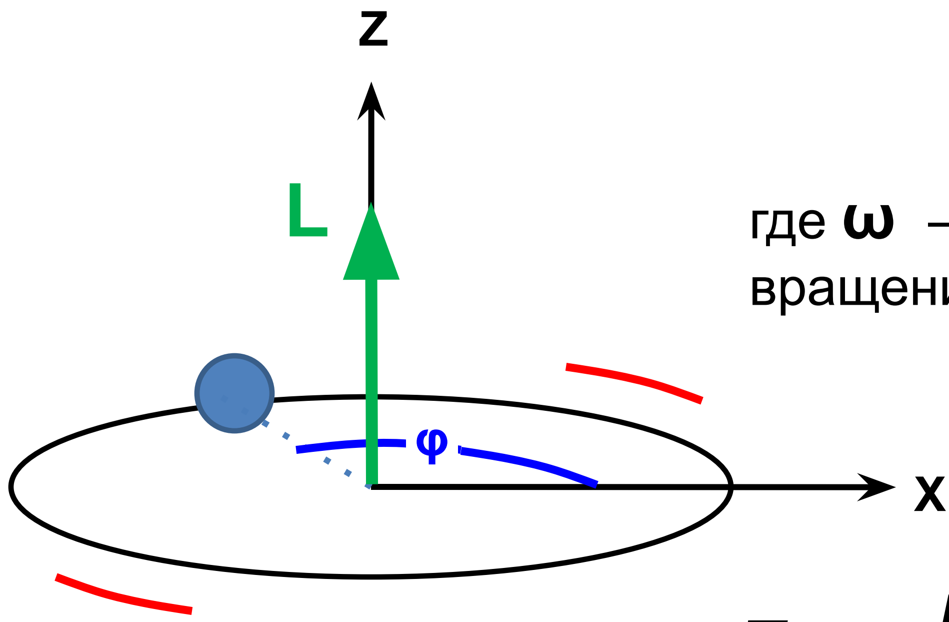
Плоский ротатор



$$\phi(t) = \omega \cdot t$$

где **ω** — **угловая скорость** (частота вращения), выраженная в радианах/с.

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m\omega^2 r^2}{2} = \frac{|L|^2}{2I}$$

$I = mr^2$ — **момент инерции** (***число***)

$\overline{L} = \overline{r} \times m\overline{v}$ — **момент импульса** (***псевдовектор***)

$L_z = \pm |L|$ — **проекция вектора момента на ось Z** (***число***)

Квантовомеханическое описание

Задача: найти все стационарные состояния ротатора; для каждого состояния установить вид волновой функции и допустимые значения наблюдаемых

$$\Phi(\varphi, t) = ??? \qquad E = ??? \qquad L = ???$$

$$\Phi(\phi, t) = D_1\psi_1 + D_2\psi_2 + \ldots + D_r\psi_r$$

Стационарные волновые функции

(собственные функции оператора Гамильтона)

$$\psi(\phi, t) = \psi(\phi)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(\phi)\, e^{-i\omega t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\cdot\psi(x)$$

Поступательное движение

$$\psi(x) = A\cdot e^{ikx} + B\cdot e^{-ikx}$$

$$k = \frac{|P_x|}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{d^2\psi(\varphi)}{d\varphi^2} = E\cdot\psi(\varphi)$$

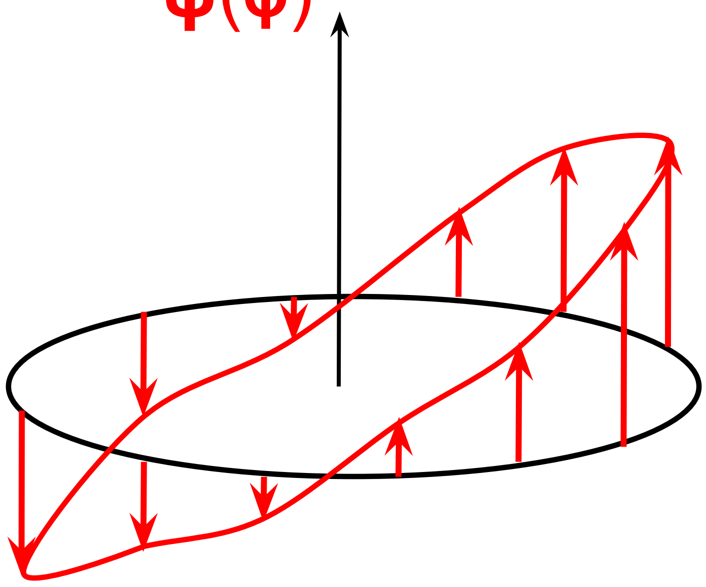
Вращательное движение

$$\psi(\varphi) = A\cdot e^{im\varphi} + B\cdot e^{-im\varphi}$$

$$m = \frac{|L_z|}{\hbar}$$

m **— вращательное квантовое число**

Граничные условия



$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

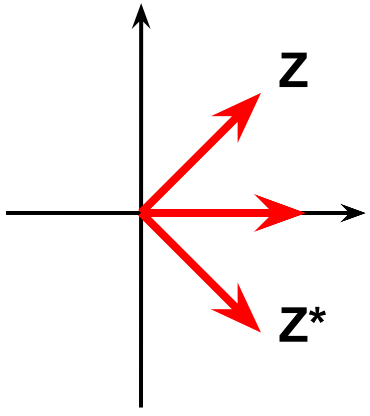
(волновая функция должна воспроизводиться после каждого полного оборота)

$$\psi(\phi) = Ae^{im\phi} + Be^{-im\phi}$$

$$\psi(\phi + 2\pi) = Ae^{im(\phi + 2\pi)} + Be^{-im(\phi + 2\pi)}$$

$$=$$

$$= Ae^{im\phi} \cdot e^{im2\pi} + Be^{-im\phi} \cdot e^{-im2\pi}$$



$$e^{im2\pi} = e^{-im2\pi} = 1 \Longrightarrow m = 0, 1, 2, \ldots$$

Наблюдаемые

$$|\mathrm{L}| = m \cdot \square = 0,\ \square,\ 2\square,\ 3\square, \ldots$$

$$L_z = \pm m \cdot \square = 0,\ \pm\square,\ \pm 2\square,\ \pm 3\square,\ \ldots$$

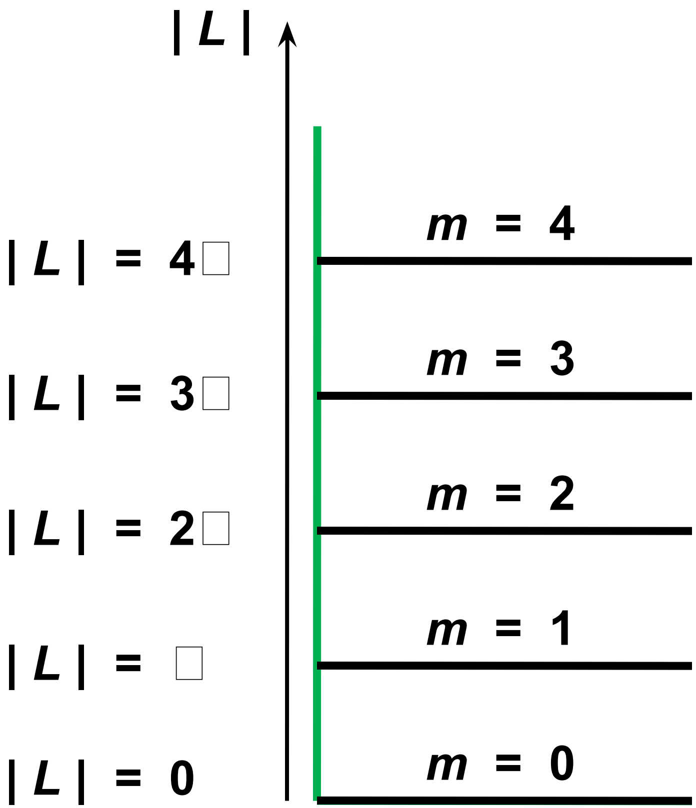
$$E = |\mathrm{L}|^2 / 2I = b \cdot m^2 = 0,\ b,\ 4b,\ 9b, \ldots$$

($b = \square^2 / 2I$ — *вращательная постоянная*)

Вывод: для ротатора (как и для частицы в ящике) стационарными являются не любые состояния, а только некоторые, выделенные в отношении значений энергии и момента импульса.

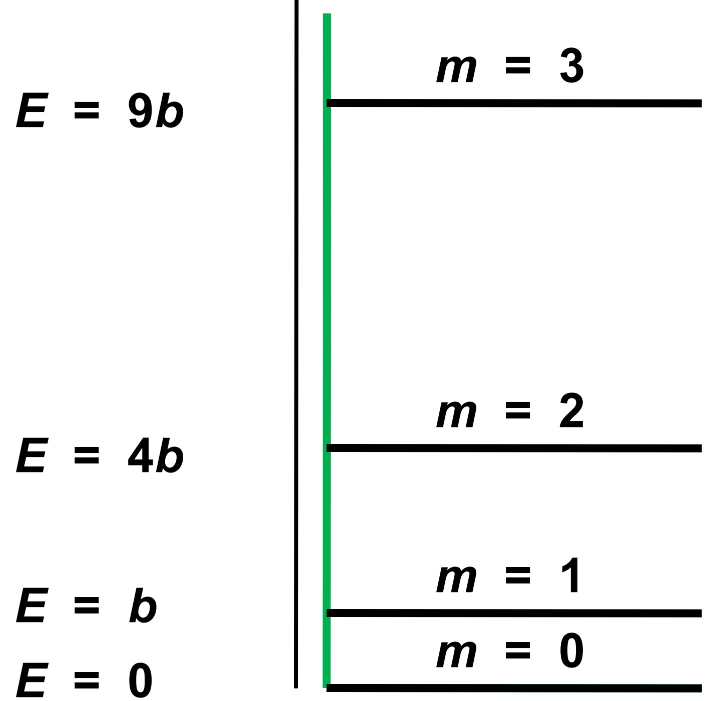
Такие состояния образуют дискретное множество и их можно пронумеровать с помощью *вращательного квантового числа* : $m = 0, 1, 2, \ldots$

Импульсная диаграмма



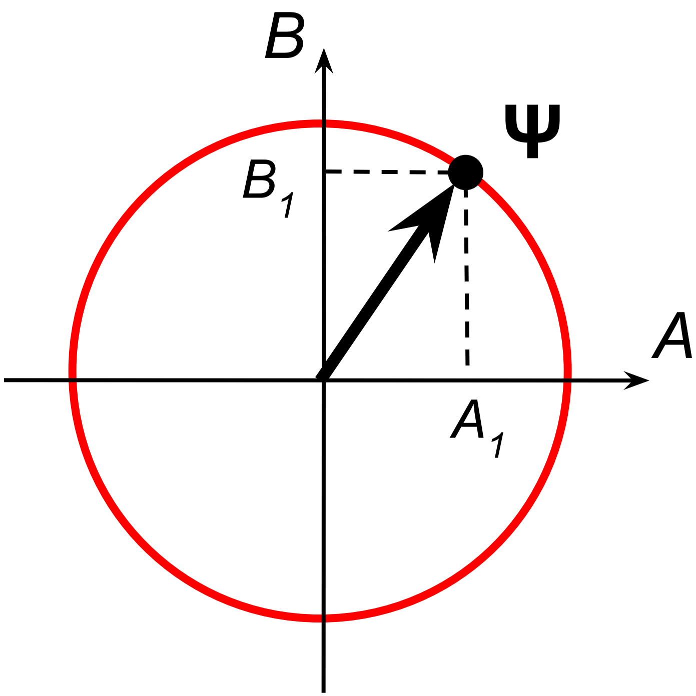
Энергетическая диаграмма

$b = □^2 / 2I$



Волновые функции

$$\Psi(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi} + B \cdot e^{-im\varphi} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots)$$



На коэффициенты A и B ограничений нет, поэтому каждому разрешенному уровню энергии соответствует двумерное пространство состояний

(окружность $A^2 + B^2 = 1$)

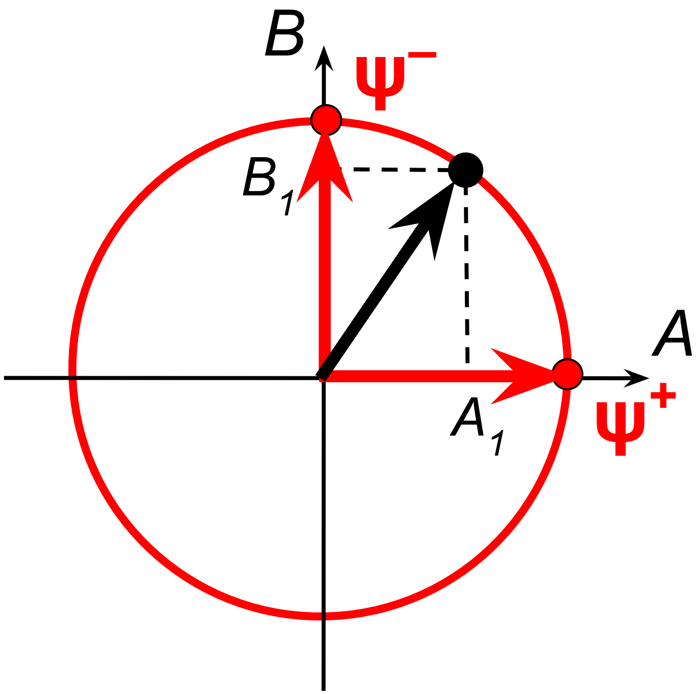
Все эти состояния имеют одинаковые значения энергии и модуля вектора момента

$E = \text{const}$ и $|L| = \text{const}$

но различаются по величинам коэффциентов A и B

Это пространство удобно описывать, выделяя в нем двумерный базисный набор:

$$\psi(\varphi) = C_1 \cdot \psi^+ + C_2 \cdot \psi^-$$



$$\psi^+ = e^{im\varphi}$$

$$\psi^- = e^{-im\varphi}$$

$$\psi(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi} + B \cdot e^{-im\varphi}$$

Базисные состояния

Эти базисные состояния отличаются тем, что для них точно известно значение одной из наблюдаемых — проекции L_z

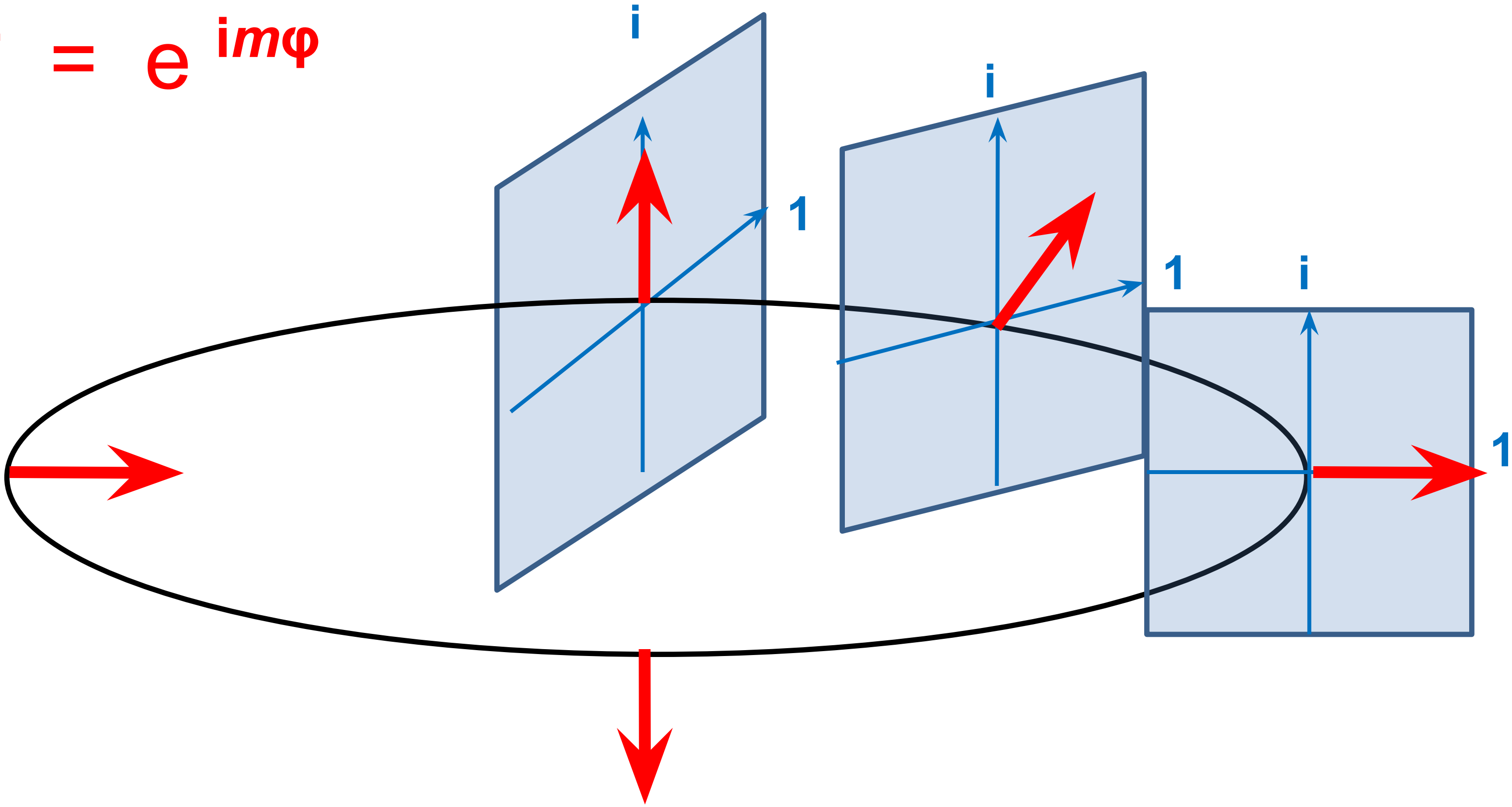
$$\psi^{+} = e^{im\varphi} \quad (L_z = +|L|)$$

(частица движется равномерно против часовой стрелки)

$$\psi^{-} = e^{-im\varphi} \quad (L_z = -|L|)$$

(частица движется равномерно по часовой стрелке)

$$\psi^{+} = e^{\,\mathrm{i}m\varphi}$$

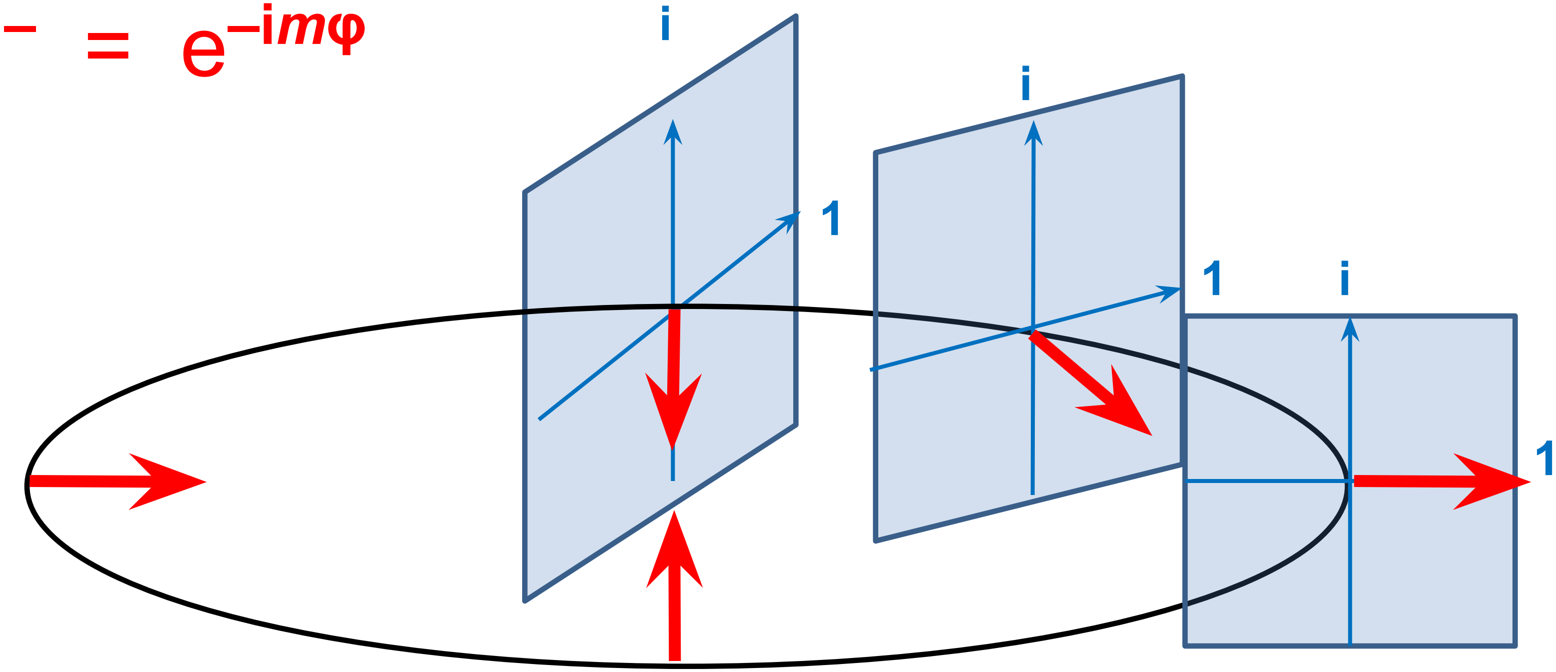


Конец стрелки описывает левую спираль вокруг траектории движения (число полных оборотов равно квантовому числу *m*)

$$|\,\psi^{+}\,|^{2} = \mathrm{const} = \frac{1}{2\pi}$$

(движение равномерное и строго направленое)

$\psi^{-} = e^{-im\varphi}$



Конец стрелки описывает правую спираль вокруг траектории движения (число полных оборотов равно квантовому числу *m*)

$| \psi^{-} |^2 = \text{const} = \dfrac{1}{2\pi}$ **(движение равномерное и строго направленное)**

Другой базис

$(A = 1;\ B = 0)$ $\quad \psi^{+} = e^{im\varphi}$

$(A = 0;\ B = 1)$ $\quad \psi^{-} = e^{-im\varphi}$

$(A = 1;\ B = 1)$ $\quad \psi' = e^{im\varphi} + e^{-im\varphi}$

$(A = 1;\ B = -1)$ $\quad \psi'' = e^{im\varphi} - e^{-im\varphi}$

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i \cdot \sin\theta$$

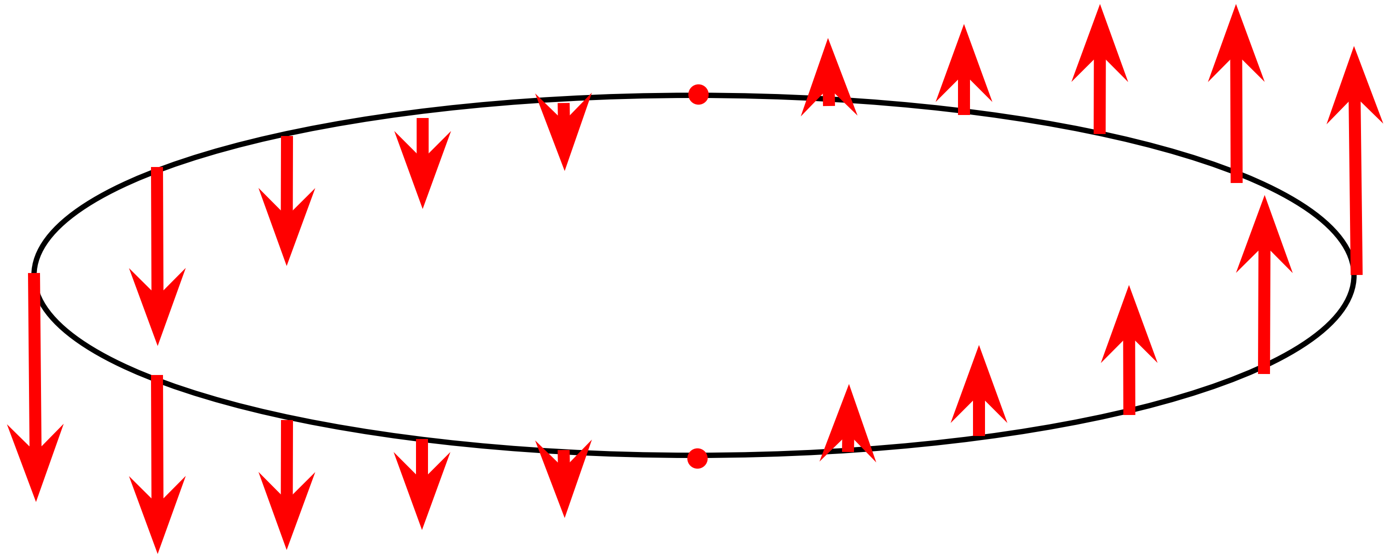
$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i \cdot \sin\theta$$

$$e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos\theta$$

$$\psi' = \cos(m\varphi)$$

$$\psi'' = \sin(m\varphi)$$

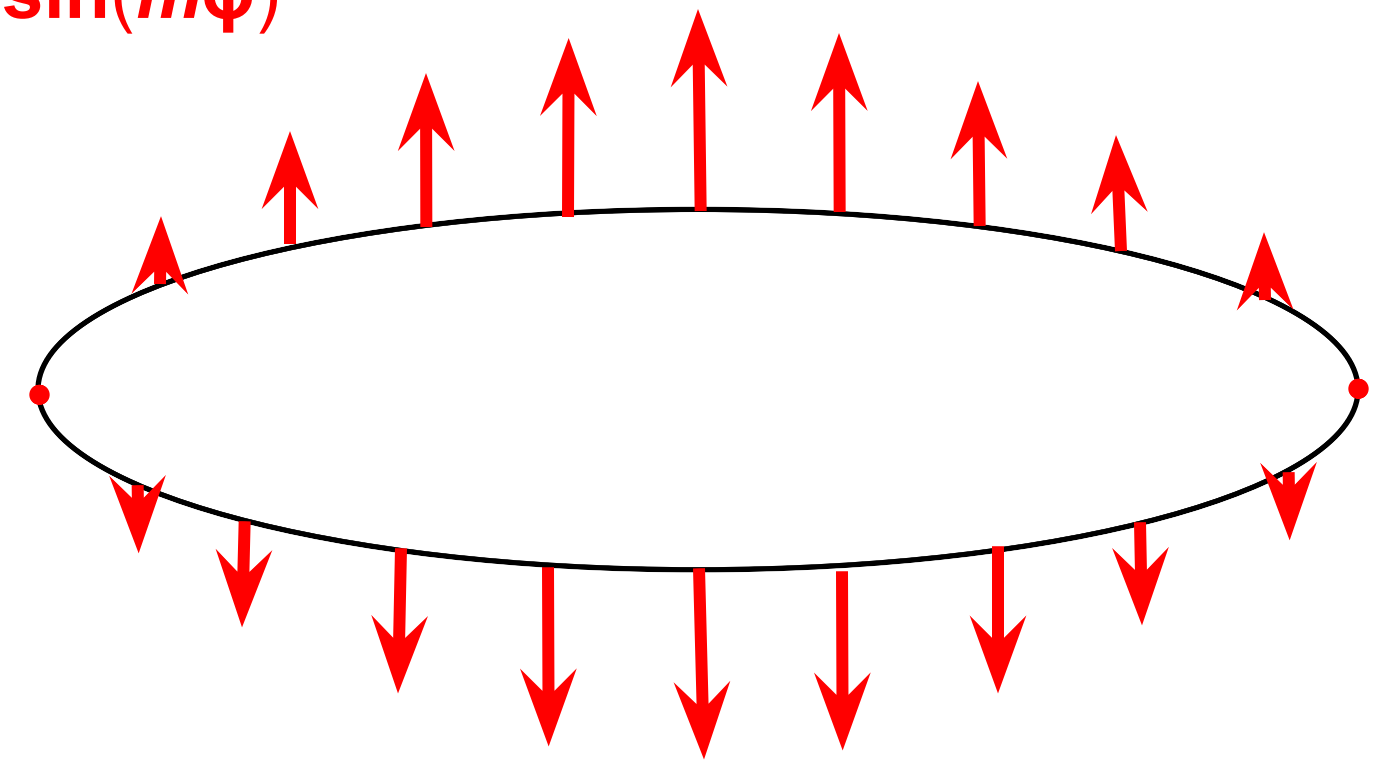
$\boldsymbol{\psi' = \cos(m\varphi)}$



Конец стрелки описывает косинусоиду (число полных волн равно квантовому числу *m*)

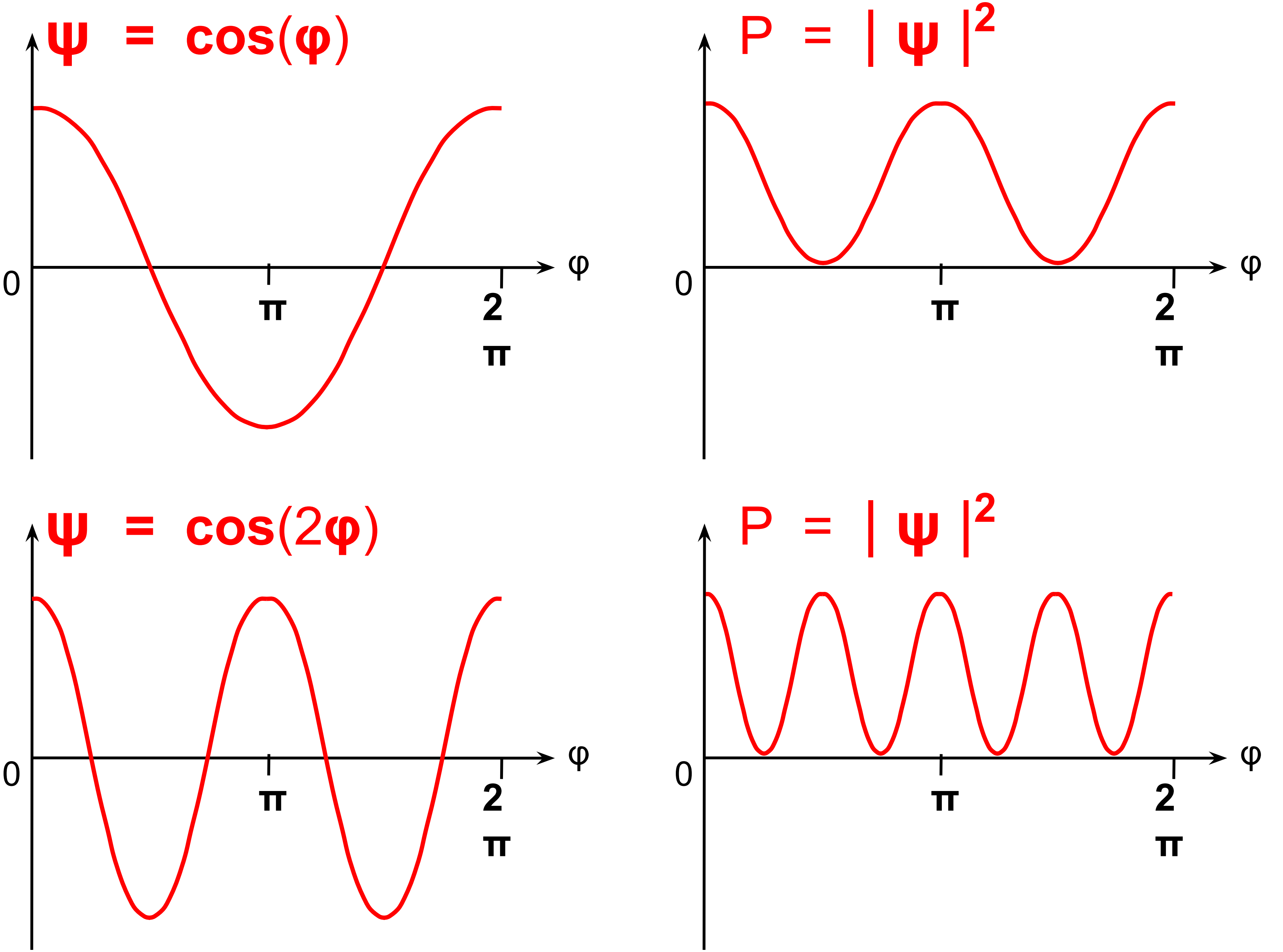
$|\psi'|^2 = \cos^2(m\varphi)$ **(движение неравномерное)**

$\psi'' = \sin(m\varphi)$



Конец стрелки описывает синусоиду
(число полных волн равно квантовому числу *m*)

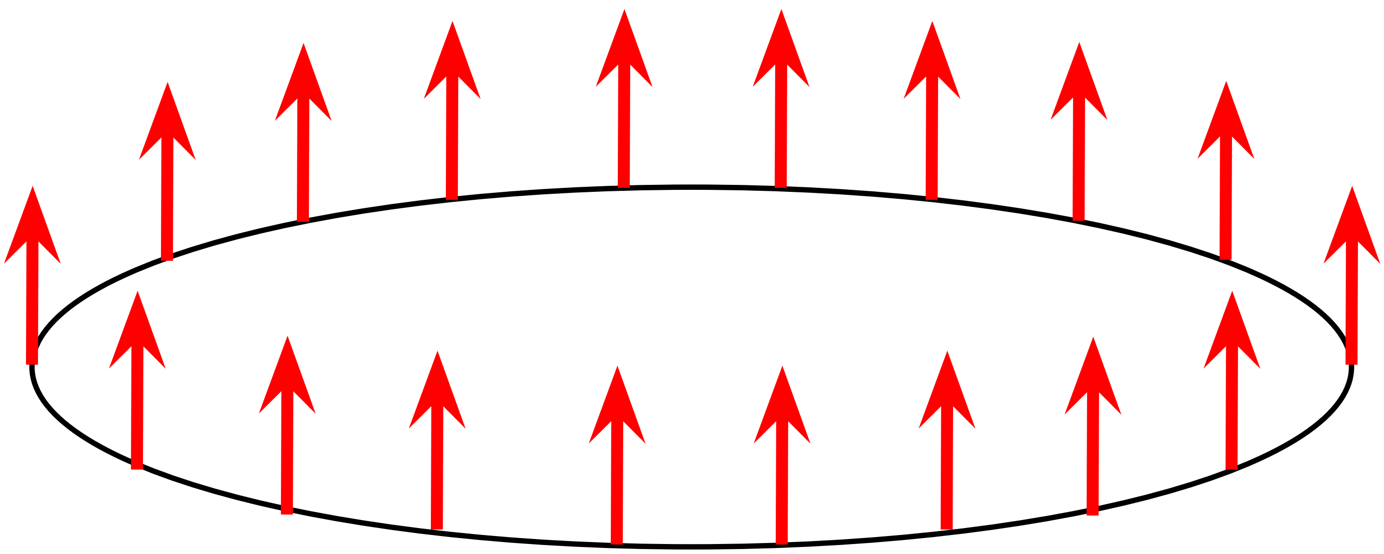
$|\psi''|^2 = \sin^2(m\varphi)$ **(движение неравномерное)**


ψ = cos(φ)
0
π
2π
φ
P = |ψ|²
0
π
2π
φ
ψ = cos(2φ)
0
π
2π
φ
P = |ψ|²
0
π
2π
φ

Исключение

При m = 0 все формулы вырождаются в константу:

$$\psi^{+} = \psi' = \text{const} = (1/2\pi)^{1/2}$$



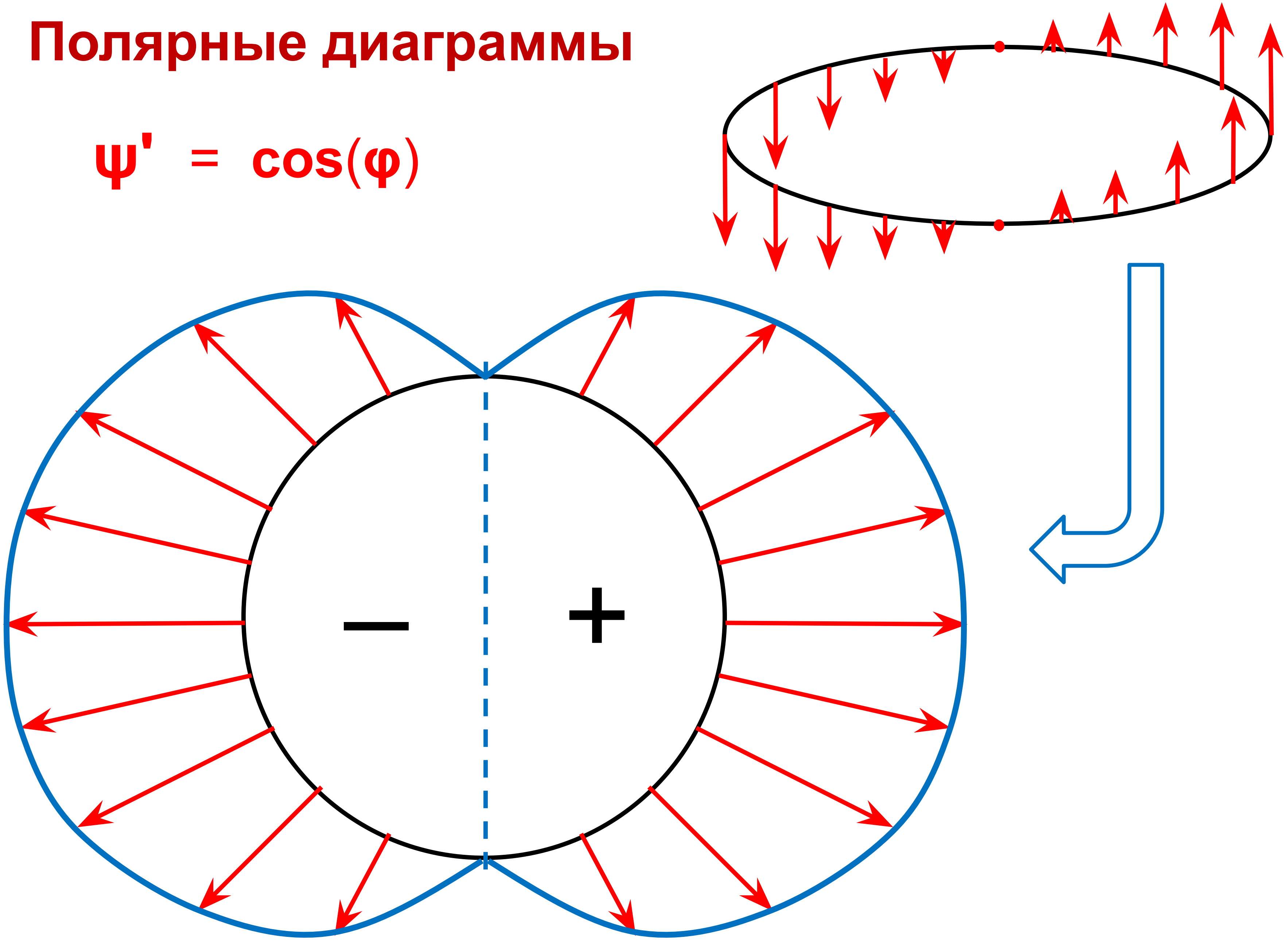
$$|\,\psi\,|^2 = \text{const} = \frac{1}{2\pi}$$

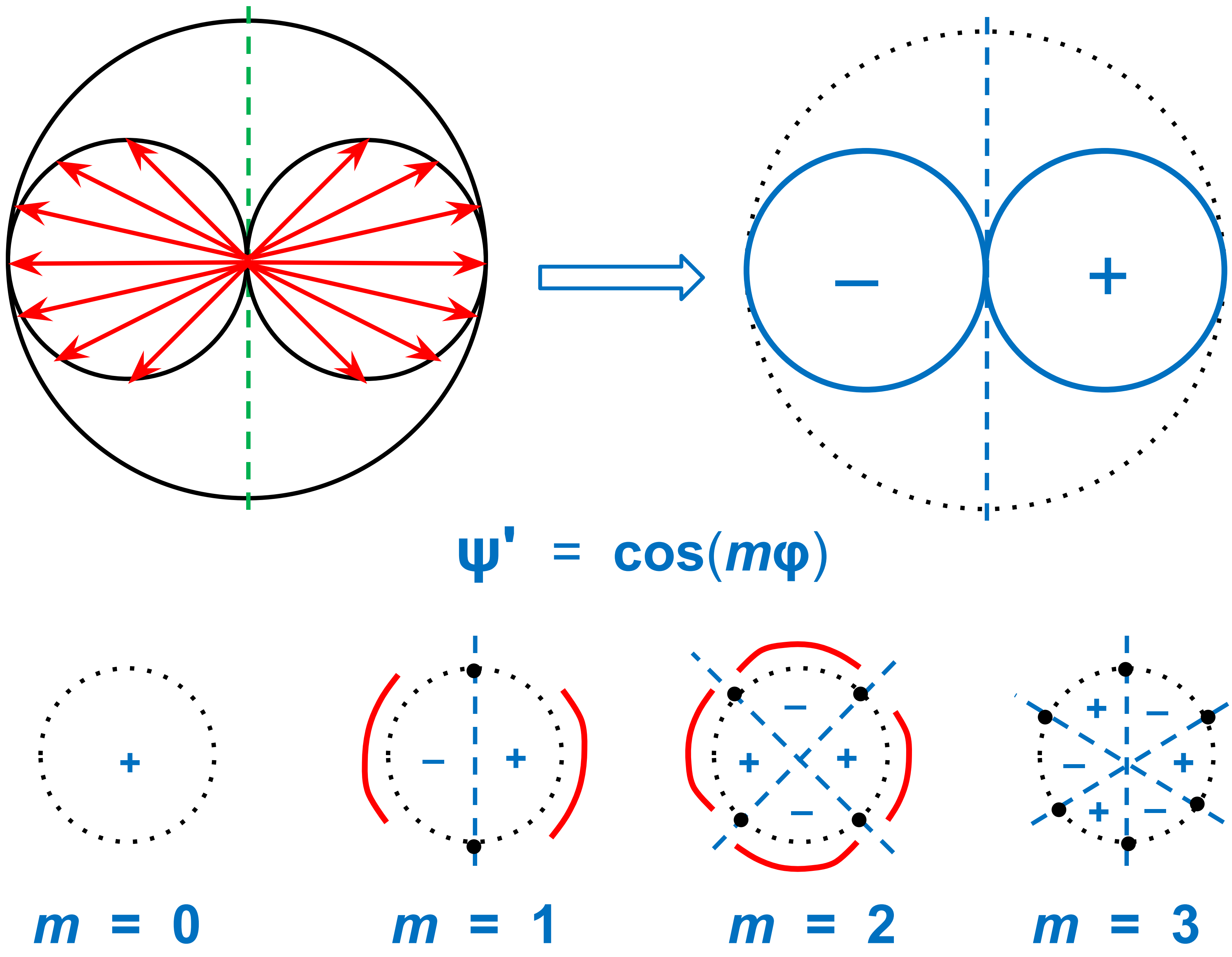
(движение равномерное, но не направленное)

ψ⁺
Lz
Lz = + | L | P+ = 1
Lz = – | L | P– = 0
(вращение против часовой стрелки)
ψ⁻
Lz
Lz = + | L | P+ = 0
Lz = – | L | P– = 1
(вращение по часовой стрелке)
ψ'
ψ''
Lz
Lz = + | L | P+ = 1/2
Lz = – | L | P– = 1/2
(направление вращения не определено)

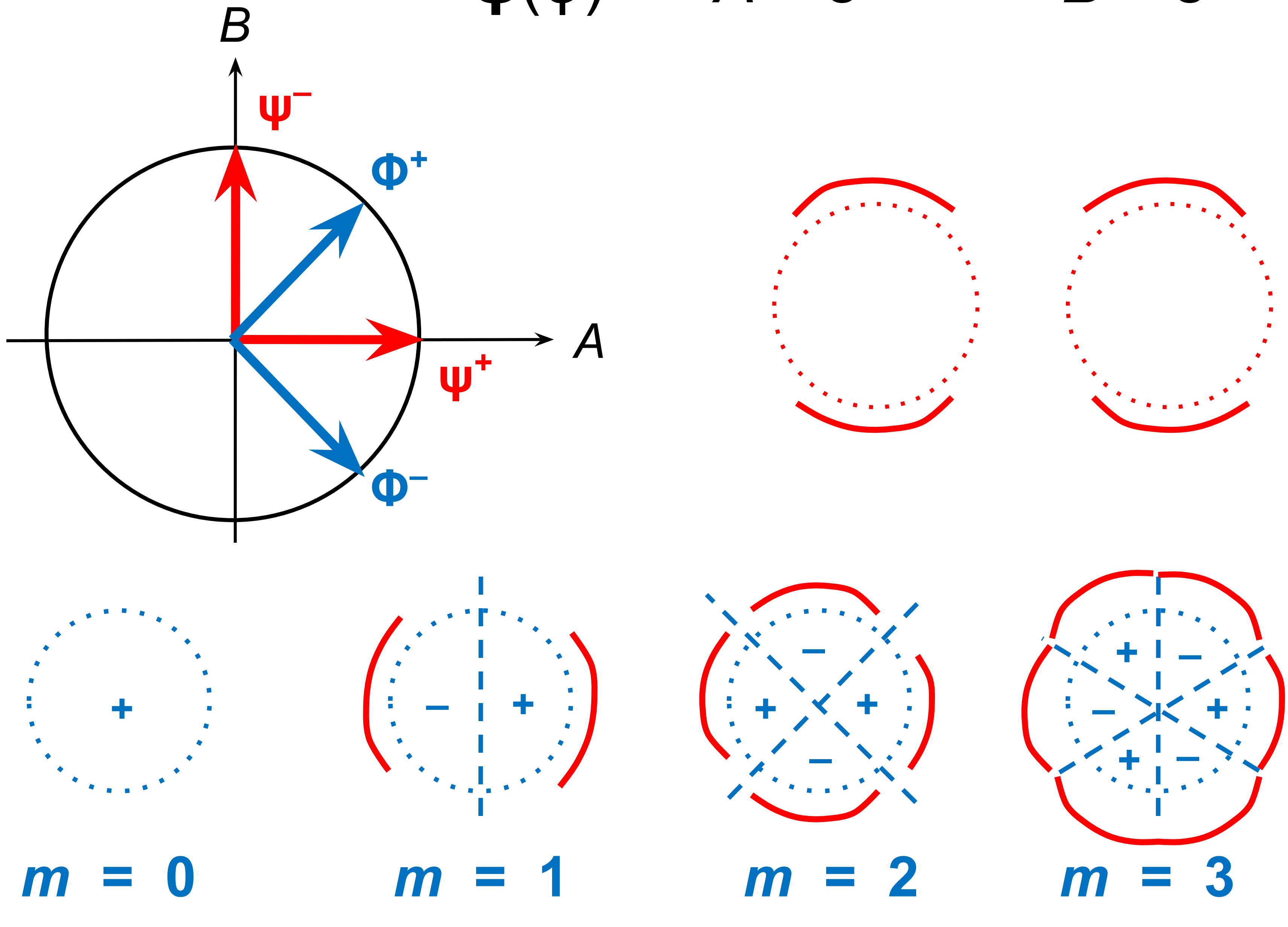
Полярные диаграммы

$$\psi' = \cos(\varphi)$$




−
+
ψ' = cos(mφ)
+
m = 0
−
+
m = 1
−
+
+
−
m = 2
+
−
−
+
+
−
m = 3

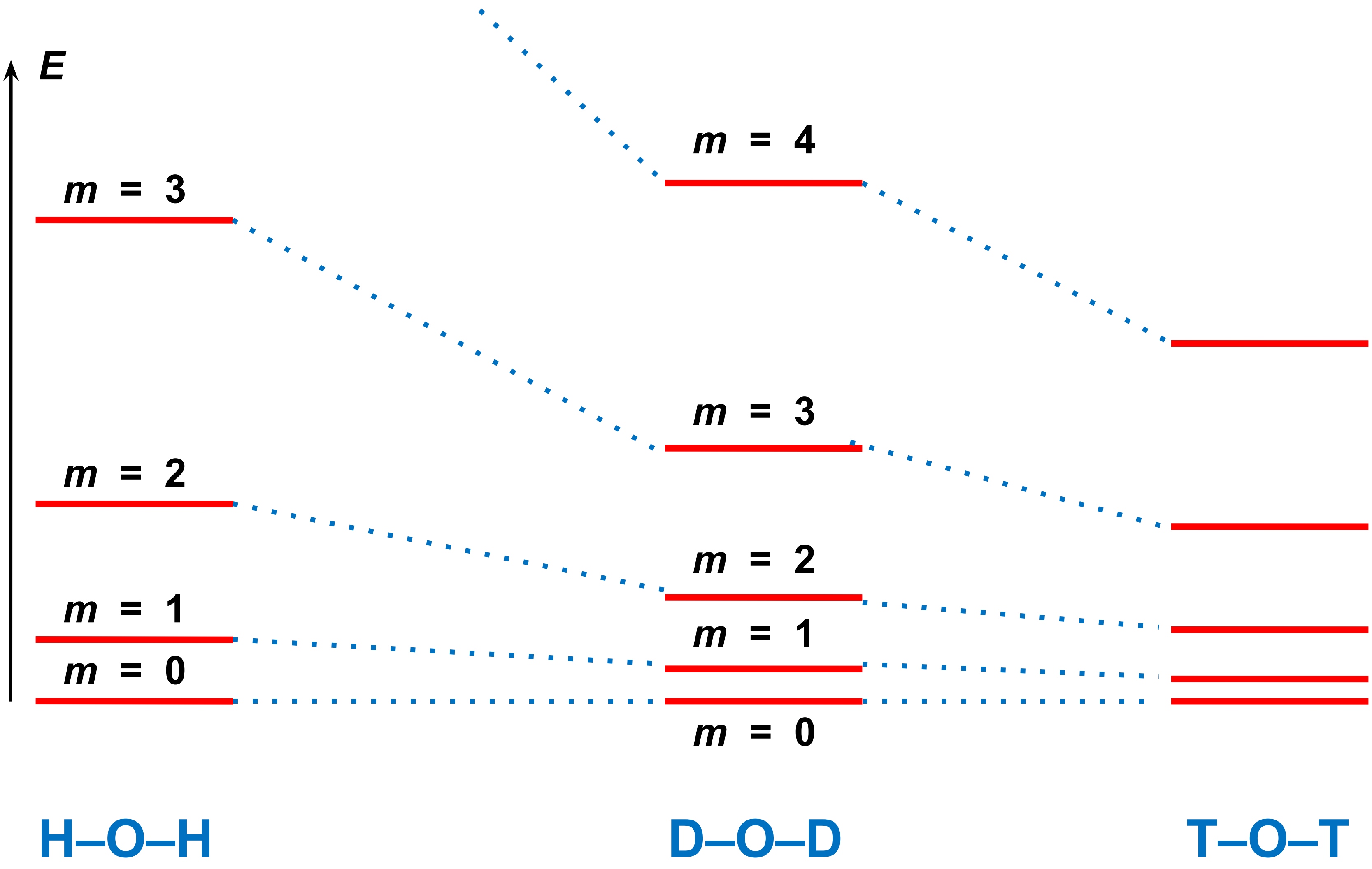
$$\psi(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi} + B \cdot e^{-im\varphi}$$



Влияние параметров

$$E = b \cdot m^2$$

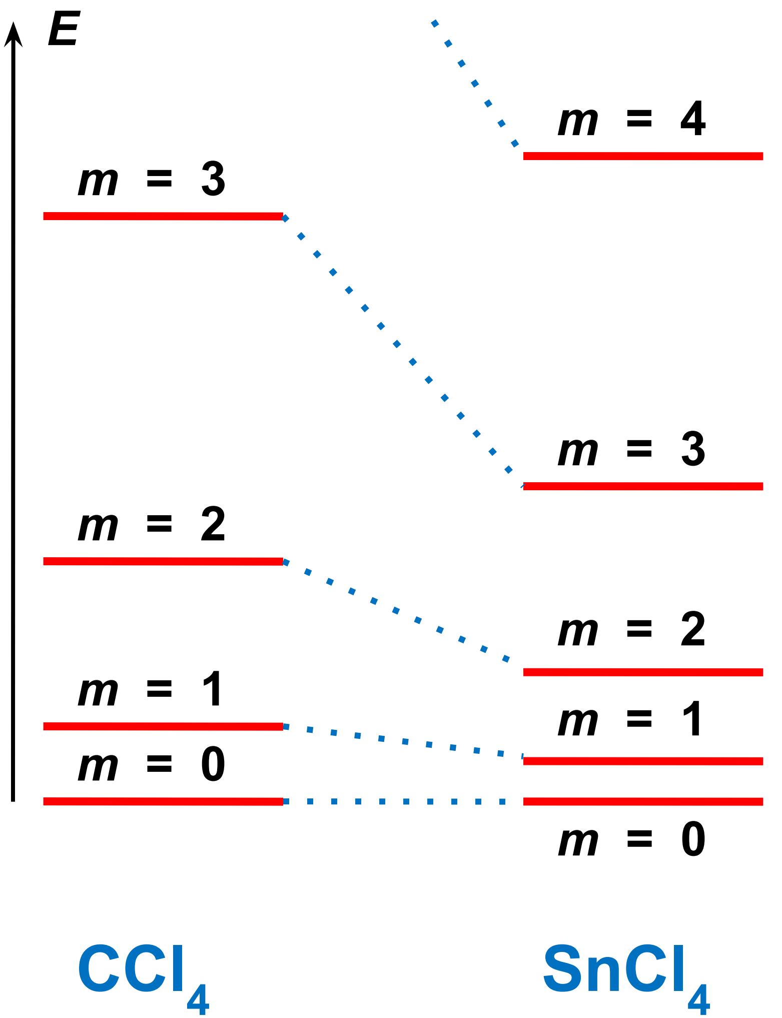
$$b = \square^2 / mr^2$$

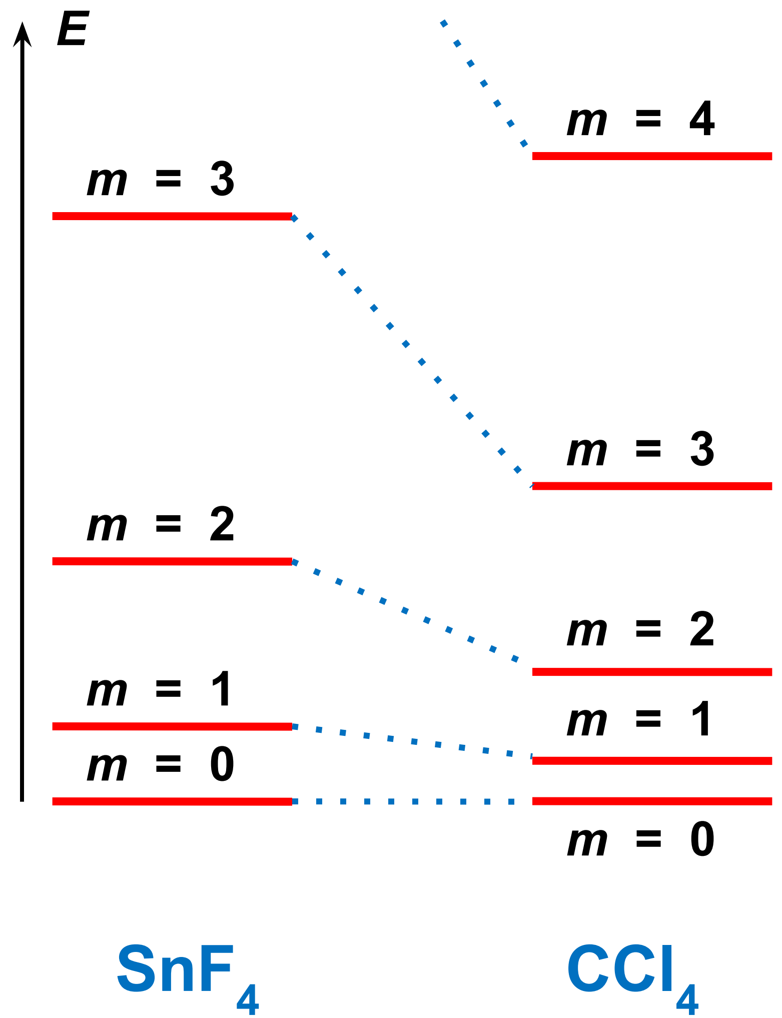


Влияние параметров

$$E = b \cdot m^2$$

$$b = \hbar^2 / mr^2$$





Домашнее задание

Задача 4.4. Дана молекула O=C=O, которая вращается вокруг оси, перпендикулярной прямой, проходящей через центры атомов.

Вычислить частоту (в герцах) и длину волны (в метрах) электромагнитного излучения, вызывающего квантовый переход между двумя стационарными состояниями: m_1 и m_2.

$$m_O = 16 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27} = 26{,}72 \cdot 10^{-27}\ \text{кг}$$

$$\square_{CO} = 1{,}1621 \cdot 10^{-10}\ \text{м}$$

Вычислить энергии начального и конечного стационарных состояний по формуле:

$$E = (\square^2 / 2I) \cdot m^2, \quad \text{где} \quad I = 2 \cdot m_O \cdot (\square_{CO})^2$$

Вычислить разность энергий $\Delta E = E_2 - E_1$

Воспользоваться формулами $\Delta E = h\nu$ и $\lambda = c/\nu$