16 Moment pędu

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

$$
\begin{aligned}
L_x &= y\,p_z - z\,p_y, \\
L_y &= z\,p_x - x\,p_z, \\
L_z &= x\,p_y - y\,p_x,
\end{aligned}
\tag{16.1}
$$

lub

$$
L_i = \varepsilon_{ijk} r_j p_k. \tag{16.2}
$$

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:

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\
\hat{L}_y &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\
\hat{L}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned}
\tag{16.3}
$$

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

$$
[\hat{L}_k, \hat{L}_l] = i\hbar\,\epsilon_{klm}\hat{L}_m. \tag{16.4}
$$

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

$$
\left[\hat{J}_k, \hat{J}_l\right] = i\hbar\,\epsilon_{klm}\hat{J}_m. \tag{16.5}
$$

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 (16.5) dopuszcza szerszą klasę reprezentacji niż orbitalny moment pędu.

16.1 Spektrum

Wprowadźmy operatory

$$
\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2,\ \hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2. \tag{16.6}
$$

Operatory te nie są hermitowskie, ale zachodzi

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-,\ \hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+. \tag{16.7}$$

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:

$$\left[\hat{J}_3, \hat{J}_+\right] = \hbar \hat{J}_+,\ \left[\hat{J}_3, \hat{J}_-\right] = -\hbar \hat{J}_-,\ \left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar \hat{J}_3. \tag{16.8}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \left|j,m\right\rangle &= \hbar^2 \lambda_j \left|j,m\right\rangle, \\ \hat{J}_3 \left|j,m\right\rangle &= \hbar m \left|j,m\right\rangle. \end{aligned} \tag{16.9}$$

O stanach tych założymy, że są znormalizowane:

$$\left\langle j',m'\right| j,m\rangle = \delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{16.10}$$

i że tworzą układ zupełny

$$1 = \sum_{j,m} \left|j,m\right\rangle \left\langle j,m\right| \overset{\text{ozn}}{=} \left|j,m\right\rangle \left\langle j,m\right|. \tag{16.11}$$

gdzie zakładamy sumę po j i m.

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

$$\left|\alpha\right\rangle = J_+ \left|j,m\right\rangle,\ \left|\beta\right\rangle = J_- \left|j,m\right\rangle \tag{16.12}$$

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

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

$$\hat{J}^2 \begin{matrix}\left|\alpha\right\rangle \\ \left|\beta\right\rangle\end{matrix} = \hat{J}^2 J_\pm \left|j,m\right\rangle = J_\pm \hat{J}^2 \left|j,m\right\rangle = J_\pm \hbar^2 \lambda_j \left|j,m\right\rangle = \hbar^2 \lambda_j \begin{matrix}\left|\alpha\right\rangle \\ \left|\beta\right\rangle\end{matrix}. \tag{16.13}$$

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

$$\left\langle j,m'\right| \left[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm\right] \left|j,m\right\rangle = \pm\hbar \left\langle j,m'\right| \hat{J}_\pm \left|j,m\right\rangle. \tag{16.14}$$

W tym celu rozpiszmy komutator i skorzystajmy z (16.11). Rozpatrzmy najpierw $\hat{J}_+$:

$$\left\langle j,m'\right| \hat{J}_3 \left|j,m''\right\rangle \left\langle j,m''\right| \hat{J}_+ \left|j,m\right\rangle - \left\langle j,m'\right| \hat{J}_+ \left|j,m''\right\rangle \left\langle j,m''\right| \hat{J}_3 \left|j,m\right\rangle = \hbar \left\langle j,m'\right| \hat{J}_+ \left|j,m\right\rangle, \tag{16.15}$$

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:

$$\hbar m' \langle j,m'| \hat{J}_+ |j,m\rangle - \hbar m \langle j,m'| \hat{J}_+ |j,m\rangle = \hbar \langle j,m'| \hat{J}_+ |j,m\rangle \tag{16.16}$$

i dalej

$$(m' - m - 1) \langle j,m'| \hat{J}_+ |j,m\rangle = 0. \tag{16.17}$$

Widzimy zatem, że

$$\langle j,m'| \hat{J}_+ |j,m\rangle \neq 0 \qquad \text{dla} \qquad m' = m+1. \tag{16.18}$$

Podobnie, zauważając, że dla $\hat{J}_-$ zmienia się tylko znak po prawej stronie (16.16) otrzymujemy

$$(m' - m + 1) \langle j,m'| \hat{J}_- |j,m\rangle = 0, \tag{16.19}$$

a co za tym idzie

$$\langle j,m'| \hat{J}_- |j,m\rangle \neq 0 \qquad \text{dla} \qquad m' = m-1. \tag{16.20}$$

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

$$|\alpha\rangle = \hat{J}_+ |j,m\rangle = \hbar \mathcal{N}_{jm} |j,m+1\rangle\,, \qquad |\beta\rangle = \hat{J}_- |j,m+1\rangle = \hbar \mathcal{N}^*_{jm} |j,m\rangle\,. \tag{16.21}$$

Fakt, że współczynnik $\mathcal{N}_{jm}$ dla $\hat{J}_-$ jest równy sprzężeniu zespolonemu $\mathcal{N}_{jm}$ dla $\hat{J}_+$ wynika z relacji (16.7):

$$\langle j,m| \hat{J}_- |j,m+1\rangle^\dagger = \langle j,m+1| \hat{J}_+ |j,m\rangle\,. \tag{16.22}$$

Aby wyliczyć $\mathcal{N}_{jm}$ skorzystamy z trzeciej relacji komutacji (16.8):

$$\langle j,m| \left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] |j,m\rangle = 2\hbar \langle j,m| \hat{J}_3 |j,m\rangle\,, \tag{16.23}$$

z której wynika, że

$$|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 - |\mathcal{N}_{jm}|^2 = 2m. \tag{16.24}$$

Rozwiązaniem tego równania różnicowego jest

$$|\mathcal{N}_{jm}|^2 = C - m(m+1). \tag{16.25}$$

Stąd

$$|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 = C - m(m-1) \tag{16.26}$$

i dalej

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

Tym samym sprawdziliśmy, że (16.25) jest rozwjązaniem (16.24). Stała C musi zależeć od j, gdyż $\mathcal{N}_{jm}$ zależy od j. Aby znalęć tę zależność zauważmy, że norma $|\mathcal{N}_{jm}|^2 > 0$, a więc m nie może być za duże. Istnieją dwa rozwiązania równania

$$C - m(m+1) = C - m^2 - m = 0 \tag{16.27}$$

a mianowicie

$$m_1 = \frac{-1+\sqrt{1+4C}}{2}, \qquad m_2 = \frac{-1-\sqrt{1+4C}}{2}. \tag{16.28}$$

Zauważmy, że

$$-m_1 = m_2 + 1. \tag{16.29}$$

Dla

$$m_2 < m < m_1$$

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

$$\hat{J}_+ |j, m_1\rangle = \mathcal{N}_{jm_1} |j, m_1 + 1\rangle = 0. \tag{16.30}$$

Podobnie

$$\hat{J}_- |j, m_2 + 1\rangle = \mathcal{N}^*_{jm_2} |j, m_2\rangle = 0. \tag{16.31}$$

A zatem dopuszczalne m leży w przedziale

$$-m_1 = m_2 + 1 \leq m \leq m_1, \tag{16.32}$$

gdzie równość $m_2 + 1 = -m_1$ wynika z (16.28). Wartości m zmieniają się od $-m_1$ do m_1 co 1, a zatem

$$m_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots \tag{16.33}$$

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

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

$$C = m_1(m_1 + 1). \tag{16.34}$$

Do wyliczenia pozostało nam λ_j. W tym celu obliczmy

$$\begin{aligned}
\langle j, m| \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \langle j, m| \frac{1}{2}\hat{J}_+\hat{J}_- + \frac{1}{2}\hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_3^2 |j, m\rangle \\
&= \hbar^2 \left\{ \frac{1}{2}\left(|\mathcal{N}_{jm-1}|^2 + |\mathcal{N}_{jm}|^2\right) + m^2 \right\} \\
&= \hbar^2 \left\{ \frac{1}{2}\left(C - m(m+1) + C - (m-1)m\right) + m^2 \right\} \\
&= \hbar^2 C
\end{aligned} \tag{16.35}$$

Stąd

$$\lambda_j = m_1(m_1 + 1) = j(j+1), \tag{16.36}$$

gdzie przez j oznaczyliśmy największą możliwą wartość przyjmowaną przez m (poprzednio m_1).

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

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, |j, m+1\rangle\,, \tag{16.37}$$

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, |j, m-1\rangle\,. \tag{16.38}$$

A zatem otrzymaliśmy wynik znany dla całkowitych l, ale j może być połówkowe.

16.2 Reprezentacja macierzowa

Zauważmy, że związki (16.37,16.38) oraz (16.9) 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

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \; \hat{J}_2 = \frac{i}{2}(\hat{J}_- - \hat{J}_+). \tag{16.39}$$

16.2.1 $j = 1/2$ – macierze Pauliego

Dla $j = 1/2$ mamy tylko dwa możliwe stany $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ i $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$. Korzystając ze wzorów (16.37,16.38) mamy

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle &= 0, \qquad \hat{J}_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \\
\hat{J}_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle &= 0, \qquad \hat{J}_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.
\end{aligned} \tag{16.40}$$

Wybierając reprezentację

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{16.41}$$

dostajemy zatem

$$\hat{J}_+ = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hbar\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{16.42}$$

co daje

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \tag{16.43}$$

oraz

$$\hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}^2 = \hbar^2\frac{3}{4}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{16.44}$$

Macierze

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{16.45}$$

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

$$[\sigma_k, \sigma_l] = 2i\epsilon_{klm}\sigma_m \tag{16.46}$$

co wynika z relacji

$$\hat{J}_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k. \tag{16.47}$$

Warto też na koniec podać użyteczny wzór

$$\sigma_k\sigma_l = \mathbf{1}\delta_{kl} + i\epsilon_{klm}\sigma_m, \tag{16.48}$$

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

16.2.2 $j = 1$

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

$$|1,1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1,0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1,-1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{16.49}$$

W tej reprezentacji

$$\hat{J}_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hbar\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{16.50}$$

a co za tym idzie

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \tag{16.51}$$

oraz

$$\hat{J}_3 = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{16.52}$$

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

$$\hat{J}_k^U = U^\dagger \hat{J}_k U, \tag{16.53}$$

które spełniają te same relacje komutacji (16.5) 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

$$\left(\hat{S}_k\right)_{lm} = -i\hbar\, \epsilon_{lkm}. \tag{16.54}$$

Spełniają one relacje komutacji (16.5), co łatwo zprawdzić bezpośredim rachunkiem

$$\begin{aligned}
\left[\hat{S}_p, \hat{S}_q\right]\Big|_{km} &= -\hbar^2 \left\{\epsilon_{pkl}\epsilon_{qlm} - \epsilon_{qkl}\epsilon_{plm}\right\} \\
&= -\hbar^2 \left\{\delta_{pm}\delta_{kq} - \delta_{pq}\delta_{km} - \delta_{qm}\delta_{kp} + \delta_{qp}\delta_{km}\right\} \\
&= -\hbar^2 \left\{\delta_{pm}\delta_{kq} - \delta_{qm}\delta_{kp}\right\} \\
&= -\hbar^2 \epsilon_{pql}\epsilon_{lmk} \\
&= i\hbar\epsilon_{pql}\left(-i\hbar\epsilon_{lkm}\right) \\
&= i\hbar\epsilon_{pql}\left(\hat{S}_l\right)_{km},
\end{aligned} \tag{16.55}$$

gdzie skorzystaliśmy z tożsamości

$$\epsilon_{pkl}\epsilon_{lqm} = \delta_{pq}\delta_{km} - \delta_{pm}\delta_{kq}. \tag{16.56}$$

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.

16.3 Związek z funkcjami kulistymi

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

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

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

$$\hat{H},\ \hat{L}^2,\ \hat{L}_3 \to \alpha = (n, l, m) \tag{16.57}$$

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

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}\,) = \langle \vec{r}|\, n, l, m\rangle = \langle r, \theta, \varphi|\, n, l, m\rangle\,. \tag{16.58}$$

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

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}\,) = u_{n,l}(r) Y^l_m(\theta, \varphi). \tag{16.59}$$

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

$$Y^l_m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi|\, l, m\rangle\,. \tag{16.60}$$

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

$$\mathbf{1} = \int |\theta, \varphi\rangle\, \langle \theta, \varphi|\; d\cos\theta\, d\varphi. \tag{16.61}$$