$\boxed{\text{QMI-cv8}}$ Sférické harmoniky – vzorové řešení

ÚLOHA 1: kulové fce jako homogenní polynomy

poznámka: kulové fce z spol. vl. fce $\hat{L}^2 Y_{em} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{em}$

$\hat{L}_z Y_{em} = \hbar m Y_{em}$

ukázali jsme následující charakteristiku vl. podpr. L^2 pro dané ℓ

$$\mathcal{L}\{Y_{\ell m}, \forall m\} = \mathcal{L}\{p_\ell(x,y,z) \text{ homogenní}, \Delta p_\ell = 0\}$$

přitom Y_{em} je fce jen ϑ, φ ..úhlů ve sfér. souřadnicích, kdežto $x = r\cos\varphi \sin\vartheta$; $y = r \sin\varphi \sin\vartheta$, $z = r\cos\vartheta$; můžeme se omezit na sféru $x^2+y^2+z^2 = r^2 = 1$ nebo vydělit $\forall\ p_\ell / r^\ell$

• $\boxed{\ell = 0}$ jediný homog. polynom $p_0(x,y,z) = C = \boxed{Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$

konstantu určíme z normalizace:

$$1 \overset{!}{=} \int |Y_{00}|^2 d\Omega = |C|^2 \int d\Omega = |C|^2 \cdot 4\pi \quad \rightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

• $\boxed{\ell = 1}$ $\forall$ homog. polynomy řádu 1 mají tvar $p_\ell = ax + by + cz$ a automaticky splňují podmínku $\Delta p_\ell = 0$

$\rightarrow Y_{11}$ najdeme z podm. $\boxed{\hat{L}_+ Y_{11} = 0}$

$$\hat{L}_+ = L_x + iL_y = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y + iz\partial_x - ix\partial_z)$$

$$\hat{L}_+ p_\ell = -i\hbar\,[cy \underbrace{- bz + iaz}_{b = ia} - icx] = 0 \quad \text{identicky } \forall x,y,z$$

$\Rightarrow$ $c = 0$, $b = ia$ tj. $Y_{11} = a(x+iy)$

$\llcorner\ a(\cos\varphi + i\sin\varphi)\sin\vartheta = a\sin\vartheta\, e^{i\varphi}$

konstantu a určíme z normovací podm.:

$$1 \overset{!}{=} \int |Y_{11}|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \underbrace{\sin\vartheta\, d\vartheta}_{dz} \cdot \sin^2\vartheta \cdot |a|^2 = 2\pi |a|^2 \int_{-1}^{1} (1 - z^2)\, dz = 4\pi |a|^2 \left(1 - \frac{1}{3}\right)$$

$z = \cos\vartheta$

tj. $1 = \frac{8\pi}{3} |a|^2$

závěr $Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,(x+iy)$

$$\rightarrow \hat{L}_- Y_{11} = \hbar \sqrt{\underbrace{(\ell+m)}_{2}\underbrace{(\ell-m+1)}_{1}}\, Y_{10} = \hbar\sqrt{2}\, Y_{10} \quad \dots \quad \boxed{Y_{10} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} L_- Y_{11}}$$

$$\hat{L}_- = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y - iz\partial_x + ix\partial_z)$$

$$Y_{10} = \frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(-iz-iz) \doteq -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,z = Y_{10}$$

$\rightarrow$ podobně $Y_{1-1} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} L_- Y_{10} = \frac{+i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}(y+ix) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x-iy)$

ještě můžeme $\forall$ harmoniky Y_{11}, Y_{10}, Y_{1-1} vynásobit společ. fázovým faktorem $e^{i\delta}$ ... fázová konvence předepisuje, aby

$Y_{10} > 0$ na severním pólu tj. $z=1, x=y=0$ neboli $\theta = 0$

to znamená $e^{i\delta} = -1$

$\boxed{\text{ZÁVĚR}}$: $\boxed{Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{(x+iy)}{r} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}}$ $\boxed{Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta}$ $\boxed{Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}}$

• $\boxed{l=2}$ stejný postup jen trochu pracnější!

obecný $p_2(x,y,z) = ax^2 + by^2 + cz^2 + dyz + \beta xz + \gamma xy$

podmínka $0 = \Delta p_2 = 2(a+b+c) = 0 \quad \rightarrow$ volíme $c = -(a+b)$

aplikace podmínky $L_+ Y_{22} = 0$:

$$L_+ p_2 = -\beta i x^2 + d y^2 + (\beta i - d) z^2 + yz(\gamma i - 2a - 4b) + xz(4ai + 2ib - \gamma) + (\beta - di)xy$$

$= 0$ identicky $\forall x,y,z \Rightarrow \beta = 0;\ d = 0;\quad \gamma i = 2a + 4b = -2b - 4a$

$\Rightarrow b = -a$

$\gamma = -i(2a+4b) = 2ai$

tedy: $Y_{22} = a(x^2 + 2ixy - y^2) = a(x+iy)^2$

$= a\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}$

normování: $1 = \int |Y_{22}|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \underbrace{\sin\theta\, d\theta}_{|dz|,\ z=\cos\theta} \sin^4\theta\, |a|^2 = 4\pi a^2 \int_0^1 \underbrace{(1-z^2)^2}_{1-2z^2+z^4} dz = 4\pi a^2 \underbrace{\left(1 - \frac{2}{3} + \frac{1}{5}\right)}_{\frac{15-10+3}{15} = \frac{8}{15}}$

$\rightarrow a = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}$

Y_{21} a Y_{20} určíme z $Y_{21} = \frac{L_- Y_{22}}{\hbar\sqrt{4\cdot 1}} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,z(x+iy)$

$\hookrightarrow \sqrt{(l+m)(l-m+1)}$

$Y_{20} = \frac{L_- Y_{21}}{\hbar\sqrt{3\cdot 2}} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2 - x^2 - y^2) \leftarrow$ fázová konvence $Y_{20}|_{z>0,\,x=y=0} > 0$

je už splněna ✓

Závěr: $Y_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{(x\pm iy)^2}{r^2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi}$ $\quad Y_{2\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{z(x\pm iy)}{r^2} = \mp\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin 2\theta\, e^{\pm i\varphi}$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

Dodatečný námět:

totéž odvodit z komutační relace $\boxed{[\hat L_\alpha,\hat x_\beta]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat x_\gamma}$

neboli označíme $\boxed{\hat x_\pm\equiv\hat x\pm i\hat y}$

$$[\hat L_x,\hat y]=i\hbar\hat z \qquad [\hat L_y,\hat z]=i\hbar\hat x \qquad [\hat L_z,\hat x]=i\hbar\hat y \qquad (1)$$

$$[\hat L_x,\hat z]=-i\hbar\hat y$$

atd

$$[\hat L_\pm,\hat z]=[\hat L_x,\hat z]\pm i[\hat L_y,\hat z]$$

$$=-i\hbar\hat y\pm i\,i\hbar\hat x=\mp\hbar(\hat x\pm i\hat y)$$

$$[\hat L_\pm,\hat x_+]=\pm i\underbrace{[\hat L_y,\hat x]}_{-i\hbar\hat z}+i\underbrace{[L_x,\hat y]}_{i\hbar z}=\hbar z(\pm1-1)$$

tj $\boxed{[\hat L_+,\hat x_+]=[\hat L_-,\hat x_-]=0}$ (3) $\qquad \boxed{-[\hat L_-,\hat x_+]=[\hat L_+,\hat x_-]=2\hbar z}$ (4)

$\boxed{[\hat L_\pm,\hat z]=\mp\hbar\hat x_\pm}$ (2)

- $\boxed{l=0}$ nechť $|\phi\rangle\equiv\phi(r)$ je libovolná nezáv. na úhlech

pak z vyjádření $\hat L_\alpha$ ve sfér. souř. $\Rightarrow$ $\hat L_\alpha|\phi\rangle=0$ tj $L^2|\phi\rangle=0$, $L_z|\phi\rangle=0$

- $\boxed{l=1}$

(3) $\Rightarrow$ $\hat L_+\hat x_+|\phi\rangle=0$ $\Rightarrow$ $Y_{11}\sim(x+iy)\phi(r)$

$$Y_{10}=\frac{1}{\hbar\sqrt2}\hat L_-Y_{11}=\frac{1}{\hbar\sqrt2}\underbrace{\hat L_-\hat x_+}_{=[\hat L_-,\hat x_+]+\hat x_+\hat L_-}|\phi\rangle=\frac{1}{\hbar\sqrt2}\big(\underbrace{-2\hbar z}_{(4)}+\hat x_+\underbrace{\hat L_-)|\phi\rangle}_{0}=-\sqrt2\, z\,\phi(r)$$

$$Y_{1-1}=\frac{1}{\hbar\sqrt2}\hat L_-Y_{10}=\frac{-\sqrt2}{\hbar\sqrt2}\hat L_-\hat z\phi(r)=-\frac{1}{\hbar}\big(\underbrace{[\hat L_-,\hat z]}_{(2)\ \hbar x_-}+\hat z\underbrace{\hat L_-)|\phi\rangle}_{0}=-x_-\phi(r)=-(x-iy)\phi(r)$$

pokud chceme Y_{1m} závislé jen na θ,φ volíme $\phi(r)=\frac{1}{r}$

- $\boxed{l=2}$

obecně platí $\hat L_+(x+iy)^l|\phi\rangle=\hat L_+\hat x_+^l|\phi\rangle=\big(\underbrace{[L_+,\hat x_+]}_{(3)=0}x_+^{l-1}+x_+\underbrace{L_+\hat x_+^{l-1}}_{=0\text{ z matem. indukce}}\big)|\phi\rangle$

tj obecně $Y_{ll}\sim x_+^l|\phi\rangle$ a pro $\phi=r^{-l}$ závisí jen na θ,φ

pro $l=2$ $\quad Y_{22}\sim x_+^2|\phi\rangle=(x^2+2iyx-y^2)|\phi\rangle$

$$Y_{21}=\frac{1}{\sqrt4\,\hbar}\hat L_-Y_{22}=\frac{1}{2\hbar}\hat L_-\hat x_+^2|\phi\rangle=\frac{1}{2\hbar}\big(\underbrace{[\hat L_-,\hat x_+]}_{(4)=-2\hbar z}+\hat x_+\hat L_-\big)\hat x_+|\phi\rangle=-zx_++\frac{1}{2\hbar}x_+\big(\underbrace{[L_-,x_+]}_{-2\hbar z}+x_+\underbrace{L_-)|\phi\rangle}_{0}$$

$$=-2zx_+|\phi\rangle$$

+ ..atd vidíte, že je to docela efektivní

ÚLOHA 2 – moment hybnosti daného stavu $\psi(x,y,z)$

$$\psi(x,y,z) = (x+y+3z)\,f(r) = \underbrace{\frac{x+y+3z}{r}}_{\phi(\theta,\varphi)}\ \underbrace{r f(r)}_{g(r)}$$

BÚNO $g(r)$ normované $\int_0^\infty |g(r)|^2 r^2 dr = 1$

- úhlový faktor $\frac{x+y+3z}{r}$ je homog. polynom 1. st.; $\Delta p = 0$

$\Rightarrow$ je vl. stavem operátoru $\hat{L}^2$ a odpovídá kvantovému číslu $\boxed{l=1}$ tj. vl. č. $\hat{L}^2$ je $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$

- měření projekce momentu hybn. $\hat{L}_z$:

nejjednodušší je rozložit úhlovou část $\phi(\theta,\varphi)$ do sférických harmonik $\phi = c_{-1} Y_{1-1} + c_0 Y_{10} + c_1 Y_{11}$

pravděpodobnost naměření hodnoty m: $p_m = \frac{|c_m|^2}{|c_0|^2 + |c_1|^2 + |c_{-1}|^2}$

z minulé úlohy: $Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (x+iy)/r$ $\qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{z}{r}$

$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (x-iy)/r$

def $k = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}$ pak: $(Y_{11} + Y_{1-1}) \cdot k = -i\sqrt{2}\, \frac{y}{r}$ $\qquad k Y_{10} = \frac{z}{r}$

$(Y_{1-1} - Y_{11}) \cdot k = \sqrt{2}\, \frac{x}{r}$

$$\Rightarrow \phi = \frac{x}{r} + \frac{y}{r} + 3\frac{z}{r} = \frac{k}{\sqrt{2}}(Y_{1-1} - Y_{11}) + \frac{ik}{\sqrt{2}}(Y_{1-1} + Y_{11}) + 3k Y_{10}$$

$$= \underbrace{\frac{k}{\sqrt{2}}(1+i)}_{c_{-1}} Y_{1-1} + \underbrace{3k}_{c_0} Y_{10} + \underbrace{\frac{k}{\sqrt{2}}(i-1)}_{c_1} Y_{11}$$

$|c_0|^2 = 9k^2$

$|c_1|^2 = |c_{-1}|^2 = k^2$

$$\Rightarrow \boxed{p_{-1} = p_1 = \frac{1}{11}} \quad \boxed{p_0 = \frac{2}{11}}$$

- trochu pracnější ale pravděpodobný postup je normovat $\langle\phi|\phi\rangle_{S_2} = \int |\phi(\theta,\varphi)|^2 d\Omega = 1$ $\quad$ (a) a spočíst pravděpodobnost $p_m = \langle Y_{1m}|\phi\rangle_{S_2}^2 = \left|\int Y_{1m}^* \phi\, d\Omega\right|^2$ (b)

tedy (a):

$$\langle\phi|\phi\rangle = \iint \left[(\cos\varphi+\sin\varphi)\sin\theta + 3\cos\theta\right]^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= \iint \Big[\big(\underbrace{\underbrace{\cos^2\varphi+\sin^2\varphi}_{1}}_{2\pi} + \underbrace{\underbrace{2\cos\varphi\sin\varphi}_{\sin 2\varphi}}_{0}\big)\sin^2\theta + \underbrace{9\cos^2\theta}_{2\pi} + \underbrace{6\sin\theta\cos\theta}_{3\sin 2\theta}(\underbrace{\cos\varphi}_{0}+\underbrace{\sin\varphi}_{0})\Big]\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

integrace $\int_0^{2\pi} d\varphi$

$$= 2\pi \int \left[\sin^2\theta + 9\cos^2\theta\right]\sin\theta\, d\theta = 2\pi\int_0^\pi (1+8\underbrace{\cos^2\theta}_{z^2})\underbrace{\sin\theta\, d\theta}_{dz} = 2\pi\int_{-1}^{1}\left[1+8z^2\right]dz = 2\pi\left(2+\frac{16}{3}\right)$$

$z=\cos\theta$

tj $\langle\phi|\phi\rangle = 4\pi\cdot\frac{11}{3}$

(b) $$p_0 = \frac{|\langle Y_{10}|\phi\rangle|^2}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{3}{4\pi\cdot 11}\left|\iint \underbrace{Y_{10}^*}_{\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta}\left[(\cos\varphi+\sin\varphi)\sin\theta + 3\cos\theta\right]\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|^2$$

$$p_0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^2\cdot\frac{1}{11}\left|\iint\Big[(\underbrace{\cos\varphi}_{0}+\underbrace{\sin\varphi}_{0})\sin\theta + \underbrace{3\cos\theta}_{2\pi}\Big]\cos\theta\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|^2$$

integrace $\int d\varphi$

$$p_0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^2\cdot\frac{1}{11}\left|2\pi\int_0^\pi 3\underbrace{\cos^2\theta}_{z^2}\cdot\underbrace{\sin\theta\, d\theta}_{dz}\right|^2 = \frac{9}{(4\pi)^2}\frac{(2\pi)^2}{11}\left|3\cdot\underbrace{\int_{-1}^{1} z^2 dz}_{\frac{2}{3}}\right|^2 = \frac{9}{11}$$

$\dots z=\cos\theta$

podobně bychom zintegrovali p_1 a p_{-1}, ale vidíte, že je to mnohem pracnější.