wypadku niezbędne obliczenia są nadal koncepcyjnie proste, lecz jeszcze bardziej skomplikowane. Wynika to stąd, że zgodnie z (13.3) musimy obliczyć kwadraty operatorów przedstawionych we wzorach (13.23). Prześledzimy obliczenia operatora L_1^2 . Z (13.23a) mamy

$$\begin{aligned} L_1^2 &= -\hbar^2 \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]. \end{aligned} \quad (13.26)$$

Pozostaje wykonać niezbędne różniczkowania. Otrzymujemy

$$\begin{aligned} L_1^2 &= -\hbar^2 \left[\sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right. \\ &\quad + 2 \sin \varphi \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi} + \operatorname{ctg} \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &\quad \left. - \operatorname{ctg}^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg}^2 \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (13.27)$$

Niestety powyższego wzoru nie da się uprościć. Podobnie nieprzyjemny wynik otrzymamy obliczając kwadrat L_2 . W tym wypadku mamy

$$\begin{aligned} L_2^2 = & -\hbar^2 \left[\cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right. \\ & - 2 \sin \varphi \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi} + \operatorname{ctg} \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \\ & \left. + \operatorname{ctg}^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg}^2 \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (13.28)$$

Choć oba uzyskane wyrażenia są mocno złożone, jednak wiele członów różni się tylko znakiem. Pozostałe ładnie się grupują. Biorąc pod uwagę jedynekę trygonometryczną, otrzymujemy sumę

$$L_1^2 + L_2^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (13.29)$$

Na szczęście, z (13.23c) w trywialny sposób mamy

$$L_3^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (13.30)$$

Wobec tego operator kwadratu orbitalnego momentu pędu we współrzędnych sferycznych wyraża się wzorem

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + (1 + \operatorname{ctg}^2 \theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (13.31)$$

Pozostaje doprowadzić powyższy wynik do wygodniejszej postaci. Przede wszystkim z elementarnej trygonometrii

$$1 + \operatorname{ctg}^2 \theta = \frac{1}{\sin^2 \theta} \quad (13.32)$$

Co więcej, nietrudno jest otrzymać następującą relację różniczkową

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{1}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (13.33)$$

Wykorzystując powyższe relacje pomocnicze w (13.31) otrzymujemy końcowe wyrażenie dla kwadratu orbitalnego momentu pędu.

Podsumowanie

Formuły dla operatorów $\vec{L}^2$ oraz L_3 w reprezentacji położeniowej wyrażone we współrzędnych sferycznych są podstawowymi wynikami tego paragrafu. Zbieramy je tu razem

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (13.34a)$$

$$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (13.34b)$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.34c)$$

Wzory te okazały się szczególnie wygodne w dalszych zastosowaniach. Zwróćmy także uwagę, że operator orbitalnego momentu pędu zależy jedynie od zmiennych kątowych, co wskazuje na jego ścisłe powiązanie z obrotami.

13.3.4 Wartości własne i funkcje własne $\vec{L}^2$ i L_3

Wnioski z ogólnego formalizmu

Operatory $\vec{L}^2$ oraz L_3 spełniają kanoniczne relacje komutacyjne (13.2), a także zagadnienia własne (13.6). Na podstawie ogólnej teorii z poprzedniego rozdziału wiemy, że liczby l są całkowite lub połówkowe, natomiast m zmienia się od $-l$ do $+l$ skokowo co jeden. Stwierdziliśmy, że naturalne jest pracować w reprezentacji położeniowej, a na dodatek we współrzędnych sferycznych. Celem naszym jest więc teraz znalezienie funkcji własnych (w tymże układzie współrzędnych), a także przedyskutowanie wartości własnych.

Operator $\vec{L}$ zależy jedynie od zmiennych kątowych, dlatego w reprezentacji położeniowej wprowadzamy bazę za pomocą stanów kątowych $|\theta\varphi\rangle = |\Omega\rangle$ (gdzie Ω to kąt bryłowy), którym na podstawie ogólnych rozważań o reprezentacjach w przestrzeni Hilberta, przypisujemy następujące własności.

(i) Ortonormalność (zmienne ciągłe)

$$\langle \theta\varphi | \theta'\varphi' \rangle = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (13.35)$$

(ii) Zupełność

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\theta\varphi\rangle \langle \theta\varphi| = \hat{1}. \quad (13.36)$$

Zauważmy że całkując po kącie bryłowym mamy: $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, dlatego też w powyższych wzorach pojawił się $\sin\theta$.

Odwołując się do ogólnych reguł zapisu operatorów w wybranej reprezentacji, przepisujemy równania własne (13.6) w reprezentacji położeniowej $|\theta\varphi\rangle$

$$\langle \theta\varphi | \vec{L}^2 | lm \rangle = \vec{L}^2 \langle \theta\varphi | lm \rangle = \hbar^2 l(l+1) \langle \theta\varphi | lm \rangle, \quad (13.37a)$$

$$\langle \theta\varphi | L_3 | lm \rangle = L_3 \langle \theta\varphi | lm \rangle = \hbar m \langle \theta\varphi | lm \rangle, \quad (13.37b)$$

Lewe strony są po prostu elementami macierzowymi operatorów $\vec{L}^2$ i L_3 w reprezentacji położeniowej. W środkowych członach rozumiemy, że odpowiednie operatory są wyrażone w reprezentacji $|\theta\varphi\rangle$, czego już nie zaznaczamy górnym indeksem. Oczywiście więc są to operatory w postaci (13.34). Natomiast po prawej mamy wyrażenia wynikłe z równań własnych (13.6).

Wykorzystując więc postać operatorów orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej możemy napisać równania własne dla funkcji falowych $\langle \theta\varphi | lm \rangle$, które możemy oczywiście nazwać funkcjami własnymi (w reprezentacji położeniowej) orbitalnego momentu pędu, należącymi do wartości własnych l i m . Posługujemy się tu terminologią ustaloną przy dyskusji reprezentacji w przestrzeni Hilberta. A zatem z (13.34), (13.37) otrzymujemy parę równań różniczkowych

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \langle \theta\varphi | lm \rangle = \\ = \hbar^2 l(l+1) \langle \theta\varphi | lm \rangle \end{aligned} \quad (13.38a)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \langle \theta\varphi | lm \rangle = \hbar m \langle \theta\varphi | lm \rangle. \quad (13.38b)$$

Równania te pozwalają na wyciągnięcie szeregu ważnych wniosków. Przede wszystkim zauważmy, że z równania (13.38b) wynika faktoryzacja funkcji własnych

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = g(\varphi) F_{lm}(\theta). \quad (13.39)$$

Po wstawieniu tak sfaktoryzowanej funkcji do równania (13.38b), stwierdzamy, że funkcja $F_{lm}(\theta)$ skraca się. W ten sposób otrzymujemy równanie zawierające tylko funkcję $g(\varphi)$. Ma ono postać

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} g(\varphi) = m g(\varphi). \quad (13.40)$$

Scałkowanie tego równania jest trywialne. Stałą całkowania przyjmujemy za dowolną i włączoną do funkcji F_{lm} . Wobec tego

$$g(\varphi) = e^{im\varphi}. \quad (13.41)$$

Z drugiej strony, podstawiając sfaktoryzowaną postać funkcji własnej do wzoru (13.38a) widzimy, że dwukrotne różniczkowanie po kącie φ wyprodukuje czynnik $-m^2$ i poza tym nie zmieni funkcji $g(\varphi)$. Wobec tego, w równaniu tym, na skutek faktoryzacji (13.39) funkcja $g(\varphi)$ skróci się po obu stronach. W rezultacie uzyskamy równanie wyłącznie dla funkcji $F_{lm}(\theta)$.

Otrzymana postać funkcji $g(\varphi)$ ma bardzo istotne konsekwencje. Stan układu fizycznego nie może się zmienić, jeśli dokonamy obrotu układu fizycznego o kąt 2π wokół osi z . Oznacza to, że musi być spełniony warunek

$$g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi) = e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} e^{2im\pi} = e^{im\varphi}. \quad (13.42)$$

A zatem musi być $e^{2im\pi} = 1$. Stąd zaś wynika, że liczba kwantowa m może przyjmować jedynie wartości całkowite. Możemy powiedzieć, że żądanie, aby m było liczbą całkowitą wynika z żądania niezmienniczości stanu układu fizycznego przy obrotach o kąt 2π . Z faktu, że m jest liczbą całkowitą, automatycznie wynika, że liczba kwantowa l też musi być liczbą całkowitą, bowiem m zmienia się od $-l$ do $+l$ co jeden.

Podsumujmy wnioski wynikające z ogólnych rozważań, które prowadziliśmy w reprezentacji położeniowej.

- Liczby kwantowe charakteryzujące wartości własne orbitalnego momentu pędu są liczbami całkowitymi.

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (13.43a)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (13.43b)$$

- Funkcje własne orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej (we współrzędnych sferycznych) faktoryzują się

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = e^{im\varphi} F_{lm}(\theta). \quad (13.44)$$

- Podstawienie faktoryzacji (13.44) do wzoru (13.38a) daje równanie, które spełniają funkcje $F_{lm}(\theta)$

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] F_{lm}(\theta) = l(l+1) F_{lm}(\theta). \quad (13.45)$$

gdzie l i m są całkowite (jak wyżej). Wyznaczenie funkcji $F_{lm}(\theta)$ będzie celem naszych dalszych rozważań.

13.4 Harmoniki sferyczne

13.4.1 Wprowadzenie

Funkcje własne (13.44) orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej

$$Y_{lm}(\theta, \varphi), = \langle \theta \varphi | l m \rangle = e^{im\varphi} F_{lm}(\theta), \quad (13.46)$$

nazwiemy harmonikami sferycznymi. Jako funkcje własne obserwabli, harmoniki sferyczne muszą spełniać typowe warunki nakładane na funkcje falowe.

- Harmoniki sferyczne powinny tworzyć zbiór funkcji ortonormalnych, tj muszą spełniać

$$\begin{aligned} \delta_{ll'} \delta_{mm'} &= \langle l m | l' m' \rangle \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \langle l m | \theta \varphi \rangle \langle \theta \varphi | l' m' \rangle \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (13.47)$$

Pierwsza równość jest wyrazem ortonormalności stanów własnych orbitalnego momentu pędu. Druga wynika z zastosowania relacji zupełności (13.36) do równości poprzedniej. Trzeci krok to po prostu zastosowanie definicji (13.46).

- Stany własne orbitalnego momentu pędu muszą być bazą zupełną. Wobec tego muszą spełniać warunek

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |l m\rangle \langle l m| = \hat{1}. \quad (13.48)$$

Z ortonormalności bazy $|\theta \varphi\rangle$ (por. (13.35)) oraz z powyższego, wynika ciąg równości

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') &= \langle \theta \varphi | \theta' \varphi' \rangle \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \langle \theta \varphi | l m \rangle \langle l m | \theta' \varphi' \rangle \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \end{aligned} \quad (13.49)$$

co stanowi relację zupełności dla harmonik sferycznych.

13.4.2 Konstrukcja harmonik sferycznych

Uwagi wstępne

Konstrukcję harmonik sferycznych można prowadzić na różne sposoby. Przedstawimy tu zarys jednego z nich, a szczegóły omówimy w *Dodatkach matematycznych*. Zauważmy najpierw, że z ogólnej teorii wynika, iż stan $|l, l\rangle$ odpowiadający maksymalnej wartości m (dla danego l) musi spełniać relację

$$L_+ |l, l\rangle = 0. \quad (13.50)$$

Jeśli teraz bra $\langle \theta \varphi |$ podziela z lewej na powyższą równość, to automatycznie przejdziemy do reprezentacji położeniowej. Biorąc operator L_+ według (13.34c) otrzymamy równanie

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0. \quad (13.51)$$

Z definicji (13.46) wynika $Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} F_{ll}(\theta)$, co podstawiamy do naszego równania. W wyniku elementarnych manipulacji otrzymujemy

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta F_{ll}(\theta) = 0, \quad (13.52)$$

gdzie już możemy używać zwykłych pochodnych, bo $F_{ll}(\theta)$ jest funkcją jednej zmiennej. W tym momencie możemy naszkicować procedurę konstrukcji harmonik sferycznych.

- Rozwiązując równanie (13.52) zbudujemy funkcję $e^{il\varphi} F_{ll}(\theta)$, która trzeba unormować. W ten sposób znajdziemy harmonikę $Y_{ll}(\theta, \varphi)$.
- Dalej, pracując cały czas w reprezentacji położeniowej, będziemy działać na $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ operatorem obniżającym L_- . W ten sposób wygenerujemy harmoniki sferyczne o coraz to mniejszym numerze m . Na przykład, w pierwszym takim kroku mamy

$$\begin{aligned} Y_{l,l-1}(\theta, \varphi) &= \langle \theta \varphi | l, l-1 \rangle \\ &\propto L_- \langle \theta \varphi | l, l \rangle = L_- Y_{l,l}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (13.53)$$

Przy przejściu do drugiej linii wpisaliśmy znak proporcjonalności, ponieważ operator L_+ produkuje pewien dodatkowy czynnik, który trzeba wyeliminować prowadząc normowanie harmonik sferycznych.

- Kontynuując stosowanie L_- będziemy budować harmoniki sferyczne o coraz mniejszych liczbach m , aż wreszcie dojdziemy do $m_{min} = -l$.

Obliczenia $F_{ll}(\theta)$

Aby efektywnie skorzystać z takiej procedury musimy najpierw wyznaczyć funkcję $F_{ll}(\theta)$ z równania (13.52). Równanie to przepisujemy w postaci

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{d\theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} F_{ll}(\theta). \quad (13.54)$$

Jest to równanie o rozdzielających się zmiennych

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{F_{ll}(\theta)} = l \frac{d \sin \theta}{\sin \theta}, \quad (13.55)$$

które prosto scałkować. Otrzymujemy

$$F_{ll}(\theta) = C_l (\sin \theta)^l, \quad (13.56)$$

gdzie C_l jest stałą całkowania, którą trzeba określić na drodze normowania. Wobec tego, pierwsza skonstruowana harmonika sferyczna jest postaci

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = C_l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l, \quad (13.57)$$

co trzeba unormować.

Normowanie

Przystępujemy więc do normowania. Na podstawie (13.47) musimy mieć

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |C_l|^2 e^{-il\varphi} (\sin \theta)^l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l \\ &= 2\pi |C_l|^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta (\sin \theta)^{2l}. \end{aligned} \quad (13.58)$$

Zamieniamy zmienną całkowania $x = \cos \theta$. Otrzymana funkcja podcałkowa jest parzysta i wobec tego mamy

$$1 = 4\pi |C_l|^2 \int_0^1 dx (1-x^2)^l = 4\pi |C_l|^2 I_1(l). \quad (13.59)$$

Całka $I_1(l)$ jest obliczona w *Dodatkach matematycznych*. Rezultat jest następujący

$$I_1(l) = \int_0^1 dx (1-x^2)^l = \frac{[2^l l!]^2}{(2l+1)!}. \quad (13.60)$$

Podstawiając tę całkę do wzoru (13.59) łatwo otrzymujemy

$$|C_l| = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!}. \quad (13.61)$$

Harmonika $Y_{ll}(\theta, \varphi)$

Do określenia pozostaje jedynie faza stałej normalizacyjnej. Przyjmujemy tutaj fazę równą $(-1)^l$, a przyczyny tego wyboru omówimy w *Dodatkach matematycznych*. Wstawiając obliczoną stałą do wzoru (13.57) otrzymujemy ostateczną postać skonstruowanej harmoniki sferycznej

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} (\sin \theta)^l. \quad (13.62)$$

Stosując teraz operator obniżający L_- możemy działać nim na uzyskaną harmonikę. W ten sposób otrzymamy $Y_{l, l-1}(\theta, \varphi)$. Procedurę tę omawiamy szczegółowo w *Dodatkach matematycznych*.

13.4.3 Harmoniki sferyczne – zebranie informacji

Nie możemy tu prowadzić wykładu dotyczącego teorii funkcji specjalnych. Zbierzemy tu jedynie rezultaty wyprowadzone w *Dodatkach matematycznych* i przedstawimy wzory pożyteczne w dalszym ciągu wykładu.

Harmoniki sferyczne – funkcje własne orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej – można przedstawić na dwa równoważne sposoby

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{(\sin \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \\ &= \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \\ &\quad \times e^{im\varphi} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}. \end{aligned} \quad (13.63)$$

Z powyższych określeń harmonik sferycznych wynika relacja sprzężenia zespolonego

$$[Y_{lm}(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \varphi). \quad (13.64)$$

Harmoniki sferyczne można zapisać za pomocą stowarzyszonych funkcji Legendre'a (patrz *Dodatek matematyczny D*) w postaci

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta), \quad (13.65a)$$

gdzie $m \geq 0$. Natomiast dla $m < 0$ mamy

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta). \quad (13.65b)$$

W *Dodatku matematycznym D* sprawdzamy, poprzez bezpośrednie obliczenia, że tak zadane harmoniki sferyczne istotnie są rozwiązaniami zagadnień własnych (13.37).

Przy odbiciu przestrzennym gdy kąty sferyczne ulegają następującym zamianom

$$\theta \xrightarrow{\text{odbicie}} \pi - \theta, \quad \varphi \xrightarrow{\text{odbicie}} \varphi + \pi, \quad (13.66)$$

harmoniki sferyczne mają własność

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \xrightarrow{\text{odbicie}} Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (13.67)$$

co, jak mówimy, określa parzystość harmonik sferycznych.

Posługując się wzorem (13.63) możemy bez trudu wyliczyć i wypisać kilka pierwszych harmonik sferycznych. Dla $l = 0$ jedynie możliwą wartością m jest zero. Zatem

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 0 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}. \quad (13.68)$$

Dla przypadku $l = 1$ mamy trzy możliwe wartości $m = -1, 0, 1$. A więc mamy też trzy harmoniki sferyczne

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 1 \pm 1 \rangle = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta, \quad (13.69a)$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 1 0 \rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta. \quad (13.69b)$$

Dla $l = 2$ mamy pięć możliwych $m = -2, -1, 0, 1, 2$. Odpowiednie pięć harmonik sferycznych ma postać

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 \pm 2 \rangle = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta, \quad (13.70a)$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 \pm 1 \rangle = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta, \quad (13.70b)$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 0 \rangle = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1). \quad (13.70c)$$

Często przydatna jest relacja rekurencyjna dla harmonik sferycznych

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \cos \theta = Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} + Y_{l-1,m}(\theta, \varphi) \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}} \quad (13.71)$$

Harmoniki sferyczne stanowią zupełny zbiór funkcji ortonormalnych, tzn. zachodzi relacja ortonormalności (13.47), a także relacja zupełności (13.49). Tak więc harmoniki sferyczne stanowią bazę w przestrzeni funkcji zmiennych kątowych (θ, φ) . Oznacza to, że dowolną funkcję $f(\theta, \varphi)$ można rozłożyć w szereg

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (13.72)$$

przy czym współczynniki rozwinięcia dane są jako całki w reprezentacji położeniowej (we współrzędnych sferycznych)

$$C_{lm} = \langle l m | f \rangle = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi). \quad (13.73)$$

Na koniec zauważmy, że harmoniki sferyczne, a ściślej ich część zależna od kąta θ , są powiązane ze stowarzyszonymi wielomianami Legendre'a. Związek ten omawiamy w *Dodatkach matematycznych*.

* * * * *