Odtud pak pro operátor $\mathcal{L}^2 = \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2$ dostaneme

$$\mathcal{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

nebo po úpravě (7)

$$\mathcal{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\operatorname{tg}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

2. Vlastní funkce a vlastní hodnoty operátorů $\mathcal{L}_z$, $\mathcal{L}^2$

2.1) Řešení

Zjistili jsme, že spolu s velikostí momentu hybnosti můžeme přesně určit pouze jednu z jeho složek. Protože při naší volbě souřadné soustavy je nejjednodušší operátor $\mathcal{L}_z$,budeme se zabývat z-ovou složkou (osa z má zatím v prostoru libovolný směr).

Protože operátory $\mathcal{L}_z, \mathcal{L}^2$ komutují, je možné najít pro ně společný soubor ortonormálních vlnových funkcí (viz odst.IV.3.3), které budou řešením rovnic

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) = \alpha\,\psi(r,\theta,\varphi) \tag{8a}$$

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi(r,\theta,\varphi) = \beta\,\psi(r,\theta,\varphi) \tag{8b}$$

kde jsme označili vlastní hodnoty $\mathcal{L}_z$ jako α a pro $\mathcal{L}^2$ jako β.
Protože operátory $\mathcal{L}_z, \mathcal{L}^2$ nepůsobí na proměnnou r, můžeme ji ve funkcích $\psi(r,\theta,\varphi)$ považovat za parametr, který nebudeme dále vypisovat.

Vlastní hodnoty a funkce $\mathcal{L}_z$ - rovnice (8a)

Řešení rovnice (8a) je

$$\psi(\theta,\varphi) = f(\theta)\,e^{i\alpha\varphi/\hbar} \tag{9}$$

kde $f(\theta)$ je libovolná funkce θ (a ovšem i r).
V odst. II.3.4 jsme stanovili podmínky, kterým musí vyhovovat každá vlnová funkce; připomeňme si, že musí být: i) spojitá i s 1.derivací, ii) jednoznačná, iii) konečná, iv) kvadraticky integrovatelná. U funkce (9) je třeba zajistit jednoznačnost; při zvětšení úhlu o 2π musí platit (okrajová podmínka pro (8a))

$$\psi(\theta,\varphi+2\pi) = \psi(\theta,\varphi) \tag{10}$$

Aplikace podmínky (10) na řešení (9) vede k požadavku $\exp(i2\pi\alpha/\hbar) = 1$; odtud dostáváme vlastní hodnoty $\mathcal{L}_z$

$$\boxed{\alpha = m_l\,\hbar} \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{11}$$

V podstatě je to výsledek shodný s 1.Bohrovým postulátem ve staré kvantové teorii (Bohr uvažoval pouze kruhové orbity).

Vlastní hodnoty a vlastní funkce $\mathcal{L}^2$ - rovnice (8b)

Dosaďme nyní funkci (9) do rovnice (8b) (již ze struktury operátoru $\mathcal{L}^2$ je zřejmé, že je možná separace proměnných θ, φ). Po dělení $\exp(im_1\varphi)$ dostaneme rovnici pro funkci $f(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{df(\theta)}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m_1^2}{\sin^2\theta}\right) f(\theta) = 0 \qquad (12)$$

kde

$$\lambda = \beta / \hbar^2 \qquad (12a)$$

Naznačíme jen hlavní kroky řešení; postup je v hlavních rysech shodný s tím, který jsme podrobně probrali u harmonického oscilátoru. Pro přehlednost budeme dále psát jen m místo m_1 !

a) V rovnici (12) provedeme substituci

$$\cos\theta = y \qquad (13)$$

a dostaneme tak rovnici

$$(1 - y^2)\frac{d^2f}{dy^2} - 2y\frac{df}{dy} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-y^2}\right) f = 0 \qquad (14)$$

kde

$$-1 \leqslant y \leqslant 1 .$$

b) Protože rovnice (14) má singularity v bodech $y = \pm 1$ (u harmonického oscilátoru to byly body $\pm\infty$), je třeba vyšetřit řešení v okolí těchto bodů. Přitom se ukáže, že řešení pro nás přijatelné je třeba hledat ve tvaru

$$f(y) = (1 - y^2)^{|m|/2}\, v(y) \qquad (15)$$

Po dosazení do (14) získáme rovnici pro v(y):

$$(1 - y^2)\frac{d^2v}{dy^2} - 2(|m| + 1)\, y\frac{dv}{dy} + \left[\lambda - |m|(|m| - 1)\right] v = 0 \qquad (16)$$

c) Řešení rovnice (16) se hledá ve tvaru mocninné řady

$$v(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n \qquad (17)$$

Dosadíme ji do (16) a uspořádáme podle mocnin y. Má-li být rovnice splněna pro všechna y, musí být koeficienty u všech mocnin y rovny nule. Tento požadavek dá rekurentní formuli (srov. postup vedoucí k (VII.19))

$$a_{n+2} = \frac{(n + |m|)(n + |m| + 1) - \lambda}{(n+2)(n+1)} \cdot a_n \qquad (18)$$

Znovu (podobně jako v (VII.20)) dostáváme dvě řešení v(y): nekonečné řady se sudými a lichými mocninami y. Obě se v okolí bodů $y = \pm 1$

chovají jako $(1-y^2)^{-m}$, tj. divergují pro $y \to \pm 1$. Východisko z této situace je opět jediné: ukončit řadu u některé mocniny y, takže v(y) se stane polynomem. Možné to je, neboť v (18) máme zatím neurčený parametr λ. Položíme-li

$$\lambda = l\,(\,l + 1\,) \qquad l = 0,1,2,\ldots \tag{19}$$

bude pro dané l a m funkce v(y) polynomem stupně nejvýše $l - |m|$. Protože volbou (19) změníme jen jednu z řad v polynom; musí být druhá identicky rovna nule. To dosáhneme zase volbou $a_0 \neq 0$, $a_1 = 0$ nebo $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$; $a_0 \neq 0$, resp. $a_1 \neq 0$, se pak určí z normalizační podmínky.

Z (19) a (12a) získáme vlastní hodnoty $\mathcal{L}^2$

$$\boxed{\beta = l\,(\,l + 1\,)\,\hbar^2}\ , \quad l = 0,1,2,\ldots \tag{20}$$

Místo kvantového čísla l se často používá značení převzaté ze spektroskopie:

l	0	1	2	3	4	5	6
označení písmenem	s	p	d	f	g	h	i

Velikost momentu hybnosti částice je, stejně jako jeho složka L_z, kvantována a může nabývat hodnot

$$\sqrt{l(l+1)}\ \hbar \quad (l=0,1,2,\ldots)\ .$$

K danému l (pro danou velikost $\vec{L}$) jsou možné hodnoty projekce $\vec{L}$ na zvolenou osu (srov.(11))

$$m_l\hbar \quad \text{a} \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l\ , \tag{21}$$

neboť v úvaze, která nás přivedla k (19), jsme položili $n + |m| = l$ a sčítací index $n \geq 0$.

2.2) Sférické funkce

Funkce které jsou řešením rovnice (14) se nazývají přidružené Legendrovy funkce; v matematice patří mezi tzv. speciální funkce, což jsou funkce, které jsou řešením některých, často se v aplikacích vyskytujících, obyčejných diferenciálních rovnic 2.řádu [11,12,13].

Pro $m > 0$ se dají vyjádřit takto

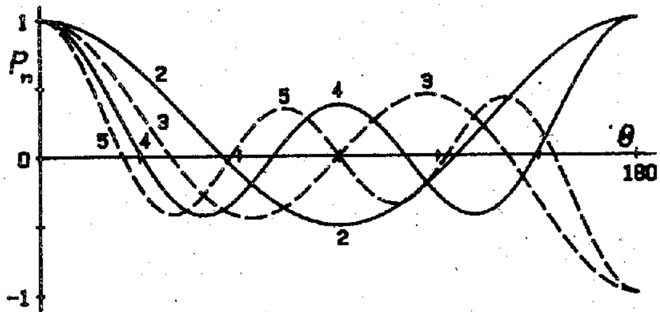
$$P_l^m(y) = (1-y^2)^{m/2} \cdot \frac{d^m}{dy^m} P_l(y) \tag{22}$$

kde $P_l(y)$ jsou tzv. Legendrovy polynomy, které jsou konečným řešením (14) s $\lambda = l(l+1)$ a m=0; to znamená, že $P_l(y) = P_l^0(y)$. Polynomy $P_n(y)$ lze získat pomocí formule (Rodriguezův vzorec)

$$P_n(y) = \frac{1}{2^n\, n!} \frac{d^n}{dy^n}\left[(y^2-1)^n\right] \tag{23}$$

Tabulka 3
Legendrovy polynomy $P_n(y)$ pro $n=0,\dots,5$

$$P_0(y) = 1$$
$$P_1(y) = y$$
$$P_2(y) = \frac{1}{2}(3y^2 - 1)$$
$$P_3(y) = \frac{1}{2}(5y^3 - 3y)$$
$$P_4(y) = \frac{1}{8}(35y^4 - 30y^2 + 3)$$
$$P_5(y) = \frac{1}{8}(63y^5 - 70y^3 + 15y)$$



Obr.20
Legendrovy polynomy $P_n(\cos\theta)$
pro n = 2,3,4,5

Takto definované Legendrovy polynomy jsou na intervalu $-1 \leq y \leq 1$ ortogonální; platí

$$\int_{-1}^{1} P_n(y)\, P_k(y)\, dy = \int_0^{\pi} P_n(\cos\theta) P_k(\cos\theta) \sin\theta\, d\theta = \frac{2}{2n+1}\, \delta_{nk} \tag{25}$$

Pro výpočet hodnot polynomů vyšších řádů je možné využít <u>rekurentní formuli</u>

$$(2n+1) y P_n(y) = (n+1) P_{n+1}(y) + n P_{n-1}(y) \;;\; n=1,2,\dots \tag{26}$$

<u>Přidružené Legendrovy funkce s $m<0$</u> definujeme takto:

$$P_l^{-m}(y) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(y) \qquad (m>0) \tag{27}$$

Spolu s (22),(23) to umožňuje vyjádřit P_l^m pro všechna m_l v (21).

<u>Pro dané m</u> jsou i přidružené Legendrovy funkce ortogonální :

$$\int_{-1}^{1} P_p^m(y) P_q^m(y)\, dy = \int_0^{\pi} P_p^m(\cos\theta) P_q^m(\cos\theta) \sin\theta\, d\theta = \frac{2}{2q+1} \frac{(q+m)!}{(q-m)!} \delta_{pq} \tag{28}$$

<u>Normalizované vlastní funkce operátorů $\mathcal{L}_z, \mathcal{L}^2$</u> označíme $Y_l^m(\theta,\varphi)$; platí pro ně

$$\mathcal{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_l^m(\theta,\varphi) \;;\; \mathcal{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{29}$$

V rovnicích (29) je $l = 0, 1, 2, \ldots$ a $m(\equiv m_l) = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$.

Na základě předcházejících výsledků ((9),(11),(14),(19)) dostaneme

$$\boxed{Y_l^m(\Theta,\varphi) = C_m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\; P_l^{|m|}(\cos\Theta)\, e^{im\varphi}} \tag{30}$$

kde

$$C_m = (-1)^m \text{ pro } m \geqslant 0 \quad \text{a} \quad C_m = 1 \text{ pro } m < 0 .$$

Funkce $Y_l^m(\Theta,\varphi)$ se nazývají <u>sférické funkce</u> (pozn.: někteří autoři nazývají sférickými funkcemi P_l^m).

Jiná forma vyjádření, platná pro všechna m, je

$$Y_l^m(\Theta,\varphi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; e^{im\varphi} (\sin\Theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos\Theta)^{l+m}} (\sin\Theta)^{2l} \tag{31}$$

Z (30) nebo (31) plyne, že

$$Y_l^{-m}(\Theta,\varphi) = (-1)^m Y_l^{m*}(\Theta,\varphi) \tag{32}$$

Upozornění!

Sférické funkce jsou určeny (tak jako vlastní funkce i jiných operátorů) až na fázový faktor s modulem 1. Na to je třeba dávat pozor při studiu literatury. Vedle výše uvedených definic se vyskytují i jiné; např. se faktor $(-1)^m$ vypouští a pro $m<0$ se definuje $Y_n^{-m} = Y_n^{m*}$.

Pokud se provedená volba při všech matematických úpravách dodržuje, jsou samozřejmě konečné výsledky pro měřitelné fyzikální veličiny shodné.

<u>Normalizační konstanta sférických funkcí</u> je vybrána tak, že platí (funkce $f(\Theta)$ a $\exp(im\varphi)$ v (9) jsou vlastně normalizované také každá zvlášť)

$$\int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}\int_{\theta=0}^{\theta=\pi} Y_l^{m*}(\Theta,\varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\Theta,\varphi)\, \sin\Theta\, d\Theta\, d\varphi = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \tag{33}$$

Tabulka 4

Několik prvních sférických funkcí

$$Y_0^0(\Theta,\varphi) = (4\pi)^{-1/2}$$

$$Y_1^0(\Theta,\varphi) = (3/4\pi)^{1/2} \cos\Theta$$

$$Y_1^{\pm 1}(\Theta,\varphi) = \mp (3/8\pi)^{1/2} \sin\Theta \exp(\pm i\varphi) \tag{34}$$

$$Y_2^0(\Theta,\varphi) = (5/16\pi)^{1/2} (3\cos^2\Theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1}(\Theta,\varphi) = \mp (15/8\pi)^{1/2} \sin\Theta \cos\Theta \exp(\pm i\varphi)$$

$$Y_2^{\pm 2}(\Theta,\varphi) = (15/32\pi)^{1/2} \sin^2\Theta \exp(\pm i 2\varphi)$$

2.3) Prostorové kvantování

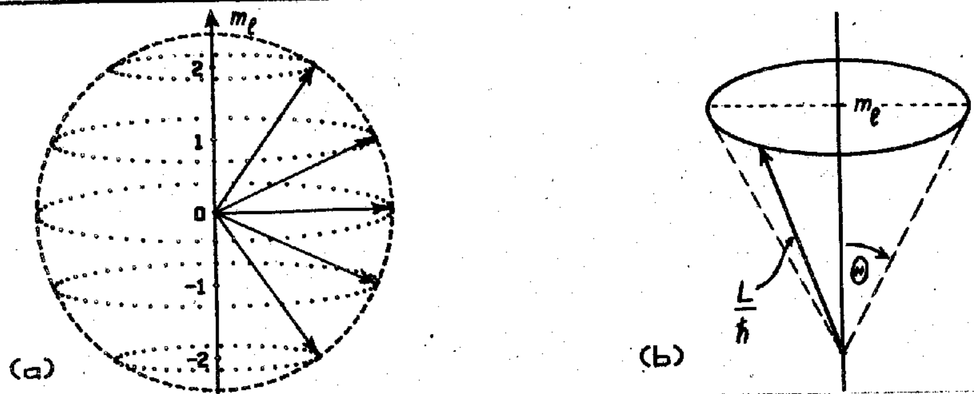
Nechť l je nějaké pevné číslo. Potom je možné moment hybnosti zobrazit vektorem délky

$$\frac{L}{\hbar} = \sqrt{l(\,l + 1\,)} \tag{35}$$

Jeho průmět do osy z může podle (21) být

$$m = -l, -(l-1), \ldots, -1, 0, 1, \ldots, (l-1), l \ .$$

Kvantové číslo m ($\equiv m_l$) se nazývá magnetické kvantové číslo [1] a l orbitální kvantové číslo.



Obr.21

Vektorový diagram pro l=2 a $L/\hbar=\sqrt{6}$ (a); Vektor $\vec{L}$ může ležet kdekoliv na kuželi a průmět m se nemění (b).

Protože jediná podmínka kladená na složky L_x, L_y je $L_x^2+L_y^2 = L^2-m^2\hbar^2$, můžeme vektor $\vec{L}$ považovat za náhodně orientovaný vzhledem k úhlu φ; může ležet kdekoliv na kuželi podle obr.21b s vrcholovým úhlem θ, pro který platí

$$\cos\theta = \frac{m}{\sqrt{l(\,l + 1\,)}} \tag{36}$$

V klasické mechanice by tomu odpovídala situace, kdy vektor $\vec{L}$ koná precesní pohyb kolem osy z.

Nebylo by ovšem správné si představovat, že vektor $\vec{L}$ má určitý směr a my ho pouze nejsme schopni přesně změřit. Ve skutečnosti, jestliže L^2 a L_z mají určité hodnoty, musíme si představit, že je současně pokryt celý kužel orientací (obr.21b), který patří k daným hodnotám L^2, L_z. Uvedený vektorový model vychází z klasických představ a při řešení mnoha úloh (např. skládání momentů hybnosti apod.) může být velice užitečný. Je však třeba mít stále na paměti kvalitativní odlišnost objektů mikrosvěta od makroobjektů a nečinit na základě klasických představ ukvapené závěry. K problematice momentu hybnosti se ještě vrátíme v následující kapitole.

---

[1] V magnetickém poli se snímá degenerace vzhledem k m (Zeemanův jev).