Dobrovoľnícky seminár z kvantovej mechaniky

letný semester 2006/07, štvrtky o 16:00 v A204 (Katedra fyziky)

nasledovné témy pripravil Martin Konôpka
(martin.konopka@stuba.sk)

posledná aktualizácia: 4. apríla 2007

`neucelený dokument - niektoré na seminári prebraté témy sú tu len naznačené alebo nedopísané`

Moment hybnosti v kvantovej mechanike a súvis s rotáciami

Obsah

1 Úvod

Moment hybnosti (MH) je dôležitou veličinou už aj v klasickej mechanike. Vieme, že jeho tri zložky patria medzi sedem dôležitých čísiel-veličín, ktoré sa v uzavretej sústave zachovávajú (sú to energia, 3 kartézske zložky hybnosti no a práve aj 3 kartézske zložky momentu hybnosti). Okrem toho sa MH, resp. jeho niektorá zložka, zachováva aj v niektorých neizolovaných sústavách, napríklad pri pohybe častice vo vonkajšom poli, ak to pole vykazuje istú symetriu. Dá sa ukázať, že zachovanie momentu hybnosti v klasickej mechanike priamo vyplýva z izotrópnosti priestoru, t.j. že pri otočení sústavy o istý uhol sa na nej a jej popise fyzikálne nič nemení [1]. (A podobne zasa zachovanie hybnosti súvisí s homogénnosťou priestoru a zachovanie energie s homogénosťou času.) Ak bude čas a bude to potrebné, tieto veci si niekedy tiež prejdeme. Ako uvidíme, v kvantovej mechanike (QM) má MH ešte dôležitejšiu úlohu ako v klasickej. Uvidíme, že MH aj v QM veľmi úzko súvisí s rotáciami. Okrem toho sa ukazuje, že QM objekty (napr. elektrón) majú nielen MH súvisiaci s pohybom elektrónu v bežnom pristore (tzv. orbitálny MH), ale aj vnútorný MH (spin). Tento druhý MH nemá žiaden klasický analóg. Úloha MH v QM sa tak ukazuje ešte dôležitejšia ako v klasickej mechanike. Táto dôležitosť je ešte viac zvýraznená tým, že vlastné stavy operátorov MH sa často používajú na klasifikáciu kvantových stavov atómov aj molekúl alebo aspoň na klasifikáciu symetrií funkcií.

2 Orbitálny moment hybnosti

2.1 Definícia operátora orbitálneho momentu hybnosti

To, čo pod (orbitálnym) MH častice máme na mysli v klasickej mechanike, t.j.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}\ , \tag{1}$$

má svoju priamu obdobu aj v kvantovej mechanike. Kedže poznáme predpis pre zámenu klasických veličín za operátory, vieme napísať, že

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}\ , \tag{2}$$

kde $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ a $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$. Na vyjadrenie vektorového súčinu použijeme známe determinantové pravidlo a dostaneme

$$\hat{L_x} = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\ ,\quad \hat{L_y} = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\ ,\quad \hat{L_z} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\ . \tag{3}$$

Alebo, ak dosadíme za operátory súradníc a hybností explicitné vyjadrenia, tak

$$\hat{L_x} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\ ,\quad \hat{L_y} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\ ,\quad \hat{L_z} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\ . \tag{4}$$

Príklad: Overte, že zložky operátora MH sú hermitovské.
Treba teda dokázať, že operátor hermitovsky združený k $\hat{L}_x$ je opäť $\hat{L}_x$ a obdobne pre $\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z$. Spomeňme si, že ak máme dva operátory, $\hat{A}$ a $\hat{B}$, tak

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \ .$$

Takže zoberme

$$(\hat{y}\hat{p}_z)^\dagger = \hat{p}_z^\dagger \hat{y}^\dagger = \hat{p}_z \hat{y} = \hat{y}\hat{p}_z \ ,$$

lebo tak $\hat{y}$ ako aj $\hat{p}_z$ sú hermitovské a medzi sebou komutujú. Úplne obdobne to platí pre všetky ďalšie súčiny vystupujúce vo výrazoch pre zložky MH. Tým máme dokázanú jeho hermitovosť.

No a okrem kartézskych zložiek vektora je často potrebné uvažovať aj veľkosť vektora alebo niekedy ešte praktickejšie druhú mocninu jeho veľkosti. Obdobne je to aj s vektorom - operátorom $\hat{\vec{L}}$. Operátor štvorca MH definujeme úplne prirodzene vzťahom

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \ . \tag{5}$$

2.2 Operátory momentu hybnosti vo sférických súradniciach

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{cotg}\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
\hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{cotg}\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \qquad (6) \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \tag{7}$$

2.3 Komutačné vzťahy

Ak dva operátory komutujú, tak vlastné funkcie každého z týchto operátorov možno nájsť tak, aby boli spoločné pre oba operátory [2]. To je veľmi dôležitý poznatok jednak pre hľadanie vlastných funkcií a najmä úzko súvisí s princípom neurčitosti; dve pozorovateľné (v jednej fyzikálnej sústave) nadobúdajú naraz ostré hodnoty (nulové neurčitosti) práve vtedy, keď ich oprátory komutujú. V QM je MH veľmi dôležitý, takže si jeho komutačné vzťahy spočítame resp. pripomenieme.

Takže môžme rátať

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \ .$$

Komutátory so štyrmi operátormi rozbijeme na jednoduchšie a pre tie použijeme známe komutačné vzťahy:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

a všetky ostatné komutátory sú nulové, ako napr.

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{p}_y, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = \text{atď.} = 0 \ .$$

Tak nám nakoniec vyjde mimoriadne dôležitý výsledok, že kartézske zložky operátora MH *nekomutujú* a že ich komutátory sú

$$\boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \;, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \;, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y} \; . \tag{8}$$

No a ešte rátajme

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \;,$$

atď., zrátajte si to sami. Možno pri tom využiť nasledovné všeobecné komutačné pravidlá, ktoré redukujú komutátory súčinov na jednoduché komutátory (striešky pre stručnosť zápisu vynecháme). Počítajme $[ab, c] = abc - cab = abc - acb + acb - cab = a[b, c] + [a, c]b$. Teda užitočné všeobecné pravidlo je

$$[ab, c] = a[b, c] + [a, c]b \; .$$

No a z toho môžme vypočítať ešte zložitejší komutátor, ak by náhodou niekedy bol treba, aj keď teraz nie.

$$[ab, cd] = ac[b, d] + a[b, c]d + c[a, d]b + [a, c]db \; .$$

Výpočtom zisťujeme, že $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_x$ komutujú, a tak isto ďalšie podobné komutátory:

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0} \; . \tag{9}$$

(Kedže osi x, y, z sú rovnocenné, všetky tri tieto komutátory musia byť rovnaké.)

No a nakoniec komutácia s Hamiltonovým operátorom pre centrálne symetrické pole. Tak uvažujme hamiltonián tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m_e} + V(r) \; . \tag{10}$$

Počítajme

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = \frac{1}{2m_e}[\hat{\vec{p}}^{\,2}, \hat{L}_x] + [V(r), \hat{L}_x]$$

K tomu treba

$$[\hat{p}_x^2, \hat{L}_x] = \hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{L}_x] + [\hat{p}_x, \hat{L}_x]\hat{p}_x = 0 \; .$$

Ďalej

$$[\hat{p}_y^2, \hat{L}_x] = \hat{p}_y[\hat{p}_y, \hat{L}_x] + [\hat{p}_y, \hat{L}_x]\hat{p}_y = \hat{p}_y[\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y] + [\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y]\hat{p}_y =$$
$$= \hat{p}_y[\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z] + [\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z]\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_z[\hat{p}_y, \hat{y}] + [\hat{p}_y, \hat{y}]\hat{p}_z\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_z(-i)\hbar - i\hbar\hat{p}_z\hat{p}_y = -2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z \; .$$

Ďalej

$$[\hat{p}_z^2, \hat{L}_x] = \hat{p}_z[\hat{p}_z, \hat{L}_x] + [\hat{p}_z, \hat{L}_x]\hat{p}_z = \hat{p}_z[\hat{p}_z, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y] + [\hat{p}_z, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y]\hat{p}_z =$$
$$= -\hat{p}_z[\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_y] - [\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_y]\hat{p}_z = i\hbar\hat{p}_z\hat{p}_y + i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z = 2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z \; .$$

Dochádzame teda k medzivýsledku, že

$$[\hat{\vec{p}}^{\,2}, \hat{L}_x] = [\hat{\vec{p}}^{\,2}, \hat{L}_y] = [\hat{\vec{p}}^{\,2}, \hat{L}_z] = 0 \; . \tag{11}$$

Celkom iný typ komutátora, ktorý tiež treba vyrátať, je napr. $[V(r), \hat{L}_x]$ a tak isto $[V(r), \hat{L}_y]$ a $[V(r), \hat{L}_z]$, ktoré musia mať z dôvodu symetrie tú istú hodnotu. ($V(r)$ je guľovo symetrický, teda žiaden smer nie je ničím výnimočný.) Rýchlo sa presvedčíme, že najjednoduchší výpočet týchto komutátorov je zobrať ten s $\hat{L}_z$, pričom použijeme vyjadrenie $\hat{L}_z$ vo sférických súradniciach. Samotný komutátor potom počítame tak, že skúšajme jeho pôsobenie, resp. pôsobenie jeho členov na ľubovoľnú funkciu.

$$V(r)\hat{L}_z f(\vec{r}) = -i\hbar V(r)\frac{\partial}{\partial\phi}f(\vec{r})$$

Kedže $V(r)$ nezávisí od ϕ, hneď aj zisťujeme, že operátory $\hat{L}_z$ a $V(r)$ komutujú, a tak isto musia ďalšie dva:

$$[\hat{L}_z, V(r)] = [\hat{L}_x, V(r)] = [\hat{L}_y, V(r)] = 0 \ . \tag{12}$$

Takže oba členy hamiltoniánu komutujú s $\hat{L}_x$, a tak isto aj s $\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z$:

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0} \ . \tag{13}$$

Ako úplne posledný dôležitý komutátor nám zostal

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0} \ , \tag{14}$$

o čom sa môžme presvedčiť opäť (aj) s využitím vyjadrenia $\hat{L}^2$ vo sférických súradniciach. `Bolo by dobré týmto komutáciám rozumieť aj bez detailného počítania.`

Odvodené zarámované komutačné vzťahy nám naznačujú návod, ako budeme postupovať pri hľadaní vlastných sústav (funkcií a hodnôt) tých jednotlivých operátorov: Zoberieme najprv ten operátor (je to $\hat{L}_z$), ktorého vlastnú sústavu vieme nájsť najjednoduchšie. Vieme, že takto nájdené vlastné stavy potom môžu byť (ak na tom popracujeme) aj vlastnými stavmi operátora $\hat{L}^2$ - to preto, že tie dva operátory komutujú. No a vlastné stavy operátora $\hat{L}_z$ ale aj operátora $\hat{L}^2$ môžu byť aj vlastnými stavmi sféricky symetrického hamiltoniánu.

2.4 Vlastná sústava operátora $\hat{L}_z$

Ak si zoberieme jeho vyjadrenie vo sférických súradniciach, tak ľahko zistíme, že

$$\hat{L}_z \Phi_m(\varphi) = m\hbar\Phi_m(\varphi) \ , \tag{15}$$

kde

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

a vlastné hodnoty sú teda $m\hbar$.

2.5 Vlastná sústava operátora $\hat{L}^2$

Vyššie uvedené vlastné funkcie operátora $\hat{L}_z$ nie sú (s výnimkou triviálneho prípadu $m = 0$) vlastnými funkciami operátora $\hat{L}^2$. Aby sme ich takými spravili, určite treba nejak riešiť závislosť od uhla ϑ a nepokaziť pritom to, že sú už vlastnými funkciami pre $\hat{L}_z$. Vlastnými funkciami pre L_z môžu byť len vtedy, keď závislosť na φ má tvar $\exp(im\varphi)$. Teda spoločné vlastné funkcie pre $\hat{L}_z$ aj $\hat{L}^2$ musia mať tvar

$$Y = \text{const}\ \Theta(\vartheta)\, e^{im\varphi} \ ,$$

kde $\Theta(\vartheta)$ je nejaká zatiaľ neznáma funkcia a const je ľubovoľná konštanta, alebo dokonca to môže byť aj funkcia, napr. premennej r (ale s takými komplikáciami nie je *teraz* vhodné sa unúvať), len nesmie závisieť na ϑ a φ. Spoločné vlastné funkcie Y teda treba hľadať v separovanom (faktorizovanom) tvare. Matematicky ten problém zapíšeme

$$\hat{L}_z Y(\vartheta,\varphi) = m\hbar Y(\vartheta,\varphi) \tag{16}$$
$$\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta,\varphi) \tag{17}$$

kde

$$Y(\vartheta,\varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi_m(\varphi) \tag{18}$$

a $\hbar^2\lambda$ sú neznáme vlastné hodnoty operátora L^2. $\Phi_m(\varphi)$ už poznáme:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \ , \quad m \in Z \tag{19}$$

Vlastnú sústavu pre $\hat{L}^2$ budeme hľadať vo sférických súradniciach; inak by to bolo nesmierne komplikované. Vidno napr., že v kartézskych by sme mali hneď 3 premenné, x, y, z, zatiaľ čo vo sférických len 2. Dosadením faktorizovaného tvaru riešenia do (17) dostaneme

$$-\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right]\Theta = \lambda\Theta$$

Túto diferenciálnu rovnicu ideme teraz riešiť takým tradičným (a hodne zdĺhavým a komplikovaným) spôsobom. Viete už z prednášky Moderná fyzika, že existuje aj šikovnejšia metóda. Teraz však nie sme na Modernej fyzike, takže si môžme dovoliť prebrať aj tradičnú nemodernú metódu :-) Aj tá má svoje zaujímavé stránky a okrem toho až po jej prebratí dokážeme oceniť šikovnosť tej inej metódy, o ktorej si ešte niekedy tiež povieme.

Najprv zavedieme substitúciu $\xi = \cos\vartheta$. Vyjadríme vzťahy medzi deriváciami podľa jednej a druhej premennej (stačí používať obyčajné derivácie)

$$\frac{d\Theta}{d\vartheta} = \frac{d\Theta}{d\xi}\frac{d\xi}{d\vartheta}$$

a

$$\frac{d^2\Theta}{d\vartheta^2} = \frac{d}{d\vartheta}\frac{d\Theta}{d\vartheta} = \frac{d}{d\vartheta}\left(\frac{d\Theta}{d\xi}\frac{d\xi}{d\vartheta}\right) = \frac{d}{d\vartheta}\left(\frac{d\Theta}{d\xi}\right)\frac{d\xi}{d\vartheta} + \frac{d\Theta}{d\xi}\frac{d}{d\vartheta}\left(\frac{d\xi}{d\vartheta}\right) = \frac{d^2\Theta}{d\xi^2}\left(\frac{d\xi}{d\vartheta}\right)^2 + \frac{d\Theta}{d\xi}\frac{d^2\xi}{d\vartheta^2} \ .$$

Rovnica potom bude

$$\left[(1-\xi^2)\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} + \lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right]\Theta = 0$$

a hľadáme jej riešenie na intervale $\langle -1; 1\rangle$. Na tomto intervale je to *singulárna diferenciálna rovnica*, lebo jeden z členov pre $\xi = \pm 1$ diverguje; ± 1 sú teda singulárne body (SB). Singulárne diferenciálne rovnice sa riešia (pokiaľ to vôbec ide) napr. nasledovne. Urobíme ďalšiu substitúciu:

$$t = 1 - \xi^2 \ ,$$

čím zredukujeme dva SB na jeden, $t = 0$. Rovnica prejde na tvar

$$t\left[4(1-t)\frac{d^2\Theta}{dt^2} - 2\frac{d\Theta}{dt}\right] + 4(1-t)\frac{d\Theta}{dt} + \left(\lambda - \frac{m^2}{t}\right)\Theta = 0$$

a po úprave

$$4t\frac{d^2\Theta}{dt^2} - 4t^2\frac{d^2\Theta}{dt^2} - 6t\frac{d\Theta}{dt} + 4\frac{d\Theta}{dt} + \left(\lambda - \frac{m^2}{t}\right)\Theta = 0 \ .$$

Jej priblíženie v okolí SB je

$$4t\frac{d^2\Theta}{dt^2} + 4t\frac{d\Theta}{dt} - m^2\Theta = 0 \quad (\text{pre } t \to 0) \ .$$

Skúsime (= uhádneme) presné riešenie tejto približnej v tvare

$$\Theta = c_1 t^{|m|/2} + c_2 t^{-|m|/2} \ .$$

(Dá sa o ňom ľahko presvedčiť, keď ho dosadíme.) c_1 a c_2 sú ľubovoľné komplexné konštatny. Sú nezávislé na m. Druhý člen tohto riešenia však práve pre SB $t \to 0$ diverguje. Za fyzikálne prípustné riešenie však považujeme také, ktoré nedivergujú pre celý definičný obor $\langle 0; 1\rangle$. Preto musí byť $c_2 = 0$. Riešenie v okolí SB teda je

$$\Theta = c_1 t^{|m|/2} \quad (\text{pre } t \to 0) \ .$$

Riešenie presnej rovnice platné pre všetky $t \in \langle 0; 1\rangle$ teraz budeme hľadať v tvare

$$\Theta = t^{|m|/2} v_m(t) = (1-\xi^2)^{|m|/2} v_m(t) \ .$$

Dosadíme tento tvar do kompletnej diferenciálnej rovnice a po dosť zdĺhavých úpravách dostaneme rovnicu pre neznámu funkciu v_m:

$$(1-\xi^2)v_m'' - 2(m+1)\xi v_m' + [\lambda - m(m+1)]v_m = 0 \ . \tag{20}$$

To už nie je singulárna DR. Zderivujme ju podľa ξ. Dostávame

$$(1-\xi^2)v_m''' - 2(m+1)\xi v_m'' + [\lambda - (m+1)(m+2)]v_m' = 0$$

a po malom prepise

$$(1-\xi^2)\left(\frac{dv_m}{d\xi}\right)'' - 2(m+1+1)\xi\left(\frac{dv_m}{d\xi}\right)' + [\lambda - m(m+1)]\frac{dv_m}{d\xi} = 0 \ . \tag{21}$$

Rovnice (20) a (21) sa rovnaké, len majú odlišne zapísanú neznámu funkciu. Preto musí platiť

$$v_{m+1}(\xi) = \frac{d}{d\xi}v_m(\xi) \Rightarrow v_m(\xi) = \frac{d^2}{d\xi^m}v_0(\xi) \ .$$

Stačí teda nájsť riešenie pre $m = 0$, čiže rovnice

$$(1-\xi^2)v_0'' - 2\xi v_0' + \lambda v_0 = 0 \ .$$

`Bolo by to treba dokončiť - nestihol som to tu zapísať, ale na seminári sme si to povedali.`

3 Rotácie vlnových funkcií a ich súvis s orbitálnym momentom hybnosti

Budeme uvažovať aktívne rotácie, čiže súradnicové osi sa hýbať nebudú, bude sa hýbať len pripravujúci prístroj a teda aj vlnová funkcia. Až na odlišnosti v značení to preberieme ako v knihe [2], časť 11.2.

Aspoň niečo stručne, čo sme prebrali (a to iným spôsobom ako v tej knihe). Nech sa jedná o fyzikálnu rotáciu o uhol α okolo istej pevnej osi. (Obr. 2 kdesi ďalej znázorňuje aktívnu rotáciu okolo osi z.) Zavedieme teda vektor $\vec{\alpha}$ popisujúci tak veľkosť rotácie ako aj smer a orientáciu osi. Nech $\vec{r}$ je nejaký bod v priestore, ktorý tou rotáciou zmení svoju polohu na $\vec{r}\,'$. Ako túto novú polohu určíme na základe znalosti $\vec{r}$ a $\vec{\alpha}$? Budeme najprv uvažovať len infinitezimálne otočenie $\delta\vec{\alpha}$. Potom to vychádza

$$\delta\vec{r} = \vec{r} \times \delta\vec{\alpha} \ . \tag{22}$$

Po zrotovaní bude mať vlnová funkcia nejaký iný matematický tvar ψ' (aj keď pri pohľade z inej, vhodne natočenej, súradnicovej sústavy, by vyzerala tak isto ako pôvodná funkcia ψ). Platí [1]

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) \ .$$

Rozviňme to do Taylorovho radu.

$$\psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{r}) = \left[1 - (\vec{r} \times \delta\vec{\alpha}) \cdot \vec{\nabla}\right] \psi(\vec{r}) = \left[1 - \delta\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)\right] \psi(\vec{r}) \ .$$

Čiže

$$\psi'(\vec{r}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{L}}\right) \psi(\vec{r}) \ . \tag{23}$$

`Nedokončené, ale na seminári sme to prebrali.`

4 Spin elektrónu

4.1 Úvod

V 20. rokoch minulého storočia sa nahromadila experimentálna evidencia, že elektrón má vlastný (vnútorný) magnetický moment a moment hybnosti (nazvaný potom spin). Experimenty ukázali, že sú len dva rôzne priemety spinového momentu hybnosti na ľubovoľnú os a nadobúdajú hodnoty $\pm\hbar/2$. Dá sa to nazvať aj tak, že elektrón má nejaký vnútorný stupeň voľnosti, ktorý môže nadobúdať len dve hodnoty [2]. Môžme povedať, že elektrón treba okrem súradnice $\vec{r}$ popisovať aj ďalšou súradnicou, ktorú budeme značiť σ. No a hľadal sa vhodný teoretický popis spinu, ktorý by zapadol do schémy QM a vysvetľoval alebo lepšie povedané popisoval experimentálne pozorovania.

4.2 Konštrukcia spinových operátorov a vektorov (spinorov)

Pri konštrukcii tejto teórie môžme postupovať zhruba nasledovne, induktívne; viď aj kniha [2]. Fyzikálne tie dva spinové stavy, ozn. ich $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, vykazujú vlastnosti navzájom *ortogonálnych* stavov: buď detekujeme $|\uparrow\rangle$ alebo $|\downarrow\rangle$. Ak už vieme, že elektrón je napr. v stave $|\downarrow\rangle$, tak ďalšie meranie jeho stavu určite dá opäť stav $|\downarrow\rangle$. Tie dva stavy teda nemajú žiaden „prekryv“; ak je elektrón určite v jednom z nich, tak v druhom z nich je s nulovou pravdepodobnosťou. (Ak prejde prvý krát Sternovým-Gerlachovým prístrojom a povedzme bude mať spin dole, tak druhý taký istý prístroj, keď doňho tento elektrón vletí, už určite bude detekovaný, že má spin dole, teda stav tohto elektrónu nemá nič spoločné so stavom spinu hore.) Práve toto sa nazýva ortogonálnosť stavov a u spinu sa to experimentálne pozoruje.

[1] Ak by sme chceli byť úplne všeobecní, tak by sme uvažovali, že

$$\psi'(\vec{r}) = \text{const}\ \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) \ ,$$

kde const je hocijaká komplexná konštanta s veľkosťou 1. Ale to by neviedlo k žiadnym významne odlišným zisteniam.

[2] Okrem toho má elektrón samozrejme aj tri vonkajšie - posuvné - stupne voľnosti x, y, z, z ktorých každý môže nadobúdať nekonečné množstvo spojitých hodnôt.

Aby sme si trochu ozrejmili, ako súvisí formálna matematická definícia ortogonálnosti s výsledkami meraní stavov, preopakujme si, ako je to so zvyčajnými vlnovými funkciami závislými len od priestorovej súradnice (lebo tie už ako-tak poznáme). Ich ortogonálnosť sa matematicky vyjadruje integrálom

$$\int \psi_i^*(\vec{r})\psi_j(\vec{r})d^3r = 0 \text{ , pre } i \neq j,$$

teda že ich skalárny súčin je nulový. Skrátene to v QM píšeme aj

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = 0 \ .$$

Okrem ortogonálnosti týchto dvoch funkcií budeme predpokladať aj ich normovanosť, teda, skráteným zápisom,

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1 \ , \ \forall i \ .$$

Ortogonálnosť plus normovanosť sa združene nazýva ortonormovanosť. Sústava funkcií ψ_i je teda ortonormovaná. Predpokladajme, že stavy ψ_i sú všetky možné, v akých sa sústava môže nachádzať (v tom zmysle, akýkoľvek stav, v akom sa môže nachádzať, je zapísateľný ako lineárna kombinácia stavov ψ_i; v najjednoduchšom prípade je v tej lineárnej kombinácii len jeden člen). Predstavme si, že nejaká vlnová funkcia elektrónu je

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\psi_i(\vec{r}) \ ,$$

kde c_i sú nejaké komplexné konštanty. Musia byť také, aby funkcia ψ bola normovaná (na 1), čiže pravdepodobnosť nájsť elektrón niekde v priestore musí byť 1:

$$1 = \int \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3r \equiv \langle\psi|\psi\rangle = [\text{v dôsledku spomínanej ortonormovanosti}] = \sum_i |c_i|^2 \ .$$

Čísla $|c_i|^2$ sú teda pravdepodobnosti toho, že pri meraní na superpozičnom stave ψ nameriame stav ψ_i [3]. ψ_i sú navzájom sa vylučujúce stavy, keďže celková pravdepodobnosť je jednoduchým súčtom. Iná interpretácia čísiel $|c_i|^2$ sa ani nenúka. Vynásobením funkcie $\psi(\vec{r})$ zľava funkciou $\phi_j^*(\vec{r})$ a preintegrovaním dostaneme

$$c_j = \int \psi_j^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3r$$

Skrátene

$$c_j = \langle\psi_j|\psi\rangle \ .$$

Toto môžme napísať aj trochu všeobecnejšie znejúco - nemusí ísť len o stav jedného elektrónu ale hocijakej QM sústavy. A nemusíme písať index ako i alebo j. Nech sústava je v nejakom neznámom stave ψ. Predpokladajme, že máme meracie zariadenie, ktoré je schopné zistiť, či tá sústava je v stave ϕ[4]. Potom amplitúda pravdepodobnosti, že pri meraní na stave ψ detekujeme stav ϕ, je

$$c_\phi = \int \phi^*\psi d^3r \equiv \langle\phi|\psi\rangle \ .$$

Ak by napr. stavy ϕ a ψ boli ortogonálne, tak pravdepodobnosť $|c_\phi|^2$ takej detekcie je nulová. Ak by naopak boli totožné, tak pravdepodobnosť je 1. Takéto sú teda dôsledky ortogonality stavov na výsledky meraní.

[3] To pravda predpokladá, že merací prístroj je konštruovaný tak, že vie detekovať práve tieto stavy.

[4] Znie to čudne, ale tak to je. Tá QM sústava je v nejakom neznámom všeobecnom stave. Náš prístroj je konštruovaný tak, že vie detekovať iba istú sadu stavov. Jedným z tej sady je stav ϕ. Ak meraná sústava (stav ψ) má „čosi v sebe“ zo stavu ϕ, tak je nenulová pravdepodobnosť, že prístroj stav ϕ detekuje.

Podobne budeme uvažovať aj o spinových stavoch alebo funkciách - nazvať ich môžme ako chceme. Keď sa zamyslíme nad výstupmi Sternových-Gerlachových pokusov, naozaj sú také, aké by sme čakali pre navzájom ortogonálne stavy $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$. Takže to zapíšeme aj matematicky - nulovosťou ich prekryvu t.j. skalárneho súčinu:

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$$

Zatiaľ je to dosť abstraktné resp. formálne, lebo nevieme, ako vlastne by sa takýto skalárny súčin podrobne počítal, nemáme tam žiadnu premennú typu $\vec{r}$, ale to nevadí.

O spinových funkciách budeme tiež predpokladať že sú *normované na 1*, z úplne obdobných dôvodov ako pre zvyčajné vlnové funkcie závislé od $\vec{r}$: ak máme elektrón kdesi v priestore, tak pravdepodobnosť nájsť ho kdesi v priestore (keď prehľadáme resp. preintegrujeme cez celý priestor) je 1. Pri spine zasa prehľadávame spinový „priestor“ , teda či má spin „hore“ alebo „dole“ a pravdepodobnosť nájsť elektrón v nejakom spinovom stave vôbec je opäť jedna - tiež celkom triviálne, lebo nejaký spin (hodnotu zistenú detektorom) mať musí. Takže

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \ .$$

Pri zvyčajných vlnových funkciách už vieme, že výraz - skalárny súčin typu $\langle\phi|\psi\rangle$ sa detailnejšie prepíše ako integrovanie, čiže sumovanie cez všetky možné hodnoty vektora $\vec{r}$, čo fyzikálne môže znamenať, že elektrón hľadáme vo všeobecnosti po všetkých možných miestach priestoru (alebo napr. keď počítame $\langle\psi|\psi\rangle$ - musí vyjsť 1). Už môžme tušiť, že obdobný výraz pre spinové funkcie, napr. $\langle\uparrow|\downarrow\rangle$ sa podrobnejšie prepíše tiež ako nejaké sumovanie - ale tentoraz cez akúsi *spinovú súradnicu*, pričom tiež musíme presumovať cez všetky možné súradnice spinového priestoru. Tie nadobúdajú len dve rôzne hodnoty, zatiaľ ich voláme „hore“ a „dole“ .

Spin je fyzikálna veličina (priemet vnútorného MH na zvolenú os, povedzme z); aby zapadol do schémy QM, musí existovať (musí sa dať zkonštruovať) nejaký *hermitovský operátor*, pre ktorý sú to vlastné stavy. Ten operátor nazveme operátorom spinového MH. MH je vektor; najprv budeme uvažovať jeho z-ovú zložku. Ak teda takto vykonštruovaný operátor, ozn. ho $\hat{s}_z$, existuje, musí podľa experimentu platiť

$$\hat{s}_z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \ , \qquad \hat{s}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \ . \tag{24}$$

No a okrem týchto dvoch spinových stavov elektrónu už nebol experimentálne zistený žiaden iný spinový stav s ostrou hodnotou momentu hybnosti [5]. Teda stavy $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ tvoria **úplnú sústavu** stavov v spinovom priestore. Inými slovami, ľubovoľný spinový stav sa dá vyjadriť ako lineána kombinácia stavov $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$:

$$\chi = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle \ ,$$

kde $c_\uparrow$ a $c_\downarrow$ sú príslušné amplitúdy pravdepodobností. O úplných sústavách stavov sme už hovorili aj vyššie.

Vlnová funkcia elektrónu ešte závisí aj od súradníc $\vec{r}$, ale to teraz kvôli jednoduchosti výkladu nepíšeme; závislosť od $\vec{r}$ je teraz skrytá v amplitúdach $c_\uparrow$ a $c_\downarrow$, alebo môžme pre jednoduchosť teraz ignorovať, že elektrón sa môže pohybovať aj v priestore. Vyššie napísany stav χ, pokiaľ má obe amplitúdy nenulové, už nie je ostrým spinovým stavom; pravdepodobnosť nájsť spin hore je $|c_\uparrow|^2$ a dole $|c_\downarrow|^2$. Teda možných spinových stavov je nekonečne veľa, ale len dva z nich majú ostré hodnoty priemetu spinu (vnútorného MH) na os z.

[5] Stav má ostrú hodnotu nejakej veličiny, keď ľubovoľné meranie tej veličiny na tom stave poskytne vždy tú istú hodnotu meranej veličiny. Vieme, že taký stav je vlastným stavom nejakého hermitovského operátora.

Úplne obdobné tvrdenia platia aj pre priemety spinu na osi x a y. Ale *je zvykom všetky spinové stavy vyjadrovať pomocou vlastných stavov operátora* $\hat{s}_z$. To aby bol poriadok. Vlastný stav napr. operátora $\hat{s}_x$ musí byť nejakou lineárnou kombináciou stavov $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, keďže pomocou tých je možné vyjadriť ľubovoľný spinový stav.

Aby sme sa mohli pohnúť ďalej, musíme postulovať ešte komutačné vzťahy spinových operátorov. Zo žiadnej teórie sa dedukciou nedajú odvodiť, takže ich musíme naozaj postulovať. Motiváciou je, že orbitálny MH tiež spĺňa už nám známe komutačné vzťahy. Pre spinový MH postulujeme také isté. Neskôr uvidíme ich hlbšie zdôvodnenie, takže nás to postulovanie teraz nemusí trápiť.

$$\boxed{[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z \ , \qquad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar\hat{s}_x \ , \qquad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar\hat{s}_y} \ . \tag{25}$$

Poďme konštruovať nejaký explicitný tvar (reprezentáciu) operátorov $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ a $\hat{s}_z$. Pozrime sa na rovnice (24). Operátor $\hat{s}_z$ si vyjadrime pomocou iného operátora, aby sa nám tam nemotalo to $\frac{\hbar}{2}$.

$$\hat{s}_z \equiv +\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z \ .$$

Rovnice (24) potom budú vyzerať jednoduchšie:

$$\hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle = +1|\uparrow\rangle \ , \qquad \hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = -1|\downarrow\rangle \ . \tag{26}$$

Zoberme si napr. druhú z týchto rovníc. To, čo je na jej oboch stranách, je istý spinový stav, konkrétne $-|\uparrow\rangle$. Na ľavej strane je celkovo samozrejme ten istý stav, len vyjadrený zložitejšie - pomocou pôsobenia operátora $\hat{\sigma}_z$. Už vieme, že zo stavov môžme počítať skalárne súčiny a že na to máme stručné značenie; napr. ak chceme spraviť skalárny súčin stavu ϕ so stavom ψ, tak to zapíšeme $\langle\phi|\psi\rangle$. Zoberme teda povedzme stav $|\uparrow\rangle$ a spravme jeho skalárny súčin so stavom vystupujúcim na stranách spomínanej rovnice. Spravme to pre obe strany tej rovnice - na oboch vyjde to isté číslo, aj keď to napohľad tak nevyzerá:

$$\langle\uparrow|\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = \langle\uparrow|-1|\downarrow\rangle \ .$$

Obdobne môžme skalárne vynásobiť aj napr. stav $|\downarrow\rangle$ so stavom v tej rovnici. Dostaneme

$$\langle\downarrow|\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|-1|\downarrow\rangle \ .$$

Pre prvú z rovníc (26) to bude úplne podobne a dostaneme atď atď. `nedokončené, ale na semināri prebraté`

Ďalej v rámci tejto podpodčasti prebrať:

- konštrukcia matice σ_z (vo zvyčajnej báze)
- konštrukcia matice σ_z v báze iných stavov
- spomenúť rôzne reprezentácie
- konštrukcia matíc σ_x a σ_y (vo zvyčajnej báze) na základe už postulovaných komutačných vzťahov:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ . \tag{27}$$

- konštrukcia vlastných vektorov Pauliho matíc: že musia byť dvojzložkové atď.
- operátor priemetu spinu na všeobecne smerujúcu os $\vec{n}$ [2]:

$$\vec{n}\cdot\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix} \tag{28}$$

s príslušnými vlastnými vektormi pre vl. hodnoty $+1$ a -1

$$\left(\begin{array}{c} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{array}\right) , \quad \left(\begin{array}{c} -e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{array}\right) \tag{29}$$

- na domácu úlohu preštudovať časť 5.3 z knihy [2], aby sme pochopili, že posledne menovaný operátor je hermitovský
- všeobecná spinová funkcia (stav):

$$|\chi\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle \ .$$

Môžme ju reprezentovať aj obyčajným vektorom, tu maticou 1x2. Ak máme dva takéto všeobecné spinové stavy, napr. ešte aj

$$|\chi'\rangle = c'_\uparrow|\uparrow\rangle + c'_\downarrow|\downarrow\rangle \ .$$

a chceme počítať napr. ich skalárny súčin, dostaneme

$$\langle\chi|\chi'\rangle = „\int d\sigma_z“ \chi(\sigma_z)^*\chi'(\sigma_z)$$

kde „integrovanie“ cez spinovú súradnicu je v skutočnosti sumovaním, teda

$$\langle\chi|\chi'\rangle = \sum_{\sigma_z=\pm1} \chi(\sigma_z)^*\chi'(\sigma_z) \ .$$

- značenie celkových vlnových funkcií jednej častice; napr., ak sa dá faktorizovať, tak

$$\Psi(\vec{r},\sigma_z) = \psi(\vec{r})\chi(\sigma_z)$$

ale vo všeobecnosti celková vlnová funkcia nemusí byť faktorizovateľná, čiže by sme mohli mať napr.

$$\Psi(\vec{r},\sigma_z) = \sum_i \psi_i(\vec{r})\chi_i(\sigma_z)$$

- Pre poriadok by sa mal rozslišovať pojem stav a funkcia. Napr. značením $|\Psi\rangle$ označujeme stav (matematicky vektor z Hilbertovho pristoru) a $\Psi(X)$ je príslušná (vlnová) funkcia, teda vyjadrenie vektora v súradnicovej reprezentácii [2].

4.3 Rôzne značenia spinových funkcií

Najvšeobecnejší spinový stav je, ako sme už spomenuli, superpozíciou spinu hore a dole. V Diracovom značení

$$|\chi\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle \ ,$$

kde $c_\uparrow$ a $c_\downarrow$ sú príslušné amplitúdy pravdepodobností. `Atď., na seminári sme si o tom povedali.`

4.4 Spin elektrónu v magnetickom poli

Treba zdôrazniť: *spin* v magnetickom poli, nie elektrón so všetkými aspektami. Budeme totiž ignorovať silu $-e\vec{v}\times\vec{B}$, ktorá na elektrón tiež pôsobí. V knihe [2] si môžte pozrieť, ako vyzerá priamo riešenie časovej SchrR. Tu si však predvedieme riešenie najprv bezčasovej SchrR a časovú SchrR budeme riešiť až potom.

Poriadne definujme, aký fyzikálny model alebo systém vlastne ideme uvažovať. Bude to zahŕňať kinetickú energiu translačného („orbitálneho") pohybu, lebo bez tej by to bolo až príliš fiktívne. Ďalej zvyčajnú potenciálnu energiu elektrónu vo vonkajšom elektrostatickom poli (to môže byť napr. pole od jadier) a ešte, a to nás teraz bude najviac zaujímať, potenciálnu energiu magnetického dipólu v danom vonkajšom magnetickom poli. Hamiltonián napíšeme v tvare

$$H = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} + V(\hat{\vec{r}}) + H^{\rm spin}(\hat{\vec{\sigma}}) \ , \tag{30}$$

$V(\hat{\vec{r}})$ je člen závislý len od priestorovej súradnice elektrónu a reprezentuje tú potenciálnu energiu vo vonkajšom elektrickom poli (ak tam nejaké je - nemusí byť, ale buďme všeobecnejší, keď nás to nič nestojí). Napr. to môže byť $-e^2/(4\pi\varepsilon_0)$, ale nemusíme sa obmedzovať na tento konkrétny tvar; je teraz úplne nepodstatný. Proste ide o potenciálnu energiu spojenú s pozíciami vo zvyčajnom (t.j. „orbitálnom") priestore. Člen $H^{\rm spin}(\hat{\vec{\sigma}})$ zasa závisí len od vlastného (vnútorného) magnetického momentu elektrónu (teda aj od jeho spinu) a reprezentuje potenciálnu energiu toho magnetického momentu vo vonkajšom magnetickom poli. Ide teda o potenciálnu energiu súvisiacu s rôznymi „pozíciami" v spinovom priestore.

$$H^{\rm spin}(\hat{\vec{\sigma}}) = -\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B} = \frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B} \ . \tag{31}$$

Celý hamiltonián si môžme zapísať

$$H(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}},\hat{\vec{\sigma}}) = H^{\rm orb}(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}) + H^{\rm spin}(\hat{\vec{\sigma}}) \ . \tag{32}$$

4.4.1 Riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice

Problém, ktorý teraz budeme riešiť, má formuláciu

$$H\Phi = E\Phi \ . \tag{33}$$

Kedže hamiltonián je súčtom dvoch nezávislých členov, z ktorých jeden pôsobí len na orbitálne stupne voľnosti a druhý len na súradnice (a samozrejme potom tie dva členy aj komutujú), je možná faktorizácia:

$$\Phi(\vec{r},\sigma) = \phi(\vec{r})\chi(\sigma) \ , \tag{34}$$

pričom $\phi(\vec{r})$ a $\chi(\sigma)$ definujeme tak, že sú vlastnými stavmi operátorov $H^{\rm orb}$ a $H^{\rm spin}$:

$$H^{\rm orb}\phi(\vec{r}) = E^{\rm orb}\phi(\vec{r}) \tag{35}$$

$$H^{\rm spin}\chi(\sigma) = E^{\rm spin}\chi(\sigma) \ . \tag{36}$$

Aby sme videli, že riešenie sa ozaj faktorizuje, pôsobme na takto navrhnutý tvar riešenia celkovým hamiltoniánom:

$$H\Phi = (H^{\rm orb}+H^{\rm spin})\phi(\vec{r})\chi(\sigma) = \chi(\sigma)H^{\rm orb}\phi(\vec{r}) + \phi(\vec{r})H^{\rm spin}\chi(\sigma) \ ,$$

lebo napr. $H^{\rm orb}\chi(\sigma) = \chi(\sigma)H^{\rm orb}$; to je tým, že orbitálny operátor na spinový stav nijak nepôsobí. Potom teda

$$H\Phi = E^{\rm orb}\chi(\sigma)\phi(\vec{r}) + E^{\rm spin}\phi(\vec{r})\chi(\sigma) = E\Phi \ ,$$

teda ten faktorizovaný tvar je ozaj riešením, pričom celková vlastná energia je súčtom tých dvoch partikulárnych. Na riešenie celého problému nám teda stačí vyriešiť tie dva partikulárne problémy (35,36). O probléme (35) predpokladajme, že jeho riešenie už poznáme. (Napr. to môže byť problém atómu vodíka alebo jednoducho voľný elektrón, ktorého riešením je rovinná vlna.) Zaoberajme sa problémom (36).

Podľa (31) potom máme

$$\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\,|\chi\rangle = E^{\rm spin}\,|\chi\rangle\ .$$

Túto rovnicu sme zapísali v abstraktnom Diracovom značení. Toto značenie je, ako už trocha vieme, všeobecnejšie v tom zmysle, že to nie je zápis v konkrétnej (napr. maticovej) reprezentácie, ale je to niečo nad všetkými konkrétnymi reprezentáciami. Teraz sa nám však lepšie bude vyhovovať konkrétna reprezentácia, a to maticová, lebo vieme, ako v nej Pauliho operátor $\hat{\vec{\sigma}}$ vyzerá: sú to Pauliho matice $\vec{\sigma}$ (tu už striešku nepíšeme). A vieme aj vyjadriť neznámy vlastný stav $|\chi\rangle$ ako nejaký dvojzložkový vektor χ; zapíšeme si ho

$$\chi = \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}\ ,$$

kde $c_\uparrow$ a $c_\downarrow$ sú zatiaľ neznáme amplitúdy pravdepodobností. Vyjadríme si magnetickú indukciu ako $\vec{B}=\vec{b}B$, kde $\vec{b}$ je jednotkový vektor v smere $\vec{B}$. Zisťujeme, že v hamiltoniáne máme operátor priemetu spinu na os $\vec{b}$. Jeho maticovú reprezentáciu už poznáme - viď rovnica (28). Takže zapíšeme

$$\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\ \chi = E^{\rm spin}\,\chi$$

a v ďalšom kroku a podrobnejšie

$$\frac{e\hbar B}{2m_e}\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = E^{\rm spin}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}$$

Po drobnej úprave

$$\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = \frac{2m_e E^{\rm spin}}{e\hbar B}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}$$

Tento problém už však máme vyriešený - viď riešenia (29). A vlastné hodnoty takejto spinovej matice sú vždy ± 1 bez ohľadu na smer vektora $\vec{b}$. Teda môžme písať výsledky: vlastné energie sú dve rôzne, zapíšeme ich

$$E^{\rm spin}_\pm = \pm\frac{e\hbar B}{2m_e}$$

a príslušné vlastné vektory (samozrejme tiež dva) sú

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}\ ,\quad \chi_- = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}\ .$$

V abstraktnom Diracovom značení tieto dva vektory zapíšeme ako stavy

$$|\chi_+\rangle = e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}\,|\uparrow\rangle + e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}\,|\downarrow\rangle \tag{37}$$

$$|\chi_-\rangle = -e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}\,|\uparrow\rangle + e^{i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}\,|\downarrow\rangle\ . \tag{38}$$

Teraz k riešeniu celého problému (33). Riešení orbitálnej časti problému, rovnice (35) je zvyčajne nekonečne veľa (na rozdiel od spinového problému, ktorý má len dve riešenie), ale povedzme že nás zaujíma len jedno z tých riešení (najčastejšie to, čo má najnižšiu energiu). Takže zkombinovaním riešenia orbitálneho problému s riešeniami spinového problému dostaneme dve celkové vlastné energie

$$E_\pm = E^{\mathrm{orb}} \pm \frac{e\hbar B}{2m_e}$$

a dva príslušné vlastné stavy, ktoré tým abstraktným zápisom zapíšeme

$$|\Phi_\pm\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi_\pm\rangle \equiv |\phi\rangle|\chi_\pm\rangle \quad \text{(zostručnene)} \ .$$

Aby to bolo konkrétnejšie, môžme to prepísať napr. ako

$$\Phi_+ = \phi(\vec{r}) \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi(\vec{r})\ e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \phi(\vec{r})\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

a obdobne by vyzeral Φ_-. Toto posledné vyjadrenie je spinor obsahujúci aj orbitálnu časť a je to vlastne taká miešaná reprezentáca: orbitálna časť je zapísaná v súradnicovej (tzv. x) reprezentácii a spinová explicitným vymenovaním oboch zložiek v maticovej reprezentácii.

Treba si uvedomiť, že $\phi(\vec{r})$ je nejaká ľubovoľne zvolená vlastná funkcia orbitálnej časti hamiltoniánu. Ako sme už spomenuli, takýchto vlastných funkcií je typicky nekonečne veľa. Ak ich chceme uvažovať všetky, môžme ich pre rozlíšenie napr. indexovať: $\phi_i(\vec{r})$. A môžme teda zapísať *všetky* lineárne nezávislé vlastné stavy daného hamiltoniánu nasledovne (uvedieme len skrátené značenie bez podrobného rozpisovania vektorov):

$$\Phi_{i\pm} = \phi_i(\vec{r})\ \chi_\pm \ . \tag{39}$$

Sme síce schopní nájsť aj ešte iné vlastné stavy, ale tie by boli len lineárnymi kombináciami už nájdených. Stavy (39) tvoria úplnú ortonormovanú sústavu stavov (predpokladáme, že aj orbitálne vlastné funkcie ϕ_i sú ortonormované). Len pre zaujímavosť, inou úplnou ortonormovanou sústavou stavou by boli stavy

$$\{\phi_i(\vec{r})\ |\uparrow\rangle,\ \phi_i(\vec{r})\ |\downarrow\rangle\} \tag{40}$$

Presnejšie povedané, tieto posledné stavy sú špeciálnym prípadom systému (39), a to keď $\vec{B}$ má smer totožný s osou z.

4.4.2 Riešenie časovej Schrödingerovej rovnice

Problém, ktorý teraz budeme riešiť, má formuláciu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \ , \tag{41}$$

kde hamiltonián je stále ten istý (30). Pre časovo závislý problém treba špecifikovať aj počiatočnú podmienku; nech teda

$$|\Psi(0)\rangle = |\phi_{i_0}\rangle \otimes |\downarrow\rangle \ . \tag{42}$$

Čiže za počiatočný stav orbitálnej časti sme zvolili jeden z vlastných stavov orbitálneho hamiltoniánu a za počiatočný stav spinovej časti spin $-\hbar/2$ vzhľadom na os z. Aby to nebolo také abstraktné, zapíšeme to v konkrétnej reprezentácii - tej zmiešanej súradnicovo-maticovej, ktorú sme použili aj vyššie. Teda

$$\Psi(0) = \phi_{i_0}(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \ ,$$

$\phi_{i_0}(\vec{r})$ je teda funkcia popisujúca počiatočné rozloženie elektrónu vo zvyčajnom (orbitálnom) priestore. Počiatočné rozloženie elektrónu v spinovom priestore je zasa také, že s amplidúdou pravdepodobnosti 1 má spin $-1/2$.

Jeden z najčastejších spôsobov ako hľadať riešenie takýchto a iných QM problémov, je vyjadriť riešenie v tvare lineárnej kombinácie nejakých známych stavov a hľadať potom hodnoty koeficientov tejto superpozície; v prípade, že riešime časový problém, koeficienty budú časovo závislé. Tie známe stavy nazývame aj bázové stavy alebo jednoducho *báza*. Ak je to úplná sústava stavov, tak hovoríme o úplnej báze. Pre problém, ktorý teraz riešime, si za bázu zvolíme stavy (39). Mohli by sme v princípe úplne rovnocenne zvoliť za bázu napr. aj stavy (40). Ale uvidíme resp. uvideli by sme, keby sme spravili oba spôsoby, že riešenie v báze (39) bude jednoduchšie. Dá sa to aj očakávať, lebo stavy (39) sú vlastnými stavmi hamiltoniánu, pre ktorý máme riešiť teraz časový vývoj.

Takže

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i \left[a_{i+}(t)|\Phi_{i+}\rangle + a_{i-}(t)|\Phi_{i-}\rangle\right] \ ,$$

kde $a_{i\pm}(t)$ sú neznáme koefienty. Dosadením takto navrhnutého riešenia do časovej SchR (41) dostaneme

$$i\hbar \sum_i \left[\dot{a}_{i+}(t)|\Phi_{i+}\rangle + \dot{a}_{i-}(t)|\Phi_{i-}\rangle\right] = \sum_i \left[a_{i+}(t)E_{i+}|\Phi_{i+}\rangle + a_{i-}(t)E_{i-}|\Phi_{i-}\rangle\right] \ ,$$

kde bodkami označujeme derivácie podľa času. V súradnicovej reprezentácii by táto rovnica mala tvar

$$i\hbar \sum_i \left[\dot{a}_{i+}(t)\Phi_{i+}(X) + \dot{a}_{i-}(t)\Phi_{i-}(X)\right] = \sum_i \left[a_{i+}(t)E_{i+}\Phi_{i+}(X) + a_{i-}(t)E_{i-}\Phi_{i-}(X)\right] \ ,$$

kde $X \equiv \vec{r}, \sigma$ je stručné značenie pre súbor priestorových a spinovej súradníc. Vynásobme túto rovnicu zľava napr. funkciou $\Phi_{j-}(X)$ a preintegrujme cez X [6]. Vďaka ortonormovanosti našej bázy dostaneme

$$i\hbar\dot{a}_{j-}(t) = a_{j-}(t)E_{j-} \ .$$

A obdobne by sme prenásobením funkciou $\Phi_{j+}(X)$ a preintegrovaním dostali

$$i\hbar\dot{a}_{j+}(t) = a_{j+}(t)E_{j+} \ .$$

Sú to jednoduché diferenciálne rovničky, ktoré majú riešenia

$$a_{j\pm}(t) = a_{j\pm}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{j\pm}t}$$

S riešením nášho problému sme teda zatiaľ došli k tvaru

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i \left[a_{i+}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i+}t}|\Phi_{i+}\rangle + a_{i-}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i-}t}|\Phi_{i-}\rangle\right] \ .$$

Zatiaľ neznáme konštanty $a_{j\pm}$ určíme z počiatočnej podmienky (42), a to nasledovne. Práve napísané riešenie vyjadríme v čase 0:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_i \left[a_{i+}(0)|\Phi_{i+}\rangle + a_{i-}(0)|\Phi_{i-}\rangle\right] \ .$$

[6] Integrovanie cez X je stručné vyjadrenie znamenajúce naozajstné integrovanie cez x, y a z cez celý priestor a sumovanie cez dve hodnoty spinovej súradnice σ. No a miesto násobenia, integrovania a sumovania môžme používať kompaktné a prehľadné Diracovo značenie pomocou $\langle$bra$|$ a $|$ket$\rangle$ vektorov, ktoré tieto operácie vybaví omnoho stručnejšie.

Celkom tak isto, ako sme robili vyššie, prenásobíme a preintegrujeme, inými slovami spravíme skalárny súčin stavu $|\Phi_{j+}\rangle$ so stavom $|\Psi(0)\rangle$ a dostaneme

$$\langle\Phi_{j+}|\Psi(0)\rangle = a_{j+}(0) \ .$$

Obdobným postupom dostaneme aj vyjadrenie pre $a_{j-}(0)$, takže stručne môžme zapísať

$$a_{j\pm}(0) = \langle\Phi_{j\pm}|\Psi(0)\rangle \ .$$

Toto platí pre ľubovoľný počiatočný stav, nielen ten (42), čo sme si zvolili ako príklad.

Ako teraz vypočítať konkrétnejšie výrazy pre tieto počiatočné amplitúdy, t.j. ako vypočítať príslušné skalárne súčiny? Pripomenieme si, že stavy $|\Phi_{j\pm}\rangle$ máme vyjadrené výsledkami (39), pričom výrazy pre spinové stavy $|\chi_\pm\rangle$ sú určené vzťahmi (37, 38). Za $|\Psi(0)\rangle$ jednoducho dosadíme daný počiatočný stav vyjadrený vzťahom (42). Takže napr.

$$\begin{aligned} a_{j+}(0) = \langle\phi_j\chi_+|\phi_{i_0}\downarrow\rangle &= [\text{kvôli ortogonálnosti orbitálnych vlastných funkcií}] = \\ &= \delta_{j\,i_0}\langle\chi_+|\downarrow\rangle = \delta_{j\,i_0}\sum_\sigma \chi_+^*(\sigma)\chi_\downarrow(\sigma) = \delta_{j\,i_0}e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \ . \end{aligned}$$

Podobne

$$a_{j-}(0) = \delta_{j\,i_0}e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}$$

Preto

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i_0+}t}|\Phi_{i_0+}\rangle + e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i_0-}t}|\Phi_{i_0-}\rangle \ .$$

Zvyčajne sa nám však viac pozdáva výsledok vyjadrený v základnej báze (lebo má úzky vzťah k experimentu), a tou je povedzme báza (40). Takže ešte dosadíme za $\Phi_{i\pm}$ vzťahy (39) a tiež rozpíšeme energie. Výsledok bude

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i+}t}|\phi_{i_0}\rangle &\left[e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}\,|\uparrow\rangle + e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}\,|\downarrow\rangle\right] + \\ +e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{i-}t}|\phi_{i_0}\rangle &\left[-e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2}\,|\uparrow\rangle + e^{i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2}\,|\downarrow\rangle\right] \ . \end{aligned} \tag{43}$$

`Treba to ešte zjednodušiť, popr. sa (na domácu úlohu) „pohrať“ s rôznymi počiatočnými podmienkami a smermi magnetickej indukcie.`

4.5 Spin: kvantové číslo alebo súradnica?

Niekedy sa spin značí kvantovým číslom (napr. spinové kvantové číslo m_s v atóme vodíka), inokedy zasa súradnicou, ako sme to robili aj v predchádzajúcej časti. Vo všeobecnosti musí byť informácia o spine zahrnutá aj do súradnice aj do indexu. Prečo a ako sa to myslí? Keď máme nejakú rovnicu pre vlastné funkcie a hodnoty, napr. $\hat{A}f(x) = \lambda f(x)$, tak už z definície tohto problému vlastná hodnota nesmie závisieť od súradnice. Pri spine však (vlastná) energia od spinového stavu závisieť môže (a často aj závisí, aspoň trochu). Preto by sme povedali, že spin musí byť charakterizovaný kvantovým číslom, napr. $+1/2$, $-1/2$, alebo jednoducho $+1$ a -1, podľa dohody značenia. Na druhej strane však vieme, že predsa kvantovomechanický stav nemusí mať ostrú hodnotu spinu; môže to byť náš starý známy $|\chi\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle$. Nezávislé spinové stavy však môžu byť len dva a ak máme dohodnuté, že si ako dva nezávislé stavy vyberieme $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, tak aké spinové kvantové číslo potom dáme superpozičnému stavu $|\chi\rangle$? Vidno, že sme v problémoch. Ale v praxi sme ich už vyriešili, len sa treba nad tým zamyslieť a spraviť závery. Tie môžu byť nasledovné: Elektrón sa ozaj môže nachádzať buď v spinovom stave $|\uparrow\rangle$ alebo $|\downarrow\rangle$, pravda, vo všeobecnosti s istými amplitúdami pravdepodobnosti, čo sa zapíše práve spomenutým spôsobom (a dá sa to interpretovať aj tak, že kým nespravíme meranie, tak akoby sa nachádzal v oboch stavoch naraz). Je to obdoba toho, že ani pri popise jeho polohy v bežnom priestore nevieme, kde sa naozaj nachádza, len vieme, že s istou amplitúdou pravdepodobnosti je tu a s inou tam a s ešte inou hentam. Takže v tomto zmysle spin naozaj môžme chápať ako najakú súradnicu σ (ktorá však môže nadobúdať len dve rôzne hodnoty ± 1). Ale ako potom ošetriť to, že vlastná energia nesmie závisieť od spinovej súradnice? Tak, že budeme striktne rozlišovať, čo je spinová súradnica a čo je spinové „kvantové číslo“ . Pod spinovým „kvantovým číslom“ treba vo všeobecnosti rozumieť index, ktorým značíme (odlišujeme) dve vlastné hodnoty nejakého spinového problému, napr. toho z predošlej časti. Mali sme tam spinové vlastné stavy $|\chi_\pm\rangle$, ktoré sme v súradnicovej reprezentácii značili $\chi_\pm(\sigma)$. To $\pm$ sú spinové indexy („kvantové čísla“)[7] a σ je zasa spinová súradnica. Takže problém značenia je takto vyriešený. Rozpíšme si to trochu. Napr.

$$\chi_\uparrow(\sigma) = \begin{cases} 1, & \text{pre } \sigma = +1 \\ 0, & \text{pre } \sigma = -1 \end{cases}$$

a nemáme problém ani so závislosťou vlastnej hodnoty od spinu: Napr. rovnice

$$\hat{s}_z \chi_\uparrow(\sigma) = \lambda_\uparrow \chi_\uparrow(\sigma)$$

$$\hat{s}_z \chi_\downarrow(\sigma) = \lambda_\downarrow \chi_\downarrow(\sigma)$$

v sebe nemajú žiadne protirečenie. Tie nulové hodnoty spinových funkcií to zariadia.

5 Rotácie a všeobecný moment hybnosti

5.1 Infinitezimálne rotačné operátory

Táto časť môže byť chápaná aj ako čisto matematická, lepšie povedané geometrická. Budeme uvažovať, podobne ako sme už kedysi uvažovali, rotáciu okolo nejakej osi $\vec{\xi}$ o uhol α. Predtým sme uvažovali tzv. *aktívne* rotácie [8], t.j. otáčali sme pripravujúcim prístrojom a teda aj vlnovou funkciou. Pri čisto matematickom pohľade sme otáčali funkciou. Súradicové osi sa nehýbali. Treba si uvedomiť, že otočenie (kontúr) funkcie o uhol α je ekvivalentné tomu, keď funkciou nehýbeme, ale otáčame súradnicovú sústavu o uhol $-\alpha$ (okolo tej istej osi $\vec{\xi}$). V jednom či druhom prípade je po otočení vyjadrenie funkcie vzhľadom na aktuálnu súradnicovú sústavu také isté. Tento druhý typ rotácii nazývame *pasívne* rotácie. Viac-menej z konvenčných dôvodov budeme teraz primárne uvažovať pasívne rotácie podobne ako v knihe [3]. V rôznej literatúre sa používa raz ten či onen prístup, podľa toho, kedy ktorý je (aspoň subjektívne) vhodnejší. Aj v tomto výklade pomocne použijeme aj pasívne rotácie, keď sa to bude hodiť. Treba poznať oba tieto typy rotácií a hlavne ich nepopliesť.

Podstatný rozdiel medzi rotáciami uvažovanými kedysi a teraz je však v tom, že kedysi sme mali len funkcie v obyčajnom priestore, t.j. závisiace od $\vec{r}$. Teraz závisia aj od spinovej súradnice. Okrem toho teraz budeme uvažovať, že môžu závisieť nielen od súradníc jednej častice, ale vo všeobecnosti od viacerých častíc.

Úlohou bude nájsť operátor, ktorý vyjadrí zmenu stavu pri rotácii súradnicovej sústavy. Teda

$$|\Phi'\rangle = \hat{R}(\alpha, \vec{\xi})|\Phi\rangle \ , \tag{44}$$

[7] V špeciálnom prípade, keď je magnetická indukcia rovnobežná s osou z , tie indexy $\pm$ sú jednoducho $\uparrow$ a $\downarrow$.

[8] často nazývané aj fyzikálne

kde α je uhol a $\vec{\xi}$ je jednotkový vektor v smere rotačnej osi. Kedže $|\Phi\rangle$ vo všeobecnosti nemôže byť reprezentované zvyčajnou vlnovou funkciou (lebo môže závisieť nielen od priestorových súradníc), Taylorov rozvoj nám tu nepomôže. Všetku potrebnú informáciu o operátore $\hat{R}(\alpha,\vec{\xi})$ je však možné nájsť aj nasledovne. Zadefinujeme *infinitezimálny rotačný operátor* $\hat{I}_{\vec{\xi}}$:

$$\boxed{i\hat{I}_{\vec{\xi}} = \lim_{\alpha\to 0}\frac{\hat{R}(\alpha,\vec{\xi})-1}{\alpha}} . \tag{45}$$

Čiže pre malé rotácie platí

$$\hat{R}(\alpha,\vec{\xi}) = 1 + i\alpha\hat{I}_{\vec{\xi}} , \quad \alpha\to 0 . \tag{46}$$

Hocijako veľké rotácie:

$$\hat{R}(\alpha,\vec{\xi}) = e^{i\alpha\hat{I}_{\vec{\xi}}} . \tag{47}$$

5.1.1 Skladanie infinitezimálnych rotačných operátorov

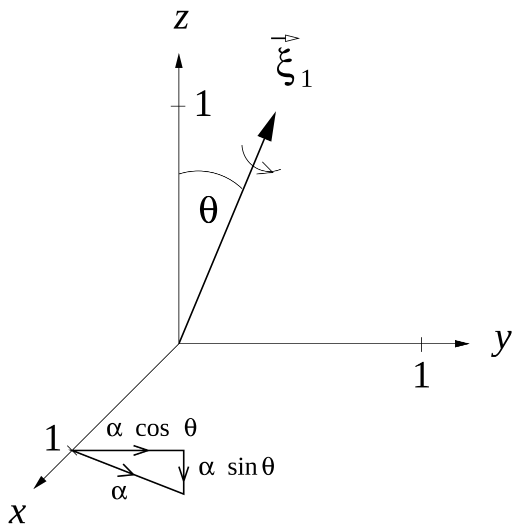
Skúsme zadefinovať nasledovný vektorový operátor:

$$\hat{\vec{I}} = \hat{I}_x\vec{e}_x + \hat{I}_y\vec{e}_y + \hat{I}_z\vec{e}_z . \tag{48}$$

Potom je zrejmé, že operátory infinitezimálnych rotácií pre jednotlivé kartézske osi sa dajú počítať skalárnymi súčinmi:

$$\hat{I}_x = \vec{e}_x\cdot\hat{\vec{I}} , \quad \hat{I}_y = \vec{e}_y\cdot\hat{\vec{I}} , \quad \hat{I}_z = \vec{e}_z\cdot\hat{\vec{I}} .$$

Radi by sme boli, keby sa operátor infinitezimálnej rotácie okolo všeobecne smerovanej osi $\vec{\xi}$ počítal prirodzeným zovšeobecnením, t.j. $\hat{I}_{\vec{\xi}} = \vec{\xi}\cdot\hat{\vec{I}}$. Ukážeme, že tomu je naozaj tak. Uvažujme pasívnu rotáciu o veľmi malý uhol α okolo osi $\vec{\xi}_1$ (obr. 1), ktorá leží v rovine yz. Túto rotáciu možno zložiť z dvoch po sebe idúcich rotácií: okolo osi z a okolo osi y



Obrázok 1: Skladanie infinitezimálych rotácií. Os $\vec{\xi}_1$ leží v rovine yz [3].

(v ľubovoľnom poradí, pokiaľ sú tie rotácie ozaj veľmi malé). Vidno to napr. z toho, ako sa zmení poloha bodu $(1,0,0)$ (ležiaceho na osi x). Platí teda [9]

$$\hat{R}(\alpha,\vec{\xi}_1) = \hat{R}(\alpha\sin\theta, y)\hat{R}(\alpha\cos\theta, z) + O(\alpha^2) .$$

[9] Správne by sme to mali odvodiť aj formálnejšie pomocou násobenia matíc, ale pokiaľ za zaujímame len o presnosť do 1. rádu, náčrt situácie na obrázku 1 by mal stačiť na to, aby sme videli, že tú rotáciu možno zložiť z dvoch iných, a to v ľubovoľnom poradí. Čosi veľmi podobné budeme robiť aj kúsok ďalej, a tam to spravíme aj odvodením pomocou vzťahov, lebo nás bude zaujímať presnosť do 2. rádu, ktorú už očami tak dobre nevieme posúdiť.

Kedže α tu je malé, možno použiť vyjadrenie (46) a dostávame

$$\hat{I}_{\vec{\xi}_1} = \hat{I}_y \sin\theta + \hat{I}_z \cos\theta \ .$$

Naša všeobecne smerovaná os $\vec{\xi}$ nech má smerové kosínusy (kartézske zložky vyjadrené sférickými uhlami) $\sin\theta\cos\phi$, $\sin\theta\sin\phi$ a $\cos\theta$. Predstavíme si pomocnú súradnicovú sústavu, ktorej os z' je taká istá ako os z, ale os y' je kolmým priemetom osi $\vec{\xi}$ do vodorovnej roviny. V tejto pomocnej súradnicovej sústave je os $\vec{\xi}$ opäť v špeciálnej polohe - totiž v rovine $y'z'$. Preto platí

$$\hat{I}_{\vec{\xi}} = \hat{I}_{y'} \sin\theta + \hat{I}_z \cos\theta \ .$$

A keď porozmýšľame ďalej, zistíme aj, že

$$\hat{I}_{y'} = \hat{I}_y \sin\phi + \hat{I}_x \cos\phi \ .$$

Preto nakoniec

$$\hat{I}_{\vec{\xi}} = \hat{I}_x \cos\phi\sin\theta + \hat{I}_y \sin\phi\sin\theta + \hat{I}_z \cos\theta \ ,$$

čiže

$$\boxed{\hat{I}_{\vec{\xi}} = \vec{\xi}\cdot\hat{\vec{I}}} \ . \tag{49}$$

Infinitezimálne rotačne operátory sa formálne skladajú ako jednotkové vektory; $\hat{I}_x$, $\hat{I}_y$ a $\hat{I}_z$ akoby boli jednotkové vektory v smere kartézskych osí a čísla $\cos\phi\sin\theta$, $\sin\phi\sin\theta$ a $\cos\theta$ akoby kartézske zložky celkového jednotkového „vektora“ $\hat{I}_{\vec{\xi}}$. Napr. vyjadrenie

$$\vec{\xi} = \vec{e}_x \cos\phi\sin\theta + \vec{e}_y \sin\phi\sin\theta + \vec{e}_z \cos\theta$$

má naozaj formu ako predposledne rozpísaný vzťah pre $\hat{I}_{\vec{\xi}}$.

5.1.2 Komutačné vzťahy

Mohli by sme pomerne jednoducho dostať komutačné vzťahy pre rotačné operátory $\hat{I}_x$, $\hat{I}_y$ a $\hat{I}_z$ bez toho, že by sme museli uvažovať ich konkrétnu reprezentáciu (napr. maticovú). Tak je to spravené v knihe [3]. Využijeme tu však kúsok iný postup, tak ako to je zasa v [2]. Pri tomto budeme uvažovať aktívne rotácie, lebo skladania rotácií okolo rôznych osí sa niekedy predstavia ľahšie, keď sú uvažované v aktívnom zmysle (ale je to subjektívna záležitosť). Pre odlíšenie budeme aktívne rotácie značiť operátorom $\widehat{\mathrm{Rot}}\,(\alpha,\xi)$. Medzi aktívnymi a pasívnymi rotáciami platí jednoduchý vzťah

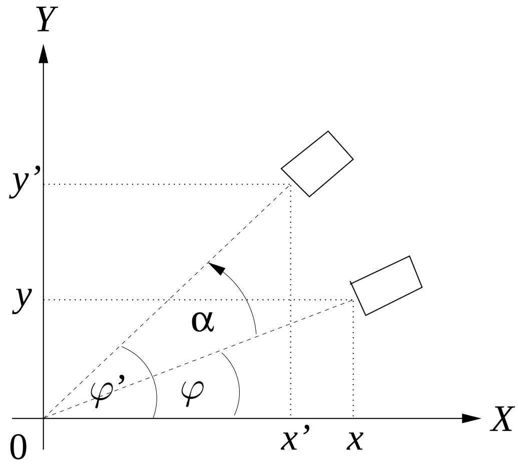
$$\hat{R}(\alpha,\vec{\xi}) = \widehat{\mathrm{Rot}}\,(-\alpha,\vec{\xi}) \ . \tag{50}$$

Takže keď nakoniec nájdeme nejaké vzťahy pre operátory $\widehat{\mathrm{Rot}}$ aktívnych rotácií, tak ľahko budeme vedieť ich prepísať pre operátory $\hat{R}$ pasívnych rotácií. Uvažujme aktívnu rotáciu okolo osi z podľa obrázku 2 (viď aj kniha [2], kapitola 11.2). Nech (x,y,z) je hocijaký bod v priestore. Pre fyzikálnu názornosť si môžme predstaviť aj prístroj (tá krabica), ktorý pripravuje stav nejakého QM objektu a atívna rotácia znamená rotovať tým prístrojom. Tým sa samozrejme musí meniť aj matematická forma vlnovej funkcie resp. stavu. Na obrázku sme zvolili dosť špeciálny bod (x,y,z), ale to len aby sme kresbu neprekomplikovali. Ako sa tou rotáciou zmenia súradnice rotovaného bodu? Máme

$$x = \rho\cos\varphi \ , \quad y = \rho\sin\varphi$$

a

$$x' = \rho\cos\varphi' \ , \quad y' = \rho\sin\varphi' \ ,$$



Obrázok 2: Aktívna (fyzikálna) rotácia okolo osi Z o uhol α. Šípka na oblúku uhla označuje, čo myslíme pod kladným smerom aktívnej rotácie.

kde ρ je dĺžka tej rotovanej úsečky, teda dĺžka priemetu vektora $\vec{r} = (x, y, z)$ do vodorovnej roviny. Potom musí platiť

$$x' = \rho \cos(\varphi + \alpha) = \rho \cos\varphi \cos\alpha - \rho \sin\varphi \sin\alpha = x\cos\alpha - y\sin\alpha\ .$$

A podobne

$$y' = \rho \sin(\varphi + \alpha) = \rho \sin\varphi \cos\alpha + \rho \cos\varphi \sin\alpha = x\sin\alpha + y\cos\alpha\ .$$

No a samozrejme

$$z' = z\ .$$

Maticové vyjadrenie tejto rotácie teda bude

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Túto maticu aktívnej rotácie označíme symbolom $\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{z})$, čím ju odlíšime od symbolu R znamenajúceho v našom značení pasívnu rotáciu. `Nepopliesť so značením v knihe Pišúta a kol.! My teraz používame značenie ako v knihe [3].` Podobne už dokážeme ľahko odvodiť aj matice pre rotovanie okolo osí x a y. Takže to spíšme:

$$\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}\ ,\quad \mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{y}) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}\ ,$$
$$\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{z}) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\ . \tag{51}$$

Teraz skúsime spraviť dve po sebe idúce rotácie, jednu okolo osi x, druhú okolo y. Pre jednoduchosť použijeme pre obe z nich ten istý uhol. Túto zloženú rotáciu realizujeme jednoduchým vynásobením matíc a zistíme, že výsledok závisí od poradia tých dvoch rotácií:

$$\boxed{\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{x})\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{y}) \neq \mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{y})\mathrm{Rot}\,(\alpha, \mathrm{x})}\ .$$

To sme už vlastne naznačili aj vyššie, kde sme skladali dve (pasívne) infinitezimálne rotácie, jednu okolo osi z o uhol $\alpha\sin\theta$ a druhú okolo osi y o uhol $\alpha\cos\theta$ (infinitezimálny tam bol uhol α, nie θ) a odvodili tak vzťah pre skladanie infinitezimálnych operátorov. Tam sme síce uvažovali, že na poradí násobenia nezáleží, ale to sme mysleli len v limite $\alpha \to 0$ a do 1. rádu v α; aj sme to explicitne naznačili pripísaním symbolu $O(\alpha^2)$. Teraz síce tiež budeme uvažovať infinitezimálne rotácie, ale presnosť do 1. rádu v rotačnom uhle nám nebude stačiť, lebo nekomutovanie tých rotácií sa prejaví až v 2. ráde. Malý uhol si teraz označme ε. Rotačné matice potom budú

$$\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 \end{pmatrix} + \mathrm{O}(\varepsilon^3)\ ,$$

$$\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{y}) = \begin{pmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1-\varepsilon^2/2 \end{pmatrix} + \mathrm{O}(\varepsilon^3)\ ,$$

$$\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{z}) = \begin{pmatrix} 1-\varepsilon^2/2 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1-\varepsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \mathrm{O}(\varepsilon^3)\ .$$

Priamym výpočtom s týmito maticami zistíme, že

$$\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{x})\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{y})\mathrm{Rot}\,(-\varepsilon^2,\mathrm{z}) = \mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{y})\mathrm{Rot}\,(\varepsilon,\mathrm{x}) + \mathrm{O}(\varepsilon^3)\ .$$

Znamená to, že tri malé rotácie na ľavej strane majú s presnosťou do 2. rádu ten istý efekt ako dve na pravej. Proste natočia rotovaný bod do tej istej novej polohy. No a keďže nás zaujímajú aj pasívne rotácie, pomocou vzťahu (50) ľahko odvodíme, že

$$R(-\varepsilon,x)R(-\varepsilon,y)R(\varepsilon^2,z) = R(-\varepsilon,y)R(-\varepsilon,x) + O(\varepsilon^3)\ .$$

Nakoniec, len z estetických dôvodov, si zavedieme infinitezimálny uhol $\varepsilon' \equiv -\varepsilon$, prepíšeme posledný vzťah s použitím toho nového uhla, a ten vzápätí pre jednoduchosť premenujeme na opäť ε. Dostaneme

$$R(\varepsilon,x)R(\varepsilon,y)R(\varepsilon^2,z) = R(\varepsilon,y)R(\varepsilon,x) + O(\varepsilon^3)\ .$$

No a ešte raz pripomenieme: symbolmi R značíme pasívne rotácie (t.j. keď rotuje len súradnicová sústava) a symbolmi Rot zasa aktívne (fyzikálne) rotácie (t.j. keď sa súradnicová sústava nehýbe a hýbe sa len fyzikálna sústava, alebo formálnejšie chápané, že rotuje vlnová funkcia resp. sa rotačne transformuje stavový vektor).

To, ako sa pri (pasívnej) rotácii zmení (transformuje) vyjadrenie nejakého stavového vektora, závisí len od toho, akú rotáciu absolvuje súradnicová sústava. Preto ak tú istú rotáciu dosiahneme dvoma rôznymi postupmi, výsledný stavový vektor bude v oboch prípadoch ten istý. Transformáciu nejakého stavového vektora $|\Phi\rangle$ pri rotácii súradnicovej sústavy popísanej maticou $R(\alpha,\vec{\xi})$ realizujeme pôsobením abstraktného operátora $\hat{R}(\alpha,\vec{\xi})$. To sme definovali vzťahom (44). (Abstraktného preto, lebo ten stavový vektor sme nevyjadrili v žiadnej konkrétnej reprezentácii.)

Pre transformovanie stavového vektora našou konkrétnou zloženou rotáciou preto platí

$$\hat{R}(\varepsilon,x)\hat{R}(\varepsilon,y)\hat{R}(\varepsilon^2,z)|\Phi\rangle = \hat{R}(\varepsilon,y)\hat{R}(\varepsilon,x)|\Phi\rangle + \hat{O}(\varepsilon^3)|\Phi\rangle\ .$$

Aj keď konkrétne vyjadrenie rotačných operátorov (v nejakej reprezentácii) ešte nepoznáme, to zatiaľ ani netreba; stačí, že vieme, že ich pôsobenia majú spĺňať vyššie uvedený vzťah. Tým vzťahom sme spravili dôležitý krok, lebo sme prešli od matíc transformujúcich len súradnicu $\vec{r}$ ku operátorom transformujúcich ľubovoľný vektor Hilbertovho priestoru. Z tej ľubovoľnosti vyplýva, že stav Φ v tej rovnici ani netreba písať, a teda možno napísať vzťah aj v operátorovom tvare:

$$\boxed{\hat{R}(\varepsilon,x)\hat{R}(\varepsilon,y)\hat{R}(\varepsilon^2,z)=\hat{R}(\varepsilon,y)\hat{R}(\varepsilon,x)+\hat{O}(\varepsilon^3)}\ . \tag{52}$$

Mimoriadnu dôležitosť tohto vzťahu pri porozumenie skladania rotácií sme sme zvýraznili aj zarámovaním. Dosadením za operátory $\hat{R}$ pomocou infinitezimálnych podľa vyjadrenia (47) dostaneme

$$\left(1+i\varepsilon\hat{I}_x-\frac{1}{2}\varepsilon^2\hat{I}_x^2\right)\left(1+i\varepsilon\hat{I}_y-\frac{1}{2}\varepsilon^2\hat{I}_y^2\right)\left(1+i\varepsilon^2\hat{I}_z\right)=\left(1+i\varepsilon\hat{I}_y-\frac{1}{2}\varepsilon^2\hat{I}_y^2\right)\left(1+i\varepsilon\hat{I}_x-\frac{1}{2}\varepsilon^2\hat{I}_x^2\right)\ ,$$

pričom sme písali len členy do 2. rádu v ε, čo pre veľmi malé uhly stačí. Keď to roznásobíme (a nesmieme pritom prehadzovať poradie rôznych operátorov, lebo nekomutujú, aspoň teda to tušíme a o chvíľu aj explicitne uvidíme), dostaneme dosť veľkú rovnicu, ktorú si preto radšej rozpíšme podľa jednotlivých rádov, aj keď to treba aspoň zatiaľ chápať ako jednu rovnicu.

$$\begin{array}{lccc}
\varepsilon^0: & 1 & = & 1\\
\varepsilon^1: & i\hat{I}_x+i\hat{I}_y & = & i\hat{I}_y+i\hat{I}_x\\
\varepsilon^2: & -\frac{1}{2}\hat{I}_x^2-\hat{I}_x\hat{I}_y-\frac{1}{2}\hat{I}_y^2+i\hat{I}_z & = & -\frac{1}{2}\hat{I}_y^2-\hat{I}_y\hat{I}_x-\frac{1}{2}\hat{I}_x^2
\end{array}$$

Vidíme, že rády 0 a 1 nedajú žiadnu užitočnú informáciu[10]. Navyše vypadne aj väčšina členov 2. rádu. Od oboch strán rovnice môžme príspevky 0. a 1. rádu a časť tých 2. rádu odčítať a dostaneme novú rovnicu, ktorá bude mať najnižší rád 2:

$$\left(-\hat{I}_x\hat{I}_y+i\hat{I}_z\right)\varepsilon^2=-\hat{I}_y\hat{I}_x\varepsilon^2+(\text{nejaký operátor})\varepsilon^3+O(\varepsilon^4)$$

Teraz túto rovnicu predelíme hodnotou ε^2 a na to, čo zostane, uplatníme limitu $\varepsilon\to 0$. Dostaneme komutačný vzťah $\hat{I}_x\hat{I}_y-\hat{I}_y\hat{I}_x=i\hat{I}_z$. Takto sme si trochu detailne ukázali aj to, ako korektne chápať také veci, ako napr. že stačí uvažovať presnosť do 2. rádu a pod. Teraz je zrejmé, že to neznamená spravenie nejakého priblíženia. Všetko je úplne presné.

Vďaka symetrii hneď cyklickou zámenou dostaneme aj ďalšie dva komutačné vzťahy. Zhrňme ich všetky tri:

$$\boxed{[\hat{I}_x,\hat{I}_y]=i\hat{I}_z}\ ,\quad \boxed{[\hat{I}_x,\hat{I}_y]=i\hat{I}_z}\ ,\quad \boxed{[\hat{I}_x,\hat{I}_y]=i\hat{I}_z}\ . \tag{53}$$

Pripomeňme, že o týchto operátoroch zatiaľ vieme len to, že popisujú zmenu vyjadrenia (transformáciu) stavu pri rotácii súradnicovej sústavy. Ich konkrétnejšie vyjadrenie zatiaľ nemáme.

5.1.3 Operátory $\hat{I}^2$, $\hat{I}_+$ a $\hat{I}_-$

Definujeme ich nasledovne.

$$\hat{I}^2=\hat{I}_x^2+\hat{I}_y^2+\hat{I}_z^2\ , \tag{54}$$

$$\hat{I}_+=\hat{I}_x+i\hat{I}_y\ ,\quad \hat{I}_-=\hat{I}_x-i\hat{I}_y\ . \tag{55}$$

Z týchto definícií a zo základných komutačných vzťahov (53) sa dá ľahko odvodiť, že platia aj nasledovné pravidlá (ktoré sme už v inom značení odvodili v minulosti, takže ich len zopakujeme):

$$[\hat{I}_z,\hat{I}_+]=\hat{I}_+\ ,\quad [\hat{I}_z,\hat{I}_-]=-\hat{I}_-\ ,\quad [\hat{I}_+,\hat{I}_-]=2\hat{I}_z \tag{56}$$

$$\left[\hat{I}_x,\hat{I}^2\right]=[\hat{I}_y,\hat{I}^2]=[\hat{I}_z,\hat{I}^2]=0 \tag{57}$$

$$\left[\hat{I}_+,\hat{I}^2\right]=[\hat{I}_-,\hat{I}^2]=0\ . \tag{58}$$

Pozn.: $\hat{I}_\pm$ nie sú hermitovské.

[10] To bol práve dôvod, prečo sme museli uvažovať až 2. rád v ε.

5.2 Vlastné vektory a hodnoty infinitezimálnych rotačných operátorov

Budeme postupovať presne ako v knihe [2], časť 11.3, len s trochu iným značením. Dvojica operátorov $\hat{I}_z$ a $\hat{I}^2$ komutuje, takže sa musia dať nájsť ich spoločné vlastné vektory. Dvojicu príslušných rovníc zapíšeme

$$\hat{I}^2|\Phi_{\eta w}\rangle = \eta|\Phi_{\eta w}\rangle \tag{59}$$

$$\hat{I}_z|\Phi_{\eta w}\rangle = w|\Phi_{\eta w}\rangle \ . \tag{60}$$

Tak vlastné vektory $|\Phi_{\eta w}\rangle$ ako aj vlastné hodnoty η a w sú neznáme. Z definície operátora $\hat{I}^2$ vyplýva [11], že

$$\eta \geq 0 \ . \tag{61}$$

Definujme teraz stavové vektory $|\Phi_{\eta w}\rangle_+$ a $|\Phi_{\eta w}\rangle_-$ nasledovne:

$$|\Phi_{\eta w}\rangle_\pm \equiv \hat{I}_\pm|\Phi_{\eta w}\rangle \ .$$

Skúmajme pôsobenie operátora $\hat{I}^2$ na tieto vektory.

$$\hat{I}^2|\Phi_{\eta w}\rangle_+ = \hat{I}^2\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle_+ = [\hat{I}^2 \text{ a } \hat{I}_+ \text{ komutujú}] = \hat{I}_+\hat{I}^2|\Phi_{\eta w}\rangle_+ = \hat{I}_+\eta|\Phi_{\eta w}\rangle = \eta|\Phi_{\eta w}\rangle_+ \ .$$

Vektor $|\Phi_{\eta w}\rangle_+$ je teda tiež vlastným vektorom pre $\hat{I}^2$, pričom vlastná hodnota je η. Úplne obdobne dostaneme aj

$$\hat{I}^2|\Phi_{\eta w}\rangle_- = \eta|\Phi_{\eta w}\rangle_- \ .$$

Len kúsok zložitejšie je zistiť pôsobenie $\hat{I}_z$ na $|\Phi_{\eta w}\rangle_\pm$:

$$\begin{aligned}\hat{I}_z|\Phi_{\eta w}\rangle_+ &= \hat{I}_z\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle = [\text{treba použiť komutačný vzťah medzi } \hat{I}_z \text{ a } \hat{I}_+] = \\ &= (\hat{I}_+ - \hat{I}_+\hat{I}_z)|\Phi_{\eta w}\rangle = \hat{I}_+|\Phi\rangle - \hat{I}_+ w|\Phi_{\eta w}\rangle = (1+w)\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle \ .\end{aligned}$$

Teda $|\Phi_{\eta w}\rangle_+$ je vlastným vektorom aj pre $\hat{I}_z$, ale s vlastnou hodnotou $1+w$. A obdobne zistíme, že

$$\hat{I}_z|\Phi_{\eta w}\rangle_- = (-1+w)|\Phi_{\eta w}\rangle_- \ .$$

Zhrňme tieto zistenia: ak $|\Phi_{\eta w}\rangle$ je spoločným vlastným vektorom operátorov $\hat{I}^2$ a $\hat{I}_z$, tak stavy $|\Phi_{\eta w}\rangle_\pm \equiv \hat{I}_\pm|\Phi_{\eta w}\rangle_\pm$ sú nimi tiež. Ak si predstavíme množinu všetkých možných (navzájom ortogonálnych) vlastných vektorov $|\Phi_{\eta w}\rangle$, tak tie akože nové vektory $|\Phi_{\eta w}\rangle_\pm$ vlastne ani nebudú nové, ale budú patriť do tejto množiny. A bude platiť

$$\begin{aligned}\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle &= C^{(+)}_{\eta w}|\Phi_{\eta,w+1}\rangle \\ \hat{I}_-|\Phi_{\eta w}\rangle &= C^{(-)}_{\eta w}|\Phi_{\eta,w-1}\rangle \ ,\end{aligned}$$

kde $C^{(+)}_{\eta w}$ a $C^{(-)}_{\eta w}$ sú zatiaľ bližšie neurčené normovacie konštanty. Tieto rovnice ukazujú, že operátory $\hat{I}_\pm$ pôsobia na vlastné vektory $|\Phi_{\eta w}\rangle$ tak, že vyrobený vektor má zvýšenú resp. zníženú vlastnú hodnotu operátora $\hat{I}_z$ a vlastná hodnota operátora $\hat{I}^2$ sa nemení. Preto sa operátory $\hat{I}_\pm$ nazývajú aj *zvyšovací* resp. *znižovací* operátor. Normovacie konštanty určíme nasledovne. Spočítame skalárny súčin vektoru $\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle$ samého so sebou. Využijeme pritom predposledne napísanú rovnicu a ortonormovanosť vektorov. Dostaneme (ak je to nejasné, treba sa pozrieť do Dodatku)

$$\langle\Phi_{\eta w}|\hat{I}_-\hat{I}_+|\Phi_{\eta w}\rangle = |C^{(+)}_{\eta w}|^2 \ . \tag{62}$$

[11] Intuitívne je to zrejmé, ale ak by sme chceli byť úplne poctiví, bolo by to treba dokázať.

Obdobne z druhej rovnice

$$\langle\Phi_{\eta w}|\hat{I}_+\hat{I}_-|\Phi_{\eta w}\rangle = |C^{(-)}_{\eta w}|^2 \ . \tag{63}$$

Z komutačných a iných vzťahov v predošlých častiach sa dajú priamočiaro odvodiť vzťahy

$$\hat{I}_+\hat{I}_- = \hat{I}^2 - \hat{I}_z^2 + \hat{I}_z \ , \tag{64}$$

$$\hat{I}_-\hat{I}_+ = \hat{I}^2 - \hat{I}_z^2 - \hat{I}_z \ . \tag{65}$$

S ich pomocou dostaneme

$$|C^{(+)}_{\eta w}|^2 = \eta - w(w+1) \quad , |C^{(-)}_{\eta w}|^2 = \eta - w(w+1) \ .$$

Z toho vyplývajú ohraničenia

$$\eta \geq w(w+1) \quad \text{a} \quad \eta \geq w(w-1) \quad \forall w \ .$$

Pre dané η je teda w obmedzené zhora aj zdola. Z rovnice pre zvyšovanie to však vyzerá tak, akoby sa postupnými pôsobeniami zvyšovacieho operátora dalo w neobmedzene zvyšovať. Aby to tak naozaj nebolo, musí byť príslušná konštanta $|C^{(+)}_{\eta w}|^2$ nulová. Maximálnu hodnotu w (nad ktorú sa už nedá zvyšovať) označme $w_{\max}$. Potom musí pre isté vopred pevne zvolené η platiť

$$\eta = w_{\max}(w_{\max}+1) \ .$$

(Iba tak zabezpečíme nulovosť konštanty $|C^{(+)}_{\eta, w_{\max}}|^2$.) Obdobne môžme uvažovať aj pre ohraničenie zdola, kde označíme minimálne w ako $w_{\min}$. Preň platí

$$\eta = w_{\min}(w_{\min}-1) \ .$$

Teda pre dané η musí byť splnené

$$\eta = w_{\max}(w_{\max}+1) = w_{\min}(w_{\min}-1) \ .$$

Ak pre dané η nájdeme (čo sa nám povedzme podarí) príslušné $w_{\max}$, tak potom možné hodnoty $w_{\min} \in \{-w_{\max}, w_{\max}+1\}$. Prvá z týchto hodnôt je zrejme tá, ktorú hľadáme. Zhrňme teda, čo sme zistili. Pe dané η existuje $w_{\max}$ také, že

$$\eta = w_{\max}(w_{\max}+1)$$

a možné w sú

$$w = -w_{\max}, w_{\max}+1, \ldots, w_{\max}-1, w_{\max} \ .$$

Počet možných hodnôt w je teda $2w_{\max}+1$. Až teraz zisťujeme zaujímavú vec - že $2w_{\max}+1$ musí byť prirodzené číslo, lebo počet (predpokladáme, že je nenulový) musí taký byť. Preto musí platiť

$$\boxed{2w_{\max} \text{ je nezáporné celé číslo; a zaveďme jednoduchšie značenie } j \text{ miesto } w_{\max} : \ j \equiv w_{\max}.}$$

$$\boxed{\text{Miesto symbolov } w \text{ budeme od teraz používať } m : m = -j, -j+1, \ldots, j} \ . \tag{66}$$

Úvodné rovnice pre vlastné vektory prepíšeme teda do tvaru

$$\hat{I}^2|j,m\rangle = j(j+1)|j,m\rangle \tag{67}$$

$$\hat{I}_z|j,m\rangle = m|j,m\rangle \ , \tag{68}$$

kde sme zaviedli úsporné značenie pre vlastné vektory.

K normovacím konštantám: s využitím identít

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \ , \quad j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$$

dostaneme mimoriadne užitočné vzťahy

$$\boxed{\hat{I}_+|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ |j,m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ |j,m+1\rangle} \tag{69}$$

$$\boxed{\hat{I}_-|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\ |j,m-1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ |j,m-1\rangle} \tag{70}$$

5.3 Súvis rotácií s orbitálnym momentom hybnosti

Uvažujme teraz, že máme nejakú funkciu, ktorá závisí len od zvyčajných polohových vektorov. Zapíšme ju $f(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \equiv f(\bar{r})$. Napr. by to mohla byť vlnová funkcia N-elektrónovej sústavy, ktorá by popisovala rozloženie elektrónov len v orbitálnom priestore. Ako sa takáto funkcia zmení pri rotácii súradnicovej sústavy? (Teda máme na mysli pasívnu rotáciu[12].) Budeme uvažovať rotáciu o uhol α okolo nejakej osi danej jednotkovým vektorom $\vec{\xi}$; občas to zapíšeme aj pomocou $\vec{\alpha} = \alpha\vec{\xi}$. Kedže však pasívne rotácie sa asi ťažšie predstavia, pomocne si najprv predstavíme aktívnu rotáciu o uhol $-\alpha$ okolo tej istej osi. To má na funkciu ten istý efekt ako aktívna o uhol α. Pri tej pomocnej aktívnej rotácii budeme postupovať úplne tak isto, ako sme došli k odvodeniu transformačného vzťahu (23), len to zovšeobecníme na funkciu viacerých polohových vektorov. Transformovaná a pôvodná funkcia spĺňajú vzťah (uvažujeme len malé uhly, mali by sme písať aj členy ako $O(\alpha^2)$, ale pre stručnosť vynecháme)

$$f'(\bar{r}) = f(\bar{r} - \delta\bar{r}) = f(\bar{r}) - \delta\bar{r} \cdot \bar{\nabla} f(\bar{r}) = \left(1 - \sum_{n=1}^{N} \delta\vec{r}_n \cdot \vec{\nabla}_n\right) f(\bar{r})$$

Podľa (22) pre aktívnu rotáciu o uhol $\vec{\alpha}$ platí

$$\delta\vec{r}_n = \vec{r}_n \times \delta\vec{\alpha} \ .$$

Preto

$$f'(\bar{r}) = \underbrace{\left[1 - \sum_{n=1}^{N} (\vec{r}_n \times \delta\vec{\alpha}) \cdot \vec{\nabla}_n\right] f(\bar{r}) = \left[1 - \sum_{n=1}^{N} \delta\vec{\alpha} \cdot (\vec{r}_n \times \vec{\nabla}_n)\right]}_{\mathrm{Rot}^{\,\mathrm{orb}}(\delta\alpha, \vec{\xi})} f(\bar{r})$$

No a kedže nám ide o pasívnu transformáciu, zmeníme znamienko uhla podľa (50) a zapíšeme

$$\hat{R}^{\mathrm{orb}}(\delta\alpha, \vec{\xi}) = 1 + \delta\vec{\alpha} \cdot \sum_{n=1}^{N} (\vec{r}_n \times \vec{\nabla}_n) \ , \ \text{pre } \delta\alpha \to 0 \ .$$

Infinitezimálny rotačný operátor pre orbitálny priestor N polohových vektorov potom podľa definície (45) bude

$$\boxed{\hat{I}^{\mathrm{orb}}_{\vec{\xi}} = -i\vec{\xi} \cdot \sum_{n=1}^{N} (\vec{r}_n \times \vec{\nabla}_n)} \ . \tag{71}$$

Tento vzťah je špeciálnym prípadom všeobecného vyjadrenia (49). Infinitezimálny rotačný operátor (71), ako to aj vidno z jeho vyjadrenia, pôsobí len na funkcie závislé od zvyčajných priestorových premenných; ak by nejaká funkcia závisela od spinových súradníc, tak operátor (71) s ňou nič nespraví. Napr. $\hat{I}^{\mathrm{orb}}_{\vec{\xi}} \phi(\vec{r})\chi(\sigma) = \chi(\sigma)\hat{I}^{\mathrm{orb}}_{\vec{\xi}} \phi(\vec{r})$.

A teraz najdôležitejšia vec - vidíme, že infinitezimálny rotačný operátor (71) je úmerný operátoru orbitálneho momentu hybnosti N-časticovej sústavy. Príslušné vzťahy pre súvis medzi rotáciami a orbitálnym MH teda zapíšeme (s použitím zložkového tvaru)

$$\boxed{\hat{L}_x = \hbar\hat{I}^{\mathrm{orb}}_x \ , \quad \hat{L}_y = \hbar\hat{I}^{\mathrm{orb}}_y \ , \quad \hat{L}_z = \hbar\hat{I}^{\mathrm{orb}}_z \ .} \tag{72}$$

[12] Načo sa vlastne používajú pasívne rotácie, keď všetko sa dá vybaviť aj aktívnymi, a navyše sa aktívne zvyčajne ľahšie predstavia? Je to viac-menej vec elegancie; tým, že fyzikálnu sústavu nehýbeme a točíme len súradnicovou sústavou, nejak výraznejšie demonštrujeme to, že sa nám jedná len o skúmanie, ako sa vlnové funkcie alebo stavové vektory alebo operátory menia či nemenia, keď na ne pozeráme z rôznych súradnicových sústav. Potom môžme napr. povedať, že hamiltonián atómu je invariantný (nemení svoju formu) vzhľadom na ľubovoľnú rotáciu súradnicovej sústavy. Keď sa teda zaujímame napr. o invariantnosť operátorov voči rotáciám, čo je matematická transformácia, je prirodzenejšie uvažovať pasívnu transformáciu.

Orbitálny MH sme už prebrali dva razy, teda aspoň prípad jednej častice. Prvý raz sme použili tradičné riešenie singulárnej diferenciálnej rovnice, druhý raz sme analyzovali rotácie tak, ako v tejto podčasti, až nato, že vtedy sme uvažovali len aktívne rotácie (ale to je dosť nepodstatný rozdiel). Pri tom tradičnom spôsobe riešenia sme vtedy našli veľmi konkrétne vyjadrenia pre spoločné vlastné funkcie operátorov orbitálneho MH, a to guľové funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. V súčasnej podkapitole sme v tej všeobecnej analýze *rotácií* ani nemuseli uvažovať konkrétne vyjadrenie funkcií a zaobišli sme sa s abstraktnými vyjadreniami typu $|j, m\rangle$. Teraz už vidíme, že tieto stavy napr. v prípade jednej častice majú konkrétne reprezentácie v tvare guľových funkcií $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Len treba písať[13] index l miesto indexu j. Z tej všeobecnej analýzy rotácií teda treba zobrať prípady celočíselných j, podľa zaužívanej konvencie ich značiť l a máme popis pre orbitálny MH.

5.4 Súvis rotácií so spinovým momentom hybnosti

Tu je situácia trochu iná, pretože operátor spinového MH sa nedá definovať na základe klasickej analógie. Spinové operátory a vlastné stavy sme v jednej z predošlých častí zkonštruovali na základe znalosti experimentálnych údajov a, čo je veľmi dôležité, ešte sme *postulovali* komutačné vzťahy (25). Vôbec sme inak neskúmali, či spin má alebo nemá nejaký súvis s rotáciami. Najnovšia všeobecná analýza rotácií však v kombinácii s experimentálnymi údajmi ponúka omnoho elegantnejší náhľad.

Skúsme vo vyjadreniach (69,70) položiť $j = 1/2$. Potom so znalosťou rozsahov čísiel m podľa (66) rýchlo uvidíme, že príslušné vlastné vektory operátora infinitezimálnych rotácií pre toto j sú len dva, a to

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \;, \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \;. \tag{73}$$

Zodpovedajúce vlastné hodnoty infinitezimálneho rotačného operátora pre os z sú zasa, podľa (68), ± 1. To je presne to, čo poznáme z experimentálnych údajov o spine elektrónu! Ten má tiež len dva ortogonálne vlastné vektory a dve vlastné hodnoty, a keď ich vyjadríme v jednotkách $\hbar/2$, tak sú to práve ± 1.

5.4.1 Maticová reprezentácia infinitezimálnych rotačných operátorov pre $j = 1/2$

Zoberme teraz stav $|j, m'\rangle$ a spravme jeho skalárny súčin s oboma stranami rovnice (68). Dostaneme rovnice tvaru $\langle j, m'|\hat{I}_z|j, m\rangle = m\langle j, m'|j, m\rangle$, čiže $\langle j, m'|\hat{I}_z|j, m\rangle = m\delta_{m'm}$. Na pravej strane vidíme jednoduché čísla, ktoré môžme zapísať do matice. (Maticu 2x2 sme už kedysi zostavovali aj pre spin.) Pre $j = 1/2$, kedže možné hodnoty m sú len $\pm 1/2$, môžme tieto čísla usporiadať do 2x2 matice, ktorú označíme $I_z^{(1/2)}$. Len sa nesmieme zabudnúť dohodnúť, v akom poradí budeme do matice jednotlivé prvky zapisovať. Štandardom je poradie zodpovedajúce poradiu vektorov ako v zápise (73). $I_z^{(1/2)}$, čo je vlastne maticová reprezentácia operátora $\hat{I}_z$ v báze vektorov (73), potom bude

$$I_z^{(1/2)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \;. \tag{74}$$

S využitím vzťahov (69) a (70) dostaneme maticové reprezentácie aj pre zvyšovací a znižovací operátor:

$$I_+^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \;, \quad I_-^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;. \tag{75}$$

[13] Ku značeniu: index j sa inak používa pre celkový moment hybnosti elektrónu, index l pre orbitálny a index s pre spinový. A ak sa jedná o sústavu častíc, tak sa použijú veľké písmená.

A potom zo vzťahov (55) aj reprezentácie pre hermitovské operátory $\hat{I}_x$ a $\hat{I}_y$:

$$I_x^{(1/2)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;, \qquad I_y^{(1/2)} = \frac{1}{2i}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \;. \tag{76}$$

Matice podobné na $I_x^{(1/2)}$, $I_y^{(1/2)}$ a $I_z^{(1/2)}$ sme však už mali, keď sme kedysi uvažovali spin. Naozaj, až na chýbajúci faktor $\hbar$ sú také isté, ako maticové reprezentácie operátorov spinu 1/2. Alebo, keby tam nebol ten spoločný faktor 1/2, boli by to Pauliho matice.

5.4.2 Fyzikálna interpretácia

Tie rôzne sady vlastných vektorov $|j, m\rangle$ (každé j definuje inú sadu) získané čisto matematicky analýzou rotácií môžu teda mať aj pre polocelé j *fyzikálnu interpretáciu*. Špeciálne prípad $j = 1/2$ poskytuje presne tú *matematickú* štruktúru, akú potrebujeme pre spin elektrónu. Môžme to povedať aj tak, že našli sme akési matematické štruktúry[14], a hľadáme, či sa v prírode nachádzajú objekty, na popis ktorých by sa tie štruktúry dali použiť. Keď sa prehrabeme v experimentálnych dátach, tak víťazoslávne zistíme: áno, *prípad $j = 1/2$ má aj fyzikálnu realizáciu, a tou je spin elektrónu.* Operátor spinového MH elektrónu sa teda elegantnejšie definuje ako prípad $j = 1/2$ z analýzy rotácií[15].

Dôležité je si aj uvedomiť, že sada $2j + 1$ vektorov pre isté j tvorí úplný podpriestor Hilbertovho priestoru v zmysle, že akýmkoľvek pôsobením zvyšovacieho alebo znižovacieho operátora alebo aj $\hat{I}_x$, $\hat{I}^2$ atď. už žiaden zásadne nový vektor nevyrobíme; len taký, čo už do tej sady patrí alebo sa dá zapísať ako lineárna kombinácia vektorov tej sady. Pre spin 1/2 do tej sady patria len dva vektory (73).

Zhrňme nakoniec súvis medzi rotáciami a spinovým MH *jedného*[16] elektrónu do matematického vyjadrenia. Zapíšeme to pomocou maticovej reprezentácie operátorov:

$$\boxed{s_x = \hbar I_x^{(1/2)} \;, \quad s_y = \hbar I_y^{(1/2)} \;, \quad s_z = \hbar I_z^{(1/2)}} \;. \tag{77}$$

A Dodatok

Kedže ešte možno nie sme celkom zoznámení s operáciami pomocou Diracovho $\langle \text{bra}|$ a $|\text{ket}\rangle$ značenia, čosi si aspoň tu pod čiarou stručne k tomu napíšeme, aby sme vedeli, ako vyjadrenia pre skalárne súčiny (62) a (63) dostaneme. (Kto to vie, nemusí toto čítať.) Majme nejaký operátor $\hat{A}$ a vektor (stav) $|\Phi\rangle$. Výsledkom pôsobenia $\hat{A}$ na $|\Phi\rangle$ bude nejaký nový vektor, označíme ho $|\Psi\rangle$. Teda

$$|\Psi\rangle \equiv \hat{A}|\Phi\rangle \;.$$

[14] Odbornejšie sa nazývajú ireducibilnými reprezentáciami úplnej rotačnej grupy.

[15] Kedysi ste na Modernej fyzike už robili podobnú analýzu pre orbitálny MH a zistili ste, že sú aj tie polocelé hodnoty. Tu sme to spravili v kontexte všeobecných rotácií. Treba si ešte uvedomiť nasledovnú logiku: ak nejaké operátory sú operátormi orbitálneho MH, tak spĺňajú tie známe komutačné vzťahy. Opačné tvrdenie však neplatí. Čiže, ak nejaké operátory spĺňajú tie komutačné vzťahy, tak to ešte nemusia byť operátory orbitálneho MH. Na Modernej fyzike ste kvôli zrýchleniu výkladu spravili trochu logický skok, že ste najprv začali s orbitálnym MH, čo je menej všeobecná kategória, a preskočili ste ku komutačným vzťahom, čím ste do množiny uvažovaných matematických štruktúr zahrnuli aj čosi viac ako len orbitálne operátory.

[16] Dal by sa odvodiť aj všeobecný vzťah zahŕňajúci ľubovoľný počet elektrónov a dokonca aj vzťah zahŕňajúci nielen zvlášť spinový alebo zvlášť orbitálny MH. Ten všeobecný vzťah pre súvis infinitezimálnych rotácií s celkovým MH by vyzeral presne ako už uvedené vzťahy, teda napr. $\hat{J}_z = \hbar \hat{I}_z$, kde $\hat{J}_z$ je operátor *celkového* MH sústavy. Tento celkový MH sa vyjadrí $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. Ale tieto veci už teraz nestihnem(e) prebrať. Hádam sa k nim dostaneme neskôr.

Úlohou je spočítať skalárny súčin vektora $|\Psi\rangle$ samého so sebou, čiže určiť druhú mocninu jeho normy (lebo tak je norma definovaná). Kedže skalárne súčiny vieme už počítať v súradnicovej reprezentácii, najprv si to zapíšeme v nej. Súradnicovú reprezentáciu vektora $|\Psi\rangle$ označíme funkciou $\Psi(X)$, kde X je súhrn všetkých súradníc, či už priestorových alebo spinových, od ktorých môže tá funkcia závisieť. Máme teda vypočítať

$$\int dX \ \Psi^*(X)\Psi(X) = [\text{stručný zápis Diracovým formalizmom}] = \langle\Psi|\Psi\rangle \ ,$$

kde to integrovanie je zčasti symbolické. (T.j. v prípade spinových súradníc ho chápeme ako sumovanie cez dve hodnoty spinovej súradnice.) Majme ďalej nejakú úplnú ortonormovanú sústavu vektorov $|\psi_i\rangle$, čiže platí $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$. Vyjadríme si stav $|\Psi\rangle$ ako lineárnu kombináciu týchto (tzv. bázových) vektorov:

$$|\Psi\rangle \equiv \hat{A}|\Phi\rangle = \sum_i c_i|\psi_i\rangle \ .$$

Nemôže nás potom prekvapiť, že v súradnicovej reprezentácii to bude reprezentované lineárnou kombináciou

$$\Psi(X) = \sum_i c_i\psi_i(X) \ ,$$

kde $\psi_i(X)$ sú súradnicové reprezentácie vektorov $|\psi_i\rangle$. V súradnicovej reprezentácii však skalárny súčin spočítať vieme:

$$\int dX \ \Psi^*(X)\Psi(X) = \sum_{ij} c_i^* c_j \int dX \ \psi_i^*(X)\psi_j(X) = \sum_i |c_i|^2 \ .$$

Motivovaní tým, že $\hat{A}|\Phi\rangle = \sum_i c_i|\psi_i\rangle$, si teraz zadefinujme nasledovný zvláštne vyzerajúci objekt:

$$\langle\Phi|\hat{A}^\dagger \equiv \sum_i c_i^*\langle\psi_i| \ ,$$

kde $\hat{A}^\dagger$ je operátor hermitovsky združený ku $\hat{A}$. Je to veľmi formálne vyzerajúca definícia, ale teraz sa s ňou uspokojme. Spravme formálne pripísanie zľava tohto objektu k vektoru $|\Psi\rangle = \hat{A}|\Phi\rangle$, ktorý už tiež máme vyjadrený ako lineárnu kombináciu. Dostaneme (sumačné indexy dvoch nezávislých súm musíme značiť rôzne)

$$\langle\Phi|\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle \equiv \left(\sum_i c_i^*\langle\psi_i|\right)\left(\sum_j c_j|\psi_j\rangle\right) = \sum_i\sum_j c_i^* c_j\langle\psi_i|\psi_j\rangle = [\text{ortonormovanosť}] = \sum_i |c_i|^2 \ .$$

Čiže

$$\langle\Phi|\hat{A}^\dagger A|\Phi\rangle = \sum_i |c_i|^2 \ .$$

To je ale hodnota, ktorú sme vyššie už dostali ako hľadaný skalárny súčin. Teraz teda vidíme, že ho môžme zapisovať nielen v súradnicovej reprezentácii, ale že má aj kompaktné vyjadrenie $\langle\Phi|\hat{A}^\dagger A|\Phi\rangle$. Teda sme ukázali, že ak stav $|\Psi\rangle = \hat{A}|\Phi\rangle$, tak skalárny súčin tohto stavu so sebou samým sa dá zapísať ako

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Phi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\Phi\rangle \ .$$

Viac a oveľa lepšie o matematickom formalizme QM a o teórii reprezentácií sa dá naučiť napr. z knihy [2].

Referencie

[1] L.D. Landau, E.M. Lifšic: *Mechanika*, Fizmatlit, 5. vydanie, Moskva 2001; (sú aj vydania v iných jazykoch, napr. v anglickom a nemeckom).

[2] J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý: *Úvod do kvantovej mechaniky*, Alfa, 2. vydanie, Bratislava 1983.

[3] V. Heine: *Group theory in quantum mechanics*, Dover 1993; prvá tlač v Pergamon Press, New York 1960.