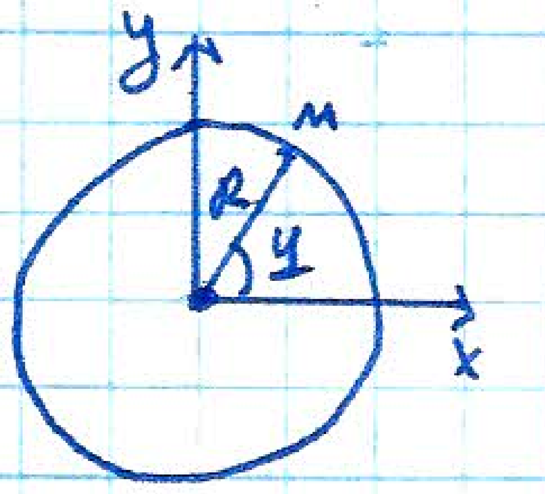
- רוטור צפיד קוונטי

לקראת הטיפול בבעיית אטום המימן, נטפל בבעיה מקדימה אשר מובלת בפתרון של בעיית אטום המימן, היא בעיית הרוטור הצפיד.

לשם כך נזכר לרגע בבעיה של חלקיק בטבעת.



$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

לצורך פתרון הבעיה הצבנו את הלפלסיאן מקואורדינטות קרטזיות לקואורדינטות קוטביות (פולריות) וקיבלנו המילטוניאן שתלוי רק ב-φ.

$$\nabla^2\psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}$$

כאשר אמרנו כי $r=R=const$ ולכן:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \frac{-\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\psi(\varphi)}{\partial\varphi^2} = \frac{-\hbar}{2I}\frac{\partial^2\psi(\varphi)}{\partial\varphi^2} = \frac{1}{2I}\left[-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi(\varphi)$$

כאשר באופן קלאסי ההמילטוניאן של חלקיק מסתובב נתון ע"י $H=\frac{L^2}{2I}$

ולכן עבור חלקיק בטבעת דו-ממדית נקבל כי אופרטור התנע הזוויתי הקוונטי הינו:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = \hat{L}_z^2$$

$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ ניצב למישור של $\vec{r}$ ושל $\vec{p}$.

וכיוון שהחלקיק כולו במישור XY התנע הזוויתי בכיוון ציר z ולכן התנע הכולל שווה לתנע בכיוון ציר z!

רמות האנרגיה של החלקיק מאופיינות במספר קוונטי יחיד שכן הבעיה היא אפקטיבית דו ממדית:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \; ; \; m=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

$\hat{H}=\frac{\hat{L}_z^2}{2I}$ כלומר הע"ע של ההמילטוניאן הם $\frac{\hbar^2m^2}{2I}$ אך ההמילטוניאן הוא בסה"כ

ולכן הע"ע של $\hat{L}_z^2$ הינם $\hbar^2m^2$ כלומר הע"ע של $\hat{L}_z$ הינם $m\hbar$, כאשר $m=0,\pm1,\pm2,\ldots$.

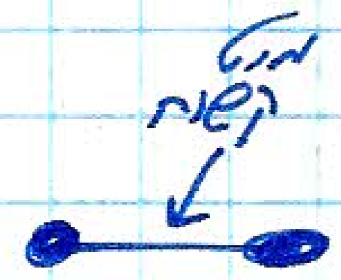
כלומר מפתרון הבעיה הפשוטה של חלקיק בטבעת קיבלנו שהתנע הזוויתי בכיוון z מקוונטט עם ע"ע של $m\hbar\,;\ m=0,\pm1,\pm2,\ldots$ דבר זה נכון לא רק לחלקיק בטבעת אלא לכל גוף שמסתובב במישור. התנע הניצב למישור יהיה מקוונטט.

כלומר, מתוך הבעיה של חלקיק בטבעת, הבלוי לנוע במישור XY, למדנו על הקוונטיזציה של גודל מרכיב התנע הזוויתי $\hat{L}_z$. בכדי ללמוד על שני הרכיבים הנוספים ונטפל בבעיה הכללית של חלקיק הנע ע"ג מעטפת כדורית מבעיה זו נלמד על התנ"ז הכללי וכיצד הוא מקוונטט.

בניגוד לאנרגיה שבהתאם לתנאי השפה יכולה להיות מקוונטטת או רציפה, התנ"ז הוא תמיד מקוונטט. דבר זה נובע מתנאי השפה המחזוריים שתמיד חלים על התנ"ז.

נעבור כעת לטיפול בבעיה המרכזית:

רוטור צביד קוונטי.



מקור השם מגיע מבעיה של רוטור צביד מסתובב. ע"י מעבר למערכת מרכז המסה בעיה זו ניתנת להפוך לבעיה של חלקיק הנע על-גבי מעטפת כדורית. הבעיה שנפתור תהיה כללית עבור כל גוף קשיח מסתובב כאשר ההבדל בין המערכות השונות יהיה ב-I מומנט ההתמד שלהן.

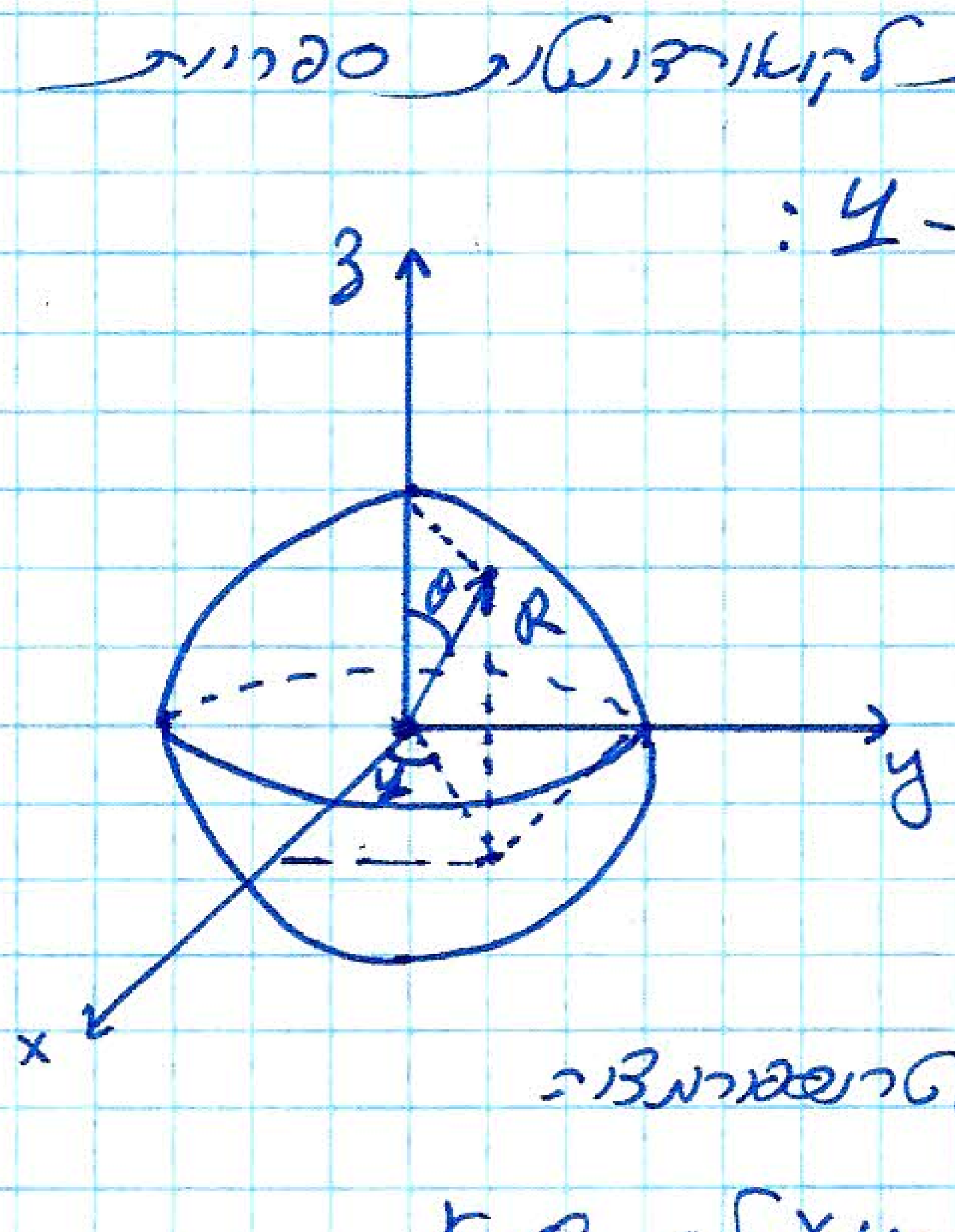
המילטוניאן של הבעיה הוא:
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

בקואורדינטות קרטזיות המילטוניאן תלוי בשלושה משתנים x,y,z.

ניזכר כי בבעיית החלקיק בטבעת המילטוניאן הקרטזי היה תלוי בשני משתנים xy אך כשעברנו לקואורדינטות פולריות המילטוניאן היה תלוי רק במשתנה φ.

באופן דומה כאן נעבור מקואורדינטות קרטזיות לקואורדינטות ספריות והמילטוניאן יהפוך להיות תלוי אך ורק בזוויות θ ו-φ:

הטרנספורמציה היא:



$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \qquad \begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \theta = \arccos\left[\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right] \\ \varphi = \arctan\left[y/x\right] \end{cases} \qquad \begin{cases} 0 \le r \le \infty \\ 0 \le \theta \le \pi \\ 0 \le \varphi \le 2\pi \end{cases}$$

הטרנספורמציה של הלפלסיאן נעשית באופן דומה לטרנספורמציה שביצענו עבור הלפלסיאן בחלקיק בטבעת במעבר מ-x,y ל-r,φ.

לא נעשה את הפיתוח המלא של הטרנספורמציה שכן הוא מייגע מאוד.
רק נשרטט קווים כלליים לפיתוח (מומלץ מאוד לנסות לפתח זאת לבד בבית).
הטרנספורמציה מבוצעת בעזרת כלל השרשרת:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

ובאותו האופן עבור $\frac{\partial \Psi}{\partial y}$ ו $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ כאשר הנגזרות $\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial \theta}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x}$
ניתנות לחשבון מתוך משוואות הטרנספורמציה.
לאחר שיש בידינו המשוואות עבור הנגזרות הראשונות עלינו לגזור פעם נוספת בכדי לקבל את הנגזרות השניות הבלתי מעורבות: $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$
ולחבר את כל האיברים. שוב הפיתוח דומה מאוד לזה שביצענו בשני מימדים עבור בעיית החלקיק בטבעת.
התוצאה הסופית שמתקבלת היא:

$$\boxed{\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}$$

כעת כיוון שאנו דנים במערכת של חלקיק ע"ג ספירה קבועה נקבל כי $r=R=const$
ולכן האיבר עם הנגזרת לפי r נופל ונקבל כי:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{R^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{R^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\Psi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2MR^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\Psi$$

וכיוון שמתקיים $I=MR^2$ ומתקיים כי: $\hat{H} = \hat{L}^2/2I$
אנו מזהים את האיבר הבא כאופרטור $\hat{L}^2$:

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

ומציאת הע"ע של $\hat{L}^2$ יובילו למציאת הע"ע של ההמילטוניאן ובאופן דומה גם עבור הפונקציות העצמיות. מציאת הע"ע והפונקציות העצמיות של $\hat{L}^2$ הינה בעיה סבוכה אשר נפתור אותה בהמשך:

$$\hat{L}^2\Psi(\theta,\varphi) = \lambda\Psi(\theta,\varphi)$$

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

הבעיה הינה דו-ממדית ולכן נקבל 2 מספרים קוונטים כשנפתור אותה.

נחלק ב- $-\hbar^2$ ונפתח את הנגזרות:

$$\frac{\partial^2\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}=-\frac{\lambda}{\hbar^2}\Psi(\theta,\varphi)\quad /\cdot\sin^2\theta$$

נוכל להכפיל את המשוואה ב- $\sin^2\theta$ ולקבל:

$$\sin^2\theta\frac{\partial^2\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\theta^2}+\cos\theta\sin\theta\frac{\partial\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\theta}+\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta\Psi(\theta,\varphi)=-\frac{\partial^2\Psi(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

ניתן לראות כי האופרטור בצד שמאל תלוי רק ב- θ וזה שבצד ימין תלוי ב- φ ועל-כן ננסה פתרון מהצורה של הפרדת משתנים

$$\Psi(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\cdot\Phi(\varphi)$$

בדומה למה שעשינו עבור חלקיק בקופסא תלת ממדית גם כאן המשוואה הדו-ממדית תהפוך לשתי משוואות חד ממדיות. נציב את $\Psi(\theta,\varphi)$ ונקבל:

$$\Phi(\varphi)\left[\sin^2\theta\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial\theta^2}+\cos\theta\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}+\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta\,\Theta(\theta)\right]=-\Theta(\theta)\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

נחלק ב- $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ את שני האגפים ונקבל:

$$\underbrace{\frac{1}{\Theta(\theta)}\left[\sin^2\theta\frac{\partial^2\Theta(\theta)}{\partial\theta^2}+\cos\theta\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}+\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta\,\Theta(\theta)\right]}_{\text{תלוי ב-}\theta}=\underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}}_{\text{תלוי ב-}\varphi}\overset{\text{לא תלוי ב-}\theta\text{ וב-}\varphi}{=}const=\alpha$$

אגף שמאל תלוי רק ב- θ ואגף ימין רק ב- φ ולכן ~~[illegible]~~ כיוון ש- θ ו- φ בלתי תלויים זה בזה כל אחד מהאגפים חייב להיות קבוע.

כלומר קיבלנו את שתי המשוואות הבאות:

$$\begin{cases}\dfrac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}=-\alpha\Phi(\varphi)\;;\quad 0\le\varphi\le2\pi\\[2ex]\sin^2\theta\dfrac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\cos\theta\sin\theta\dfrac{d\Theta(\theta)}{d\theta}+\dfrac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta\,\Theta(\theta)=\alpha\,\Theta(\theta)\end{cases}$$

עבור המשוואה הראשונה חייב להתקיים תנאי השפה שלפיו $\Phi(\varphi)$ חד ערכית

כלומר $\Phi(\varphi=0)=\Phi(\varphi=2\pi)$

<u>הבעיה הזו עם תנאי השפה הזה הינו בדיוק הבעיה של חלקיק בטבעת!</u>

הפתרון הינו:

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\ ;\ m=0,\pm1,\pm2,\dots$$

כעת נוכל לקבל את α מתוך המספר הקוונטי m ע"י הצבת הפתרון:

$$\Phi''(\varphi)=-m^2\Phi(\varphi)\ \Rightarrow\ -\alpha=-m^2\ \Rightarrow\ \underline{\underline{\alpha=m^2}}$$

זהו המספר הקוונטי הראשון שקיבלנו הוא מתאים לסיבוב בשני ממדים ונקרא המספר הקוונטי המגנטי או המספר הקוונטי האזימוטלי.

כעת α- מופיעה גם במשוואה עבור $\Theta(\theta)$ ולכן $\Theta(\theta)$ תהיה תלויה ב- m.

<u>נטפל כעת במשוואה השניה עבור $\Theta(\theta)$:</u>

$$\sin^2\theta\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\cos\theta\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}+\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta\,\Theta(\theta)=m^2\Theta(\theta)$$

המשוואה הזו תניב מספר קוונטי נוסף שיהיה תלוי במספר הקוונטי m-.

או:

$$\sin^2\theta\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2}+\sin\theta\cos\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}+\left(\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta-m^2\right)\Theta(\theta)=0$$

בכדי לפתור זאת נגדיר משתנה חדש הוא $u=\cos\theta$ כיוון ש $0\le\theta\le\pi$ לכן $-1\le u\le1$.

<u>נחשב את הנגזרות לפי u:</u>

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial\theta}=\dfrac{\partial f}{\partial u}\dfrac{\partial u}{\partial\theta}=-\sin\theta\dfrac{\partial f}{\partial u}\\[2ex]\dfrac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}=\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\dfrac{\partial f}{\partial\theta}\right)=-\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial u}\left(-\sin\theta\dfrac{\partial f}{\partial u}\right)=\sin^2\theta\dfrac{\partial^2 f}{\partial u^2}+\sin\theta\dfrac{\partial f}{\partial u}\cdot\overbrace{\dfrac{\partial(\sin\theta)}{\partial\theta}\cdot\dfrac{\partial\theta}{\partial u}}^{\frac{\partial\sin\theta}{\partial u}}=\end{cases}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial u}=\frac{1}{\left(\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)}\ ,\ u=\cos\theta.$$

$$=\sin^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}+\sin\theta\cos\theta\underbrace{\left(-\frac{1}{\sin\theta}\right)}_{=\frac{1}{\left(\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)}}\frac{\partial f}{\partial u}=\sin^2\theta\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}-\cos\theta\frac{\partial f}{\partial u}$$

כעת נציב את שתי הנגזרות הללו בחזרה במשוואה עבור $\Theta(\theta)$:

$$\sin^2\theta\left[\sin^2\theta\frac{d^2\Theta(u)}{du^2}-\cos\theta\frac{d\Theta(u)}{du}\right]+\sin\theta\cos\theta\left(-\sin\theta\frac{d\Theta(u)}{du}\right)+$$

$$+\left(\frac{\lambda}{\hbar^2}\sin^2\theta-m^2\right)\Theta(u)=0$$

נכפיל כי האיבר השני והשלישי בתיש ונחלק ב- $\sin^2\theta$ ונקבל:

$$\sin^2\theta \frac{d^2\Theta(u)}{du^2} - 2\cos\theta \frac{d\Theta(u)}{du} + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(u) = 0$$

נזכור כי $u=\cos\theta$ ולכן $\sin^2\theta = 1-\cos^2\theta = 1-u^2$ ונקבל:

$$\boxed{(1-u^2)\Theta'' - 2u\Theta' + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-u^2}\right)\Theta = 0} \qquad ' = \frac{d}{du}$$

משוואה זו נקראת ה- Associated Legendre Equation

נטפל במשוואה זו בשני מקרים: האחד בו $m=0$ והשני בו $m\neq 0$.

כאשר $m=0$ נקבל את המשוואה הבאה:

$$\boxed{(1-u^2)\Theta'' - 2u\Theta' + \frac{\lambda}{\hbar^2}\Theta = 0}$$

זוהי משוואת Legendre.

במשוואה זו המקדם $\frac{1}{1-u^2}$ נופל ולכן הפתרון הוא הרבה יותר פשוט.
הפתרון למשוואות אלו נעשה ע"י טורים. עבור האוסצילטור ההרמוני ראינו במפורש איך מבוצע הפתרון. ההתקדמות כאן גם מאוד דומות ועל-כן נראה רק את ההתקדמות לפתרון ואת התשובה הסופית.
הפתרון המלא ניתן למשוואה בספרות.

$m=0$

נתחיל עם $m=0$ משוואת לג'נדר.

תחילת הפתרון היא ע"י הצבת פתרון טורי: $\Theta(u)=\sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$

בהצבת הטור אנו מקבלים נוסחת רקורסיה בין המקדמים ע"י גזירת הטור והצבתו:

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1) - \lambda/\hbar^2}{(j+1)(j+2)}\, a_j \qquad j=0,1,2,3,\ldots$$

בדומה למשוואת הרמוני גם כאן הפתרון מתחלק לטורים שיכילו רק חזקות זוגיות וכאלה שיכילו רק חזקות אי-זוגיות. לפתרונות זוגיות מוגדרת.

בדומה למשוואת הרמוני גם כאן הטור חייב להיות סופי. כאן לעומת זאת $u=\cos\theta$ ולכן u כלוא בין 1- ל-1. בנוסף, בניגוד לבעיית האוסצילטור ההרמוני, כאן Θ לא מוכפלת ב $e^{-y^2/2}$ כפי שהיה עבור הפתרון של משוואת הרמוני.

לכן עלינו רק לבחון האם הטור מתכנס או מתבדר כאשר $j\to\infty$
בגבול זה $\lambda/\hbar^2$ זניח כי הוא קבוע ולכן:

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} \xrightarrow[j\to\infty]{} \frac{j}{j+2} \sim 1$$

בגבול גדול j-.

לכן המקדמים בטור לא דועכים! כלומר על-מנת שהטור לא יתבדר עלינו להפוך טור סופי! (לדוגמא כאשר $u=1$ הטור האינסופי יתבדר).

כלומר עלינו לדרוש כי הטור יהיה סופי: $\Theta(u)=\sum_{j=0}^{l} a_j u^j$

כך ש $a_l \neq 0$ ו $a_{l+2}=0$ וזאת בהתאם לאיברים עם זוגיות מוגדרת. אם l זוגי אז $a_1=0$ ואם l אי-זוגי אז $a_0=0$ אחרת הטור יהיה אינסופי.

ולכן מתוך יחס הרקורסיה ניתן לראות כי חייב להתקיים ש:

$$\frac{\lambda}{\hbar^2}=l(l+1) \Rightarrow \boxed{\lambda=l(l+1)\hbar^2 \quad l=0,1,2,\dots}$$

λ - הוא הע"ע של $\hat{L}^2$ - ולכן הע"ע של $\hat{L}^2$ מקוונטטים כפי שמצאנו:

$0, 2\hbar^2, 6\hbar^2, 12\hbar^2, \dots$

לכן הע"ע של אופרטור האנרגיה הינם הע"ע של $\hat{L}^2$ - מחולקים ב-$2I$ שכן $\hat{H}=\frac{\hat{L}^2}{2I}$ כלומר:

$$E_l=l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$$

והם לא תלויים במספר הקוונטי m. מכאן ש-m יוצר ניוון.

l - נקרא המספר הקוונטי של התנע"ז האורביטלי והוא מסומן ע"י אותיות באופן הבא:

$l = 0, 1, 2, 3, \dots$

$s, p, d, f, \dots$

זהו המקור המוכר לאורביטלים השונים בכימיה המוכרת.

l הינו החזקה הגבוהה ביותר של הפולינום שבתוך משוואת לג'נדר (מיחס הרקורסיה והתנאים המוקדמים).

הפולינומים הסופיים מסדר l אליהם הגענו נקראים פולינומי לג'נדר כאשר מקדמיהם מתקבלים מיחס הרקורסיה:

מקדם נרמול

$$\Theta_l^{m=0}(u)=N_l^{m=0}P_l(u) \quad ; \quad N_l^{m=0}=\sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\right)}$$

פולינומי לג'נדר

הפולינומים המתקבלים מתקבלים במשוואת לג'נדר הינם:

$P_0(u)=1 \quad ; \quad P_2(u)=\frac{1}{2}(3u^2-1)$

$P_1(u)=u \quad ; \quad P_3(u)=\frac{1}{2}(5u^3-3u)$

כאן בחרנו כי המקדמים $a_0=a_1=1$ - מספר הערות:

בשונה לפולינומי הרשומים שבהם דרשנו בחירה של המקדמים של

התאמת הגבוהה ביותר. מכאן נובע מקדם הנורמול.

תכונות פולינומי לז'נדר $P_l(u)$:

1. דרגת הפולינום (החזקה הגבוהה ביותר) היא l.

2. הזוגיות של הפולינום זהה לזוגיות של l - סימטרים עבור l זוגי ואנטי-סימטרים עבור l אי-זוגי.

3. יחס הרקורסיה בין המקדמים:

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1) - l(l+1)}{(j+1)(j+2)} a_j$$

גם בפולינומי הרמיט קיבלנו יחס רקורסיה בין הפולינומים.

4. יחס הרקורסיה בין הפולינומים:

$$\boxed{(l+1) P_{l+1}(u) = (2l+1) u P_l(u) - l P_{l-1}(u)}$$

מתוך יחס רקורסיה זה ניתן לבנות את כל הפולינומים בהינתן $P_0(u)$ ו-$P_1(u)$.

5. תנאי אורתוגונליות:

$$\int_{-1}^{1} du\, P_l(u) P_{l'}(u) = \begin{cases} 0 & l \neq l' \\ \frac{2}{2l+1} & l = l' \end{cases} = \left(\frac{2}{2l+1}\right) \delta_{ll'}$$

ניתן לעשות זאת במונחים של θ:

$$\begin{cases} u = \cos\theta \\ du = -\sin\theta\, d\theta \end{cases}$$

ולכן תנאי האורתוגונליות יכול להירשם כ:

$$\int_{0}^{\pi} \sin\theta\, P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta)\, d\theta = \begin{cases} 0 & l \neq l' \\ \frac{2}{2l+1} & l = l' \end{cases} = \left(\frac{2}{2l+1}\right) \delta_{ll'}$$

כיצד מטפלים בבעיה הכללית בה $m \neq 0$.

כעת אותה נרשם ב associated Legendre eq.

$$(1-u^2)\Theta'' - 2u\Theta' + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-u^2}\right)\Theta = 0$$

ניתן לרשום את הפתרון כ:

$$\Theta(u) = (1-u^2)^{|m|/2} \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$$

כש-m זוגי זהו טור פולינומיאלי וכאשר m אי-זוגי נקבל שורש. כאשר $m=0$ נקבל בתוצאה את הטור של פולינומי לז'נדר. האיבר הנוסף עוזר לטפל באיבר $\frac{m^2}{1-u^2}$ שמופיע במשוואה. אם נציב את הטור הנ"ל במשוואה נקבל את יחס הרקורסיה הבא:

$$a_{j+2} = \frac{(j+|m|)(j+|m|+1) - \frac{\lambda}{\hbar^2}}{(j+1)(j+2)} a_j$$

עבור $m=0$ נקבל בהצבה את יחס הרקורסיה של פולינומי לז'נדר.

גם כאן על מנת למנוע התבדרות עלינו לקטוע את הטור כלומר גם כאן נדרוש כי $\frac{\lambda}{\hbar^2}$ יהיה מספר שלם l כפול $(l+1)$

$$\boxed{\lambda \overset{!}{=} \hbar^2 l(l+1) \ ; \ l=0,1,2,\ldots}$$

אשר λ יקיים תנאי זה הטור יתאפס בנקודה מסוימת.

כדאי נשאל מהי החזקה המירבית של הפולינום j_{max} ? בהינתן l.

נדרוש כי יתקיים:

$$(j_{max}+|m|)(j_{max}+|m|+1) = l(l+1)$$

$$\Rightarrow j_{max}+|m| = l \Rightarrow j_{max} = l-|m|$$

מכאן שיש תלות על m! אסור ש- $|m|$ יהיה גדול מ- l אחרת נקבל חזקה מקסימלית שלילית. כלומר כדי ש $j_{max} \geq 0$ (זו החזקה בפולינום) עלינו לדרוש כי:

$$\boxed{|m| \leq l}$$

כלומר: $m=-l,-l+1,\ldots,0,\ldots,l-1,l$

סה"כ קיימים $2l+1$ ערכים אפשריים ל- m, לכל ערך של l נתון.

לכל אחת מהאפשרויות מתאים פולינום מחזקה $l-|m|$. החזקה המירבית מתקבלת כאשר $m=0$ והיא l.

הפתרונות המתקבלים מתוך הטור שרשמנו, מתוך יחס הרקורסיה ומתוך הדרישה לאי סופי שלו מתבדר נקראים <u>Associated Legendre Polynomials</u>

הם הפתרונות המלאים עבור $\Theta(\theta)$.

<u>תכונות של הפולינומים Associated Legendre Polynomials</u>

1. $\Theta_l^m(u) = \underbrace{N_l^m}_{\text{מקדם נרמול}} P_l^m(u)$

ניתן להראות כי ניתן לקבל מתוך:

$$\boxed{P_l^m(u) = (1-u^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{du^{|m|}} \underbrace{P_l(u)}_{\text{פולינום לז'נדר}}}$$

המשוואת מניבה פולינום מדרגה $l-|m|$.

(2). כאשר $m=0$ מקבלים $P_\ell^{m=0}=P_\ell$.

(3). אורתוגונליות:

$$\int_{-1}^{1} du\, P_\ell^m(u)\cdot P_{\ell'}^m(u) = \frac{2}{2\ell+1}\,\frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}\,\delta_{\ell\ell'}$$

כאשר $m=0$ תנאי האורתוגונליות מניב את התנאי שקיבלנו עבור פולינום לג'נדר.

מכאן ניתן לבנות את מקדם הנרמול:

$$N_\ell^m = \left[\frac{2\ell+1}{2}\,\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2}$$

כך שיתקיים:

$$\int_{-1}^{1} du\,|\Theta_\ell^m(u)|^2 = 1 .$$

גם כאן כאשר $m=0$ נקבל את הנרמול של פולינומי לג'נדר.

מספר דוגמאות לפולינומי לג'נדר associated:

כאשר $\ell=0$ גם $m=0$ ולכן:

$$P_0^0(u) = P_0(u) = 1$$

כאשר $\ell=1$ נקבל 3 פולינומים:

$$P_1^0(u) = P_1(u) = u$$

הנגזרת של $P_1(u)$

$$P_1^1(u) = \sqrt{1-u^2}\cdot 1 = \sqrt{1-u^2}$$

$$P_1^{-1}(u) = (1-u^2)^{|-1|/2}\cdot\frac{d^{|-1|}}{du^{|-1|}}u = \sqrt{1-u^2} = P_1^1(u)$$

$$P_2^0(u) = P_2(u) = \frac{1}{2}(3u^2-1)$$

$$P_2^1(u) = \sqrt{1-u^2}\,\frac{d}{du}P_2(u) = \sqrt{1-u^2}\cdot 3u = 3u\cdot\sqrt{1-u^2} = P_2^{-1}(u)$$

$$P_2^2(u) = (1-u^2)\frac{d^2}{du^2}P_2(u) = (1-u^2)\cdot 3 = 3(1-u^2) = P_2^{-2}(u)$$

ובאופן דומה ניתן לבנות את יתר פונקציות לג'נדר ה- associated.

כעת מצאנו פתרון גם עבור $\Phi(\varphi)$ וגם עבור $\Theta(\theta)$.

סיכום הפתרון:

$$\Psi_l^m(\theta,\varphi) = N_l^m P_l^m(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

$$l=0,1,2,\dots \; ; \; |m|\le l$$

$$N_l^m = \left[\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2}$$

נהוג לכתוב את הפתרון באמצעות פונקציות ספריות הרמוניות Spherical Harmonics שהן זהות לפונקציות Ψ_l^m עד כדי פקטור של $(-1)^m$:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^m\left[\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \qquad m\ge 0$$

ובאשר $m<0$ כופלים במקום ב- $(-1)^m$.

כיון שהסימן אינו נושא משמעות פיזיקלית, שכן לצורך חישוב ערכי תצפית תמיד הפונקציה תופיע בריבוע באינטגרל והסימן ייפול, נוכל להגדיר את $Y_l^m(\theta,\varphi)$ כפונקציות העצמיות של $\hat L^2$.

$\langle A\rangle = \int\Psi^* A\Psi\, d\tau$

תכונות של ה- Spherical Harmonics.

(1) $Y_l^m(\theta,\varphi)$ הינן פו' עצמיות של האופרטור $\hat L^2$ עם ע"ע $\lambda = l(l+1)\hbar^2$. וניוון בשיעור של $2l+1$ (לכל ערך l יש $2l+1$ ערכי m אפשריים) שייכים לאותו הע"ע $\hbar^2 l(l+1)$. כמובן אלו הם גם הפונ' העצמיות של הרוטור הקשיח עם אנרגיות $l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$, $l=0,1,2,\dots$ וניוון $(2l+1)$.

לפי מודל בוהר הע"ע של $|\hat L|$ הם $n\hbar$ ולא $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ כמודל בוהר

יש כאן [illegible] ערכי n [illegible] בכפולות שלמות של $\hbar$. זוהי תוצאה קוונטית!

(2) בו-זמנית Y_l^m הינן גם פונקציות עצמיות של $\hat L_z$. כיון ש- Y_l^m כתובה כמכפלה של פו' ב- θ ופו' ב- φ כאשר הפו' ב- φ ($e^{im\varphi}$) היא עצמית לאופרטור $\hat L_z$ כפי שראינו בתחילת הפרק.

$$\hat L_z Y_{l,m}(\theta,\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_l^m(\theta,\varphi) = -i\hbar\cdot im\cdot Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

עם ע"ע - $m\hbar$, $m=0,\pm1,\pm2,\dots$.

כיון ש- Y_l^m עצמיות של $\hat L_z$ ושל $\hat L^2$ מכאן נובע ששני האופרטורים מתחלפים.

כלומר Y_l^m נבחרו כך שהם תהיינה עצמיות ל- $\hat L^2$ ול- $\hat L_z$. כמובן ש- z הוא כיוון שרירותי ונוכל לבנות פו' שתהיינה עצמיות גם ל- $\hat L_x$ ול- $\hat L^2$ או ל- $\hat L_y$ ול- $\hat L^2$.

נכתוב מספר דוגמאות עבור $Y_l^m(\theta,\varphi)$:

$(-1)^0$; $P_0^0(\cos\theta)$; $e^{0\cdot i\varphi}$

$$s:\quad Y_0^0(\theta,\varphi) = 1\cdot\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}\cdot 1\cdot 1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

- פוי s אחידה על כל הכדור
דומה לפוי עם $m=0$ עבור חלקיק בטבעת.
הנירמול הוא לפי הזווית המרחבית $\Omega=4\pi$

$P_1^0 = u = \cos\theta$

$$P_z:\quad Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r}$$

- הפוי הזו גדולה כש-$\theta=0°$ או כאשר $\theta=\pi$
כלומר הוא מרוכזת בקטבים לאורך ציר
z - פוי P_z.

$P_1^1 = \sqrt{1-u^2} = \sqrt{1-\cos^2\theta} = \sin\theta$

$$P:\quad Y_1^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$$

הפוי הזו גדולה כאשר $\theta=\frac{\pi}{2}$ כלומר
על "קו המשווה".

$$P:\quad Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$$

$$d:\quad Y_2^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

$P_2^0 = \frac{1}{2}(3u^2-1) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$

כלומר יש 3 פוי מסוג p
ו-5 פוי מסוג d שכן

$l=1:\quad 2\cdot1+1=3$

$l=2:\quad 2\cdot2+1=5$

ופוי s ותואמת כך $2\cdot0+1=1$
$l=0$.

$$d:\quad Y_2^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi}$$

$$d:\quad Y_2^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\varphi}$$

$$d:\quad Y_2^2(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2(\theta)\, e^{2i\varphi}$$

$$d:\quad Y_2^{-2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2(\theta)\, e^{-2i\varphi}$$

הנירמול של Y_l^m נקבע ע"י:

$$\int Y_l^{m*}(\theta,\varphi)\,Y_l^m(\theta,\varphi)\,d\Omega = \int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,|Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 = 1$$

או באופן דומה:

$$\int_{-1}^{1}\underbrace{d(\cos\theta)}_{du}\int_0^{2\pi}d\varphi\,|Y_l^m(\theta,\varphi)|^2$$

$$\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\;Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)\,Y_l^m(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

אורתו-נורמליות.

חשוב לציין כי הפוי Y_l^m הינן מרוכבות ולכן חשוב שלא לשכוח לרשום את
הפוי המצומדת באינטגרל שם.

הפונקציה $Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$ ראינו כי היא מייצגת את האורביטל P_z המכוון לאורך ציר ה-z (שם ההסתברות המרבית למציאות האלקטרון). באופן דומה נרצה לקבל פונקציות ממשיות מתאימות ל-$\frac{x}{r}$ ול-$\frac{y}{r}$ אשר תייצגנה את P_x ואת P_y, בהתאמה.

אך הפונקציות Y_1^1 ו-Y_1^{-1} הינן מרוכבות ואין בעלות כיווניות מועדפת במישור XY. בכדי לקבל פונקציות שמתאימות ל-P_x ול-P_y נרצה לייצג את הפונקציות העצמיות של $\hat{L}^2$ כפונקציות ממשיות.

<u>לשם כך, נעזר בעובדה שקומבינציה ליניארית של פונקציות עצמיות של אופרטור ליניארי כלשהו שלהן ערכים עצמיים זהים גם היא עצמית לאופרטור ובעלת אותו הערך העצמי:</u>

הוכחה: אם ψ_1,ψ_2 עצמיות לאופרטור הליניארי $\hat{A}$ ובעלות אותו ע"ע λ כך שמתקיים: $\hat{A}\psi_1=\lambda\psi_1$; $\hat{A}\psi_2=\lambda\psi_2$ מנוונות.

אזי הפונקציה $\Phi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$, כאשר c_1,c_2 מקדמים מרוכבים כלשהם, גם היא עצמית ל-$\hat{A}$ עם אותו הע"ע λ:

$$\hat{A}\Phi=\hat{A}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)\overset{\hat{A}\text{ אופרטור ליניארי}}{=}c_1\hat{A}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2=c_1\lambda\psi_1+c_2\lambda\psi_2=\lambda(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=$$

$$=\lambda\Phi$$

מ.ש.ל.

<u>לכן נוכל לומר כי ניתן לייצג את המצבים העצמיים של $\hat{L}^2$ באמצעות פונקציות ממשיות ע"י קומבינציה ליניארית מתאימה של Y_l^m בעלות אותו מספר קוונטי l.</u>

<u>דוגמא:</u> ל-Y_1^1 ול-Y_1^{-1} אותו ע"ע לאופרטור $\hat{L}^2$ שכן לשניהם $l=1$ והע"ע של $\hat{L}^2$ תלויים רק ב-l ולא במספר הקוונטי m - $\lambda=\hbar^2 l(l+1)$.

כלומר:

$$l=1:\ \hat{L}^2Y_1^1(\theta,\varphi)=1\cdot(1+1)\hbar^2Y_1^1(\theta,\varphi)=\underline{\underline{2\hbar^2}}Y_1^1(\theta,\varphi)$$

$$l=1:\ \hat{L}^2Y_1^{-1}(\theta,\varphi)=1(1+1)\hbar^2Y_1^{-1}(\theta,\varphi)=\underline{\underline{2\hbar^2}}Y_1^{-1}(\theta,\varphi)$$

מכאן שה-קומבינציה הליניארית $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^1)$ גם היא עצמית ל-$\hat{L}^2$ עם אותו הע"ע:

$$\underline{\hat{L}^2\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{L}^2Y_1^{-1}-\hat{L}^2Y_1^1)=\frac{1}{\sqrt{2}}(2\hbar^2Y_1^{-1}-2\hbar^2Y_1^1)=$$

$$=2\hbar^2\underline{\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^1)}$$

המקדם $\frac{1}{\sqrt{2}}$ נועד בכדי לנרמל את הפונקציה. בכדי לראות זאת נזכר כי $\hat{L}^2$ הוא אופרטור הרמיטי ולכן Y_1^1 ו-Y_1^{-1} העצמיות לו יכולות להיבחר כאורתונורמליות (אם רוצים יכולות להיבחר כך הן מנורמלות – כפונ' עצמיות ואת תנאי האורתונורמליות הוכחנו לפונ' עצמיות של אופרטור הרמיטי). כלומר:

$$\left\langle \tfrac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^{1}) \middle| \tfrac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^{1}) \right\rangle = \frac{1}{2}\Big[\underbrace{\langle Y_1^{-1}|Y_1^{-1}\rangle}_{1 \text{ נירמול של } Y_1^{-1}} - \underbrace{\langle Y_1^{-1}|Y_1^{1}\rangle}_{0 \text{ אורתונורמליות}} - \underbrace{\langle Y_1^{1}|Y_1^{-1}\rangle}_{0 \text{ אורתונורמליות}} + \underbrace{\langle Y_1^{1}|Y_1^{1}\rangle}_{1 \text{ נירמול של } Y_1^{1}}\Big] = \frac{1}{2}\cdot 2 = 1$$

כעת נבחן כיצד נראית הפונקציה הלינארית הנ"ל:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^{1}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\underbrace{\left(e^{-i\varphi}+e^{i\varphi}\right)}_{2\cos(\varphi)} = \frac{2}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cos\varphi =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{x}{r} = P_x$$

השוויון האחרון ל-P_x שכן הפונקציה את Y_1^0 והמקדם הינו נורמליזציה בנוסף.

הפונקציה הנ"ל, אם כן, מתאימה לאורביטל P_x והוא אכן ממשי ומכוון לאורך ציר ה-x. המחיר שאנו משלמים כשאנו מבצעים את הפונקציה היא שהפו' P_x אינם עצמיות יותר לאופרטור P_z שכן מורכבת משני ערכים שונים של m והע"ע הוא ~~...~~ $m\hbar$. נבדוק:

$$\hat{L}_z Y_1^1 = 1\cdot\hbar\cdot Y_1^1 = \hbar Y_1^1$$

$$\hat{L}_z Y_1^{-1} = -1\cdot\hbar\, Y_1^{-1} = -\hbar Y_1^{-1}$$

$$\hat{L}_z \tfrac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1}-Y_1^{1}) \overset{\hat{L}_z \text{ אופרטור לינארי}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{L}_z Y_1^{-1} - \hat{L}_z Y_1^{1}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\hbar Y_1^{-1} - \hbar Y_1^{1}\right) =$$

$$= -\hbar\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_1^{-1}+Y_1^{1}\right) \neq a\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_1^{-1}-Y_1^{1}\right)$$

כלומר P_x אינה עצמית ל-$\hat{L}_z$. אך ניתן להראות בקלות כי P_x עצמית לאופרטור $\hat{L}_x$. ולכן P_x עצמית בו זמנית ל-$\hat{L}^2$ ול-L_x.

בכדי לקבל את P_y נבצע את הפונקציה הבאה:

$$P_y = \frac{1}{\sqrt{2}\,i}\left(Y_1^{1}+Y_1^{-1}\right)$$

ראינו את התוצאות ל-p_x ול-p_z המנורמלות. נרשום אותה במפורש:

$$p_y = -\frac{1}{\sqrt{2}\, i}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\left(-e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}\, i}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\left[-2i\sin(\varphi)\right] =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin(\theta)\sin(\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{y}{r}$$

והיא ממשית ומכוונת לאורך ציר ה-y.

כמו כן עצמית ל-$\hat{L}^2$ ול-$\hat{L}_y$.

ראינו כי אשר אנו מייצרים כמו עצמית ל-$\hat{L}_x$ היא מאבדת את העצמיות לאופרטור $\hat{L}_z$ שבו דיברנו מצבי m שונים $m=\pm 1$. מכאן אנו מבינים כי - $\hat{L}_x$ ו- $\hat{L}_z$ אינם חלופיים ולא ניתן למדוד אותם בו זמנית בדיוק מוחלט.

<u>ובאופן כללי - לא ניתן למדוד את כל רכיבי התנ"ז בדיוק מוחלט בו-זמנית.</u> קיימת אי ודאות במדידת רכיבי התנ"ז. זה די מוזר שלא ניתן למדוד שני רכיבים של אותו הוקטור בו-זמנית. כשדיברנו על אי-ודאות תנע-מקום אלו היו שני גדלים שונים ולא שני רכיבים של אותו הוקטור אשר ניתנים למדידה בו"ז.

<u>ננסה לדון בזאת באופן אינטואיטיבי:</u>

מדידת $\hat{L}^2$ תמיד תניב בהסתברות אחת ערך הע"ע (פוסטולט): $l(l+1)\hbar^2$

ולכן מדידת גודל הוקטור $|\vec{L}|$ תניב תמיד $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$

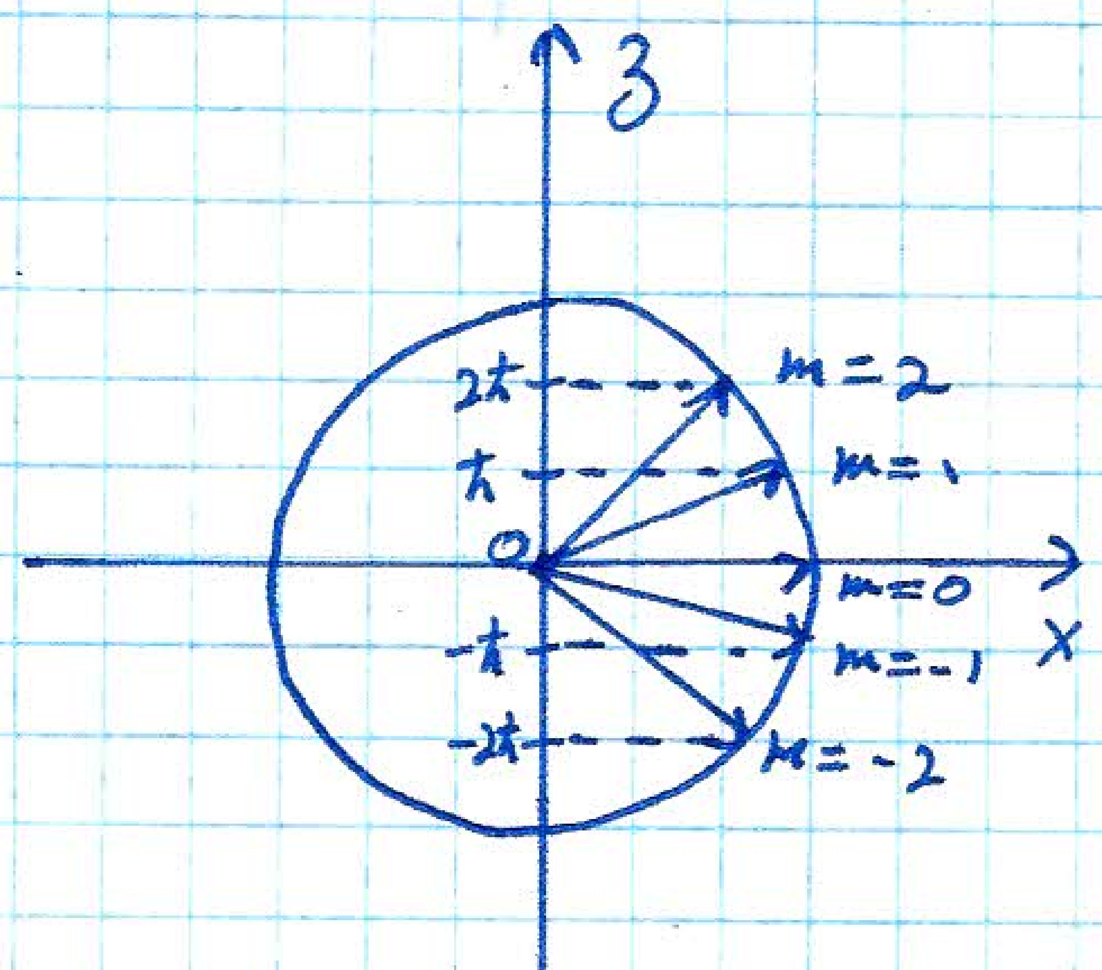
מדידת $\hat{L}_z$ - ההיטל של $\vec{L}$ על ציר אותו הגדרנו כציר z תניב $m\hbar$ $|m|\le l$

כיוון ש $|m|\le l$ אזי $|m|\le\sqrt{l^2}$ כלומר $|m|<\sqrt{l(l+1)}$

ולכן מדידת L_z שהוא ההיטל על ציר z תמיד תניב ערך קטן ממש מגודלו המוחלט של הוקטור $\vec{L}$ ($|\vec{L}|$) כלומר ההיטל ע"ג ציר z אף פעם לא יוכל להיות שווה לאורך הוקטור כך שהוקטור אף פעם לא יוכל להיות מקביל לציר z!

לדוגמא: במצב $l=2$ הערך המדוד עבור $|\vec{L}|$ הוא בהכרח $\sqrt{6}\,\hbar$

הערכים המדודים עבור $\hat{L}_z$ וכל האפשרויות: $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$



מכל הערכים המותרים עבור מדידת $\hat{L}_z$ של

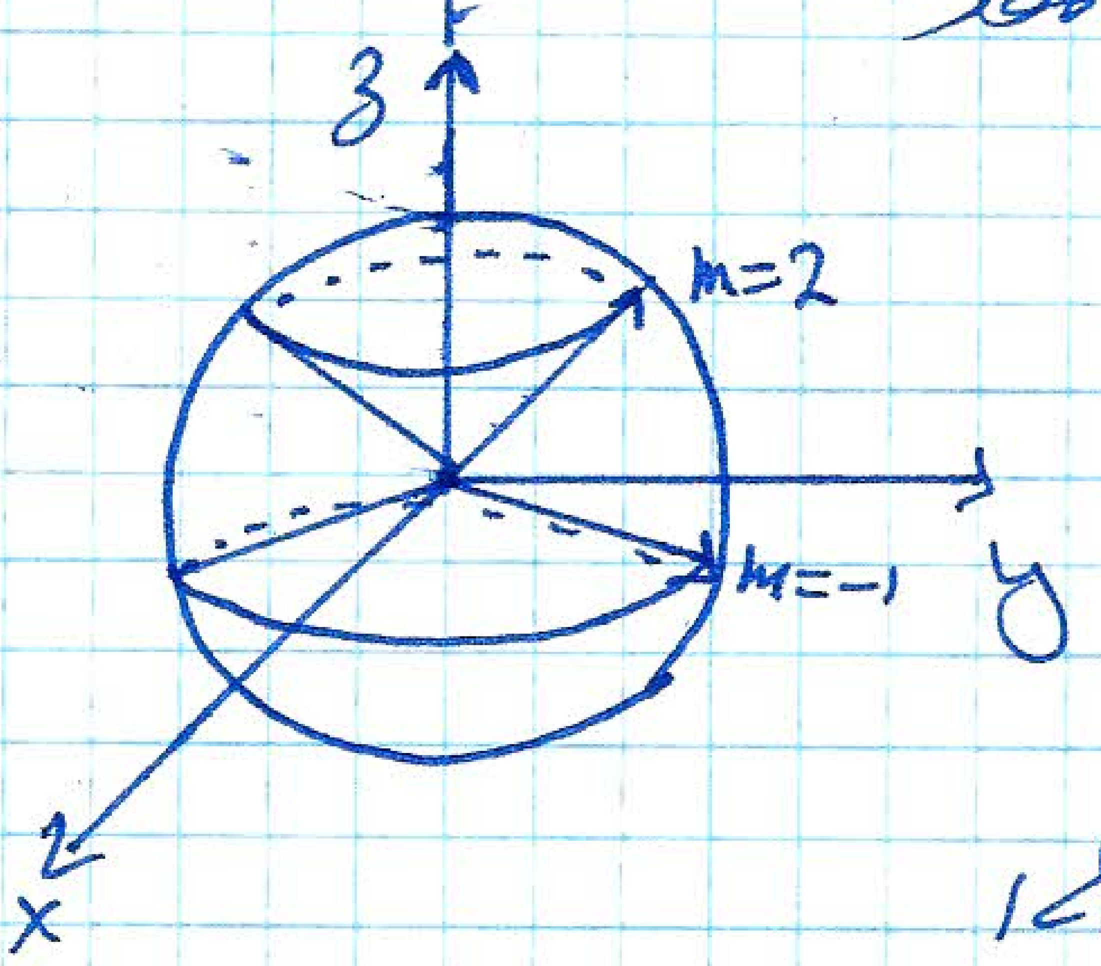
אף מהם אינו מתאים למצב בו הוקטור $\vec{L}$

פונה לכיוון ציר z (מקביל לציר z) במלואו.

למעשה הציור צריך להיות תלת מימדי כך

שמיקום הוקטור $\vec{L}$ יצייר קונוסים אך אף פעם

הוא לא יקביל לציר ה-z:



לו יכולתי ~~...~~ להקביל את $\hat{L}$ לציר

ה-z אז הייתי יודע בדיוק אינסופי

את הערך של $\hat{L}_x$ ושל $\hat{L}_y$ (שווים 0) בו זמנית

בניגוד לעקרון אי-הוודאות שכן $\hat{L}_y$ ו-$\hat{L}_x$ לא

חלופיים. זה דומה לעובדה שראינו כי באוסצילטור הרמוני אנרגיית האפס

מאפס ויש תנודה רטיטת גם בטמפרטורה אפס. כיוון ~~...~~ הפרצסיה של וקטור

$\vec{L}$ סביב ציר ה-z בתנועה קונית נובעת מעקרון אי-הוודאות.

בגבול הקלאסי עוברים ל- ℓ-ים גדולים מקבלים כי $|L| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \approx \hbar\sqrt{\ell^2} = \ell\hbar$

ולכן נוכל למדוד הערך מרבי של $\hat{L}_z$ שהוא קרוב מאוד ל-$|\hat{L}|$. הקוונטיזציה של

התנ"ז נהיה מאוד צפופה והערך הגבוה ביותר והממוצע קרוב ל-$|\hat{L}|$.

~~...~~

~~...~~

הקוונטיות של התנ"ז נקראת "קוונטיות מרחבית" - Space quantization והוא לא

נובע מפוטנציאל חיצוני או תנאי שפה חיצוניים שהטלנו על החלקיק כמו בפוטנציאל

הרמוני או קופסא אלא מהדרישה לחד-ערכיות של פו' הגל שמתקיימת תמיד. לכן

קוונטיזציה שתמיד מתקיימת. הקוונטיזציה המרחבית אינה תלויה בדבר והיא

נובעת ישירות מתכונות המרחב - היא לא תלויה בתנאים.

נבנה כעת אופרטורים שמתארים את הרכיבים השונים של התנ"ז

נרשום תחילה את האופרטורים הקלאסיים עבור הרכיבים השונים:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \begin{cases} L_x = (\vec{r}\times\vec{p})_x = yP_z - zP_y \\ L_y = (\vec{r}\times\vec{p})_y = zP_x - xP_z \\ L_z = (\vec{r}\times\vec{p})_z = xP_y - yP_x \end{cases} \qquad \vec{L} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ P_x & P_y & P_z \end{vmatrix}$$

ע"פ הפוסטולטים כדי עלינו להפוך את $p_i \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial r_i} = \hat{p}_i$ כלומר:

$$\begin{cases} \hat{L}_x = -i\hbar\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right] \\ \hat{L}_y = -i\hbar\left[z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right] \\ \hat{L}_z = -i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases}$$

מתקבל ע"י טרנספורמציה פשוטה מקואורדינטות קרטזיות לקואורדינטות כדוריות.

ראינו מה זה φ בסופות.

<u>כעת נוכל לחשב את יחסי החילוף בין אופרטורי הרכיבים של התנ"ז.</u>

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = ?$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\psi = (\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x)\psi = \hat{L}_x\hat{L}_y\psi - \hat{L}_y\hat{L}_x\psi$$

$$\hat{L}_y\psi = -i\hbar\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y\psi = -\hbar^2\left[y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) - z\frac{\partial}{\partial y}\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)\right] =$$

$$= -\hbar^2\left[y\frac{\partial\psi}{\partial x} + yz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial x} - xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} + xz\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z}\right]$$

$$\hat{L}_x\psi = -i\hbar\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_x\psi = -\hbar^2\left[z\frac{\partial}{\partial x}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - x\frac{\partial}{\partial z}\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right] =$$

$$= -\hbar^2\left[yz\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + x\frac{\partial\psi}{\partial y} + xz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial y}\right]$$

סדר הגזירה המעורבת לא משנה, שכן הפונ' היא חלקה.

נחסר את המשוואות ונקבל:

$$(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x)\psi = -\hbar^2\left(y\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\cdot i\hbar = i\hbar\hat{L}_z\psi$$

כלומר קיבלנו כי:

$$\boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z}$$

באותו האופן ניתן לקבל כי:

$$\boxed{[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x}$$

$$\boxed{[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y}$$

מסקנות:

$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ אינם חלופיים ולכן:

1. לא ניתן למדוד בו"ז בדיוק מוחלט שני רכיבים של התנע"ז.
2. לא ניתן למצוא סט שלם של פונקציות עצמיות שתהיינה עצמיות בו"ז לשני רכיבי תנע"ז. כלומר שילכסנו הן את $\hat{L}_x$ והן את $\hat{L}_y$.
3. כל שני רכיבי תנע"ז מקיימים עקרון אי-ודאות.

מצאנו כבר כי ה-Spherical Harmonics- עצמיות ל-$\hat{L}_z$ והן ל-$\hat{L}^2$ ועל-כן אנו מסיקים כי האופרטורים הללו חלופיים. ניתן להוכיח זאת באופן מפורש אך תחילה עלינו להוכיח שתי זהויות חשובות שמקיימים יחסי חילוף:

1. אם $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ אופרטורים ליניאריים אז: $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$

נוכיח:

$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=(\hat{A}+\hat{B})\hat{C}-\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})=$$

ת. אופרטורים ליניאריים

$$=\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}-\hat{C}\hat{B}=$$
$$=(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A})+(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B})=$$
$$=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$$

2. אם $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ אופרטורים ליניאריים מתקיים: $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$

נוכיח:

$$\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}=\hat{A}(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B})+(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A})\hat{B}=$$

ת. אופרטורים ליניאריים

$$=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\cancel{\hat{A}\hat{C}\hat{B}}+\cancel{\hat{A}\hat{C}\hat{B}}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}\underset{\text{ת. ליניאריות}}{=}(\hat{A}\hat{B})\cdot\hat{C}-\hat{C}(\hat{A}\hat{B})=$$
$$=[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]$$

כעת נוכל לחשב את יחסי החילוף של הרכיבים השונים עם $\hat{L}^2$. ניקח לדוגמא את $[\hat{L}^2,\hat{L}_x]$.

ניזכר כי התנע"ז הקלאסי הוא וקטור

$$\vec{L}=(L_x,L_y,L_z)=$$
$$=(yp_z-zp_y,\ zp_x-xp_z,\ xp_y-yp_x)$$

מכיוון שהתנע"ז הקוונטי גם הוא וקטור:

$$\hat{\vec{L}}=(\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z)=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y},\ z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z},\ x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

ולכן:

$$\hat{L}^2=\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}=(\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z)\cdot(\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z)=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$$

ולכן מתקיים:

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2,\hat{L}_x] \overset{①}{=} \underbrace{[\hat{L}_x^2,\hat{L}_x]}_{\mathrm{I}} + \underbrace{[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x]}_{\mathrm{II}} + \underbrace{[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]}_{\mathrm{III}}$$

$$\mathrm{I} = [\hat{L}_x^2,\hat{L}_x]\psi = \hat{L}_x^2\hat{L}_x\psi - \hat{L}_x\hat{L}_x^2\psi = \hat{L}_x^3\psi - \hat{L}_x^3\psi = 0$$

$$\mathrm{II} = [\hat{L}_y^2,\hat{L}_x] = [\hat{L}_y\cdot\hat{L}_y,\hat{L}_x] \overset{②}{=} \hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_x] + [\hat{L}_y,\hat{L}_x]\hat{L}_y =$$

$$= \hat{L}_y\cdot(i\hbar\hat{L}_z) + (-i\hbar\hat{L}_z)\hat{L}_y = -i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y)$$

$$\mathrm{III} = [\hat{L}_z^2,\hat{L}_x] = [\hat{L}_z\hat{L}_z,\hat{L}_x] = \hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{L}_x] + [\hat{L}_z,\hat{L}_x]\hat{L}_z =$$

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

ולכן:

$$\mathrm{I}+\mathrm{II}+\mathrm{III} = 0 - i\hbar\cancel{(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y)} + i\hbar\cancel{(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y)} = 0$$

כלומר:

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x] = 0$$

באופן דומה ניתן להוכיח עבור $\hat{L}_y$ ו-$\hat{L}_z$ ובסה"כ נקבל כי:

$$\boxed{[\hat{L}^2,\hat{L}_x] = [\hat{L}^2,\hat{L}_y] = [\hat{L}^2,\hat{L}_z] = 0}$$

מסקנות:

①. ניתן למדוד בדיוק מוחלט בו"ז את $\hat{L}^2$ ואת רכיביו.

②. ניתן למצוא סט שלם של פו' עצמיות שהן משותפות גם ל-$\hat{L}^2$ וגם לאחד מרכיביו. למשל ψ מלכסנת את $\hat{L}^2$ ואת $\hat{L}_z$ בו"ז, והן עצמיות לשני האופרטורים בו"ז. אבל הן לא מלכסנות את $\hat{L}_y$ ואת $\hat{L}_x$ שכן $\hat{L}_z$ לא חלופות עם שני אופרטורים אלו.

כלומר הסט השלם ~~[illegible]~~ יהיה עצמי ומלכסן של $\hat{L}^2$ ושל אחד מרכיביו בו"ז אבל לא יהיה עצמי ולא ילכסן את הרכיבים האחרים.

③. מכיוון שהרכיבים השונים של התנ"ז אינם חלופים בינם לבין עצמם לא נוכל ~~[illegible]~~ למקם את הוקטור $\vec{L}$ מכוון בכיוון $\hat{L}_z$ שכן אז נדע בודאות מוחלטת כי $L_x = L_y = 0$ בו"ז ~~[illegible]~~ ונפתור את עקרון אי הודאות.

פסול.

(4). ביחסי חלוף אין טרנזיטיביות כלומר יש אופרטור $\hat{A}$ חלופי עם $\hat{C}$ וגם אופרטור $\hat{B}$ חלופי עם $\hat{C}$ לא בהכרח $\hat{A}$ חלופי עם $\hat{B}$.

כלומר יש $[\hat{A},\hat{C}]=0$ וגם $[\hat{B},\hat{C}]=0$ לא בהכרח $[\hat{A},\hat{B}]\overset{?}{=}0$.

לדוגמא: $[\hat{L}_y,\hat{L}^2]=[\hat{L}_x,\hat{L}^2]=0$ אבל $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z\neq0$.