# Модуль 2: Квантовый формализм

**Лекция 9.**

# Основные постулаты квантовой механики

**Задача: формализовать описание движения микрочастиц.**

**1. Состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(x, y\ z, t)$ пространственных координат и времени**

**2. Каждой физической величине соответствует определенный оператор этой физической величины. Соотношения между операторами в квантовой механике аналогичны соотношениям между соответствующими физическими величинами в классической механике.**

**3. В результате измерения физической величины $f$ в любой квантовой системе могут быть получены только такие значения, которые являются собственными значениями оператора $\widehat{\Phi}$, соответствующего этой величине**

# Спектры собственных значений операторов

## 1. Спектр собственных значений оператора координаты непрерывный

**Доказательство:** Так как действие оператора координаты на волновую функцию сводится к умножению на координату x, то

$$\hat{\boldsymbol{x}}\Psi = x\Psi$$

Уравнение соответствует операторному равенству

$$\hat{\boldsymbol{x}} = x$$

Которое, по определению, выполняется для любого значения $\boldsymbol{x} \in (-\infty, +\infty)$

Аналогично для операторов $\hat{\boldsymbol{y}}$ и $\hat{\boldsymbol{z}}$.

## 2. Спектр собственных значений оператора проекции импульса непрерывный

**Доказательство:** Задача на собственные значения такого оператора сводится к решению уравнения

$$-\boldsymbol{i}\hbar\frac{\boldsymbol{\partial}\Psi}{\boldsymbol{\partial x}} = p_x\Psi$$

Из которого следует определить возможные значения $\boldsymbol{p_x}$

Решение уравнения

$$\Psi = Cexp\left(i\frac{p_x x}{\hbar}\right)$$

При всех действительных значениях $p_x$ определяет функцию $\Psi$. Поэтому собственные значения оператора $\widehat{p_x}$ образуют непрерывный спектр

$$p_x \in (-\infty, +\infty)$$

Аналогично для операторов $\widehat{p_y}$ и $\widehat{p_z}$.

# 3. Спектр собственных значений оператора проекции момента импульса дискретный

**Доказательство:** Направим полярную ось сферической системы координат вдоль z.

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi}=L_z\Psi$$

Общее решение этого уравнения

$$\Psi=C\exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right)$$

Собственные функции оператора $\widehat{L_z}$ должны быть однозначными функциями, а так как φ - циклическая переменная, то условие однозначности сводится к условию ее периодичности

$$\Psi(\varphi+2\pi)=\Psi(\varphi)$$

$$\exp\left(i\frac{L_z(\varphi+2\pi)}{\hbar}\right)=\exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right)$$

$$\exp\left(i\frac{L_z 2\pi}{\hbar}\right)=1 \quad \Rightarrow \quad \frac{L_z 2\pi}{\hbar}=2\pi m, \qquad m=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

Таким образом, получаем дискретный спектр собственных значений оператора проекции момента импульса

$$\boxed{L_z = m\hbar, m = 0, \pm 1, \pm 2, ..}$$

$m$ -магнитное квантовое число.

$$\Psi = Ce^{im\varphi}$$

Значение константы выбираем из условия нормировки

$$\boxed{\int_0^{2\pi} \Psi_m{}^* \Psi_m d\varphi = 1}$$

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m{}^* \Psi_m d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi$$

$$= 2\pi A^2 = 1$$

$$\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}}$$

$$\boxed{\begin{gathered}\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \\ \hat{L}_z \Psi_m = m\hbar \Psi_m\end{gathered}}$$

Соответствующий набор собственных функций и собственных значений оператора

Итак, проекция момента импульса на выделенное направление квантована, т.е. может принимать только значения кратные $\hbar$. Хотя направление оси $z$ произвольное, но после выбора $z$ – направления проекции $L_z$ квантуются и принимают определенные дискретные значения, а другие проекции остаются неопределенными.

# 8. Оператор квадрата момента импульса

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_z = \hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2$$

**Для анализа поведения частицы в центрально-симметричном поле, нужно записать оператор в сферической системе координат. Искать это выражение удобно, если представить оператор квадрата импульса в следующем виде:**

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) + \hat{L}_z{}^2$$

| | |
|---|---|
| $\hat{L}_+ \equiv \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)$ | оператор рождения |
| $\hat{L}_- \equiv \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)$ | оператор уничтожения |

**Воспользовавшись коммутационным соотношением**

$$\left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_+ = 2\hbar\hat{L}_z$$

**Доказать самим**

**представим оператор квадрата момента импульса в следующем виде**

$$\hat{L}^2 = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z^{\ 2} + \hbar\hat{L}_z = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^{\ 2} + \hbar\hat{L}_z$$

**Сделаем некоторые заготовки для производных по сферическим переменным:**

$$x = r\sin\theta\cos\varphi$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$
$$z = r\cos\theta$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} = \left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}\right)\Psi\cdot ctg\theta - z\frac{\partial\Psi}{\partial z}tg\theta$$

**Для того, чтобы определить оператор квадрата момента импульса, сначала определим оператор «рождения» в сферических координатах**

$$\begin{cases} z = r\cos\theta \\ x + iy = r\sin\theta\cos\varphi + ir\sin\theta\sin\varphi = r\sin\theta\cdot e^{i\varphi} \end{cases}$$

$$(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\Psi = -i\hbar\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) + i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]\Psi =$$

$$= \hbar\left[iz\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial x} - (x+iy)\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi =$$

**Выразим x, y, z в сферических координатах и воспользуемся**

$$re^{-i\varphi}cos\theta = \frac{rcos\theta sin\theta}{sin\theta}(cos\varphi - isin\varphi) = (x - iy)ctg\theta$$

$$= \hbar\left[rcos\theta\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - rsin\theta e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi =$$

$$= \hbar e^{i\varphi}\left[rcos\theta e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - rsin\theta\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi =$$

$$= \hbar e^{i\varphi}\left[(x - iy)ctg\theta\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - rsin\theta\frac{cos\theta}{cos\theta}\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi =$$

$$= \hbar e^{i\varphi}\left[\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y}\right)ctg\theta - tg\theta \cdot z\frac{\partial}{\partial z} + ictg\theta\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi =$$

**Воспользуемся заготовками и для оператора «рождения» имеем**

$$\boxed{\hat{L}_+\Psi = \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\Psi = \hbar e^{i\varphi}\left[\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + ictg\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi}\right]}$$

**Аналогично для оператора «уничтожения»**

$$\boxed{\hat{L}_- \Psi = \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\Psi = -\hbar e^{-i\varphi}\left[\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} - ictg\theta\,\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi}\right]}$$

**Следующий шаг – получим произведение операторов “рождения” и “уничтожения”:**

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) =$$

$$-\hbar^2 \cdot e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - ictg\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + ictg\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) =$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg^2\theta\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + i\left(ctg^2\theta - \frac{1}{sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

**Итак, для произведения операторов получаем выражение через сферические координаты:**

$$\boxed{\hat{L}_-\hat{L}_+ = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg^2\theta\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}$$

$$\hat{L}^2 = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z{}^2 + \hbar\hat{L}_z = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z{}^2 + \hbar\hat{L}_z$$

**Вспомним оператор проекции момента импульса**

$$\widehat{L_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \hat{L}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

**Подставим в оператор квадрата момента импульса и получаем окончательно в сферической системе координат:**

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) =$$
$$-\hbar^2\left(\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

**Выражение в скобках – угловая часть оператора Лапласа Δ - оператор Лежандра.**

# 4. Спектр собственных значений оператора квадрата момента импульса дискретный

**Доказательство:** оператор квадрата момента импульса пропорционален оператору Лежандра: $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda}$

Следовательно, решение уравнения на собственные значения оператора Лежандра определяет также **собственные функции и собственные значения оператора квадрата момента импульса**.

Легко увидеть, что оператор квадрата момента импульса коммутирует с оператором любой проекции момента импульса

$$\boxed{\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0}$$

Таким образом, наряду с квадратом момента импульса может быть определена и любая проекция (но только одна!).

Обычно выбирают проекцию момента импульса на ось $z$ – $L_z$.

Поскольку $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$, то у этих операторов могут быть **общие собственные функции.** Отличие собственных функций этих операторов состоит только в том, что собственная функция оператора $\hat{L}^2$ умножается на функцию от угла $\theta$ – $f(\theta)$

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = L^2\, Y(\theta,\varphi)$$
$$\hat{L}^2 f(\theta)\cdot e^{im\varphi} = L^2\, f(\theta)\cdot e^{im\varphi}$$

**Определим смысл операторов «рождения» и «уничтожения». Для этого подействуем оператором «рождения» на собственную функцию операторов $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$, а затем оператором $\hat{L}_z$, чтобы узнать, какова проекция момента импульса после действия оператора «рождения»**

$$\hat{L}_z\hat{L}_+ Y_m(\theta,\varphi) = \hat{L}_z\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)Y_m(\theta,\varphi) =$$

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \quad \left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \quad \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$= \left(i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_x\hat{L}_z + i\hat{L}_y\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_x\right)Y_m =$$

$$= \hat{L}_+(m\hbar + \hbar)Y_m = \hbar(m+1)\hat{L}_+ Y_m =$$

$L_z = m\hbar,$
$m = 0, \pm1, \pm2, ..$

**Таким образом, видно, что функция, образованная после действия оператора «рождения» («уничтожения») , есть собственная функция оператора $\hat{L}_z$ с собственным значением $\hbar(m+1)$.**

Итак, получаем: оператор $\hat{L}_+$ увеличивает проекцию момента импульса на ħ, а оператор $\hat{L}_-$ уменьшает на ħ:

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{L}}_+ Y_m = Y_{m+1} \\ \hat{\boldsymbol{L}}_- Y_m = Y_{m-1} \end{cases}$$

Далее рассуждаем следующим образом. Собственное значение $\hat{L}^2$ дает квадрат длины вектора момента импульса, а $L_z$ - это проекция момента импульса, равная $m\hbar$. Очевидно, что проекция вектора не может быть больше длины вектора. Пусть максимальное значение проекции равно: $|m| = l$ , т.е.:

$$\hat{L}_z Y_m(\theta,\varphi) = \hbar m Y_m(\theta,\varphi) = \hbar l Y_m(\theta,\varphi) = \hbar l\, Y_l(\theta,\varphi)$$

Тогда, если $l$ - максимальная проекция, то тогда действие оператора рождения не может увеличить эту проекцию и его действие на такую волновую функцию должно быть равно нулю:

$$\hat{\boldsymbol{L}}_+ Y_m = 0$$

Очевидно также, что $\hat{\boldsymbol{L}}_-\hat{\boldsymbol{L}}_+ \boldsymbol{Y}_l = \boldsymbol{0}$. Тогда воспользуемся выражением для оператора момента импульса и подействуем им на волновую функцию с максимальной проекцией момента импульса.

С одной стороны имеем: $\hat{L}^2 Y_l = L^2 Y_l$

С другой:
$$\hat{L}^2 Y_l = \left(\hat{\boldsymbol{L}}_- \hat{\boldsymbol{L}}_+ + \hat{L}_z{}^2 + \hbar \hat{L}_z\right) Y_l =$$
$$=(0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) Y_l = \hbar^2 l(l+1) Y_l$$

Откуда получаем, что собственные значения оператора квадрата момента импульса:

$$\boxed{L^2 = \hbar^2\, l(l+1)}$$

где *l* – максимальная проекция момента импульса на ось *z* в единицах ħ и принимает значения *l* = 0, 1, 2, 3,...

Итак, собственные значения операторов

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta)$$

$$\boxed{\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi) \end{cases}}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)}} (sin\theta)^m \frac{d^{l+m}(sin\theta)^{2l}}{(dcos\theta)^{l+m}}$$

Число *l* носит название **орбитального квантового числа** и принимает значения:

$$\boxed{\begin{matrix} l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots \\ \text{или} \quad s, p, d, f, \ldots \end{matrix}}$$

Число *m* называется **магнитным квантовым числом**, и принимает все значения через единицу до максимального значения:

$$\boxed{m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \pm l}$$

# О собственных функциях $\widehat{L^2}$

**Собственными функциями оператора $\widehat{L^2}$ являются сферические или шаровые функции $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$. Они являются собственными функциями операторов $\widehat{\Lambda}$, $\widehat{L^2}$, $\widehat{L_z}$**

$$\boxed{\begin{gathered}\widehat{\Lambda} Y_{lm}(\theta,\varphi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)\\ \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi)\\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi)\end{gathered}}$$

**Шаровые функции определяют плотность вероятности нахождения частицы под определенными углами θ,φ.**

$$\boxed{Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta)}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)}} (sin\theta)^m \frac{d^{l+m}(sin\theta)^{2l}}{(dcos\theta)^{l+m}}$$