

Ko iščeš ta list, bo s 50% verjetnostjo izginil iz obstoja ali pa razpadel na dva visokoenergijska nevtrina.

### Harmonski oscilator:

Harmosni oscilator opiše hamiltonian  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ .

Lastna stanja imajo energijo  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ ,  $\omega^2 = k/m$

Lastne funkcije (so ONS):  $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$ ,  $H_n$  so Hermitovi polinomi,  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ .

Velja še:  $x\psi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}x_0\psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}x_0\psi_{n-1}$  Verjetnostni tok:  $j = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x})$

Če  $\psi = \sum_n a_n \psi_n$ , je  $a_n = \langle \psi_n, \psi \rangle$ , veljati mora  $\sum_n |a_n|^2 = 1$ , povprečna energija je  $E = \sum_n |a_n|^2 E_n$  (in je neodvisna od časa). Verjetnost, da pri meritvi izmerimo energijo  $E_k$  je enaka  $|a_k|^2$ .

$\langle k | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{k,n+1})$ ,  $\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2})$

**Hermitovi polinomi:**  $H_{2n}$  so sodi,  $H_{2n+1}$  so lihi.

Velja:  $H_n''(u) - 2uH_n'(u) + 2nH_n(u) = 0$ ,  $H_n'(u) = 2nH_{n-1}(u)$ ,  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(u) H_m(u) du = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m}$ .

Rekurzivna zveza:  $H_{n+1}(u) = 2uH_n(u) - H_n'(u)$ , eksplicitni izraz:  $H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} = (2u - \frac{d}{du})^n 1$   
 $H_0 = 1, H_1 = 2u, H_2 = 4u^2 - 2, H_3 = 8u^3 - 12u, H_4 = 16u^4 - 48u^2 + 12, H_5 = 32u^5 - 160u^3 + 120u$ .

$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y) \exp(-y^2 + yy_0 - \frac{y_0^2}{2}) dy = \sqrt{\pi} y_0^n \exp(\frac{-y_0^2}{4})$

### 3D (vrtilna količina):

$\hat{\mathbf{p}}\psi = -i\hbar\nabla\psi$ ,  $\hat{\mathbf{r}}\psi = (x\psi, y\psi, z\psi)$ ,  $\hat{T} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2$ ,  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ . Predpostavimo  $V = V(r)$ .  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}, x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ .

Velja:  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$  in ciklično.  $[L^2, L_i] = 0$ .

V sferičnih koordinatah:  $x = r \cos \varphi \sin \vartheta, y = r \sin \varphi \sin \vartheta, z = r \cos \vartheta, dV = r^2 \sin \vartheta$

$L_x = -i\hbar\left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$ ,  $L_y = -i\hbar\left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$ ,  $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ,

$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)$

Lastne funkcije:  $Y_{\ell m}$ , lastne vrednosti za  $L^2$  so  $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ , za  $L_z$  pa  $\hbar m$ , za  $\ell = 0, 1, 2, \dots, m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$ . Te funkcije so ortonormirane glede na integral po površini sfere.

### Atom vodika:

Potencial  $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\alpha\hbar c}{r}$ . Rzstavimo tudi kinetično energijo:  $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_r + \frac{\hat{L}^2}{r^2})$

Lastne funkcije (so ONS)  $\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ ,  $n = 1, 2, \dots, \ell = 0, \dots, n-1, m_l = -\ell, \dots, \ell$ .

Lastne vrednosti:  $E_n = -E_{ry} \frac{1}{n^2}$ , kjer  $E_{ry} = \frac{m_e c^2 \alpha^2}{2} = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \approx 13.6 eV$ .

Velja:  $\int R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) r^2 dr = \delta_{nn'} \delta_{ll'}$  in  $\int Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ , kjer  $d\Omega = d(\cos \vartheta) d\varphi$ .

**Radialni del:**  $R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{nr_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ , kjer je  $\rho = \frac{2r}{nr_B}$ .

Bohrov radij  $r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar c}{m_e c \alpha}$

Povprečje potencialne enegrije:  $\langle V \rangle = -\alpha\hbar c \langle \frac{1}{r} \rangle$ , po Bohrovo pa isto, le da velja  $r_n = n^2 r_B$  in  $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{n^2 r_B}$ ,  $n$  je stanje v katerem smo. Izkaže se:  $\langle V \rangle_{nlm} = -\frac{\alpha\hbar c}{n^2 r_B}$  za vse  $n, l, m$ .

Velja tudi:  $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{r_B n^2}$ ,  $\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{2}{r_B^2 n^3 (2\ell+1)}$ ,  $\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{2}{r_B^3 n^3 \ell(\ell+1)(2\ell+1)}$ , v osnovnem stanju:  $\langle r^p \rangle = \frac{r_B^p}{2^{p+1}} (p+2)!$

Virialni teorem (klasična mehanika): Za potencial oblike  $V = \#r^p$  velja  $2\langle T \rangle = p\langle V \rangle$ . Velja tudi za osnovno stanje vodikovega atoma.

Če računamo  $\langle r \rangle$ , so koristni "matrični elementi"  $\langle i | r | j \rangle = \int R_i^* r R_j r^2 dr$ . Velja:  $\langle 1 | r | 1 \rangle = \frac{3}{2} r_B$ ,  $\langle 1 | r | 2 \rangle = \langle 2 | r | 1 \rangle = -\frac{2^5 \sqrt{2}}{3^4} r_B \approx -0.5 r_B$ ,  $\langle 2 | r | 2 \rangle = 6 r_B$ .

Ehrenfestov teorem: Za operator  $\mathcal{O}$  velja  $\frac{d\langle \mathcal{O} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathcal{O}, H] \rangle + \langle \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t} \rangle$ . V posebnem to pomeni  $\frac{d\langle r \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}$ ,  $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle$ .

**Sferični harmoniki:**  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$ .

$\langle l'm' | \mathcal{O} | lm \rangle = \int Y_{l'm'}^* \mathcal{O} Y_{lm} d\Omega$ .

$\langle l'm' | \hat{L}_x | lm \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \delta_{l'l} \delta_{m', m \pm 1}$

$\langle l'm' | \hat{L}_y | lm \rangle = \mp \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \delta_{l'l} \delta_{m', m \pm 1}$

$$\begin{aligned}\langle l'm'|\hat{L}_z|lm\rangle &= \hbar m_l \delta_{l'l} \delta_{m'm} \\ \langle l'm'|\hat{L}^2|lm\rangle &= \hbar^2 l(l+1) \delta_{l'l} \delta_{m'm}\end{aligned}$$

### Spin:

Ko postavimo vodikov atom v magnetno polje, ugotovimo da potrebujemo še spin. Definiramo ga analogno vrtilni količini in označimo s  $s$ . Sedaj imamo lastne funkcije:  $\psi_{n\ell m_\ell s m_s}$ .  $s$  je za elektron enak  $1/2$ ,  $m_s$  pa teče od  $-s$  do  $s$  po koraku 1.

Če delec postavimo v magnetno polje, nanj deluje magnetni moment  $\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2m\hbar}(g_l \hat{l} + g_s \hat{s}) = \mu_B(g_l \frac{\hat{l}}{\hbar} + g_s \frac{\hat{s}}{\hbar})$ , kjer je  $m$  masa delca. Za elektron je  $g_l = -1$ .

Če vzamemo, da magnetno polje deluje le v  $z$ -smeri (in je v tej smeri konstantno), sledi  $F_z = \langle \mu_z \rangle \frac{\partial B}{\partial z}$ , kjer  $\mu_z = \frac{e\hbar}{2m}(-\hat{l}_z + g_s \hat{s}_z)$ .

$s$  igra isto vlogo kot  $l$ , tudi enačbe so enake. Pri danem  $s$  je  $2s + 1$  možnih stanj;  $m_s = -s, -s + 1, \dots, s$ .

$$\langle \hat{s}^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1), \quad \langle \hat{s}_z \rangle = \hbar m_s$$

Za elektron:  $s = \frac{1}{2}$ ,  $g_s = 2$  (slednje je dober približek za vse fermione).

? Hamiltonian popravimo z operatorjem  $H_B = -\hat{\mu}B$  in lahko vzamemo da je polje v  $z$  smeri, torej  $H_{B_z} = -\hat{\mu}_z B_z = \frac{\mu_B B_z}{\hbar} L_z$ . Lastne vrednosti  $\hat{\mu}^2$  so  $\ell(\ell+1)\mu_B$ ,  $\hat{\mu}_z$  pa  $m_\ell \mu_B$ . Ob tem dodatku postane skupna energija  $E_{nm_\ell} = -\frac{E_0}{n^2} + m_\ell \mu_B B$ .

**LS sklopitev:** ( $B = 0$ ) Zaradi interakcije med obema vrtilnima količinama popravimo hamiltonian:

$$\Delta H_{ls} = \frac{\alpha \hbar c}{2m_e^2 c^2} \left( \frac{1}{r^3} \right) \hat{l} \hat{s}.$$

Za izračun lastnih stanj operatorja  $\hat{l} \hat{s}$  je boljša druga baza. (tukaj je  $\hat{l} = \hat{L}$ ) Definiramo skupno vrtilno količino  $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ . velja:  $\langle \hat{j}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1)$ ,  $\langle \hat{j}_z \rangle = \hbar m_j$ , kjer  $j$  teče od  $|\ell - s|$  do  $\ell + s$  po 1. Število  $m_j$  kot vedno teče od  $-j$  do  $j$ . S kvadriranjem  $j$  dobimo  $\hat{l} \hat{s} = \frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)$ . Če je  $\ell = 0$ , potem ni sklopitve.

Lastne vrednosti so  $\langle \hat{l} \hat{s} \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))$ . S to formulo poračunaš  $\langle ls \rangle$  za vse možne kombinacije  $n, l, j$  ( $s = 1/2$ ) in nato vsakega posebej vstaviš v  $\Delta E_{ls}$ .

Pretvorba:  $\psi_{n\ell m_\ell s m_s} = \sum c_{\ell m_\ell s m_s}^{ls j m_j} \psi_{n\ell s j m_j}$ . Koeficiente preberemo iz tabele (pozor, v tabeli so vsi skvadri-rani!!). Verjetnost, da neko stanje izmerimo, je ustrezni koeficient na kvadrat.

**Močno magnetno polje:** (ne rabimo iti v novo bazo) Razcep  $\Delta E = \mu_B(m_\ell + 2m_s)B_z$ .  $B > 1/6T$ , da smo c tem približku. V osnovnem stanju:  $\Delta E = \pm \mu_B B$ .

**Šibko magnetno polje:** (rabimo novo bazo) Razcep  $\Delta E = \langle H_B \rangle = \frac{\mu_B}{\hbar} B_z (\langle l_z \rangle + 2 \langle s_z \rangle)$ .

$$\langle s_z \rangle = \frac{\langle j_z \rangle \langle s_j \rangle}{\langle j^2 \rangle}, \quad \langle s_j \rangle = \frac{1}{2}(j^2 + s^2 - l^2), \quad \langle l_z \rangle = \frac{\langle j_z \rangle \langle l_j \rangle}{\langle j^2 \rangle} = \frac{\langle j_z \rangle \langle j^2 - s_j \rangle}{\langle j^2 \rangle}$$

$$\Delta E = \mu_B B_z m_j g_j, \quad \text{kjer } g_j = 1 + \frac{\langle j^2 + s^2 - l^2 \rangle}{2 \langle j^2 \rangle} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

**Perturbacije:**  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_1$

$|n\rangle$   $n$ -to stanje  $H$ ,  $|n_0\rangle$   $n$ -to stanje od  $H_0$ ,  $|n_i\rangle$   $n$ -to stanje v  $i$ -tem redu perturbacije;  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \varepsilon |n_1\rangle + \varepsilon^2 |n_2\rangle + \dots, \quad E_n = E_{n0} + \varepsilon E_{n1} + \varepsilon^2 E_{n2} + \dots$$

$$\text{POPRAVEK 1. REDA: } E_{n1} = \langle n_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle, \quad |n_1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle}{E_{n0} - E_{m0}} |m_0\rangle$$

$$\text{POPRAVEK 2. REDA: } E_{n2} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle|^2}{E_{n0} - E_{m0}} \quad (\text{vedno pride } < 0)$$

**Neharmonski operator:** V vsakem primeru uvedemo  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar} x_0 p)$ ,  $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{x_0} - \frac{i}{\hbar} x_0 p)$ ,  $n = a^+ a$ ,  $n + 1 = a a^+$ . Velja  $[x, p] = i\hbar$ ,  $[a, a^+] = 1$ ,  $\frac{x}{x_0} = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}$ .

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$$

$$H_0 = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2)$$

Če je  $H_1 = \varepsilon_4 \hbar\omega (\frac{x}{x_0})^4 = \varepsilon_4 \hbar\omega \frac{1}{\sqrt{2}^4} (\hat{a} + \hat{a}^+)^4$ , dobimo  $E_{n1} = \frac{3\varepsilon_4 \hbar\omega}{2} (n^2 + n + \frac{1}{2})$  (ostanejo le členi, kjer je enako število  $a$  in  $a^+$ ), to je dober približek, dokler  $E_{n0} > E_{n1}$ .

Če  $H_1 = \varepsilon_3 \hbar\omega (\frac{x}{x_0})^3 = \varepsilon_3 \hbar\omega \frac{1}{\sqrt{2}^3} (\hat{a} + \hat{a}^+)^3$ , je  $E_{n1} = 0$  in  $E_{n2} = -\frac{\hbar\omega\varepsilon_3^2}{8} (30(n+1)n + 11)$  (smiselni  $m$ -ji so le  $n-3, n-1, n+1, n+3$ , ker  $a$  in  $a^+$  ravno dvigata/spuščata stanja).