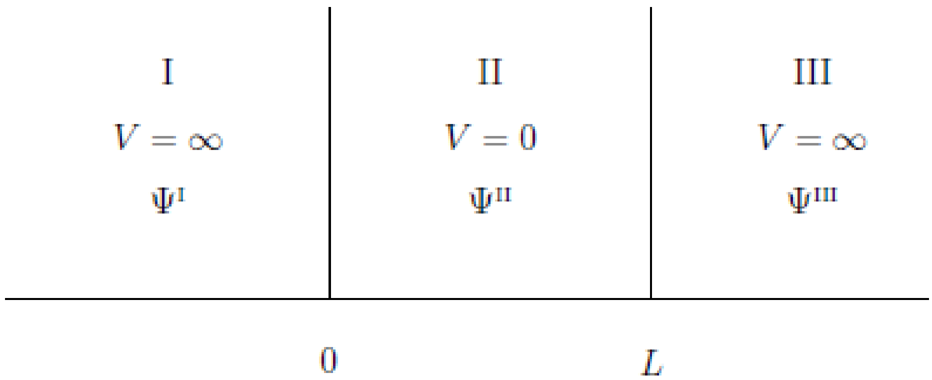
Do wykładu II

Ścisłe rozwiązania równania Schrödingera:

- cząstka w pudle potencjału
- oscylator harmoniczny
- rotator sztywny
- atom wodoru (i jon wodoropodobny)

Cząstka w jednowymiarowym pudle potencjału



Poza pudłem o długości L - energia potencjalna nieskończenie wielka.

m - masa cząstki

Należy rozwiązać równanie Schrödingera:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{1}$$

gdzie $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ to operator całkowitej energii układu (hamiltonian, operator Hamiltona) - suma operatorów: energii kinetycznej $\hat{T}$ i potencjalnej $\hat{V}$, E to energia układu, a ψ funkcja falowa.

Postać $\hat{H}$ zależy od układu. W klasycznym wyrażeniu na sumę energii kinetycznej i potencjalnej, trzeba zamienić pęd na operator pędu i położenie na operator położenia.

Dla obszaru II z rysunku V=0. Wystarczy zatem rozważyć energię kinetyczną E_{kin}

$$E_{kin} = \frac{mv_x^2}{2} = \frac{p_x^2}{2m} \tag{2}$$

gdzie v_x oznacza prędkość, a p_x - pęd cząstki poruszającej się wzdłuż osi x

Podstawienie:

$$p_x \to \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \tag{3}$$

gdzie p_x - składowa x pędu, $\hat{p}_x$ - operator składowej x pędu, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - zredukowana stała Plancka, $i = \sqrt{-1}$ - jednostka urojona, $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ - pochodna po zmiennej x.

Wynik działania operatora $\hat{p}_x$ na funkcję f(x) to pochodna tej funkcji względem x pomnożona przez liczbę $-i\hbar$ (albo $\frac{\hbar}{i} = \frac{-\hbar}{-i} = \frac{i^2\hbar}{-i} = -i\hbar$).

Operator energii kinetycznej $\hat{T}$ dla tej cząstki:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}. \tag{4}$$

Operator Hamiltona dla cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału jest równy $\hat{T}$, zatem należy rozwiązać równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{5}$$

WAŻNE: poza pudłem funkcja falowa jest równa zero.

Po pomnożeniu obu stron równania przez $-\frac{2m}{\hbar^2}$:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{6}$$

$\frac{2mE}{\hbar^2}$ - liczba

Szukane: $\psi(x)$

Jak wiadomo:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \sin kx}{\mathrm{d}x^2} = -k^2 \sin kx \tag{7}$$

Podobnie:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \cos kx}{\mathrm{d}x^2} = -k^2 \cos kx \tag{8}$$

Rozwiązanie ogólne równania różniczkowego:

$$\psi(x) = a \sin kx + b \cos kx \tag{9}$$

gdzie a i b stałe, których wartości należy ustalić

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Funkcja $\psi(x)$ musi być porządna (klasy Q)!

Musi być ciągła.

Dla $x < 0$ $\psi(x) = 0$, czyli musi być $\psi(0) = 0$

Dla $x > L$ $\psi(x) = 0$, czyli musi być $\psi(L) = 0$

$$\psi(0) = a \sin k0 + b \cos k0 = b \tag{10}$$

zatem $b = 0,$

czyli

$$\psi(x) = a \sin kx$$
$$\psi(L) = 0$$
$$\psi(L) = a \sin kL$$

$\sin kL = 0$, gdy $kL = n \cdot \pi$ i n to liczba całkowita

Zatem $k = \frac{n\pi}{L}$

$$\psi(x) = a \sin \frac{n\pi x}{L} \tag{11}$$

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między x_1 a x_2

$$\int_{x_1}^{x_2} \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = P(x_1 < x < x_2) \tag{12}$$

Zatem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{13}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{14}$$

$$\int_{-\infty}^{0} 0\mathrm{d}x + \int_{0}^{L} (a \sin \frac{n\pi x}{L})^2\mathrm{d}x + \int_{L}^{\infty} 0\mathrm{d}x = 1 \tag{15}$$

$$a^2 \int_{0}^{L} (\sin \frac{n\pi x}{L})^2\mathrm{d}x = 1 \tag{16}$$

$$a = \sqrt{\frac{2}{L}} \tag{17}$$

Normalizacja funkcji falowej

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{18}$$

Uwaga: $k = \frac{n\pi}{L}$ $\qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

stąd

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{19}$$

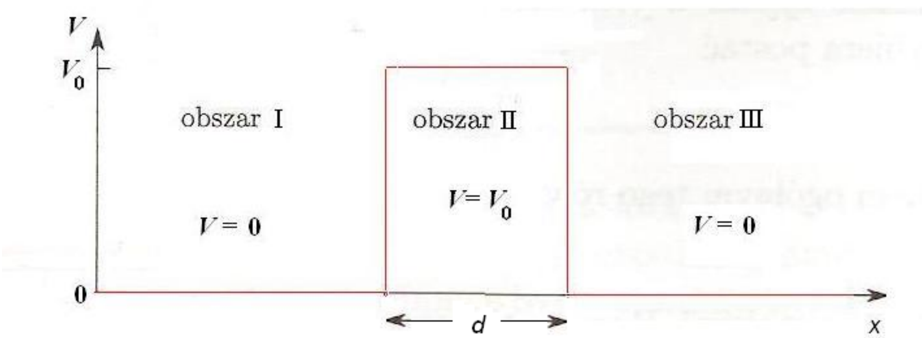
m - masa cząstki

Energia cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału zależy od liczby kwantowej n.

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \tag{20}$$

Funkcje falowe, opisujące stany cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału, także zależą od liczby kwantowej n.

Bariera potencjału o skończonej wysokości i szerokości



Cząstka o masie m poruszająca się wzdłuż osi x natrafia na barierę potencjału o skończonej wysokości $V(x) = V_0$

Przed barierą (w obszarze I) $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{21}$$

gdzie m - masa cząstki, $\hbar = h/2\pi$ (h - stała Plancka)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{22}$$

$$\Psi = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}, \text{ gdzie k} = \frac{\sqrt{\mathrm{2mE}}}{\hbar} \tag{23}$$

W obszarze II $V(x) = V_0$, zatem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V_0\psi = E\psi \tag{24}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = (E - V_0)\psi \tag{25}$$

dla $V_0 < E$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi \tag{26}$$

$$\Psi = B_1 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, \text{ gdzie k}' = \frac{\sqrt{\mathrm{2m(E - V_0)}}}{\hbar} \tag{27}$$

dla $V_0 > E$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi \tag{28}$$

$e^{k"x} \to \infty$ dla $x \to \infty$ (nie jest porządna)

$$\Psi = C_2 e^{-k"x}, \quad \text{gdzie } k" = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{29}$$

Poza barierą (w obszarze III) ponownie $V(x) = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{30}$$

$$\Psi = De^{ikx}, \text{ gdzie } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{31}$$

Efekt tunelowy - cząstka może przedostać się za barierę potencjału o skończonej wysokości i szerokości, nawet jeśli jej energia jest mniejsza od wysokości bariery.

Skaningowa mikroskopia tunelowa

Scanning Tunnelling Microscopy (STM)

Binning i Rohrer - Nagroda Nobla 1986

Cząstka w trójwymiarowym pudle potencjału.

$V(x, y, z) = 0$ dla $0 < x < L$, $0 < y < L$ i $0 < z < L$

$V(x, y, z) = \infty$, jeśli $x < 0, x > L$, $y < 0, y > L$, $z < 0$ lub $z > L$

Wewnątrz pudła potencjału (m - masa cząstki):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi = E\Psi \tag{32}$$

Metoda rozdzielenia zmiennych

Hamiltonian: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$

jest sumą trzech operatorów, z których każdy zależy od innej zmiennej niezależnej: x, y albo z

Można przyjąć: $\Psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$,

Wtedy: $\hat{H}\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$

$$(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z)\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = \varepsilon\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

$\psi_2(y)\psi_3(z)\hat{H}_x\psi_1(x) + \psi_1(x)\psi_3(z)\hat{H}_y\psi_2(y)+$

$+\psi_1(x)\psi_2(y)\hat{H}_z\psi_3(z) = E\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$

Po podzieleniu obu stron równania przez $\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$

$$\frac{\hat{H}_x\psi_1(x)}{\psi_1(x)} + \frac{\hat{H}_y\psi_2(y)}{\psi_2(y)} + \frac{\hat{H}_z\psi_3(z)}{\psi_3(z)} = E$$

musi być:

$$\frac{\hat{H}_x\psi_1(x)}{\psi_1(x)} = E_1$$

$$\frac{\hat{H}_y\psi_2(y)}{\psi_2(y)} = E_2$$

$$\frac{\hat{H}_z\psi_3(z)}{\psi_3(z)} = E_3$$

czyli

$$\hat{H}_x\psi_1(x) = E_1\psi_1(x)$$

$$\hat{H}_y\psi_2(y) = E_2\psi_2(y)$$

$$\hat{H}_z\psi_3(z) = E_3\psi_3(z)$$

Trzy równania dla cząstki w jednowymiarowym pudle potencjału

Funkcja falowa:

$$\Psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\frac{n_1\pi x}{L} \sin\frac{n_2\pi y}{L} \sin\frac{n_3\pi z}{L} \tag{33}$$

Energia: $E_{n_1n_2n_3} = \frac{(n_1^2+n_2^2+n_3^2)h^2}{8mL^2}$

$n_1 = 1,2,3,\ldots,\ n_2 = 1,2,3,\ldots,\ n_3 = 1,2,3,\ldots$

Oscylator harmoniczny

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi + \frac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi \tag{34}$$

k - stała siłowa

$$\text{siła:} \qquad F = -kx$$

Dwa atomy: x_1 - położenie atomu 1; x_2 - położenie atomu 2

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}k(x_1 - x_2 - x_e)^2\right]\Phi = \varepsilon\Phi \tag{35}$$

gdzie x_e - położenie równowagowe

Współrzędne środka masy: $(m_1 + m_2)X_s = m_1x_1 + m_2x_2$

czyli: $X_s = \frac{m_1}{m_1+m_2}x_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}x_2$

Współrzędne ruchu względnego (odchylenie od położenia równowagi) : $x = x_1 - x_2 - x_e$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X_s}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} \tag{36}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X_s}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x} \tag{37}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial}{\partial x} \tag{38}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X_s} - \frac{\partial}{\partial x} \tag{39}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X_s^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial^2}{\partial X_s \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{40}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X_s^2} - -\frac{2m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial^2}{\partial X_s \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{41}$$

Po podstawieniu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\frac{\partial^2}{\partial X_s^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\Phi = \varepsilon\Phi \tag{42}$$

gdzie $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ - masa zredukowana

$$\left(\hat{H}_1(X_s) + \hat{H}_2(x)\right)\Phi = \varepsilon\Phi \tag{43}$$

Hamiltonian składa się z dwóch części:

$\hat{H}_1$ zależy tylko od X_s, $\hat{H}_2$ zależy tylko od x (X_s i x niezależne).

Metoda **rozdzielenia zmiennych**.

Założenie: $\Phi = F(X_s)\Psi(x)$

Po podstawieniu do równania Schrödingera:

$$\Psi\hat{H}_1 F + F\hat{H}_2\Psi = \varepsilon F\Psi$$

Po podzieleniu obu stron przez $F\Psi$:

$$\frac{\hat{H}_2(x)\Psi}{\Psi} = \varepsilon - \frac{\hat{H}_1(X_s)F}{F} \tag{44}$$

Musi być zatem: $\frac{\hat{H}_2(x)\Psi}{\Psi} = E$

$\varepsilon - \frac{\hat{H}_1(X_s)F}{F} = E$ (gdzie E - pewna stała)

$$\varepsilon - \frac{\hat{H}_1(X_s)F}{F} = E \tag{45}$$

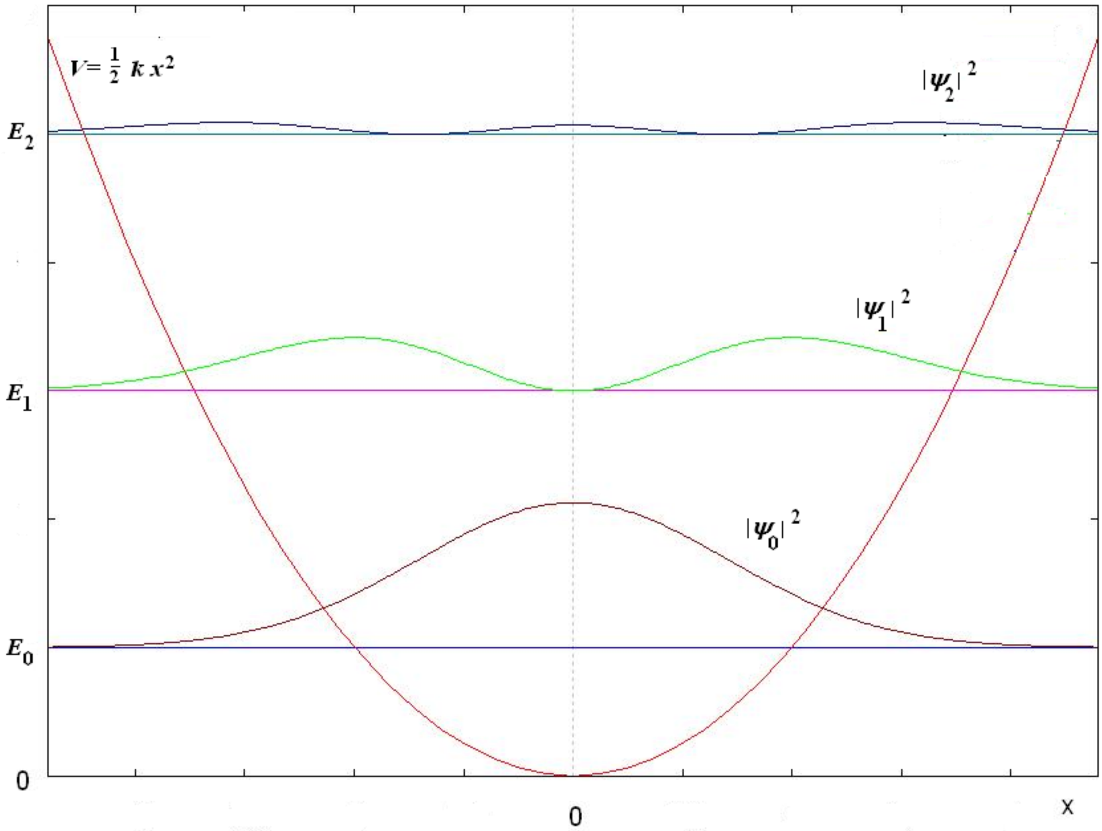
$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}X_s^2}F = (\varepsilon - E)F \tag{46}$$

ruch translacyjny środka masy

$$\frac{\hat{H}_2(x)\Psi}{\Psi} = E \tag{47}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi + \frac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi \tag{48}$$

równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego o masie μ



Energia potencjalna, poziomy energetyczne i kwadraty funkcji falowych dla oscylatora harmonicznego

- energia oscylatora harmonicznego zmienia się w sposób kwantowy (nieciągły):

  $E_\upsilon = h\nu_0(\upsilon + \frac{1}{2})$, $\upsilon = 0, 1, 2, \ldots$ - liczba kwantowa oscylacji

  $\nu_0 = (2\pi)^{-1}\sqrt{k/\mu}$ - częstość drgań klasycznego oscylatora harmonicznego

- energia kwantowego oscylatora harmonicznego nie może nigdy być równa zeru (**zerowa energia oscylacji**)

- w stanie podstawowym najbardziej prawdopodobne jest znalezienie kwantowego oscylatora harmonicznego w pobliżu punktu równowagi

- przenikanie do obszarów niedostępnych według praw fizyki klasycznej (tu poza klasyczne punkty zwrotu)

$\Psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{\frac{-y^2}{2}}$

$\Psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2}y\mathrm{e}^{\frac{-y^2}{2}}$

$\Psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}}(2y^2 - 1)\mathrm{e}^{\frac{-y^2}{2}}$ itd. ,

gdzie $y = \sqrt{\alpha}x$, $\alpha = \frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}$

wielomiany Hermite'a

Rotator sztywny

Układ dwóch cząstek, poruszających się w taki sposób, że ich odległość pozostaje stała

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2\right)\Psi = \varepsilon\Psi \tag{49}$$

gdzie

$$\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\ ;\ \Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \tag{50}$$

ale $\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2} = R$

Po przejściu do współrzędnych środka masy: $X_s = \frac{m1}{m_1+m_2}x_1 + \frac{m2}{m_1+m_2}x_2$; $Y_s = \frac{m1}{m_1+m_2}y_1 + \frac{m2}{m_1+m_2}y_2$ i $Z_s = \frac{m1}{m_1+m_2}z_1 + \frac{m2}{m_1+m_2}z_2$; i współrzędnych ruchu względnego: $x = x_1 - x_2$; $y = y_1 - y_2$ i $z = z_1 - z_2$ można łatwo dokonać oddzielenia ruchu translacyjnego środka masy.

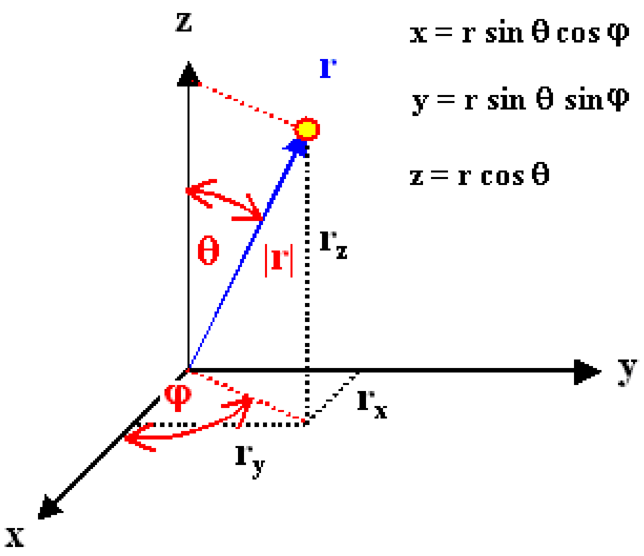
Równanie Schrödingera dla ruchu wewnętrznego (względnego) w układzie środka mas:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi = E\Psi \tag{51}$$

gdzie μ - masa zredukowana, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

przy czym $\sqrt{x^2+y^2+z^2} = R$

Współrzędne sferyczne: $0 \le r \le \infty$, $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$



Operator Laplace'a we współrzędnych sferycznych:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{52}$$

$r = R$ (stałe), więc hamiltonian ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \tag{53}$$

$\mu R^2 = I$ moment bezwładności

Należy rozwiązać równanie:

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y(\theta, \varphi) = EY(\theta, \varphi) \tag{54}$$

po pomnożeniu obu stron równania przez $\frac{2I}{\hbar^2}$

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \tag{55}$$

gdzie $\lambda = \frac{2IE}{\hbar^2}$

$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ - możliwe rozdzielenie zmiennych.

Mnożąc obie strony równania przez $\frac{\sin\theta^2}{\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}$ otrzymuje się:

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \cdot \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -\lambda \sin\theta^2 \tag{56}$$

czyli

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \lambda \sin\theta^2 = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \cdot \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} \tag{57}$$

Jedna strona równania zależy tylko od zmiennej θ, a druga tylko od zmiennej $\varphi \rightarrow$ każda z tych części musi być równa stałej, którą oznaczymy M^2

Równanie zawierające zmienną φ ma postać:

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)} \cdot \frac{\mathrm{d}^2 \Phi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} = M^2 \tag{58}$$

czyli

$$\frac{\mathrm{d}^2 \Phi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} + M^2 \Phi(\varphi) = 0 \tag{59}$$

Rozwiązanie, to funkcje: $\Phi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{iM\varphi}$, które są **jednoznaczne tylko dla** $M = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

Równanie zawierające zmienną θ ma bardziej złożoną postać. Rozwiązania znane. Sens fizyczny mają tylko rozwiązania, które uzyskuje się przy spełnieniu warunku prowadzącego do zależności:

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad \text{gdzie } J = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \ldots \tag{60}$$

J - **liczba kwantowa rotacji**

Funkcje falowe dla rotatora sztywnego:

$$Y_J^M(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{J,|M|} P_J^{|M|}(\cos\theta) \mathrm{e}^{iM\varphi} \tag{61}$$

J= 0, 1, 2,…, $M = -J,\ -J+1,\ \ldots$, -1, 0, 1, 2, …, $J-1,\ J$

$N_{J,|M|}$ - czynnik normalizacyjny

Harmoniki sferyczne:

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{i\varphi}$$

$$Y_1^{-1} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{-i\varphi}$$

$$\vdots$$

E_0 - jeden stan Y_0^0

E_1 - trzy stany, opisywane przez Y_1^{-1}, Y_1^0 i Y_1^1

E_2 - pięć stanów

Poziomy rotacyjne są $2J+1$-krotnie zdegenerowane ($2J+1$ stanów (funkcji falowych) o tej samej energii)

Energia klasycznego rotatora $E = \frac{L^2}{2I}$, gdzie L - moment pędu

czyli $L^2 = 2IE$

zatem $\hat{L}^2 = 2I\hat{H}$ - operator kwadratu momentu pędu;

$\hat{H}Y_J^M(\theta,\varphi) = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)Y_J^M(\theta,\varphi)$, gdzie $J = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ldots$

zatem

$$\hat{L}^2 Y_J^M(\theta,\varphi) = J(J+1)\hbar^2 Y_J^M(\theta,\varphi) \tag{62}$$

Operator współrzędnej L_z wektora momentu pędu (składowej L_z momentu pędu)

$L_z = xp_y - yp_x$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$$

We współrzędnych sferycznych: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\hat{L}_z Y_J^M(\theta,\varphi) = M\hbar Y_J^M(\theta,\varphi) \tag{63}$$

Harmoniki sferyczne są funkcjami własnymi operatorów $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$

Dla rotatora sztywnego energia, kwadrat momentu pędu i rzut momentu pędu na wyróżniony kierunek w przestrzeni mają jednocześnie ściśle określone wartości.

Rotator sztywny - model obracającej się cząsteczki dwuatomowej

Stan układu opisuje f_1 -funkcja własna operatora $\hat{\alpha}$ reprezentującego wielkość mechaniczną A.

$$\hat{\alpha} f_1 = a_1 f_1 \tag{64}$$

a_1 -wynik pomiaru wielkości mechanicznej A

Co uzyskamy w wyniku pomiaru innej wielkości mechanicznej B, którą reprezentuje operator $\hat{\beta}$?

Jeśli funkcja f_1 jest także funkcją własną $\hat{\beta}$, to w wyniku pomiaru otrzymamy odpowiadającą jej wartość własną operatora $\hat{\beta}$

$$\hat{\beta} f_1 = b_1 f_1 \tag{65}$$

A jaki będzie wynik pomiaru B, jeśli funkcja f_1 nie jest funkcją własną $\hat{\beta}$?

$$\hat{\beta} g_1 = b_1 g_1, \quad \hat{\beta} g_2 = b_2 g_2, \quad \hat{\beta} g_3 = b_3 g_3 \tag{66}$$

Wyniku pomiaru B nie można ściśle określić (jest to jedna z wartości własnych $\hat{\beta}$)

Wartości wielkości mechanicznych A i B można zawsze jednocześnie ściśle określić, jeśli każda funkcja własna $\hat{\alpha}$ jest także funkcją własną operatora $\hat{\beta}$

Można udowodnić: jeśli iloczyn $\hat{\alpha}$ i $\hat{\beta}$ jest przemienny, czyli dla dowolnej funkcji f:

$$\hat{\beta}\hat{\alpha} f = \hat{\alpha}\hat{\beta} f \tag{67}$$

to każda funkcja własna operatora $\hat{\alpha}$ jest także funkcją własną $\hat{\beta}$ (i odwrotnie, jeśli operatory mają wspólny zbiór funkcji własnych, to są przemienne).

Przykład: operatory: $\hat{x}{=}x\cdot$ i $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$

Iloczyn tych operatorów nie jest przemienny, np.

$$x \cdot (-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^x) = (-i\hbar x e^x) \tag{68}$$

natomiast

$$-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x e^x) = -i\hbar(e^x + x e^x) \tag{69}$$

Nie można jednocześnie ściśle określić położenia cząstki i jej pędu (zasada nieoznaczoności Heisenberga)

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\tfrac{\partial}{\partial y} - y\tfrac{\partial}{\partial x})$$
$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\tfrac{\partial}{\partial z} - z\tfrac{\partial}{\partial y})$$

Zatem: $\quad \hat{L}_x\hat{L}_z \neq \hat{L}_z\hat{L}_x;$

Podobnie: $\hat{L}_x\hat{L}_y \neq \hat{L}_y\hat{L}_x \quad$ i $\quad \hat{L}_y\hat{L}_z \neq \hat{L}_z\hat{L}_y$

Nie można dokładnie określić jednocześnie wartości żadnych dwóch składowych momentu pędu.

Można określić tylko kwadrat momentu pędu i jedną ze składowych.