VRTILNA KOLIČINA V QM

(1)

– v klasični mehaniki KM $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ $\Longrightarrow$ zamenjava z operatorji $\vec{r} \to \vec{r}$ $\quad \vec{p} \to -i\vec{\nabla}$ (atomske enote)

kartezični sistem xyz $\quad \vec{\nabla} = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$ $\quad \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ enotski vektorji vzdolž osi x, y, z

OPERATOR VRTILNE KOLIČINE

$$\hat{\vec{l}} = -i\vec{r} \times \vec{\nabla} = \left(-i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)$$

• ni težko pokazati: $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z$, $[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$

Analogija s KM deluje, ko gre za operator ORBITALNE VRTILNE KOLIČINE, kaj pa spinske?

Bolj splošna definicija za OPERATOR VRTILNE KOLIČINE V QM:

$$\hat{\vec{j}} = \vec{e}_x \hat{j}_x + \vec{e}_y \hat{j}_y + e_z \hat{j}_z, \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_k] = i l_p \quad i,k,p \text{ ciklično permutiramo}$$

Definicija gre preko komponent in ne direktno. Izkaže se, da je lastna vrednost operatorja $\hat{\vec{j}}$ nič, takoj ko je vsaj ena od lastnih vrednosti $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ različna od nič. Ključni so torej operatorji za komponente!

$$i\hat{j}_z f = i\underset{\neq 0}{\mu_z} f = i(\hat{j}_x \hat{j}_y - \hat{j}_y \hat{j}_x) f = i(\hat{j}_x \mu_y - \hat{j}_y \mu_x) f = i(\mu_y \hat{j}_x - \mu_x \hat{j}_y) f$$

$$= i(\mu_y \mu_x - \mu_x \mu_y) f = 0 \quad \text{DRŽI LE, ČE } f = 0$$

Nemogoče je najti lastno funkcijo $\hat{j}_x, \hat{j}_y$ in $\hat{j}_z$ hkrati, ki bi imela vsaj eno lastno vrednost od $\mu_x, \mu_y, \mu_z \neq 0$

Hitro lahko pokažemo, da kvadrat operatorja vrtilne količine

$$\hat{j}^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 \quad \text{komutira s projekcijami} \quad [\hat{j}_i, \hat{j}^2] = 0$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_x] = \hat{j}^2 \hat{j}_x - \hat{j}_x \hat{j}^2 = j_x^3 - j_x^3 + j_y^2 j_x - j_x j_y^2 + j_z^2 j_x - j_x j_z^2$$

$$= j_y (j_y j_x) - (j_x j_y) j_y + j_z (j_z j_x) - (j_x j_z) j_z$$

$$= j_y (j_x j_y - i j_z) - (i j_z + j_y j_x) j_y + j_z (i j_y + j_x j_z) - (j_z j_x - i j_y) j_z = 0$$

Ker sta $\hat{j}^2$ in j_z hermitska operatorja, ki KOMUTIRATA, obstaja poln sistem funkcij, ki so hkrati lastne funkcije $\hat{j}^2$ in $\hat{j}_z$

① Hermitski operator ima realne lastne vrednosti:

$$\alpha \psi = a \psi \qquad \langle \psi | \alpha | \psi \rangle = a \langle \psi | \psi \rangle = a = \langle \alpha \psi | \psi \rangle = a^* \langle \psi | \psi \rangle$$

② Lastne funkcije hermitskega operatorja, ki pripadajo različnim lastnim vrednostim so ORTOGONALNE

$$\alpha \phi_1 = a_1 \phi_1 \qquad \alpha \phi_2 = a_2 \phi_2$$

$$\left.\begin{aligned} &\langle \phi_2 | \alpha | \phi_1 \rangle = \underline{\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle a_1}, \quad \langle \phi_1 | \alpha | \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle a_2 \\ &\langle \phi_2 | \alpha | \phi_1 \rangle = a_2^* \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle^* = \underline{a_2 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle} \end{aligned}\right\} \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle (a_1 - a_2) = 0$$

KAKŠNE SO TOREJ "SKUPNE" LASTNE FUNKCIJE IN LASTNE VREDNOSTI?

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{j}^2 \psi(\gamma, \mu, \mu_z) &= \mu \psi(\gamma, \mu, \mu_z) \\ \hat{j}_z \psi(\gamma, \mu, \mu_z) &= \mu_z \psi(\gamma, \mu, \mu_z) \end{aligned}}$$

Komutacijske relacije $[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hat{j}_z$ (ciklično) so dovolj, da dobimo spekter lastnih vrednosti in izračunamo matrične elemente operatorjev $\hat{j}^2$ in $\hat{j}_z$!

Vpeljemo $\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$ ← Ni hermitski operator, $\hat{j}_+^\dagger = \hat{j}_-$, $\hat{j}_-^\dagger = \hat{j}_x$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hat{j}_\pm \, , \quad [\hat{j}^2, \hat{j}_\pm] = 0$$

$$\hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z$$

$$\hat{j}_+\hat{j}_- = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z$$

Sledi

$$\hat{j}^2\hat{j}_\pm \psi(\mu,\mu_z) = \mu\,\hat{j}_\pm\psi(\mu,\mu_z)$$

$$\hat{j}_z\hat{j}_\pm\psi(\mu,\mu_z) = (\mu \pm 1)\,\hat{j}_\pm\psi(\mu,\mu_z)$$

1. Lastne vrednosti so navzgor omejene:

- Naj bo j največja lastna vrednost $\hat{j}_z$

$$\hat{j}_+\psi(\mu,j) = 0 \to \hat{j}_-\hat{j}_+\psi(\mu,j) = 0 = (\mu - j^2 - j)\,\psi(\mu,j) \to \underline{\mu = j(j+1)}$$

- Naj bo $j-r$ najmanjša lastna vrednost $\hat{j}_z$

$$\hat{j}_-\psi(\mu, j-r) = 0 \to \hat{j}_+\hat{j}_-\psi(\mu, j-r) \to \mu - (j-r)^2 + (j-r) = 0$$

$$\to r^2 - r(2j-1) - 2j = 0$$

Ena sama pozitivna rešitev $r = 2j$. Če je j največja, je $-j$ najmanjša lastna vrednost $\hat{j}_z$.

$\mu = j(j+1) \to 2j+1$ lastnih funkcij $\psi(\mu, m)$, kjer je $m = j, j-1, \dots -j$.

SAMO CELA IN POLOVIČNA VREDNOST ZA j DOVOLJENA.

$j = 0, 1, 2, \dots \to -2, -1, 0, 1, 2$ $\quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \to -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ $\quad j = \frac{1}{4}$ $\quad \cancel{-\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$ $\quad 2j \in \mathbb{N}$

$$\hat{j}^2|\gamma jm\rangle = j(j+1)|\gamma jm\rangle \qquad (j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots)$$
$$\hat{j}_z|\gamma jm\rangle = m|\gamma jm\rangle \qquad (m = -j, -j+1, \ldots j)$$

Matrični elementi operatorjev

neznano število

$$\hat{j}_+|jm\rangle = a_{jm}|j\,m+1\rangle$$
$$(\hat{j}_+|jm\rangle)^* = \langle jm|\hat{j}_+^+ = \langle jm|\hat{j}_- = a_{jm}^*\langle j\,m+1|$$
$$\langle jm|\hat{j}_-\hat{j}_+|jm\rangle = |a_{jm}|^2\langle j\,m+1|j\,m+1\rangle$$
$$(j(j+1) - m(m+1))\langle jm|jm\rangle = |a_{jm}|^2\langle j\,m+1|j\,m+1\rangle$$
$$|a_{jm}|^2 = j(j+1) - m(m+1)$$

Od nič različni matrični elementi operatorjev $\hat{j}_+$, $\hat{j}_-$ in $\hat{j}_z$ so torej:

$$\boxed{\begin{aligned}\langle j\,m\pm 1|\hat{j}_\pm|jm\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\\ \langle jm|\hat{j}_z|jm\rangle &= m\end{aligned}}$$

SFERIČNI TENZORSKI OPERATORJI

Doslej smo se ukvarjali z delovanjem operatorjev vrtilne količine na stanja. Zdaj bomo uvedli množico operatorjev t_q^k $(q = k, k-1, \ldots -k)$, ki se pri delovanju operatorja vrtilne količine obnašajo enako kot lastna stanja operatorja vrtilne količine.

Delovanje operatorja na drugi operator opišemo s komutatorjem:
Po dogovoru deluje operator na vse, kar se nahaja desno od njega, recimo $\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\hat{l}_z f \psi = \hat{l}_z (f\psi) = -i\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} f\right)\psi - i f\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi\right)$$

$$\hat{l}_z f \psi = \hat{l}_z f \, \psi + f \hat{l}_z \psi \rightarrow \hat{l}_z f \psi = (\hat{l}_z f - f \hat{l}_z)\psi$$

Ker je ψ poljubna funkcija sledi $\hat{l}_z f = [\hat{l}_z, f]$.
Če želimo efekt $\hat{l}_z$ na funkcijo f, moramo izračunati komutator!
Argumentacija velja tudi, če je f operator.
DEFINICIJA SF. TENZORSKIH OPERATORJEV REDA k:

$$[\hat{j}_z, t_q^k] = q\, t_q^k \qquad [\hat{j}_\pm, t_q^k] = \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}\; t_{q\pm 1}^k$$

Komponente q sferičnega tenzorskega operatorja se med sabo transformirajo podobno kot ustrezne lastna stanja operatorja vrtilne količine.
Očitno predstavlja množica operatorjev

$$\hat{j}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{j}_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{j}_x + i\hat{j}_y)$$

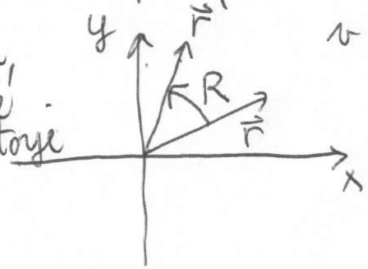
$$\hat{j}_0 = \hat{j}_z$$

$$\hat{j}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{j}_x - i\hat{j}_y)$$

komponente sferičnega tenzorskega operatorja reda 1.
Definicijo STO preko komutacijskih relacij je predlagal Racah (1942).

ALTENATIVNA DEFINICIJA operatorja vrtilne količine in STO preko drobnih rotacij v prostoru

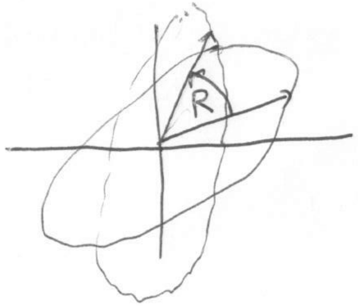
Rotacija, ki deluje na vektorje



v 2D: $\vec r = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ $\vec r\,' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ $\vec r\,' = R\vec r$

matrika, ki transformira $\vec r \to \vec r\,'$

rotacija, ki deluje na funkcijo



$\psi(x,y) = C$ $\psi'(x,y) = P(R)\psi(x,y)$

Primer: $\psi(x,y) \equiv x$

Pozitivna rotacija za 90° privede do nove funkcije

$$\psi'(x,y) \equiv y = P(90^\circ)x$$

Dodaten vrtež za $+90^\circ$

$$\psi''(x,y) = P(90^\circ)y = -x$$

V polarnih koordinatah $\psi'(r,\varphi) = P(\alpha)\psi(r,\varphi) = \psi(r,\varphi-\alpha)$

Isto velja v 3D, če gre za vrtež okrog osi z:

$$P_z(\alpha)\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r,\theta,\varphi-\alpha)$$

$\hat l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$, $\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) = \lim\limits_{\delta\varphi\to 0}\frac{\psi(r,\theta,\varphi)-\psi(r,\theta,\varphi-\delta\varphi)}{\delta\varphi} = \lim\limits_{\delta\varphi\to 0}\left(\frac{1-P_z(\delta\varphi)}{\delta\varphi}\right)\psi(r,\theta,\varphi)$

$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{1-P_z(\delta\varphi)}{\delta\varphi}$ $(\delta\varphi\to 0) \to \hat l_z = -i\left(\frac{1-P_z(\delta\varphi)}{\delta\varphi}\right)$

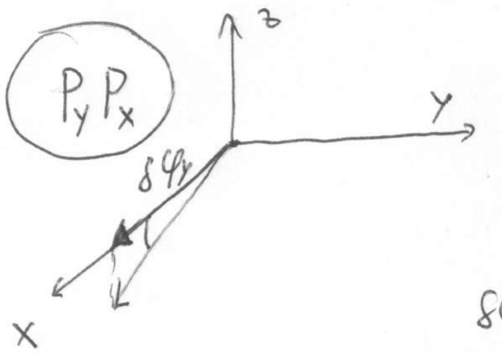
Zdaj zahtevamo, da velja isto za z-komponento operatorja vrtilne količine nasploh

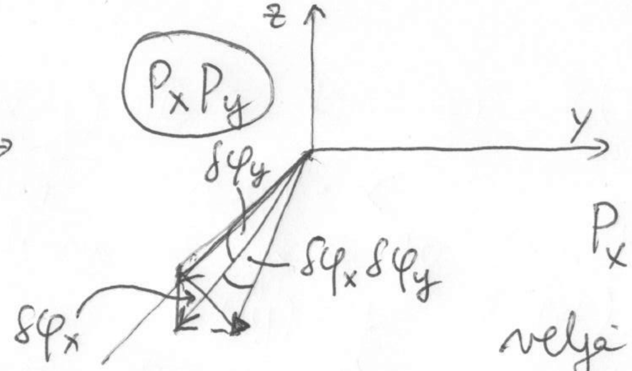
7

$$\hat{j}_z = -i\left(\frac{1-P_z(\delta\varphi)}{\delta\varphi}\right) \rightarrow \boxed{P_z(\delta\varphi) = 1 - i\,\delta\varphi\,\hat{j}_z}$$

Pokažemo lahko, da je ta definicija konsistentna s komutatorsko definicijo

$P_x(\delta\varphi_x)$, $P_y(\delta\varphi_y)$: operatorja rotacije ne komutirata





$$P_x(\delta\varphi_x)P_y(\delta\varphi_y) \simeq P_z(\delta\varphi_x\delta\varphi_y)P_y(\delta\varphi_y) \times P_x(\delta\varphi_x)$$

velja do 2. reda v $\delta\varphi_x, \delta\varphi_y$

$$(1-i\delta\varphi_x\hat{j}_x)(1-i\delta\varphi_y\hat{j}_y) = (1-i\delta\varphi_x\delta\varphi_y\hat{j}_z)(1-i\delta\varphi_y\hat{j}_y)(1-i\delta\varphi_x\hat{j}_x)$$

$$\rightarrow -\delta\varphi_x\delta\varphi_y\hat{j}_x\hat{j}_y = -i\delta\varphi_x\delta\varphi_y\hat{j}_z - \delta\varphi_x\delta\varphi_y\hat{j}_y\hat{j}_x \rightarrow [\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hat{j}_z$$

Kako se pod vplivom rotacije transformirajo lastna stanja operatorja vrtilne količine in kako sferični tenzorski operatorji?

$$P_z(\delta\varphi)|jm\rangle = (1-im\,\delta\varphi)|jm\rangle$$

Kako pa operatorji?

Naj α operator povezuje $\psi_i = \alpha \phi_i$. Zarotimo obe funkciji $\psi_i' = P\psi_i$, $\phi_i' = P\phi_i$ in definirajmo transformiran operator α' preko relacije $\psi_i' = \alpha' \phi_i'$:

(8)

$$P^{-1}\psi_i' = \alpha P^{-1}\phi_i' \rightarrow \alpha' = P\alpha P^{-1} \quad \text{podobnostna transformacija}$$

Potrebujemo inverzni operator rotacije

$$[P_z(\delta\varphi)]^{-1} = P_z(-\delta\varphi) = 1 + i\delta\varphi \hat{j}_z$$

$$(t_q^k)' = P_z(\delta\varphi)\, t_q^k\, P_z^{-1}(\delta\varphi) = (1 - i\delta\varphi \hat{j}_z)\, t_q^k\, (1 + i\delta\varphi \hat{j}_z)$$

Ko zanemarimo člene višjega reda dobimo:

$$(t_q^k)' = t_q^k - i\delta\varphi[\hat{j}_z, t_q^k] = (1 - i\delta\varphi q)\, t_q^k$$

: analogna enačbi za transformacijo lastnih stanj vrtilne količine

STO in lastna stanja vrtilne količine se popolnoma enako transformirajo pri poljubni rotaciji v prostoru

Poljuben operator, ki se pri rotaciji transformira na enak način kot vektor (recimo r) je vektorski operator. Recimo ∇:

$$\nabla_x' = P_z(90^\circ)\nabla_x P_z(-90^\circ) = \nabla_y$$

$$\nabla_y' = P_z(90^\circ)\nabla_y P_z(-90^\circ) = -\nabla_x$$

$$\nabla_z' = P_z(90^\circ)\nabla_z P_z(-90^\circ) = \nabla_z$$

Transformacija pri rotaciji za končen kot

$$P_z(\varphi) = (1 - i\delta\varphi\, \hat{j}_z)^n = \left(1 - \frac{i\varphi}{n}\hat{j}_z\right)^n$$

$$\lim_{n\to\infty} \left(1-\frac{i\varphi}{n}\hat{j}_z\right)^n = e^{-i\varphi \hat{j}_z}$$

$$P_x(\theta) = e^{-i\theta \hat{j}_x}$$

$$P_x(\theta)|\gamma j m\rangle = \sum_{\gamma' j' m'} |\gamma' j' m'\rangle\langle \gamma' j' m'| e^{-i\theta \hat{j}_x}|\gamma j m\rangle$$

Uporabili smo relacijo polnosti: $\sum_{\gamma j m} |\gamma j m\rangle\langle\gamma j m| = 1$

Ker operator $\hat{j}_x$ komutira z $\hat{j}^2$, mora biti matrika diagonalna glede na j in neodvisna od γ (ker nima notranjih prostostnih stopenj)

Poljubne rotacije v 3D lahko predstavimo kot superpozicijo 3 rotacij okrog koordinatnih osi → Eulerjevi koti (Goldstein 1950, Edwards 1957)

Zarotirano funkcijo lahko zapišemo kot

$$P(\omega)|\gamma j m\rangle = \sum_{m'} |\gamma j m'\rangle D^j_{m'm}(\omega)$$

Operator poljubne rotacije

matrični element rotacijske matrike ($D^j_{m'm}$ je Wignerjeva rotacijska matrika)

Enako se transformirajo STO!

$$(t^l_q)' = P(\omega)\, t^l_q\, P^{-1}(\omega) = \sum_{q'} t^l_{q'} D^l_{q'q}(\omega)$$

Množica lastnih funkcij in tenzorskih operatorjev reda k je baza za reprezentacijo rotacijske grupe. Ta reprezentacija je <u>ireducibilna</u>, ker ni mogoče z kombinacijo baznih funkcij tvoriti reprezentacij nižje dimenzije.

$$D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-im'\alpha}\, d^j_{m'm}(\beta)\, e^{-im\gamma}$$

Vrtenje funkcije, vektorja, stanja.... v FIKSNEM KOORDINATNEM SISTEMU

$$\left.\begin{array}{l} -\ \text{za kot } \gamma \text{ okrog osi } z \\ -\ \text{za kot } \beta \text{ okrog osi } y \\ -\ \text{za kot } \alpha \text{ okrog osi } z \end{array}\right\} \text{POLJUBNA ROTACIJA}$$

$$d^j_{m'm}(\beta) = \sqrt{\frac{(j-m)!\,(j+m')!}{(j+m)!\,(j-m')!}}\;\frac{\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m}}{(m'-m)!}\;{}_2F_1\!\left(m'-j, -m-j; m'-m+1; -\mathrm{tg}^2\frac{\beta}{2}\right)$$

Hipergeometrijska vrsta

$${}_2F_1(a,b;c;z) = 1 + \frac{ab}{c}z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!\,c(c+1)}z^2 + \dots$$

Ker sta a in b negativni naravni števili ali nič je ${}_2F_1$ polinom končne stopnje $\min(|m'-j|, |m+j|)$