Kvantna mehanika I - pričakovane vrednosti operatorja vrtilne količine

Janez Dovč

3. maj 2003

1 Naloga

Imamo stanje:

$$\Psi(\vec{r}) = A(2\imath x + y + z)e^{-\alpha r}$$

kjer $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.
Sedaj bi radi izračunali:

- pričakovano vrednost operatorja kvadrata velikosti vrtilne količine
- pričakovano vrednost vseh projekcij vrtilne količine
- verjetnost, da bomo pri meritvi L_z izmerili vrednost 0

2 Malo teorije

Naše stanje bomo razvili po lastnih stanjih vrtilne količine $|lm\rangle$, ki jim pravimo tudi sferni harmoniki. Njihova lepa lastnost je ta, da so med seboj ortogonalni

$$\langle lm|l'm'\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

kar nam bo krepko olajšalo račune, poleg tega pa so sferni harmoniki, včasih jim pravimo tudi krogelne funkcije, tudi lastne funkcije kvadrata velikosti vrtilne količine. m je obhodno magnetno kvantno število in je lastna vrednost za komponentno vrtilne količine, l pa je obhodno kvantno število in je v zvezi z lastnimi vrednostmi kvadrata vrtilne količine.

$$L^2 |lm\rangle = \hbar l(l+1) |lm\rangle \tag{1}$$

$$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle \tag{2}$$

Zapišimo sedaj še nekaj osnovnih sfernih harmonikov, ki jih bomo potrebovali v naših izračunih:

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\imath\varphi}$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-\imath\varphi}$$

in se lotimo računanja.

3 Reševanje

Kot smo že rekli, bomo našo prvotno funkcijo transformirali v krogelne koordinate ter jo izrazili z sfernimi harmoniki.

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

$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$

$$z = r\cos\theta$$

Torej

$$\Psi = rA(2\imath\sin\theta\cos\varphi + \sin\theta\sin\varphi + \cos\theta)e^{-\alpha r}$$

Da bomo lahko izrazili tudi produkte kotnih funkcij, si pripravimo še naslednje pomožne izračune:

$$Y_{11} + Y_{1-1} = -2\imath\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\sin\varphi$$

$$Y_{1-1} - Y_{11} = 2\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cos\varphi$$

Dobimo:

$$\Psi = rA(\imath\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_{1-1} - Y_{11}) + \frac{\imath}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}(Y_{1-1} + Y_{11}) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10})e^{-\alpha r}$$

Ko torej izpostavimo posamezne krogelne funkcije ter seštejemo koeficiente pred njimi, dobimo:

$$\Psi = rA\frac{8\pi}{3}\left(-\frac{\imath}{2}Y_{11} + \frac{3\imath}{2}Y_{1-1} + \frac{\sqrt{2}}{2}Y_{10}\right)e^{-\alpha r} \tag{3}$$

Poslužimo se na tem mestu standardnega trika, ter našo funkcijo razstavimo na del z radialno odvisnostjo ter del z kotno odvisnostjo

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_1(r)\Psi_2(\vartheta,\varphi)$$

Čemu trik?? Da bomo normalizirali vsak del posebej (jasno), vendar pa nas v naši nalogi radialni del sploh ne zanima, tako, da normalizirajmo le kotno odvisni del (kar ni posebej zahtevno, glede na to, da so sferni harmoniki med seboj ortogonalni ter seveda normirani)

$$B^2(\frac{1}{4} + \frac{9}{4} + \frac{1}{2}) = 1$$

Končna funkcija v Diracovem zapisu torej izgleda takole:

$$|\Psi\rangle = |R\rangle\,(-\frac{\imath}{2\sqrt{3}}\,|11\rangle + \frac{\imath\sqrt{3}}{2}\,|1-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}\,|10\rangle \tag{4}$$

Izračunajmo sedaj pričakovano vrednost kvadrata velikosti vrtilne količine.

$$\left\langle L^2\right\rangle = \langle\Psi|\,L^2\,|\Psi\rangle$$

Ker vemo, da radialni del ne vpliva na pričakovano vrednost kvadrata velikosti vrtilne količine, ter, da je kotni del naše funkcije sestavljen iz samih sfernih harmonikov z $l = 1$ ter seveda tudi, da je kotni del normiran, lahko z pomočjo enačbe 1 takoj zapišemo rezultat.

$$\left\langle L^2\right\rangle = 2\hbar^2$$

Lotimo se še pričakovanih vrednosti projekcij vrtilne količine:

$$\langle L_z \rangle = \langle R|R \rangle \langle F| L_z |F \rangle$$

Z upoštevanjem enačbe 2 dobimo:

$$\langle L_z \rangle = \frac{\hbar}{12} - \frac{3\hbar}{4} = -\frac{2}{3}\hbar$$

Pričakovane vrednosti L_x in L_y pa bomo izračunali s pomočjo dveh pomožnih operatorjev in sicer:

$$L_+ = L_x + \imath L_y \tag{5}$$

$$L_- = L_x - \imath L_y \tag{6}$$

ki na sferne harmonike delujeta takole:

$$L_\pm |lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}\, |l, m \pm 1\rangle$$

Izračunajmo torej posamezen operator (pazi na spremembo predznaka pri adjungaciji):

$$\langle L_+ \rangle = \langle R|R \rangle \langle F|\hbar\imath\sqrt{\frac{3}{2}}Y_{10} + \hbar\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{11}\rangle = (\frac{1}{2}\imath\hbar + \frac{1}{6}\imath\hbar) = \frac{2}{3}\imath\hbar$$

$$\langle L_- \rangle = \langle F| - \frac{1}{\sqrt{6}}\imath\hbar Y_{10} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hbar Y_{1-1}\rangle = (-\frac{1}{6}\imath\hbar - \frac{1}{2}\imath\hbar) = -\frac{2}{3}\imath\hbar$$

Če torej še na hitrico premečemo enačbi 5 ter 6, dobimo:

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2}(\langle L_+ \rangle + \langle L_- \rangle) = 0$$

in

$$\langle L_y \rangle = \frac{1}{2\imath}(\langle L_+ \rangle - \langle L_- \rangle) = \frac{2}{3}\hbar$$

Sedaj nas zanima le še, če izmerimo L_z, kolikšna je verjetnost, da dobimo vrednost 0. Izkaže se, da je verjetnost za to enaka temu, da se naša funkcija nahaja v stanju z $m = 0$. Za znanja željne glave, ki jim vprašanje, zakaj je temu tako, ne bo dalo miru, pa naj namignem, da se izpeljava nahaja v knjigi Franza Schwabla in sicer v poglavju 2.9.

Torej, odgovor na naše vprašanje lahko preprosto preberemo iz enačbe kotnega dela naše funkcije (4), saj je verjetnost, da bo sistem po meritvi v $|10\rangle$, kar kvadrat koeficienta in je enaka $\frac{1}{6}$.