Rotation i kvantmekaniken

- Separering av variabler tillåter oss ofta att separera mellan elektroniska koordinater och kärnkoordinater

- Beroende på systemets komplexitet kan vi ytterligare separera mellan translation, vibration och rotation för kärnkoordinaterna

- Teorin om rotationsrörelse i k.m. är mycket viktig, inte bara för roterande system, utan även för elektronernas rörelse då denna kan separeras in i en radiell del och en vinkeldel för sfäriskt symmetriska system. Vinkel-beroendet är mycket närt besläktat med teorin om rotationsrörelse.

- I allmänhet har vi situationen där vinkelberoendet av $V(\underline{r}) = V(r, \phi, \theta) = V(r)\tilde{V}(\phi, \theta) \rightarrow V(\phi, \theta) = 0$
Till följd av detta är den totala energin = kinetisk energi

$$E = -\frac{\hbar}{2m}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2$$

- Vi skall betrakta 2 typer av kvantiserad rotations rörelse: Rigid-rotor och elektroniska banimpulsmomentet

- Gemensamt för bägge typer av rotation är att $V_{rot} = 0$!

- Ifall vi betraktar en partikel på en ring så har vi

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} = \frac{mr^2\omega^2}{2} = \frac{I\omega^2}{2}$$

$$(I = mr^2)$$

$$J = \pm pr \Rightarrow E = \frac{p^2 r^2}{2mr^2} = \frac{J^2}{2I}$$

- I den klassiska mekaniken kan J anta ett kontinuerligt antal värden

- Ifall vi istället betraktar den roterande partikeln som vågrörelse på ett (de Broigle $p = \frac{h}{\lambda}$) cykliskt-cirkulärt avgränsat område får vi följande krav för stående vågrörelse $\lambda = \frac{2\pi r}{m_l}$

– För J_z gäller således

$$J_z = \pm \frac{m_\ell h}{2\pi} = \pm m_\ell \hbar \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

och för energin:

$$E = \frac{J_z^2}{2 \cancel{m}} = \frac{m_\ell^2 \hbar^2}{2I}$$

– Alternativt kan vi betrakta S.E. för en partikel på en ring (2D)

$$\hat{H} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\frac{\hbar}{2m} \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi}$$

$$\begin{cases} x = r\cos\phi \\ y = r\sin\varphi \end{cases} \longrightarrow \text{fixat } r: \; \hat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi}$$

$$\Rightarrow \cancel{\hat{H}} \quad \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\psi = \frac{2E\overset{mr^2}{I}}{\hbar^2}\psi$$

kvantiserad!

$$\psi_{m_\ell}(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{(2\pi)^{1/2}} \qquad m_\ell = \pm\frac{(2EI)^{1/2}}{\hbar}$$

(3)

cykliskt gränsvärde kräver:

$$\boxed{\psi_{m_\ell}(\varphi) = \psi_{m_\ell}(\varphi + 2\pi)}$$

$$\psi_{m_\ell}(\varphi + 2\pi) = \frac{e^{im_\ell\varphi}\, e^{2\pi i m_\ell}}{(2\pi)^{1/2}}$$

med $e^{i2\pi} = -1$

$$(-1)^{2m_\ell} = 1 \rightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \square$$

- Detta resultat gäller för alla kvantmekaniska ~~parti~~ system som roterar enbart i 2D!

- klassiskt kan man definiera ett banimpulsmoment enligt

$$L = \underline{r} \times \underline{p}$$

- I kvantmekaniken definieras banimpulsmomentet som egenvärdet till banimpulsmoment operatorn, vilken fås genom att substituera impulsmomentoperatorn $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ i L

$$\hat{L} = \underline{r} \times \underline{\hat{p}} = r \times \left(\frac{\partial}{\partial x}\bar{i} + \frac{\partial}{\partial y}\bar{j} + \frac{\partial}{\partial z}\bar{k} \right)$$

För det tvådimensionella fallet får vi således (x, y)

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} \bar{i} & \bar{j} & \bar{k} \\ x & y & z \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \end{vmatrix} \Rightarrow \hat{l}_z = (x p_y - y p_x)\frac{\hbar}{i}$$

$$\uparrow$$
$$0$$

vilket i cylinderkoordinater blir

$$\boxed{\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}}$$

5

- I 3D fallet ~~betraktar~~ är

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- I sfäriska koordinater:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Lambda^2$$

$$\Lambda^2 = \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

- då vi betraktar r som konstant

får vi

$$\frac{1}{r^2}\Lambda^2\psi(\theta,\varphi) = -\frac{2Em}{\hbar^2}\psi(\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow \boxed{\Lambda^2\psi(\theta,\varphi) = -\frac{2IE}{\hbar^2}}$$

- Man kan enkelt visa att ifall

$\Psi(\theta,\varphi)$ har formen $\Theta \cdot \Phi$ så

separerar ekvationen

$$\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} = -\varepsilon\,\Theta\Phi$$

där med $\Theta \cdot \Phi$ och multiplikation med $\sin^2\theta$ ger:

$$\boxed{\frac{\Phi}{}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \varepsilon\sin^2\theta = 0}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_l^2 \qquad \frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + \varepsilon\sin^2\theta = m_l^2$$

$\sim l(l+1)$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_l^2\,\Phi$$ har samma lösning som partikeln på en ring!

$$\Phi = \frac{e^{i\varphi m_l}}{(2\pi)^{1/2}}$$

– Den andra diff. ekvationen är mer komplicerad (se Arfken) att lösa, men dess lösningar kan indexeras med två tal l, och m_l

$l = 0, 1, 2 \ldots \qquad m_l = l, l-1 \ldots -l$

Lösningarna är associerade Legendre funktioner. $P_l^{m_l}$

För ett givet l har vi $2l+1$ lösningar.

De normaliserade lösningarna kallas ofta för sfäriska klotyt funktioner

$$Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = N e^{i m_l \varphi} P_l^{m_l}(\cos\theta)$$

Två viktiga relationer:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l,m_l} \cdot Y_{l',m_l'} \underbrace{\sin\theta \, d\theta \, d\varphi}_{d\Omega} = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'}$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l m_l} \cdot Y_{l m_l'} Y_{l' m_l''} \, d\Omega = \delta_{m_l, m_l' + m_l''}$$

- Insättning av $Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$ i

$$\frac{\sin\theta\, d}{d\theta} \sin\theta \frac{d\, Y_{l,m_l}}{d\theta} = (m_l^2 - \varepsilon \sin^2\theta)\, Y_{l,m_l}$$

ger följande lösning för energin

$$E = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \qquad l = 0, 1, 2 \ldots$$

där E är oberoende av m_l.

Varje energinivå är således $2l+1$ ggr degenererad (i avsaknad av ett externt magnetiskt fält).

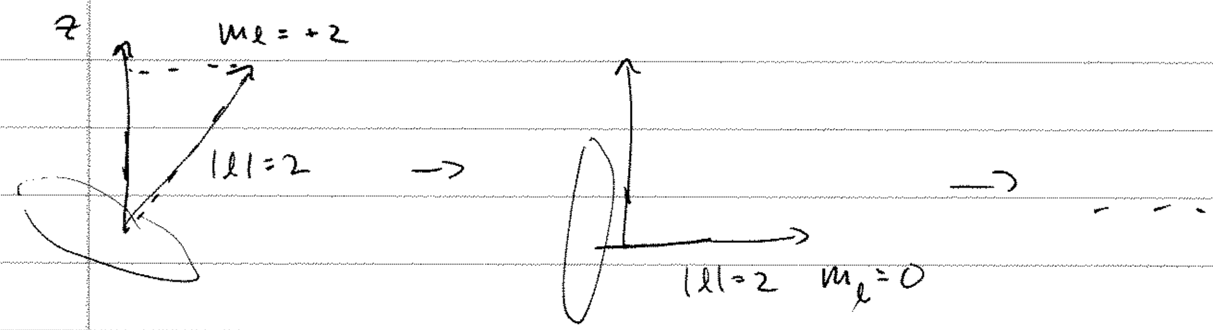
- Rotationsenergin hos en kropp är

$$\cancel{J_z} \quad E = \frac{J^2}{2I}$$

detta ger för kvantmekaniska system i 3D:

$$|\bar{J}| = |\bar{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}^{1/2}\hbar \qquad \ell = 0, 1, \ldots$$

samt z-komponenten $l_z = m_\ell \hbar$



<u>rotationsplanet är kvantiserat!</u>

Stern - Gerlach → space quantization

– Varför alltid z-komponenten?
(by convention :)

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad \hat{l}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

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

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\,\hat{l}_z \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\,l_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\,\hat{l}_y$$

Vilket är enkelt att visa!

$\hat{l}_\alpha$ är komplementära operatorer, så att endast <u>en</u> kan vara känd vid en given tidpunkt. Vi väljer z!

Men! $\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = \hat{\Lambda}^2 \hbar^2$

och $[\hat{l}^2, \hat{l}_\alpha] = 0$!

Vi kan känna magnituden samt <u>en</u> komponent av banimpulsmomentet samtidigt!