- konstanty

$\hbar = h/2\pi \approx 1.055\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$	redukovaná Planckova konstanta
$e \approx 1.602\times10^{-19}\,\mathrm{C}$	elementární náboj
$m_e \approx 9.11\times10^{-31}\,\mathrm{kg}$	hmotnost elektronu
$m_p \approx 1.673\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$	hmotnost protonu
$c \approx 3.00\times10^{8}\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}$	rychlost světla ve vakuu
$\varepsilon_0 \approx 8.85\times10^{-12}\,\mathrm{F\cdot m^{-1}}$	permitivita vakua

Vlnová mechanika

1 Obecné poznatky

laplacián $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

- nestacionární Schrödingerova rovnice a vlnová funkce

3D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$ operátorově $\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$ $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

pojmy: vlnová funkce $\psi(\bar{r},t)$, Hamiltonián $\hat{H}$, kinetický člen, (stacionární) potenciál

1D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$ pro vlnovou funkci $\psi(x,t)$

interpretace vlnové funkce: $|\psi(x,t)|^2$ – hustota pravděpodobnosti nalezení částice

$P(\text{částici najdeme v čase } t \text{ mezi } x_A \text{ a } x_B) = \int_{x_A}^{x_B} |\psi(x,t)|^2 dx$

normování vlnové funkce $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$

střední poloha částice $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x,t)|^2 dx$

rovnice kontinuity 3D: $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla\cdot\bar{j} = 0$ 1D: $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j = 0$

tok hustoty pravděpodobnosti 3D: $\bar{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$ 1D: $j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$

princip superpozice – řešení nestacionární Sch.r. lze libovolně lineárně kombinovat

$\psi_1(\bar{r},t)$ a $\psi_2(\bar{r},t)$ jsou řešení nestac. Sch.r. $\Rightarrow$ $\psi(\bar{r},t) = c_1\psi_1(\bar{r},t) + c_2\psi_2(\bar{r},t)$ je rovněž řešením
(analogicky pro více příspěvků)

- vlnová funkce volné částice

částice s ostrou/určitou hodnotou hybnosti

ve 3D: $\psi(\bar{r},t) \sim e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r}-\omega t)} = e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r}-Et)}$

v 1D: $\psi(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}$ ← nelze normovat

hybnost $\bar{p} = \hbar\bar{k}$

energie $E = \hbar\omega$

disperzní relace $E = \frac{p^2}{2m}$

superpozice řešení vytvářející vlnový balík v 1D

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp$$

normování

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2dx = \int_{-\infty}^{\infty}|\phi(p)|^2dp = 1$$

grupová rychlost $\bar{v} = \frac{\bar{p}}{m} = \frac{\hbar\bar{k}}{m}$ (velikost plyne z $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2k^2}{2m}$)

reciprocita: šířka balíku v x je nepřímo úměrná šířce v k (a přeneseně v hybnosti a energii)

- stacionární Schrödingerova rovnice a vlastní stavy

stacionární potenciál V nezávislý na t

→ řešení nestacionární Sch. rovnice hledáme v separovaném tvaru $\psi(x,t) = \Psi(x)\,\phi(t)$

idea metody separace proměnných:

po dosazení separované $\psi(x,t) = \Psi(x)\,\phi(t)$ uvést do tvaru funkce x = funkce t

rovnost platí pro $\forall\, x, t$ → obě funkce jsou konstantní (a jde o tutéž konstantu)

poté separátní řešení vzniklých rovnic pro Ψ a ϕ svázaných skrze konstantu

stacionární Schrödingerova rovnice a stacionární stav

3D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec r) + V(\vec r)\,\Psi(\vec r) = E\,\Psi(\vec r)$ $\qquad \psi(\vec r,t) = \Psi(\vec r)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

1D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\,\Psi(x) = E\,\Psi(x)$ $\qquad \psi(x,t) = \Psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

hustota pravděp. $|\psi|^2 = |\Psi|^2$

operátorově $\hat H\,\Psi = E\Psi$

spektrum – soubor vlastních energií E (jsou reálné) a případně vlastních stavů Ψ

degenerace – jedné hodnotě E odpovídá více možných Ψ (př. dvakrát degenerovaná hladina / stav)

podmínky spojitosti a hladkosti: $\Psi(x)$ spojitá, $\Psi'(x)$ spojitá pro všechna x (podobně ve 3D)
(výjimka: singularita v potenciálu, např. ∞ skok)

- zachycení časového vývoje pomocí stacionárních stavů

- hledáme řešení $\psi(x,t)$ nestacionární Sch. r. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat H\psi$ dané počátečním $\psi(x,t=0)$
- postup založený na principu superpozice a vl. stavech a energiích ze stac. Sch. r. $\hat H\,\Psi_n = E_n\Psi_n$

rozklad do vlastních stavů v $t=0$: $\quad \psi(x,t=0) = \sum_n c_n\Psi_n(x)$

časově vyvinutý stav v čase t: $\quad \psi(x,t) = \sum_n c_n\Psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

vlastní energie příslušná Ψ_n

- případ se dvěma přispívajícími vl. stavy

$$\psi(x,t=0) = c_1\Psi_1(x) + c_2\Psi_2(x) \longrightarrow \psi(x,t) = c_1\Psi_1(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2\Psi_2(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$$

odpovídající hustota pravděpodobnosti

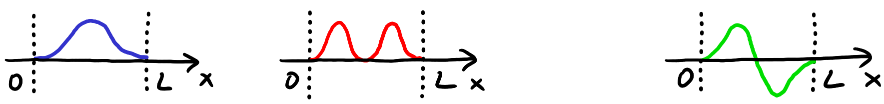
$$|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t) = \left(c_1^*\Psi_1^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2^*\Psi_2^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)\left(c_1\Psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2\Psi_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)$$

$$= \underbrace{|c_1|^2|\Psi_1(x)|^2 + |c_2|^2|\Psi_2(x)|^2}_{\text{statický příspěvek}} + \underbrace{c_1^* c_2\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\,\Psi_1^*(x)\Psi_2(x) + c_1 c_2^*\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\,\Psi_1(x)\Psi_2^*(x)}_{\text{oscilující interferenční příspěvek (reálná fce)}}$$

- osciluje s frekvencí $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$

- vhodný ilustrační příklad: superpozice zákl. a prvního exc. stavu v ∞ jámě s reálnými c_1, c_2

$$|\psi(x,t)|^2 = c_1^2\,\frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi x}{L} + c_2^2\,\frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi x}{L} + 2c_1c_2\,\frac{2}{L}\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)$$



2 1D problémy v rámci vlnové mechaniky

- řešení stac. Sch.r. pro konstantní 1D potenciál $V(x) = V_0$

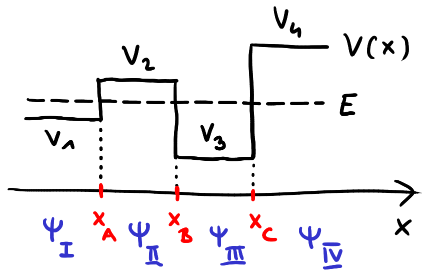
1) $E > V_0$ oscilující řešení

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} = a \cos kx + b \sin kx \qquad k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

2) $E < V_0$ exponenciálně rostoucí / klesající řešení

$$\psi(x) = c_1 e^{\varkappa x} + c_2 e^{-\varkappa x} = a \cosh \varkappa x + b \sinh \varkappa x \qquad \varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

- postup při řešení Sch.r. s po částech konstantním $V(x)$



1) osu x rozdělíme na oblasti s konst. V

2) v jednotlivých oblastech zapíšeme obecné řešení Sch.r. omezené případně dodatečnými podmínkami dané úlohy

Př. $\psi_I(x) = a_1 e^{ik_1x} + b_1 e^{-ik_1x} \qquad k_1 = \sqrt{2m(E-V_1)}/\hbar$

$\psi_{IV}(x) = a_4 e^{-\varkappa_4 x} \qquad \varkappa_4 = \sqrt{2m(V_4-E)}/\hbar \qquad (e^{\varkappa_4 x}$ nelze$)$

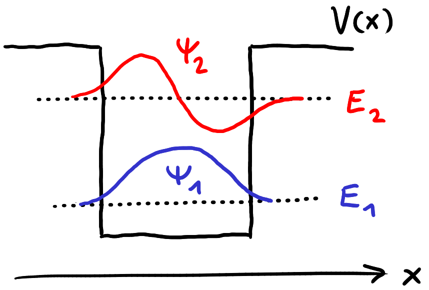
3) v dělících bodech mezi oblastmi zformulujeme podmínky spojitosti a hladkosti

Př. v bodě x_A: $\psi_I(x_A) = \psi_{II}(x_A)$ a $\psi_I'(x_A) = \psi_{II}'(x_A)$, podobně pro x_B, x_C

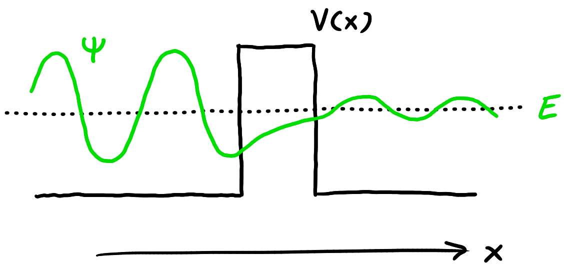
4) vyřešíme vzniklou soustavu rovnic pro koeficienty (a u vázaných stavů i neznámou energii E)

- charakter vlastních stavů v 1D

1) vázané stavy
- lokalizované, zachycené v potenciálové jámě
- diskrétní spektrum energií



2) rozptylové stavy
- jdoucí do nekonečna, nelze normovat
- spojité spektrum energií



- obecně k vlastnostem vázaných stavů v 1D jamách

1) nedegenerované stavy s reálnými vlnovými funkcemi

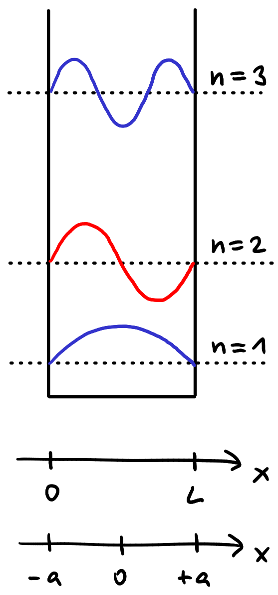
2) roste počet uzlů (základní stav bez uzlů, poté přibývají po jednom)

3) u symetrických jam se střídají sudé a liché funkce $\psi(x)$ (základní stav sudý)

4) ortogonalita vlnových funkcí s různými energiemi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = 0 \quad \text{pro } \psi_m, \psi_n \text{ odpovídající } E_m \neq E_n$$

- nekonečně hluboká kvantová jáma – archetypální QM systém



kvůli potenciálu s nekonečnými schodky má specifické okrajové podmínky:

$\psi(x)$ na okrajích jámy a vně musí být nulové (! není spojitost ψ')

hodnoty k kompatibilní s okrajovými podmínkami $k_n = \frac{n\pi}{L}$

↪ vlastní energie: $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$ $\quad n = 1, 2, 3, \dots$

normované vlnové funkce vlastních stavů $\left(\text{tj. } \int |\psi_n(x)|^2 dx = 1\right)$:

- pro interval $[0, L]$

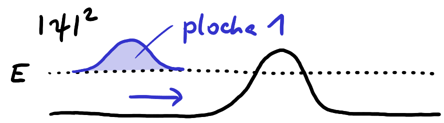
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

- pro interval $[-a, +a]$

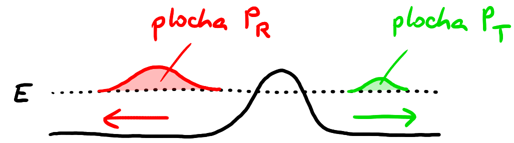
$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{2a} & n \text{ liché} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{2a} & n \text{ sudé} \end{cases}$$

- kvantifikace rozptylu

– pravděpodobnost průchodu a odrazu při rozptylu částice na potenciálové bariéře



pozdější čas:



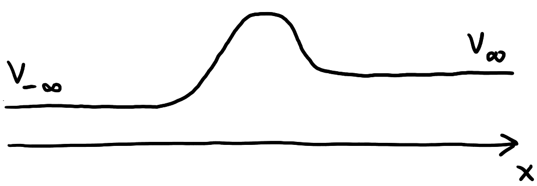
(energie E je jen přibližná, v balíku je obsažena superpozice vlastních stavů s blízkými energiemi)

– vyčíslení využívající stacionární stavy vlnové povahy (určitá hodnota energie)

dopadající + odražená

$$\psi(x) \to e^{ikx} + R e^{-ikx}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_{-\infty})}}{\hbar}$$



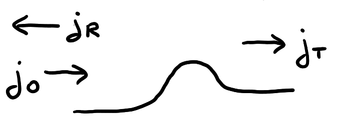
prošlá

$$\psi(x) \to T e^{ik'x}$$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_\infty)}}{\hbar}$$

koeficienty R a T závisí na E (nebo k) a získáme je řešením stacionární Sch.r.

pravděpodobnost průchodu a odrazu určíme na základě toků hustoty pravděpodobnosti:



$$P(\text{odraz}) = P_R = \frac{j_R}{j_0} = |R|^2 \qquad P(\text{průchod}) = P_T = \frac{j_T}{j_0} = \frac{k'}{k} |T|^2$$

(pro rovinnou vlnu je $j = \frac{\hbar}{m} k\, |\text{amplituda}|^2$)

Pozn. k degeneraci: pro $E > \max(V_{-\infty}, V_\infty)$ dva degener. stavy – částice dopadající zleva/zprava

pro $\min(V_{-\infty}, V_\infty) < E < \max(V_{-\infty}, V_\infty)$ jeden stav – částice jdoucí ze strany s $V < E$

- další podstatné body k rozptylovým situacím

  – schopnost vyřešit potenciálový schod (vyčíslení P_R, P_T) – jednoduché díky jedinému sešívání

  – představa o tunelování pravoúhlou bariérou, schopnost sestavení tvaru řešení

  a rovnic svazujících koeficienty, přibl. výsledek $P_T \approx e^{-2\varkappa a} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\,a}$

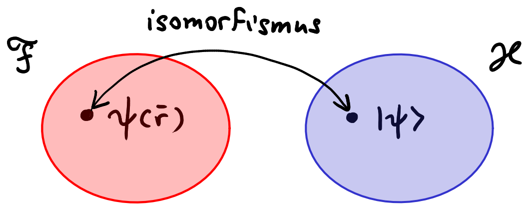
Abstraktní formalismus kvantové mechaniky

① Stavy

P1 Stav systému je reprezentován normovaným vektorem z příslušného Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$.

- prostor stavů je vektorový prostor $\longrightarrow$ platí princip superpozice
- Hilbertův prostor – vektorový prostor se skalárním součinem

dvě podoby H.p. užívané v kurzu:



$\mathcal{F}$ – Hilbertův prostor kvadraticky integrovatelných vlnových funkcí $\psi(\vec r)$ splňujících $\int |\psi|^2 d^3\vec r < \infty$ (s dodatečnými fyzikálními omezeními, např. spojitost)

$\mathcal{H}$ – abstraktní Hilbertův prostor stavů $|\psi\rangle$

prvky podle Diraca označeny jako ket-vektory

- zavedení skalárního součinu

1) na prostoru $\mathcal{F}$: $(\psi, \eta) \overset{\text{def}}{=} \int \psi^*(\vec r)\, \eta(\vec r)\, d^3\vec r \in \mathbb{C}$ (analogicky v 1D s $\int \dots dx$)

vlastnosti $(\psi, \eta_1 + \eta_2) = (\psi, \eta_1) + (\psi, \eta_2)$ (totéž i pro první argument)

$(\psi, c\eta) = c(\psi, \eta)$ $\quad (c\psi, \eta) = c^*(\psi, \eta)$ $\quad (\psi, \eta) = (\eta, \psi)^*$

2) na prostoru $\mathcal{H}$: skalární součin přenesený isomorfismem $(|\psi\rangle, |\eta\rangle) = \int \psi^*(\vec r)\, \eta(\vec r)\, d^3\vec r$

v Diracově formalismu se vyjadřuje kombinací bra- a ket-vektorů

bra-vektory $\langle\psi|$ – prvky pomocného duálního prostoru $\mathcal{H}^*$ zavedené pomocí vztahu

$$\langle\psi|\eta\rangle = (|\psi\rangle, |\eta\rangle) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec r)\, \eta(\vec r)\, d^3\vec r$$

– užitečné vyjádření: bra-vektor příslušný lineární kombinaci ket-vektorů

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \longrightarrow c_1^*\langle\psi_1| + c_2^*\langle\psi_2|$$

vlastnosti linearity skalárního součinu jako u 1) & $\langle\psi|\eta\rangle = \langle\eta|\psi\rangle^*$

Pozn. Předchozí $\mathcal{H}$ je zaveden jako isomorfní k $\mathcal{F}$. Existují i abstraktní H.p. bez vztahu k nějakému $\mathcal{F}$, např. H.p. spinu. Skalární součin se pak zavádí podle typu fyz. systému.

② Operátory

P2 Pozorovatelné veličiny odpovídají hermitovským operátorům působícím na $\mathcal{H}$.

- lineární operátory – zobrazení vektorů z H.p. na vektory z H.p. (někdy i mimo) splňující

na $\mathcal{F}$ $\quad \eta = \hat A \psi$: vlastnosti linearity $\quad \hat A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1 \hat A \psi_1 + c_2 \hat A \psi_2$

na $\mathcal{H}$ $\quad |\eta\rangle = \hat A|\psi\rangle$: $\quad \hat A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1 \hat A|\psi_1\rangle + c_2 \hat A|\psi_2\rangle$

- součin operátorů (= postupné působení) $\hat C = \hat A \hat B$: $\hat C \psi = \hat A(\hat B \psi)$ pořadí je podstatné!
- významné operátory vyjádřené pro případ $\mathcal{F}$ (definice působením na vlnovou funkci)

souřadnice $\hat x \psi = x\psi$ $\quad$ hybnost (složka hybnosti) $\hat p_x \psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi$

kinetická energie $\hat T = \frac{1}{2m}\hat p^2 \rightarrow \hat T\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$ $\left(\text{v 1D případě } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)$

Hamiltonián částice v potenciálu $\hat H \psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$ (V může být funkce $\vec r$ i t)

- **komutátor** operátorů $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

- pokud $[\hat{A},\hat{B}]=0$, lze volně zaměňovat pořadí působení $\hat{A}$ a $\hat{B}$ (tj: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$)

- pokud $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C} \neq 0$, doprovází změnu pořadí přičtení/odečtení $\hat{C}$: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + \hat{C}$, $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - \hat{C}$

- elementární komutátory složek polohy a hybnosti: $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ (1D případ)

  $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$ $\quad [\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar$ $\quad [\hat{x},\hat{p}_y] = 0$ $\quad [\hat{y},\hat{p}_x] = 0$ apod. (3D případ)

  výpočet pro 1D případ v souřadnicové reprezentaci

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar}{i}x\frac{d\psi}{dx} - \frac{\hbar}{i}\psi = i\hbar\psi$$

- **střední hodnota** operátoru / veličiny $\langle\hat{A}\rangle \overset{\text{def}}{=} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = (\psi,\hat{A}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)\,dx$

- hermitovské sdružení a hermitovské operátory

  def: operátor $\hat{A}^+$ **hermitovsky sdružený** k $\hat{A}$ splňuje $(\eta,\hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\eta,\psi)$ pro všechny ψ,η

  hermitovský operátor je samosdružený, tj: $\hat{A}^+ = \hat{A}$

  pravidla pro herm. sdružování: $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$ $\quad (\lambda\hat{A})^+ = \lambda^*\hat{A}^+$ $\quad (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

  další pravidla v rámci Diracova formalismu:

  - sdružování mezi sebou převádí ket- a bra-vektory $|\psi\rangle \overset{+}{\longleftrightarrow} \langle\psi|$ $\quad (|\psi\rangle)^+ = \langle\psi|$ a naopak)
  - sdružování několika objektů za sebou – sdružovat jednotlivé objekty a klást v opačném pořadí

  např.: $\hat{A}|\psi\rangle \overset{+}{\longleftrightarrow} \langle\psi|\hat{A}^+$ $\qquad \langle\psi|A|\eta\rangle^* = \langle\eta|\hat{A}^+|\psi\rangle$ (+ čísla odpovídá komplex. sdružení)

3 Reprezentace

- zvolíme (obvykle) ortonormální bázi v Hilbertově prostoru a v ní vyjádříme **stavy jako vektory koeficientů** a **operátory jako matice**

- **báze** – úplný soubor $\{\varphi_n(\vec{r})\}$ (nebo $\{|n\rangle\}$ v Diracovi) umožňující rozklad libovolného stavu

  ortonormální báze – splňuje $\int\varphi_m^*(\vec{r})\varphi_n(\vec{r})\,d^3\vec{r} = \langle m|n\rangle = \delta_{mn} = \begin{cases}1 & m=n\\ 0 & m\neq n\end{cases}$

v dalším předpokládáme ortonorm. bázi

- rozklad do báze $\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n\varphi_n(\vec{r})$ nebo $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$

  koeficienty rozkladu: $c_n = (\varphi_n,\psi) = \int\varphi_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\,d^3\vec{r} = \langle n|\psi\rangle$

  stav je pak reprezentován vektorem $\psi(\vec{r}), |\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\end{pmatrix}$, herm. sdružení $\langle\psi| \rightarrow \begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\end{pmatrix}^+ = (c_1^*\ c_2^*\ \dots)$

- skalární součin

$$\int\psi^*(\vec{r})\eta(\vec{r})\,d^3\vec{r} = \langle\psi|\eta\rangle = \underbrace{(c_1^*\ c_2^*\ \dots)}_{\langle\psi|}\underbrace{\begin{pmatrix}d_1\\d_2\\\vdots\end{pmatrix}}_{|\eta\rangle} = \sum_n c_n^* d_n$$

- normování

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \rightarrow \sum_n |c_n|^2 = 1$$

- operátory

$$|\eta\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}d_1\\d_2\\\vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}A_{11} & A_{12} & \cdots\\ A_{21} & A_{22} & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\end{pmatrix}$$

maticový element

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle = \int\varphi_m^*(\vec{r})\,\hat{A}\,\varphi_n(\vec{r})\,d^3\vec{r}$$

řádkový sloupcový index

hermitovské operátory jsou reprezentovány herm. maticemi: $A_{mn} = A^*_{nm}$, $A^+ = A^{T*} = A$

- přechod mezi ortonormálními bázemi

báze A: $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ báze B: $|1'\rangle, |2'\rangle, \dots$

rozvoje stejného stavu:

$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots$

$= c_1'|1'\rangle + c_2'|2'\rangle + \dots$

$c_1' = \langle 1'|\psi\rangle$ atd.

matice přechodu M

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \langle 1'|1\rangle & \langle 1'|2\rangle & \cdots \\ \langle 2'|1\rangle & \langle 2'|2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{M} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

převod operátorů

$H' = M H M^{-1}$

báze B báze A

- souřadnicová a hybnostní reprezentace (vše pro 1D)

– založené na sadě funkcí mimo $\mathcal{F}$, která je ovšem úplná – nepravá / zobecněná báze

souřadnicová rep. – zcela lokalizované bázové funkce $\varphi_{x'}(x) = \delta(x-x')$ → $|x'\rangle$ v Diracovi

hybnostní rep. – bázové funkce odpovídají volné částici s hybností p: $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$ → $|p\rangle$

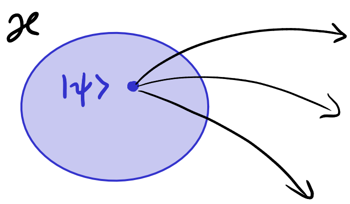
– ortogonalita bázových funkcí $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{x'}^*(x)\varphi_{x''}(x)\,dx = \delta(x'-x'')$ $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_p^*(x)\varphi_{p'}(x)\,dx = \delta(p-p')$

– převodní vztahy $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde\psi(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp$ $\tilde\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx$

– operátory souřadnice a hybnosti: $\hat x\,\psi(x) = x\,\psi(x)$ $\hat p\,\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x)$

$\hat x\,\tilde\psi(p) = i\hbar\frac{d}{dp}\tilde\psi(p)$ $\hat p\,\tilde\psi(p) = p\,\tilde\psi(p)$

- ilustrace vztahu prvků abstraktního $\mathcal{H}$ a jejich reprezentací



$|\psi\rangle$ = stav systému

bázové funkce

souřadnicová reprezentace $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ $|x'\rangle \leftrightarrow \delta(x-x')$

hybnostní reprezentace $\tilde\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$ $|p\rangle \leftrightarrow \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

reprezentace založená na bázi $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ $|n\rangle \leftrightarrow \varphi_n(x)$

vektor koeficientů $c_1, c_2, c_3 \dots$ $c_n = \langle n|\psi\rangle$

4 Spektra

- spektrální věta

$\hat A$ je hermiteovský operátor, jeho vlastní vektory mohou být dvojího druhu (i současně)

1) vlastní vektory z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ $\hat A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$ (diskrétní spektrum)

2) nepravé vlastní vektory mimo $\mathcal{H}$ $\hat A|a\rangle = a|a\rangle$ (spojité spektrum)

tvrzení: 1) vlastní hodnoty jsou reálné

2) vlastní vektory příslušné různým vlastním hodnotám jsou ortogonální

3) vlastní vektory tvoří úplný soubor

- společné vlastní stavy komutujících operátorů

Je-li $[\hat A, \hat B] = 0$, lze najít úplný soubor společných vlastních stavů $\{|mn\rangle\}$ (mn jsou dvojice indexů) splňujících $\hat A|mn\rangle = a_m|mn\rangle$, $\hat B|mn\rangle = b_n|mn\rangle$. Zde a_m, b_n jsou vlastní hodnoty příslušné $|mn\rangle$.

Př. $[\hat L^2, \hat L_z] = 0$ → společné vlastní stavy $|lm\rangle$, $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = -l, -l+1, \dots, +l$

Platí i pro více operátorů, např. u sféricky symetrického systému hledáme spol. vl. stavy $\hat H, \hat L^2, \hat L_z$

- stacionární Schrödingerova rovnice – základní spektrální problém v QM

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ vyjádřená v ortonormální bázi $|1\rangle, |2\rangle, \dots$: $\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$

složení vlastního stavu z vlastního vektoru koeficientů ←

$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots$

P3 Možnými výsledky měření veličiny A jsou pouze vlastní hodnoty příslušného operátoru $\hat{A}$. Bezprostředně po měření se systém nachází ve vlastním stavu příslušném naměřené vlastní hodnotě (redukce / kolaps stavu při měření). Je-li daná vl. hodnota degenerovaná, provede se projekce do příslušného podprostoru.

P4 Pravděpodobnosti naměření jednotlivých vlastních hodnot ve stavu $|\psi\rangle$ jsou dány překryvem s normovanými vlastními vektory příslušnými těmto vl. hodnotám: $P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2$ (v degenerovaném případě je třeba sčítat přes vektory příslušné a_n).

ilustrace výsledku měření na stavu

$|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \dots$

$|\psi\rangle \to$

- a_1 s pravděp. $P(a_1) = |\langle a_1|\psi\rangle|^2 = |c_1|^2$
- a_2 s pravděp. $P(a_2) = |\langle a_2|\psi\rangle|^2 = |c_2|^2$
- a_3 s pravděp. $P(a_3) = |\langle a_3|\psi\rangle|^2 = |c_3|^2$
- $\vdots$

statistické charakteristiky hypotetické sady mnoha nezávislých měření se stejným výchozím stavem $|\psi\rangle$

střední hodnota veličiny A ve stavu $|\psi\rangle$:

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n |c_n|^2 = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

neurčitost veličiny A ve stavu $|\psi\rangle$:

$$\Delta A = \sqrt{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle}$$ (stř. hodnoty počítané v $|\psi\rangle$)

= stř. kvadrat. odchylka při mnoha měřeních se stejným $|\psi\rangle$

5 Časový vývoj

P5 Časový vývoj systému je popsán nestacionární Schrödingerovou rovnicí $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$.

- nestacionární Schrödingerova rovnice v bázi

  rozklad $|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle + \dots$ $\quad i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$

- časový vývoj v bázi vlastních stavů: $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \to |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$

- Ehrenfestův teorém

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$ (obvykle $\hat{A}$ nezávisí explicitně na čase a zůstane jen 1. člen)

6 Princip neurčitosti

– kompatibilní/nekompatibilní veličiny A, B – komutátor $[\hat{A},\hat{B}]$ je nulový/nenulový

- kompat. veličiny současně přesně měřitelné – existují společné vl. stavy neměnné při měření $\hat{A}$ i $\hat{B}$:

  $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, $\hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$ → měření A (B) dá hodnotu a (b), stav $|\psi\rangle$ se přitom podle P3 zachová

- nekompatibilní veličiny podléhají principu neurčitosti:

  obecný princip neurčitosti $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|$ (neurčitosti a střední hodnota pro daný stav)

  pro souřadnici a příslušnou složku hybnosti: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (nezávislé na stavu díky konst. $[\hat{x},\hat{p}]$)

Aplikace formalismu & rozšiřující témata

(1) Harmonický oscilátor

- Hamiltonián 1D oscilátoru s hmotností m a frekvencí ω: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$
- řešení v souřadnicové reprezentaci

  stacionární Schrödingerova rovnice $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$

  vlastní energie $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ $(n = 0,1,2,\dots)$

  vlnové funkce vl. stavů $\psi_n(x) \sim H_n(\xi)\,e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ (Hermitův polynom stupně n × gaussovka)

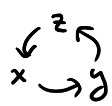
  škálovaná souřadnice $\xi = \frac{x}{x_0}$, charakteristická délka $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
- algebraický přístup k HO
  - bezrozměrné škálované operátory $\hat{Q} = \frac{\hat{x}}{x_0}$, $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{p_0}$ s $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}$ $\rightarrow$ $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{P}^2+\hat{Q}^2)$
  - žebříkové operátory $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}+i\hat{P})$, $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}-i\hat{P})$ s komutátorem $[\hat{a},\hat{a}^+] = 1$
  - působení na vlastní stavy $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right)$ označené $|n\rangle \leftrightarrow \psi_n(x)$ $(n = 0,1,2,\dots)$

    $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ $\quad\hat{a}|0\rangle = 0\quad$ $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ $\quad\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$
  - sestavení $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$, $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^+-\hat{a})$ a výpočty středních hodnot a matic. elementů
- důsledek Ehrenfestova teorému: $\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} + \omega^2\langle x\rangle = 0$ $\rightarrow$ $\langle x\rangle$ vykonává stejné pohyby jako klasický HO
- separace proměnných pro 3D isotropní HO s $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2)$

  vlastní funkce $\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$ a energie $E_{n_xn_yn_z} = \hbar\omega\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)$ $(n_x, n_y, n_z = 0,1,2,\dots)$

(2) Moment hybnosti

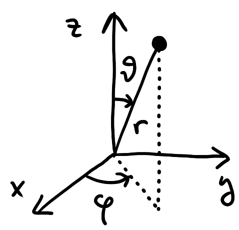
- definice orbitálního momentu hybnosti

  $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ $\rightarrow$ $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$, $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$, $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$
- komutační relace
  - složky $\hat{\vec{L}}$ vzájemně nekomutují: $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ a další dvě cyklickou záměnou 
  - všechny složky $\hat{\vec{L}}$ komutují s kvadrátem velikosti $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$: $[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0$ $(\alpha = x,y,z)$
- souvislost s rotacemi – jen intuitivně: pomocí $\hat{L}_z$ lze zkonstruovat operátor rotace kolem osy z
- společné vlastní stavy $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$ v souřadnicové reprezentaci se sférickými souřadnicemi
  - všechny operátory MH tedy $\hat{L}_{x,y,z}$ i $\hat{L}^2$ vyjádřené ve sférických souřadnicích se dotýkají pouze úhlových souřadnic ϑ a φ, např. operátor z-složky $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

  $\rightarrow$ vlnové funkce vlastních stavů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$ mají separovaný tvar

  $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$

  radiální část ↗ ↖ úhlová část



$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$
$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$
$z = r\cos\vartheta$

$R(r)$ je zcela libovolná radiální funkce ($\hat{L}$ ji ignoruje)

přidružený Legendrův „polynom"

$Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$ jsou sférické harmonické funkce tvaru $Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \sim P_{\ell m}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}$

- možná kvantová čísla ℓ, m a odpovídající vlastní hodnoty $\hat{L}^2, \hat{L}_z$

  $Y_{\ell m}$ může mít $\ell = 0,1,2,3,\dots$ a pro dané ℓ potom $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$

  $Y_{\ell m}$ splňuje $\hat{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$, $\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$ → vl. hodnoty $\hbar^2\ell(\ell+1)$ a $\hbar m$ pro $\hat{L}^2$ resp. $\hat{L}_z$

- ortogonalita vlastních stavů (při integrování úhlových závislostí přes plný prostorový úhel)

$$\iint Y^*_{\ell m} Y_{\ell' m'}\, d\Omega = \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\; Y^*_{\ell m}(\vartheta,\varphi)\, Y_{\ell' m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

- algebraický přístup k MH

- operátory obecného momentu hybnosti: libovolná trojice operátorů $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ splňujících komutační relace $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$ & cyklická záměna (zahrnuje orbitální MH $\hat{\vec{L}}$ i spin $\hat{\vec{S}}$)

- důsledkem komutačních relací je struktura spektra společných vlastních stavů $\hat{J}_z$ a $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \qquad \hat{J}_z|jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \qquad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

  možné hodnoty j: orbitální MH ($\hat{\vec{J}} \to \hat{\vec{L}}$, $j \to \ell$) – celočíselné $j = 0,1,2,3,\dots$

  spin ($\hat{\vec{J}} \to \hat{\vec{S}}$, $j \to s$) – celočíselné a poločíselné $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$

- žebříkové operátory: $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ a hermitovsky sdružený $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$

  působení $\hat{J}_\pm$ na vlastní stavy $\hat{J}_\pm |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}\,|j, m\pm1\rangle$

  (využití při vyčíslování působení $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ a $\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$ na vlastní stavy $|jm\rangle$)

3 Systémy se sférickou a válcovou symetrií

- Hamiltonián invariantní vůči rotacím a) všem – sférická sym. b) kolem jedné osy – válcová sym.

  sféricky symetrický $\hat{H}$ – komutuje se všemi složkami MH: $[\hat{H}, \hat{L}_\alpha] = 0$ ($\alpha = x,y,z$) → také $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$

  → hledáme společné vlastní stavy $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ popsané vlnovou funkcí tvaru $\Psi \sim R(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$

  válcově symetrický $\hat{H}$ – komutuje s $\hat{L}_z$ (pro válcovou osu z): $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$

  → hledáme společné vlastní stavy $\hat{H}, \hat{L}_z$ s vlnovou funkcí $\Psi \sim R(r)\, e^{im\varphi}$ (2D případ)

- radiální Schrödingerova rovnice pro úlohy s centrálním (= sféricky sym.) potenciálem

- úhlová část laplaciánu ve sférických souřadnicích odpovídá až na prefaktor operátoru $\hat{L}^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\Psi) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}\Psi$$

  – konzistentní s $[\hat{H}, \hat{L}_\alpha] = 0$ a separací $\Psi \sim R\, Y_{\ell m}$

  → rovnice pro radiální část vlnové funkce $\Psi \sim R(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right]R = ER$$

  odstředivý potenciál ze členu s $\hat{L}^2$

  alternativní vyjádření s pomocí funkce $u(r) = r\,R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right]u = Eu$$

  s okrajovými podmínkami $u(0) = 0$, $u(\infty) = 0$

  řešením zvlášť pro každé ℓ získáme sadu vlastních energií a příslušných vlnových funkcí

$$E_{n\ell} \quad \& \quad \Psi_{n\ell m}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{r} u_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \qquad \ell = 0,1,2,\dots \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, +\ell$$

konvenční pojmenování: $n\,/\,\ell\,/\,m$ – hlavní / vedlejší / magnetické kvantové číslo

- střední hodnoty radiálních veličin

střední hodnota libovolné funkce $f(r)$ závislé jen na vzdálenosti od centra

$$\langle f\rangle = \iiint f(r)\,|\psi(\vec r)|^2\, d^3\vec r = \int_0^\infty dr\, f(r)\, \underbrace{r^2 \int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |\psi(r,\vartheta,\varphi)|^2}_{} = \int_0^\infty f(r)\,\rho(r)\, dr$$

radiální distribuční funkce $\rho(r)$ (= hustota pravděpodobnosti nalezení částice v různých vzdálenostech od centra)

odvozené veličiny: střední vzdálenost $\langle r\rangle$

střední kvadratická vzdálenost $\sqrt{\langle r^2\rangle}$

nejpravděpodobnější vzdálenost – hodnota r, pro které je $\rho(r)$ maximální

- atom vodíku

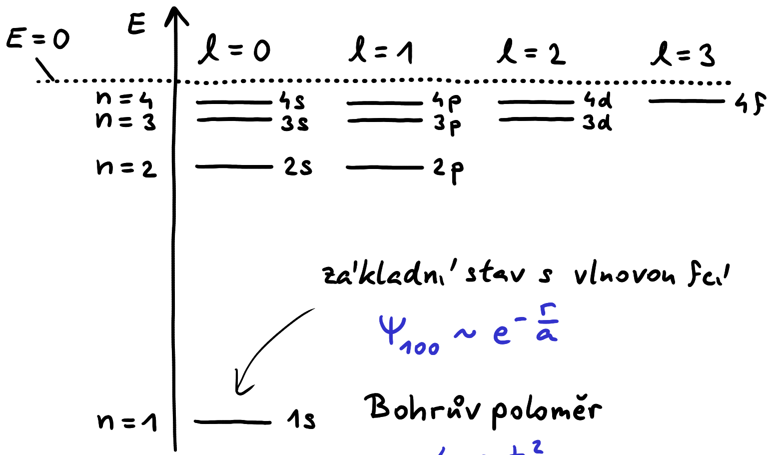
coulombovský potenciál $V(r) = -\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{e^2}{r}$ redukovaná hmotnost $\mu = \dfrac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$

– struktura hladin

hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3, \dots$

vedlejší kvantové číslo $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$

magnetické kv. číslo $m = -\ell, -\ell+1, \dots, +\ell$



vlastní energie

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \approx -13.606\,\mathrm{eV}\,\frac{1}{n^2}$$

základní stav s vlnovou fcí $\psi_{100} \sim e^{-\frac{r}{a}}$

Bohrův poloměr

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.529\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$$

– vlnové funkce vlastních stavů

$$\psi_{n\ell m}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$$

radiální část $R_{n\ell}(r) = (\text{polynom v } r) \times e^{-\frac{r}{na}}$

1) $n-\ell-1$ uzlů 2) pro malé r je $R_{n\ell} \sim r^\ell$ 3) pro velké r exponenciální pokles

– reálné kombinace orbitalů s $\pm m$: $\psi \sim Y_{\ell m} \pm Y_{\ell,-m} \rightarrow \varphi$-závislost $\cos m\varphi$ nebo $\sin m\varphi$ Př. $2p_x, 2p_y$

4 Spin, interakce nabitých částic s EM polí

- spin **P6** Elektron/proton/neutron nesou spin-$\frac{1}{2}$, tj. vnitřní moment hybnosti popsaný operátory $\hat S_x, \hat S_y, \hat S_z$ splňujícími komutační relace MH ($[\hat S_x, \hat S_y] = i\hbar \hat S_z$ atd.), který je neustále ve vlastním stavu $\hat S^2$ s vlastní hodnotou $\hbar^2 s(s+1)$ s kvantovým číslem $s = \frac{1}{2}$.

– vlastní stavy $\hat S_z$: $\hat S_z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$, $\hat S_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$ obecný stav spinu-$\frac{1}{2}$: $|\chi\rangle = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle$

– spinové operátory v bázi $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$: $\hat S_\alpha = \frac{\hbar}{2}\sigma_\alpha$ Pauliho matice $\sigma_x = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

- interakce náboje částice q s EM polem zachycena v Hamiltoniánu $\hat H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\vec A\right)^2 + q\phi$

(vyjádření EM polí pomocí vektorového a skalárního potenciálu: $\vec B = \nabla\times\vec A$, $\vec E = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec A}{\partial t}$)

- interakce náboje a spinu elektronu s homogenním magnetickým polem do 1. řádu v B

$\hat H_{int} = -\hat{\vec M}\cdot\vec B$, kde $\hat{\vec M} = -\mu_B \frac{1}{\hbar}(\hat{\vec L} + g\hat{\vec S})$ je magnetický moment elektronu (orbitální + spinový)

Bohrův magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ (velikost $\mu_B \approx 58\,\mu eV \cdot T^{-1}$), spinový g-faktor $g \approx 2$

- související jevy: precese magnetického momentu v statickém $\vec{B}$

štěpení degenerovaných hladin v elektrickém / magnetickém poli – **Starkův / Zeemanův jev**

5 Systémy více částic

- vícečásticová vlnová funkce (bez spinu) $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ (pro každou částici sada souřadnic)

interpretace: $|\Psi|^2$ je hustota pravděpodobnosti současného nalezení částic v daných pozicích

- **nerozlišitelné** (identické **částice**): $|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2$ invariantní vůči permutaci argumentů

P7 Stavy identických **bosonů / fermionů** (částice s celočíselným / poločíselným spinem) jsou zcela **symetrické / antisymetrické** vůči záměně dvou částic.

- **nezávislé** částice (bez vzájemné interakce) $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_N$

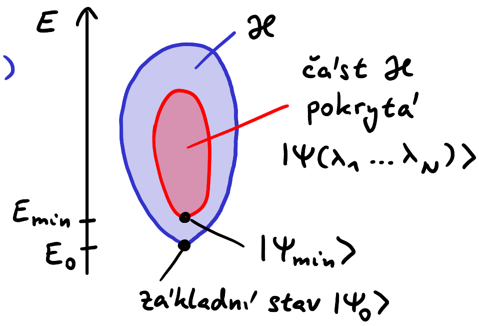
– obsazují hladiny z jednočásticové Sch. r. $\hat{H}_1 \phi_\alpha = E_\alpha \phi_\alpha$, celková energie = součet E_α obsazených hladin

identické bosony: libovolné rozložení bosonů na jednočástic. hladinách (i všechny na jedné)

identické fermiony: maximálně jeden fermion v daném jednočástic. stavu (**Pauliho princip**)

6 Přibližné metody

- variační metoda



1) zvolí se **zkušební stav** $|\Psi(\lambda_1 \dots \lambda_N)\rangle$ nebo vlnová funkce $\Psi(\vec{r}, \lambda_1 \dots \lambda_N)$ s jedním nebo více **variačními parametry** $\lambda_1 \dots \lambda_N$

2) výpočet střední energie $E(\lambda_1 \dots \lambda_N) = \langle \hat{H} \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$

3) **minimalizace** $E(\lambda_1 \dots \lambda_N)$ vzhledem k variačním parametrům

→ odhad základního stavu $|\Psi_{min}\rangle$ a jeho energie E_{min}

- poruchové teorie (PT)

Hamiltonián $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ – **neporušený Hamiltonián** $\hat{H}_0$ se známými vlastními stavy z $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$

+ slabá **porucha** $\hat{W}$ – časově nezávislá / závislá → stacionární / nestac. PT

a) **stacionární** – změny vl. energií a stavů při přechodu $\hat{H}_0 \to \hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}$ zachyceny rozvojí v $\lambda \in [0, 1]$

v 1. řádu PT: $\Delta E_n = \langle n | \hat{W} | n \rangle$ (nedeg. E_n) nebo $\Delta E_n =$ vl. hodnoty matice $\hat{W}$ v bázi degen. stavů s E_n

b) **nestacionární** – postupné přecházení mezi stavy $|n\rangle$ vlivem poruchy, vystiženo pravd. přechodu $P_{n \to m}(t)$

v 1. řádu PT s harmonickou poruchou $\hat{W}(t) = \hat{W} \cos \omega t$, která působí po dlouhý čas a slabě:

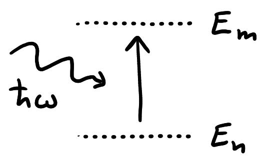
Fermiho zlaté pravidlo $$\frac{d}{dt} P_{n \to m} \sim \underbrace{|\langle m | \hat{W} | n \rangle|^2}_{\text{matic. prvek poruchy mezi výchozím } |n\rangle \text{ a finálním } |m\rangle} \underbrace{[\delta(E_m - E_n - \hbar\omega) + \delta(E_m - E_n + \hbar\omega)]}_{\text{„zachování energie" při přechodu}}$$

Př. interakce s el. polem světelné vlny

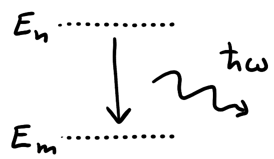
dipólový matic. prvek, např.

$W_{mn} \sim \langle m | \hat{z} | n \rangle$ pro z-polarizaci

→ **výběrová pravidla**



absorpce EM záření



emise stimulovaná EM polem