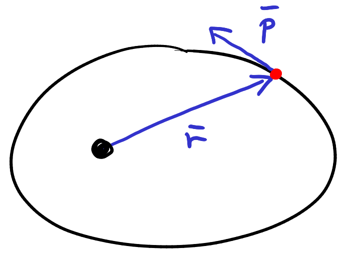
Moment hybnosti v kvantové mechanice

① Zavedení MH – dynamická veličina vystihující otáčivý pohyb kolem osy / bodu

- klasický moment hybnosti pro jednu částici



def: $\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$

časová změna : $\dfrac{d\bar{L}}{dt} = \underbrace{\dfrac{d\bar{r}}{dt}}_{= \bar{v} = \frac{1}{m}\bar{p}} \times \bar{p} + \bar{r} \times \dfrac{d\bar{p}}{dt} = \bar{r} \times \bar{F}$

→ zachování MH pro $\bar{F} = \bar{0}$ nebo centrální pole $\bar{F} \parallel \bar{r}$

(př. druhý Keplerův zákon)

- operátory momentu hybnosti v QM (orbitální MH)

klasicky: $\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$ např. pro $L_z = x p_y - y p_x$ a podobně pro další složky

QM analogie : tři komponenty tvořící vektorový operátor $\hat{L} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned}\right\}$$

kompaktní zápis $\hat{\bar{L}} = \hat{\bar{r}} \times \hat{\bar{p}}$

$\hat{\bar{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

$\hat{\bar{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$

v souřadnicové reprezentaci

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$ a podobně pro $\hat{L}_{x,y}$

- komutátory MH

A) složky $\hat{\bar{L}}$ spolu nekomutují:

$$\left.\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y \end{aligned}\right\}$$

– spojeno cyklickou záměnou $z \to x \to y$

– odvození z $[\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ nebo v souř. reprezentaci – cvičení

→ obecně je nelze současně přesně měřit (výjimka – stavy s $\langle \hat{L}_\alpha \rangle = 0$ pro nějaké α)

a nemají úplný soubor společných vlastních stavů

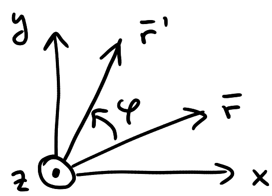
B) každá ze složek komutuje s kvadrátem velikosti L to jest $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, L_z] = 0$$ zkráceně $[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0 \quad (\alpha = x, y, z)$

② Souvislost MH s rotacemi

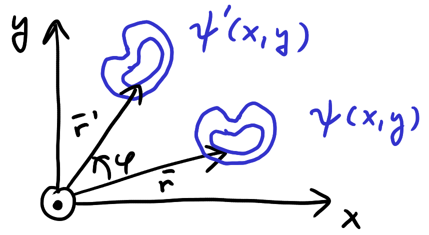
- rotace v 3D prostoru popsány ortogonálními (tj. reálnými unitárními) maticemi R

Př. rotace kolem osy z: $\bar{r}' = R_{z,\varphi}\,\bar{r}$ ⚠ nekomutují



$$\bar{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \bar{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \quad R_{z,\varphi} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- rotace skalárních funkcí



operátor rotace

funkční vztah mezi ψ a $\psi' = \hat{R}\psi$

$$\psi(\bar{r}) = \psi'(\bar{r}') \;\rightarrow\; \psi'(\bar{r}) = \psi(R^{-1}\bar{r})$$

otočení zpět

A) infinitezimální rotace

$R^{-1}_{z,\Delta\varphi} = R_{z,-\Delta\varphi}$: $\quad x' = x\cos\Delta\varphi + y\sin\Delta\varphi \approx x + y\Delta\varphi$ $\quad$ pro malé $\Delta\varphi$,

$\circlearrowleft \Delta\varphi$ $\quad y' = -x\sin\Delta\varphi + y\cos\Delta\varphi \approx y - x\Delta\varphi$ $\quad$ se zanedbáním

$z' = z$ $\quad \sigma(\Delta\varphi^2)$

$$\hat{R}_{z,\Delta\varphi}\psi(x,y,z) = \psi(x',y',z') \approx \psi(x+y\Delta\varphi,\, y-x\Delta\varphi,\, z)$$

$$\approx \psi(x,y,z) + \frac{\partial\psi}{\partial x}y\Delta\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y}(-x\Delta\varphi) \qquad \text{Taylorovým rozvojem}$$

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

→ pro infinitezimální rotaci $\hat{R}_{z,\Delta\varphi}\psi = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{L}_z\right)\psi$ (podobně R_x, R_y)

B) rotace pro libovolný úhel φ

rozložíme do infinitezimálních rotací $\hat{R}_{z,\varphi} = \underbrace{\hat{R}_{z,\Delta\varphi}\hat{R}_{z,\Delta\varphi}\cdots\hat{R}_{z,\Delta\varphi}}_{N \text{ krát pro } \Delta\varphi = \frac{\varphi}{N}}$

ve výsledném výrazu vystupují jen $\hat{1}$ a $\hat{L}_z$ – vše komutuje a zacházíme jako s čísly

$$\hat{R}_{z,\varphi} = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{L}_z\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left[1 + \frac{1}{N}\left(-\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_z\right)\right]^N = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_z}$$

moment hybnosti je tzv. generátorem rotace ($\hat{L}_z$ je generátorem rotace $\hat{R}_z$ apod.)

Pozn. 1: nekomutativnost – komutátory složek $\hat{\bar{L}}$ jsou nenulové, nekomutují tedy obecně ani rotace

Pozn. 2: V QM je moment hybnosti obecnější pojem, orbitální MH $\hat{\bar{L}} = \hat{\bar{r}} \times \hat{\bar{p}}$ je jen jednou z možností (orbitální proto, že „točí" s polohou částice a tedy vlnovou funkcí)

– obecný moment hybnosti $\bar{J}$ lze v QM zavést právě přes generování rotací

infinitezimální $\hat{R}_{x,\Delta\varphi} = 1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{J}_x$ a podobně pro $\hat{J}_y$ a $\hat{J}_z$

– jeho operátory splňují komutační relace $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$ apod.

Př. spin elektronu zachycen operátory $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ splňujícími uvedené komut. relace

3 Rotační symetrie a zachovávání momentu hybnosti

- izotropnost systému (sféricky symetrický systém, např. úloha s centrálním polem – atom H)

klasicky: $\bar{r}(t)$ možná trajektorie → i $R\bar{r}(t)$ je možná trajektorie (R je libovolná rotace) v QM: $|\psi(t)\rangle$ zachycuje určitý časový vývoj systému → i $\hat R|\psi(t)\rangle$ je možný časový vývoj

- symetrie na úrovni Hamiltoniánu

$|\psi(t)\rangle$ i $\hat R|\psi(t)\rangle$ se řídí toutéž Sch. r. (stejný $\hat H$)

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat H|\psi(t)\rangle \qquad\qquad i\hbar\frac{d}{dt}\hat R|\psi(t)\rangle = \hat H\hat R|\psi(t)\rangle$$

aplikace $\hat R$ $\longrightarrow$ $i\hbar\frac{d}{dt}\hat R|\psi(t)\rangle = \hat R\hat H|\psi(t)\rangle$ } pro libovolnou rotaci $\hat R$

rozdíl $0=(\hat H\hat R-\hat R\hat H)|\psi(t)\rangle$ pro libovolný možný $|\psi(t)\rangle$ → $\hat H$ komutuje s $\hat R$: $[\hat H,\hat R]=0$

důsledek: sfér. symetrický $\hat H$ komutuje se všemi složkami $\hat{\vec L}$ $\quad [\hat H,\hat L_\alpha]=0 \quad (\alpha=x,y,z)$

např. pro infinitezimální rotaci s osou z $\quad \hat R_{z,\Delta\varphi}=\hat 1-\frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\,\hat L_z$

$$0=[\hat H,\hat R_{z,\Delta\varphi}]=[\hat H,\hat 1-\tfrac{i}{\hbar}\Delta\varphi\,\hat L_z] = -\tfrac{i}{\hbar}\Delta\varphi\,[\hat H,\hat L_z] \rightarrow [\hat H,\hat L_z]=0$$

Pozn.: $\hat H$ je invariantní vůči $\hat R$, ověříme takto $\hat H' = \hat R^{-1}\underbrace{\hat H\hat R}_{\hat R\hat H} = \hat R^{-1}\hat R\hat H = \hat H$

- využití symetrie – společné vlastní stavy

$[\hat H,\hat L_\alpha]=0$ → vlastní stavy $\hat H$ lze hledat ve tvaru vlastních stavů $\hat L_\alpha$

1) sférický symetrický systém: $[\hat H,\hat L_\alpha]=0\ (\alpha=x,y,z)$ $\quad [\hat H,\hat R_{\vec n,\varphi}]=0$ pro všechna $\vec n,\varphi$

jednotlivé složky $\hat{\vec L}$ sice nekomutují, ale všechny komutují s $\hat L^2$

→ hledáme společné vlastní stavy $\hat H, \hat L^2, \hat L_z$ (místo z může být cokoli jiného)

2) válcově symetrický systém (symetrická osa z případně 2D případ s rot. sym. v rovině xy):

$[\hat H,\hat L_z]=0 \quad [\hat H,\hat R_{z,\varphi}]=0$ pro všechna φ → hledáme společné vlastní stavy $\hat H$ a $\hat L_z$

Pozn. Dalším důsledkem symetrie je zachování středních hodnot podle Ehrenfestova teorému

$$[\hat H,\hat L_\alpha]=0 \rightarrow \frac{d\langle\hat L_\alpha\rangle}{dt}=0 \rightarrow \langle\hat L_\alpha\rangle \text{ je nezávislá na čase}$$

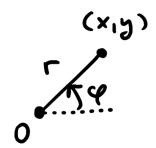
4 Struktura vlastních stavů momentu hybnosti v souřadnicové reprezentaci

- problémy se sférickou / válcovou symetrií se řeší v příslušných souřadnicích
- operátory MH si všímají závislosti jen na úhlových souřadnicích
- vlastní stavy MH → univerzální úhlové závislosti nezávislé na konkrétním $\hat H$
  → předchystané tvary řešení se zohledněnou rotační symetrií

A) válcová symetrie s rotační osou z

- 2D – řešení v polárních souřadnicích $\psi(r,\varphi)$

  3D – přibude (v tuto chvíli nezajímavá) souřadnice z



$x=r\cos\varphi$
$y=r\sin\varphi$

- operátor z-složky MH: $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$ (všímá si jen úhlové proměnné φ)

získá se transformací $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ z kartézských souřadnic do polárních nebo

přes rotace: $\hat{R}_{z,\Delta\varphi}\Psi(r,\varphi) = \Psi(r,\varphi-\Delta\varphi) \approx \Psi(r,\varphi) - \underbrace{\Delta\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}}_{\frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\hat{L}_z}\Psi(r,\varphi)$ $\quad\rightarrow\quad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

- vlastní stavy $\hat{L}_z$

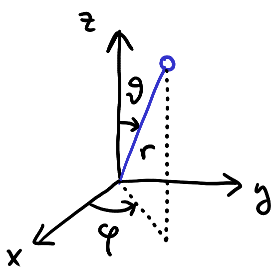
$\hat{L}_z\Psi(r,\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi(r,\varphi) = \lambda\Psi(r,\varphi)$ $\quad \lambda\in\mathbb{R} \quad \rightarrow \quad \Psi = \text{funkce } r \times e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}$

Ψ musí být jednoznačná $\rightarrow$ $\lambda = \hbar m,\ m\in\mathbb{Z}$ a úhlová závislost Ψ je $e^{im\varphi}$

$\rightarrow$ vlastní stavy $\hat{H}$ by se měly dát hledat ve tvaru $\Psi = \text{funkce } r \times e^{im\varphi}$ $\quad m\in\mathbb{Z}$

B) sférická symetrie problému

- sférické souřadnice

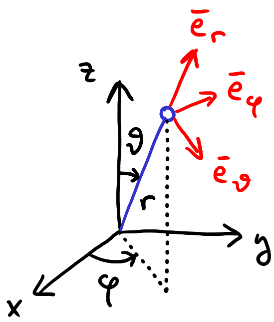


převodní vztahy

$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$

$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$

$z = r\cos\vartheta$



lokální báze

- jednotkové vektory ve směru změn sférických souřadnic
- ortogonální pro všechna r,ϑ,φ

- operátory momentu hybnosti vyjádřené ve sférických souřadnicích

nabla operátor v lokální bázi $\nabla = \bar{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \bar{e}_\vartheta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \bar{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}} = \hat{\vec{r}}\times\frac{\hbar}{i}\nabla = \bar{e}_r r \times \frac{\hbar}{i}\left(\bar{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \bar{e}_\vartheta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \bar{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$\rightarrow$ uplatní se jenom derivace podle ϑ a φ

$$\left.\begin{aligned}\hat{L}_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\!an\,\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_y &= -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\!an\,\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{aligned}\right\}\quad \hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

- vlastní stavy $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$ budou mít tvar $R(r)\,f(\vartheta,\varphi)$

$R(r)$ – libovolná radiální funkce

$f(\vartheta,\varphi)$ – úhlová závislost splňující rovnice vlastního problému $\quad \hat{L}^2 f(\vartheta,\varphi) = \lambda f(\vartheta,\varphi)$, $\quad \hat{L}_z f(\vartheta,\varphi) = \zeta f(\vartheta,\varphi)$

explicitně: $-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial f}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}\right] = \lambda f$

$-i\hbar\frac{\partial f}{\partial\varphi} = \zeta f$

úhlovou závislost popisují **sférické harmonické funkce** (detaily v bestiáři)

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_{lm}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \qquad l = 0,1,2,3,\dots \quad \text{a} \quad m = 0,1,2,\dots l$$

$$Y_{l,-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m Y^*_{lm} \qquad \text{dodefinování pro } m<0 \ (\text{kvůli } P_{lm})$$

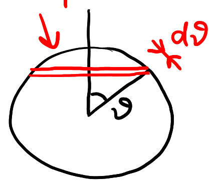
splňují rovnice pro vlastní stavy	možné hodnoty	obvyklé pojmenování
$\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$	$l = 0,1,2,3,\dots$	vedlejší kvantové číslo
$\hat{L}_z Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar m\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$	$m = -l,-l+1,\dots,+l$	magnetické kvantové číslo

→ společné vlastní stavy operátorů momentu hybnosti $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ jsou tvaru

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad R(r) \dots \text{libovolná radiální funkce}$$

- vlastnosti sférických harmonických funkcí

element obvodu
$\sin\vartheta\, d\varphi$



ortogonalita na jednotkové kouli

$$\iint Y^*_{lm} Y_{l'm'}\, d\Omega = \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

rozvoj obecné úhlové závislosti

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{lm} Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \qquad \text{kde} \qquad c_{lm} = \iint Y^*_{lm} f\, d\Omega$$

úplnost souboru sférických harmonických funkcí

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{lm}(\vartheta',\varphi') = \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')$$

Př. ortogonalita Y_{00} a Y_{20}

$$\iint Y^*_{00} Y_{20}\, d\Omega = \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\frac{1}{2}(3\cos^2\vartheta - 1) \overset{\xi=\cos\vartheta}{=} \frac{\sqrt{5}}{8\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\xi\,(3\xi^2-1) = 0$$

5 Abstraktní algebraický přístup k vlastnímu problému MH

- obecný moment hybnosti v QM – trojice operátorů $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ splňující komutační relace

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \qquad [\hat{J}_y,\hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x \qquad [\hat{J}_z,\hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$$

kvadrát velikosti $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ s odvozenými komutátory $[\hat{J}^2,\hat{J}_\alpha] = 0 \quad \alpha = x,y,z$

- spektrum společných vlastních stavů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$ získané algebraickým přístupem

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}^2|jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1)\,|jm\rangle \\ \hat{J}_z|jm\rangle &= \hbar m\,|jm\rangle \end{aligned}\right\} \quad \text{možné hodnoty kvantových čísel:} \quad \begin{aligned} j &= 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \tfrac{5}{2}, 3, \dots \\ m &= -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{aligned}$$

- k tomuto výsledku se dojde čistě na základě komutačních relací, nic jiného není třeba
- celočíselné j: orbitální MH (zde $j \leftrightarrow \ell$) a spin bosonů – foton, gluon, Higgsův boson...

  poločíselné j: spin fermionů – elektron, proton, kvarky...

- přecházení mezi vlastními stavy pomocí žebříkových operátorů (prakticky užitečné jako u HO)

  žebříkové operátory $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm \hat{J}_y$

  působení na vlastní stavy MH: $\hat{J}_\pm |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\, |j, m\pm 1\rangle$

  původní komponenty MH: $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \qquad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$

- souvislost se souřadnicovou reprezentací (sfér. harm. funkcemi)

  korespondence $|\ell m\rangle \leftrightarrow R(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ s libovolnou $R(r)$

  žebříkové operátory $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm \frac{\partial}{\partial\vartheta} + i \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

  přecházení mezi vl. stavy MH $\hat{L}_\pm |\ell m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\, |\ell, m\pm 1\rangle$

Př. $\hat{L}_- |00\rangle = 0$: $\hat{L}_- Y_{00} = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\frac{1}{\sqrt{4\pi}} = 0$

$\hat{L}_+ |20\rangle = \hbar\sqrt{6}\,|21\rangle$: $\hat{L}_+ Y_{20} = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\frac{1}{2}(3\cos^2\vartheta - 1) = \hbar\Big(\underbrace{-\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,3}_{\sqrt{6}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}}\cos\vartheta\sin\vartheta\, e^{i\varphi}\Big)$

Pozn.: Condonova-Shortleyova fáze $(-1)^m$ se zavádí pro konzistentnost s algebraickým přístupem

Doplněk 1 – detaily ke struktuře sférických harmonických funkcí a jejímu původu

$f(\vartheta,\varphi)$ – úhlová závislost splňující rovnice vlastního problému $\hat{L}^2 f(\vartheta,\varphi) = \lambda f(\vartheta,\varphi)$, $\hat{L}_z f(\vartheta,\varphi) = \zeta f(\vartheta,\varphi)$

explicitně: $$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial f}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}\right] = \lambda f$$

$$-i\hbar\frac{\partial f}{\partial\varphi} = \zeta f$$

druhá rovnice si spolu s požadavkem jednoznačnosti vynutí φ-závislost typu $e^{im\varphi}$ s $m\in\mathbb{Z}$

$\rightarrow$ $f(\vartheta,\varphi) = \Theta(\vartheta)\,e^{im\varphi}$ a $\zeta = \hbar m$

po dosazení do první rovnice (bezrozměrná $\tilde{\lambda}$)

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{d\Theta}{d\vartheta}\right) + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta\right] = 0$$

substituce $\xi = \cos\vartheta$ $$\frac{d}{d\vartheta} = \frac{d\xi}{d\vartheta}\frac{d}{d\xi} = -\sin\vartheta\,\frac{d}{d\xi} \quad\rightarrow\quad \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta} = -\frac{d}{d\xi}$$

$$\sin\vartheta\,\frac{d}{d\vartheta} = \sin^2\vartheta\,\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta} = -(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}$$

z hranaté závorky se stane Legendrova diferenciální rovnice pro $P(\xi) = \Theta(\vartheta) = P(\cos\vartheta)$

$$\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{dP}{d\xi}\right] + \left(\tilde{\lambda} - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)P = 0$$

řešením jsou přidružené Legendrovy polynomy $P_{\ell m}(\xi)$, vlastní hodnota je pak $\tilde{\lambda} = \ell(\ell+1)$
(viz elektrostatika a řešení Laplaceovy rovnice ve sférických souřadnicích)

Formule umožňující výpočet $P_{\ell m}(\xi)$:

$$P_\ell(\xi) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{d\xi^\ell}(\xi^2-1)^\ell \qquad P_{\ell m}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{d\xi^m}P_\ell(\xi)$$

(skutečný polynom jen pro sudé m)

sloučením $P_{\ell m}$ pro ϑ-závislost a $e^{im\varphi}$ pro φ-závislost spolu s normovacím faktorem vzniknou **sférické harmonické funkce**

$$Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\,P_{\ell m}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi} \qquad \ell = 0,1,2,3,\dots \text{ a } m = 0,1,2,\dots\ell$$

$$Y_{\ell,-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\,Y_{\ell m}^* \qquad \text{dodefinování pro } m<0 \text{ (kvůli } P_{\ell m})$$

Př. ukázka vyčíslení Y_{00}, Y_{20} a Y_{21}

$$P_{00}(\xi) = P_0(\xi) = 1$$

$$P_{20}(\xi) = P_2(\xi) = \frac{1}{2^2\,2!}\frac{d^2}{d\xi^2}(\xi^2-1)^2 = \frac{1}{8}\frac{d}{d\xi}2(\xi^2-1)2\xi = \frac{1}{2}(3\xi^2-1)$$

$$P_{21}(\xi) = \sqrt{1-\xi^2}\,\frac{d}{d\xi}P_2(\xi) = 3\xi\sqrt{1-\xi^2}$$

vyčíslení (přidruž.) Legendrových polynomů

$\rightarrow$ $Y_{00}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ $\quad Y_{20}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\frac{1}{2}(3\cos^2\vartheta - 1)$ $\quad Y_{21}(\vartheta,\varphi) = (-1)\sqrt{\frac{5}{4\pi}\frac{1!}{3!}}\,3\cos\vartheta\sin\vartheta\,e^{i\varphi}$

Doplněk 2 – algebraický přístup k momentu hybnosti

- komutační relace

$[\hat J_x, \hat J_y] = i\hbar \hat J_z$ + cyklickou záměnou $[\hat J_y, \hat J_z] = i\hbar \hat J_x$ a $[\hat J_z, \hat J_x] = i\hbar \hat J_y$

všechny složky komutují s $\hat J^2$: $[\hat J^2, \hat J_x] = [\hat J^2, \hat J_y] = [\hat J^2, \hat J_z] = 0$

- pomocné žebříkové operátory $\hat J_+ = \hat J_x + i\hat J_y$, $\hat J_- = \hat J_x - i\hat J_y = \hat J_+^\dagger$

komutační relace $[\hat J^2, \hat J_\pm] = 0$ (triviální)

a $[\hat J_z, \hat J_\pm] = [\hat J_z, \hat J_x \pm i\hat J_y] = i\hbar \hat J_y \mp (i)^2 \hbar \hat J_x = \pm\hbar(\hat J_x \mp i\hat J_y) = \pm\hbar \hat J_\pm$

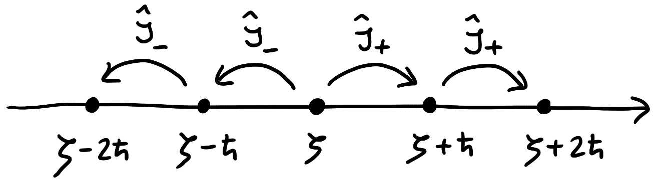
- vlastní stav $|\psi\rangle$ splňující $\hat J^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ a $\hat J_z|\psi\rangle = \zeta|\psi\rangle$

Co dělají $\hat J_\pm$ při působení na $|\psi\rangle$? → nové $|\psi_+\rangle = \hat J_+|\psi\rangle$ a $|\psi_-\rangle = \hat J_-|\psi\rangle$

$$\left.\begin{aligned} \hat J^2|\psi_+\rangle &= \hat J^2\hat J_+|\psi\rangle \overset{\text{kom.}}{=} \hat J_+\hat J^2|\psi\rangle = \hat J_+\lambda|\psi\rangle = \lambda|\psi_+\rangle \\ \hat J^2|\psi_-\rangle &= \hat J^2\hat J_-|\psi\rangle = \hat J_-\hat J^2|\psi\rangle = \hat J_-\lambda|\psi\rangle = \lambda|\psi_-\rangle \end{aligned}\right\} \text{vlastní stavy } \hat J^2 \text{ se stejnou vl. hodnotou } \lambda$$

$$\left.\begin{aligned} \hat J_z|\psi_+\rangle &= \hat J_z\hat J_+|\psi\rangle \overset{\text{kom.}}{=} (\hbar\hat J_+ + \hat J_+\hat J_z)|\psi\rangle = (\hbar+\zeta)|\psi_+\rangle \\ \hat J_z|\psi_-\rangle &= \hat J_z\hat J_-|\psi\rangle = (-\hbar\hat J_- + \hat J_-\hat J_z)|\psi\rangle = (-\hbar+\zeta)|\psi_-\rangle \end{aligned}\right\} \text{vlastní stavy } \hat J_z \text{ se změněnou vl. hodnotou } \zeta \pm \hbar$$

pohyb v podprostoru vlastních stavů $\hat J^2$ příslušných λ



$\hat J_\pm$ nás přenášejí o $\hbar$ vpravo/vlevo

← vlastní hodnoty $\hat J_z$

- Kam až to může zajít?

vyšetření normy generovaných stavů → omezení možných hodnot ζ a nakonec i λ

normované

$$\langle\psi_+|\psi_+\rangle = \langle\psi|(\hat J_+)^\dagger\hat J_+|\psi\rangle = \langle\psi|\hat J_-\hat J_+|\psi\rangle = \langle\psi|(\lambda-\zeta^2-\hbar\zeta)|\psi\rangle = \lambda-\zeta^2-\hbar\zeta$$

$$\hat J_-\hat J_+ = (\hat J_x - i\hat J_y)(\hat J_x + i\hat J_y) = \underbrace{\hat J_x^2+\hat J_y^2}_{\hat J^2-\hat J_z^2} + i\underbrace{(\hat J_x\hat J_y - \hat J_y\hat J_x)}_{i\hbar\hat J_z} = \hat J^2 - \hat J_z^2 - \hbar\hat J_z$$

analogicky (změna u smíšených)

$$\langle\psi_-|\psi_-\rangle = \langle\psi|\hat J_+\hat J_-|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat J^2-\hat J_z^2+\hbar\hat J_z)|\psi\rangle = \lambda-\zeta^2+\hbar\zeta$$

obě normy musí být ≥ 0 jinak jsme vyskočili z Hilbertova prostoru,
což působením $\hat J_\pm$ (kombinace $\hat J_{x,y}$) nelze

ζ je tedy omezené, protože pro dostatečně velké ζ (kladné i záporné)
by vyšla záporná norma, omezení ovšem závisí na λ

Pozn. λ je kladné, protože $\lambda = \langle\psi|\hat{J}^2|\psi\rangle = \underbrace{\langle\psi|\hat{J}_x\,\hat{J}_x|\psi\rangle}_{\langle u|u\rangle \geq 0} + \underbrace{\langle\psi|\hat{J}_y\,\hat{J}_y|\psi\rangle}_{\langle v|v\rangle \geq 0} + \dots$

korektní ukončení „žebříku" stavů:

pro nějaké ζ_{max} musí být $\hat{J}_+|\psi(\lambda,\zeta_{max})\rangle = 0$ a zároveň na druhém konci

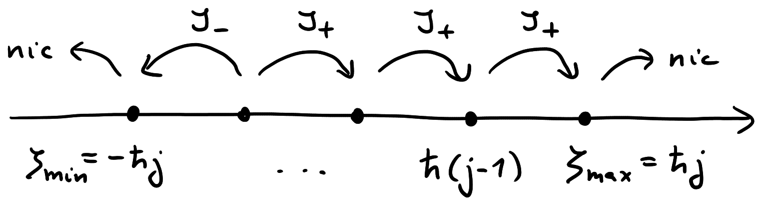
pro nějaké ζ_{min} musí být $\hat{J}_-|\psi(\lambda,\zeta_{min})\rangle = 0$

$\longrightarrow$ $\lambda = \zeta_{max}(\zeta_{max}+\hbar)$ a $\lambda = -\zeta_{min}(-\zeta_{min}+\hbar)$ (tušíme, že $\zeta_{min} = -\zeta_{max}$)

označme $\zeta = \hbar m$ a $\zeta_{max} = \hbar m_{max} = \hbar j$, potom $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ a $m_{min} = -j$

(druhý kořen pro ζ_{min} vychází $\hbar(j+1)$, což je více než ζ_{max} → byl by rozpor)

obrázek situace



vlastní hodnota $\hat{J}^2$

$\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ $j \geq 0$

(nepředpokládáme celočís. j)

vlastní hodnoty $\hat{J}_z$: $\zeta = \hbar m$ kde $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

ζ_{min} a ζ_{max} dělí celistvý počet $\hbar$ $\rightarrow$ $2j$ je celočíselné