

3.9. Оператор квадрата момента импульса. Сферические функции.

3.9.1. Оператор квадрата момента импульса (МИ).

Оператор квадрата МИ определяется, как и обычный квадрат МИ через проекции:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (3.9.1)$$

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

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) + \frac{1}{2}(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z^2 \quad (3.9.2)$$

Здесь мы введем операторы “рождения” и “уничтожения” (их смысл будет виден ниже в пункте 3.9.2):

$$\hat{L}_+ \equiv (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \quad (3.9.3)$$

$$\hat{L}_- \equiv (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \quad (3.9.4)$$

Воспользовавшись коммутационным соотношением

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ = 2\hbar\hat{L}_z, \quad (3.9.5)$$

представим оператор квадрата МИ в следующем виде

$$\hat{L}^2 = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z. \quad (3.9.6)$$

Для того чтобы определить \hat{L}^2 через угловые переменные θ, φ , сделаем некоторые заготовки для производных по этим переменным:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad (3.9.7)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \theta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \theta} = \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \cdot \text{ctg}\theta - z \frac{\partial \psi}{\partial z} \text{tg}\theta \quad (3.9.8)$$

Итак, чтобы определить оператор квадрата МИ \hat{L}^2 , ищем сначала выражение для оператора “рождения”. Напомним, что декартовы координаты записываются через сферические координаты в следующем виде:

$$\begin{cases} z = r \text{Cos}\theta \\ x + iy = r \text{Sin}\theta \text{Cos}\varphi + ir \text{Sin}\theta \text{Sin}\varphi = r \text{Sin}\theta \cdot e^{i\varphi} \end{cases} \quad (3.9.9)$$

Далее проводим вычисления:

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

Здесь воспользуемся (3.9.9), а затем $re^{-i\varphi} \text{Cos}\theta = \frac{r \text{Cos}\theta \text{Sin}\theta}{\text{Sin}\theta} (\text{Cos}\varphi - i \text{Sin}\varphi) = (x - iy) \text{ctg}\theta$:

$$\begin{aligned} &= \hbar \left[r \text{Cos}\theta \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin}\theta \cdot e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[r \text{Cos}\theta \cdot e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin}\theta \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \\ &= \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[(x - iy) \text{ctg}\theta \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - r \text{Sin}\theta \frac{\text{Cos}\theta}{\text{Cos}\theta} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi = \\ &= \hbar \cdot e^{i\varphi} \left[\left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ctg}\theta - \text{tg}\theta \cdot z \frac{\partial}{\partial z} + i \text{ctg}\theta \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi \end{aligned}$$

Теперь воспользуемся (3.9.7) и (3.9.8) и окончательно получаем для оператора “рождения”:

$$\hat{L}_+ \psi = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} + i \text{ctg}\theta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \quad (3.9.10)$$

Аналогично можно получить выражение для оператора “уничтожения”:

$$\hat{L}_- \psi = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \psi = -\hbar e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} - i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right). \quad (3.9.11)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{L}_- \hat{L}_+ &= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = -\hbar^2 \cdot e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i \left(\operatorname{ctg}^2 \theta - \frac{1}{\operatorname{Sin}^2 \theta} \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned}$$

Итак, получаем для произведения операторов выражение через сферические координаты:

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.9.12)$$

Вспомним также полученный в §3.8 оператор проекции МИ:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3.9.13)$$

Подставим (3.9.12) и (3.9.13) в оператор квадрата МИ (3.9.6). Итак, получаем окончательный вид оператора квадрата момента импульса в сферической системе координат:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\operatorname{Sin} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{Sin} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\operatorname{Sin}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (3.9.14)$$

Легко видеть, что выражение в скобках (3.9.14) совпадает с выражением для оператора Лежандра (3.7.3), т.е. угловой частью оператора Δ .

3.9.2. Собственные значения оператора квадрата МИ

Вспоминая выражение для оператора Лежандра $\hat{\Lambda}$ (3.7.13), видим, что оператор квадрата МИ (3.9.14) пропорционален ему:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda} \quad (3.9.15)$$

Таким образом, решение уравнения на собственные значения оператора Лежандра (3.7.12):

$$\hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \quad (3.9.16)$$

определяет также *собственные функции* и *собственные значения оператора квадрата МИ*. С другой стороны уравнение (3.9.16) есть уравнение для определения угловой части волновой функции при движении в центральном поле.

Легко увидеть, что оператор квадрата МИ коммутирует с оператором любой проекции МИ:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad (3.9.17)$$

Таким образом, наряду с квадратом МИ может быть определена и любая проекция (но только одна!). Обычно выбирают проекцию МИ на ось $z - L_z$. Поскольку $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$, то у этих операторов могут быть *общие собственные функции*. Отличие собственных функций этих операторов состоит только в том, что собственная функция \hat{L}^2 умножается на функцию от угла $\theta - f(\theta)$:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) &= L^2 Y(\theta, \varphi) \\ \hat{L}^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi} &= L^2 f(\theta) \cdot e^{im\varphi} \end{aligned} \quad (3.9.18)$$

В рамках этого курса мы не будем решать уравнения (3.9.16) или (3.9.18), однако сможем получить собственные значения оператора квадрата МИ, не решая эти уравнения.

Для этого для начала определим смысл операторов “рождения” и “уничтожения” (3.9.3) и (3.9.4). Подействуем оператором рождения \hat{L}_+ на собственную функцию операторов \hat{L}^2 и $\hat{L}_z - Y_m(\theta, \varphi) = f(\theta) \cdot \exp(im\varphi)$, а затем оператором \hat{L}_z , чтобы узнать, какова проекция МИ после действия оператора рождения:

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

Пронесем оператор проекции МИ через оператор рождения, вспомнив коммутационные соотношения (3.8.6) из предыдущего параграфа:

$$= (i\hbar\hat{L}_y + \hat{L}_x\hat{L}_z + i\hat{L}_y\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_x) Y_m = \hat{L}_+ (m\hbar Y_m + \hbar Y_m) = \hbar(m+1)\hat{L}_+ Y_m$$

Таким образом, видно из полученных выражений, что функция, образованная после действия оператора “рождения” (“уничтожения”) $(\hat{L}_\pm Y_m)$, есть собственная функция оператора L_z с собственным значением $\hbar(m \pm 1)$. Итак, получаем: оператор \hat{L}_+ увеличивает проекцию МИ на \hbar , а оператор \hat{L}_- уменьшает проекцию МИ на \hbar :

$$\begin{cases} \hat{L}_+ Y_m = Y_{m+1} \\ \hat{L}_- Y_m = Y_{m-1} \end{cases} \quad (3.9.19)$$

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

$$\hat{L}_z Y_m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_m(\theta, \varphi) = \hbar l Y_m(\theta, \varphi) = \hbar l Y_l(\theta, \varphi) \quad (3.9.20)$$

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:

$$\hat{L}_+ Y_l = 0 \quad (3.9.21)$$

Очевидно также, что $\hat{L}_- \hat{L}_+ Y_l = 0$. Тогда воспользуемся выражением для оператора МИ (3.9.6) и подействуем им на волновую функцию с максимальной проекцией МИ. С одной стороны из (3.9.18) имеем:

$$\hat{L}^2 Y_l = L^2 Y_l$$

С другой стороны, исходя из (3.9.21) и действия операторов проекции, имеем:

$$\hat{L}^2 Y_l = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z) Y_l = (0 + \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l) Y_l = \hbar^2 l(l+1) Y_l$$

Откуда получаем, что *собственные значения оператора квадрата МИ* равны:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (3.9.22)$$

где l – максимальная проекция МИ на ось z в единицах \hbar и принимает значения $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Итак, собственные значения операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z :

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (3.9.23)$$

Здесь волновые функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ имеют два индекса: l максимальная проекция МИ и его текущая проекция m . Квантовое число l носит название *орбитального квантового числа* и принимает значения:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (3.9.24)$$

или s, p, d, f, \dots

Снизу от чисел приведены часто встречающиеся буквенные обозначения этого квантового числа. Квантовое число m называется *магнитным квантовым числом*, и оно принимает все значения через единицу до максимального значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l \quad (3.9.25)$$

Напомним, что это квантовое число определяет проекцию МИ на ось z .

3.9.3. О собственных функциях оператора квадрата МИ

Собственными функциями оператора квадрата МИ являются *сферические* или *шаровые* функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Они являются собственными функциями следующих операторов: \hat{L} , \hat{L}^2 и \hat{L}_z :

$$\begin{aligned}
\hat{L}Y_{lm}(\theta, \varphi) &= -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
\hat{L}^2Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{3.9.26}$$

Шаровые функции определяют плотность вероятности нахождения частицы под определенными углами θ, φ . Ранее (см § 3.8) мы получали собственные функции оператора проекции МИ отдельно (3.8.16), поэтому шаровые функции можно представить в виде:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta), \tag{3.9.27}$$

где выделены функции, зависящие только от угла θ :

$$\Theta_{lm}(\theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} (\sin\theta)^m \frac{d^{l+m}(\sin\theta)^{2l}}{(d \cos\theta)^{l+m}} \tag{3.9.28}$$

Примечание 1. Функции $\Theta_{lm}(\theta)$ связаны с присоединенными полиномами Лежандра:

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

Присоединенные полиномы Лежандра могут быть определены по следующей рекуррентной формуле:

$$P_l^m(x) = \frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l,$$

где $x = \cos\theta$. Присоединенные полиномы Лежандра удовлетворяют уравнению:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) P_l^m(\cos\theta) + l(l+1)P_l^m(\cos\theta) - \frac{m^2 P_l^m(\cos\theta)}{\sin^2\theta} = 0$$

Можно убедиться, что так выбранные шаровые функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ удовлетворяют условию ортонормированности:

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{3.9.29}$$

3.9.3. Описание состояний в центрально симметричном поле.

Итак, для описания движения в центрально симметричном поле имеем следующий гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \tag{3.9.30}$$

Стационарное уравнение Шредингера и соответствующая волновая функция имеют вид:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi &= E\psi, \\
\psi(\vec{r}) &= R(r)Y(\theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{3.9.31}$$

Поскольку оператор Лапласа в (3.9.30) представляется в виде: $\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda}$, мы имеем 2 разделившихся уравнения:

$$\begin{cases} \Delta_r R(r) + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2} \right) R(r) = 0, \\ \hat{\Lambda} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \end{cases}, \tag{3.9.32}$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r))$, $\lambda = l(l+1)$, $Y(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Определение k^2 в задаче равносильно определению энергии частицы, т.е. нахождению собственных значений энергии E . Поле $U(r)$ – стационарное, т.е. энергия частицы сохраняется.

Что еще сохраняется при движении частицы в центральном поле? По классической механике – сохраняются полная энергия и момент импульса частицы как векторная величина.

В квантовой механике формулируется следующее утверждение: *для того, чтобы динамическая переменная сохранялась во времени* (т.е. была бы интегралом движения), *необходимо и достаточно, чтобы соответствующий оператор не зависел явно от времени и коммутировал с оператором полной энергии*.

В самом деле, рассмотрим производную по времени от среднего значения какого либо оператора:

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{Q} \psi + \psi^* \hat{Q} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \psi \right] dV \quad (3.9.33)$$

Из стационарного уравнения Шредингера выражаем первые производные по времени:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*$$

и подставим в выражение (3.9.33), используя эрмитовость оператора \hat{H} :

$$\int (\hat{H}^* \psi^*) \psi dV = \int \psi^* \hat{H} \psi dV.$$

Продолжаем запись (3.9.33):

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \left[\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^* \hat{Q} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{Q} \hat{H} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \psi \right] dV = \int \psi^* \left[\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] \right] \psi dV$$

Итак, если полная производная по времени равна 0 (интеграл есть сохраняющаяся величина), то получаем следующее соотношение:

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] = 0 \quad (3.9.34)$$

что и требовалось доказать.

Например, рассмотрим импульс. Оператор импульса $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ от времени явно не зависит. Однако коммутатор не равен нулю в общем случае $[\hat{p}, \hat{H}] \neq 0$ из-за зависимости потенциальной энергии от координат. Таким образом, импульс не сохраняется при движении частицы в центрально-симметричном поле, как и в классической механике.

Легко также увидеть, что в центральном поле коммутаторы оператора квадрата МИ и проекции МИ с оператором полной энергии равны нулю, поскольку потенциальная энергия зависит только от модуля \vec{r} :

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \quad \text{и} \quad [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \quad (3.9.35)$$

Кроме того, эти операторы явно не зависят от времени. Таким образом, определенные ранее величины L^2 и L_z сохраняются при квантовомеханическом описании движения частицы в центральном поле: *момент импульса по абсолютной величине (длина вектора МИ) и его проекция имеют определенные значения и сохраняются во времени*.

Соответствующим собственным значениям энергии E , квадрата момента импульса L^2 , его проекции L_z сопоставляются квантовые числа, описывающие состояние частиц в центральном поле, соответственно: n , l , m . Энергия, в общем, определяется радиальным движением и соответственно главным квантовым числом n , хотя она может также зависеть и от других квантовых чисел l , m . Однако движение, описываемое угловыми переменными, определяются квантовыми числами l , m , и сейчас разберем классификацию состояний по этому движению.

Рассмотрим несколько состояний с наименьшими значениями орбитального квантового числа.

1). Состояние с квантовыми числами $l = 0$, $m = 0$. Это так называемое S – состояние. Это состояние обладает сферической симметрией. Момент импульса и соответственно его проекция равны нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

которая вообще не зависит от углов. Поэтому распределение плотности симметрично относительно центра (см рис. 9.1).

2). Состояние с квантовыми числами $l = 1, m = 0, \pm 1$. Это P – состояние. Полный момент импульса частицы в таком состоянии равен $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{2}$. Три возможных состояния частицы отличаются магнитными квантовыми числами – проекциями момента импульса на ось z , которые схематично изображены на рис. 9.2. Рассмотрим эти состояния подробнее.

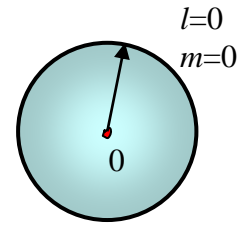


Рис. 9.1.

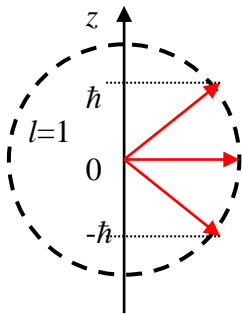


Рис. 9.2.

а). Состояние с магнитным квантовым числом $m = 0$, угловая часть волновой функции этого состояния описывается шаровой функцией

$$Y_{10} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta.$$

Проекция МИ на ось z равна 0. Поскольку зависимости шаровой функции от угла φ нет, то распределение плотности симметрично относительно оси z и имеет вид “гантели”, ориентированной по оси z (см рис. 9.3).

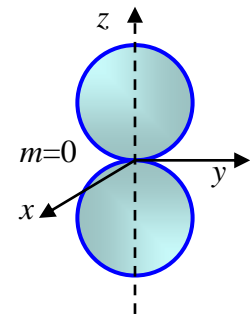


Рис. 9.3.

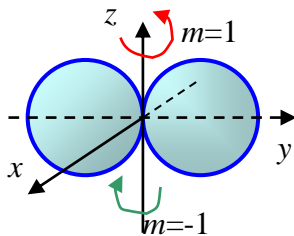


Рис. 9.4.

б). Магнитное квантовое число $m = \pm 1$, соответствующая шаровая функция равна

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$

Эти состояния с проекцией МИ на ось z равной $\pm\hbar$. Распределение плотности имеет вид бублика, наизнанного на ось z (на рисунке 9.4 даны разрезы распределения плотности в плоскости (zy)). Причем бублик может “закручиваться” в разные стороны, что соответствует различному знаку проекции МИ.

3). Состояние с квантовыми числами $l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$. Имеем D – состояние. Полный момент импульса частицы равен $L = \hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\sqrt{6}$. Пять возможных состояний отличаются проекциями момента импульса m на ось z (см рис. 9.5). Запишем соответствующие угловые части волновых функций

а). Состояние с магнитным квантовым числом $m = 0$. Проекция МИ равна нулю. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

Шаровая функция, описывающая состояние с нулевой проекцией момента импульса, от угла φ не зависит, поэтому распределение

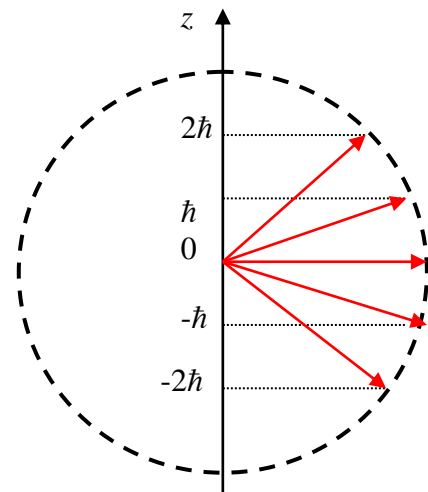


Рис. 9.5.

плотности симметрично относительно оси z . Распределение плотности вероятности изображается “гантелями с манжеткой” вокруг оси z (см рис. 9.6 А).

б). Состояние с магнитным квантовым числом $m = \pm 1$. Проекция момента импульса L_z равна постоянной Планка $L_z = \pm \hbar$. Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

Разрез распределения плотности вероятности, симметричный относительно оси z , в плоскости (zy) изображен на рисунке 9.6 Б.



Рис. 9.6.

в). Состояние с магнитным квантовым числом $m = \pm 2$. Проекция МИ равна двум (в единицах \hbar). Состояние описывается шаровой (волновой) функцией вида

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}$$

Разрез распределения плотности вероятности в плоскости (zy) , имеющей тор-образный вид относительно оси z , изображен на рисунке 9.6 В.

Аналогично рассматриваются шаровые функции и плотности вероятности распределения частиц по угловым переменным при больших значениях орбитального числа l .