

Rozdział 13

Orbitalny momentu pędu

13.1 Ogólne własności orbitalnego momentu pędu

13.1.1 Przypomnienie wyników

W poprzednim rozdziale wprowadziliśmy orbitalny moment pędu cząstki poprzez odwołanie się do fizyki klasycznej i do zasady odpowiedniości. W *Uzupełnieniach* omówiliśmy natomiast jego związek z obrotami. Zbierzemy teraz uzyskane uprzednio rezultaty.

Operator orbitalnego momentu pędu jest operatorem wektorowym o trzech składowych

$$\vec{L} = (L_1, L_2, L_3) \quad \text{gdzie} \quad L_k = \varepsilon_{kmn} x_m p_n, \quad (13.1)$$

utworzonych za pomocą operatorów położenia i pędu. Składowe L_k spełniają kanoniczną relację komutacyjną

$$[L_m, L_n] = i\hbar \varepsilon_{mnp} L_p, \quad (13.2)$$

Relacja ta, z jednej strony, wynika z kanonicznej relacji komutacyjnej dla położenia i pędu $[x_m, p_n] = i\hbar \delta_{mn}$, a z drugiej strony, jest konsekwencją własności obrotów.

Wszystkie własności operatora \vec{J} omówione w poprzednim rozdziale zostały wyprowadzone w oparciu o identyczną relację komutacyjną. Dlatego też wszystkie wyniki poprzedniego rozdziału możemy prawie automatycznie zastosować do orbitalnego momentu pędu. Wystarczy tylko dopasować notację. Definiujemy więc operator całkowitego orbitalnego momentu pędu oraz operatory podnoszący i obniżający

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, \quad L_{\pm} = L_1 \pm iL_2. \quad (13.3)$$

Wszelkie relacje komutacyjne przenosimy bez trudu, zmieniając w odpowiedni sposób notację. Dowody przebiegają zupełnie analogicznie. A zatem mamy teraz

$$[\vec{L}^2, L_m] = 0, \quad [L_3, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm}, \quad (13.4a)$$

$$[L_{\pm}, L_{\mp}] = 2\hbar L_3, \quad [\vec{L}^2, L_{\pm}] = 0. \quad (13.4b)$$

Obowiązują też podobne relacje operatorowe

$$\vec{L}^2 = \frac{1}{2} (L_{\pm} L_{\mp} + L_{\mp} L_{\pm}) + L_3^2, \quad (13.5a)$$

$$L_{\mp} L_{\pm} = \vec{L}^2 - L_3(L_3 \pm \hbar), \quad (13.5b)$$

które można sprawdzić takimi samymi rachunkami jak w poprzednim rozdziale.

13.2 Wartości własne i wektory własne

Wyprowadzenie wartości i stanów własnych operatora momentu pędu \vec{J} bazowało wyłącznie na regułach komutacyjnych. Wobec tego, że tutaj mamy te same reguły, więc znów przenosimy wyniki zmieniając jedynie w odpowiedni sposób notację.

Niech $|l, m\rangle$ oznacza unormowany stan własny operatorów \vec{L}^2 oraz L_3 , wówczas

$$\vec{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad (13.6a)$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad (13.6b)$$

Układ fizyczny po obrocie o kąt 2π musi wracać do stanu wyjściowego. Stąd też wynika, że liczby kwantowe l oraz m są liczbami całkowitymi. Wniosek ten, nie mający na razie żadnego uzasadnienia, wyprowadzimy w dalszym ciągu wykładu.

Konstrukcja stanów własnych przebiega także analogicznie. Podprzestrzeń $\mathcal{E}(\alpha, l)$ zawiera $(2l+1)$ wektorów odpowiadających różnym dopuszczalnym wartościom liczby m . Liczba α numeruje stany własne, jakiejś innej obserwacji, jeśli dwa operatory \vec{L}^2 oraz L_3 nie wystarczają do utworzenia zupełnego układu komutujących obserwacji. Stany $|\alpha, l, m\rangle$ tworzą zbiór zupełny i ortonormalny

$$\langle \alpha, l, m | \beta, l', m' \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (13.7)$$

Co więcej, omawiana podprzestrzeń jest inwariantna względem operatorów \vec{L} , a także nieredukowalna, tzn. nie ma mniejszej podprzestrzeni zawartej w $\mathcal{E}(\alpha, l)$, która byłaby inwariantna względem operatorów orbitalnego momentu pędu.

13.2.1 Elementy macierzowe

Zebrane tu rezultaty łatwo wynikają z poprzedniego rozdziału.

$$\langle l, m | \vec{L}^2 | l', m' \rangle = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (13.8a)$$

$$\langle l, m | L_3 | l', m' \rangle = \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (13.8b)$$

$$\langle l, m | L_{\pm} | l', m' \rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{ll'} \delta_{m, m' \pm 1}. \quad (13.8c)$$

Z definicji L_{\pm} w (13.3) oraz z (13.8c) wynikają dwa dalsze elementy macierzowe

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_1 | l', m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \delta_{ll'} [& \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} \\ & + \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1}], \end{aligned} \quad (13.9a)$$

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_2 | l', m' \rangle = \frac{\hbar}{2i} \delta_{ll'} [& \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} \\ & - \sqrt{l(l+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1}], \end{aligned} \quad (13.9b)$$

które wynikają z dodania i odjęcia stronami formuł (13.8c) dla operatorów L_+ oraz L_- .

13.3 Orbitalny moment pędu w reprezentacji położeniowej

Zarówno w poprzednim rozdziale, jak i w *Uzupełnieniach* znaleźliśmy jawną postać składowych operatora \vec{L} w reprezentacji położeniowej:

$$L_1 = L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (13.10a)$$

$$L_2 = L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (13.10b)$$

$$L_3 = L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (13.10c)$$

Formuły te zapisane są we współrzędnych kartezjańskich, które jak się okazuje w praktyce, nie są zbyt wygodne. Jak wspominaliśmy, dyskutując zasadę odpowiedniości, operatory powinny być konstruowane we współrzędnych kartezjańskich, a dopiero potem można przejść do innych współrzędnych. Tak też teraz zrobimy, transformując składowe (13.10) orbitalnego momentu pędu do współrzędnych sferycznych.

13.3.1 Współrzędne kartezjańskie i sferyczne

Przypominamy związek między współrzędnymi kartezjańskimi i sferycznymi

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (13.11)$$

oraz relacje odwrotne

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad \cos \theta = \frac{z}{r} = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}. \quad (13.12)$$

Zamiana zmiennych

Przejście we wzorach (13.10) od współrzędnych kartezjańskich do sferycznych jest raczej ćwiczeniem w różniczkowaniu. Zbierzemy ważne rezultaty pośrednie, podając ich wyprowadzenia jedynie w skrócie.

Macierz zamiany współrzędnych jest następująca

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi, & \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \theta, \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, & \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (13.13)$$

Obliczenia dziewięciu pochodnych tworzących powyższą macierz są bardzo proste. Naszkicujemy jednak sposób obliczania niektórych z nich. I tak, z(13.12) otrzymujemy

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} 2x = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi. \quad (13.14)$$

Analogicznie obliczamy pozostałe dwa elementy pierwszego wiersza macierzy (13.13). Różniczkując względem x drugą z relacji (13.12) mamy

$$\begin{aligned} -\sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} = -\frac{1}{2} z (x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} 2x \\ &= -\frac{zx}{r^3} = -\frac{1}{r} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi, \end{aligned} \quad (13.15)$$

i stąd, wobec (13.11), wynika pierwszy wyraz w drugim wierszu macierzy (13.13). I w końcu trzecia relacja w (13.12) pozwala otrzymać

$$\frac{1}{\cos^2 \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{y}{x} = -\frac{y}{x^2} = -\frac{\sin \varphi \sin \theta}{r \cos^2 \varphi \sin^2 \theta}, \quad (13.16)$$

skąd po uproszczeniu dostajemy pierwszy człon trzeciego wiersza macierzy (13.13).

Otrzymana tablica pochodnych pozwala wyrazić pochodne względem współrzędnych kartezjańskich przez pochodne we współrzędnych sferycznych. I tak, w myśl zasad różniczkowania funkcji złożonych otrzymujemy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.17)$$

Korzystając z pochodnych zebranych w tablicy (13.13) dostajemy

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.18)$$

W ten sam sposób obliczamy pozostałe operatory różniczkowania względem zmiennych kartezjańskich przez odpowiednie operatory we współrzędnych sferycznych. Wyniki są następujące

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (13.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (13.20)$$

13.3.2 Operatory L_k we współrzędnych sferycznych

Obliczenia składowych L_k operatora orbitalnego momentu pędu we współrzędnych sferycznych polegają na podstawieniu wzorów (13.17,13.19,13.20) do formuł (13.10). Wygląda to skomplikowanie, jednak wiele członów znosi się parami. Wykorzystanie elementarnych relacji trygonometrycznych także daje znaczne uproszczenia. Nie ma tu więc żadnych trudności koncepcyjnych, a jedynie mamy do czynienia z dość żmudnymi rachunkami. Pokażemy tutaj jak obliczać jedną ze składowych operatora momentu pędu. Pozostałe oblicza się bardzo podobnie i dlatego podamy tylko gotowe rezultaty.

Na podstawie wzoru (13.10), do którego podstawiamy odpowiednie formuły (13.11) oraz (13.20) i (13.19), dla pierwszej składowej operatora momentu pędu mamy

$$\begin{aligned} L_1 &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= -i\hbar \left[r \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right. \\ &\quad \left. - r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \end{aligned} \quad (13.21)$$

Wyrazy zawierające $\partial/\partial r$ skracają się,

$$\begin{aligned} L_1 &= -i\hbar \left[-\sin^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ &= i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \end{aligned} \quad (13.22)$$

co kończy obliczenia. W analogiczny sposób obliczamy dwie pozostałe składowe operatora \vec{L} we współrzędnych sferycznych. Rezultaty wyrażają się wzorami

$$L_1 = L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.23a)$$

$$L_2 = L_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.23b)$$

$$L_3 = L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (13.23c)$$

Ponieważ składowe podnosząca i obniżająca wyrażają się jako kombinacje L_1 oraz L_2 , więc z powyższych wzorów łatwo uzyskujemy

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (13.24)$$

Warto przypomnieć, że sprzężenie operatora różniczkowania zmienia jego znak, to znaczy

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \text{oraz} \quad \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (13.25)$$

dzięki czemu, z relacji (13.24) widzimy, że operatory L_+ oraz L_- są swymi sprzężeniami, tj. $L_+^\dagger = L_-$, i na odwrót.

13.3.3 Operator \vec{L}^2 we współrzędnych sferycznych

W tym wypadku niezbędne obliczenia są nadal koncepcyjnie proste, lecz jeszcze bardziej skomplikowane. Wynika to stąd, że zgodnie z (13.3) musimy obliczyć kwadraty operatorów przedstawionych we wzorach (13.23). Prześledzimy obliczenia operatora L_1^2 . Z (13.23a) mamy

$$\begin{aligned} L_1^2 &= -\hbar^2 \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \end{aligned} \quad (13.26)$$

Pozostaje wykonać niezbędne różniczkowania. Otrzymujemy

$$\begin{aligned} L_1^2 &= -\hbar^2 \left[\sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + 2 \sin \varphi \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi} \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg}^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg}^2 \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (13.27)$$

Niestety powyższego wzoru nie da się uprościć. Podobnie nieprzyjemny wynik otrzymamy obliczając kwadrat L_2 . W tym wypadku mamy

$$\begin{aligned} L_2^2 &= -\hbar^2 \left[\cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - 2 \sin \varphi \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi} \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg}^2 \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (13.28)$$

Choć oba uzyskane wyrażenia są mocno złożone, jednak wiele członów różni się tylko znakiem. Pozostałe ładnie się grupują. Biorąc pod uwagę jedynekę trygonometryczną, otrzymujemy sumę

$$L_1^2 + L_2^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (13.29)$$

Na szczęście, z (13.23c) w trywialny sposób mamy

$$L_3^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (13.30)$$

Wobec tego operator kwadratu orbitalnego momentu pędu we współrzędnych sferycznych wyraża się wzorem

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + (1 + \operatorname{ctg}^2 \theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (13.31)$$

Pozostaje doprowadzić powyższy wynik do wygodniejszej postaci. Przede wszystkim z elementarnej trygonometrii

$$1 + \operatorname{ctg}^2 \theta = \frac{1}{\sin^2 \theta} \quad (13.32)$$

Co więcej, nietrudno jest otrzymać następującą relację różniczkową

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{1}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (13.33)$$

Wykorzystując powyższe relacje pomocnicze w (13.31) otrzymujemy końcowe wyrażenie dla kwadratu orbitalnego momentu pędu.

Podsumowanie

Formuły dla operatorów \vec{L}^2 oraz L_3 w reprezentacji położeniowej wyrażone we współrzędnych sferycznych są podstawowymi wynikami tego paragrafu. Zbieramy je tu razem

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (13.34a)$$

$$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (13.34b)$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (13.34c)$$

Wzory te okażą się szczególnie wygodne w dalszych zastosowaniach. Zwróćmy także uwagę, że operator orbitalnego momentu pędu zależy jedynie od zmiennych kątowych, co wskazuje na jego ścisłe powiązanie z obrotami.

13.3.4 Wartości własne i funkcje własne \vec{L}^2 i L_3

Wnioski z ogólnego formalizmu

Operatory \vec{L}^2 oraz L_3 spełniają kanoniczne relacje komutacyjne (13.2), a także zagadnienia własne (13.6). Na podstawie ogólnej teorii z poprzedniego rozdziału wiemy, że liczby l są całkowite lub połówkowe, natomiast m zmienia się od $-l$ do $+l$ skokowo co jeden. Stwierdziliśmy, że naturalne jest pracować w reprezentacji położeniowej, a na dodatek we współrzędnych sferycznych.

Celem naszym jest więc teraz znalezienie funkcji własnych (w tymże układzie współrzędnych), a także przedyskutowanie wartości własnych.

Operator \vec{L} zależy jedynie od zmiennych kątowych, dlatego w reprezentacji położeniowej wprowadzamy bazę za pomocą stanów kątowych $|\theta\varphi\rangle = |\Omega\rangle$ (gdzie Ω to kąt bryłowy), którym na podstawie ogólnych rozważań o reprezentacjach w przestrzeni Hilberta, przypisujemy następujące własności.

(i) Ortonormalność (zmienne ciągłe)

$$\langle\theta\varphi|\theta'\varphi'\rangle = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (13.35)$$

(ii) Zupełność

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\theta\varphi\rangle\langle\theta\varphi| = \hat{1}. \quad (13.36)$$

Zauważmy że całkując po kącie bryłowym mamy: $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, dlatego też w powyższych wzorach pojawił się $\sin\theta$.

Odwołując się do ogólnych reguł zapisu operatorów w wybranej reprezentacji, przepisujemy równania własne (13.6) w reprezentacji położeniowej $|\theta\varphi\rangle$

$$\langle\theta\varphi|\vec{L}^2|lm\rangle = \vec{L}^2\langle\theta\varphi|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)\langle\theta\varphi|lm\rangle, \quad (13.37a)$$

$$\langle\theta\varphi|L_3|lm\rangle = L_3\langle\theta\varphi|lm\rangle = \hbar m\langle\theta\varphi|lm\rangle, \quad (13.37b)$$

Lewe strony są po prostu elementami macierzowymi operatorów \vec{L}^2 i L_3 w reprezentacji położeniowej. W środkowych członach rozumiemy, że odpowiednie operatory są wyrażone w reprezentacji $|\theta\varphi\rangle$, czego już nie zaznaczamy górnym indeksem. Oczywiście więc są to operatory w postaci (13.34). Natomiast po prawej mamy wyrażenia wynikłe z równań własnych (13.6).

Wykorzystując więc postać operatorów orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej możemy napisać równania własne dla funkcji falowych $\langle\theta\varphi|lm\rangle$, które możemy oczywiście nazwać funkcjami własnymi (w reprezentacji położeniowej) orbitalnego momentu pędu, należącymi do wartości własnych l i m . Posługujemy się tu terminologią ustaloną przy dyskusji reprezentacji w przestrzeni Hilberta. A zatem z (13.34), (13.37) otrzymujemy parę równań różniczkowych

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \langle\theta\varphi|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) \langle\theta\varphi|lm\rangle \quad (13.38a)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \langle\theta\varphi|lm\rangle = \hbar m \langle\theta\varphi|lm\rangle. \quad (13.38b)$$

Równania te pozwalają na wyciągnięcie szeregu ważnych wniosków. Przede wszystkim zauważmy, że z równania (13.38b) wynika faktoryzacja funkcji własnych

$$\langle\theta\varphi|lm\rangle = g(\varphi) F_{lm}(\theta). \quad (13.39)$$

Po wstawieniu tak sfaktoryzowanej funkcji do równania (13.38b), stwierdzamy, że funkcja $F_{lm}(\theta)$ skraca się. W ten sposób otrzymujemy równanie zawierające tylko funkcję $g(\varphi)$. Ma ono postać

$$-i \frac{\partial}{\partial\varphi} g(\varphi) = m g(\varphi). \quad (13.40)$$

Scałkowanie tego równania jest trywialne. Stałą całkowania przyjmujemy za dowolną i włączoną do funkcji F_{lm} . Wobec tego

$$g(\varphi) = e^{im\varphi}. \quad (13.41)$$

Z drugiej strony, podstawiając sfaktoryzowaną postać funkcji własnej do wzoru (13.38a) widzimy, że dwukrotne różniczkowanie po kącie φ wyprodukuje czynnik $-m^2$ i poza tym nie zmieni funkcji $g(\varphi)$. Wobec tego, w równaniu tym, na skutek faktoryzacji (13.39) funkcja $g(\varphi)$ skróci się po obu stronach. W rezultacie uzyskamy równanie wyłącznie dla funkcji $F_{lm}(\theta)$.

Otrzymana postać funkcji $g(\varphi)$ ma bardzo istotne konsekwencje. Stan układu fizycznego nie może się zmienić, jeśli dokonamy obrotu układu fizycznego o kąt 2π wokół osi z . Oznacza to, że musi być spełniony warunek

$$g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi) = e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} e^{2im\pi} = e^{im\varphi}. \quad (13.42)$$

A zatem musi być $e^{2im\pi} = 1$. Stąd zaś wynika, że liczba kwantowa m może przyjmować jedynie wartości całkowite. Możemy powiedzieć, że żądanie, aby m było liczbą całkowitą wynika z żądania niezmienniczości stanu układu fizycznego przy obrotach o kąt 2π . Z faktu, że m jest liczbą całkowitą, automatycznie wynika, że liczba kwantowa l też musi być liczbą całkowitą, bowiem m zmienia się od $-l$ do $+l$ co jeden.

Podsumujmy wnioski wynikające z ogólnych rozważań, które prowadziliśmy w reprezentacji położeniowej.

- Liczby kwantowe charakteryzujące wartości własne orbitalnego momentu pędu są liczbami całkowitymi.

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (13.43a)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (13.43b)$$

- Funkcje własne orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej (we współrzędnych sferycznych) faktoryzują się

$$\langle \theta \varphi | l m \rangle = e^{im\varphi} F_{lm}(\theta). \quad (13.44)$$

- Podstawienie faktoryzacji (13.44) do wzoru (13.38a) daje równanie, które spełniają funkcje $F_{lm}(\theta)$

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] F_{lm}(\theta) = l(l+1) F_{lm}(\theta). \quad (13.45)$$

gdzie l i m są całkowite (jak wyżej). Wyznaczenie funkcji $F_{lm}(\theta)$ będzie celem naszych dalszych rozważań.

13.4 Harmoniki sferyczne

13.4.1 Wprowadzenie

Funkcje własne (13.44) orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej

$$Y_{lm}(\theta, \varphi), = \langle \theta \varphi | l m \rangle = e^{im\varphi} F_{lm}(\theta), \quad (13.46)$$

nazwiemy harmonikami sferycznymi. Jako funkcje własne obserwabli, harmoniki sferyczne muszą spełniać typowe warunki nakładane na funkcje falowe.

- Harmoniki sferyczne powinny tworzyć zbiór funkcji ortonormalnych, tj muszą spełniać

$$\begin{aligned} \delta_{ll'} \delta_{mm'} &= \langle l m | l' m' \rangle = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \langle l m | \theta \varphi \rangle \langle \theta \varphi | l' m' \rangle \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (13.47)$$

Pierwsza równość jest wyrazem ortonormalności stanów własnych orbitalnego momentu pędu. Druga wynika z zastosowania relacji zupełności (13.36) do równości poprzedniej. Trzeci krok to po prostu zastosowanie definicji (13.46).

- Stany własne orbitalnego momentu pędu muszą być bazą zupełną. Wobec tego muszą spełniać warunek

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |l m\rangle \langle l m| = \hat{1}. \quad (13.48)$$

Z ortonormalności bazy $|\theta \varphi\rangle$ (por. (13.35)) oraz z powyższego, wynika ciąg równości

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') &= \langle \theta \varphi | \theta' \varphi' \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \langle \theta \varphi | l m \rangle \langle l m | \theta' \varphi' \rangle \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi'), \end{aligned} \quad (13.49)$$

co stanowi relację zupełności dla harmonik sferycznych.

13.4.2 Konstrukcja harmonik sferycznych

Uwagi wstępne

Konstrukcję harmonik sferycznych można prowadzić na różne sposoby. Przedstawimy tu zarys jednego z nich, a szczegóły omówimy w *Dodatkach matematycznych*. Zauważmy najpierw, że z ogólnej teorii wynika, iż stan $|l, l\rangle$ odpowiadający maksymalnej wartości m (dla danego l) musi spełniać relację

$$L_+ |l, l\rangle = 0. \quad (13.50)$$

Jeśli teraz bra $\langle \theta \varphi |$ podziela z lewej na powyższą równość, to automatycznie przejdziemy do reprezentacji położeniowej. Biorąc operator L_+ według (13.34c) otrzymamy równanie

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{ll}(\theta, \varphi) = 0. \quad (13.51)$$

Z definicji (13.46) wynika $Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} F_{ll}(\theta)$, co podstawiamy do naszego równania. W wyniku elementarnych manipulacji otrzymujemy

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta F_{ll}(\theta) = 0, \quad (13.52)$$

gdzie już możemy używać zwykłych pochodnych, bo $F_{ll}(\theta)$ jest funkcją jednej zmiennej. W tym momencie możemy naszkicować procedurę konstrukcji harmonik sferycznych.

- Rozwiązując równanie (13.52) zbudujemy funkcję $e^{il\varphi} F_{ll}(\theta)$, która trzeba unormować. W ten sposób znajdziemy harmonikę $Y_{ll}(\theta, \varphi)$.
- Dalej, pracując cały czas w reprezentacji położeniowej, będziemy działać na $Y_{ll}(\theta, \varphi)$ operatorem obniżającym L_- . W ten sposób wygenerujemy harmoniki sferyczne o coraz to większym numerze m . Na przykład, w pierwszym takim kroku mamy

$$\begin{aligned} Y_{l, l-1}(\theta, \varphi) &= \langle \theta \varphi | l, l-1 \rangle \\ &\propto L_- \langle \theta \varphi | l, l \rangle = L_- Y_{ll}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (13.53)$$

Przy przejściu do drugiej linii wpisaliśmy znak proporcjonalności, ponieważ operator L_+ produkuje pewien dodatkowy czynnik, który trzeba wyeliminować prowadząc normowanie harmonik sferycznych.

- Kontynuując stosowanie L_- będziemy budować harmoniki sferyczne o coraz mniejszych liczbach m , aż wreszcie dojdziemy do $m_{\min} = -l$.

Obliczenia $F_{ll}(\theta)$

Aby efektywnie skorzystać z takiej procedury musimy najpierw wyznaczyć funkcję $F_{ll}(\theta)$ z równania (13.52). Równanie to przepisujemy w postaci

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{d\theta} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} F_{ll}(\theta). \quad (13.54)$$

Jest to równanie o rozdzielających się zmiennych

$$\frac{d F_{ll}(\theta)}{F_{ll}(\theta)} = l \frac{d \sin \theta}{\sin \theta}, \quad (13.55)$$

które prosto scałkować. Otrzymujemy

$$F_{ll}(\theta) = C_l (\sin \theta)^l, \quad (13.56)$$

gdzie C_l jest stałą całkowania, którą trzeba określić na drodze normowania. Wobec tego, pierwsza skonstruowana harmonika sferyczna jest postaci

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = C_l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l, \quad (13.57)$$

co trzeba unormować.

Normowanie

Przystępujemy więc do normowania. Na podstawie (13.47) musimy mieć

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |C_l|^2 e^{-il\varphi} (\sin \theta)^l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l \\ &= 2\pi |C_l|^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta (\sin \theta)^{2l}. \end{aligned} \quad (13.58)$$

Zamieniamy zmienną całkowania $x = \cos \theta$. Otrzymana funkcja podcałkowa jest parzysta i wobec tego mamy

$$1 = 4\pi |C_l|^2 \int_0^1 dx (1 - x^2)^l = 4\pi |C_l|^2 I_1(l). \quad (13.59)$$

Całka $I_1(l)$ jest obliczona w *Dodatkach matematycznych*. Rezultat jest następujący

$$I_1(l) = \int_0^1 dx (1 - x^2)^l = \frac{[2^l l!]^2}{(2l+1)!}. \quad (13.60)$$

Podstawiając tę całkę do wzoru (13.59) łatwo otrzymujemy

$$|C_l| = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \frac{1}{2^l l!}. \quad (13.61)$$

Harmonika $Y_{ll}(\theta, \varphi)$

Do określenia pozostaje jedynie faza stałej normalizacyjnej. Przyjmujemy tutaj fazę równą $(-1)^l$, a przyczyny tego wyboru omówimy w *Dodatkach matematycznych*. Wstawiając obliczoną stałą do wzoru (13.57) otrzymujemy ostateczną postać skonstruowanej harmoniki sferycznej

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} (\sin \theta)^l. \quad (13.62)$$

Stosując teraz operator obniżający L_- możemy działać nim na uzyskaną harmonikę. W ten sposób otrzymamy $Y_{l,l-1}(\theta, \varphi)$. Procedurę tę omawiamy szczegółowo w *Dodatkach matematycznych*.

13.4.3 Harmoniki sferyczne – zebranie informacji

Nie możemy tu prowadzić wykładu dotyczącego teorii funkcji specjalnych. Zbierzemy tu jedynie rezultaty wyprowadzone w *Dodatkach matematycznych* i przedstawimy wzory pożyteczne w dalszym ciągu wykładu.

Harmoniki sferyczne – funkcje własne orbitalnego momentu pędu w reprezentacji położeniowej – można przedstawić na dwa równoważne sposoby

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{(\sin \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \\ &= \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}. \end{aligned} \quad (13.63)$$

Z powyższych określeń harmonik sferycznych wynika relacja sprzężenia zespolonego

$$[Y_{lm}(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_{l,-m}(\theta, \varphi) \quad (13.64)$$

Harmoniki sferyczne można zapisać za pomocą stowarzyszonych funkcji Legendre’a (patrz *Dodatek matematyczny D*) w postaci

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta), \quad (m \geq 0), \quad (13.65a)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (m < 0). \quad (13.65b)$$

W *Dodatkach matematycznych D* sprawdzamy, poprzez bezpośrednie obliczenia, że tak zadane harmoniki sferyczne istotnie są rozwiązaniami zagadnień własnych (13.37).

Przy odbiciu przestrzennym gdy kąty sferyczne ulegają następującym zamianom

$$\theta \xrightarrow{\text{odbicie}} \pi - \theta \quad \varphi \xrightarrow{\text{odbicie}} \varphi + \pi \quad (13.66)$$

harmoniki sferyczne mają własność

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \xrightarrow{\text{odbicie}} Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (13.67)$$

co, jak mówimy, określa parzystość harmonik sferycznych.

Posługując się wzorem (13.63) możemy bez trudu wyliczyć i wypisać kilka pierwszych harmonik sferycznych. Dla $l = 0$ jedynie możliwą wartością m jest zero. Zatem

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 0 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}. \quad (13.68)$$

Dla przypadku $l = 1$ mamy trzy możliwe wartości $m = -1, 0, 1$. A więc mamy też trzy harmoniki sferyczne

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 1 \pm 1 \rangle = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta, \quad (13.69a)$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 1 0 \rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta. \quad (13.69b)$$

Dla $l = 2$ mamy pięć możliwych $m = -2, -1, 0, 1, 2$. Odpowiednie pięć harmonik sferycznych ma postać

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 \pm 2 \rangle = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta, \quad (13.70a)$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 \pm 1 \rangle = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta, \quad (13.70b)$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | 2 0 \rangle = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1). \quad (13.70c)$$

Często przydatna jest relacja rekurencyjna dla harmonik sferycznych

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \cos \theta = Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} + Y_{l-1,m}(\theta, \varphi) \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}} \quad (13.71)$$

Harmoniki sferyczne stanowią zupełny zbiór funkcji ortonormalnych, tzn. zachodzi relacja ortonormalności (13.47), a także relacja zupełności (13.49). Tak więc harmoniki sferyczne stanowią bazę w przestrzeni funkcji zmiennych kątowych (θ, φ) . Oznacza to, że dowolną funkcję $f(\theta, \varphi)$ można rozłożyć w szereg

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (13.72)$$

przy czym współczynniki rozwinięcia dane są jako całki w reprezentacji położeniowej (we współrzędnych sferycznych)

$$C_{lm} = \langle l m | f \rangle = \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi). \quad (13.73)$$

Na koniec zauważmy, że harmoniki sferyczne, a ściślej ich część zależna od kąta θ , są powiązane ze stowarzyszonymi wielomianami Legendre'a. Związek ten omawiamy w *Dodatkach matematycznych*.

* * * * *