Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 10

Verze 2024.1

Generátory translace a rotace

Operátor hybnosti v kvantové mechanice lze použít k translaci vlnové funkce

Chytrý způsob jak napsat Taylorův rozvoj

$$\psi(q+a) = e^{a\frac{\partial}{\partial q}}\psi(q) = e^{ia\hat{p}}\psi(q)$$

Posunovací operátor

Existují další takové operátory? Ano - např. rotace je translace ve sférických souřadnicích

$$\psi(x,y) \equiv \psi(r,\phi) \rightarrow \psi(r,\phi+\phi_0) = e^{\phi_0\frac{\partial}{\partial\phi}}\psi(r,\phi)$$

Lze ukázat, že

Složka z operátoru momentu hybnosti

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(x,y) = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,y) = i\hat{L}_z\psi(x,y)$$

Integrály pohybu

V kvantové mechanice je veličina L **integrálem pohybu** (IP) pokud platí

$$\frac{d}{dt}\hat{L} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{L} + [\hat{H},\hat{L}] \equiv 0$$

Speciálně je-li $\hat{L}$ nezávislé na čase

$$\frac{d}{dt}\hat{L} = [\hat{H},\hat{L}] \equiv 0$$

Důsledky nulového komutátoru:

$\langle\hat{L}\rangle = const.$ + veličina sdílí stejné vlastní stavy s Hamiltoniánem.

Komutátor závisí na tvaru potenciální funkce - speciální případy:

- Volný pohyb $V(\vec{r}) = 0$ - **všechny složky hybnosti** jsou IP
- Centrální síla $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ - **všechny složky momentu hybnosti a kvadrát momentu hybnosti** jsou IP
- **Energie** je IP, protože $[\hat{H},\hat{H}] = 0$.

Operátor momentu hybnosti

Klasicky

$$\boxed{\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}}$$

Kvantování provedeme ostříškováním a tedy pro složky máme

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Jednotlivé složky navzájem nekomutují. Obecně máme:

$$\boxed{[\hat{L}_l,\hat{L}_m] = i\hbar\epsilon_{lmn}\hat{L}_n}$$

Veličina ϵ_{lmn} je tzv. Levi-Civitův symbol: $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{ikj} = \epsilon_{kij}$ a $\epsilon_{123} = 1$ (antisymetrický tenzor).

Velmi důležitou je kvadrát momentu hybnosti $\hat{L}^2$

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.}$$

Kvadrát momentu hybnosti $\hat{L}^2$ komutuje se všemi složkami momentu hybnosti

$$\boxed{[\hat{L}^2,\hat{L}_m] = 0, \forall m}$$

Současně lze tedy měřit celkový moment hybnosti (jeho velikost) a jednu jeho složku.

Nejjednodušší problém je $\hat{L}_z$: (známe jeho vyjádření v s. repre.)

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi},\ \hat{L}_z\psi(\phi) = l_z\psi(\phi) \Rightarrow \psi(\phi) \sim e^{ia\phi}$$

a musí být celé

Jako u hybnosti + okrajová podmínka $\psi(\phi+2\pi) = \psi(\phi)$

$$\boxed{\psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}} \Rightarrow \boxed{\hat{L}_z\psi(\phi) = \hbar m\psi(\phi)}$$

normalizace na intervalu $\langle 0,2\pi)$

Dále pracujeme v **jednotkách $\hbar$**: vlastní stav $|m\rangle$

$$\hat{L}_z|m\rangle = m|m\rangle,\ \langle\phi|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi},\ \hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Zdvihací a snižovací operátory: analogie k harmonickému oscilátoru

$$\hat{\boldsymbol{L}}_\pm = \hat{\boldsymbol{L}}_x \pm i\hat{\boldsymbol{L}}_y,$$

Lze je motivovat na spinových operátorech, jak jsou z nebespadlé

Pomocí komutačních relací lze ukázat

$$\hat{L}_z\hat{L}_\pm|m\rangle = \begin{cases} (m+1)\hat{L}_+|m\rangle & + \\ (m-1)\hat{L}_-|m\rangle & - \end{cases}$$

$\hat{L}_+$ zdvihá

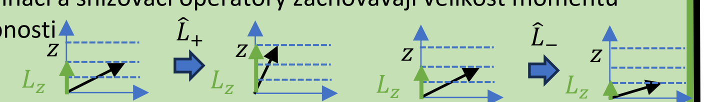
$\hat{L}_-$ snižuje

Vlastní stavy $\hat{L}^2$: $\hat{L}^2|j\rangle = (l^2)_j|j\rangle$ Vlastní hodnota kvadrátu momentu hybnosti

def.

$$\hat{L}^2\hat{L}_\pm|j\rangle = \hat{L}^2|\pm j\rangle = \hat{L}_\pm\hat{L}^2|j\rangle = (l^2)_j\hat{L}_\pm|j\rangle = (l^2)_j|\pm j\rangle$$

Zdvihací a snižovací operátory zachovávají velikost momentu hybnosti



Vlastní stavy $\hat{L}^2$ označíme $|jm\rangle$. Kvantové číslo m označuje $\hat{L}_z$.

Předpokládáme, že platí: $\hat{L}_\pm|jm\rangle = \alpha^\pm(j,m)|j(m\pm1)\rangle$

Pomocí konstrukce $\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2 + \hat{L}_z - \hat{L}_z^2$ obdržíme také

$$\hat{L}_+\hat{L}_-|jm\rangle = \left((l^2)_j + m - m^2\right)|jm\rangle$$

$$\Rightarrow \langle jm|\hat{L}_+\hat{L}_-|jm\rangle = (l^2)_j - m(m-1) = |\alpha^-(j,m)|^2$$

$$\langle jm|\hat{L}_+|j(m-1)\rangle = \alpha^+(j,m-1) = \left(\hat{L}_-|jm\rangle\right)^+|j(m-1)\rangle = \alpha^-(j,m)$$

$$\alpha^-(j,m) = \alpha^+(j,m-1) = \sqrt{(l^2)_j - m(m-1)}$$

Pro minimální hodnotu $m \equiv m_{min}$ už nelze snižovat pomocí $\hat{L}_-$

$$\hat{L}_-|jm_{min}\rangle = \sqrt{(l^2)_j + m - m^2}|j(m_{min}-1)\rangle = 0$$

$$(l^2)_j = m_{min}(m_{min}-1) = j(j+1) \qquad j = |m_{min}| = |m_{max}|$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\hat{\boldsymbol{L}}^2|\boldsymbol{jm}\rangle = \boldsymbol{j(j+1)}|\boldsymbol{jm}\rangle\\ &\hat{\boldsymbol{L}}_z|\boldsymbol{jm}\rangle = \boldsymbol{m}|\boldsymbol{jm}\rangle \quad j = |m_{max}|\end{aligned}}$$

Vlastní energie rotátoru

$$\boxed{\hat{H}|jm\rangle = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I}|jm\rangle}$$

Tuhý rotátor

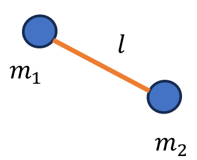
Dvě hmotné částice (s hmotnostmi m_1 a m_2) ve vzdálenosti l (např. dvouatomová molekula při zanedbání vibračního stupně volnosti). Uvažujeme jen pohyb vůči hmotnému středu.

Redukovaná hmotnost

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Moment setrvačnosti

$$I = \mu l^2$$



Kinetická energie

$$T = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{L^2}{2I},\ \text{kde}\quad L = I\omega,$$

Schrödingerova rovnice

Pro volnou částici očekáváme: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 = \frac{\hat{L}^2}{2I} = \frac{\hat{L}^2}{2\mu l^2}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{L}^2 = -\hbar^2 l^2 \nabla^2\Big|_{r=l}}$$

r je fixní, zůstane pouze úhlová část Laplaciánu

Hledejme **společné vlastní vektory** komutujících veličin $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ a $\hat{H}$.

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Sekce videí od Operátor momentu hybnosti :* https://youtu.be/zZ_nxCmLDU4
- *až po Vlastní funkce kvadrátu momentu hybnosti:* https://youtu.be/tJwmTL4_5Mo

Příště: **Pohyb v centrální poli**