Лекція № 9

ПОВНИЙ НАБІР ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН

(повтор важливого матеріалу з лекції № 8)

Стан заданий, якщо задана його ХФ. ХФ виміряти не можна. Фізичний зміст має тільки квадрат модуля ХФ. Ми говоримо, що стан заданий, якщо задана певна сукупність квантовомеханічних (фізичних) величин.

Сукупність квантовомеханічних величин, завдання яких повністю визначає стан квантової системи, називається **повним набором** квантовомеханічних величин.

У класичній механіці для системи з N ступенями волі потрібно задати $2N$ величин (координат і імпульсів). У квантовій механіці для системи з N ступенями волі потрібно задати N величин (наприклад, N координат або N імпульсів) або будь-які N одночасно вимірних величин. ХФ системи, що описує дане стан буде ВФ операторів величин, що входять у повний набір, що відповідають даним ВЗ.

«Чистий» стан задається ХФ, яка є ВФ для повного набору.

«Змішаний» стан – стан без певної ХФ. У ньому задані лише ймовірності реалізації того або іншого «чистого» стану. Це неповний опис.

КУТОВИЙ МОМЕНТ – МОМЕНТ ІМПУЛЬСУ (ANGULAR MOMENTUM)

Оператор кутового моменту. Комутаційні співвідношення. Власні функції та власні значення операторів $\hat{l}_z$ і $\hat{\vec{l}}^{\,2}$. «Сходові («лестничные») оператори».

Визначення оператора кутового моменту $\hat{\vec{L}}$ в декартових координатах:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}; \quad \hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}},$$

У тензорних позначеннях:

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k,$$

ε_{ijk} – символ Леві-Чівіта. Символ ε_{ijk} – це одиничний, повністю антисиметричний тензор 3-го рангу:

$$\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}; \, \varepsilon_{iik} = 0; \, \varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1; \, \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = -1.$$

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x,$$
$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

Доведемо комутаційні співвідношення:

$$\left[\hat{L}_i, \hat{x}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k; \quad \left[\hat{L}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k; \quad \left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k; \quad \left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i\right] = 0.$$

Безрозмірний оператор кутового моменту $\hat{\vec{l}}$ й комутаційні співвідношення для нього

$$\hat{\vec{l}} = \frac{1}{\hbar}\hat{\vec{L}}; \quad \left[\hat{l}_i, \hat{l}_j\right] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k; \quad \left[\hat{\vec{l}}^{\,2}, \hat{l}_i\right] = 0.$$

Оператори $\hat{l}_z$ й $\hat{\vec{l}}^{\,2}$ у сферичних координатах:

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}; \quad \hat{\vec{l}}^{\,2} = -\Delta_{\theta\varphi} = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

ВФ та ВЗ оператора l_z знаходимо, вирішуючи рівняння

$$-i\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = l_z\Phi(\varphi)$$

з урахуванням вимоги періодичності ВФ

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi).$$

Одержуємо нормовані на одиницю ВФ і ВЗ

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad l_z = m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

m – це магнітне квантове число. Залежність від кута θ тут довільна.

Використовуємо для знаходження ВЗ оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2}$ «сходові оператори» $\hat{l}_\pm$:

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y.$$

Це два неермітових, ермітово спряжених оператора. Сходові оператори задовольняють комутаційним співвідношенням (перевірити самостійно)

$$[l_z, l_\pm] = \pm l_\pm; \quad [l_+, l_-] = 2l_z.$$

Покажемо, що $\hat{l}_\pm\psi_m$, де ψ_m – власні функції оператора z-проекції кутового моменту $\left(\hat{l}_z\psi_m = m\psi_m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, ...\right)$, також є власними функціями оператора $\hat{l}_z$ із власними значеннями $m+1$ або $m-1$ для $\hat{l}_+$ й $\hat{l}_-$ відповідно. Скористаємося для цього комутаційними співвідношеннями

$$\left[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm\right] = \pm\hat{l}_\pm;$$

Побудуємо функцію $\hat{l}_\pm\psi_m$, де $\hat{l}_z\psi_m = m\psi_m$ й подіємо на неї оператором $\hat{l}_z$:

$$\hat{l}_z(\hat{l}_\pm\psi_m) = (\hat{l}_z\hat{l}_\pm)\psi_m = \hat{l}_\pm(\hat{l}_z \pm 1)\psi_m = \hat{l}_\pm(m\pm 1)\psi_m = (m\pm 1)\hat{l}_\pm\psi_m \sim \psi_{m\pm 1}$$

Знайдемо власні значення оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2}$. Використовуємо комутаційні співвідношення

$$\left[\hat{l}_+, \hat{l}_-\right] = 2\hat{l}_z.$$

Спочатку покажемо, що якщо фіксоване ВЗ оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2}$, то ВЗ оператора $\hat{l}_z$ не можуть перевищити максимального значення.

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2; \quad \hat{\vec{l}}^{\,2} - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2;$$

У оператора $\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$, який є сума квадратів двох ермітових операторів ВЗ$\geq$ 0, отже, у оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2} - \hat{l}_z^2$ теж ВЗ$\geq$ 0. Якщо задати ВЗ $\hat{\vec{l}}^{\,2}$, як λ_{l^2}, то ВЗ $\lambda_{l_z} = m$ оператора $\hat{l}_z$ при зафіксованому значенні λ_{l^2} не можуть перевищити певного максимального значення, для якого їхня різниця $\lambda_{l^2} - \lambda_{l_z}^2 \geq 0$. Позначимо $\lambda_{l\max} = m_{\max} = l$. Це означає, що далі підвищувати ВЗ оператор $\hat{l}_+$ не може, тому $\hat{l}_+\psi_l = 0$.

Перетворимо оператор $\hat{\vec{l}}^{\,2}$, виразивши його через сходові оператори

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} = \frac{1}{2}\left[\left(\hat{l}_x + i\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x - i\hat{l}_y\right) + \left(\hat{l}_x - i\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x + i\hat{l}_y\right)\right] + \hat{l}_z^2 =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+\right) + \hat{l}_z^2 = \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_z + +\hat{l}_z^2;$$

Дія оператора ВФ оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2}$ на ВФ $\hat{l}_z$ із максимальним ВЗ λ_{l^2} зводиться до множення ВФ на число

$$\hat{\vec{l}}^{\,2}\psi_l = l(l+1)\psi_l.$$

Отже, ψ_l – це ВФ оператора $\hat{\vec{l}}^{\,2}$ зі ВЗ $\lambda_{l^2} = l(l+1)$.

Усі ВФ $\hat{\vec{l}}^{\,2}$ – це певним чином нормовані сферичні функції. Спільні власні функції та власні значення операторяв $\hat{l}_z$ та $\hat{\vec{l}}^{\,2}$:

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad l = 0,1,2,3,...;$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = mY_{lm}(\theta,\varphi), \quad m = 0,\pm1,\pm2,...,\pm l.$$

l – орбітальне квантове число, m – магнітне квантове число.

сферичні функції: $Y_{lm}(\theta,\varphi) = C_{lm} P_l^m(\theta) e^{im\varphi}$;

$$P_l^m(\cos\theta) = \sin^m\theta \frac{d^m}{(d\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta); \quad P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{(d\cos\theta)^l}\left(\cos^2\theta - 1\right)^l,$$

де $P_l^m(\theta)$ – приєднані поліноми Лежандра, $P_l(\cos\theta)$ – поліноми Лежандра, C_{lm} – нормувальна константа

$$C_{lm} = (-1)^k \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}, \quad k = m, m \geq 0, k = 0, m < 0.$$

Покажемо, що **оператор кутового моменту** пов’язаний з **оператором нескінченно малого повороту** на кут $\delta\varphi << 1$. Поворот у площині xOy задається так

$$x' = x\cos\delta\varphi + y\sin\delta\varphi \approx x + y\delta\varphi;$$

$$y' = -x\sin\delta\varphi + y\cos\delta\varphi \approx -x\delta\varphi + y.$$

Обернене перетворення

$$x \approx x' - y'\delta\varphi;$$

$$y \approx x'\delta\varphi + y'.$$

Розкладання в ряд Тейлора функції трьох просторових змінних

$$\psi(x,y,z) = \psi(x' - y'\delta\varphi, y' + x'\delta\varphi, z) \approx$$

$$\approx \psi(x',y',z') - \delta\varphi y' \frac{\partial\psi(x',y',z')}{\partial x'} + \delta\varphi x' \frac{\partial\psi(x',y',z')}{\partial y'} =$$

$$\left(1 + \delta\varphi\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)\right)\psi(x',y',z'); \hat{\mathrm{W}}_z = 1 + \delta\varphi\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)$$

$$\hat{\mathrm{W}}_z = 1 + \delta\varphi\left(x' \frac{\partial}{\partial y'} - y' \frac{\partial}{\partial x'} \right) = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\varphi \hat{L}_z;$$

$$\hat{L}_z = x'\hat{p}_{y'} - y'\hat{p}_x.$$

Заодно скажемо про те, що оператор імпульсу – це оператор нескінченно малого зсуву

$$\hat{T}_{\delta x} = e^{\delta x \frac{d}{dx}} \approx 1 + \delta x \frac{d}{dx} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta x \hat{p}_x;$$

$$\hat{T}_{\delta \vec{r}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\hat{\vec{p}}$$