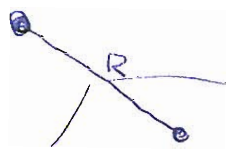
Rotace tuhého tělesa

Davydov, kv. mechanika

Motivace: kvantová rotace diatomika v aproximaci tuhého tělesa

mějme 2 ~~[illegible]~~ atomy s hmotností m ve rovnovážné vzdálenosti R.



- Problém 2 těles řešíme v rozdílovém polohovém vektoru
virtuální částice má redukovanou hmotnost $\mu = \frac{m}{2}$.

$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu}\nabla^2$; Převod: $\underbrace{-\frac{1}{2\mu}\nabla^2 \psi = \frac{1}{2\mu}\cdot\frac{1}{r}\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\right) r\psi(r,\vartheta,\varphi)}$

$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2\mu R^2} = \frac{\hat{L}^2}{2I} = a\hat{L}^2$; I... moment setrvačnosti

a... rotační konstanta v meV, nebo cm^{-1}

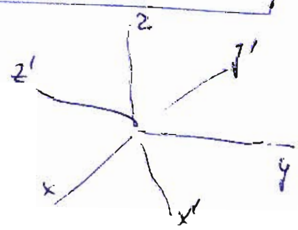
$E_j = a\, j(j+1)$; $(2j+1)$-násobná degenerace $\quad (2j+1)\dfrac{e^{-\frac{a j(j+1)}{kT}}}{\sum_j (2j+1) e^{-\frac{a j(j+1)}{kT}}} \overset{?}{=} P_j$

$\langle \vartheta\varphi | \psi_{jm}\rangle = Y_{jm}(\vartheta\varphi)$

Maxwellovská distribuce

Jak na obecnou polyatomickou molekulu?

3-úhlové stupně volnosti. Eulerovy úhly α, β, γ



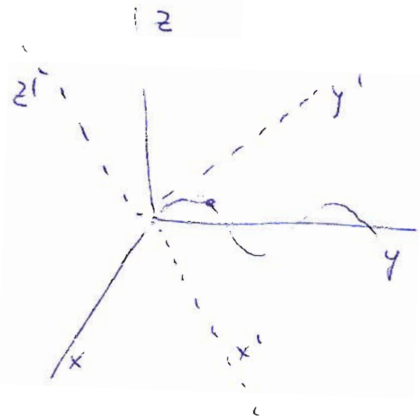
Přejdeme na to odbočkou

~~Jak se transfor~~ ~~Mějme systém popsaný hamiltoniánem H a~~

Mějme nerelativistickou kv. mechaniku. Invariance v čase vede na zachování energie a proto je $\hat{H}$ dobrý kv. operátor. ~~Izo~~ Homogenita prostoru vede na zachování celkové hybnosti systému $\vec{P}$. Operátor translace vlnové fce $\hat{T} = e^{-i\vec{P}\cdot\vec{A}}$. ~~Op~~ Izotropie prostoru vede na zachování celkového momentu hybnosti $\vec{L}$ systému. Operátor otočení kolem $\vec{n}$ je $\hat{R}^{\vec{n}}_{\alpha} = e^{-i\alpha\vec{L}\cdot\vec{n}}$

Transformace ~~operátor vl.~~ vl. stavů impulsmomentu částice při otáčení souřadných os

$$\psi(\vec r) \rightarrow \psi(\vec r\,'(\vec r))$$
$$\psi'(\vec r\,') = \psi(\vec r)$$



$$\hat R(\alpha,\beta,\gamma) = \hat R^z_\gamma \hat R^y_\beta \hat R^z_\alpha$$
$$\hat R^z_\gamma = e^{i\gamma \hat J_z}, \quad \hat R^y_\beta = e^{i\beta \hat J_y}, \quad \hat R^z_\alpha = e^{i\alpha \hat J_z}$$

← komutují s $\hat J^2$

Vlastní stavy $|jm\rangle$ operátoru $\hat J^2$, ~~$R(\alpha,\beta,\gamma)$~~

$$\boxed{R(\alpha,\beta,\gamma)\,|jm\rangle = \sum_k |jk\rangle\langle jk|R(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle}$$

$$\boxed{D^j_{mk} \equiv \langle jk|R(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle}$$

Wignerovy funkce
zobecněné kulové fce
D-fce

$$\langle \vartheta',\varphi'|R(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle = \boxed{\langle \vartheta,\varphi|jm\rangle = \sum_k D^j_{mk} \langle \vartheta,\varphi|jk\rangle}$$

$R(\alpha,\beta,\gamma)$ je unitární operátor a jeho maticová reprezentace v ortonormálním podprostoru je unitární. $(D^j)^+ = D^{j\,-1}$

$$\sum_m D^j_{mk} D^{*j}_{mk'} = \sum D^{*j}_{km} D^j_{k'm} = \delta_{kk'}$$

$$\boxed{\langle \vartheta',\varphi'|jk\rangle = \sum_m \langle \vartheta,\varphi|jm\rangle D^{*j}_{mk}}$$

$$\boxed{D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{im\alpha}\, d^j_{mk}(\beta)\, e^{ik\gamma}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} d^j_{mk}(\beta) &= D^j_{mk}(0,\beta,0) \\ &= \langle jk|e^{i\hat J_y \beta}|jm\rangle \end{aligned}}$$

Pár vlastností bez důkazu

$$D^{l}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_{lm}(\beta,\alpha)$$

$$D^{l}_{0k}(\alpha,\beta,\gamma) = (-1)^{k}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_{lk}(\beta,\gamma)$$

Jedná se o úplnou, ortogonální sadu fcí na ~~3-rozměrné~~ na prostoru 3-rozměrných rotací. Je to reprezentace SO_3

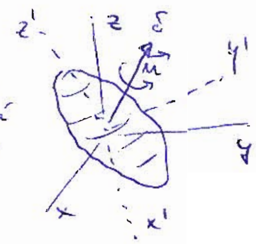
$$\boxed{\sum_k D^{j}_{mk}(\vartheta_2)\, D^{j}_{km'}(\vartheta_1) = D^{j}_{mm'} \quad (\vartheta \equiv \vartheta_2\vartheta_1)}$$

$$\int D^{*j}_{mk}(\alpha\beta\gamma)\, D^{j'}_{m'k'}(\alpha,\beta,\gamma)\,\sin\beta\, d\alpha\, d\beta\, d\gamma = \frac{8\pi^2}{2j+1}\,\delta_{jj'}\,\delta_{mm'}\,\delta_{kk'}$$

Vlastní fce operátoru impulsmomentu $\hat{L}$ tuhého tělesa

$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z$ působí na prostoru Eulerových úhlů (α,β,γ)

pomocná částice



- pomocná částice má impulsmoment $\hat{J}^2, \hat{J}_{z'}$

$$\boxed{\langle \vartheta,\varphi | jm\rangle = \sum_k D^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\,\langle \vartheta'\varphi' | jk\rangle}$$

$$[D^{j}_{mk}(\alpha\beta\gamma)]' = e^{-i\delta\vec{L}\cdot\vec{n}}\, D^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) = (1 - i\delta\vec{L}\cdot\vec{n})\, D^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)$$

- $\langle \vartheta,\varphi | jm\rangle' = \langle \vartheta\varphi | jm\rangle$
- $\langle \vartheta'\varphi' | jm\rangle' = e^{i\delta\vec{J}\cdot\vec{n}}\,\langle \vartheta'\varphi' | jm\rangle$

$$\langle \vartheta\varphi | jm\rangle = \sum_k (1 - i\delta\vec{L}\cdot\vec{n})\, D^{j}_{mk}\,(1 + i\delta\vec{J}\cdot\vec{n})\,\langle \vartheta'\varphi' | jk\rangle$$

$$\boxed{\sum_k (\vec{n}\cdot\vec{L}\, D^{j}_{mk} - D^{j}_{mk}\,\vec{n}\cdot\vec{J})\, |jk\rangle = 0}$$

A.) $\vec{n} \parallel z'$:
$$\boxed{\sum_k |jk\rangle\,(\hat{L}_{z'} D^{j}_{mk} - k\, D^{j}_{mk}) = 0} \Rightarrow \boxed{\hat{L}_{z'} D^{j}_{mk} = k\, D^{j}_{mk}}$$

B) $\vec{n} \parallel x'$ $\quad \hat{L}_{x'} D^j_{mk} \sim c D^j_{mk+1} + d D^j_{mk-1}$

C) $\vec{n} \parallel y'$ $\quad$ — " —

$$\boxed{\left(\hat{L}^2_{x'} + \hat{L}^2_{y'} + \hat{L}^2_{z'}\right) D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) = j(j+1) D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)}$$

Zopakoval postup, ale připoutal testovací (pomocnou) částici k tělesu:

$$\boxed{\hat{L}_z D^j_{mk} = m D^j_{mk}} \quad \boxed{\hat{L}_{z'} D^j_{mk} = k D^j_{mk}} \quad \boxed{\hat{L}^2 D^j_{mk} = j(j+1) D^j_{mk}}$$