7. predavanje

Vladimir Dananić

14. studenoga 2011.

Sadržaj

Kutna količina gibanja

U klasičnoj je mehanici dinamika vrtnje tijela opisana promjenom kutne količine gibanja $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Da bismo vrtnju tijela opisali i kvantnomehanički moramo uzeti kinetičku energiju vrtnje (hamiltonijan za “slobodni rotator”) i pripadajuće veličine kvantizirati, tj. prevesti ih u operatore. Promatrajmo tijelo kojemu središte mase miruje, a tijelo se vrti oko osi koja prolazi njegovim središtem mase (težištem). Budući da je energija tijela koje se slobodno vrti oko svoje osi razmjerna kvadratu njegove kutne količine gibanja, dovoljno je proučiti kvantizaciju kutne količine gibanja i vidjeti koje su moguće njezine vrijednosti, a time i energije tijela. Ako tijelo ima moment tromosti I pri vrtnji oko određene osi što prolazi njegovim težištem i kutnu količinu gibanja $\vec{L}$, tada je njegova energija E jednaka

$$E = \frac{\vec{L}^2}{2I} \tag{1}$$

Energija E, zadana jednadžbom (1), potpuno je slična energiji slobodne čestice $E_k = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Međutim, u klasičnoj mehanici sve sastavnice vektora $\vec{L}$

Kutna količina gibanja

međusobno komutiraju. No, hoće li to ostati tako ako sastavnice vektora $\vec{L}$ zamijenimo odgovarajućim operatorima? Prisjetimo se da zamjena vektora $\vec{p}$ u "običnoj" (translatornoj) kinetičkoj energiji operatorima ne mijenja spektar kinetičke energije slobodne čestice jednostavno zato što sve sastavnice vektora $\vec{p}$ međusobno komutiraju čak i nakon njihove zamjene s operatorima. Energija slobodne čestice jednako je kontinuirana u kvantnoj kao i u klasičnoj mehanici. No, čestica koja se vrti nije sasvim slobodna zato što se mora gibati po određenoj kružnici. Njezina de Broglieva valna duljina ne može imati bilo koju vrijednost zbog kvantnomehaničke interferencije čestice sa samom sobom. Zato ćemo sada ustanoviti kakva su komutacijska pravila za operatore L_x, L_y, L_z. Budući da ti operatori sadrže operatore x, y, z i p_x, p_y, p_z koji međusobno svi ne komutiraju, imamo sljedeće jednakosti:

Kutna količina gibanja

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] = & [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - \\
& - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] = yp_x [p_z, z] - 0 - 0 + xp_y [z, p_z] = \\
& - i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar (xp_y - yp_x) = \\
& = i\hbar L_z
\end{aligned} \tag{2}
$$

Na sličan način dobijemo jednakosti:

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{3}$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \tag{4}$$

Ove se tri jednakosti mogu napisati u sažetom obliku:

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L} \tag{5}$$

Hamiltonijan čestice koja se vrti razmjeran je kvadratu kutne količine gibanja $\vec{L}^2$. Može se pokazati da $\vec{L}^2$ komutira s $\vec{L}$. Iz te činjenice slijedi

Kutna količina gibanja

potpuna sličnost hamiltonijana rotatora s hamiltonijanom slobodne čestice, za koju operator kinetičke energije komutira s operatorom količine gibanja $\vec{p}$. Međutim, za slobodnu česticu imamo $\vec{p} \times \vec{p} = 0$, a za rotator imamo $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$. To znači da u bitnome komutacijska pravila za operator kutne količine gibanja određuju moguće energije kvantnomehaničkog rotatora. Da bismo pojednostavnili pisanje, uvedimo bezdimenzijski operator $\vec{J} = \frac{\vec{L}}{\hbar}$, tako da imamo komutacijska pravila:

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\vec{J} \tag{6}$$

a hamiltonijan (1) tada ima oblik:

$$H_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I}\vec{J}^2 \tag{7}$$

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Komutacijska pravila (6) možemo napisati u drugačijoj bazi. Uvest ćemo operatore

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \ , \ J_z \equiv J_z \tag{8}$$

tako da dobijemo sljedeća komutacijska pravila:

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \ , \ [J_+, J_-] = 2J_z \ , \ \left[\vec{J}^2, \vec{J}\right] = 0 \tag{9}$$

Također imamo jednakost

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}\left(J_+J_- + J_-J_+\right) \tag{10}$$

Sada ćemo algebarskom metodom dobiti i vlastite vektore i vlastite vrijednosti hamiltonijana (7). Označimo s λ vlastitu vrijednost operatora $\vec{J}^2$. No, ta nam vlastita vrijednost sama po sebi nije dovoljna zato što $\vec{J}^2$ komutira sa svim operatorima $J_{\pm}, J_z$. Moramo uvesti bazu koja je vlastita jednom od operatora $J_{\pm}, J_z$. Uzet ćemo vlastitu bazu operatora J_z i njegovu vlastitu vrijednost označiti s μ.

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Dakle, imamo dvije vlastite vrijednosti: λ i μ i pripadajuće vlastite vektore koji ovise o tim vrijednostima: $\Psi_{\lambda,\mu}$. To znači da vrijede jednakosti:

$$\vec{J}^2\Psi_{\lambda,\mu} = \lambda\Psi_{\lambda,\mu}\ ,\ J_z\Psi_{\lambda,\mu} = \mu\Psi_{\lambda,\mu} \tag{11}$$

Primjenom komutacijskoga pravila $[J_z, J_+] = J_+$ na vektor $\Psi_{\lambda,\mu}$ dolazimo do zaključka $J_+\Psi_{\lambda,\mu} = C_+(\lambda,\mu)\Psi_{\lambda,\mu+1}$. Isto tako primjenom komutacijskoga pravila $[J_z, J_-] = -J_-$ zaključujemo $J_-\Psi_{\lambda,\mu} = C_-(\lambda,\mu)\Psi_{\lambda,\mu-1}$. Budući da su operatori J_+ i J_- jedan drugome hermitski konjugirani, zaključujemo da mora vrijediti $C_+(\lambda,\mu) = C_-^*(\lambda,\mu+1)$. Preostalo komutacijsko pravilo $[J_+, J_-] = 2J_z$ daje nam sljedeće rekurzivne formule:

$$|C_+(\lambda,\mu)|^2 = |C_+(\lambda,\mu-1)|^2 - 2\mu \tag{12}$$

$$|C_-(\lambda,\mu+1)|^2 = |C_-(\lambda,\mu)|^2 - 2\mu \tag{13}$$

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Rekurzivne formule (12) i (13) po svemu su obične osim po očitom zahtjevu da je svaki član niza pozitivan, odnosno nenegativan, zato što su nizovi sastavljeni od apsolutnih kvadrata određenih koeficijenata. Operator J_+ podiže vlastitu vrijednost μ točno za 1, a pri tome se norma vektora $C_+\Psi_{\lambda,\mu}$ mora smanjiti za svaki $\mu > 0$. To nam kaže rekurzivna formula (12). Budući da norma bilo kojega vektora ne može biti negativnom, to znači da mora postojati određena vrijednost $\mu = \mu_+ > 0$ za koju je $C_+(\lambda, \mu_+) = 0$, nakon koje se vrijednosti μ niz prekida, odnosno svi su daljni članovi niza jednaki 0. Isto tako operator J_- smanjuje vlastitu vrijednost μ točno za 1, što znači da rekurzivna formula (13) mora biti prekinuta za neki $\mu = \mu_- < 0$, tj. mora vrijediti $C_-(\lambda, \mu_-) = 0$. Potražimo opće rješenje rekurzivnih formula (12) i (13). Stavimo li $f(\mu) = |C_+(\lambda, \mu)|^2$ rekurzivnu formulu (12) možemo napisati u obliku funkcionalne jednadžbe:

$$f(\mu) = f(\mu - 1) - 2\mu \tag{14}$$

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Funkcionalna jednadžba (14) ima rješenje:

$$f(\mu) = -\mu\,(\mu + 1) + f(0) \tag{15}$$

Budući da mora vrijediti $f(\mu_+) = 0$, to znači da je $f(0) = \mu_+\,(\mu_+ + 1)$. Uzmemo li u obzir odnos $|C_-(\lambda, \mu)|^2 = |C_+(\lambda, \mu - 1)|^2$ možemo napisati sljedeće jednakosti:

$$C_+(\lambda, \mu) = \sqrt{\mu_+\,(\mu_+ + 1) - \mu\,(\mu + 1)} \tag{16}$$

$$C_-(\lambda, \mu) = \sqrt{\mu_+\,(\mu_+ + 1) - \mu\,(\mu - 1)} \tag{17}$$

Budući da mora vrijediti $C_-(\lambda, \mu_-) = 0$, iz jednadžbe (17) dobivamo $\mu_- = -\mu_+$. No, uzastopnim djelovanjem operatora J_- na vektor Ψ_{λ,μ_+} moramo s korakom 1 doći do $\mu_- = -\mu_+$, što znači da$\mu_+ - \mu_- = 2\mu_+ = n$, gdje je $n = 0, 1, 2, \ldots$. Dakle, vlastita vrijednost μ_+ mora biti cijeli ili polucijeli broj. Označimo taj broj kao j, tj. $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$.

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Iz svega ovoga slijedi da vlastita vrijednost μ mora poprimati sljedeće vrijednosti: $-j, -j+1, -j+2, ...j-2, j-1, j$. A što je s energijom, odnosno vlastitom vrijednošću λ? Da bismo to doznali dovoljno nam je uporabiti jednadžbu (10):

$$\begin{aligned}\vec{J}^2\Psi_{\lambda,\mu} =& \lambda\Psi_{\lambda,\mu} = \Big[\mu^2 + \frac{1}{2}C_+(\lambda,\mu-1)C_-(\lambda,\mu) + \\ &+\frac{1}{2}C_-(\lambda,\mu+1)C_+(\lambda,\mu)\Big]\Psi_{\lambda,\mu} = j(j+1)\Psi_{\lambda,\mu}\end{aligned} \tag{18}$$

Dakle, vlastita vrijednost $\lambda = j(j+1)$, a prema tome i vlastita energija rotatora (7) $E = \frac{\hbar^2}{2I}j(j+1)$.

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Saberimo dobivene rezultate:

$$\begin{aligned}
\vec{L}^2\Psi_{L,M} &= \hbar^2 L(L+1)\Psi_{L,M} \\
L_z\Psi_{L,M} &= \hbar M\Psi_{L,M} \\
L_+\Psi_{L,M} &= \hbar\sqrt{L(L+1)-M(M+1)}\Psi_{L,M+1} \\
L_-\Psi_{L,M} &= \hbar\sqrt{L(L+1)-M(M-1)}\Psi_{L,M-1} \\
L &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\ ,\ M = -L, -L+1, \dots .L-1, L
\end{aligned} \tag{19}$$

Vidimo da za zadani L imamo $2L+1$ vlastitih vektora $\Psi_{L,M}$. Najniža vrijednost $L=0$ predočuje rotator koji se uopće ne vrti. Dakle, to je trivijalan slučaj. Najniži netrivijalni slučaj je za $L=\frac{1}{2}$, kada imamo samo dva bazna vektora, koje možemo označiti kako nam drago. Naprimjer Ψ_+ i Ψ_-. Za njih vrijedi $L_z\Psi_+ = \frac{\hbar}{2}\Psi_+$, $L_z\Psi_- = -\frac{\hbar}{2}\Psi_-$, $L_+\Psi_+ = 0$, $L_-\Psi_+ = \hbar\Psi_-$, $_-\Psi_- = 0$ i $_+\Psi_- = \hbar\Psi_+$.

Vlastiti vektori i vlastite vrijednosti kutne količine gibanja

Vektore $\Psi_{L,M}$ i operatore $L_\pm, L_z$ možemo predočiti matricama konačnoga reda. Za vektore $\Psi_{L,M}$ možemo uzeti jednostupčane matrice s $2L+1$ redaka, a operatori će tada biti kvadratne matrice $2L+1$ reda. Naprimjer, za $L=1$ imamo za vektore:

$$\Psi_{1,1} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \; , \; \Psi_{1,0} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \; , \; \Psi_{1,-1} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

a za operatore imamo:

$$L_z \equiv \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \; , \; L_+ \equiv \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \; , \; L_- \equiv \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{21}$$

Vlastite funkcije operatora kutne količine gibanja

U prikazanome algebarskom izvodu energijskoga spektra kvantnomehaničkoga rotatora ostala je nevidljiva jedna važna stvar, a ta je da za polucijele vrijednosti od L ne možemo operator kutne količine gibanja prikazati kao diferencijalni operator po određenim prostornim koordinatama. Naime, pošli smo od klasičnoga izraza $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, koji kvantizacijom postaje operatorom $\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla}$. Operator $\vec{\nabla}$ očito je diferencijalni operator u kartezijevim koordinatama. Dakle, trebali bismo naći takve funkcije $F_{L,M}(x, y, z)$ da vrijede sljedeće jednakosti:

$$\begin{aligned}
-i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)F_{L,M} &= MF_{L,M} \qquad (22)\\
\left[z\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - (x+iy)\frac{\partial}{\partial z}\right]F_{L,M} &= \sqrt{L(L+1) - M(M+1)}F_{L,M}\\
\left[-z\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) + (x-iy)\frac{\partial}{\partial z}\right]F_{L,M} &= \sqrt{L(L+1) - M(M-1)}F_{L,M}
\end{aligned}$$

Vlastite funkcije operatora kutne količine gibanja

Diferencijalne se jednadžbe (22) mogu prevesti u razvidniji oblik u sfernim koordinatama:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\phi\sin\theta \\ y &= r\sin\phi\sin\theta \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{23}$$

Zadatci

1. Izrazite u matričnom obliku operatore kutne količine gibanja i vlastite vektore za $L = \frac{1}{2}$.
2. Izračunajte srednju vrijednost operatora $L_-^2 L_+^2$ u stanju opisanome vlastitim vektorom $\Psi_{2,0}$.
3. Molekula O_2 ima približni polumjer $r = 10^{-10}\, m$. Procijenite njezinu rotacijsku energiju za $L = 1$. Kolika je ekvivalentna temperatura potrebna za pobuđivanje te energijske razine?
4. Izrazite operator L_z kao diferencijalni operator u sfernim koordinatama.