

## **РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ**

### Задача 8(5)

Докажите, что орбитальный момент  $L$  электрона принимает в квантовой механике значения  $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ , где  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

#### Вспомним

##### 1. Момент импульса частицы в классической механике

$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$  – момент импульса частицы

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \mathbf{x}^0 & \mathbf{y}^0 & \mathbf{z}^0 \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}, \text{ где}$$

$\mathbf{r} = \mathbf{x}^0 x + \mathbf{y}^0 y + \mathbf{z}^0 z$  – радиус-вектор частицы,

$x, y, z$  – декартовые компоненты вектора  $\mathbf{r}$ ,

$\mathbf{p} = \mathbf{x}^0 p_x + \mathbf{y}^0 p_y + \mathbf{z}^0 p_z$  – импульс частицы,

$p_x, p_y, p_z$  – декартовые компоненты вектора  $\mathbf{p}$ ,

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} \text{ – декартовые компоненты момента импульса.}$$

**2. Переход к квантовой механике для системы имеющей классический аналог**

$$x, y, z, p_x, p_y, p_z \Rightarrow \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U(x, y, z) \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar \\ \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} = i\hbar \\ \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} = i\hbar \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x} = 0 \\ \hat{x}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{x} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = 0 \\ \hat{x}\hat{z} - \hat{z}\hat{x} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y} = 0 \\ \hat{y}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{y} = 0 \end{cases}$$

$$\hat{y}\hat{z} - \hat{z}\hat{y} = 0$$

$$\hat{q}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{q}_i = i\hbar\delta_{ij}$$

$$\hat{q}_i\hat{q}_j - \hat{q}_j\hat{q}_i = 0$$

$$\hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{p}_i = 0$$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z, \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

### 3. Момент импульса частицы в квантовой механике

$$x, y, z, p_x, p_y, p_z \Rightarrow \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar \\ \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} = i\hbar \\ \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} = i\hbar \end{cases}$$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z, \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{z}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{z} = \hat{z}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) - (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\hat{z} = 0$$

$$\hat{p}_z\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_z = \hat{p}_z(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) - (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\hat{p}_z = 0$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = ?$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y = \\ &= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y = \\ &= \hat{p}_z\hat{z}\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_z\hat{z}\hat{x}\hat{p}_y + \hat{p}_y\hat{x}\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_x\hat{y}\hat{z}\hat{p}_z = \\ &= \hat{p}_z\hat{z}(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y) + \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_z = \\ &= -\hat{p}_z\hat{z}\hat{L}_z + (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\hat{z}\hat{p}_z = -\hat{p}_z\hat{z}\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{z}\hat{p}_z = \hat{L}_z(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}) = \hat{L}_zi\hbar \\ \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x &= i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

**ИТОГ**

$$\begin{cases} \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z \\ \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x \\ \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y \end{cases}$$

#### 4. Линейные операторы

**Вспомним:** Оператор  $\hat{A}$  это закон перехода  $\hat{A}|b\rangle = |a\rangle$  от одного вектора  $|b\rangle$  к другому вектору  $|a\rangle$ .

В матричной форме это записывается так

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{N1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix}, |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix} - \text{вектора, заданные через свои проекции в каком-либо базисе,}$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{N1} \end{pmatrix} - \text{представитель оператора } \hat{A} \text{ в том же базисе,}$$

$N$  — размерность пространства, в котором действует оператор  $\hat{A}$ .

#### Примечание:

При переходе от одного базиса к другому происходит изменение представителя оператора  $\hat{A}$ .

### Самосопряжённые (эрмитовые) операторы

#### А) Операция транспонирования

При транспонировании оператора  $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}^T$  у матричных элементов оператора изменяется порядок индексов  $A_{mn} \Rightarrow A_{nm}$ .

#### Б) Операция комплексного сопряжения оператора

При комплексном сопряжении оператора  $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}^*$  матричные элементы оператора заменяются на комплексно сопряжённые элементы.

Оператор  $\hat{A}$  называется самосопряжённым  $\hat{A} = \hat{A}^+$ , если  

$$(\hat{A}^*)^T = \hat{A} \text{ или } (\hat{A}^T)^* = \hat{A}$$

### Свойства самосопряжённого оператора

А) Собственные значения самосопряжённого оператора- действительны.

Б) Собственные векторы самосопряжённого оператора, принадлежащие различным собственным значениям этого оператора, ортогональны.

В) Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0)$ , то их собственные векторы совпадают.

#### Примечание:

Операторы квантовой механики  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{y} = y$ ,  $\hat{z} = z$ ,  $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$ ,  $\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ ,

$$\begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases} \text{ - есть самосопряжённые операторы.}$$

### Вспомним задачу, которую нужно решить

Докажите, что орбитальный момент  $L$  электрона принимает в квантовой механике значения  $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ , где  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

### Решение

1. Введём оператор квадрата момента импульса  $\hat{L}^2$

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

**Примечание:** оператор  $\hat{L}^2$  – самосопряжённый

2. Найдём коммутатор операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  ( $\hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = ?$ )

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 &= (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) \hat{L}_z - \hat{L}_z (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) = \hat{L}_x^2 \hat{L}_z + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z + \hat{L}_z^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 - \hat{L}_z \hat{L}_z^2 = \\ &= \hat{L}_x^2 \hat{L}_z + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 = \\ &= \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z + \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_y = \end{aligned}$$

Учтём, что  $\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x$

$$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y.$$

Откуда

$$\hat{L}_y \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_x + \hat{L}_z \hat{L}_y$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_y + \hat{L}_x \hat{L}_z$$

Теперь

$$\begin{aligned} &= \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z + \hat{L}_y \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_y = \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z + \hat{L}_y (i\hbar \hat{L}_x + \hat{L}_z \hat{L}_y) - (i\hbar \hat{L}_y + \hat{L}_x \hat{L}_z) \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_y = \\ &= \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_z \hat{L}_y - i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_y = \\ &= \hat{L}_x \hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_y = \\ &= \hat{L}_x (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) \hat{L}_y = \\ &= \hat{L}_x (-i\hbar \hat{L}_y) + i\hbar \hat{L}_x \hat{L}_y = 0 \end{aligned}$$

$$\textbf{Итог} \quad \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = 0$$

Или Операторы  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  имеют общий базис.

**Задача на собственные векторы и собственные значения оператора  $\hat{L}_z$**

$$\hat{L}_z |L_z\rangle = |L_z\rangle L_z$$

$|L_z\rangle$  – собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$ ,

$L_z$  – собственное значение оператора  $\hat{L}_z$ .

Кроме того,  $L_z$  – проекция момента количества движения электрона на ось z.

**Задача на собственные векторы и собственные значения оператора  $\hat{L}^2$**

$$\hat{L}^2 |L^2\rangle = |L^2\rangle L^2$$

$|L^2\rangle$  – собственный вектор оператора  $\hat{L}^2$ ,

$L^2$  – собственное значение оператора  $\hat{L}^2$ .

Кроме того,  $L^2$  – квадрат момента импульса электрона.

Поскольку  $\hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = 0$ , то собственные векторы операторов  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  совпадают

$$|L^2\rangle = |L_z\rangle \quad !!!.$$

**Напоминание**  $L^2$  надо найти.



Для дальнейших исследований введём операторы

$$\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y,$$

$$\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

и найдём коммутаторы

$$\hat{L}^+ \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^+ = ?$$

$$\hat{L}^- \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^- = ?$$

**Расчёт коммутатора  $\hat{L}^+ \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^+$**

$$\begin{aligned} \hat{L}^+ \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^+ &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \hat{L}_z - \hat{L}_z (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hat{L}_x \hat{L}_z + i\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hat{L}_z \hat{L}_y = i(\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) - (\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z) = \\ &= i\hbar L_x - i\hbar L_y = -\hbar L_x - i\hbar L_y = -\hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = -\hbar \hat{L}^+ \end{aligned}$$

$$\underline{\hat{L}^+ \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^+ = -\hbar \hat{L}^+}$$

**Расчёт коммутатора  $\hat{L}^- \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^-$**

$$\begin{aligned} \hat{L}^- \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^- &= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \hat{L}_z - \hat{L}_z (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x \hat{L}_z - i\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x + i\hat{L}_z \hat{L}_y = -i(\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) - (\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z) = \\ &= -i\hbar L_x - i\hbar L_y = \hbar L_x - i\hbar L_y = \hbar \hat{L}^- \end{aligned}$$

$$\underline{\hat{L}^- \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^- = \hbar \hat{L}^-}$$

**Действие оператора  $\hat{L}_z$  на вектор  $\hat{L}^+ |L_z\rangle$**

Напоминаем:  $|L_z\rangle$  – собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$ , или

$$\hat{L}_z |L_z\rangle = |L_z\rangle L_z.$$

Найдём результат действия оператора  $\hat{L}_z$  на вектор  $\hat{L}^+ |L_z\rangle$

Учтём, что  $\hat{L}^+ \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^+ = -\hbar \hat{L}^+$  откуда  $\hat{L}^+ \hat{L}_z + \hbar \hat{L}^+ = \hat{L}_z \hat{L}^+$ .

Теперь  $\hat{L}_z \hat{L}^+ |L_z\rangle = (\hat{L}^+ \hat{L}_z + \hbar \hat{L}^+) |L_z\rangle = \hat{L}^+ \hat{L}_z |L_z\rangle + \hbar \hat{L}^+ |L_z\rangle = \hat{L}^+ |L_z\rangle L_z + \hbar \hat{L}^+ |L_z\rangle = (L_z + \hbar) \hat{L}^+ |L_z\rangle$ , то есть

$$\hat{L}_z \hat{L}^+ |L_z\rangle = \hat{L}^+ |L_z\rangle (L_z + \hbar)$$

**Вывод: Вектор  $\hat{L}^+ |L_z\rangle$  есть собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $(L_z + \hbar)$ .**

Таким образом, действие оператора  $\hat{L}^+$  на собственный вектор  $|L_z\rangle$  оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $L_z$  даёт новый собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $L_z + \hbar$ .

Аналогично можно показать, что

**Вектор  $\hat{L}^- \hat{L}^+ |L_z\rangle$  есть собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $(L_z + \hbar + \hbar)$ .**

Таким образом, возможные проекции момента количества движения  $L_z$  на ось z при увеличении  $L_z$  отличаются друг от друга на  $\hbar$ . Но собственные значения оператора  $\hat{L}_z$  есть возможные проекции момента количества движения на ось z. Выбирая в качестве вектора  $|L_z\rangle$  вектор  $|L_{z,\max}\rangle$ , которому соответствует максимальное значение  $L_{z,\max}$  (максимально возможная проекция момента количества движения на ось z) будем иметь

$$\hat{L}^+ |L_{z,\max}\rangle = 0,$$

поскольку вектора  $\hat{L}^+ |L_{z,\max}\rangle$  не существует.

### Действие оператора $\hat{L}_z$ на вектор $\hat{L}^- |L_z\rangle$

Напоминаем:  $|L_z\rangle$  – собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$ , или

$$\hat{L}_z |L_z\rangle = |L_z\rangle L_z.$$

Найдём результат действия оператора  $\hat{L}_z$  на вектор  $\hat{L}^- |L_z\rangle$ .

Учтём, что  $\hat{L}^- \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^- = \hbar \hat{L}^+$  откуда  $\hat{L}^- \hat{L}_z - \hbar \hat{L}^- = \hat{L}_z \hat{L}^-$ .

Теперь  $\hat{L}_z \hat{L}^- |L_z\rangle = (\hat{L}^- \hat{L}_z - \hbar \hat{L}^-) |L_z\rangle = \hat{L}^- \hat{L}_z |L_z\rangle - \hbar \hat{L}^- |L_z\rangle = \hat{L}^- |L_z\rangle L_z - \hbar \hat{L}^- |L_z\rangle = (L_z - \hbar) \hat{L}^- |L_z\rangle$ , то есть

$$\hat{L}_z \hat{L}^- |L_z\rangle = \hat{L}^- |L_z\rangle (L_z - \hbar).$$

**Вывод: Вектор  $\hat{L}^- |L_z\rangle$  есть собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $(L_z - \hbar)$ .**

Таким образом, действие оператора  $\hat{L}^-$  на собственный вектор  $|L_z\rangle$  оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $L_z$  даёт новый собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $L_z - \hbar$ .

Аналогично можно показать, что **Вектор  $\hat{L}^+ \hat{L}^- |L_z\rangle$  есть собственный вектор оператора  $\hat{L}_z$  с собственным значением  $(L_z - \hbar - \hbar)$** . Таким образом, возможные проекции момента количества движения  $L_z$  на ось  $z$  при уменьшении  $L_z$  отличаются друг от друга на  $\hbar$ . Но собственные значения оператора  $\hat{L}_z$  есть возможные проекции момента количества движения на ось  $z$ . Выбирая в качестве вектора  $|L_z\rangle$  вектор  $|L_{z,\min}\rangle$ , которому соответствует минимальное значение  $L_{z,\min}$  (максимально возможная проекция момента количества движения на ось  $z$ ) будем иметь

$$\hat{L}^- |L_{z,\min}\rangle = 0,$$

поскольку вектора  $\hat{L}^- |L_{z,\min}\rangle$  не существует. Но

$$|L_{z,\min}| = |L_{z,\max}|.$$

Последнее условие и квантование проекции момента количества движения  $L_z$  можно описать, выбирая в качестве  $L_z$  величину

$$L_z = m\hbar, \text{ где } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Здесь  $l\hbar$  – максимально возможное значение  $L_{z,\max}$  проекции момента количества движения на ось  $z$ .

### Собственные значения оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$

Для расчёта собственного значения оператора  $\hat{\mathbf{L}}^2$  получим выражение для оператора  $\hat{L}^- \hat{L}^+$

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

Поскольку  $\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z$ ,

$$\hat{L}^- \hat{L}^+ = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hbar \hat{L}_z \text{ или}$$

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

Поскольку  $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ , то

$$\hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar \hat{L}_z.$$

Откуда

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

Выше было отмечено, что собственные векторы операторов  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и  $\hat{L}_z$  совпадают. Действуя оператором

$\hat{\mathbf{L}}^2$  на собственный вектор  $|L_{z,\max}\rangle$  оператора  $\hat{L}_z$ , которому соответствует максимальное значение проекции  $L_{z,\max} = l\hbar$ , получим

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |L_{z,\max}\rangle = (\hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |L_{z,\max}\rangle = \hat{L}^- \hat{L}^+ |L_{z,\max}\rangle + \hat{L}_z^2 |L_{z,\max}\rangle + \hbar \hat{L}_z |L_{z,\max}\rangle.$$

$$\text{Но } \hat{L}^+ |L_{z,\max}\rangle = 0, \quad \hat{L}_z |L_{z,\max}\rangle = \hbar l |L_{z,\max}\rangle, \quad \hat{L}_z^2 |L_{z,\max}\rangle = (\hbar l)^2 |L_{z,\max}\rangle.$$

Это даёт возможность представить величину  $\hat{\mathbf{L}}^2 |L_{z,\max}\rangle = |L_{z,\max}\rangle ((\hbar l)^2 + \hbar^2 l)$  и

найти собственное значение  $L^2$  оператора  $\hat{\mathbf{L}}^2$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1).$$

### Задача 9 (3)

Вычислить энергетический спектр трёхуровневой системы - отрицательного иона трёхатомной молекулы с гамильтонианом

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & W & W \\ W & E_0 & W \\ W & W & E_0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

решив для этого стационарное уравнение Шредингера  $\hat{H}|\psi\rangle = |\psi\rangle E$ .

#### Решение

Уравнение Шредингера

$$\hat{H}|\psi\rangle = |\psi\rangle E \quad (2)$$

в матричной форме имеет вид

$$\begin{pmatrix} E_0 & W & W \\ W & E_0 & W \\ W & W & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} E, \quad (3)$$

где  $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$  – искомый вектор стационарного состояния.

Уравнение Шредингера в матричной форме (3) позволяет получить систему линейных алгебраических уравнений для определения проекций  $c_1, c_2, c_3$  вектора  $|\psi\rangle$

$$\begin{cases} (E_0 - E)c_1 + Wc_2 + Wc_3 = 0 \\ Wc_1 + (E_0 - E)c_2 + Wc_3 = 0 \\ Wc_1 + Wc_2 + (E_0 - E)c_3 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Система линейных алгебраических уравнений является однородной и потому имеет ненулевое решение, если определитель равен нулю

$$\begin{vmatrix} (E_0 - E) & W & W \\ W & (E_0 - E) & W \\ W & W & (E_0 - E) \end{vmatrix} = 0. \quad (5)$$

Расчёт определителя в (5) позволяет получить алгебраическое уравнение для нахождения энергии системы  $E$ , при которой система алгебраических уравнений (4) имеет ненулевое решение

$$(E_0 - E)^3 + 2W^3 - 3(E_0 - E)W^2 = 0. \quad (6)$$

Алгебраическое уравнение (6) можно записать в более простой форме, если ввести новую переменную

$$x = E_0 - E \quad (7)$$

$$x^3 - 3xW^2 + 2W^3 = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) является неполным кубическим уравнением

$$x^3 + px + q = 0, \quad (9)$$

где

$$p = -3W^2, \quad q = 2W^3. \quad (10)$$

отором

13

Решение уравнения (9) можно найти по стандартной формуле

$$x = u + v, \quad (11)$$

где

$$u = \left( -\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \right)^{1/3}, \quad v = \left( -\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \right)^{1/3} \quad (12)$$

при условии

$$uv = -\frac{p}{3}. \quad (13)$$

Подстановка  $p$  и  $q$  (10) в выражения для  $u$  и  $v$  (12) позволяет найти  $u$  и  $v$

$$u = \left( -\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \right)^{1/3} = \left( -W^3 + \sqrt{W^6 - W^6} \right)^{1/3} = \left( -W^3 \right)^{1/3}, \quad (14)$$

$$v = \left( -\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \right)^{1/3} = \left( -W^3 - \sqrt{W^6 - W^6} \right)^{1/3} = \left( -W^3 \right)^{1/3}. \quad (15)$$

Условие (14) позволяет найти три корня  $u_1, u_2, u_3$

$$u_1 = We^{i\frac{\pi}{3}}, \quad u_2 = We^{i\frac{\pi}{3} + i\frac{2\pi}{3}} = -W, \quad u_3 = We^{i\frac{\pi}{3} + i\frac{4\pi}{3}} = We^{-i\frac{\pi}{3}}. \quad (16)$$

Условие (15) позволяет найти три корня  $v_1, v_2, v_3$

$$v_1 = We^{i\frac{\pi}{3}}, \quad v_2 = We^{i\frac{\pi}{3} + i\frac{2\pi}{3}} = -W, \quad v_3 = We^{i\frac{\pi}{3} + i\frac{4\pi}{3}} = We^{-i\frac{\pi}{3}}. \quad (17)$$

Выражения (16) для  $u_1, u_2, u_3$  и (17) для  $v_1, v_2, v_3$  позволяет найти искомый корень,

$$x = u_i + v_j, \quad (16)$$

при выполнении условия

$$u_i v_j = -\frac{p}{3} = W^2. \quad (18)$$

Условие (18) выполняется только для следующих пар для  $u_1$  и  $v_3$ , для  $u_3$  и  $v_1$ , а также для  $u_2$  и  $v_2$

подстановка этих пар  $u_i$  и  $v_j$  выражение (11) для

$$x = u_i + v_j \quad (19)$$

Позволяет найти корни  $x$  уравнения (9)

$$x^3 + px + q = 0 \quad (20)$$

$$x_I = u_1 + v_3 \quad (21)$$

$$x_{II} = u_3 + v_1 \quad (22)$$

$$x_{III} = u_2 + v_2 \quad (23)$$

Явная подстановка выражений  $u_1, u_2, u_3$  и  $v_1, v_2, v_3$  в значения корней (21-22) позволяет найти

$$x_I = u_1 + v_3 = We^{i\frac{\pi}{3}} + We^{-i\frac{\pi}{3}} = W \left( \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) + \cos\left(-\frac{\pi}{3}\right) + i \sin\left(-\frac{\pi}{3}\right) \right) = W, \quad (24)$$

$$x_{II} = u_3 + v_1 = W, \quad (25)$$

$$x_{III} = u_2 + v_2 = -2W. \quad (26)$$

Значения корней  $x_I$  (24),  $x_{II}$  (25) и  $x_{III}$  (26) по формуле (7) позволяет найти энергетические уровни

стационарных состояний

$$E_I = E_0 - x_I = E_0 - W,$$

$$E_{II} = E_0 - x_{II} = E_0 - W,$$

$$E_{III} = E_0 - x_{III} = E_0 + 2W.$$