

## 20 Moment pędu

Przypomnijmy sobie rozważania, które doprowadziły nas do rozwiązania kątovej części równania Schrödingera dla atomu wodoru. Klasycznie moment pędu zdefiniowany jest jako wektor  $\vec{L}$  o współrzędnych

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y, \\ L_y &= z p_x - x p_z, \\ L_z &= x p_y - y p_x, \end{aligned} \quad (20.1)$$

lub

$$L_i = \varepsilon_{ijk} r_j p_k. \quad (20.2)$$

Kwantowo *operator* momentu pędu  $\hat{L}$  (w celu uproszczenia notacji opuściliśmy strzałkę oznaczającą wektor, ale należy pamiętać, że operator momentu pędu ma trzy składowe) powstaje przez zastąpienie  $\vec{r}$  i  $\vec{p}$  przez odpowiadające im operatory. Warto przepisać  $\hat{L}$  we współrzędnych sferycznych:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left( -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (20.3)$$

Składowe  $\hat{L}_i$  operatora momentu pędu mają łatwe do zapamiętania reguły komutacji:

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{L}_m. \quad (20.4)$$

Spróbujmy teraz odtworzyć strukturę stanów własnych operatorów  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_3$  korzystając tylko z własności algebraicznych, tak jak to zrobiliśmy w przypadku oscylatora harmonicznego badając algebrę operatorów  $a$  i  $a^\dagger$ . Punktem startowym będą dla nas reguły komutacji

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{J}_m. \quad (20.5)$$

Choć relacja ta jest identyczna, jak relacja dla operatorów  $\hat{L}_k$ , to specjalnie zmieniliśmy notację na  $\hat{J}_k$ , gdyż jak się okaże, związek komutacyjny (20.5) dopuszcza szerszą klasę reprezentacji niż orbitalny moment pędu.

### 20.1 Spektrum

Wprowadźmy operatory

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2. \quad (20.6)$$

Operatory te nie są hermitowskie, ale zachodzi

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-, \quad \hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+. \quad (20.7)$$

Jak zobaczymy, operatory te będą grały rolę podobną jak operatory kreacji i anihilacji dla oscylatora harmonicznego. Oczywiście operatory  $\hat{J}_\pm$  komutują z  $\hat{J}^2$ . Pozostałe związki komutacyjne mają postać:

$$\left[ \hat{J}_3, \hat{J}_+ \right] = \hbar \hat{J}_+, \quad \left[ \hat{J}_3, \hat{J}_- \right] = -\hbar \hat{J}_-, \quad \left[ \hat{J}_+, \hat{J}_- \right] = 2\hbar \hat{J}_3. \quad (20.8)$$

Zdefiniujmy stany własne  $\hat{J}^2$  i  $\hat{J}_3$ :

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 \lambda_j |j, m\rangle, \\ \hat{J}_3 |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (20.9)$$

O stanach tych założymy, że są znormalizowane:

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (20.10)$$

i że tworzą układ zupełny

$$1 = \sum_{j,m} |j, m\rangle \langle j, m| \stackrel{\text{ozn}}{=} |j, m\rangle \langle j, m|. \quad (20.11)$$

gdzie zakładamy sumę po  $j$  i  $m$ .

Zbadajmy teraz czy stany powstałe z zadziałania operatorami  $\hat{J}_\pm$  na stan  $|j, m\rangle$  są stanami własnymi  $\hat{J}^2$  i  $\hat{J}_3$ . Niech

$$|\alpha\rangle = \hat{J}_+ |j, m\rangle, \quad |\beta\rangle = \hat{J}_- |j, m\rangle \quad (20.12)$$

Choć stan  $|j, m\rangle$  jest poprawnie unormowany, to stany  $|\alpha\rangle$ ,  $|\beta\rangle$  na ogół nie są unormowane.

Podziałajmy operatorem  $\hat{J}^2$  na stan  $|\alpha\rangle$  lub  $|\beta\rangle$ :

$$\hat{J}^2 \begin{array}{l} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{array} = \hat{J}^2 \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}^2 |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hbar^2 \lambda_j |j, m\rangle = \hbar^2 \lambda_j \begin{array}{l} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{array}. \quad (20.13)$$

Stąd widać, że stany  $|\alpha\rangle$  i  $|\beta\rangle$  są stanami własnymi  $\hat{J}^2$  do tego samego  $j$  co wyjściowy stan  $|j, m\rangle$ . Zatem operatory  $\hat{J}_\pm$  nie zmieniają  $j$  ale mogą zmieniać i zmieniają  $m$ . Aby wyliczyć ich działanie na stany  $|j, m\rangle$  zbadajmy element macierzowy

$$\langle j, m' | \left[ \hat{J}_3, \hat{J}_\pm \right] |j, m\rangle = \pm \hbar \langle j, m' | \hat{J}_\pm |j, m\rangle. \quad (20.14)$$

W tym celu rozpiszmy komutator i skorzystajmy z (20.11). Rozpatrzmy najpierw  $\hat{J}_+$ :

$$\langle j, m' | \hat{J}_3 |j, m''\rangle \langle j, m'' | \hat{J}_+ |j, m\rangle - \langle j, m' | \hat{J}_+ |j, m''\rangle \langle j, m'' | \hat{J}_3 |j, m\rangle = \hbar \langle j, m' | \hat{J}_+ |j, m\rangle, \quad (20.15)$$

gdzie suma przebiega tylko po  $m''$ , gdyż elementy macierzowe  $\hat{J}_3$  i  $\hat{J}_+$  między stanami o  $j'' \neq j$  są równe zero. Ponieważ stany  $|j, m\rangle$  są stanami własnymi  $\hat{J}_3$  otrzymujemy:

$$\hbar m' \langle j, m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle - \hbar m \langle j, m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \hbar \langle j, m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle \quad (20.16)$$

i dalej

$$(m' - m - 1) \langle j, m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle = 0. \quad (20.17)$$

Widzimy zatem, że

$$\langle j, m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle \neq 0 \quad \text{dla} \quad m' = m + 1. \quad (20.18)$$

Podobnie, zauważając, że dla  $\hat{J}_-$  zmienia się tylko znak po prawej stronie (20.16) otrzymujemy

$$(m' - m + 1) \langle j, m' | \hat{J}_- | j, m \rangle = 0, \quad (20.19)$$

a co za tym idzie

$$\langle j, m' | \hat{J}_- | j, m \rangle \neq 0 \quad \text{dla} \quad m' = m - 1. \quad (20.20)$$

Podsumowując: operatory  $\hat{J}_\pm$  podwyższają (obniżają)  $m$  o 1 :

$$|\alpha\rangle = \hat{J}_+ | j, m \rangle = \hbar \mathcal{N}_{jm} | j, m + 1 \rangle, \quad |\beta\rangle = \hat{J}_- | j, m + 1 \rangle = \hbar \mathcal{N}_{jm}^* | j, m \rangle. \quad (20.21)$$

Fakt, że współczynnik  $\mathcal{N}_{jm}$  dla  $\hat{J}_-$  jest równy sprzężeniu zespolonemu  $\mathcal{N}_{jm}$  dla  $\hat{J}_+$  wynika z relacji (20.7):

$$\langle j, m | \hat{J}_- | j, m + 1 \rangle^\dagger = \langle j, m + 1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle. \quad (20.22)$$

Aby wyliczyć  $\mathcal{N}_{jm}$  skorzystamy z trzeciej relacji komutacji (20.8):

$$\langle j, m | [\hat{J}_+, \hat{J}_-] | j, m \rangle = 2\hbar \langle j, m | \hat{J}_3 | j, m \rangle, \quad (20.23)$$

z której wynika, że

$$|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 - |\mathcal{N}_{jm}|^2 = 2m. \quad (20.24)$$

Rozwiązaniem tego równania różnicowego jest

$$|\mathcal{N}_{jm}|^2 = C - m(m + 1). \quad (20.25)$$

Stąd

$$|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 = C - m(m - 1) \quad (20.26)$$

i dalej

$$|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 - |\mathcal{N}_{jm}|^2 = C - m(m - 1) - C + m(m + 1) = 2m.$$

Tym samym sprawdziliśmy, że (20.25) jest rozwiązaniem (20.24). Stała  $C$  musi zależeć od  $j$ , gdyż  $\mathcal{N}_{jm}$  zależy od  $j$ . Aby znaleźć tę zależność zauważmy, że norma  $|\mathcal{N}_{jm}|^2 > 0$ , a więc  $m$  nie może być za duże. Istnieją dwa rozwiązania równania

$$m(m + 1) - C = m^2 + m - C = 0 \quad (20.27)$$

a mianowicie

$$m_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4C}}{2}, \quad m_2 = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4C}}{2}. \quad (20.28)$$

Zauważmy, że

$$-m_1 = m_2 + 1. \quad (20.29)$$

Dla

$$m_2 < m < m_1. \quad (20.30)$$

$|\mathcal{N}_{jm}|^2$  pozostaje nieujemne. Zdziałanie  $\hat{J}_+$  na stan o  $m_1$  daje zero

$$\hat{J}_+ |j, m_1\rangle = \mathcal{N}_{jm_1} |j, m_1 + 1\rangle = 0. \quad (20.31)$$

Podobnie

$$\hat{J}_- |j, m_2 + 1\rangle = \mathcal{N}_{jm_2}^* |j, m_2\rangle = 0. \quad (20.32)$$

A zatem dopuszczalne  $m$  leży w przedziale

$$-m_1 = m_2 + 1 \leq m \leq m_1, \quad (20.33)$$

gdzie równość  $m_2 + 1 = -m_1$  wynika z (20.28). Wartości  $m$  zmieniają się od  $-m_1$  do  $m_1$  co 1, a zatem

$$m_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (20.34)$$

Tylko dla takich  $m_1$  obniżając  $m_1$  krokami o 1 ( $m_1, m_1 - 1, m_1 - 2, \dots$ ) „trafimy” w  $m = -m_1$ .

Dla  $m = m_1$   $|\mathcal{N}_{jm}|^2 = 0$ , a zatem

$$C = m_1(m_1 + 1). \quad (20.35)$$

Do wyliczenia pozostało nam  $\lambda_j$ . W tym celu obliczmy

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \langle j, m | \frac{1}{2} \hat{J}_+ \hat{J}_- + \frac{1}{2} \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_3^2 |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 \left\{ \frac{1}{2} (|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 + |\mathcal{N}_{jm}|^2) + m^2 \right\} \\ &= \hbar^2 \left\{ \frac{1}{2} (C - m(m+1) + C - (m-1)m) + m^2 \right\} \\ &= \hbar^2 C \end{aligned} \quad (20.36)$$

Stąd

$$\lambda_j = m_1(m_1 + 1) = j(j + 1). \quad (20.37)$$

Wybierając rzeczywiste fazy dla  $\mathcal{N}_{jm}$  otrzymujemy

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \quad (20.38)$$

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle. \quad (20.39)$$

A zatem otrzymaliśmy wynik z poprzedniego rozdziału, ale  $j$  może być półówkowe.

## 20.2 Reprezentacja macierzowa

Zauważmy, że związki (20.38,20.39) oraz (20.9) definiują reprezentację macierzową dla operatorów  $\hat{J}_\pm$  (a zatem też dla  $\hat{J}_{1,2}$ ) i  $\hat{J}_3$ . Operatory  $\hat{J}_{1,2}$  można wyliczyć ze związku

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_2 = \frac{i}{2}(\hat{J}_- - \hat{J}_+). \quad (20.40)$$

### 20.2.1 $j = 1/2$ – macierze Pauliego

Dla  $j = 1/2$  mamy tylko dwa możliwe stany  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  i  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ . Korzystając ze wzorów (20.38,20.39) mamy

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= 0, & \hat{J}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ \hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= 0, & \hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (20.41)$$

Wybierając reprezentację

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (20.42)$$

dostajemy zatem

$$\hat{J}_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (20.43)$$

co daje

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (20.44)$$

oraz

$$\hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (20.45)$$

Macierze

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (20.46)$$

(oznaczane też jako  $\tau$ ) noszą nazwę *macierzy Pauliego*. Są to macierze hermitowskie, które – jak łatwo się przekonać – spełniają reguły komutacji

$$[\sigma_k, \sigma_l] = 2i\epsilon_{klm}\sigma_m \quad (20.47)$$

co wynika z relacji

$$\hat{J}_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k. \quad (20.48)$$

Warto też na koniec podać użyteczny wzór

$$\sigma_k\sigma_l = \mathbf{1}\delta_{kl} + i\epsilon_{klm}\sigma_m, \quad (20.49)$$

gdzie  $\mathbf{1}$  jest macierzą jednostkową  $2 \times 2$ .

### 20.2.2 $j = 1$

Dla  $j = 1$  mamy trzy możliwe stany, dla których wygodnie wybrać następującą reprezentację

$$|1, 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (20.50)$$

W tej reprezentacji

$$\hat{J}_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hbar\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (20.51)$$

a co za tym idzie

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad (20.52)$$

oraz

$$\hat{J}_3 = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (20.53)$$

Warto zauważyć, że nie jest to jedyna możliwa reprezentacja macierzowa. Dowolna transformacja unitarna  $U$  przeprowadza  $\hat{J}_k$  w inne macierze  $\hat{J}_k^U$

$$\hat{J}_k^U = U^\dagger \hat{J}_k U, \quad (20.54)$$

które spełniają te same relacje komutacji (20.5) i dla których  $\hat{J}^2$  pozostaje takie samo, bo  $U^\dagger U = 1$ .

Inną spotykaną często w literaturze reprezentację trójwymiarową operatorów krętu tworzą całkowicie antysymetryczne macierze

$$\left(\hat{S}_k\right)_{lm} = -i\hbar \epsilon_{lkm}. \quad (20.55)$$

Spełniają one relacje komutacji (20.5), co łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}_p, \hat{S}_q\right]_{km} &= -\hbar^2 \{\epsilon_{pkl}\epsilon_{qlm} - \epsilon_{qkl}\epsilon_{plm}\} \\ &= -\hbar^2 \{\delta_{pm}\delta_{kq} - \delta_{pq}\delta_{km} - \delta_{qm}\delta_{kp} + \delta_{qp}\delta_{km}\} \\ &= -\hbar^2 \{\delta_{pm}\delta_{kq} - \delta_{qm}\delta_{kp}\} \\ &= -\hbar^2 \epsilon_{pql}\epsilon_{lmk} \\ &= i\hbar\epsilon_{pql}(-i\hbar\epsilon_{lkm}) \\ &= i\hbar\epsilon_{pql} \left(\hat{S}_l\right)_{km}, \end{aligned} \quad (20.56)$$

gdzie skorzystaliśmy z tożsamości

$$\epsilon_{pkl}\epsilon_{lqm} = \delta_{pq}\delta_{km} - \delta_{pm}\delta_{kq}. \quad (20.57)$$

Warto wspomnieć, że udowodniliśmy przy okazji *tożsamość Jacobiego*:

$$\epsilon_{pkl}\epsilon_{qlm} - \epsilon_{qkl}\epsilon_{plm} = \epsilon_{pql}\epsilon_{lmk}. \quad (20.58)$$

W tej reprezentacji żadna z macierzy  $\hat{S}_k$  nie jest diagonalna. Jak się przekonamy reprezentacja ta pojawia się w naturalny sposób przy badaniu obrotu wektorowej funkcji falowej.

### 20.3 Związek z funkcjami kulistymi

Ograniczmy się teraz do całkowitych  $j = l$ . Jak wiemy funkcja falowa w reprezentacji położeń daje się zapisać jako (8.24)

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \alpha \rangle,$$

gdzie  $\alpha$  oznacza zespół liczb kwantowych, odpowiadających wzajemnie komutującym operatorom. W przypadku ruchu w potencjale sferycznym mamy trzy takie operatory, które dają się jednocześnie zdiagnozować:

$$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3 \rightarrow \alpha = (n, l, m) \quad (20.59)$$

którym odpowiadają trzy liczby kwantowe:  $n, l$  i  $m$ . Zatem funkcja falowa dla ruchu w polu centralnym przyjmuje postać

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n, l, m \rangle = \langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle. \quad (20.60)$$

Po przejściu do zmiennych sferycznych funkcja falowa rozseparowała się na część radialną i kątową, przy czym część radialna nie zależała od  $m$ :

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = u_{n,l}(r)Y_m^l(\theta, \varphi). \quad (20.61)$$

Ponieważ zarówno funkcje kuliste, jak i stany  $|l, m\rangle$  diagonalizują operatory  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_3$ , i nie zależą od innych zmiennych ani od innych liczb kwantowych, zatem zachodzi

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle. \quad (20.62)$$

Podobnej relacji nie da się napisać dla funkcji radialnej.

Na koniec warto przypomnieć, że stany  $|\theta, \varphi\rangle$  są związane z miarą kątową  $\sin \theta d\theta d\varphi = d \cos \theta d\varphi$ . Zatem na przykład rozkład jedynki przyjmuje postać

$$\mathbf{1} = \int |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| d \cos \theta d\varphi. \quad (20.63)$$