Poglavje 3

Gibanje v treh dimenzijah

Posplošimo dosedanja spoznanja na trorazsežni prostor. Valovna fukcija je tedaj odvisna od treh koordinat in časa, $\Psi(x, y, z, t)$. Njen absolutni kvadrat je gostota verjetnosti, da najdemo delec v volumnu $dV = dx\, dy\, dz$ okoli točke (x, y, z). Ker se mora delec nahajati nekje v prostoru, je

$$\int \Psi^* \Psi \, dx\, dy\, dz = 1$$

Fizikalne količine predstvljajo operatorji, ki delujejo na funkcije treh koordinat. Povprečje neke fizikalne količine izračunamo podobno kot v eni dimenziji:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \widehat{A} \Psi \, dx\, dy\, dz$$

V klasični mehaniki je gibalna količina vektor s tremi komponentami. Zato ima tudi v kvantni mehaniki operator gibalne količine tri komponente:

$$\widehat{\mathbf{p}} = (\widehat{p}_x, \widehat{p}_y, \widehat{p}_z) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$$

Znak ∇ (nabla) je običajni simbol za vektor odvodov po vseh treh koordinatah. Vektorski operator položaja $\widehat{\mathbf{r}}$ je seveda kar množenje s koordinatami

$$\widehat{\mathbf{r}} \psi(x, y, z) = (x\psi, y\psi, z\psi)$$

V klasični fiziki je kinetična energija $W_{kin} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} / 2m = \left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right) / 2m$. Operator kinetične energije na enak način tvorimo iz operatorja gibalne količine:

$$\widehat{W}_{kin} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{p}_x^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

Hamiltonov operator polne energije je vsota operatorjev kinetične in potencialne energije

$$\widehat{H} = \widehat{W}_{kin} + V\left(\mathbf{r}\right)$$

Schroedingerjeva enačba v treh razsežnostih je

$$\widehat{H}\Psi\left(\mathbf{r},t\right) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

ali

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi\left(\mathbf{r},t\right) + V\left(\mathbf{r}\right)\Psi\left(\mathbf{r},t\right) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Stacionarne rešitve Schroedingerjeve enačbe imajo časovno odvisnost $e^{-i\omega t}$ in so lastne funkcije Hamiltonovega operatorja, torej zadoščajo staionarni Schroedingerjevi enačbi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\left(\mathbf{r}\right) + V\left(\mathbf{r}\right)\psi\left(\mathbf{r}\right) = W\psi\left(\mathbf{r}\right)$$

Stanje prostega delca z dobro določeno gibalno količino je raven val v treh razsežnostih:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = A\,e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} = A\,e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \omega t)} \tag{3.1}$$

Lastne vrednosti komponent gibalne količine so enako kot v eni dimenziji $p_i = \hbar k_i$. Ravni val je tudi lastno stanje energije z lastno vrednostjo $W = \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$.

3.1 Trirazsežna neskončna potencialna jama

Poglejmo, kakšna so lastna stanja energije za delec v trirazsežni potencialni jami v obliki kocke z robom $\dot{a}$. Podobno kot v eni razsežnosti bomo vzeli, da je potencialna energija 0 za x, y in z med 0 in a in neskončna povsod drugje. Zato se mora delec nahajti z vsemi tremi koordinatami znotraj intervala $(0, a)$, valovna funkcija na mejah te kocke pa mora biti 0. Tako potencialno jamo si lahko predstavljamo kot kockasto votlino z idealno togimi stenami.

Stacionarna Schroedingerjeva enačba znotraj kocke je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=W\psi\,(x,y,z) \tag{3.2}$$

V eni dimenziji so bile rešitve stoječi valovi oblike $A\sin(n\pi x/a)$. Trirazsežni ravni val 3.1 lahko zapišemo kot produkt treh prostorskih funkcij $e^{ik_xx}e^{ik_yy}e^{ik_zz}$, zato poskusimo tudi rešitev za potencialno jamo zapisati kot produkt treh stoječih valov

$$\psi\,(x,y,z)=A\sin k_1x\,\sin k_2y\,\sin k_3z$$

Postavimo ta nastavek v enačbo 3.2. Dobimo zvezo

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2+k_2^2+k_3^2\right)\psi=W\psi$$

Nastavek je torej dobra rešitev enačbe 3.2. Da določimo možne vrednosti za k_i, moramo upoštevati še robne pogoje, da je $\psi\,(x,y,z)=0$ če je katerakoli koordinata 0 ali a. Pri $x=0$, $y=0$ in $z=0$ smo robnemu pogoju že zadostili z izbiro sinusnih funkcij. Vsi trije sinusi morajo biti 0 tudi, kadar je $x=a$, $y=a$ ali $z=a$, zato mora biti $k_ia=n\pi$ in dobimo

$$k_i=\frac{n_i\pi}{a}$$

Lastne vrednosti energije so torej dane s tremi kvantnimi števili n_1, n_2 in n_3:

$$W_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\,a^2}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right)$$

Tu smo prvič naleteli na pojav *degeneracije* lastnih stanj energije. Izbrano lastno vrednost energije lahko dobimo z različnimi vredostmi za n_1, n_2 in n_3, tako da ustreza vsaki lastni vrednosti energije več lastnih stanj in pravimo, da so lastna stanja degenerirana. Prvo vzbujeno lastno stanje na primer dobimo tako, da vzamemo za enega od n_i vrednost 2, za preostali dve kvantni števili pa 1. Očitno to lahko naredimo na tri načine.

3.2 Trirazsežni harmonski oscilator

Podobno lahko obravnavamo posplošitev harmonskega oscilatorja na tri razsežnosti. Vzemimo. da je delec v potencialu oblike

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}Kr^2 = \frac{1}{2}K\left(x^2+y^2+z^2\right)$$

Stacionarna Schroedingerjeva enačba je

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2}K\left(x^2+y^2+z^2\right)\psi = W\psi(x,y,z)$$

Robni pogoj je, da je valovna funkcija v neskončnosti (v vseh smereh) nič. Spet poskusimo najti rešitev v obliki produkta

$$\psi(x,y,z) = u(x)\,v(y)\,w(z)$$

Postavimo to v Sch. enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(vw\frac{d^2u}{dx^2}+uw\,\frac{d^2v}{dy^2}+uv\frac{d^2w}{dz^2}\right)+\frac{1}{2}K\left(x^2+y^2+z^2\right)uvw = Wuvw$$

Delimo obe strani z uvw :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{u(x)}\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{2}Kx^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{v(y)}\frac{d^2v}{dy^2}+\frac{1}{2}Ky^2-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{w(z)}\frac{d^2w}{dz^2}+\frac{1}{2}Kz^2 = W$$

Na desni imamo vsoto treh izrazov, ki je vsak funkcija le ene spremenljivke, na desni pa konstanto, neodvisno od x, y in z. To je za vse vrednosti koordinat možno le tako, da je vsak člen na levi enak neki konstanti:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{u(x)}\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{1}{2}Kx^2 &= \lambda_1 \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{v(y)}\frac{d^2v}{dy^2}+\frac{1}{2}Ky^2 &= \lambda_2 \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{w(z)}\frac{d^2w}{dz^2}+\frac{1}{2}Kz^2 &= \lambda_3
\end{aligned}$$

Lastna vrednsost energije je $W = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$. Enačbe za u, v in w imajo natanko enako obliko kot enčba za lastne vrednosti harmonskega oscilatorja v eni dimenziji. Tudi robni pogoji so enaki: vrednosti funkcij v neskončnosti morajo biti nič. Zato morajo biti tudi lastne vrednosti

$$\lambda_i = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)$$

kjer so $n_i = 0, 1, 2, ...$Energija je torej dana s tremi kvantnimi števili:

$$W_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)$$

Ustrezne valovne funkcije so produkti enodimenzionalnih valovnih funkcij za vse tri smeri. Harmonski oscilator v treh dimenzijah se torej obnaša kot trije neodvisni harmonski oscilatorji. Tudi v tem primeru so lastna stanja degenrirana, saj lahko isto vrednost energije dobimo z različnimi vrednostmi n_i.

Uporabljenemu postopku, ko poskušamo napisati rešitev parcialne diferencialne enačbe kot produkt funkcij posameznih koordinat, pravimo metoda ločitve (separacije) spremenljivk.

3.3 Nedoločenost in komutator dveh operatorjev

Preden nadaljujemo z obravnavo trirazsežnega gibanja, si poglejmo povezavo med produktom nedoločenosti dveh količin in njunim *komutatorjem,* ki je definiran kot

$$\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$$

Vzemimo operatorja položaja $\widehat{x}$ in gibalne količine $\widehat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$. Njun komutator je po pravilih odvajanja produkta

$$\begin{aligned}[\widehat{x}, \widehat{p}] &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right) = \\ &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial x}\right) = i\hbar\end{aligned}$$

Torej

$$[\widehat{x},\widehat{p}] = i\hbar \tag{3.3}$$

Vrstni red delovanja operatorja položaja in gibalne količine je torej pomemben.

[Če komu gornji računček z operatorji dela težave, si lahko misli, da komutator deluje na poljubno funkcijo:

$$\begin{aligned}
[\widehat{x},\widehat{p}]\,\psi &= -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\psi\right) = \\
&= -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial x}{\partial x}\right) = i\hbar\psi
\end{aligned}$$

Ker je funkcija $\psi\,(x)$ poljubna, sledi, da mora veljati enačba 3.3.]

Če operatorja dveh fizikalnih količin ne komutirata, ne obstoja stanje, v katerem bi bile vrednosti obeh količin ostro določene. Če bi tako stanje ψ_{AB} obstajalo, bi moralo biti hkrati lastno stanje obeh operatorjev:

$$\begin{aligned}
\widehat{A}\psi_{AB} &= A\psi_{AB} \\
\widehat{B}\psi_{AB} &= B\psi_{AB}
\end{aligned}$$

Na prvo enačbo delujmo z $\widehat{B}$, na drugo pa z $\widehat{A}$:

$$\begin{aligned}
\widehat{B}\widehat{A}\psi_{AB} &= A\widehat{B}\psi_{AB} = AB\psi_{AB} \\
\widehat{A}\widehat{B}\psi_{AB} &= B\widehat{A}\psi_{AB} = AB\psi_{AB}
\end{aligned}$$

Za zadnjim enačajem smo lahko zamenjali A in B, ker sta to lastni vrednosti, torej navadni števili. Odštejmo enačbi med seboj, pa imamo

$$\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\psi_{AB} = 0$$

Ker smo predpostavili, da $\widehat{A}$ in $\widehat{B}$ ne komutirata, da je torej $\left[\widehat{A},\widehat{B}\right] \neq 0$, vidimo, da ne moreta imeti hkrati ostro določene vrednosti. Njun produkt nedoločenosti $\delta A\,\delta B$ je različen od nič.

*Zadnji korak tega izvajanja ni neoporečen, stanje ψ_{AB} bi lahko bilo lastno stanje komutatorja $\left[\widehat{A},\widehat{B}\right]$ z lastno vrednostjo 0. Za položaj in gibalno količino to ni mogoče, ker je $[\widehat{x},\widehat{p}] = i\hbar$ konstanta. Vendar velja ugotovitev splošno, kar se lahko prepričamo na naslednji način, ki nam bo dal tudi kvantitativno zvezo med pričakovano vrednostjo komutatorja in produktom nedoločenosti.

Najprej definirajmo operatorja $\delta\widehat{A} = \widehat{A} - \langle A\rangle$ in $\delta\widehat{B} = \widehat{B} - \langle B\rangle$. Pričakovani vrednosti $\langle \delta A^2\rangle$ in $\langle \delta B^2\rangle$ sta kvadrata nedoločenosti obeh operatorjev. Ker števila komutirajo med seboj, je $\left[\widehat{A},\widehat{B}\right] = \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]$. Tvorimo nov operator $\left(\delta\widehat{A} + iq\delta\widehat{B}\right)\left(\delta\widehat{A} - iq\delta\widehat{B}\right)$, kjer je q poljuben. Pričakovana vrednost tega operatorja je večja od nič:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left\langle \left(\delta\widehat{A} + iq\delta\widehat{B}\right)\left(\delta\widehat{A} - iq\delta\widehat{B}\right)\right\rangle = \\ &= \left\langle \delta\widehat{A}^2\right\rangle + iq\left\langle \delta\widehat{A}\delta\widehat{B}\right\rangle - iq\left\langle \delta\widehat{B}\delta\widehat{A}\right\rangle + q^2\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle = \\ &= \left\langle \delta\widehat{A}^2\right\rangle + iq\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle + q^2\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle = F(q) \end{aligned}$$

Poiščimo q_0, pri katerem ima $F(q)$ minimum. Iz $F'(q_0) = 0$ dobimo

$$q_0 = -\frac{i}{2}\frac{\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle}{\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle}$$

Pričakovana vrednost komutatorja dveh fizikalnih količin mora biti imaginarna, zato je q_0 realen. Dobljeni ekstrem je minimum, ker je $q^2\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle > 0$. Postavimo q_0 v gornjo neenačbo in dobimo

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left\langle \delta\widehat{A}^2\right\rangle\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle^2 - \frac{1}{4}\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle^2 \\ 0 &\leq \left\langle \delta\widehat{A}^2\right\rangle\left\langle \delta\widehat{B}^2\right\rangle + \frac{1}{4}\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle^2 \end{aligned}$$

Korenimo, pa imamo

$$\delta A\,\delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\delta\widehat{A},\delta\widehat{B}\right]\right\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\widehat{A},\widehat{B}\right]\right\rangle\right|$$

Vzemimo kot primer položaj in gibalno količino. Komutator je $[\widehat{x},\widehat{p}] = i\hbar$, od koder z uporabo gornje formule dobimo že znano Heisenbergovo zvezo

$$\delta x\delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

*

Komponente gibalne količine med seboj komutirajo, saj je vrstni red odvodov po različnih koordinatah nepomemben. Zato so ravni valovi v treh razsežnostih lahko hkratna lastna stanja vseh treh komponent gibalne količine. Ni tudi nobenih omejitev pri nedoločenosti na primer δx in δp_y, ker odvajanje po y komutira z množenjem z x.

3.4 Vrtilna količina

Lotimo se obravnave vrtilne količine. Klasično je vrtilna količina za delec glede na izbrano izhodišče

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_z - zp_y,\, zp_x - xp_z,\, xp_y - yp_x)$$

Operator vrtilne količine, ki ga bomo označevali z $\widehat{\mathbf{l}}$, dobimo tako, da v klasični izraz postavimo operator gibalne količine:

$$\widehat{\mathbf{l}} = \left(\widehat{l}_x, \widehat{l}_y, \widehat{l}_z\right) = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y},\, z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z},\, x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Poglejmo komutator

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{l}_x, \widehat{l}_y\right] &= \widehat{l}_x\widehat{l}_y - \widehat{l}_y\widehat{l}_x = \\
&= -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] = \\
&= -\hbar^2[y\frac{\partial}{\partial x} + yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + xz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - \\
&\quad -zy\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} - xz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + xy\frac{\partial^2}{\partial z^2}] \\
&= i\hbar\,\widehat{l}_z
\end{aligned}$$

S ciklično permutacijo koordinat dobimo še $\left[\widehat{l}_y, \widehat{l}_z\right]$ in $\left[\widehat{l}_z, \widehat{l}_x\right]$. Tako imamo komutacijska pravila

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{l}_x, \widehat{l}_y\right] &= i\hbar\,\widehat{l}_z \\
\left[\widehat{l}_y, \widehat{l}_z\right] &= i\hbar\,\widehat{l}_x \\
\left[\widehat{l}_z, \widehat{l}_x\right] &= i\hbar\,\widehat{l}_y
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Operatorji, ki med seboj ne komutirajo, ne morejo imeti hkrati ostro določenih vrednosti, to je, ni stanj, ki bi bila hkrati lastna stanja vseh treh komponent vrtilne količine. To je drugače kot pri gibalni količini, kjer komponente komutirajo. Izberemo si lahko le eno komponento in poiščemo njena lastna stanja in lastne vrednosti. Običajno se odločimo za komponento $\widehat{l}_z$.

Zanima nas še kvadrat velikosti vektorja vrtilne količine $\widehat{\mathbf{l}}^2 = \widehat{l}_x^2 + \widehat{l}_y^2 + \widehat{l}_z^2$. Poglejmo, ali ta operator komutira s komponentami. Za to izračunajmo

$$\begin{aligned}\left[\widehat{l}_z^2, \widehat{l}_x\right] &= \widehat{l}_z^2\widehat{l}_x - \widehat{l}_x\widehat{l}_z\widehat{l}_x + \widehat{l}_x\widehat{l}_z\widehat{l}_x - \widehat{l}_x\widehat{l}_z^2 = \\ &= \widehat{l}_z\left[\widehat{l}_z, \widehat{l}_x\right] + \left[\widehat{l}_x, \widehat{l}_z\right]\widehat{l}_z = 0\end{aligned}$$

V prvi vrstici smo prišteli in odšteli $\widehat{l}_x\widehat{l}_z\widehat{l}_x$. Ker taka zveza velja za vsak par koordinat, operator $\widehat{\mathbf{l}}^2$ komutira z vsemi komponentami, tako da lahko poiščemo hkrati lastne vrednosti in lastne funkcije za $\widehat{\mathbf{l}}^2$ in $\widehat{l}_z$.

Vzemimo, da imamo dve telesi, ki sta povezani s togo ročko. Takemu objektu recimo rotator. Temu modelu se približa dvoatomna molekula. Zanima nas vrtenje take ročke. Njen položaj najlažje podamo tako, da navedemo kot θ med ročko in osjo z in kot ϕ med projekcijo ročke na ravnino xy in osjo $\dot{x}$, torej kote krogelnih koordinat. Stanje rotatorja bo podano s funkcijo $\psi(\theta, \phi)$. Poiskati želimo lastne vrednosti in lastne funkcije operatorjev $\widehat{l}_z$ in $\widehat{\mathbf{l}}^2$. Za to ju moramo najprej izraziti v krogelnih koordinatah. Iz zvez

$$\begin{aligned}x &= r\cos\phi\sin\theta \\ y &= r\sin\phi\sin\theta \\ z &= r\cos\theta\end{aligned}$$

po nekoliko daljšem, a preprostem računu dobimo

$$\begin{aligned}\widehat{l}_x &= -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ \widehat{l}_y &= -i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ \widehat{l}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \mathrm{ctg}\theta \, \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Z izrazom za $\widehat{l}_z$ lahko nekoliko bolje razumemo, zakaj ni mogoče hkrati ostro določiti vseh treh komponent vrtilne količine. Podobno kot je operator za položaj $\widehat{x}$ kar množenje z x, je operator za kot kar množenje s ϕ. To seveda ne komutira z odvajanjem po ϕ, torej s komponento z vrtilne količine. Velja enako komutacijsko pravilo kot za $\widehat{x}$ in $\widehat{p}$, to je $\left[\widehat{\phi}, \widehat{l}_z\right] = i\hbar$. Zato tudi ni mogoče hkrati ostro določiti ϕ in l_z. Produkt nedoločenosti je $\delta\phi\, \delta l_z \geq \hbar/2$. V lastnem stanju $\widehat{l}_z$ je $\delta l_z = 0$ in je ϕ popolnoma nedoločen in so vse vrednosti ϕ enako verjetne. To pomeni, da je tudi projekcija osi vrtenja na ravnino xy popolnoma nedoločena in ne moremo nič reči o komponentah x in y vrtilne količine.

Določimo sedaj lastne vrednosti in lastne funkcije $\widehat{l}_z$. Ta operator deluje le na funkcije ϕ, zato zapišemo njegova lastna stanja kot $\Phi(\phi)$:

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = l_z \Phi$$

Rešitve te enačbe imajo obliko $\Phi = A\, e^{im\phi}$, kjer je $m = l_z/\hbar$. Ker predstavlja $\phi+2\pi$ isto točko kot ϕ, mora biti $\Phi(\phi)$ periodična funkcija s periodo 2π. To pomeni, da je m celo število. Lastne vrednosti komponente z vrtilne količine so torej $l_z = \hbar\, m$, lastne funkcije pa $\Phi_m = A\, e^{im\phi}$. Konstanto A določimo s pogojem, da mora biti valovna funkcija normalizirana: $\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi \, d\phi = 1$, tako da je $A = 1/\sqrt{2\pi}$.

Poglejmo še lastne vrednosti in lastne funkcije $\widehat{\mathbf{l}}^2$. Te so neposredno povezane z lastnimi vrednostmi energije vrtenja, saj je klasično rotacijska energija prečke $W_{rot} = \Gamma^2/2J$, kjer je J vztrajnostni moment prečke glede na os, ki je pravokotna na prečko in gre skozi težišče. Zato je iskanje lastnih vrednosti in lastnih funkcij $\widehat{\mathbf{l}}^2$ enakovredno reševanju stacionarne Schroedingerjeve enačbe za rotator. Označimo lastne fukcije z $Y(\theta, \phi)$ in imamo

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \mathrm{ctg}\theta \, \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -\lambda Y(\theta, \phi)$$

Lastna vrednost $\widehat{\mathbf{l}}^2$ je $\hbar^2\lambda$. Enačbo spet rešimo tako, da zapišemo $Y =$

$\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)$. Enačbo množimo s $\sin^2\theta$ in delimo z $\Theta\Phi$ in dobimo

$$\frac{1}{\Theta}\sin^2\theta\,\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+\frac{1}{\Theta}\sin\theta\,\cos\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta}-\lambda\sin^2\theta=\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}$$

Desna stran je le funkcija θ, leva pa samo funkcija ϕ, zato mora biti vsaka stran posebej enaka konstanti, recimo ji m^2. Rešitve za Φ so lastne funkcije $\widehat{l}_z$

$$\Phi=e^{im\phi}$$

kjer je m celo število.

Preostala enčba za Θ in lastno vrednost λ je bolj zapletena in podrobnosti reševanja ne bomo navajali. Pot je podobna kot pri iskanju lastnih funkcij in lastnih vrednosti harmonskega oscilatorja. Rešitve iščemo v obliki vrste po $\cos\theta$. Vrsta konvergira za vse θ le, če se konča, torej če je polinom. To nam da možne vrednosti $\lambda=l\,(l+1)$, kjer je $l=0,1,2...$ Veljati mora tudi $|m|\leq l$. Za $m=0$ so lastne funkcije Legendreovi polinomi $P_l\,(\cos\theta)$, ki so stopnje l in so sodi za sode l in lihi za lihe l. Če je $m\neq0$, so lastne funkcije pridružene Legendreove funkcije $P_l^m(\cos\theta)$, kjer je

$$P_l^m\,(\xi)=\left(1-\xi^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{d\xi^m}P_l\,(\xi)$$

Lastne funkcije operatorja $\widehat{\mathbf{l}}^2$ so torej

$$Y_{lm}\,(\theta,\phi)=A_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{3.5}$$

Konstanta A_{lm} je določena z normalizacijskim pogojem

$$\int Y_{lm}^*Y_{lm}d\Omega=\int_0^\pi\int_0^{2\pi}Y_{lm}^*Y_{lm}d\phi\sin\theta\,d\theta\;=1$$

Integrirati moramo po vsem prostorskem kotu, to je, po vsej površini enotne krogle. Funkcijam $Y_{lm}\,(\theta,\phi)$ pravimo *krogelne funkcije.* Lastne vrednosti operatorja kvadrata velikosti vrtilne količine so

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

lastne vrednosti projekcije vrtilne količine na os z pa

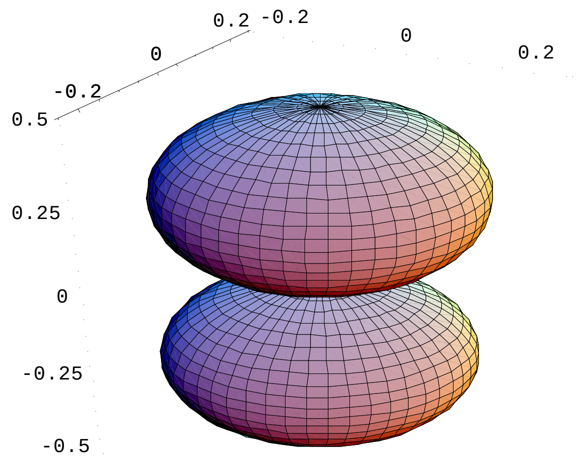
$$l_z=\hbar\,m$$

Pri tem je $l = 0, 1, 2...$ in $m = -l, -l+1, ...l-1, l$.

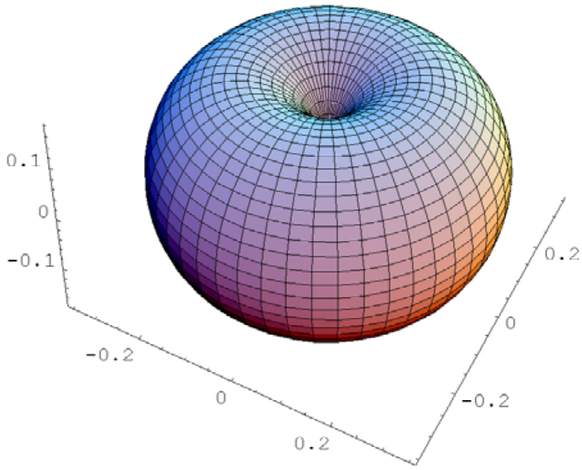
Prvih nekaj sferičnih funkcij je

$$
\begin{array}{ll}
Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} & \\
Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta & Y_{1\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{\pm i\phi} \\
Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right) & Y_{2\pm1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta \, e^{\pm i\phi} \\
 & Y_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{\pm 2i\phi}
\end{array}
$$

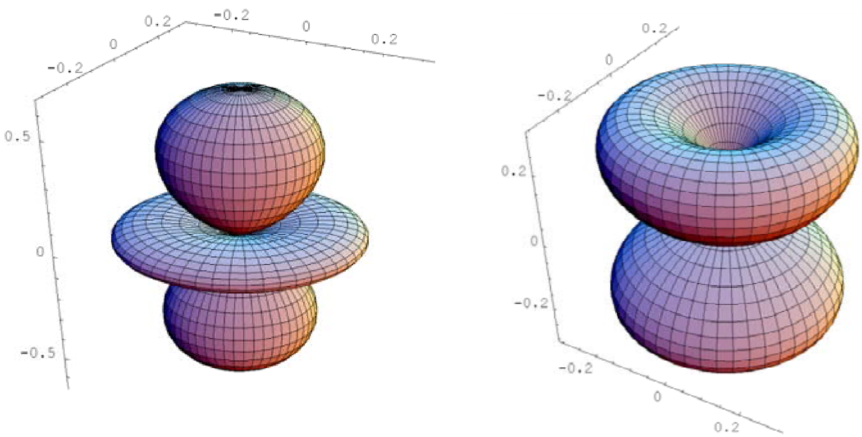
Nekaj jih je predstavljenih tudi na naslednjih slikah.



Y_{10}



$|Y_{11}|$



$|Y_{20}|$ in $|Y_{21}|$

Lastne vrednosti za kvadrat velikosti vrtilne količine so degenerirane. Vsaki vrednosti l ustreza $2l+1$ vrednosti m in prav toliko različnih sferičnih funkcij.

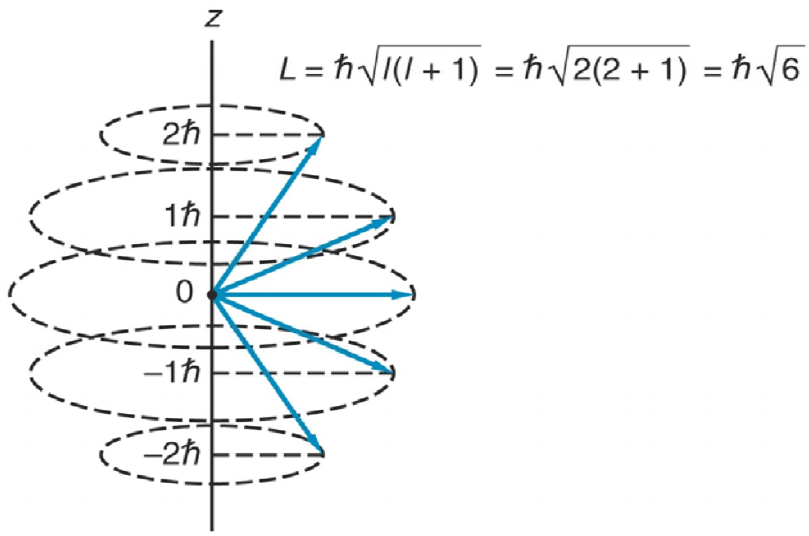
Sferične funkcije so med seboj ortogonalne:

$$\int Y^*_{l'm'} Y_{lm} d\Omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y^*_{l'm'} Y_{lm} d\phi \sin\theta \, d\theta = \delta_{l'l}\delta_{m'm}$$

Vsako funkcijo na krogli, to je funkcijo θ in ϕ lahko zapišemo kot razvoj po sferičnih funkcijah.

Funkcije Y_{lm} opisujejo stanje rotatorja, to je objekta, za katerega bi klasično morali navesti orientacijo v prostoru in kako se ta spreminja, to je, vektor vrtilne količine. Absolutni kvadrat $|Y_{lm}|^2$ predstavlja gostoto verjetnosti, da je prečka usmerjena v okolico $d\Omega$ kotov θ in ϕ. Pri gibanju točkastega delca imamo v kvantni mehaniki lahko stanje, v katerem so ostro določene tri komponente gibalne količine - ravni val - pri čemer so koordinate nedoločene. Pri vrtenju prečke ne moremo ostro določiti niti vseh treh komponent vrtilne količine, temveč le eno - komponento z - in velikost vrtilne količine. Orientacija prečke v ravnini xy je popolnoma nedoločena, zato morata biti nedoločeni tudi x in y komponenti vrtilne količine.

Geometrijsko si vrtilno količino lahko predstavljamo takole. Vemo, kolikšna je njena velikost in vemo, kolikšna je projekcija na os z, tako da mora pri vsakem m ležati na nekem stožcu okoli osi z, kot kaže slika.



Edino kadar je vrtilna količina 0, so vse tri komponente tudi 0 in s tem ostro določene. Ustrezna krogelna funkcija je konstanta, prečka torej z enako verjetnostjo kaže v katerokoli smer v prostoru.

Energija vrtenja rotatorja je dana z velikostjo vrtilne količine:

$$W_{rot} = \frac{\Gamma^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{2J}\, l\,(l+1)$$

kjer je J vztrajnostni moment. Če je dolžina prečke L in masa na vsakem koncu m, je $J = mL^2/2$. Primer takega rotatorja predstavlja molekula dveh enakih atomov. Res meritve infrardečih spektrov pokažejo, da se energijski razmik med lastnimi stanji energije zaradi vrtenja molekule enakomerno povečuje, kot pričakujemo po gornji formuli:

$$\Delta W_{rot} = \frac{\hbar^2}{2J}\left[l\,(l+1) - (l-1)\,l\right] = \frac{\hbar^2}{J} l$$

Vzemimo za primer molekulo H_2. Vrednost $\hbar^2/2J = \hbar^2/m_H L^2 = \hbar^2 c^2/m_H c^2 L^2 = (200\,\mathrm{eVnm})^2/(10^9\mathrm{eV}\ 10^{-2}\mathrm{nm}^2) = 2 \cdot 10^{-3}\mathrm{eV}$ da prehode v daljnem infrardečem področju, to je pri valovnih dolžinah okoli 0,1mm.