Úloha 4: Rotace lineární molekuly.

Termín odevzdání: 8. prosince

Orientace lineární molekuly je popsána směrovým vektorem $\vec{n} = (x, y, z)$. V kvantové mechanice vezmeme jako stavový prostor $\mathcal{H} = L^2(S)$ prostor kvadraticky integrovatelných funkcí $\psi(x, y, z)$ na jednotkové sféře $r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Vlnovou funkci ψ mohu tedy chápat jako funkci sférických souřadnic θ a φ, neboť $x = \sin\theta\cos\varphi$, $y = \sin\theta\sin\varphi$ a $z = \cos\theta$. Operátor momentu hybnosti molekuly je definován stejně jako orbitální moment hybnosti bezstrukturní částice. Hamiltonův operátor popisující rotaci molekuly je

$$\hat{H} = \hat{L}^2/2I, \tag{1}$$

kde $I > 0$ je moment setrvačnosti molekuly. Předpokládejte, že molekula je připravena ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x, y, z) = [x + y - z]^2 . \tag{2}$$

1. Nalezněte rozklad funkce $\psi(x, y, z)$ do sférických harmonik (4 body).

2. Zjistěte jaké hodnoty projekce hybnosti $\hat{L}_z$ molekuly na osu z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností (3 body).

3. Zjistěte jaká je hustota pravděpodobnosti $|\psi(t)|^2$ nalézt molekulu orientovanou v čase t ve směru $\vec{n} = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$. V jakých časech nabývá tato veličina minima případně maxima? (3 body)

Nápověda - tabulka sférických harmonik:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad Y_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x \pm iy)^2$$

$$Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x \pm iy) \qquad Y_{2\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}z(x \pm iy)$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2 - x^2 - y^2) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3z^2 - 1)$$