Атомная физика

Лекция 13

М.Ю. Рябикин

канд. физ.-мат. наук, в.н.с. ИПФ РАН

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ВШОПФ

2025

Момент импульса

Оператор момента импульса

Момент импульса – один из основных интегралов движения в КМ.

Подобно тому, как закон сохранения импульса следует из однородности пространства по отношению к замкнутой системе частиц, аналогичный закон для момента импульса является следствием изотропии пространства. Ввиду изотропии пространства бесконечно малый поворот не меняет гамильтониана системы. Это приводит к тому, что оператор момента импульса оказывается пропорциональным векторному произведению операторов координаты и импульса, что соответствует классическому выражению для момента импульса (Ландау, Лифшиц, т. 3, §26).

Операторное представление момента импульса.

Классическое выражение для момента импульса в виде символического определителя (в КМ момент импульса обычно обозначают буквой L):

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r},\mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}, \qquad (13.1)$$

где $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ – радиус-вектор и импульс частицы, соответственно $\rightarrow$

$$\begin{aligned} L_x &= p_z y - p_y z, \\ L_y &= p_x z - p_z x, \\ L_z &= p_y x - p_x y \end{aligned} \qquad (13.2)$$

Заменяем координаты и проекции импульса на соответствующие операторы $\rightarrow$ операторы проекций момента импульса:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial z}y - \frac{\partial}{\partial y}z\right) = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$
$$\hat{L}_y = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial z}x - \frac{\partial}{\partial x}z\right) = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right), \qquad (13.3)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial y}x - \frac{\partial}{\partial x}y\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

В КМ важен квадрат момента импульса L^2. Введем оператор квадрата момента импульса по обычному правилу КМ (заменяя физические величины операторами):

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2 = -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right].$$

Вопрос об одновременной измеримости разных компонент момента импульса и его квадрата.

Покажем, что $\forall$ пара операторов L_α не коммутирует.

$$\hat{L}_x\hat{L}_y = \hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)\right] = \hbar^2\left[yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} - y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial x}\right) - zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}\right] =$$

$$= \hbar^2\left[yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} - y\frac{\partial}{\partial x} - yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}\right]. \qquad (13.4)$$

Аналогично:

$$\hat{L}_y\hat{L}_x = \hbar^2\left[yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} - x\frac{\partial}{\partial y} - xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y} - zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z} + z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right]. \qquad (13.5)$$

Сравниваем правые части (13.4) и (13.5). Они не совпадают $\to \hat{L}_x\hat{L}_y \neq \hat{L}_y\hat{L}_x$.

Аналогично: $\hat{L}_z\hat{L}_y \neq \hat{L}_y\hat{L}_z$ и $\hat{L}_z\hat{L}_x \neq \hat{L}_x\hat{L}_z$ $\to$ никакие две компоненты момента импульса в физической системе не могут быть измерены одновременно.

Исключение: тривиальный случай (все компоненты =0). $\to$

Классическое понятие вектора момента импульса не имеет прямого аналога в КМ.

Коммутатор разных компонент момента импульса.

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x=\hbar^2\left[x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right]=i\hbar\left\{-i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right]\right\}=i\hbar\hat{L}_z \quad (13.6)$$

Аналогично, $\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=i\hbar\hat{L}_x$ и $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=i\hbar\hat{L}_y$.

Т. обр., коммутационные соотношения компонент момента импульса имеют вид

$$\begin{aligned}\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x&=i\hbar\hat{L}_z,\\ \hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y&=i\hbar\hat{L}_x,\\ \hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z&=i\hbar\hat{L}_y.\end{aligned} \quad (13.7)$$

$\rightarrow$ Все компоненты момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения. В этом отношении момент существенно отличается от импульса, у которого все три компоненты одновременно измеримы.

Коммутатор компонент момента импульса и его квадрата.

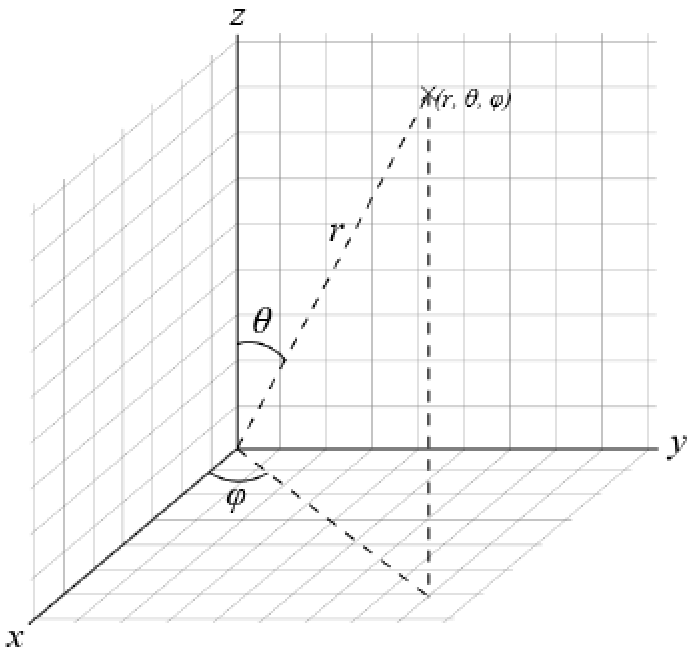
Используя полученные выше выражения для компонент момента импульса и его квадрата и, для краткости вычислений, пользуясь найденными коммутационными соотношениями, можно получить:

$$\begin{aligned}
&\hat{L}_x\hat{L}^2-\hat{L}^2\hat{L}_x=0,\\
&\hat{L}_y\hat{L}^2-\hat{L}^2\hat{L}_y=0,\\
&\hat{L}_z\hat{L}^2-\hat{L}^2\hat{L}_z=0.
\end{aligned}\tag{13.8}$$

→ существуют квантовые состояния, в которых одновременно определены квадрат момента импульса и одна (любая) из его проекций.

Собственные значения и собственные функции операторов проекций момента импульса

Для нахождения системы собственных функций операторов проекций момента импульса удобно использовать сферическую систему координат.



Связь между декартовыми и сферическими координатами описывается формулами

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi, \qquad (13.9)$$
$$z = r\cos\theta.$$

Формулы обратного перехода удобно записать как

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \qquad (13.10а)$$

$$\cos\theta = \frac{z}{r}, \qquad (13.10б)$$

$$\mathrm{tg}\,\varphi = \frac{y}{x}. \qquad (13.10в)$$

Преобразования координат (13.9) → выражения для частных производных по декартовым координатам через частные производные по сферическим координатам → выражения для операторов проекций момента импульса в сферических координатах.

Частные производные от функции f по декартовым координатам x_i ($i=x, y, z$):

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}=\frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_i}+\frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x_i}+\frac{\partial f}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}. \qquad (13.11)$$

(13.10а) $\rightarrow$

$$2r\frac{\partial r}{\partial x_i}=2x_i \;\rightarrow$$

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\frac{x}{r}=\sin\theta\cos\varphi\,, \qquad (13.12а)$$

$$\frac{\partial r}{\partial y}=\frac{y}{r}=\sin\theta\sin\varphi\,, \qquad (13.12б)$$

$$\frac{\partial r}{\partial z}=\frac{z}{r}=\cos\theta\,. \qquad (13.12в)$$

(13.10б) $\rightarrow$

$$-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial x}=-\frac{z}{r^2}\frac{\partial r}{\partial x}=-\frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial r}{\partial x}\rightarrow$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\cos\theta}{r}\sin\theta\cos\varphi=\frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\,. \qquad (13.13а)$$

$$-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial y}=-\frac{z}{r^2}\frac{\partial r}{\partial y}=-\frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial r}{\partial y}\rightarrow$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\cos\theta}{r}\sin\theta\sin\varphi=\frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\,. \qquad (13.13б)$$

$$-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{1}{r}-\frac{z}{r^2}\frac{\partial r}{\partial z}\rightarrow$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{1}{\sin\theta}\left(-\frac{1}{r}+\frac{\cos\theta}{r}\cos\theta\right)=-\frac{1}{r\sin\theta}\left(1-\cos^2\theta\right)=-\frac{\sin\theta}{r}\,. \qquad (13.13в)$$

$$(13.10\text{в}) \to \frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2} \to$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\cos^2\varphi\frac{r\sin\theta\sin\varphi}{r^2\sin^2\theta\cos^2\varphi} = -\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}. \qquad (13.14\text{а})$$

$$\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y} = -\frac{1}{x} \to$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{\cos^2\varphi}{r\sin\theta\cos\varphi} = \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}. \qquad (13.14\text{б})$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0. \qquad (13.14\text{в})$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial f}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial\varphi};$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial f}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial\varphi};$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial f}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}.$$

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

$$= -i\hbar\left[r\sin\theta\sin\varphi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \right.$$

$$\left. - r\cos\theta\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$$

$$= -i\hbar\left(-\sin^2\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos^2\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

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

$$= i\hbar\left[r\sin\theta\cos\varphi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \right.$$

$$\left. - r\cos\theta\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] =$$

$$= i\hbar\left(-\sin^2\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos^2\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right) = \\
&= -i\hbar\left[r\sin\theta\cos\varphi\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) - \right. \\
&\left. - r\sin\theta\sin\varphi\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \right] = \\
&= -i\hbar\left(\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}
$$

$$\hat{L}_x{}^2 = -\hbar^2\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)=$$

$$=-\hbar^2\left(\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{ctg}\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\right.$$

$$+\sin\varphi\cos\varphi\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}-$$

$$\left.-\mathrm{ctg}^2\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)=$$

$$=-\hbar^2\left(\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{ctg}\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+2\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\right.$$

$$\left.+\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right).$$

$$\hat{L}_y{}^2 = -\hbar^2\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)=$$

$$=-\hbar^2\left(\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{ctg}\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\right.$$

$$-\sin\varphi\cos\varphi\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+$$

$$\left.+\mathrm{ctg}^2\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)=$$

$$=-\hbar^2\left(\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\mathrm{ctg}\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-2\mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\right.$$

$$\left.-\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+\mathrm{ctg}^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right).$$

$$\hat{L}_z{}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

$$\hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \mathrm{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathrm{ctg}^2\theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) =$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \mathrm{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) =$$

$$= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Итак, операторы проекций и квадрата момента импульса в сферических координатах определяются следующими выражениями:

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (13.15)$$

Последнее выражение полезно сравнить с выражением для оператора Лапласа в сферических координатах:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (13.16)$$

Этот оператор состоит из двух слагаемых:

$$\Delta = \Delta_R + \frac{1}{r^2}\Delta_Y ,$$

где

$\Delta_R = \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \dfrac{\partial}{\partial r}\right)$ – радиальная часть оператора Лапласа, а

$\Delta_Y = \dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ – его угловая часть.

Таким образом, оператор квадрата углового момента пропорционален угловой части оператора Лапласа:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_Y .$$

Найдем собственные функции и собственные значения операторов $\hat{L}^2$ и одной из проекций момента $\hat{L}_\alpha$. Имеем в виду, что $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_\alpha$ коммутируют, т.е. значения соответствующих физических величин могут быть измерены одновременно с любой точностью. $\rightarrow$ $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_\alpha$ обладают одинаковым набором собственных функций (при этом спектры собственных значений различаются).

Эти собственные функции должны удовлетворять системе уравнений

$$\hat{L}_\alpha \Psi = L_\alpha \Psi , \qquad (13.17)$$

$$\hat{L}^2 \Psi = L^2 \Psi \qquad (13.18)$$

(L^2 здесь и далее надо понимать не как квадрат числа L, а как собственное значение оператора $\hat{L}^2$).

Из явного вида (13.15) операторов $\hat{L}_\alpha$ очевидно, что решение системы (13.17)-(13.18) проще всего получить, если в качестве оператора $\hat{L}_\alpha$ взять оператор $\hat{L}_z$.

Операторы $\hat{L}_\alpha$ и $\hat{L}^2$ зависят только от угловых координат $\rightarrow$ Уравнения на собственные функции операторов $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$ можно записать как

$$\hat{L}_z\Psi(\theta,\varphi) = L_z\Psi(\theta,\varphi)\,, \qquad (13.19)$$

$$\hat{L}^2\Psi(\theta,\varphi) = L^2\Psi(\theta,\varphi)\,. \qquad (13.20)$$

Оператор $\hat{L}_z$ зависит только от φ $\rightarrow$ систему (13.19)-(13.20) можно решать методом разделения переменных. Ищем решение в виде

$$\Psi(\theta,\varphi) = P(\theta)\Phi(\varphi)\,. \qquad (13.21)$$

(13.21) $\rightarrow$ в (13.19) $\rightarrow$

$$-i\hbar\frac{\partial\Phi(\varphi)}{\partial\varphi} = L_z\Phi(\varphi)\,. \qquad (13.22)$$

Решение:

$$\Phi(\varphi) = C\exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right), \qquad (13.23)$$

где C – постоянная интегрирования.

При повороте на $\Delta\varphi = 2\pi$ система переходит сама в себя → функция $\Phi(\varphi)$ должна быть периодической с периодом 2π:

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

Из вида (13.23) → это условие периодичности выполняется, если значения L_z **квантуются** по правилу

$$L_z = \hbar m \quad (m = 0, \pm1, \pm2, \ldots). \qquad (13.24)$$

Целое число m в атомной физике называется ***магнитным квантовым числом***.

Каждая ВФ (13.23) характеризуется определенным значением магнитного квантового числа m. Постоянную C можно определить из условия

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi = 1.$$

→ Собственные функции оператора L_z, соответствующие собственным значениям (13.24), записываются как

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi). \qquad (13.25)$$

Собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента импульса

Обратимся к уравнению (13.20). Оператор $\hat{L}^2$ запишем как (13.15), а функцию $\Psi(\theta,\varphi)$ как (13.21) с учетом (13.25):

$$-\hbar^2\Delta_Y P(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi)=L^2P(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi). \qquad (13.26)$$

Это дифференциальное уравнение хорошо изучено в матфизике. Нас интересуют только ограниченные решения (согласно постулатам КМ, ВФ должна быть ограниченной).

Уравнение (13.26) имеет ограниченные решения только если собственные значения L^2 принадлежат следующему дискретному множеству:

$$L^2=\hbar^2 l(l+1) \qquad (l=0,\,1,\,2,\,\ldots). \qquad (13.27)$$

В атомной физике величину l называют ***орбитальным квантовым числом***.
Величина l ограничивает возможные значения квантового числа m следующим образом:

$$|m|\le l\,.$$

Функции $P(\theta)$, удовлетворяющие (13.26) – присоединенные полиномы Лежандра $P_l^{|m|}(\cos\theta)$, определяемые соотношением

$$P_l^{|m|}(\xi) = \frac{1}{2^l\, l!}(1-\xi^2)^{|m|/2}\frac{\partial^{|m|+l}}{\partial\xi^{|m|+l}}(\xi^2-1)^l\,, \qquad (13.28)$$

где $\xi = \cos\theta$.

$\Phi_m(\varphi)$ из (13.25) и $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ из (13.28) $\rightarrow$ в (13.21) $\rightarrow$ решение системы (13.19)-(13.20) в виде ***сферических функций***, содержащих два квантовых числа l и m:

$$\Psi_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^k\sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)\exp(im\varphi)\,, \qquad (13.29)$$

где

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \ \text{ и } \ m = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots,\ \pm l; \qquad (13.30)$$

$$k = \begin{cases} m, & m \ge 0 \\ 0, & m < 0 \end{cases}.$$

Можно встретить другие варианты записи решения (13.29), отличающиеся нормировочным множителем.

Ландау, Лифшиц, т. 3, § 28:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi} . \qquad (13.29a)$$

1) Множитель i^l – естественный выбор с точки зрения преобразования ВФ при обращении времени, сложения моментов и др.

2) Множитель $(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}$ является альтернативной записью множителя $(-1)^k$, где

$$k = \begin{cases} m, & m \geq 0 \\ 0, & m < 0 \end{cases}$$ – см. (13.29) – (13.30).

Коэффициент перед $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ обеспечивает нормировку квадрата модуля (13.29) на единицу. Можно убедиться, что

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\,, \qquad (13.31)$$

т.е. функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ составляют ортонормированный базис. Тем самым они удовлетворяют общему принципу ортогональности собственных функций, соответствующих разным собственным значениям физической величины f (в данном случае – двух физических величин: полного момента и его проекции на ось z).

Явный вид низших сферических функций:

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,;$$

$$Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(-i\varphi)\,; \quad Y_{10}(\theta,\varphi) = -i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,; \quad Y_{11}(\theta,\varphi) = -i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(i\varphi)\,.$$

Заметим, что определенному значению L^2, заданному числом l согласно (13.27), соответствует $2l+1$ различных линейно независимых функций $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, т.е. $2l+1$ различных состояний, различающихся значениями квантового числа m (13.30). $\rightarrow$ Каждое состояние с определенным L^2 $(2l+1)$-кратно вырождено по магнитному квантовому числу, т.е. по проекциям момента импульса.

Квантовые состояния с определенными значениями l принято обозначать строчными буквами латинского алфавита следующим образом:

Орбитальное квантовое число l	0	1	2	3	4	5
Обозначение	s	p	d	f	g	h

(при $l \geq 3$ состояния с различными l нумеруются в алфавитном порядке). Отметим, что в атомах и молекулах состояния с $l > 5$ реализуются очень редко.

(13.30) $\rightarrow$ Максимальное значение L_z реализуется при $m = l$ и равно

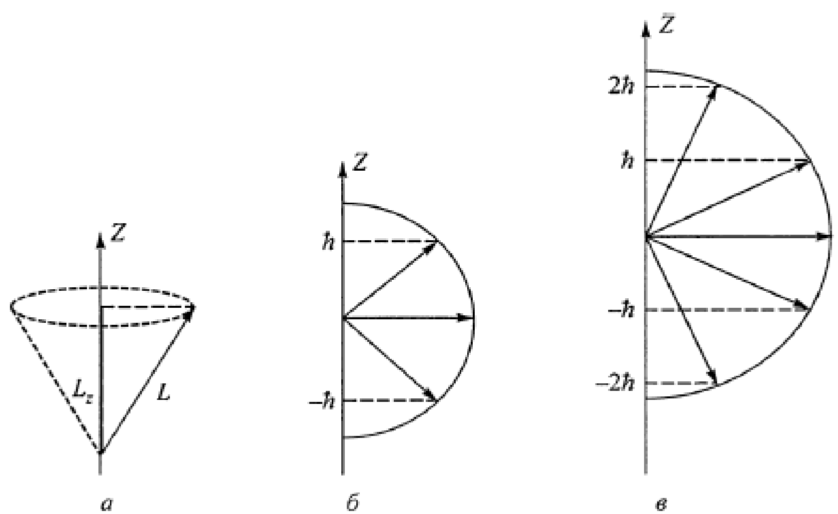
$$L_z(\max) = \hbar l\,. \qquad (13.32)$$

$\rightarrow$ L_z всегда меньше модуля момента импульса, равного

$$|L| = \sqrt{L^2} = \hbar\sqrt{l(l+1)}\,. \qquad (13.33)$$

Это свойство согласуется с невозможностью одновременного точного определения всех компонент момента импульса (одновременно измеренными могут быть только L^2 и одна из проекций L_α; для остальных проекций результаты измерений носят вероятностный характер). $\rightarrow$ Момент импульса в КМ не является обычной векторной величиной.

Графическая интерпретация (весьма условная!): конус с образующей длиной L и углом раствора, определяемым величиной L_z. В результате разных измерений будут получаться разные образующие на поверхности этого конуса, т.е. разные L_x и L_y. Усреднение по большой серии измерений даст нулевые значения L_x и L_y. Строгое доказательство – см. ниже.



«Векторная модель» (иллюстрирует геометрические соотношения между модулем и проекциями момента импульса).

Рис. 13.1. Изображение проекций момента импульса с помощью векторной модели.

Вычислим средние значения величин L_x и L_y в состоянии с определенными значениями L^2 и L_z.

Определение среднего:

$$\bar{f} = \int \Psi^* \left(\hat{f} \Psi \right) dq \,. \tag{13.34}$$

В теории углового момента часто используются операторы $\widehat{L}_+$ и $\widehat{L}_-$, которые выражаются линейными комбинациями операторов $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$:

$$\widehat{L}_+ = \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y, \quad \widehat{L}_- = \widehat{L}_x - i\widehat{L}_y. \tag{13.35}$$

Операторы (13.35) замечательны тем, что, действуя на сферическую функцию $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, они, соответственно, увеличивают или уменьшают на единицу квантовое число m по следующим правилам (Ландау, Лифшиц, т. 3):

$$\widehat{L}_+ Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_1 Y_{l,m+1}(\theta, \varphi), \tag{13.36}$$

$$\widehat{L}_- Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_2 Y_{l,m-1}(\theta, \varphi), \tag{13.37}$$

где

$$C_1 = \hbar\sqrt{(l+m+1)(l-m)}, \quad C_2 = \hbar\sqrt{(l-m+1)(l+m)}\,. \tag{13.38}$$

Поэтому такие операторы часто называют «повышающими» и «понижающими».

Действительно, из правил коммутации для пар операторов $\left(\hat{L}_x, \hat{L}_z\right)$ и $\left(\hat{L}_y, \hat{L}_z\right)$ легко получить правили коммутации

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_+\right] = \hbar\hat{L}_+ \text{ и } \left[\hat{L}_z, \hat{L}_-\right] = -\hbar\hat{L}_-,$$

или

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{L}_\pm. \qquad (13.39)$$

Применим оператор $\hat{L}_z\ \hat{L}_\pm$ к собственной функции Ψ_m оператора $\hat{L}_z$ ($\hat{L}_z\Psi_m = \hbar m\Psi_m$):

$$\hat{L}_z\hat{L}_\pm\Psi_m = \left(\hat{L}_\pm\hat{L}_z \pm \hbar\hat{L}_\pm\right)\Psi_m = \hbar(m\pm1)\hat{L}_\pm\Psi_m \rightarrow$$

$$\hat{L}_+\Psi_m = C_1\Psi_{m+1},\ \hat{L}_-\Psi_m = C_2\Psi_{m-1} \rightarrow \text{(13.36)-(13.37)}.$$

Теперь запишем выражение для среднего значения $\overline{L}_x$:

$$\overline{L}_x = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\widehat{L}_x Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi. \qquad (13.40)$$

Используя определение (13.35), представим операторы $\hat{L}_x$ и $\hat{L}_y$ в виде линейных комбинаций операторов $\hat{L}_+$ и $\hat{L}_-$:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \ \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}. \qquad (13.41)$$

Подставим $\hat{L}_x$ из (13.41) в (13.40):

$$\overline{L}_x = \frac{1}{2}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi)\widehat{L}_+ Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi +$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi)\widehat{L}_- Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi.$$

Воспользуемся свойствами повышающего и понижающего операторов:

$$\overline{L}_x = \frac{C_1}{2}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi) Y_{l,m+1}(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi +$$

$$+\frac{C_2}{2}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi) Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi.$$

Из-за свойств ортогональности сферических функций оба интеграла в предыдущем выражении для $\overline{L}_x$ равны нулю. Аналогично вычисляется среднее значение $\overline{L}_y$, которое тоже оказывается равным нулю:

$$\overline{L}_x = \overline{L}_y = 0\,. \qquad (13.42)$$

Вид сферических функций для *s*-, *p*-, *d*- и *f*- состояний:

Состояние	l	m	$Y_{lm}(\theta,\varphi)$
s	0	0	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$
p	1	-1	$i\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(-i\varphi)$
		0	$i\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$
		$+1$	$-i\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(i\varphi)$

d	2	-2	$-\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\exp(-2i\varphi)$
		-1	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\exp(-i\varphi)$
		0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1-3\cos^2\theta)$
		1	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\exp(i\varphi)$
		2	$-\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\exp(2i\varphi)$

f	3	-3	$-i\sqrt{\dfrac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\exp(-3i\varphi)$
		-2	$-i\sqrt{\dfrac{105}{32\pi}}\cos\theta\sin^2\theta\exp(-2i\varphi)$
		-1	$-i\sqrt{\dfrac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)\exp(-i\varphi)$
		0	$-i\sqrt{\dfrac{7}{16\pi}}\cos\theta(5\cos^2\theta-3)$
		1	$i\sqrt{\dfrac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)\exp(i\varphi)$
		2	$-i\sqrt{\dfrac{105}{32\pi}}\cos\theta\sin^2\theta\exp(2i\varphi)$
		3	$i\sqrt{\dfrac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\exp(3i\varphi)$

Нетрудно видеть, что при определенных значениях угла θ функция $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ проходит через ноль, меняя знак. Количество таких значений угла θ равно квантовому числу l. То же самое можно сказать по отношению к углу φ, рассмотрев действительную или мнимую часть зависящего от φ множителя в функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. В этом случае количество соответствующих нулей равно квантовому числу m. Линии $\theta = \text{const}$ и $\varphi = \text{const}$, вдоль которых сферическая волновая функция равна нулю, образуют семейство ***узловых линий***, представляющих собой в данном случае определенные параллели и меридианы, проведенные на сфере радиуса r.