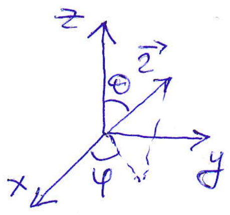
Лекция 10

Угловые функции

сферические координаты

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



$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle\theta,\varphi|lm\rangle$$

сферические функции / шаровые гармоники.

$$\hat{l}^2|lm\rangle = l(l+1)|lm\rangle$$
$$\hat{l}_z|lm\rangle = m|lm\rangle$$
$$-l \le m \le l$$

Операторы момента в сфер. координатах

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad \hat{l}^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\hat{l}_\pm = e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

Условие полноты $\int d\Omega\,|\theta,\varphi\rangle\langle\theta,\varphi| = \hat{1}$

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

Условие ортонормированности $\int d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$$ – представимо в виде произведен. функций от θ и от φ.

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\theta,\varphi) = mY_{lm}(\theta,\varphi) \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \Rightarrow$$

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta_{lm}}{d\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta_{lm}(\theta)\right] = l(l+1)\Theta_{lm}(\theta) \quad (*)$$

решение этого уравнения в терминах присоед. полиномов Лежандра.

отметим, что $\hat{l}_+|ll\rangle = 0 \Rightarrow$

$$\hat{l}_+ Y_{ll}(\theta,\varphi) = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\Theta_{ll}(\theta)\right)=0 \Rightarrow$$

$$\frac{d}{d\theta}\Theta_{ll}(\theta) - l\,\mathrm{ctg}\,\theta\,\Theta_{ll}(\theta)=0 \Rightarrow \Theta_{ll}(\theta)\sim\sin^l\theta$$

используя условие нормировки находим $\left(\int_{-1}^{1} d\cos\theta\,\Theta_{ll}^2(\theta)=1\right)$

$$\Theta_{ll}(\theta)=\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}\,\frac{1}{2^l l!}\sin^l\theta$$

Шаровые гармоники для меньших значений m можно получить действием оператора $\hat{l}_-$.

$$\hat l_-|lm\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l\,m-1\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,|l\,m-1\rangle$$

$$\Rightarrow \hat l_-|ll\rangle = \sqrt{2l\cdot 1}\,|l\,l-1\rangle;\quad \hat l_-^2|l,l\rangle=\sqrt{(2l)(2l-1)(1)(2)}\,|l,l-2\rangle$$

$$\hat l_-^{m'}|ll\rangle = \sqrt{(2l)\dots(2l-m'+1)\,m'!}\,|l\,l-m'\rangle = \sqrt{\frac{(2l)!\,(m')!}{(2l-m')!}}\,|l\,l-m'\rangle$$

Тогда выбираем $m'=l-m$

$$\hat l_-^{(l-m)}|ll\rangle = \sqrt{\frac{(2l)!\,(l-m)!}{(l+m)!}}\,|lm\rangle \Rightarrow |lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\,(\hat l_-)^{l-m}|ll\rangle$$

$$\Rightarrow Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\,(\hat l_-)^{l-m}\,Y_{ll}(\theta,\varphi)$$

Как действует $\hat l_-[f(\theta)e^{im\varphi}] = e^{i(m-1)\varphi}\sin^{1-m}\theta\,\frac{d}{d\cos\theta}\left(f\sin^m\theta\right)$

используя можно показать, что

$$(\hat l_-)^{l-m}\left(\Theta_{ll}e^{il\varphi}\right) = e^{im\varphi}\sin^{-m}\theta\,\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}\left(\sin^l\theta\,\Theta_{ll}\right)$$

В итоге

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\,\frac{1}{2^l l!}\,\frac{1}{\sin^m\theta}\,\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}\sin^{2l}\theta$$

отличается от ЛЛ III отсутствием фактора $(-i)^l$. Этот фактор возникает если дополнительно потребовать $Y^*_{lm}=(-1)^{l-m}Y_{l-m}$

Шаровые гармоники

$l=0$ $\quad Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ – угловое распред. изотропно

$l=1$ $\quad Y_{11}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{i\varphi}\sin\theta$

$$Y_{10}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,e^{-i\varphi}\sin\theta$$

Чётность состояния с определенным моментом l

Операция простанств. инверсии $\quad \vec{r}\to\vec{r}\,'=-\vec{r}$

Оператор инверсии $\quad \hat{P}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$

Состояние с определён. чётностью $\quad \hat{P}\psi=P\psi$; но $\hat{P}^2=\hat{1}$

$\Rightarrow$ собствен. значения оператора $\hat{P}$, $P=\pm1$

$P=+1$ – соотв. чётным функциям

$P=-1$ – нечётным функциям

В сферических координатах $\quad \vec{r}\to-\vec{r}$

$$(r,\theta,\varphi)\to(r,\pi-\theta,\varphi+\pi)$$

Достаточно определить чётность сост. $|lm\rangle$ для какого то выбранного значения m, поскольку остальные члены мультиплета получаются из $|lm\rangle$ действием операторов $\hat{l}_+$ или $\hat{l}_-$. Но действие оператора момента не меняет чётность состояния.

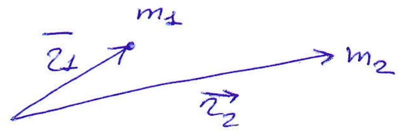
Итак

$$\hat{P}\, Y_{ll}(\theta,\varphi) = Y_{ll}(\pi-\theta,\, \varphi+\pi)$$

$$\hat{P}\left(e^{il\varphi} \sin^l\theta\right) = e^{il(\varphi+\pi)} \sin^l(\pi-\theta) = \underbrace{e^{il\pi}}_{(-1)^l} e^{il\varphi} \sin^l\theta$$

$\Rightarrow \boxed{P = (-1)^l}$ ← Получили простой результат для чётности состояния с определённым значением момента — l.

Задача двух тел



$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — двух частичная волновая функция

Удовл. УШ:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} + U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right]\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_{tot}\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Так же, как в курсе механики вводим:

$$\vec{R} \equiv \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$$ — радиус вектор центра масс

$$\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$ — радиус вектор относительного положен. $2^х$ частиц.

$\hat{H} = \hat{H}_{ц.м.} + \hat{H}_{отн.}$ — Тогда $\hat{H}$ представляется как сумма гамильтонианов для свободного движения центра масс и гамильтониана относит. движения.

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}^2_{\vec{R}}\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}}+U(\vec{r})\right)\right]\psi(\vec{R},\vec{r})=E_{tot}\,\psi(\vec{R},\vec{r})$$

где $M=m_1+m_2$ и $m=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ – приведённая масса

Ищем решение в виде $\psi(\vec{R},\vec{r})=\Phi(\vec{R})\,\psi(\vec{r})$

$$\Rightarrow\quad -\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_R^2\,\Phi(\vec{R})=E_{c.m.s}\,\Phi(\vec{R})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}}+U(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\,\psi(\vec{r})\qquad\text{и}\qquad E_{tot}=E_{c.m.s}+E$$

Центральное поле $\qquad U(\vec{r})=U(|\vec{r}|)=U(r)$

$\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}}+U(r)$ – коммутирует с $\forall$ компонентой оператора момента $\hat{\ell}_i$

Полный набор одновремен. измер. величин:

$\hat{H},\ \hat{\ell}^2,\ \hat{\ell}_z$ – энергия, момент и проекция момента

$[\hat{H},\hat{\ell}^2]=0$, $[\hat{H},\hat{\ell}_z]=0$ и $[\hat{\ell}^2,\hat{\ell}_z]=0$.

В сферических координатах $\psi\equiv\psi(r,\theta,\varphi)$ и тогда УШ. $\hat{H}\psi=E\psi$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi\right)+\frac{1}{r^2}\underbrace{\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]}_{[\ldots]=-\hat{\ell}^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(r)\right)\psi=0$$

Ищем решение в виде

$$\psi=R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\qquad\qquad \hat{\ell}^2Y_{\ell m}=\ell(\ell+1)Y_{\ell m}$$

$R(r)$ – радиальная волновая функция.

Уравнение для $R(r)$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)-\frac{\hbar^2(\ell+1)\ell}{2mr^2}\right]R=0$$

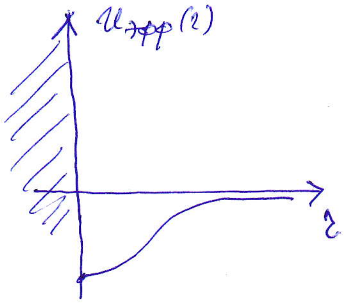
Введём новую функцию $\chi(r)$, так что $R=\frac{\chi}{r}$

$$\Rightarrow\quad \frac{d^2}{dr^2}\chi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_{eff.}(r)\right)\chi=0 \quad \text{где} \quad U_{eff}(r)=U(r)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}$$

центробежная энергия.

Условие на конечность $R(r)$ при $r\to 0$ даёт требование $\chi(r)\to 0$ при $r\to 0$.

Итог: задача сведена к одномерному движению в потенциале $U_{эфф}(r)$, где область движения ограничена $0\le r<\infty$, причём $\chi(0)=0$. Последнее условие эквивалентно наличию ∞ потенциальной стенки при $r=0$.



Если говорить о состояниях (стационарных, дискретного спектра (связанных состояниях)

Тогда их энергии зависят от двух целых чисел ℓ и $n_r=0,1,2,$
$\ell = 0,1,2,..$

Значения момента ℓ и радиального квантового числа n_r

$E_{n_r,\ell}$ — имеется $2\ell+1$ кратное вырождение по разным проекциям углового момента $-m$

$-\ell\le m\le \ell$

n_r – количество нулей радиальной волновой функции (не считая возм. нулей при $r=0$).

$n_r = 0$ и $l = 0$ — состоян. с наименьшей энергией — основное состояние (невырожденное).

$E_{0,0}$ — энергия основн. состоян.

Можно утверждать, что $E_{n_r+1,\,l} > E_{n_r,\,l}$ ← след. дискретн. уровень в заданн. потенциале $U_{eff}(r)$

$E_{n_r,\,l+1} > E_{n_r,\,l}$ ← тот же самый по счёту уровень, но увеличивается параметр l в центробежной части $U_{eff.}(\vec{r})$

Соотношение между

$E_{n_r+1,\,l}$ и $E_{n_r,\,l+1}$ зависит от конкретного вида центрального поля $U(r)$.

↑

Для этих величин нет ~~[illegible]~~ определен. неравенства.

Условие нормировки ~~[illegible]~~ $\int_0^\infty r^2 dr \cdot |R(r)|^2 = 1$ или

для χ $\int_0^\infty dr \, |\chi(r)|^2 = 1$.

Принятая терминология:

Квантовые состояния с $l = 0$ — s-состояния

$l = 1$ — p-состояния

$l = 2$ — d-состояния

$l = 3$ — f-состояния