5 Moment hybnosti a úlohy s centrálním potenciálem

5.1 Komutační relace operátoru momentu hybnosti •

Stanovte komutační relace mezi složkami $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z$ operátoru momentu hybnosti $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ vyjádřeného v kartézských souřadnicích. Postupujte jednak s využitím explicitního vyjádření $\hat{p}_\alpha = -i\hbar\partial/\partial x_\alpha$, jednak s využitím elementárních komutátorů $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$. Dále najděte komutační relace $\hat{L}^2$ a jednotlivých složek momentu hybnosti.

5.2 Operátor $\hat{L}_z$ ve sférických souřadnicích •

Úpravou výrazu

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

najděte vyjádření operátoru $\hat{L}_z$ ve sférických souřadnicích, tj. diferenciální operátor působící na vlnovou funkci s proměnnými r, ϑ a φ. Jako význačnou osu sférických souřadnic, od níž je měřen úhel ϑ, zvolte osu z.

5.3 Sférické harmonické funkce •

(a) S využitím definice najděte tvar sférické harmonické funkce $\mathrm{Y}_{20}(\theta, \varphi)$.
(b) S využitím výsledku předchozího bodu a vyjádření operátoru $\hat{L}_+$ ve sférických souřadnicích nalezněte tvar sférické harmonické funkce $\mathrm{Y}_{21}(\theta, \varphi)$
(c) Ověřte ortogonalitu sférických harmonických funkcí $\mathrm{Y}_{10}(\theta, \varphi)$, $\mathrm{Y}_{20}(\theta, \varphi)$ a $\mathrm{Y}_{00}(\theta, \varphi)$.

5.4 Měření momentu hybnosti 1 •

Částice se nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí
(a) $\psi_1(r, \vartheta, \varphi) = (z + a)f(r)$
(b) $\psi_2(r, \vartheta, \varphi) = (x^2 + y^2)f(r)$
(c) $\psi_3(r, \vartheta, \varphi) = (x^2 - y^2)f(r)$
Pro každou z těchto vlnových funkcí najděte možné výsledky měření L^2 a L_z. V případě funkce ψ_2 najděte i pravděpodobnosti změření jednotlivých možných hodnot L^2.

Pozn.: Povzneste se nad jistou umělost zadaných vlnových funkcí. V reálném případě (např. v problému s centrálním potenciálem) se přinejmenším kvantové číslo l projeví v efektivním potenciálu pro radiální část vlnové funkce a příspěvky do vlnové funkce vyznačující se různým kvantovým číslem l by tak nesdílely radiální část, jako je tomu v zadání.

5.5 Měření momentu hybnosti 2

Částice se nachází ve stavu, který je současně vlastním stavem $\hat{L}^2$ s příslušným kvantovým číslem l a vlastním stavem $\hat{L}_z$ s příslušným kvantovým číslem m.
(a) Vypočtěte střední hodnotu $\hat{L}_x^2$.
(b) Ověřte předcházející výsledek výpočtem pravděpodobností jednotlivých vlastních stavů $\hat{L}_x$ pro případ $l = 1$, $m = 1$.

5.6 Měření momentu hybnosti 3

V čase $t = 0$ je kvantový stav $|\psi(0)\rangle$ jisté částice vlastním stavem $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$ s vlastními hodnotami $2\hbar^2$ a 0. Najděte časový vývoj stavu $|\psi(0)\rangle$, je-li řízen hamiltoniánem $\hat{H} = A\hat{L}_x$. Měření L_x

poskytlo hodnotu $-\hbar$. Určete, v jakých časových okamžicích $t > 0$ byl tento výsledek měření nejpravděpodobnější.

5.7 Moment hybnosti jako integrál pohybu

Uvažujme o částici v trojrozměrném prostoru v centrálním poli. Hamiltonián má tvar

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\boldsymbol{r}}|)\,.$$

Ukažte, že časová derivace střední hodnoty každé ze složek momentu hybnosti je rovna nule, tj. moment hybnosti je integrálem pohybu.

5.8 Zeemanův jev •

Atom s orbitálním momentem hybnosti charakterizovaným kvantovým číslem $l = 1$ se nachází v magnetickém poli $\boldsymbol{B} = B(\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$. Působení magnetického pole je popsáno Hamiltoniánem $\hat{H} = \mu\,\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{B}$, kde $-\mu\,\hat{\boldsymbol{L}}$ je operátor magnetického momentu atomu. Popište výsledné energiové spektrum. Řešte úlohu nejprve pro $\boldsymbol{B} \parallel \boldsymbol{z}$, poté v obecném případě. Nepomáhejte si přitom otočením souřadného systému.

5.9 Nekonečně hluboká sférická jáma

Najděte vlnové funkce vlastních stavů a vlastní energie částice o hmotnosti m nacházející se v nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené koulí o poloměru R. Pro jednoduchost se omezte na stavy s nulovým momentem hybnosti.

5.10 Konečně hluboká sférická jáma ✡

Najděte vlnové funkce vázaných stavů a vlastní energie částice o hmotnosti m, která se pohybuje v potenciálu konečně hluboké jámy dané

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R\,, \\ 0 & r > R\,. \end{cases}$$

Omezte se pouze na stavy s $l = 0$ a $l = 1$. Jaká je podmínka existence vázaného stavu v jámě?

5.11 Vlastní stavy atomu vodíku •

S využitím definičního vztahu pro radiální vlnové funkce atomu vodíku a sférické harmonické funkce nalezněte tvar vlnových funkcí vlastních stavů atomu vodíku $1s$, $2s$ a $2p_z$.

5.12 Charakteristiky vlastních stavů atomu vodíku •

(a)Vypočtěte nejpravděpodobnější vzdálenost od jádra r_0, střední vzdálenost od jádra $\langle r\rangle$ a střední kvadratickou vzdálenost od jádra $\sqrt{\langle r^2\rangle}$ pro následující stavy atomu vodíku

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\,\mathrm{e}^{-r/a}\,, \qquad \psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-r/2a}\,, \qquad \psi_{2p_z} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\,\frac{r}{2a}\,\mathrm{e}^{-r/2a}\cos\vartheta\,.$$

Zde a značí Bohrův poloměr.
(b)Dále najděte úhel Θ takový, že elektron v $2p_z$ stavu se nachází s pravděpodobností $1/2$ v oblasti vymezené $\min(\vartheta, \pi - \vartheta) \le \Theta$.

5.13 Dipólový moment spojený s přechody v atomu vodíku

Určete dipólový moment spojený s přechody mezi dvojicemi stavů $1s - 2s$ a $1s - 2p_z$ atomu vodíku, to jest maticové elementy $\langle 1s|\hat{\boldsymbol{r}}|2s\rangle$ a $\langle 1s|\hat{\boldsymbol{r}}|2p_z\rangle$. Příslušné vlnové funkce vyjádřené ve sférických souřadnicích jsou uvedeny v zadání úlohy 5.12.

5.14 Atom vodíku v hybnostní reprezentaci ✡

Vypočtěte vlnovou funkci stavů $1s$ a $2s$ atomu vodíku v hybnostní reprezentaci. Vlnové funkce těchto stavů v obvyklé souřadnicové reprezentaci jsou

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\,\mathrm{e}^{-r/a}\,, \qquad \psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-r/2a}\,,$$

kde a je Bohrův poloměr.

5.15 Dvouatomová molekula ✡

Molekula je tvořena dvěma atomy s hmotnostmi m a M spojených vazbou délky a a tuhosti k. Při vyšetřování rotačně-vibračního pohybu molekuly lze předpokládat, že elektronový oblak obklopující jádra molekuly se vždy nachází v základním stavu a jeho příspěvek do celkové energie je zahrnut v tuhosti vazby. Molekulu tedy budeme považovat za systém dvou jader řízený hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}_2^2}{2M} + \frac{1}{2}k(|\hat{\boldsymbol{r}}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_2| - a)^2\,.$$

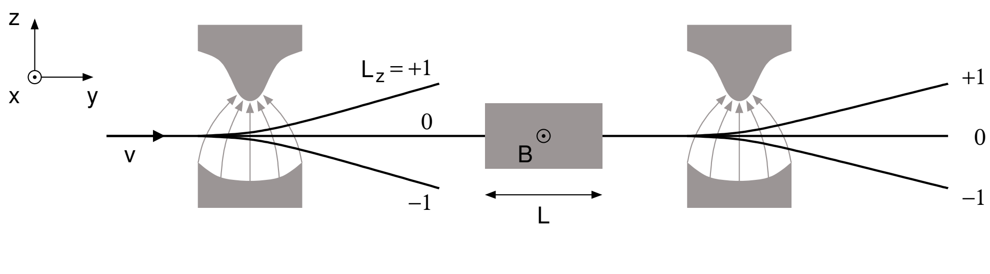
Najděte energiové hladiny tohoto systému. Oddělte přitom pohyb těžiště systému a relativní pohyb jader a předpokládejte, že molekula má zanedbatelnou celkovou hybnost. Při vyšetřování vibrací zanedbejte vliv rotačního pohybu molekuly. Při vyšetřování rotací zase považujte vzdálenost jader za pevnou a rovnou a.

5.16 Rotační pohyb molekuly metylchloridu ✡

Na molekulu metylchloridu CH_3Cl se lze dívat jako na symetrický vlček, který má vzhledem k ose vazby C–Cl moment setrvačnosti I_a a vzhledem ke dvěma na vazbu kolmým osám moment setrvačnosti I_b. Určete rotační hladiny energie této molekuly. Co byste usoudili z tohoto výsledku o rotačních stavech lineárních molekul typu CO_2?

5.17 Rozšířený Sternův-Gerlachův experiment •

Sternův-Gerlachův experiment spočívá v prostorovém oddělení částic s různými hodnotami projekce magnetického momentu do určité osy pomocí nehomogenního magnetického pole. Kombinací několika Sternových-Gerlachových separátorů a dalších magnetických polí lze realizovat mnoho zajímavých experimentů s kvantovým stavem částic. V této úloze předpovíte výsledky dvou takových experimentů. Uvažujme o uspořádání z následujícího obrázku. Atomy, jejichž magnetický moment je dán momentem hybnosti L s $l = 1$, vlétají rychlostí o velikosti v rovnoběžnou s osou y do prvního separátoru, kde se rozdělí na tři paprsky s $L_z = +1, 0, -1$. Prostřední paprsek s definovaným stavem momentu hybnosti je dále zpracováván.



(a) Mezi separátory je oblast homogenního magnetického pole o velikosti B orientovaného ve směru osy x. Atomy prolétávají tímto polem po dráze délky L. Interakce atomů s magnetickým polem je vystižena hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar}\mu_B B \hat{L}_x \ ,$$

ve kterém $\mu_B = e\hbar/2m_e$ je Bohrův magneton. Vypočtěte relativní intenzity paprsků za druhým separátorem za předpokladu, že jsou úměrné pravděpodobnosti nalezení atomu ve stavech s $L_z = +1, 0, -1$ při vstupu do druhého separátoru.

(b) Magnetické pole z bodu (a) je vypnuto, ale druhým separátorem otáčíme kolem osy y. Vypočtěte závislost relativních intenzit paprsků na úhlu otočení φ. Nejsnadnější cesta je využití explicitního vyjádření sférických harmonických funkcí

$$Y_{1,+1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\frac{x+iy}{r} \ , \qquad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r} \ , \qquad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\frac{x-iy}{r} \ .$$