

2.4. Момент количества движения (момент импульса)

Трехмерное движение в микромире, как и в классической механике, не всегда можно свести к трем независимым одномерным движениям. В микромире трехмерное движение имеет некоторые качественные отличия от классической механики. Его изучение начнем с момента количества движения.

Момент количества движения материальной точки в классической механике выражается через координату и импульс соотношением

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}].$$

В квантовой механике соответствующая величина называется также орбитальным моментом, и ей соответствует эрмитов оператор

$$\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (2.28)$$

В квантовой механике невозможно указать определенные значения $\mathbf{L}$ ввиду совместной неизмеримости его декартовых компонент:

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

Совместно измеримыми здесь оказываются лишь $\mathbf{L}^2$ и проекция $\mathbf{L}$ на выделенное направление, например, L_z . Собственные значения $\hat{L}_z$ квантуются и равны целому числу постоянных Планка: $L_z = m\hbar$, $m = 0, \pm 1, \dots$. Соответствующие собственные функции также известны в полярных координатах (см. (1.50)). Ниже мы рассмотрим задачу нахождения определенных значений $\mathbf{L}^2$.

Рассмотрение удобно провести в сферических координатах (r, θ, φ) , связанных с декартовыми известными соотношениями:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta,$$

где

$$r \geq 0; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi; \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

В сферических координатах оператор орбитального момента содержит только угловые переменные:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; \tag{2.29}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta\varphi}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \tag{2.30}$$

где $\nabla_{\theta\varphi}^2$ — угловая часть оператора Лапласа.

Запишем уравнение для собственных функций и собственных значений оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$ в сферических координатах:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi(\theta, \varphi) = (L^2) \Psi(\theta, \varphi). \tag{2.31}$$

Собственное значение здесь следует понимать как единый символ, а не « L в квадрате». Поэтому оно взято в скобки.

Граничные условия к уравнению (2.31) сводятся к периодичности (для обеспечения однозначности):

$$\Psi(\theta, \varphi) = \Psi(\theta, \varphi + 2\pi); \quad \Psi(\theta, \varphi) = \Psi(\theta + \pi, \varphi). \tag{2.32}$$

Условие однозначности требует *регулярности* $\Psi(\theta, \varphi)$ в особых точках $\theta = 0, \pi$.

Решения уравнения (2.31) целесообразно искать с учетом определенных значений L_z вследствие его совместной измеримости с $\mathbf{L}^2$, т. е. в факторизованном виде

$$\Psi(\theta, \varphi) = \Psi_{m_l}(\theta, \varphi) = \Theta_{m_l}(\theta) e^{im_l \varphi}, \tag{2.33}$$

где m_l — так называемое *магнитное квантовое число*, соответствующее значению $L_z = m_l \hbar$.

Подстановка (2.33) в (2.31) приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению для $\Theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{m_l}}{d\theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{m_l}(\theta) + \lambda \Theta_{m_l}(\theta) = 0, \quad (2.34)$$

где

$$\lambda = (L^2)/\hbar^2. \quad (2.35)$$

Заменой переменных $t = \cos \theta$ (при этом из требования периодичности по θ получаем, что $\sin \theta = +\sqrt{1-t^2}$) это уравнение преобразуем к виду:

$$\left[\frac{d}{dt} (1-t^2) \frac{d}{dt} - \frac{m_l^2}{1-t^2} + \lambda \right] Q_{m_l}(t) = 0, \quad (2.36)$$

где $Q_{m_l}(t) = \Theta_{m_l}(\theta)$, $|t| \leq 1$. Непрерывность его решений следует из непрерывности коэффициентов при $\Theta_{m_l}(t)$.

Уравнение (2.36) имеет регулярные в особых точках $t = \pm 1$ решения при дискретных значениях λ :

$$\lambda = \lambda_l = l(l+1), \quad \text{где } l = |m_l|, |m_l|+1, \dots$$

Это присоединенные функции Лежандра $P_l^{|m_l|}(t)$ (см. приложение Д).

Собственные значения L^2 выражаются через λ в соответствии с (2.35):

$$\boxed{(L^2)_l = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, \dots} \quad (2.37)$$

Квантовое число l называется *орбитальным*.

Нормированные на единичной сфере собственные функции L^2 называются *сферическими функциями*:

$$Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!}} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) e^{im_l \varphi}. \quad (2.38)$$

При заданном орбитальном квантовом числе l магнитное квантовое число m_l может принимать значения $0, \pm 1, \dots, \pm l$. Собственные значения $\hat{L}^2$ не зависят от магнитного квантового числа, поэтому они будут вырожденными с кратностью

$$\boxed{g_l = 2l+1.} \quad (2.39)$$

Магнитное квантовое число m соответствует определенным значениям L_z . Поэтому собственные значения $\hat{L}^2$ вырождены по величине L_z .

Данный феномен есть следствие инвариантности оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$ относительно поворотов системы координат вокруг начала координат.

Состояния с определенными значениями $\mathbf{L}^2$ обладают и определенной четностью:

$$\boxed{Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \text{т. е. } P_l = (-1)^l.} \quad (2.40)$$

Таким образом, величина четности полностью определяется величиной $\mathbf{L}^2$ через орбитальное квантовое число.

Сферические функции образуют на единичной сфере полную ортонормированную систему — базис:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \quad (2.41)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi). \quad (2.42)$$

Приведем явный вид некоторых сферических функций, часто используемых в приложениях:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \\ Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Отметим следующий интересный факт: при $|m| = l$ равенство $(\mathbf{L}^2)_l = \max L_z^2 = \hbar^2 l^2$, очевидное из классических соображений, *не выполняется!* Это прямое следствие совместной неизмеримости декартовых компонент $\mathbf{L}$. Невозможно подобрать такое состояние, в котором вектор $\mathbf{L}$ был бы ориентирован *строго* вдоль оси Oz (рис. 2.5). В противном случае это привело бы к нулевым (т. е. *вполне определенным*) значениям проекций L_x и L_y наряду с L_z , что невозможно в силу их совместной неизмеримости. Таким образом, в любом состоянии вектор $\mathbf{L}$ с *ненулевой* вероятностью отклоняется от оси Oz , так что $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \hbar^2 l/2$. Это и есть *наглядное проявление совместной неизмеримости проекций $\mathbf{L}$* . С ростом орбитального квантового числа такая неопределенность сказывается все слабее: $(L^2 - L_z^2)/L^2 \sim l^{-1}$. В классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) этот эффект становится исчезающе малым.

Квантовая теория углового момента чрезвычайно удобна для изучения движения в центральном поле.