

TILLEGG 11

11 Harmonisk oscillator og dreieimpuls — vha operatoralgebra

I Tillegg 3 er den harmoniske oscillatoren gitt en grundig bølgemekanisk behandling. Vi skal nå vise at energi-spektret (og egentilstandene) kan finnes på en enklere måte ved hjelp av **operator-algebra**. Vi bruker her egenskapene til Hilbert-rom-operatorene direkte, uten å gå veien om en bestemt representasjon, dvs uten først å projisere ned på en bestemt basis.

Det er flere grunner til at vi har valgt oscillatoren for å demonstrere slagkraften til den generelle Dirac-formalismen: Den kvantemekaniske harmoniske oscillatoren står sentralt innen flere felter av fysikken; og den vanligste kvantiseringsmetoden er den vi skal gjennomgå her. Dessuten kan denne metoden generaliseres til mange andre problemstillinger. I dette tillegget skal vi som et eksempel kvantisere dreie-impuls, med en metode som ligner mye på den vi her bruker for oscillatoren. Det vil da vise seg at den abstrakte operator-algebraen, ved siden av å reprodusere de bølgemekaniske resultatene for bane-dreieimpuls (Tillegg 5), også gir en beskrivelse av ”halvtallige” dreieimpuls-tilstander (spinn), som *ikke* kan beskrives bølgemekanisk. Dirac-notasjonen lar oss altså formulere en mer generell teori enn den bølgemekaniske formuleringen (posisjons- og impuls-representasjonene).

Med denne lille innledningen går vi nå løs på oscillatoren, for å forsøke å lære oss den algebraiske teknikken.

11.1 Harmonisk oscillator

Den såkalte **algebraiske** metoden eller **operatormetoden** er forklart side 129 i Hemmer. (Her og hos Hemmer brukes denne metoden for å vise noen av fordelene med Dirac-formuleringen av kvantemekanikk, men som du kan se side 33 i Griffiths fungerer metoden også i posisjonsrepresentasjonen av kvantemekanikk.)

Stigeoperatorene a og a^\dagger

Utgangspunktet er Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\widehat{q}^2, \quad (\text{T11.1})$$

der de abstrakte Hilbert-rom-operatorene \hat{q} og \hat{p} oppfyller kommutator-relasjonen

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (\text{T11.2})$$

I tillegg til de hermitske operatorene \hat{q} og \hat{p} viser det seg praktisk å innføre den dimensjonsløse operatoren

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}. \quad (\text{T11.3})$$

Denne er ikke-hermitesk; den er jo forskjellig fra sin adjungerte, som er ¹

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}. \quad (\text{T11.4})$$

Uttrykt ved a og a^\dagger kan vi merke oss at posisjons- og impulsoperatorene \hat{q} og \hat{p} tar formen

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad (\text{T11.5})$$

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a - a^\dagger).$$

Som side 130 i Hemmer kan vi regne ut operatorproduktene $a^\dagger a$ og aa^\dagger . Her må vi huske på at \hat{q} og \hat{p} ikke kommuterer; $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Vi får derfor

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{q}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{i}{2\hbar} (\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q}) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (\text{T11.6})$$

Her er $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2$ Hamilton-operatoren for oscillatoren. Med den motsatte rekkefølgen på de to operatorene skifter det siste leddet fortegn:

$$aa^\dagger = \dots = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{i}{2\hbar} (\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q}) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}. \quad (\text{T11.7})$$

De to operatorene kommuterer altså ikke, men oppfyller den viktige relasjonen

$$aa^\dagger - a^\dagger a = [a, a^\dagger] = 1. \quad (\text{T11.8})$$

Spektret og egenvektorene

Vi skal se at denne **algebraiske** relasjonen er *alt vi trenger* for å løse egenverdi-problemet for Hamilton-operatoren (jf (T11.6))

$$\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}), \quad (\text{T11.9})$$

¹De ikke-hermiteske operatorene a og a^\dagger svarer ikke til fysiske observable, og det er vanlig å la være å bruke det vanlige operatorsymbolet $\hat{\quad}$ over disse; det er underforstått at de er operatører.

dvs for å finne egenverdiene E_n og egenvektorene $|n\rangle$ i egenverdiligningen

$$\widehat{H}|n\rangle = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (\text{T11.10})$$

Ved å skrive egenverdiene på formen

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}),$$

der de dimensjonsløse tallene n er ukjente, kan vi skrive denne egenverdiligningen på formen

$$\widehat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (\widehat{N} = a^\dagger a), \quad (\text{T11.11})$$

Som du sikkert skjønner, ønsker vi å vise at de eneste mulige egenverdiene til operatoren $\widehat{N} = a^\dagger a$ er $n = 0, 1, 2, \dots$. Derfor kalles denne operatoren $\widehat{N} = a^\dagger a$ for **antallsoperatoren**.

Hvordan løser vi så egenverdi-problemet (T11.11) (der der de ukjente egenverdiene n til antallsoperatoren \widehat{N} brukes som merkelapper på egenvektorene)?

Vi starter med å bruke kommutatoren $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ (som er det eneste vi trenger) til å vise at

$$\widehat{N}a = (a^\dagger a)a = (aa^\dagger - 1)a = a\widehat{N} - a = a(\widehat{N} - 1) \quad (\text{T11.12})$$

og

$$\widehat{N}a^\dagger = (a^\dagger a)a^\dagger = a^\dagger(1 + a^\dagger a) = a^\dagger(\widehat{N} + 1). \quad (\text{T11.13})$$

Den siste sammenhengen kan vi bruke til å vise at

Dersom $|n\rangle$ er en egenvektor til \widehat{N} med egenverdi n ,

$$\widehat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (\text{T11.14})$$

så er også vektoren $a^\dagger|n\rangle$ en egenvektor til \widehat{N} , med egenverdi $n + 1$.

Beviset er enkelt: Vha (T11.13) og (T11.11) har vi at

$$\widehat{N}(a^\dagger|n\rangle) = a^\dagger(\widehat{N} + 1)|n\rangle = a^\dagger(n + 1)|n\rangle = (n + 1)(a^\dagger|n\rangle), \quad (\text{T11.15})$$

og det var jo dette vi skulle vise. På tilsvarende måte kan vi bruke (T11.12) til å vise at $a|n\rangle$ er en egenvektor med egenverdien $n - 1$:

$$\widehat{N}(a|n\rangle) = a(\widehat{N} - 1)|n\rangle = a(n - 1)|n\rangle = (n - 1)(a|n\rangle), \quad \text{q.e.d.} \quad (\text{T11.16})$$

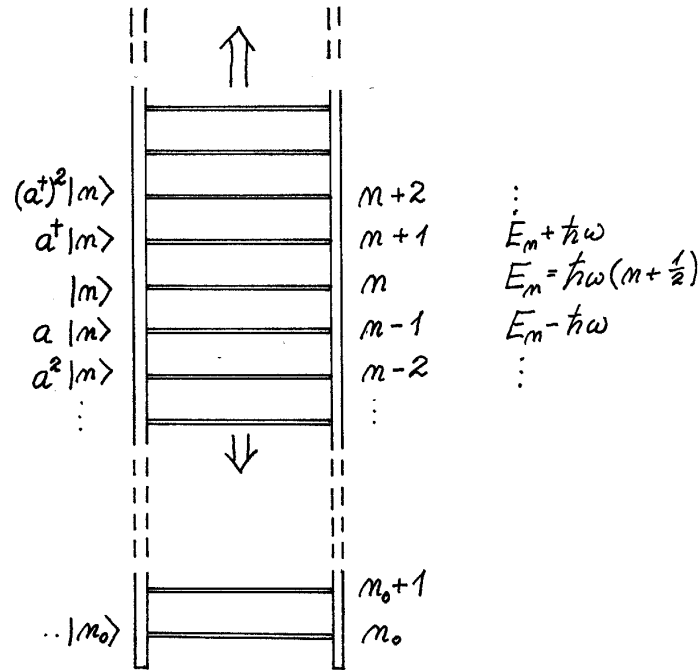
Det er altså slik at hvis du gir meg én (normert) egenvektor $|n\rangle$, slik at

$$\widehat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle n|n\rangle = 1,$$

så kan jeg bruke operatorene a^\dagger og a gjentatte ganger til å lage meg en hel flokk med egenvektorer:

$$a^\dagger|n\rangle, (a^\dagger)^2|n\rangle, \dots \quad \text{og} \quad a|n\rangle, a^2|n\rangle, \dots$$

Disse operatorene kalles **stige-operatører**, fordi de tillater oss å “klatre” opp og ned i energi. Vi kan også kalle a^\dagger for en **heve-operator** og a en **senke-operator**:



Ved å bruke heveoperatoren a^\dagger kan vi åpenbart skaffe oss et *ubegrenset* antall tilstander med egenverdier $n + 1$, $n + 2$, osv, men det samme er ikke tilfellet for senkeoperatoren a . Som indikert i figuren, må det finnes et **laveste trinn** i **stigen**, med en laveste egenverdi n_0 . Ved å se på normkvadratet av vektoren $a|n\rangle$ finner vi nemlig at egenverdien n er et ikke-negativt tall:

$$0 \leq \|a|n\rangle\|^2 = (a|n\rangle)^\dagger(a|n\rangle) = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|\widehat{N}|n\rangle = n. \quad (\text{T11.17})$$

Med dette lille regnestykket har vi vist at dersom $|n\rangle$ er en egenvektor til \widehat{N} med egenverdi n [og til \widehat{H} med egenverdi $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$], så er n nødt til å være ≥ 0 . Dette gjelder for alle egentilstander $|n\rangle$, også det laveste trinnet i stigen, $|n_0\rangle$, som er grunntilstanden. Vi har altså vist at n_0 ikke kan være negativ.

Regnestykket viser også at **normen** (“lengden”) av vektoren $a|n\rangle$ er

$$\|a|n\rangle\| = \sqrt{n}, \quad (\text{T11.18})$$

(forutsatt at tilstanden $|n\rangle$ du ga meg er normert, slik jeg antok ovenfor). Med et tilsvarende regnestykke bør du nå sjekke at normen til vektoren $a^\dagger|n\rangle$ er

$$\|a^\dagger|n\rangle\| = \sqrt{n+1}. \quad (\text{T11.19})$$

Så tilstandene $a|n\rangle$, $a^2|n\rangle$, $a^\dagger|n\rangle$, $(a^\dagger)^2|n\rangle$ osv er ikke normerte, men det skal vi fikse på nedenfor.

La oss først se på hva som skjer dersom vi bruker senkeoperatoren a på det nederste trinnet i stigen, $|n_0\rangle$. Ligning (T11.16) ser da slik ut:

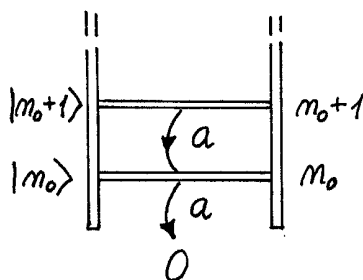
$$\widehat{N}(a|n_0\rangle) = (n_0 - 1)(a|n_0\rangle). \quad (\text{T11.20})$$

Logikken i denne ligningen, som vi må ta innover oss, er følgende: Dersom vektoren $a|n_0\rangle$ er forskjellig fra null (normerbar), er den ifølge denne ligningen en egenvektor til \widehat{N} med egenverdi $n_0 - 1$. Men siden $|n_0\rangle$ var det laveste trinnet, *eksisterer* det jo ikke noen slik

egenvektor! Følgelig må vi konkludere med at vektoren $a|n_0\rangle$ er identisk lik null (da er den jo ingen egenvektor, for en egenvektor skal være normerbar):

$$\boxed{a|n_0\rangle = 0.} \quad (\text{T11.21})$$

Så når senkeoperatoren a virker på grunntilstanden, så fås **null-vektoren**:



Vha denne ligningen (T11.21) kan vi nøste opp hele mysteriet! Ved å bruke (T11.17), $\|a|n\rangle\|^2 = n$, kan vi konstatere at

$$n_0 = \|a|n_0\rangle\|^2 = 0, \quad \text{og} \quad E_{n_0} = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad (\text{T11.22})$$

akkurat som ventet.

Så hvis du gir meg en egentilstand $|n\rangle$, så kan jeg bruke senkeoperatoren a til å klatre ned et helt antall trinn til jeg finner grunntilstanden $|n_0\rangle = |0\rangle$ (bortsett fra en normeringsfaktor). Og jeg kan klatre opp igjen til utgangspunktet $|n\rangle$ som du ga meg ved å bruke a^\dagger like mange ganger. Dette betyr selvsagt at egenverdien n til vektoren du ga meg må være et ikke-negativt heltall.

Konklusjonen er at de eneste mulige energieigenverdiene er

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad \text{med} \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

og at det finnes bare én egenvektor $|n\rangle$ for hver E_n .

Det er også enkelt å ta vare på normeringen. Siden $a^\dagger|n\rangle$ har egenverdien $n+1$ og normen $\sqrt{n+1}$, har vi at

$$\boxed{a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,} \quad (\text{T11.23})$$

hvor $|n+1\rangle$ nå er normert (og hvor vi har gjort et *fasevalg*). Tilsvarende følger det fra (T11.16) og (T11.18) at ²

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,} \quad (= 0 \text{ for } n = 0), \quad (\text{T11.24})$$

²Merk at a fjerner et energikvant $\hbar\omega$ fra oscillatoren, mens a^\dagger tilfører et slikt kvant. Operatoren a kalles derfor en **annihilasjonsoperator** og a^\dagger kalles en **kreasjonsoperator**. (annihilere=utslette; kreere=skape.)

der $|n-1\rangle$ er normert. Den første av disse svært viktige formlene viser at hele stigen av tilstander kan konstrueres med utgangspunkt i grunntilstanden $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{1}} |0\rangle, \\ |2\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{2}} |1\rangle = \frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{1 \cdot 2}} |0\rangle, \\ &\vdots \\ &\vdots \\ |n\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \dots = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \end{aligned}$$

Grunntilstanden og de ekiterte tilstandene er altså fastlagt av ligningene

$$\boxed{a|0\rangle = 0 \quad \text{og} \quad |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle.} \quad (\text{T11.25})$$

Posisjons-representasjonen

Resultatene ovenfor for spektret og egenvektorene til antallsoperatoren $\hat{N} = a^\dagger a$ (og dermed også til $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$) har vi funnet ved å bruke bare operator-relasjonen ("algebraen") $[a, a^\dagger] = 1$, og uten å projisere Hilbert-vektorene ned på noen basis.

Som vi har sett tidligere vil et valg av basis gi operatører og tilstander mer konkret form. Som et eksempel skal vi her bruke posisjons-basisen $|q\rangle$. Vi begynner med å sjekke at den "kryptiske" relasjonen i (T11.25),

$$a|0\rangle = 0,$$

virkelig bestemmer grunntilstanden $|0\rangle$ og den tilhørende bølgefunksjonen. Ved å projisere denne på posisjonseigenvektoren $|q\rangle$ og sette inn uttrykket (T11.3) for a har vi:

$$\langle q| \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) |0\rangle = 0. \quad (\text{T11.26})$$

Vi kan nå bruke verktøy-formlene (T10.62) og (T10.63), her på formen

$$\langle q|\hat{q} = q\langle q| \quad \text{og} \quad \langle q|\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \langle q|,$$

som gir

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial q} \right) \langle q|0\rangle = 0. \quad (\text{T11.27})$$

Her er $\langle q|0\rangle$ bølgefunksjonen $\psi_0(q)$ for grunntilstanden, og uttrykket i parentesen er operatoren a i posisjonsrepresentasjonen (jf diskusjonen i avsnitt 10.3.b). (Merk også at det tilsvarende uttrykket for a^\dagger har et minustegn foran den siste roten). Relasjonen $a|0\rangle = 0$ gir oss altså differensialligningen

$$\frac{d}{dq} \psi_0(q) = -\frac{m\omega}{\hbar} q \psi_0(q),$$

som er lett å integrere opp:

$$\begin{aligned}\ln \psi_0 &= -\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 + \ln C_0 \implies \\ \psi_0(q) &= C_0 e^{-m\omega q^2/2\hbar}.\end{aligned}\tag{T11.28}$$

Denne gjenkjenner vi som bølgefunksjonen for grunntilstanden (se Tillegg 3). [$C_0 = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ gir en normert bølgefunksjon.]

Bølgefunksjonene for de eksiterte tilstandene finner vi tilsvarende fra formelen for $|n\rangle$:

$$\begin{aligned}\psi_n(q) &= \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle q| \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right)^n |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial q} \right)^n \psi_0(q).\end{aligned}$$

Med samme dimensjonsløse variabel $x = q\sqrt{m\omega/\hbar}$ som vi tidligere har brukt for den harmoniske oscillatoren har vi altså

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \frac{C_0}{\sqrt{2^n n!}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-x^2/2} \quad (x = q\sqrt{m\omega/\hbar}).\end{aligned}\tag{T11.29}$$

[Den siste overgangen er ikke vist her, men kan tas for gitt, og du kan selvsagt også prøve å sjekke mot resultatene i Tillegg 3 for noen få n -verdier.]

Disse resultatene viser *litt* av slagkraften til den algebraiske metoden. I neste avsnitt skal vi bruke en tilsvarende metode til å finne egentilstander og egenverdier for dreieimpulser.

11.2 Generell kvantisering av dreieimpuls

Innledning

I forrige avsnitt så vi at kvantiseringen av antallsoperatoren $N = a^\dagger a$ kunne baseres utelukkende på **algebraen** $[a, a^\dagger] = 1$ for operatorene a og a^\dagger .

Vi skal nå bruke en lignende algebraisk metode til å finne egentilstander og egenverdier for en generalisert dreieimpuls \mathbf{J} . Som nevnt vil det da vise seg at vi for det første reproducerer resultatene for bane-dreieimpuls i Tillegg 5 (heltallige kvantetall l og m , bl.a). For det andre resulterer den algebraiske metoden i et sett av dreieimpuls-tilstander med *halvtallige* kvantetall, som følgelig ikke kan være banedreieimpuls-tilstander. Disse tilstandene gir en beskrivelse av spinn-frihetsgrader, som ikke er mulig med den gamle bølgefunksjonsformalismen. Dette er en triumf for vår nye Hilbert-rom-formulering av kvantemekanikken, og for den algebraiske metoden.

Før vi formulerer denne teorien kan vi ta en rask titt på hvordan de ikke-hermiteske operatorene

$$\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)\tag{T11.30}$$

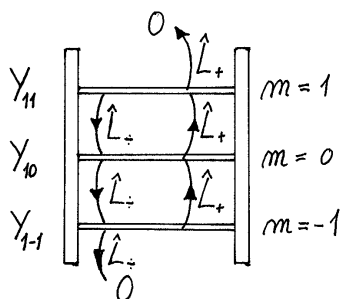
virker på “tripletten” Y_{1m} , dvs på de tre vinkelfunksjonene

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}.$$

Som vi lett kan sjekke ved regning, fungerer \hat{L}_+ og \hat{L}_- da som **stigeoperatorer**, dvs de endrer det magnetiske kvantetallet med hhvis $+1$ og -1 :

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ Y_{1-1} &= \hbar\sqrt{2} Y_{10}, & \hat{L}_- Y_{11} &= \hbar\sqrt{2} Y_{10}, \\ \hat{L}_+ Y_{10} &= \hbar\sqrt{2} Y_{11}, & \hat{L}_- Y_{10} &= \hbar\sqrt{2} Y_{1-1}, \\ \hat{L}_+ Y_{11} &= 0, & \hat{L}_- Y_{1-1} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{T11.31})$$

Dette er illustrert i figuren, hvor vi ser at de to operatorene bringer oss hhvis ett trinn opp eller ett trinn ned i triplett-”stigen”.



Vi legger spesielt merke til at \hat{L}_+ anvendt på øverste trinn i stigen gir null, og tilsvarende for \hat{L}_- anvendt på nederste trinn (analogt med at $a|0\rangle = 0$).

Dreieimpuls-algebraen og andre operator-relasjoner

Vi antar at vi har en generell dreieimpuls \mathbf{J} som svarer til Hilbert-rom-operatorene J_x, J_y og J_z . Det eneste vi forutsetter om disse er at de er Hermitiske og oppfyller den fundamentale dreieimpuls-algebraen ³

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &= i\hbar J_z, \\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x, \\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y, \end{aligned} \quad (\text{T11.32})$$

som er samme algebraen som vi hadde for bane-dreieimpulsen $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ (jf Tillegg 5).

Eksemplet ovenfor indikerer at vi vil få glede av operatorene J_+ og J_- , som er hverandres adjungerte:

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y; \quad (J_+)^{\dagger} = J_-, \quad (J_-)^{\dagger} = J_+. \quad (\text{T11.33})$$

Ved samme beregning som for bandedreieimpulsen er det lett å vise at \mathbf{J}^2 kommuterer med alle komponentene av \mathbf{J} ;

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = [\mathbf{J}^2, J_y] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0. \quad (\text{T11.34})$$

³Du finner en ypperlig framstilling av dette stoffet i Hemmers kapittel 8. I likhet med Hemmer, dropper vi her “hattene” over operatorene. Det vil egentlig framgå av sammenhengen hva som er operatører og hva som er observabler.

Da er også

$$[\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = 0. \quad (\text{T11.35})$$

Ved å se på kommutatorene $[J_z, J_{\pm}]$ er det videre lett å se at

$$J_z J_{\pm} = J_{\pm} J_z \pm \hbar J_{\pm}. \quad (\text{T11.36})$$

Vi har også at

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z, \quad (\text{T11.37})$$

$$J_- J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z.$$

Simultane egenvektorer

Siden \mathbf{J}^2 og J_z kommuterer, kan vi søke etter simultane egenvektorer til \mathbf{J}^2 og J_z :

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad (\text{T11.38})$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle. \quad (\text{T11.39})$$

Her har vi skrevet de to egenverdiene på formen $\hbar^2 j(j+1)$ og $\hbar m$, og vi har brukt tallene j og m som merkelapper på egenvektorene.⁴ Det eneste vi vet om j og m er foreløpig at

$$|m| \leq \sqrt{j(j+1)}. \quad (\text{T11.40})$$

Dette følger av at kvadratiske operatører som J_z^2, J_x^2 osv har ikke-negative forventningsverdier:

$$\langle J_z^2 \rangle_{\psi} = \langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle = \langle \psi | J_z^{\dagger} J_z | \psi \rangle = \|J_z | \psi \rangle\|^2 \geq 0 \implies \langle \mathbf{J}^2 \rangle \geq \langle J_z^2 \rangle. \quad (\text{T11.41})$$

Dette innebærer bl.a at egenverdien til $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ ikke kan være negativ, og er grunnen til at vi kunne skrive den på formen $\hbar^2 j(j+1)$, der vi kan forutsette at j ikke er negativ;

$$j \geq 0.$$

Vi merker oss at vektorer med forskjellige egenverdier som vanlig vil være ortogonale, og vi kan som for oscillatoren bestemme oss for at vi ønsker å ha dem normert, slik at

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (\text{T11.42})$$

Endelig stige

Anta nå at det eksisterer en vektor $|j, m\rangle$ som oppfyller egenverdi-ligningene (T11.38) og (T11.39), med foreløpig ukjente kvantetall j og m . I analogi med eksemplet ovenfor kan vi da bruke stigeoperatorene J_{\pm} på vektoren $|j, m\rangle$, og se på egenskapene til de resulterende vektorene $J_+ |j, m\rangle$ og $J_- |j, m\rangle$.

Vi må nå kontrollere at J_{\pm} virkelig er stigeoperatører, slik vi venter. Da \mathbf{J}^2 kommuterer med J_{\pm} , ser vi med en gang at J_{\pm} ikke endrer dreieimpulskvantetallet j :

$$\mathbf{J}^2 (J_{\pm} |j, m\rangle) = J_{\pm} \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) (J_{\pm} |j, m\rangle). \quad (\text{T11.43})$$

⁴ $j(j+1)$, med $j \geq 0$, er foreløpig bare en fancy måte å skrive et ikke-negativt tall på.

Fra (T11.36) ser vi videre at J_{\pm} som ventet hever/senker det magnetiske kvantetallet med ± 1 :

$$J_z(J_{\pm}|j, m\rangle) = (J_{\pm}J_z \pm \hbar J_{\pm})|j, m\rangle = \hbar(m \pm 1)(J_{\pm}|j, m\rangle). \quad (\text{T11.44})$$

Fra disse ligningene ser det ut til at $J_+|j, m\rangle$ er en egentilstand til J_z med egenverdi $\hbar(m+1)$, og at $J_-|j, m\rangle$ er en egentilstand til J_z med egenverdi $\hbar(m-1)$. Tilsvarende vil $J_+^2|j, m\rangle$ være en egenvektor med egenverdi $\hbar(m+2)$, osv. Med utgangspunkt i den antatte egentilstanden $|j, m\rangle$ kan vi altså lage oss nye “trinn i en stige” av tilstander ved gjentatt bruk av J_+ og J_- . (Analogt med (T11.31) og med oscillatortilfellet vil disse nye vektorene $J_+|j, m\rangle$ osv ikke være normerte, men det kan vi korrigere ved å dividere med normen, som vi skal se nedenfor.)

Fordi $|m|$ ikke kan være større enn $\sqrt{j(j+1)}$ må prosessen med å lage nye trinn over og under utgangspunktet $|j, m\rangle$ stoppe, med et *øverste* trinn $|j, m_1\rangle$ og et *nederste* trinn $|j, m_0\rangle$. Dette krever at

$$J_+|j, m_1\rangle = 0. \quad (\text{T11.45})$$

I motsatt fall forteller nemlig (T11.44) at $J_+|j, m_1\rangle$ er en egenvektor til J_z med egenverdi $\hbar(m_1+1)$, og det går jo ikke når $|m_1|$ er det høyeste trinnet. Tilsvarende må

$$J_-|j, m_0\rangle = 0, \quad (\text{T11.46})$$

fordi $|j, m_0\rangle$ er det nederste trinnet. Merk at ingen ting av dette er overraskende, i lys av det vi så for vinkelfunksjonstripletten i (T11.31).

Øverste og nederste trinn

Erfaringene fra (T11.31) gir grunn til å mistenke at $m_1 = j$ og $m_0 = -j$, og dette viser seg å holde stikk. Nøkkelen ligger i kvadratet av normen av $J_-|j, m\rangle$, som vi kan regne ut slik:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|J_-|j, m\rangle\|^2 = (J_-|j, m\rangle)^\dagger J_-|j, m\rangle = \langle j, m|J_+J_-|j, m\rangle \\ (\text{T11.37}) &= \langle j, m|\mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z|j, m\rangle = \langle j, m|\hbar^2[j(j+1) - m^2 + m]|j, m\rangle \\ &= \hbar^2(j+m)(j+1-m). \end{aligned} \quad (\text{T11.47})$$

Tilsvarende finner vi ved å bruke J_+ :

$$0 \leq \|J_+|j, m\rangle\|^2 = \dots = \hbar^2(j-m)(j+1+m). \quad (\text{T11.48})$$

I (T11.48) kan kvadratet $\|J_+|j, m\rangle\|^2$ i prinsippet være lik null eller positivt. Er det positivt, så følger det som nevnt fra (T11.44) at

$$\frac{J_+|j, m\rangle}{\|J_+|j, m\rangle\|} = \frac{J_+|j, m\rangle}{\hbar\sqrt{(j-m)(j+1+m)}} \equiv |j, m+1\rangle \quad (\text{T11.49})$$

er en normert egentilstand til J_z med egenverdi $\hbar(m+1)$, og altså danner et nytt trinn i stigen, slik vi så ovenfor. For det øverste trinnet i stigen er denne muligheten utelukket. Derfor må normkvadratet (T11.48) være lik null for $m = m_1$:

$$\|J_+|j, m_1\rangle\|^2 = \hbar^2(j-m_1)(j+1+m_1) = 0.$$

Konklusjonen er (ikke overraskende) at m -kvantetallet for det øverste trinnet er

$$m_1 = j. \quad (\text{T11.50})$$

(m kan ikke være lik $-j - 1$, pga (T11.40).) Tilsvarende har vi for nederste trinn

$$\|J_-|j, m_0\rangle\|^2 = \hbar^2(j + m_0)(j + 1 - m_0) = 0,$$

dvs

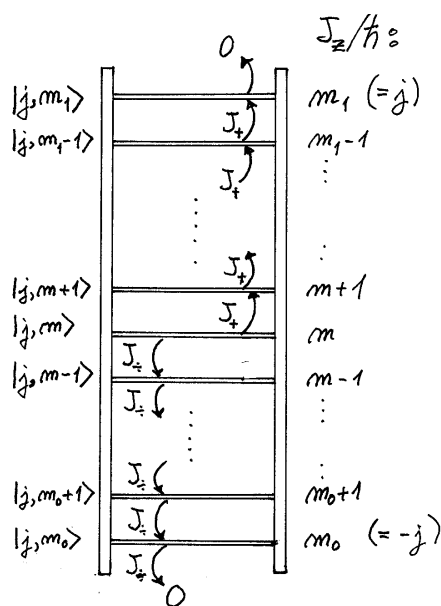
$$m_0 = -j. \quad (\text{T11.51})$$

Konklusjon

Med utgangspunkt i dreieimpulsalgebraen og den antatte egentilstanden $|j, m\rangle$ har vi nå brukt relasjonene

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)}|j, m \pm 1\rangle \quad (\text{T11.52})$$

til å konstruere en hel stige med normerte tilstander,



der det magnetiske kvantetallet varierer i skritt på 1 mellom minimalverdien $m_0 = -j$ og maksimalverdien $m_1 = j$:

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j. \quad (\text{T11.53})$$

Avstanden $2j$ mellom øverste og nederste trinn er altså heltallig. Det som er overraskende ved dette resultatet er selvsagt at det åpner for *halvtallige* verdier for dreieimpulskvantetallet j (når $2j$ er et oddetall)

$$j = 1/2, 3/2, 5/2, \text{ osv.}, \quad (\text{T11.54})$$

i tillegg til de heltallige verdiene (når $2j$ er et partall)

$$j = 0, 1, 2, \text{ osv.}, \quad (\text{T11.55})$$

som vi kjenner fra behandlingen av banedreieimpuls. Vi kan da konstatere at den tilstanden $|j, m\rangle$ som vi antok eksistensen av ovenfor, enten må ha halvtallige j og m eller heltallige j og m . Vi kan også slå fast at m er nødt til å ha en av verdiene i (T11.53). Dette er selvsagt veldig lovende. For vi er jo nettopp ute etter en slik teori, som tillater hel- og halvtallige dreieimpulskvantetall (og ingen andre).

Et spørsmål som nå melder seg er om dette betyr at vi kan ha halvtallig banedreieimpuls? Svaret er nei. For dersom vi setter $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$, og $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$, så vet vi jo fra før at løsningene $e^{im\phi}$ av egenverdiligningen for \hat{L}_z blir kontinuerlige bare dersom m og dermed l er heltallige.

11.3 Bane-dreieimpuls, i posisjonsrepresentasjonen

Utgangspunktet for utledningen ovenfor var algebraen (T11.32), som vi opprinnelig fant for bane-dreieimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Dette betyr naturligvis at formalismen ovenfor vil reproducere de tidligere resultatene for dreieimpuls \mathbf{L} (jf Tillegg 5), dersom vi projiserer på posisjonsbasisen

$$|\mathbf{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle \equiv |r, \theta, \phi\rangle.$$

Det kan være instruktivt å se hvordan dette fungerer, selv om det altså ikke kommer noe egentlig nytt utav det.

Hilbert-rom-operatoren $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ representeres i posisjons-representasjonen av

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla,$$

(som vi brukte i Tillegg 5). Dette følger fra redskapsformlene (T10.62 – 63), som gir

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \phi | \mathbf{r}^{(op)} &= \mathbf{r} \langle r, \theta, \phi |, \\ \langle r, \theta, \phi | \mathbf{p}^{(op)} &= \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} \langle r, \theta, \phi |. \end{aligned} \quad (\text{T11.56})$$

Dermed er

$$\langle r, \theta, \phi | L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \langle r, \theta, \phi |, \quad (\text{T11.57})$$

$$\langle r, \theta, \phi | L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle r, \theta, \phi |, \quad (\text{T11.58})$$

$$\langle r, \theta, \phi | L_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle r, \theta, \phi |, \quad (\text{T11.59})$$

$$\langle r, \theta, \phi | \mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \langle r, \theta, \phi |, \quad (\text{T11.60})$$

$$\langle r, \theta, \phi | L_{\pm} = \frac{\hbar}{i} e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle r, \theta, \phi |, \quad (\text{T11.61})$$

hvor vi på høyresiden finner igjen alle de ”velkjente” operatorene fra posisjonsrepresentasjonen.

Ved å kombinere (T11.57) med (T11.39) finner vi

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \langle r, \theta, \phi | l, m \rangle = \hbar m \langle r, \theta, \phi | l, m \rangle,$$

som er den velkjente egenverdligningen

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \hbar m \psi_{lm}(r, \theta, \phi) \quad (\text{T11.62})$$

for bølgefunksjonen

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \langle r, \theta, \phi | l, m \rangle. \quad (\text{T11.63})$$

Tilsvarende kan vi kombinere (T11.60) med (T11.39), og (T11.61) med (T11.52). Da dreieimpulsoperatorene i disse ligningene avhenger bare av vinklene, er ligningene separable, dvs vi kan sette

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (\text{T11.64})$$

hvor $Y_{lm}(\theta, \phi)$ oppfyller de samme ligningene som ψ_{lm} , f.eks

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (\text{T11.65})$$

Radialfunksjonen $R(r)$ er fritt valgbar, så lenge vi bare forlanger at $|l, m\rangle$ skal være en egenvektor til \mathbf{L}^2 og L_z .⁵

Ligning (T11.65) løste vi i Tillegg 5:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta(\theta) e^{im\phi}. \quad (\text{T11.66})$$

Som du vil huske, blir Y_{lm} kontinuerlig i vinkelen ϕ bare dersom m er heltallig. Halvtallige m , som er tillatt ifølge den *algebraiske* utledningen foran, gir en diskontinuitet for $\phi = 0$,

$$Y(\theta, 2\pi) = -Y(\theta, 0).$$

Funksjonen ”biter seg altså *ikke* i halen” i dette punktet, slik den må gjøre dersom den skal være kontinuerlig. Venstresiden i (T11.65) blir derfor en δ -funksjon, mens høyresiden er endelig, og det går ikke.

Vi kan derfor gjenta den konklusjonen vi kom fram til allerede i Tillegg 5: Enhver rotasjonsbevegelse som kan beskrives klassisk, med en banedreieimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, vil ved kvantisering gi heltallige dreieimpulstilstander.

Dette innebærer at halvtallige spinntilstander, som f.eks elektronspinnets \mathbf{S} , *ikke* kan forstås klassisk, som en form for rotasjon à là $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Mangelen på en slik formel for \mathbf{S} gjør dessuten at spinnets ikke lar seg beskrive i posisjons-representasjonen, altså med vanlig bølgemekanikk. En har ingen formel for f.eks. $\langle \mathbf{r} | S_z$ à là (T11.57). En må derfor nøye seg med en mer abstrakt beskrivelse basert på vektorene $|j, m\rangle$ (eller $|s, m\rangle$ som vi kommer til å bruke for spinnets i neste kapittel).

⁵Vi kunne ha oppnådd en fullstendig spesifisering av vektoren $|l, m\rangle$ (og dermed av $R(r)$) ved å forlange at den skulle være en egenvektor til f.eks en rotasjons-invariant Hamilton-operator, med en bestemt egenverdi E_n . Denne kunne vi ha brukt som en tredje merkelapp på vektoren ($|E_n, l, m\rangle$ eller $|n, l, m\rangle$). Her er vi imidlertid først og fremst interessert i egenskapene til vinkelfunksjonene $Y_{lm}(\theta, \phi)$.

Tilbake til bandedreieimpuls, hvor vi kan si at den algebraiske metoden hadde et lite ”prestisjenederlag”, ved at vi måtte støtte oss på posisjonsrepresentasjonen og den tradisjonelle differensialligningen (T11.62) for å bevise at m er heltallig. På tross av dette lille ”nederlaget” er den algebraiske metoden svært nyttig også for bandedreieimpuls. Blant annet følger det jo fra de algebraiske resultatene at når m er heltallig, så må også l være det, og dette kommer fram på en atskillig enklere måte enn ved løsningen av differensialligningen i Tillegg 5. Den algebraiske metoden gir også en hendig beregningsmåte for de sfæriske harmoniske. En kan ta utgangspunkt i (T11.45), som gir

$$L_+|l, l\rangle = 0, \quad (\text{T11.67})$$

som i posisjonsrepresentasjonen har formen (jf (T11.61))

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_u = 0. \quad (\text{T11.68})$$

Ved hjelp av blant annet (T11.66) kan en overbevise seg om at løsningen er

$$Y_u(\theta, \phi) = C_u \sin^l \theta e^{il\phi}, \quad (\text{T11.69})$$

der normeringskonstanten kan settes lik ⁶

$$C_u = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}. \quad (\text{T11.70})$$

Etter dette er det bare å bruke stigeoperatoren L_- til å beregne $Y_{l,l-1}$, $Y_{l,l-2}$, osv, ned til $Y_{l,-l}$. Ved å kombinere (T11.61) med (T11.52) har vi nemlig:

$$Y_{l,m-1} = \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l+1-m)}} e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{l,m}. \quad (\text{T11.71})$$

Her kan $\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ erstattes med m , ifølge (T11.66).

Merk at stigeoperatorene L_+ og L_- og de øvrige operatorene på høyresidene i (T11.57) – (T11.61) oppfylder de samme algebraiske relasjonene som de generelle dreieimpulsoperatorene J_+ , J_- , osv. Vi kunne derfor like godt ha brukt de algebraiske teknikkene ovenfor til å beregne spektrene og egenfunksjonene til \mathbf{L}^2 og L_z , istedenfor differensialligningene som ble brukt i Tillegg 5. Tilsvarende kunne vi ha løst oscillatorproblemet i Tillegg 3 ved hjelp av posisjonsrepresentasjonene av operatorene a og a^\dagger , altså med samme algebraiske metode som ble brukt i avsnitt 11.1.

⁶Normeringen (T11.70) gir samme normeringskonvensjon for Y_{lm} som i Tillegg 5.