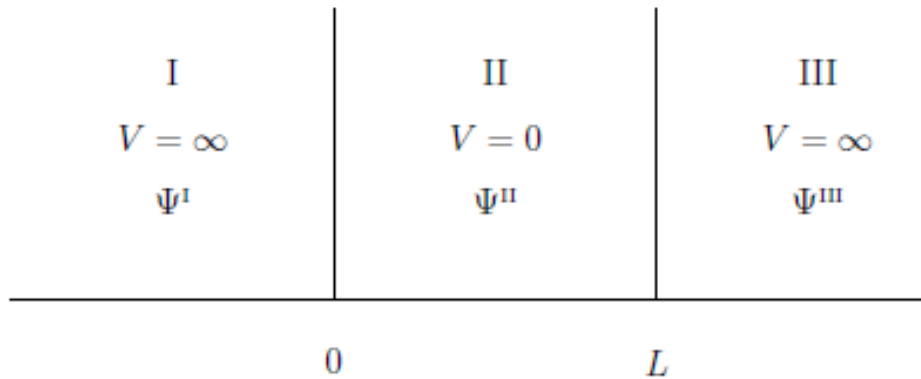


Do wykładu II

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:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (1)$$

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}

$$E_{kin} = \frac{mv_x^2}{2} = \frac{p_x^2}{2m} \quad (2)$$

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

Podstawienie:

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad (3)$$

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, $\frac{d}{dx}$ - 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:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (4)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (5)$$

WAŻNE: poza pudłem funkcja falowa jest równa zero.

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \quad (6)$$

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

Szukane: $\psi(x)$

Jak wiadomo:

$$\frac{d^2 \sin kx}{dx^2} = -k^2 \sin kx \quad (7)$$

Podobnie:

$$\frac{d^2 \cos kx}{dx^2} = -k^2 \cos kx \quad (8)$$

Rozwiązanie ogólne równania różniczkowego:

$$\psi(x) = a \sin kx + b \cos kx \quad (9)$$

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 $\psi(L) = 0$

$$\psi(0) = a \sin k0 + b \cos k0 = b \quad (10)$$

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

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

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki między x_1 a x_2

$$\int_{x_1}^{x_2} \psi^*(x)\psi(x)dx = P(x_1 < x < x_2) \quad (12)$$

Zatem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \quad (13)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)dx = 1 \quad (14)$$

$$\int_{-\infty}^0 0dx + \int_0^L (a \sin \frac{n\pi x}{L})^2 dx + \int_0^{\infty} 0dx = 1 \quad (15)$$

$$a^2 \int_0^L (\sin \frac{n\pi x}{L})^2 dx = 1 \quad (16)$$

$$a = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (17)$$

Normalizacja funkcji falowej

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

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

stąd

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

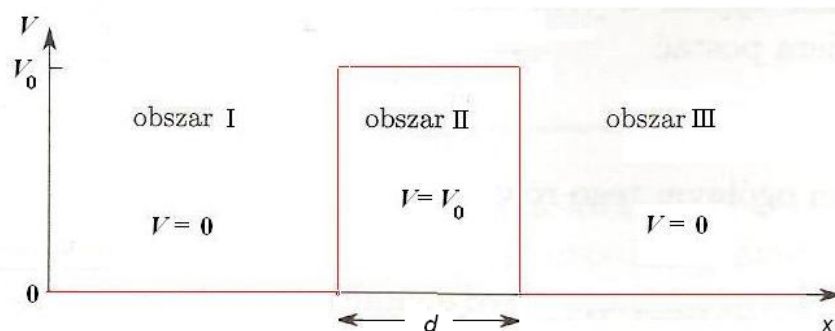
m - masa cząstki

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

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

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) $V(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (21)$$

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \quad (22)$$

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad (24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0)\psi \quad (25)$$

dla $V_0 < E$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi \quad (26)$$

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

dla $V_0 > E$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi \quad (28)$$

$e^{k''x} \rightarrow \infty$ dla $x \rightarrow \infty$ (nie jest porządna)

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (30)$$

$$\Psi = D e^{ikx}, \text{ gdzie } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (31)$$

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.

$$V(x, y, z) = 0 \text{ dla } 0 < x < L, 0 < y < L \text{ i } 0 < z < L$$

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

Wewnątrz pudła potencjału (m - masa cząstki):

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

Metoda rozdzielania zmiennych

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

$$n_1 = 1, 2, 3, \dots, \quad n_2 = 1, 2, 3, \dots, \quad n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

Oscylator harmoniczny

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

k - stała siłowa

$$\text{siła: } F = -kx$$

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

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

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) : $x = x_1 - x_2 - x_e$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X_s}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} \quad (36)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X_s}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} \quad (37)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_s} + \frac{\partial}{\partial x} \quad (38)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_s} - \frac{\partial}{\partial x} \quad (39)$$

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

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

Po podstawieniu:

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

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

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

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 $F\Psi$:

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

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

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

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

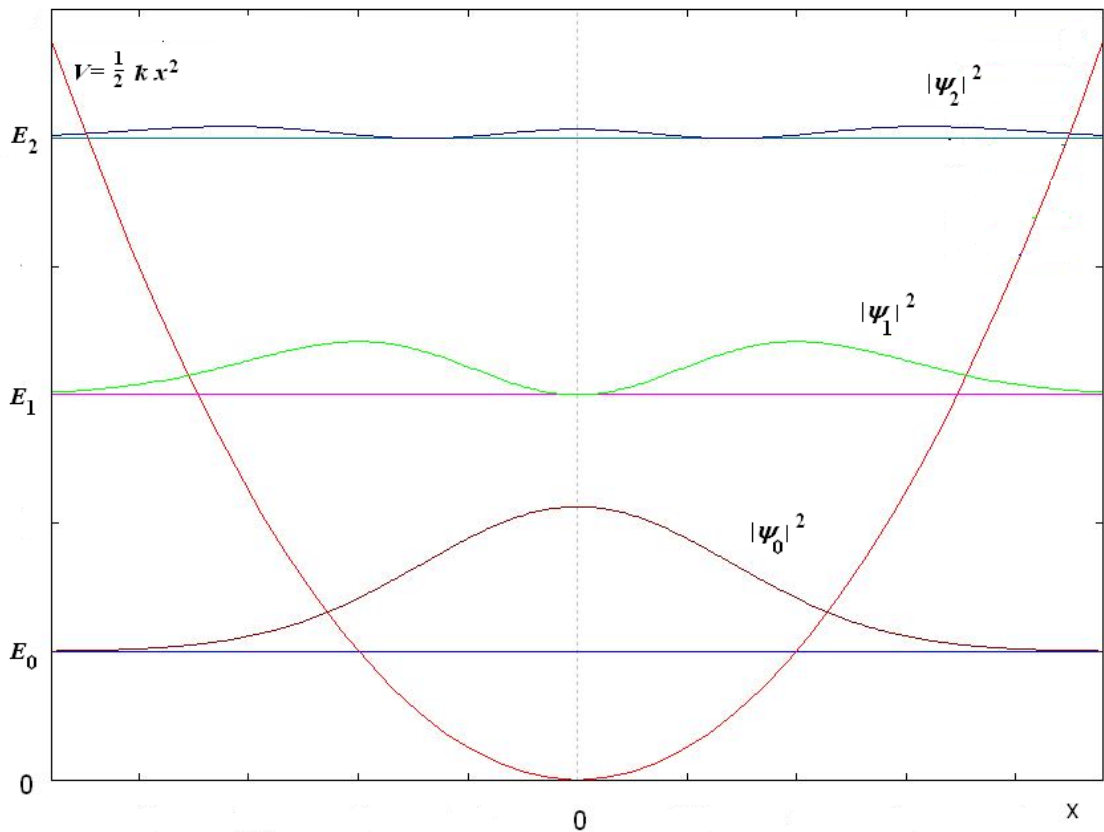
$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{d^2}{dX_s^2} F = (\varepsilon - E)F \quad (46)$$

ruch translacyjny środka masy

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

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + \frac{1}{2} kx^2 \Psi = E\Psi \quad (48)$$

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):

$$E_v = h\nu_0(v + \frac{1}{2}), v = 0, 1, 2, \dots - \text{liczba kwantowa oscylacji}$$

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

- energia kwantowego oscylatora harmonicznego nie może nigdy być równa zero (**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)

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

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

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

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

wielomiany Hermite'a

Rotator sztywny

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

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

gdzie

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

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

Po przejściu do współrzędnych środka masy: $X_s = \frac{m_1}{m_1+m_2}x_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}x_2$; $Y_s = \frac{m_1}{m_1+m_2}y_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}y_2$ i $Z_s = \frac{m_1}{m_1+m_2}z_1 + \frac{m_2}{m_1+m_2}z_2$; 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.

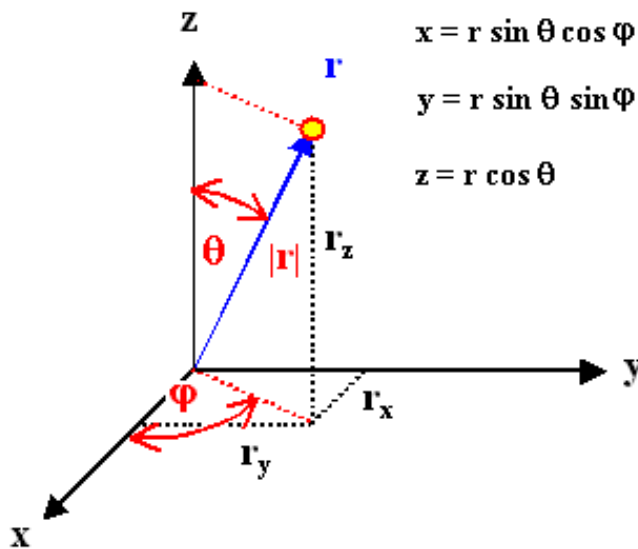
Równanie Schrödingera dla ruchu wewnętrznego (względnego) w układzie środka mas:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi = E\Psi \quad (51)$$

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: $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$



Operator Laplace'a we współrzędnych sferycznych:

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

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

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

$\mu R^2 = I$ moment bezwładności

Należy rozwiązać równanie:

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

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

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

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

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

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

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

czyli

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

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:

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

czyli

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

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

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

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

J - liczba kwantowa rotacji

Funkcje falowe dla rotatora sztywnego:

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

$J = 0, 1, 2, \dots, M = -J, -J+1, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, J-1, J$

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

Harmoniki sferyczne:

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \\ Y_1^0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta \\ Y_1^1 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ Y_1^{-1} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ &\vdots \end{aligned}$$

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 $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

zatem

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

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

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

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 .

$$\hat{\alpha}f_1 = a_1f_1 \quad (64)$$

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 $\hat{\beta}$

$$\hat{\beta}f_1 = b_1f_1 \quad (65)$$

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

$$\hat{\beta}g_1 = b_1g_1, \quad \hat{\beta}g_2 = b_2g_2, \quad \hat{\beta}g_3 = b_3g_3 \quad (66)$$

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 :

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}f = \hat{\alpha}\hat{\beta}f \quad (67)$$

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 $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$

Iloczyn tych operatorów nie jest przemienny, np.

$$x \cdot (-i\hbar\frac{d}{dx}e^x) = (-i\hbar xe^x) \quad (68)$$

natomiast

$$-i\hbar\frac{d}{dx}(xe^x) = -i\hbar(e^x + xe^x) \quad (69)$$

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

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

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

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

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

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

Można określić tylko kwadrat momentu pędu i jedną ze składowych.