

## Wykład 4

### MOMENT PĘDU I SPIN

#### 4.1. Operator momentu pędu

W mechanice klasycznej moment pędu  $\vec{J}$ , tzw. orbitalny moment pędu cząsteczki o masie  $m$  i prędkości  $\vec{v}$ , jest równy

$$\vec{J} = [\vec{r} \times (m\vec{v})] , \quad (4.1)$$

gdzie  $\vec{r}$  jest wektorem położenia cząsteczki względem pewnego punktu odniesienia w przestrzeni.

W mechanice kwantowej wektorowi położenia  $\vec{r}$  i wektorowi pędu  $\vec{p} = m\vec{v}$  odpowiadają hermitowskie operatory (1.2). Podstawiając (1.2) do (4.1) otrzymujemy operator momentu pędu

$$\begin{aligned} \hat{\vec{J}} &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ -i\frac{\hbar}{2\pi}\frac{\partial}{\partial x} & -i\frac{\hbar}{2\pi}\frac{\partial}{\partial y} & -i\frac{\hbar}{2\pi}\frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = \\ &= -i\frac{\hbar}{2\pi}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\vec{i} - i\frac{\hbar}{2\pi}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\vec{j} - i\frac{\hbar}{2\pi}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\vec{k} . \end{aligned} \quad (4.2)$$

Skąd dla składowych momentu pędu wzdłuż osi  $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$  znajdujemy

$$\begin{aligned} \hat{J}_x &= i\frac{\hbar}{2\pi}\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) , \\ \hat{J}_y &= i\frac{\hbar}{2\pi}\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right) , \\ \hat{J}_z &= i\frac{\hbar}{2\pi}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Łatwo sprawdzić, że

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\frac{\hbar}{2\pi}\hat{J}_z , \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\frac{\hbar}{2\pi}\hat{J}_x , \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i \frac{h}{2\pi} \hat{J}_y .$$

Wprowadźmy operator kwadratu momentu pędu

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 . \quad (4.5)$$

Wówczas, korzystając ze związków (4.4), znajdujemy

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad i = x, y, z . \quad (4.6)$$

Z zasad mechaniki kwantowej wynika, że jeżeli dwie wielkości fizyczne  $A$  i  $B$  mogą mieć jednocześnie określone wartości, to ich operatory  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  powinny komutować ze sobą. Ze związków komutacyjnych (4.4) i (4.6) wynika, że jednocześnie jedynie kwadrat momentu pędu i jeden z jego rzutów mają określone wartości.

#### 4.2. Funkcje własne i wartości operatorów $\hat{J}_z$ i $\hat{J}^2$

Rozważmy najpierw zagadnienie własne operatora  $\hat{J}_z$

$$\hat{J}_z f_n(x, y, z) = a_n f_n(x, y, z) . \quad (4.7)$$

dogodnie jest wyrazić operator  $\hat{J}_z$  we współrzędnych sferycznych, przez zamianę współrzędnych  $x, y, z$  oraz pochodnych względem  $x, y, z$ , odpowiednimi wyrażeniami zawierającymi współrzędne  $r, \theta, \varphi$  oraz pochodne względem  $r, \theta, \varphi$ . Korzystamy tu z elementarnych wzorów wiążących zmienne obu rodzajów

$$x = r \cos \varphi \sin \theta, \quad y = r \sin \varphi \sin \theta, \quad z = r \cos \theta, \quad (4.8)$$

oraz z reguł różniczkowania funkcji złożonych, np.

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} . \quad (4.9)$$

Korzystając z (4.9) oraz (4.8) znajdujemy, że

$$\hat{J}_z = i \frac{h}{2\pi} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (4.10)$$

Podstawiając (4.10) do (4.7) otrzymujemy równanie

$$-i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \varphi} f_n = a_n f_n . \quad (4.11)$$

Rozwiązaniami szczególnymi równania (4.11) są  $\cos(a_n 2\pi\varphi/h)$  oraz  $\sin(a_n 2\pi\varphi/h)$ , jednak dogodniej będzie użyć postaci wykładniczej

$$f_n(\varphi) = \exp\left(ia_n \frac{2\pi}{h} \varphi\right). \quad (4.12)$$

Ponieważ kąty  $\varphi$  oraz  $(\varphi \pm m \cdot 360^\circ)$  (gdzie  $m$  - liczba całkowita) są sobie równoważne, więc funkcja  $f_n(\varphi)$  powinna być funkcją okresową z okresem  $360^\circ$ . Jest to możliwe tylko wtedy, kiedy

$$a_n = m \frac{h}{2\pi}. \quad (4.13)$$

Więc funkcjami własnymi operatora  $\hat{J}_z$  są funkcje

$$f_m(\varphi) = \exp(im\varphi). \quad (4.14)$$

Rozważmy zagadnienie własne operatora  $\hat{J}^2$

$$\hat{J}^2 f_j = b_j f_j. \quad (4.15)$$

Operator  $\hat{J}^2$  we współrzędnych sferycznych ma postać

$$\hat{J}^2 = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]. \quad (4.16)$$

Można wykazać, że funkcjami własnymi operatora (4.16) są funkcje kuliste

$$Y_j^m(\theta, \varphi) = i^{m+|m|} \left( \frac{(2j+1)(j-|m|)!}{4\pi(j+|m|)!} \right) P_j^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (4.17)$$

gdzie  $P_j^m(\cos\theta)$  są wielomianami Legendre'a.

Wartości własne operatora  $\hat{J}^2$  są równe

$$b_j = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 j(j+1); \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (4.18)$$

Dla każdego  $j$  możliwymi wartościami  $m$  w (4.17) są

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm j. \quad (4.19)$$

Z porównania (4.17) i (4.14) wynika, że funkcje własne operatora  $\hat{J}^2$  są własnymi funkcjami operatora  $\hat{J}_z$ ; oczywiście powinni tak być, ponieważ operatory  $\hat{J}_z$  i  $\hat{J}^2$  komutują ze sobą.

Ze wzorów (4.13) oraz (4.19) wynika, że składowa  $z$  momentu pędu jest równa ( $mh/2\pi$ ), przy czym  $m$  przyjmuje  $(2j+1)$  wartości, począwszy od  $-j$  do  $+j$ . Oznacza to, że kierunek wektora momentu pędu jest częściowo skwantowany. Kwantowaniu podlega tylko kąt  $\theta$ , jaki tworzy wektor  $\hat{j}$  z osią  $z$ , dla kąta azymutalnego  $\varphi$  natomiast nie ma żadnych ograniczeń.

### 4.3. Elementy macierzowe operatorów $\hat{J}_x$ i $\hat{J}_y$

Oznaczmy wspólne własne stany operatorów  $\hat{J}_z$  i  $\hat{J}^2$  przez  $|j, m\rangle$ . Zgodnie z wynikami poprzedniego rozdziału powinny być spełnione równania

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 j(j+1)|j, m\rangle, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.20)$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = \frac{h}{2\pi} m|j, m\rangle, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (4.21)$$

Znajdziemy elementy macierzowe operatorów  $\hat{J}_x$  i  $\hat{J}_y$  w układzie funkcji w układzie funkcji  $|j, m\rangle$ . Wprowadźmy pomocnicze niehermitowskie operatory

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ &= \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \\ \hat{J}_- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Wówczas ze związków (4.4) i (4.6) wynikają następujące związki komutacyjne

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0, \quad (4.23)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \frac{h}{2\pi} \hat{J}_+, \quad (4.24)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = \frac{h}{2\pi} \hat{J}_-, \quad (4.25)$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\frac{h}{2\pi} \hat{J}_z. \quad (4.26)$$

Utwórzmy elementy macierzowe ze związku komutacyjnego (4.23). Biorąc pod uwagę równanie (4.20) i zasadę (1.26) obliczenia elementów macierzowych, zawierających iloczyny operatorów, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle j_1, m_1 | [\hat{J}^2, \hat{J}_+] | j, m \rangle &= \langle j_1, m_1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle \cdot \\ &\cdot \left( \frac{\hbar}{2\pi} \right)^2 [j_1(j_1 + 1) - j(j + 1)] = 0 \end{aligned}$$

Z równości tej wynika, że operator  $\hat{J}_+$  ma różne od zera macierzowe elementy tylko przy

$$j_1 = j \quad (4.27)$$

Obliczymy dalej elementy macierzowe ze związku komutacyjnego (4.24). Biorąc pod uwagę (4.21) i (4.27) znajdujemy

$$\begin{aligned} \langle j_1, m_1 | [\hat{J}_z, \hat{J}_+] | j, m \rangle &= \frac{\hbar}{2\pi} (m_1 - m) \langle j, m_1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \langle j, m_1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle \end{aligned}$$

skąd

$$\frac{\hbar}{2\pi} (m_1 - m - 1) \langle j, m_1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle = 0 \quad (4.28)$$

Z równości (4.28) wynika, że

$$m_1 = m + 1 \quad (4.29)$$

Z reguły komutacyjnej (4.26), przy uwzględnieniu (4.21) i (4.29), otrzymujemy

$$\begin{aligned} 2 \left( \frac{\hbar}{2\pi} \right)^2 m &= \langle j, m | [\hat{J}_+, \hat{J}_-] | j, m \rangle = \\ &= \langle j, m | \hat{J}_+ | j, m - 1 \rangle \langle j, m - 1 | \hat{J}_- | j, m \rangle - \\ &- \langle j, m | \hat{J}_- | j, m + 1 \rangle \langle j, m + 1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle \end{aligned} \quad (4.30)$$

Oznaczmy przez  $A(j, m)$  element macierzowy

$$\frac{\hbar}{2\pi} A(j, m) = \langle j, m + 1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle \quad (4.31)$$

Ponieważ

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2\pi} A^*(j, m) &= \langle j, m+1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle^* = \\ &= \langle j, m | \hat{J}_+^* | j, m+1 \rangle = \langle j, m | \hat{J}_- | j, m+1 \rangle , \end{aligned} \quad (4.32)$$

to wzór (4.30) możemy zapisać w postaci

$$2m = |A(j, m-1)|^2 - |A(j, m)|^2 , \quad (4.33)$$

czyli

$$|A(j, m-1)|^2 = |A(j, m)|^2 + 2m . \quad (4.34)$$

Z równości (4.34) wynika, że

$$\begin{aligned} |A(j, m)|^2 &= |A(j, m+1)|^2 + 2(m+1) , \\ |A(j, m+1)|^2 &= |A(j, m+2)|^2 + 2(m+2), \\ &\dots \\ |A(j, m+k-1)|^2 &= |A(j, m+k)|^2 + 2(m+k) . \end{aligned} \quad (4.35)$$

Zgodnie z (4.19) i (4.29), jeśli  $m = j$  , to

$$A(j, j) = 0 , \quad (4.36)$$

a zatem w (4.35)  $k$  powinien spełniać warunek

$$m+k \leq j , \quad \text{czyli} \quad k \leq j-m . \quad (4.37)$$

Uwzględniając (4.35) i (4.37), ze wzoru (4.34) mamy

$$\begin{aligned} |A(j, m-1)|^2 &= 2m + 2(m+1) + \dots + 2j = \\ &= 2 \sum_{k=0}^{j-m} (m+k) = (j+m)(j-m+1) . \end{aligned} \quad (4.38)$$

A więc z dokładnością do czynnika fazowego o module 1 znajdujemy, że różne od zera elementy macierzowe operatora  $\hat{J}_+$  są równe

$$\langle j, m | \hat{J}_+ | j, m-1 \rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} . \quad (4.39)$$

Biorąc pod uwagę (4.32) dla operatora  $\hat{J}_-$  znajdujemy

$$\begin{aligned}\langle j, m | \hat{J}_- | j, m + 1 \rangle &= \langle j, m + 1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} .\end{aligned}\quad (4.40)$$

Znając różne od zera elementy macierzowe (4.39) i (4.40), możemy bez trudu obliczyć także elementy macierzowe operatorów  $\hat{J}_x$  i  $\hat{J}_y$ . Korzystając z równości

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad (4.41)$$

$$\hat{J}_y = \frac{i}{2}(\hat{J}_- - \hat{J}_+), \quad (4.42)$$

znajdujemy

$$\langle j, m | \hat{J}_x | j, m \pm 1 \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{2\pi} \right) \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}, \quad (4.43)$$

$$\langle j, m | \hat{J}_y | j, m \pm 1 \rangle = \pm \frac{i}{2} \left( \frac{\hbar}{2\pi} \right) \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}. \quad (4.44)$$

Obliczyliśmy elementy macierzowe operatorów  $\hat{J}_x$  i  $\hat{J}_y$  z dokładnością do czynnika fazowego o module 1. Na nieokreśloność nie ma wpływu na wyniki fizyczne ponieważ z zasad mechaniki kwantowej wynika, że przekształcenie faz funkcji i operatorów nie zmieniają wniosków fizycznych teorii kwantów.

#### 4.4. Funkcje, operatory w różnych układach odniesienia i moment pędu

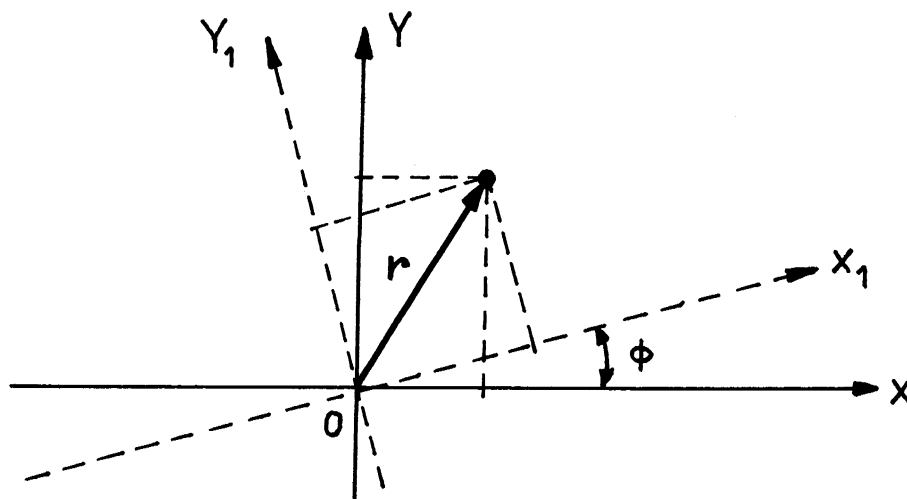
W wielu zastosowaniach trzeba przekształcać funkcje falowe albo operatory dane w jednym układzie odniesienia  $XYZ$  do nowego układu  $X_1Y_1Z_1$ , który otrzymujemy ze starego układu przez dowolny obrót dookoła początku układu współrzędnych. Niech  $f(x, y, z)$  jest pewną funkcją w układzie współrzędnych  $XYZ$ . Po obrocie układu odniesienia otrzymujemy nową funkcję  $f(x_1, y_1, z_1)$  zależną od nowych współrzędnych  $x_1, y_1, z_1$ . Symbolicznie przekształcenie funkcji  $f(\vec{r})$  przy obrocie układu odniesienia możemy zapisać w postaci

$$\hat{R}f(x, y, z) = f(x_1, y_1, z_1), \quad (4.45)$$

gdzie  $\hat{R}$  jest pewnym liniowym operatorem (operatorem obrotu).

Przypuśćmy, że obrót układu współrzędnych  $XYZ$  odbywa się dookoła osi  $Z$ . Jak widać z rys.4.1 między składowymi wektora  $\vec{r}$  w układach odniesienia  $XYZ$  i  $X_1Y_1Z_1$  istnieją związki

$$\begin{aligned}x_1 &= x \cos \varphi + y \sin \varphi, \\y_1 &= -x \sin \varphi + y \cos \varphi.\end{aligned}\tag{4.46}$$



Rys.4.1. Obrót układu odniesienia dookoła osi  $Z$

Dla nieskończenie małych wartości kąta  $\varphi$  możemy przyjąć, że  $\cos \varphi \approx 1$ ,  $\sin \varphi \approx \varphi$ , a zatem z równań (4.46) mamy

$$\begin{aligned}x_1 &= x + \varphi y, \\y_1 &= -\varphi x + y, \\z_1 &= z.\end{aligned}\tag{4.47}$$

Zastępując po prawej stronie (4.45)  $x_1, y_1, z_1$  przez  $x, y, z$  znajdujemy

$$\hat{R}_z f(x, y, z) = f(x + \varphi y, -\varphi x + y, z).\tag{4.48}$$

Dla nieskończenie małych wartości kąta  $\varphi$  prawą stronę (4.48) możemy zamienić tylko dwoma wyrazami szeregu Taylora

$$\begin{aligned}\hat{R}_z f(x, y, z) &= f(x + \varphi y, -\varphi x + y, z) = \\&= f(x, y, z) + \varphi \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x, y, z).\end{aligned}\tag{4.49}$$



Z porównania (4.49) i (4.3) widzimy, że wzór (4.49) możemy zapisać w postaci

$$\hat{R}_z f(x, y, z) = \left[ 1 - i \frac{2\pi}{h} \varphi \hat{J}_z \right] f(x, y, z) . \quad (4.50)$$

Przy obrocie o skończony kąt  $\delta$  możemy podzielić  $\delta$  na  $N$  ( $N \rightarrow \infty$ ) i dla każdego obrotu o nieskończenie mały kąt  $\varphi = \delta/N$  zastosować (4.50). Wtedy w granicy  $N \rightarrow \infty$  otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{R}_z f(x, y, z) &= \left[ 1 - i \frac{2\pi}{h} \varphi \hat{J}_z \right]^N f(x, y, z) = \\ &= \exp\left( - i \frac{2\pi}{h} \delta \hat{J}_z \right) f(x, y, z) \end{aligned} \quad (4.51)$$

W podobny sposób możemy wykazać, że obrotowi osi współrzędnych wokół osi  $X$  o kąt  $\alpha$  odpowiada operator obrotu

$$\hat{R}_x(\alpha) = \exp\left( - i\alpha \frac{2\pi}{h} \hat{J}_x \right) , \quad (4.52)$$

a obrotowi wokół osi  $Y$  o kąt  $\beta$  - operator

$$\hat{R}_y(\beta) = \exp\left( - i\beta \frac{2\pi}{h} \hat{J}_y \right) . \quad (4.53)$$

Ponieważ operatory składowych momentu pędu  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  są operatorami hermitowskimi, to zgodnie z (1.50) operatory obrotu  $\hat{R}_x, \hat{R}_y, \hat{R}_z$  są operatorami unitarnymi.

Rozpatrzmy teraz, jak przekształcają się operatory przy przejściu od układu odniesienia  $XYZ$  do układu  $X_1Y_1Z_1$ . Zgodnie ze wzorem (1.8) wartość średnia ciągu obserwacji wielkości fizycznej  $A$ , której odpowiada operator  $\hat{A}$ , jest równa

$$\langle A \rangle_f = \langle f(x, y, z) | \hat{A}(x, y, z) | f(x, y, z) \rangle , \quad (4.54)$$

gdzie  $f(x, y, z)$  i  $\hat{A}(x, y, z)$  - funkcja stanu (falowa funkcja) i operator wielkości fizycznej  $A$  w układzie współrzędnych  $XYZ$ .

Wielkość  $\langle A \rangle_f$  powinna być niezależna od układu odniesienia, a zatem

$$\langle A \rangle_f = \langle f(x_1, y_1, z_1) | \hat{A}(x_1, y_1, z_1) | f(x_1, y_1, z_1) \rangle , \quad (4.55)$$

gdzie  $f(x_1, y_1, z_1)$  i  $\hat{A}(x_1, y_1, z_1)$  - funkcja stanu (falowa funkcja) i operator wielkości fizycznej  $A$  w układzie współrzędnych  $X_1 Y_1 Z_1$ .

Biorąc pod uwagę, że zgodnie z (4.45)

$$|f(x_1, y_1, z_1)\rangle = \hat{R}|f(x, y, z)\rangle$$

i

$$\langle f(x_1, y_1, z_1)| = \langle f(x, y, z)|\hat{R}^+,$$

gdzie  $\hat{R}^+$  - sprzężony hermitowski operator, otrzymujemy

$$\langle A \rangle_f = \langle f(x, y, z)|\hat{R}^+ \hat{A}(x_1, y_1, z_1) \hat{R}|f(x, y, z)\rangle. \quad (4.56)$$

Z porównania (4.54) i (4.56) mamy

$$\hat{A}(x, y, z) = \hat{R}^+ \hat{A}(x_1, y_1, z_1) \hat{R}. \quad (4.57)$$

Uwzględniając, że dla unitarnego operatora  $\hat{R}^+ = \hat{R}^{-1}$  (1.44), znajdujemy

$$\hat{A}(x_1, y_1, z_1) = \hat{R} \hat{A}(x, y, z) \hat{R}^{-1}. \quad (4.58)$$