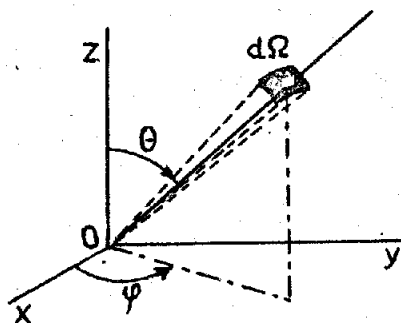


### 3.3) Hustota pravděpodobnosti

Pravděpodobnost  $w_{lm}(\theta, \varphi)$ , že rotátor, který je v kvantovém stavu s vlnovou funkcí  $\psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}^m(\theta, \varphi)$ , bude nalezen v infinitesimálním prostorovém úhlu  $d\Omega$  (viz (5)) ve směru daném úhly  $\theta, \varphi$  je

$$w_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = |Y_{lm}^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (58)$$

Uvědomíme-li si, že všechny sférické funkce závisí na  $\varphi$  jen přes faktor  $\exp(\pm i m \varphi)$ , je jasné, že  $|Y_{lm}^m(\theta, \varphi)|^2$ , a tudíž  $w_{lm}(\theta, \varphi)$ , nezávisí na  $\varphi$ ; pro všechna  $l, m$  budou úhlové závislosti hustoty pravděpodobnosti výskytu, tj. funkce  $w_{lm}(\theta, \varphi)$ , rotačně symetrické kolem osy Oz. S výhodou se proto zobrazují v polárních souřadnicích (obr.24); pro  $l=0,1,2,3$  jsou tyto grafy v obr.25.

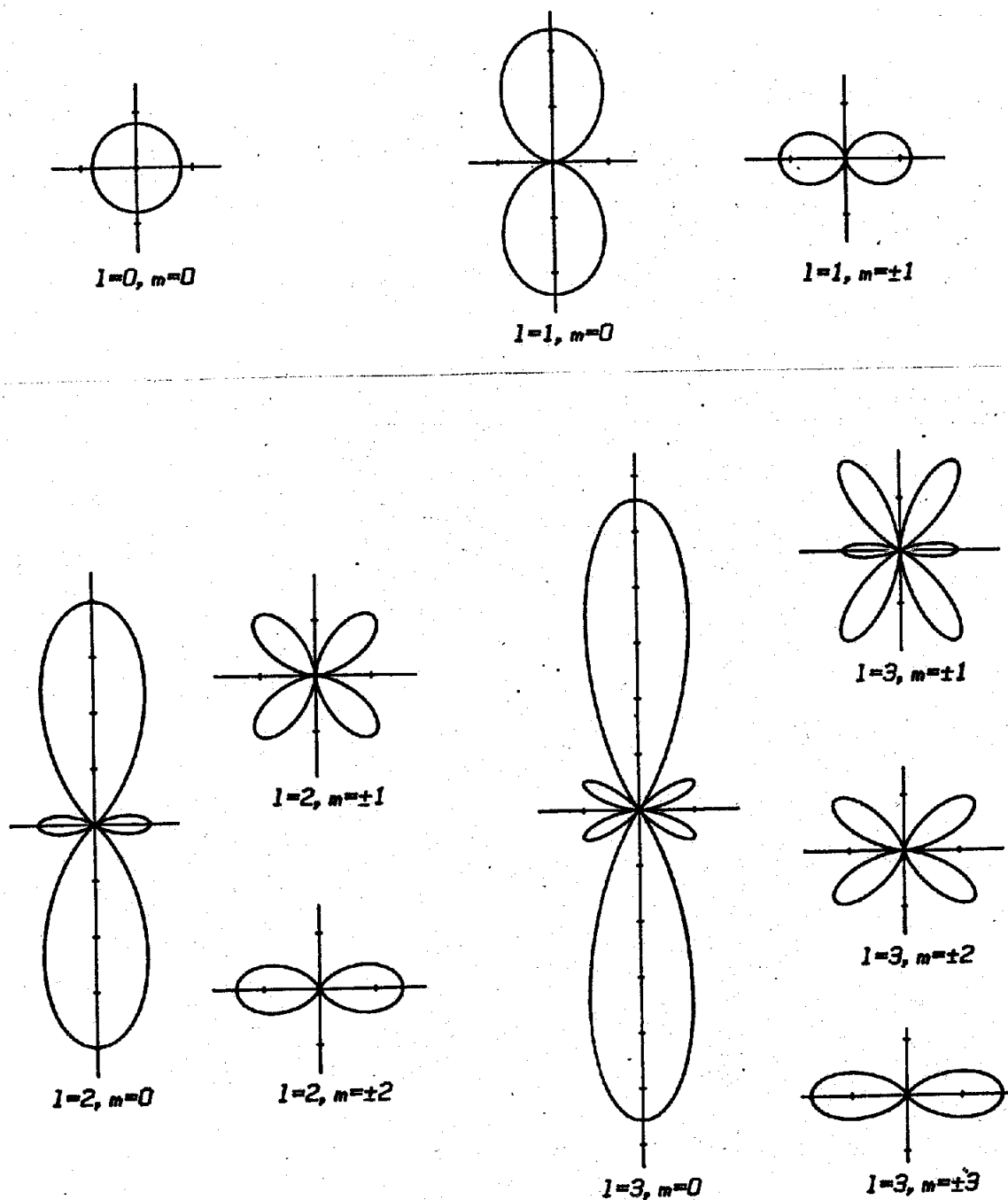


Obr.24

K zobrazení  $|Y_{lm}^m(\theta, \varphi)|^2$  v polárních souřadnicích. Zvolíme osu z a na ní počátek O. Z něho ve směru daném úhly  $\theta, \varphi$  nakreslíme polopaprsek a na něj vyneseme délku  $|Y_{lm}^m|^2$ . Takto získané body leží na ploše, která je rotačně symetrická kolem osy z. Proto v obr.25 jsou zakresleny jen křivky, které vzniknou řezem této plochy nějakou rovinou obsahující osu z.

### 4. Skládání momentů hybnosti

V předcházejících odstavcích jsme studovali orbitální moment hybnosti  $\vec{L}$  jedné částice. Z kapitoly V víme, že částice má i vlastní moment hybnosti  $\vec{S}$  (spin). V odst. VI.3 jsme se navíc naučili skládat spiny dvou stejných fermionů ve výsledný spin. Logicky bychom nyní měli řešit tyto problémy: i) výsledný orbitální moment hybnosti soustavy částic; ii) skládání orbitálního  $\vec{L}$  a spinového  $\vec{S}$  momentu hybnosti jedné částice v celkový moment hybnosti  $\vec{J}$ ; iii) celkový moment hybnosti soustavy částic. Problematika skládání momentů hybnosti je poměrně rozsáhlá; důležitá je ve fyzice atomů, molekul a jmenovitě pro spektroskopii. Není možné (a ani by to neodpovídalo pojetí skriptu) se jí zde zabývat v celé šíři. Na následujících řádcích se proto omezíme na základní úvahu o skládání dvou momentů hybnosti; pro určitost provedeme rozbor pro momenty hybnosti  $\vec{L}$ , závěry však platí obecně pro libovolné dva momenty hybnosti.



Obr.25

Polární grafy funkcí  $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$  pro  $l = 0, 1, 2, 3$  a odpovídající  $m$  (konstrukce grafů je popsána v obr.24). Měřítko je pro všechny grafy stejné, dělení os je po 0,1. Ve všech grafech je osa z svislá.

## 4.1) Dva orbitální momenty hybnosti

Mějme soustavu tvořenou dvěma neinteragujícími částmi. Jejich momenty hybnosti označme  $\vec{L}_1$ ,  $\vec{L}_2$  a výsledný moment hybnosti pak

$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ . Jím odpovídají operátory  $\vec{L}_1$ ,  $\vec{L}_2$  a

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \quad (59)$$

Vlastní hodnoty operátorů z-ových složek, tj. operátorů  $L_{1z}$ ,  $L_{2z}$ ,  $L_z$ , označme  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m$  a vlastní hodnoty operátorů  $L_1^2$ ,  $L_2^2$ ,  $L^2$  označme symboly  $l_1$ ,  $l_2$ ,  $l$ .

Nyní si položíme otázku, jak se sečítají momenty hybnosti, resp. jakých hodnot mohou nabývat kvantová čísla  $l$  a  $m$ ?

Pro kvantové číslo  $m$  je odpověď snadná. Protože operátor  $L_z$  je

$$L_z = L_{1z} + L_{2z} \quad (60)$$

budou jeho vlastní hodnoty součtem  $m_1, m_2$  (v jednotkách  $\hbar$ ), tj.

$$m = m_1 + m_2 \quad (61)$$

Pro operátor  $L^2$  ( $\neq L_1^2 + L_2^2$ ) je situace složitější.

Předně se musíme rozhodnout, jakými kvantovými čísly budeme charakterizovat moment hybnosti soustavy (musí to být vlastní hodnoty komutujících operátorů-viz odst.IV.3.3). Jedna možnost je:

$$l_1, l_2, m_1, m_2 \quad (62)$$

Pro daná  $l_1, l_2$  nabývají  $m_1, m_2$  hodnot

$$m_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l_1, \quad m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l_2 \quad (63a)$$

Celkem tedy bude  $(2l_1+1)(2l_2+1)$  různých stavů se stejnými čísly  $l_1, l_2$ .

Vlnové funkce těchto stavů označíme

$$\psi_{l_1, l_2, m_1, m_2} \quad (63b)$$

Existuje však druhá možnost: za kvantová čísla určující stav soustavy zvolit

$$l_1, l_2, l, m \quad (64a)$$

kde  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ .

To je možné, neboť operátory  $L_1^2$ ,  $L_2^2$ ,  $L^2$ ,  $L_z$  komutují (nekomutuje ale  $L^2$  s  $L_{1z}$  nebo  $L_{2z}$ !). Vlnové funkce v tomto případě označíme

$$\psi_{l_1, l_2, l, m} \quad (64b)$$

Pro daná  $l_1, l_2$  musí i nyní existovat  $(2l_1+1)(2l_2+1)$  různých stavů, neboť počet možných stavů nemůže záviset na tom, jak je rozlišujeme. Těchto  $(2l_1+1)(2l_2+1)$  stavů musí být nyní rozlišeno kvantovými čísly  $l, m$ . Určíme je následující úvahou.

Sečítáme postupně různé přípustné hodnoty  $m_1, m_2$ ; tak dostaneme hodnoty  $m$  podle následující tabulky, v níž jsou seskupeny hodnoty  $m_1, m_2$  dávající touž hodnotu  $m$ :

$m_1$	$m_2$	$m$
$l_1$	$l_2$	$l_1+l_2$
$l_1-1$	$l_2$	$l_1+l_2-1$
$l_1$	$l_2-1$	
$l_1-1$	$l_2-1$	$l_1+l_2-2$
$l_1-2$	$l_2$	
$l_1$	$l_2-1$	

Největší možná hodnota  $m$  je  $m=l_1+l_2$ , které odpovídá jeden stav  $\psi$ ; proto i nejvyšší přípustná hodnota  $m$  a  $l$  ve stavech  $\psi$  bude  $l_1+l_2$ .

Další hodnotě  $m=l_1+l_2-1$  odpovídají dva stavy, které se musí rozlišit hodnotou  $l$ . Protože největší možná hodnota  $l$ , jak jsme právě ukázali, je  $l_1+l_2$  a protože  $m$  nemůže být větší než  $l$  (pro  $m$  opět musí platit  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  - viz (21)), mohou tomuto  $m$  odpovídat jen stavy  $l=l_1+l_2$ ,  $l=l_1+l_2-1$ . K  $m=l_1+l_2-2$  existují 3 stavy  $\psi$ ; analogicky k předchozímu závěru bude  $l$  pro tyto stavy rovno:  $l_1+l_2$ ,  $l_1+l_2-1$ ,  $l_1+l_2-2$ .

V prováděné úvaze by bylo možné pokračovat, dokud by se při zmenšení  $m$  o 1 zvětšoval o 1 počet stavů se zadaným  $m$ . Procedura by zřejmě pokračovala až do chvíle, kdy  $m$  dosáhne hodnoty  $|l_1-l_2|$ ; předpokládáme-li že  $l_2 \leq l_1$ , zůstal by při dalším snižování  $m$  počet stavů roven  $2l_2+1$ . Nejmenší přípustná hodnota  $l$  je tedy  $|l_1-l_2|$ . Dospěli jsme tak k závěru, že přípustné hodnoty  $l$  jsou

$$l = l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, |l_1-l_2| \quad (65)$$

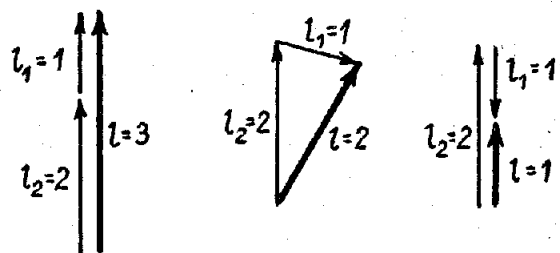
Je-li  $l_2 \leq l_1$  (pro  $l_1 \leq l_2$  zaměníme indexy), bude  $l$  nabývat  $2l_2+1$  hodnot a celkový počet stavů  $\psi$  odpovídající daným hodnotám  $l_1, l_2$  je roven

$$\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} (2l+1) = (2l_1+1)(2l_2+1),$$

stejně jako pro stavy  $\psi$ .

Uvedený výsledek byl získán ještě před vznikem nové kvantové teorie v tzv. vektorovém modelu. V tomto modelu se předpokládá, že délka vektoru  $\underline{l}$  (srov. s konstrukcí v obr.21), který vznikne složením dvou momentů hybnosti  $l_1, l_2$ , se může měnit jen po jednotkových skocích.

Maximální je pro paralelní vektory, kdy  $l = l_1 + l_2$ , a minimální pro antiparalelní s  $l = l_2 - l_1$  (pro  $l_2 \gg l_1$ ) (obr.26).



Obr.26

Skládání momentů hybnosti s  $l_1=1$ ,  $l_2=2$  ve výsledný moment hybnosti.

Jestliže je třeba skládat 3 nebo více momentů hybnosti, skládáme je postupně po dvou s využitím odvozených pravidel.

Všimněme si ještě vztahu mezi stavy  $\psi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$  a  $\psi_{l_1, l_2, l, m}$ . Ve stavu  $\psi_{l_1, l_2, m_1, m_2}$  není obecně určitá hodnota  $l$ . Protože soubory funkcí  $\varphi$  i  $\psi$  určují stavy téhož systému, musí být možný přechod od jednoho souboru k druhému. Jinými slovy: soubor jedné funkce lze použít jako bázi, v níž se dají vyjádřit druhé funkce. Lze psát

$$\psi_{l_1, l_2, l, m} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} \varphi_{l_1 m_1 l_2 m_2} \quad (66)$$

$$\varphi_{l_1, m_1, l_2, m_2} = \sum_l \sum_m C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} \psi_{l_1 l_2 l m} \quad (67)$$

kde

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} \equiv \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l_1 l_2 l m \rangle = \int \varphi_{l_1 m_1 l_2 m_2}^* \psi_{l_1 l_2 l m} d\tau$$

jsou tzv. Clebschovy-Gordanovy koeficienty (koeficienty vektorového skládání) a kvantová čísla  $m_1, m_2, m$  jsou svázána vztahem (61) a  $l, l_1, l_2$  vztahem (65).

Pro Clebschovy-Gordanovy koeficienty platí řada užitečných vztahů, které můžete najít např. v [2]. Existují také tabulky těchto koeficientů, např. v [6] (viz též dodatek G). Fyzikální význam C-G koeficientů je prostý. Z (66) je vidět, že  $|\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l_1 l_2 l m \rangle|^2$  udává pravděpodobnost, že ve stavu  $\psi_{l_1 l_2 l m}$  ( $\equiv |l_1 l_2 l m\rangle$ ) (v němž je celkový moment hybnosti dán  $l$  a jeho průmět na osu  $z$  číslem  $m$ ), je projekce momentu hybnosti na osu  $z$  u prvního podsystemu dána  $m_1$  a u druhého  $m_2 = m - m_1$ . Táž veličina

$|\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l_1 l_2 l m \rangle|^2$  dává podle (67) pravděpodobnost, že ve stavu  $|l_1 m_1 l_2 m_2\rangle$  (jsou dány  $m_1, m_2$  pro podsystemy) je celkový moment soustavy určen číslem  $l$ .

#### 4.2) Orbitální a spinový moment hybnosti

Úvaha, kterou jsme právě provedli pro dva orbitální momenty hybnosti, platí zcela obecně pro kombinaci libovolných dvou momentů. Můžete si např. ověřit, že aplikována na dva spiny s  $s=1/2$  dá výsledky, které jsme odvodili v odst.VI.3.

Pravidla kvantování plynoucí z komutačních relací (1) jsou platná i pro celkový moment hybnosti částice

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad , \quad (68)$$

pro výsledný orbitální moment hybnosti soustavy částic

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i \quad , \quad (69)$$

pro výsledný spin soustavy

$$\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i \quad (70)$$

i pro celkový moment hybnosti soustavy částic

$$\vec{J} = \sum_i ( \vec{L}_i + \vec{S}_i ) \quad (71)$$

(nezapomínejme ale na předpoklad o nezávislosti podsystemů vystupujících v sumacích).

Všimněme si jen krátce kombinace orbitálního momentu hybnosti a spinu s kvantovým číslem  $s=1/2$  ( $m_s = \pm 1/2$ ). V předchozí úvaze to znamená nahradit  $l_1, m_1$  čísly  $l, m_l$  a dvojici  $l_2, m_2$  čísly  $s, m_s$ . Operátor celkového momentu (68) je  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  a pro z-ovou složku  $J_z = L_z + S_z$ .

Vlastní hodnoty  $J^2$  budou

$$j(j+1)\hbar^2$$

Podle (65) (1 je nahrazeno j) jsou pro  $l > 0$  možné pouze dvě hodnoty  $j = l \pm s$ , tj.

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{a} \quad j = l - \frac{1}{2} \quad (72)$$

Pro stav s  $l=0$  (s-stav) je možná pouze hodnota

$$j = \frac{1}{2}$$

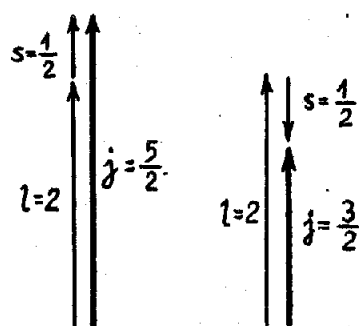
Pro  $l=2$  jsou možné kombinace (72) v obr.27.

Kvantové číslo j může tudíž nabývat hodnot

$$j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots \quad (73)$$

Vlastní hodnoty  $J_z$  pak jsou (pro dané j)

$$m_j \hbar \quad \text{kde} \quad m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots, \pm j \quad (74)$$



Obr.27

Skládání  $\vec{L}$  a  $\vec{S}$  pro  $l=2$  a  $s=1/2$ 

Spektroskopické značení zavedené pro kvantové číslo  $l$  (viz(20)) se při kombinaci  $l$  se spinem  $s$  rozšiřuje v zápis

$$^l_j \quad (75)$$

kde  $l$  se opět zapíše písmenem  $s, p, d, \dots$  a kvantové číslo  $j$  se napíše jako index vyjádřený zlomkem. Tak dostaneme

$l$	0	1		2		3	
$j$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$
označení	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	$f_{5/2}$	$f_{7/2}$

Tabulky Clebschových-Gordanových koeficientů pro skládání  $l$  s  $s=1/2$  jsou v dodatku G.