Kvantni togi rotator

Imejmo sedaj točkasta delca z maso m_1 in m_2 na konstantni razdalji R. Zamislimo si lahko, da delca ločuje toga prečka. Delca se vrtita okoli skupnega težišča. Vztrajnostni moment sistema izračunamo kot vsoto vztrajnostnih momentov obeh delcev

$$\mathrm{I} = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

r_1 in $r_2 = R - r_1$ sta razdalji točkastih delcev do težišča sistema. Iz ravnovesja navorov glede na težišče velja, da je $m_1 r_1 = m_2 r_2$. Za vztrajnostni moment tako dobimo

$$\mathrm{I} = m_1 \left(\frac{m_2 R}{m_1 + m_2}\right)^2 + m_2 \left(\frac{m_1 R}{m_1 + m_2}\right)^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R^2 = \mu R^2$$

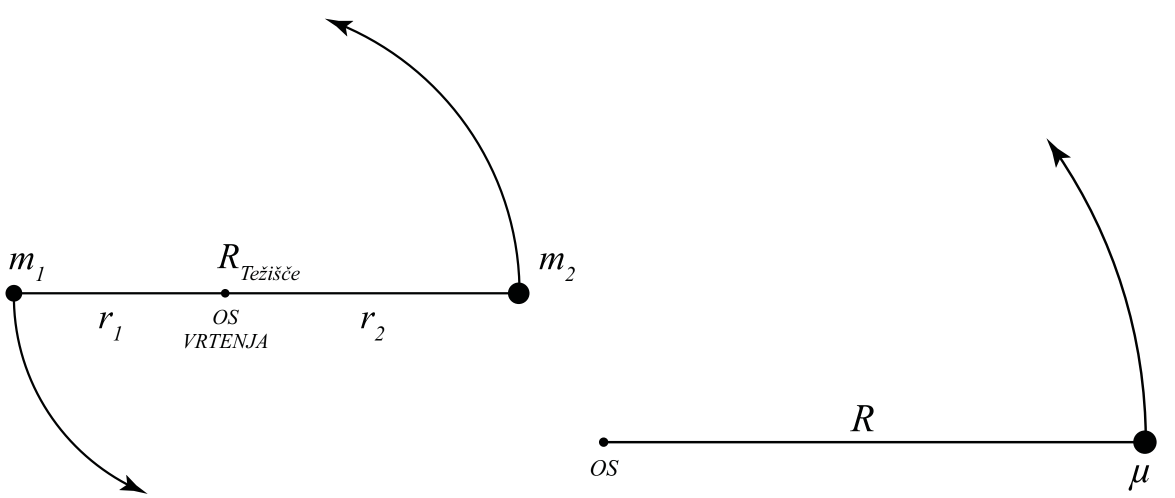
μ je reducirana masa delcev m_1 in m_2. Vidimo, da je kroženje dveh delcev okoli skupnega težišča enakovredno kroženju delca z reducirano maso μ na razdalji R okoli osi. Če se delec prosto vrti v ravnini, in je koordinatna os z pravokotna na to ravnino, potem je energija pri kroženju enaka kar samo kinetični energiji zaradi vrtenja

$$T = \frac{L_z^2}{2I}$$

Če pa se delec prosto vrti v prostoru je le enaka

$$T = \frac{L^2}{2I}$$

Vrtilna količina ima v klasični mehaniki lahko kakršnokoli pozitivno vrednost, tako da ima delec lahko tudi kakršnokoli kinetično energije, če se le prečka ne deformira. V vsakem času poznamo vrtilno količine in kot zasuka pri kroženju.



Slika 1: Kroženje dveh točkastih mas okoli skupnega težišča je enakovredno kroženju delca z reducirano maso.

V kvantni mehaniki opisani sistem imenujemo rotator. Primer takšnega sistema so vse dvoatomne molekule, kjer atoma ne nihata drug proti drugem. Sistem opišemo z rešitvijo Schrödingerjeve enačbe

$$\hat{\mathrm{H}}\psi(\vec{\mathrm{r}}) = \mathrm{E}\psi(\vec{\mathrm{r}})$$

Ker se ukvarjamo s kroženjem okoli točke, je primerno, da uporabimo krogelne koordinate. Hamiltonov operator v teh koordinata zapišemo kot

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\left(r^2\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\right) + \frac{1}{r^2 sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(sin\vartheta\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) + V$$

Če je rotator prost, se pravi, če ni zunanjih sil, potem je potencial enak nič. Delec z reducirano maso μ kroži na konstantni razdalji, torej valovna funkcija ni odvisna od koordinate r, se pravi, da je odvod $\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{r}}$ enak nič, r pa je kar enak razdalji R, na kateri kroži delec. Za začetek si poglejmo še kroženje delca v ravnini xy, takrat je tudi odvod $\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}$ enak nič, ϑ pa je enak 90°. Hamiltonov operator se pri ravninskem gibanju poenostavi na

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{R^2 sin^2 90°}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = \frac{\hat{\mathrm{L}}_z{}^2}{2I}$$

Hamiltonov operator je sorazmeren operatorju komponente vrtilne količine v smeri osi z, tako da z njim komutira in ima tudi iste lastne funkcije. Velja

$$\hat{\mathrm{L}}_z\psi_m = \mathrm{m}\hbar\psi_m, \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, m \in \mathbb{Z}$$

Izračunajmo sedaj še

$$\hat{\mathrm{H}}\psi_m = \frac{\hat{\mathrm{L}}_z{}^2}{2I}\psi_m = \frac{\mathrm{m}^2\hbar^2}{2I}\psi_m$$

Vidimo, da so omenjene funkcije tudi lastne funkcije Hamiltonovega operatorja, lastne energije pa so kar enake

$$E_m = \frac{\mathrm{m}^2\hbar^2}{2I}$$

Sedaj si poglejmo še splošno vrtenje, v tem primeru je samo odvod po razdalji enak nič ($\frac{\partial\psi}{\partial \mathrm{r}} = 0$), koordinata, na kateri kroži delec, je kar enaka razdalji R. Hamiltonov operator za splošno kroženje je

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{R^2 sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{R^2 sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = \frac{\widehat{\mathrm{L}^2}}{2I}$$

Hamiltonov operator je sorazmeren operatorju kvadrata vrtilne količine, tako da z njim komutira in ima tudi iste lastne funkcije. Velja

$$\hat{\mathrm{L}}^2 \mathrm{Y}_{lm} = l(l+1)\hbar^2 \mathrm{Y}_{lm}, l \in \{0,1,2,3,\dots\}, |m| \leq l$$

Izračunajmo sedaj še

$$\hat{\mathrm{H}}\mathrm{Y}_{lm} = \frac{\hat{\mathrm{L}}^2}{2I}\mathrm{Y}_{lm} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\mathrm{Y}_{lm}$$

Vidimo, da so krogelne funkcije lastne funkcije Hamiltonovega operatorja, energija pa je odvisna le od orbitalnega kvantnega števila in ima degeneracijo $2l+1$. Kvantni rotator ima diskreten energijski spekter, odvisen le od kvantnega števila l, ne pa od kvantnega števila m. Pri vrtenju imamo lahko stanje z energijo 0, to pomeni, da je stanje brez vrtilne količine, delec se ne vrti. Delec se še vedno translacijsko giblje, kjer imamo nedoločenost, ki ustreza Heisenbergovi neenakosti.