# Vrtilna količina

Vpeljemo **operator vrtilne količine** kot

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p};\ \ \vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

Operator vrtilne količine je hermitski (kar zgleda trivialno ampak ni)

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -\vec{p} \times \vec{r} = \vec{L}^\dagger$$

Koristen je tudi kvadrat operatorja vrtilne količine

$$\vec{L}^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p})(\vec{r} \times \vec{p}) = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L^2$$

## Lastnosti

i. $[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma$ npr. $[L_x, L_y]$
ii. $[L_\alpha, A_\beta] = i\hbar\epsilon\_\alpha\beta\gamma A_\gamma$ kjer je $\vec{A} = \vec{r}, \vec{p}, \vec{L}$,…
iii. $[\vec{L}, \hat{A}] = 0$ če je $\hat{A} = konst., r^2, p^2, L^2$
iv. **Lestvični operatorji (ladder operator)**
So analog kreacijskemu in anhilacijskemu operatorju pri LHO. Definiramo ju kot

$$L_\pm = L_x \pm iL_y = (L_\mp)^\dagger$$
$$[L^2, L_\pm] = 0$$

Velja pa še

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$$

in pa

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_Z$$

Kar dobimo preprosto iz

$$L_+L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 + iL_yL_x - iL_xL_y = \Big| + L_z^2 - L_z^2$$
$$= L^2 + \hbar L_z - L_z^2 \ \ \Rightarrow L_\pm L_\mp = L^2 \pm L_z - L_z^2$$

## Lastne vrednosti $L_z, L^2$

To bi lahko rešili čisto običajno ampak raje naredimo to kot smo pri LHO samo tukaj z lestvičnimi operatorji.

Velja

$$L_zL_\pm|m\rangle = (L_+L_z \pm \hbar L_\pm)|m\rangle = (m \pm 1)\hbar L_+|m\rangle \propto |(m \pm 1)\rangle$$

Torej $L_+, L_-$ zvišujeta/znižujeta lastno vrednost. Vemo še

$$[L^2, L_z] = 0$$

$$L^2|m\rangle = \lambda|m\rangle;\ \lambda \in \mathbb{R}\ \text{ker je}\ L^2\ \text{hermitski}$$

$$\langle m|L^2|m\rangle = \left\langle m\left|\sum_\alpha L_\alpha^2\right|m\right\rangle = \sum_\alpha \langle L_\alpha m|L_\alpha m\rangle \geq 0 \text{ ker je to } norma \text{ vektorja}$$

Torej je

$$\lambda\langle m|m\rangle \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0$$

Operator $L^2$ je semipozitivno definiten. $L^2 L_\pm|m\rangle = L_\pm L^2|m\rangle = \lambda L_\pm|m\rangle$. Lastne vrednosti so

$$L^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle$$

$$L_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$$

## Omejitev za m in lastne vrednosti $L_\pm$

Poglejmo si

$$\langle L_+\psi_{lm}|L_+\psi_{lm}\rangle = \langle\psi_{lm}|(L_+)^\dagger L_+|\psi_{lm}\rangle = \langle\psi_{lm}|L_-L_+|\psi_{lm}\rangle \geq 0$$

$$\langle lm|L_\mp L_\pm|lm\rangle = \langle lm|L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z|lm\rangle = (l(l+1)\hbar^2 - m(m\pm 1)\hbar^2)\langle lm|lm\rangle \geq 0$$

Torej mora biti $(l(l+1)\hbar^2 - m(m\pm 1)\hbar^2) \geq 0$.

Če je $m \geq 0; l \geq 0: m(m+1) \leq l(l+1) \Rightarrow m \leq l$
Če je $m \leq; l \geq 0 \Rightarrow -m \geq -l$

$$\Rightarrow |m| \leq l$$

Hkrati smo pa tudi ugotovili

$$L_\pm|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}|l, m\pm 1\rangle$$

## Kakšni so l?

Vzemimo največji možen m

$$L_-|ll\rangle = C_{l,l-1}|l, l-1\rangle$$

$$L_-L_-|ll\rangle = C_{l,l-2}|l, l-2\rangle$$

$$\vdots$$

$$L_-^k|ll\rangle = C_{l,l-k}|l,, l-k\rangle$$

Naredimo to tolikokrat da je projekcija $l - k = -l$. Torej je $2l = k$ in smo ugotovili

$$l = \frac{k}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$$

### *Zakaj ima pa vodik le celoštevilske $l$?*

Naj bo $\psi_{lm} = Ce^{im\varphi}$ in $\psi(\vec{r})$ vodikova valovna funkcija. Radi bi zahtevali zveznost $\psi_{lm}$ torej mora veljati

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} \Rightarrow e^{im2\pi} = 1 \Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

*Kakšne pa so rešitve $\psi_{lm}$?*

Rešitve so sferični harmoniki $Y_l^m(\theta, \phi)$.

## Zapis operatorja L z matriko

Razvijemo $|\psi\rangle$ po sferičnih harmonikih

$$|\psi\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{lm}|lm\rangle$$

na njo lahko delujemo z operatorjem, ki je prav tako zapisan v isti bazi. Operator lahko zapišemo kot

$$L_+ = \sum_{ll',mm'} |l'm'\rangle (L_+)_{l'l,m'm} \langle lm|$$

kjer je $(L_+)_{l'l,m'm} = \langle l'm'|L_+|lm\rangle$ **matrika matričnih elementov**. Za operator $L_+$ je

$$(L_+)_{l'l,m'm} = \left\langle l'm' \left| \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \right| l, m+1 \right\rangle \delta_{l'l}\delta_{m'm}$$

Torej je

$$L_+|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & 0 & & & & & \\ & 0 & 0 & \sqrt{2} & & & & & \\ & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ & & & & 0 & \sqrt{4} & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_{00} \\ c_{11} \\ c_{10} \\ c_{1-1} \\ c_{22} \\ c_{21} \\ c_{20} \\ c_{2,-1} \\ c_{2,-2} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

# Centralni potencial $V(r)$

Imamo hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

in je **invarianten na rotacije v prostoru.**

$$[H, \vec{L}] = 0 \qquad \vec{r} \cdot \vec{L} = 0$$

$$[H, L^2] = 0 \qquad \vec{p} \cdot \vec{L} = 0$$

Laplace v sferičnih koordinatah je

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + (\theta, \varphi) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)$$

Ker se $H$ razstavi na vsoto radialnega in kotnega dela lahko vzamemo nastavek

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r) Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Rešujemo kot vedno $H\Psi = E\Psi$ oz.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\, r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)\psi(r) + \left(V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)\psi(r) = E\psi(r)$$

kjer definiramo

$$V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) = V_{cfg}(r) + V(r)$$

Vzamemo splošen nastavek

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

To vstavimo in poračunamo in se nam SE poenostavi na enačbo za $u(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}u(r) + V_{eff}(r)u(r) = Eu(r)$$

## Rešitev za $r \to 0$

Omejimo se na limito $\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$. Dodatno zanemarimo energijo $E$, ki je končna in v primerjavi s centrifugalnim delom zanemarljiva. Dobimo

$$\frac{d^2u(r)}{dt^2} = \frac{l(l+1)}{r^2}u(r)$$

Za $l > 0$ nam jo reši nastavek $u(r) = Cr^\lambda$

$$\lambda(\lambda-1) = l(l+1) \to \lambda_{1,2} = l+1, -l$$

$$\Rightarrow u(r) = C_l r^{l+1} + \frac{D_l}{r^l}$$

Takoj lahko postavimo $D_l = 0$ da lahko funkcijo sploh normiramo. To ne velja pri $l = 0$ sicer. Takrat je

$$\lim_{r\to 0} u(r) = D_0 \Rightarrow \psi(r) = C_0 + \frac{D_0}{r}$$

Iz analogije Poissonove enačbe za potencial točkastega naboja v elektrostatiki vemo, da je $\psi$ rešitev enačbe

$$\nabla^2\psi(\vec{r}) = -4\pi D_0 \delta^3(\vec{r})$$

Torej funkcija $1/r$ ni rešitev SE, saj v izhodišču ni potenciala $\propto \delta^3(\vec{r})$. Zato je $D_l = 0$ za vsak 0 in je rešitev le

$$\psi(r) = C_l r^l$$

## Rešitev za $r \to \infty$

### Za kontinuumska stanja $E > 0$

Predpostavimo spet $V(r) \to 0$. Privzemimo, da je potencial povsem zanemarljiv za neke $r > r_0$in iščemo asimptotske rešitve, v katerih je tudi centrifugalni odboj zanemarljiv.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}u(r) = Eu(r)$$

Rešitev je prosti val

$$u(r) = C_+ e^{ikr} + C_- e^{-ikr}; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

### Za vezana sanja $E < 0$

Z pogojem $\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0$ je rešitev poznana

$$u(r) = D_- e^{-\kappa r} + D_+ e^{\kappa r}; \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Da to lahko normiramo postavimo $D_+ = 0$.

## Povzetek

Tako se rešitev centralnega potenciala vede kot

$$u(r) = r^{l+1} v(r) e^{-\kappa r}$$

kjer je $r^{l+1}$ za majhne razdalje, $e^{-\kappa r}$ za velike razdalje in $v(r)$ za vse vmes.

# Coulombski potencial

Iščemo lastne energije $E < 0$ in lastne funkcije $u(r)$ enačbe

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)u(r) = Eu(r)$$

Vpeljemo brezdimenzijsko koordinato $\rho = \kappa r$ in $|E| = \frac{\kappa^2\hbar^2}{2m}$ in tako prepišemo v

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{me_0^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{\rho}\right)u(\rho) = -u(\rho)$$

in nato v

$$u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u + \frac{\rho_0}{\rho}u - u = 0; \quad \rho_0 = \frac{me_0^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}$$

Valovno funkcijo zapišemo z nastavkom za vezana stanja, ki smo ga izpeljali prej

$$u(\rho) = \rho^{l+1} v(\rho) e^{-\rho}$$

Z odvodi nastavka izrazimo $u'$ in $u''$ in jih vstavimo v enačbo in ven pride

$$\rho v'' + 2(l+1-\rho)v' + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)v = 0$$

To rešimo z Frobeniusovo metodo (MAT4)

$$v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho_0$$

izrazimo še odvoda z vrsto in vstavimo vse skupaj, da dobimo.

$$\sum_{k=}^{\infty} \rho^k \left[\big(k(k+1) + 2(l+1)(k+1)\big)c_{k+1} + \Big(-2k + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)\Big)c_k\right] = 0$$

Tako dobimo rekurzivno zvezo

$$c_{k+1} = \frac{2(k+l+1)}{(k+1)(k+2l+2)} c_k$$

Poglejmo si limito za $k \gg 1$. Takrat se rekurzivna zveza spremeni v rekurzivno zvezo eksponentne funkcije.

$$c_{k+1} = \frac{2}{k} c_k$$

Kar smo ugotovili je torej

$$u(\rho) \to e^{2\rho} \;\; (\rho \to \infty, k \to \infty)$$

Da stvar lahko normaliziramo se mora vrsta ustaviti pri nekem $k_{maks}$. Vzamemo

$$2(k_{maks} + l + 1) - \rho_0 = 0 \Rightarrow c_k = 0; k > k_{maks}$$

kjer je $k_{maks} + l + 1 = n$ **glavno kvantno število**. Tako tudi vidimo, da je $\rho_0 = 2n = 2{,}4{,}6, \ldots$ Iz $\kappa$ izrazimo energijo in dobimo

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m e_0^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2\rho_0^2}$$

Rezultat je torej **Bohrova formula** za energijske nivoje v vodikovem atomu. Lastne energije so odvisne od $n$ in ne tudi od $l$.

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}; n = 1{,}2{,}3, \ldots$$

## Degeneracija

Imamo degeneracijo zaradi različnih načinov, kako lahko pridemo do celotne vrednosti tirne vrtilne količine. To nam da n-kratno degeneracijo. Dodatna degeneracija pa pride od projekcije vrtilne količine. Torej vsaki energiji ustreza $n^2$ stanj.

### Kvantni Laplace-Runge-Lenzov vektor

Visoka stopnja degeneracije $E_n$ kaže na obstoj dodatne ohranjene količine, ki je v tem primeru ravno $\vec{A}$. Izraz je enak kot za klasični LRL vektor

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\left(\vec{p}\times\vec{L}+\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)^{\dagger}\right)-\frac{me_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{r}$$

ki je sicer *hermitiziran* ker velja

$$\vec{p}\times\vec{L}\neq\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)^{\dagger}=-\vec{L}\times\vec{p}$$

V vodikovem atomu torej obstajajo naslednje ohranitvene zveze

$$\left[\vec{L},H\right]=0\quad\left[L^2,H\right]=0\quad\left[\vec{A},H\right]=0$$

in $\vec{A}\cdot\vec{L}=\vec{L}\cdot\vec{A}$ ki pomeni, da leži LRL vektor v ravnini elipse. Logično, ker je sorazmeren s polosjo elipse.

## Nabit delec v magnetnem polju

Newtonova enačba za nabit delec v EM polju je

$$m\ddot{\vec{r}}=e\vec{E}+e\vec{v}\times\vec{B}$$

To je tudi ustrezna enačba gibanja Hamiltonove funkcije

$$H=\frac{\left(\vec{p}-e\vec{A}\right)^2}{2m}+e\phi(\vec{r})$$

Pri čemer sta $A$ in $\phi$ vektorski in skalarni potencial, ki določata polji.

$$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$$

$$\vec{E}=-\nabla\phi-\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}$$

Ustrezna SE je

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-e\vec{A}\right)^2\Psi+e\phi\Psi$$

Pri izvrednotenju kvadrata upoštevamo da členi delujejo na funkcijo

$$\left(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla\right)\Psi=\nabla\cdot\left(\psi\vec{A}\right)+\vec{A}\cdot\nabla\Psi=\Psi\left(\nabla\cdot\vec{A}\right)+2\vec{A}\cdot\nabla\Psi$$

Torej imamo SE

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\Psi+i\frac{\hbar e}{m}\vec{A}\cdot\nabla\Psi+\left(i\frac{\hbar}{2m}\left(\nabla\cdot\vec{A}\right)+\frac{e^2}{2m}A^2+e\phi\right)\Psi$$

Običajno delamo v Coulombovi umeritvi brezizvornega vektorskega potenciala $\nabla\cdot A=0$.

## Zeemanova sklopitev

V SE so prisotni tudi prvi krajevni odvodi valovne funkcije, ki predstavljajo bistven del sklopitve delca z magnetnim poljem. Imejmo $\vec{B} = konst.$. Vektorski potencial ki ustreza je

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B} \quad \nabla \cdot \vec{A} = 0 \quad \nabla \times \vec{A} = \vec{B} = (0,0,B)$$

Z uporabo vektorskih zvez in identitet izpeljemo

$$i\frac{\hbar e}{m}\vec{A} \cdot \nabla\Psi = -i\frac{\hbar e}{2m}\left(\vec{r} \times \vec{B}\right) \cdot \nabla\Psi = i\frac{\hbar e}{2m}(\vec{r} \times \nabla) \cdot \vec{B}\Psi = -\frac{e}{2m}\vec{B} \cdot \vec{L}\Psi$$

Skladno s klasičnim izrazom vpeljemo **operator magnetnega dipolnega momenta**

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m}\vec{L}$$

in **Bohrov magneton** $\mu_B = |e_0|\hbar/2m_e$. Linearna sklopitev tirnega gibanja delca z magnetnim poljem je znana kot **normalna Zeemanova sklopitev**

$$H_{Zeeman} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Kvadratna sklopitev delca s poljem predstavlja samo dodaten potencial odvisen od izbire umeritve $\vec{A}$. V našem primeru predstavlja osno simetričen harmonski oscilator

$$\frac{e^2}{2m}\vec{A} \cdot \vec{A} = \frac{e^2}{8m}\left(B^2r^2 - \left(\vec{B} \cdot \vec{r}\right)^2\right) = \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2)$$

in $H = \frac{p^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} + e\phi + \frac{e^2B^2}{8m}(x^2 + y^2)$

Kvadratna sklopitev je v atomu zanemarljiva, ampak je pa pomembna v obravnavi delca v homogenem magnetnem polju.

## Landauovi nivoji

Kljub temu, da je $\vec{B} = B\hat{e}_z$ invarianten na translacije v $xy$ ravnini in na rotacije je nenavadno to, da ne obstaja vektorski potencial $\vec{A}$, ki bi bil hkrati invarianten na obe ti transformaciji. Zato tudi Hamiltonov operator ni translacijsko invarianten in ustrezne rešitve so odvisne od umeritve vektorskega potenciala.

Zapišimo vektorski potencial $\vec{A}$, ki je translacijsko invarianten glede na smer $x$, kar imenujemo **Landauova umeritev**

$$\vec{A} = B(-y, 0,0) \Rightarrow \nabla \times \vec{A} = (0,0,B)$$

Prednost je, da se dvodimenzionalni problem poenostavi na enodimenzionalnega. SE

$$\frac{1}{2m}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + eBy\right)^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\Psi + e\phi\Psi = E\Psi$$

je Landau reševal z nastavkom

$$\Psi(\vec{r}) = \exp\left(i\,\left(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_z}{\hbar}z\right)\right)\chi(y)$$

Naj bo električen potencial odvisen samo od koordinate $y$: $\phi(\vec{r}) = \phi(y)$. Upoštevamo dejstvo, da je delovanje funkcije operatorja na lastni vektor kar množenje s funkcijo lastne vrednosti

$$f\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{\frac{ip_x}{\hbar}x} = f(p_x)e^{\frac{ip_x}{\hbar}x}$$

Od tod sledi 1D SE s potencialom $V(y) = e\phi(y) + p_z^2/2m$

$$\frac{1}{2m}\left[(p_x + eBy)^2 - \hbar^2\frac{d^2}{dy^2}\right]\chi(y) + V(y)\chi(y) = E\chi(y)$$

Vpeljemo **ciklotronsko frekvenco $\boldsymbol{\omega = |e|B/m}$** in **magnetno dolžino** $\xi = \sqrt{\hbar/(|e|B)}$, $p_x = \hbar k$ in od $k$ odvisen premik $y_k = -\xi^2 k$. Sedaj lahko prepišemo $H$ v obliko harmonskega oscilatorja z dodatnim potencialom

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(y - y_k)^2\chi(y) + V(y)\chi(y) = E\chi(y)$$

Če je $V = 0$ so rešitve kar premaknenja stanja harmonskega oscilatorja in $\chi_{nk}(y) = \varphi_n(y - y_k)$ in je celotna rešitev podana s

$$\Psi_{nk}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\varphi_n(y - y_k)$$

Tako so lastne energije ali **Landauovi nivoji**

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Ti imajo zelo visoko stopnjo degeneracije, saj vsakemu $n$ ustreza kar kontinuum stanj s $k \in \mathbb{R}$. Ker energija $E_n$ ni odvisna od $k$ je časovni razvoj valovne funkcije, ki jo za dani $n$ razvijemo po $k$ v bazi $\{\Psi_{nk}\}$ trivialna, saj je vsaka linearna kombinacija degeneriranih stacionarnih stanj še vedno stacionarno stanje. Poenostavljen primer je funkcija, razvita po ravnih valovih

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \tilde{\psi}(k)e^{ikx}dk$$

ki ob $t > 0$ ne spremeni svoje oblike

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \tilde{\psi}(k)e^{ikx - i\,E/\hbar\,t}dk \rightarrow \psi(x, 0)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

## Lokalne umeritvene transformacije

Klasično je rešitev neodvisna od umeritve, tukaj pa ni tako. Radi bi pokazali, da je v glavnem tako tudi v kvantni mehaniki, ampak da pa obstajajo zanimive izjeme. Imejmo še

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda \quad \phi' = \phi - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda$$

Vemo že, da valovnim funkcijam lahko naredimo **globalno transformacijo**

$$\psi_l \to e^{i\delta_l}\psi_l; \;\; \delta_l \in \mathbb{R}$$

in da ta ne vpliva na merljive količine. Naredimo sedaj **lokalno umeritveno transformacijo** (na vsakem $\vec{r}$ je lahko $\delta$ drugačen)

$$\Psi'(\vec{r},t) = e^{i\delta(\vec{r},t)}\Psi(\vec{r},t); \;\; \delta \in \mathbb{R}$$

Vstavimo to v SE

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - e\vec{A}'\right)^2\Psi' + e\phi'\Psi'$$

*Stranski račun*

Posamezne člene izrazimo z uporabo splošnega pravila

$$\left(i\frac{\partial}{\partial x} + f\right)e^{i\delta}\psi = -\left(\frac{\partial\delta}{\partial x}\right)e^{i\delta}\psi + e^{i\delta}i\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + fe^{i\delta}\psi = e^{i\delta}\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \left(f - \frac{\partial\delta}{\partial x}\right)\right)\psi$$

$$\left(i\frac{\partial}{\partial x} + f\right)^2 e^{i\delta}\psi = \left(i\frac{\partial}{\partial f} + f\right)e^{i\delta}\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \left(f - \frac{\partial\delta}{\partial x}\right)\right)\psi = e^{i\delta}\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \left(f - \frac{\partial\delta}{\partial x}\right)\right)^2\psi$$

Iz tega dobimo SE za $\Psi$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \frac{1}{2m}\sum_{\alpha}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - eA'_\alpha + \hbar\frac{\partial\delta}{\partial x_\alpha}\right)^2\Psi + \left(e\phi' + \hbar\frac{\partial\delta}{\partial t}\right)\Psi$$

Izberemo tako $\Lambda = \frac{\hbar}{e\delta}$. Torej se $\Psi'$ po transformaciji $\vec{A} \to \vec{A}'$ izrazi kot

$$\Psi'(\vec{r},t) = e^{\frac{ie}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)}\Psi(\vec{r},t)$$

S tem smo pokazali, da lahko v okviru teh transformacij poljubno izberemo umeritev EM polja. Matrični elementi opazljivk so še vedo invariantni na umeritev

$$\rho' = |\Psi'|^2 = |\Psi|^2 = \rho$$

## Aharonov-Bohmov pojav

Predpostavimo, da v nekem delu prostora ni polja, torej daje tam vektorski potencial brezvrtinčen

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0$$

Zato lahko $\vec{A}$ izrazimo kot gradient skalarnega polja $\vec{A} = \nabla\Lambda$ in velja

$$\Lambda(\vec{r}) = \Lambda(\vec{r}_0) + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} A(\vec{r}')\cdot d\vec{r}'$$

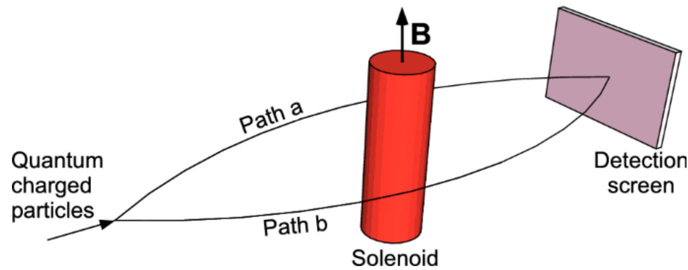
Konstanta $\Lambda(\vec{r}_0)$ predstavlja globalno fazo in jo lahko postavimo na 0. Izhodiščna točka leži nekje v območju, kjer ni magnetnega polja. Valovno funkcijo za to območje izračunamo iz enačbe

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_A}{\partial t}=\frac{\left(\vec{p}-e\vec{A}\right)^2}{2m}\Psi_A+V\Psi_A;\quad \vec{B}=0$$

Lahko pa računamo kar po enačbi pri kateri vektorski potencial ni prisoten, saj v obravnavanem delu prostora ni magnetnega polja.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0=\frac{\vec{p}^2}{2m}\Psi_0+V\Psi_0$$

Obe rešitvi opišeta torej delec za primer, ko ni magnetnega polja. Velja




$$\vec{A}'=\vec{A}+\nabla(-\Lambda)=0$$

in zato je

$$\Psi_A(\vec{r},t)=e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda(\vec{r},t)}\Psi_0=e^{-i\frac{e}{\hbar}\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}A(\vec{r}')\cdot d\vec{r}'}\Psi_0$$

Naj se po žici ob odsotnosti magnetnega polja $\vec{B}=0,\vec{A}=0$ giblje valovni paket, ki se razcepi na dva enaka dela

$$\Psi_I=\Psi_1+\Psi_2$$

Obe amplitudi $\Psi_{1,2}$ se razvijata skozi čas in se na koncu združita nazaj v valovno funkcijo $\Psi_{II}$. Sedaj pa si zamislimo eksperiment, ko to pot prebada magnetno polje $\vec{B}$, ki je omejeno na notranjost navpičnega valja. Elektroni se gibljejo samo po območju kjer je $\vec{B}=0$ ampak $A\neq 0$, zato lahko izrazimo verjetnostno amplitudo v točki II

$$\Psi_{II,B}=e^{i\delta_1}\Psi_1+e^{i\delta_2}\Psi_2$$

$$\delta_1=\frac{e}{\hbar}=\int_{\text{pot }1}\vec{A}(\vec{r})\cdot d\vec{r}$$

$$\delta_2=\frac{e}{\hbar}=\int_{\text{pot }2}\vec{A}(\vec{r})\cdot d\vec{r}$$

Valovni funkciji sta v najboljšem primeru enaki ko velja

$$\Psi_{II,B}=e^{i\delta_2}\left(1+e^{i(\delta_1-\delta_2)}\right)\Psi_1$$

Razlika integralov po obeh poteh poteka po zaključeni zanki in zaradi Stokesovega izreka sledi

$$\delta_1-\delta_2=\frac{e}{\hbar}\oint\vec{A}(\vec{r})\cdot d\vec{r}=\frac{e}{\hbar}\iint_S\nabla\times\vec{A}\cdot d\vec{S}=\frac{e}{\hbar}\iint_S\vec{B}\cdot d\vec{S}=\frac{e}{\hbar}\Phi_B$$

Fazna razlika je torej sorazmerna z magnetnim pretokom v valju. Izračunajmo razmerje med električnim tokom ko je polje $I_B$ in ko ga ni $I$

$$\frac{I_B}{I}=\frac{\left|\Psi_{II,B}\right|^2}{|\Psi_{II}|^2}=\frac{1}{4}\left|1+e^{i\frac{e}{\hbar}\Phi_B}\right|^2=\cos^2\frac{e}{2\hbar}\Phi_B$$

To je **Aharonov-Bohmov pojav** (odvisnost toka od magnetnega pretoka)

Pogoj za maksimum je

$$\frac{e}{2\hbar}\Phi_B = \pi n \Rightarrow \Phi_B = \frac{nh}{e}$$

Iz tega se lahko naredijo zelo natančne sonde za merjenje magnetnega polja.

## Spin

Vse osnovne zveze poznamo že iz obravnave vrtilne količine razen da bomo tu puščali polovične spine in bomo videli, kam pridemo. **Operator spina** vpeljemo kot

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

Velja tudi

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$$

Tako kot prej sta pomembna tudi **lestvična operatorja**

$$S_\pm = S_x \pm iS_y = S_\mp^\dagger$$

ki dvigata ali znižujeta stanja po pravilu

$$S_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}|s, m\pm 1\rangle$$

V primeru vrtilne količine s polovičnimi vrednostmi ne obstajajo lastni vektorji v koordinatni reprezentaciji. Kvantna stanja so **spinorji**, $(2s+1)$-terice v $\mathbb{C}^{2s+1}$ in so v uporabi zelo različne oznake.

$$|sm_s\rangle = |sm\rangle = \left|\frac{1}{2}m\right\rangle = |m\rangle = \begin{cases}|\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle\end{cases}$$

Stanja $|sm\rangle$ so lastna projekcije $S_z$ in $S^2$. Velja tako kot prej

$$S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle$$

$$S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle$$

Podrobneje si bomo pogledali $s = 1/2$ zato **od tu dalje to velja**. Torej imamo bazo $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. Bazna vektorja sta povezana z $S_\pm$ saj velja

$$S_+|\downarrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle \quad S_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$$

Poglejmo kako lahko posamezne operatorje zapišemo z matrikami. Potrebujemo matrične elemente

$$\langle\uparrow|S_+|\uparrow\rangle = 0 \qquad \langle\uparrow|S_+|\downarrow\rangle = \hbar$$

$$\langle\downarrow|S_+|\uparrow\rangle = 0 \qquad \langle\downarrow|S_+|\downarrow\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad S_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix} = S_-^\dagger$$

$$S_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

Tako lahko izrazimo

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Hitro lahko pokažemo, da velja

$$S_\alpha^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} I$$

Velja tudi

$$\left[S_\alpha, S_\beta^2\right] = 0 \qquad \left[S_\alpha^2, S_\beta^2\right] = 0$$

V splošnem če ne bi gledali samo $s = \frac{1}{2}$ bi pa matrika lestvičnega operatorja zgledala takšna kot pri vrtilni količini

$$S_+|\psi\rangle \to \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & \\ & & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & & & \\ & & 0 & 0 & 2 & 0 & & & \\ & & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & & & \\ & & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ & & & & & & 0 & \sqrt{5} & \cdots \\ & & & & & & 0 & 0 & \cdots \\ & & & & & & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ c_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ c_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} \\ c_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} \\ c_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} \\ c_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} \\ c_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}} \\ c_{\frac{5}{2}\frac{3}{2}} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

## Paulijeve matrike

Najpomembnejši primer je spin $1/2$ in se ga običajno obravnava v okviru Paulijevih matrik $\sigma$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}; \quad \vec{\sigma} = \left(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\right)$$

**Paulijeve matrike**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

predstavljajo prikladno bazo za razvoj poljubne hermitske matrike $2 \times 2$.

### Lastnosti Paulijevih matrik

- $\det \sigma_\alpha = -1$
- $\operatorname{tr} \sigma_\alpha = 0$
- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I = 1$
- $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI$
- $\sigma_\alpha \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} I + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$
- $[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2i\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$
- $\{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} = \sigma_\alpha\sigma_\beta + \sigma_\beta\sigma_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta} I$
- Povezava običajnega vektorja $\vec{a}$ z vektorjem Paulijevih matrik

$$\vec{a} \cdot \vec{\sigma} = \sum_\alpha a_\alpha \sigma_\alpha = (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^\dagger; \quad a_\alpha \in \mathbb{R}$$

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \sum_{\alpha\beta} a_\alpha \sigma_\alpha b_\beta \sigma_\beta = \vec{a} \cdot \vec{b}\, I + i \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} a_\alpha b_\beta \sigma_\gamma$$

Če velja $\vec{a} = \vec{b} = \vec{n}; |\vec{n}| = 1 \;\Rightarrow (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) = I$

## Seštevanje vrtilnih količin

Zanimivi so tudi sistemi, ki jih sestavlja več podsistemov, od katerih ima vsak svojo vrtilno količino. Obravnavajmo vodikov atom. Imamo elektron v orbitalnem stanju z $l = 0$ in drugi delec je proton.

$$|\Psi\rangle = \left|\frac{1}{2} m_e\right\rangle \left|\frac{1}{2} m_p\right\rangle$$

Naj bo spin elektrona $\vec{S}_1$ in spin protona $\vec{S}_2$. Oba operatorja se na običajen način izražata z Paulijevimi matrikami

$$\vec{S}_n = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_n; \;\; n = 1{,}2$$

Vpeljimo še tenzorski produkt. Ta nam omogoča nedvoumni zapis celotne vrtilne količine in ustreznih baznih vektorjev

$$\vec{S} = \vec{S}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{S}$$

$$|\Psi\rangle = |s_1 m_1\rangle \otimes |s_2 m_2\rangle$$

ker je $s_1 = \frac{1}{2} = s_2$ lahko poenostavimo bazo na $|m_1 m_2\rangle$, ki je

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

Ta ima lastnosti, kot bi jih pričakovali. Definiramo projekcijo vrtilne količine v smer $z$ kot

$$S_z = S_{1z} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2z}$$

kjer identiteta nič ne naredi z tistim delom, kateremu pripada.

$$S_z|m_1m_2\rangle = (S_{1z} \otimes I_2)|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle + (I_1 \otimes S_{2z})|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle =$$

$$= (m_1 + m_2)|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

Za operator skupne vrtilne količine veljajo običajne komutacijske zveze (**operatorja komutirata če delata v čisto drugih prostorih**)

$$[S_\alpha, S_\beta] = [S_{1\alpha} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\alpha}, S_{1\beta} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\beta}] =$$

$$= [S_{1\alpha}, S_{1\beta}] \otimes I_2 + I_1 \otimes [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] + 0 + 0 =$$

$$= i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{1\gamma} \otimes I_2 + I_1 \otimes i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{2\gamma} = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$$

To pomeni, da lahko tudi kot posameznih vrtilnih količinah vpeljemo lestvične operatorje

$$S_\pm = S_x \pm iS_y = S_{1\pm} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\pm}$$

Bazni vektorji $\{|m_1m_2\rangle\}$ napenjajo prostor celotne vrtilne količine. So lastna stanja $S_z$, posameznih projekcij in posameznih kvadratov vrtilnih količin. Niso pa lastna za celotno vrtilno količino. Lahko pa uvedemo ustrezna stanja

$$\vec{S}^2|sm\rangle = \hbar s(s+1)|sm\rangle$$

$$S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle$$

$$m = m_1 + m_2 = \{-1, 0, 1\} \Rightarrow s = \{0, 1\}$$

Ta stanja dobimo z razvojem

$$|sm\rangle = \sum_{m_1m_2} c_{m_1m_2}|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

Zanimajo nas koeficienti $c_{m_1m_2}$.

### $s = 1$

a) $m = 1$

$$S^2|11\rangle = 1(1+1)\hbar^2|11\rangle = 2\hbar^2|11\rangle$$
$$S_z|11\rangle = \hbar|11\rangle$$

b) $m = 0$

Stanje z $m = 0$ zgeneriramo z operatorjem $S_-$

$$S_-|11\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}|10\rangle = \sqrt{2}\hbar|01\rangle$$

Naredimo to isto operacijo če na drug način

$$(S_{1-} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2-})|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \hbar|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

Torej mora veljati:

$$\hbar(\,|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) = \sqrt{2}\hbar|10\rangle$$

oz.

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$$

c) $m = -1$
Postopek ponovimo oz. kar uganimo

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

S tem smo določili **tripletna stanja** s $s = 1$. Singletno stanje določimo tako, da ga razvijemo po bazi in upoštevamo, da ima projekcijo vrtilne količine $m_1 + m_2 = 0$.

$$|00\rangle = c_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}|\uparrow\downarrow\rangle + c_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\downarrow\uparrow\rangle$$

Ker imata stanji $|10\rangle$ in $|00\rangle$ razlicen $s$ velja ortogonalnost $\langle 10|00\rangle = 0$. Iz tega velja

$$c_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -c_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$$

Po normalizaciji lahko tako dobimo še **singletno stanje** s $s = 0$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

## Heisenbergova sklopitev

Medsebojna energija dveh delcev z magnetnim momentom je v klasični fiziki znana kot dipolna sklopitev. Najenostavnejši kvantni primer sklopitve dveh delcev s spinom $1/2$ je **Heisenbergova sklopitev**

$$H = J_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

kjer je $J_0$ izmenjalna sklopitvena konstanta. Znova nas zanimajo lastne energije in lastna stanja. Uporabimo zvezo, da izrazimo skalarni produkt

$$\vec{S} \cdot \vec{S} = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

kjer velja $S_1^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$. Tako lahko operator $H$ zapišemo kot

$$H = \frac{J_0}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right)$$

$$H|sm\rangle = \frac{J_0\hbar^2}{2}\left(s(s+1) - \frac{3}{2}\right)|sm\rangle$$

Tako sta lastni energiji (pri vodiku je to tisti hiperfin razcep, kjer prehod iz tripletnega v singletno stanje da 21 cm črto, ki je ključna za astronomska opazovanja)

$$E_s = J_0\hbar^2 \begin{cases} \frac{1}{4}; s = 1 \text{ (triplet)} \\ -\frac{3}{4}; s = 0 \text{ (singlet)} \end{cases}$$

## Clebsch-Gordanovi koeficienti

Seštevamo lahko tudi poljubna operatorja vrtilne količine $\vec{J}_{1,2}$, za katerega veljajo običajne komutacijske lastnosti

$$[J_{n\alpha}, J_{\tilde{n}\beta}] = i\hbar \delta_{n\tilde{n}} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_{n\gamma}$$

Bazo in skupno vrtilno količino zapišemo kot

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

$$\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{J}_2 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

Bazo skupne vrtilne količine lahko zapišemo tudi kot

$$|jm\rangle = |j_1 j_2 j\ m\rangle$$

Recimo za $s = 1, m = 0$ stanje vodika je to $\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\ 1\ 0\right\rangle$. Stanja razvijemo po prejšnji produktni bazi

$$|j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm\rangle$$

kjer je

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm\rangle = C^{jm}_{j_1 m_1, j_2 m_2} \in \mathbb{C}$$

**Clebsch-Gordanov koeficient**. Dodatno velja $m = m_1 + m_2$ zato so koeficienti neničelni samo pri izpolnjeni trikotniški neenakosti

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

# Teorija motenj (perturbacij)

## Rayleigh-Schrödingerjeva metoda za nedegeneriran spekter

Hamiltonov operator naj bo sestavljen iz dveh delov

$$H = H_0 + H_1$$

kjer je $H_0$ ničti približek, $H_1$pa popravek/motnja. Predpostavimo, da so stanja nedegenerirana in ortonormirana

$$H_0 |n^0\rangle = E_n^{(0)} |n^0\rangle \qquad \langle m^0 | n^0\rangle = \delta_{mn}$$

Motnjo parametriziramo kot

$$H_1 = \lambda V$$

kjer je $\lambda$ pomožen brezdimenzijski parameter, po katerem razvijamo $V$ pa poljubni operator. Obravnavamo

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle$$

in želimo lastna stanja in lastne energije razbite po $\lambda$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \cdots$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

Pomnožimo to prvo zvezo za lastno stanje z $\langle n^0|$

$$\langle n^0|n\rangle = 1 + \lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + \cdots$$

Zahtevamo pa normalizacijo $\langle n^0|n\rangle = 1$ oz. to lahko kasneje renormiramo v $\langle n|n\rangle = 1$. Iz tega sledi, da so **vsi popravki ortogonalni na $|\boldsymbol{n^0}\rangle$**. Nastavka za lastno energijo in lastno stanje vstavimo v SE

$$(H_0 + \lambda V)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \cdots) = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \cdots\right)(|n^0\rangle + \lambda|n^1\rangle + \cdots)$$

Ker ta enačba velja za vsak $\lambda$ pogledamo člene pri istih potencah

$\lambda^0$: $$H_0|n^0\rangle = E_n^{(0)}|n^0\rangle$$
$\lambda^1$: $$H_0|n^1\rangle + V|n^0\rangle = E_n^{(0)}|n^1\rangle + E_n^{(1)}|n^0\rangle$$
$\lambda^2$: $$H_0|n^2\rangle + V|n^1\rangle = E_n^{(0)}|n^2\rangle + E_n^{(1)}|n^1\rangle + E_n^{(2)}|n^0\rangle$$
$$\vdots$$

Prva enačba je trivialna, drugo (in vse nadaljnje) pa pomnožimo z $\langle n^0|$. Upoštevamo $\langle n^0|H_0 = E_n^{(0)}\langle n^0|$

$$\Rightarrow E_n^{(0)}\langle n^0|n^1\rangle + \langle n^0|V|n^0\rangle = E_n^{(0)}\langle n^0|n^1\rangle + E_n^{(1)}\langle n^0|n^0\rangle$$

Iz tega sledi, da je **popravek energije v prvem redu** kar **pričakovana vrednost motnje**

$$E_n^{(1)} = \langle n^0|V|n^0\rangle = V_{nn}$$

Enak postopek lahko ponavljamo še z naslednjimi členi in s tem povežemo popravke energije s popravki stanja.

$$E_n^{(j)} = \left\langle n^0|V|n^{j-1}\right\rangle$$

Lastna stanja $H_0$ so bazni vektorji torej lahko vsako popravek razvijemo po njih. Spomnimo se $I = \sum_m |m^0\rangle\langle m^0|$

$$\left|n^j\right\rangle = \sum_{m\neq n} |m^0\rangle\left\langle m^0|n^j\right\rangle$$

Enačbo pri $\lambda^1$ pomnožimo z $\langle m_0|$ in dobimo

$$\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\langle m^0|n^1\rangle = \langle m^0|V|n^0\rangle = V_{mn}$$

iz česar sledi rezultat za koeficiente v razvoju. To je **<u>popravek 1. reda</u>**

$$|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|m^0\rangle$$

S tem je dololčen tudi **popravek energije v drugem redu**

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Torej imamo potenčno vrsto

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^0\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Popravljeno stanje je že normirano do drugega reda. V drugem redu perturbacij se vedno zniža energija osnovnega stanja.

## Degeneriran spekter

Predpostavimo, da so lastna stanja $H_0$ dvakrat degenerirana. Iskana stanja in energije razvijemo tako kot prej

$$H = H_0 + \lambda V$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \cdots$$

$$|n\rangle = c_1 \left|n_1^0\right\rangle + c_2 \left|n_2^0\right\rangle + \lambda |n^1\rangle + \cdots$$

pri čemer upoštevamo, da je obstajata dve stanji za osnovno energijo. Zopet vstavimo vrsti v SE in pogledamo enačbe pri enakih potencah

$\lambda^0$:

$$H_0\left|n_1^0\right\rangle = E_n^{(0)}\left|n_1^0\right\rangle$$
$$H_0\left|n_2^0\right\rangle = E_n^{(0)}\left|n_2^0\right\rangle$$

$\lambda^1$:

$$H_0|n^1\rangle + c_1 V\left|n_1^0\right\rangle + c_2 V\left|n_2^0\right\rangle = E_n^{(0)}|n^1\rangle + E_n^{(1)}\left(c_1\left|n_1^0\right\rangle + c_2\left|n_2^0\right\rangle\right)$$

Sedaj pomnožimo z $\langle n_1^0|$ in dobimo prvo enačbo za koeficienta $c_{1,2}$

$$E_n^{(1)} c_1 = V_{11} c_1 + V_{12} c_2$$

Ponovimo še z $\langle n_2^0|$ in dobimo še

$$E_n^{(1)} c_2 = V_{21} c_1 + V_{22} c_2$$

Dobimo problem lastnih vrednosti

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E_n^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

tako imamo dve možni rešitvi za prvi red popravka energije.

## Od časa odvisna motnja

V primeru časovno odvisne motnje ne iščemo lastnih vektorjev in energij saj ti ne obstajajo. Zanima nas časovni razvoj celotnega kvantnega stanja $|\psi(t)\rangle$. Obravnavamo torej sistem, ki je sestavljen iz od časa neodvisnega in znanega dela $H_0$ in časovno odvisne motnje $V(t)$

$$H(t) = H_0 + \lambda V(t)$$

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

Začetno stanje razvijemo po bazi znanega dela

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle$$

V isti bazi lahko razvijemo tudi stanje ob kasnejšem času

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$$

Te nastavke vstavimo v SE iz katere dobimo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar\sum_n\left(\frac{\partial c_n(t)}{\partial t}e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} - i\frac{E_n}{\hbar}c_n(t)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\right)|n\rangle = \sum_n\big(E_n + \lambda V(t)\big)c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$$

Pomnožimo to enačbo z baznimi vektorji $\langle m|$ iz katerega dobimo

$$i\hbar\frac{\partial c_m(t)}{\partial t}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} + E_m c_m(t)e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} = E_m c_m(t)e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} + \lambda\sum_n\langle m|V(t)|n\rangle e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \lambda\sum_n V_{mn}(t)c_n(t)$$

kjer so časovno odvisni matrični elementi

$$V_{mn}(t) = \langle m|V(t)|n\rangle \exp\left[-i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t\right]$$

Zapišimo rezultate v matrično enačbo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} V_{11}(t) & V_{12}(t) & \cdots & V_{1n}(t) & \cdots \\ V_{21}(t) & V_{22}(t) & \cdots & V_{2n}(t) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \cdots \\ V_{m1}(t) & V_{m2}(t) & \cdots & V_{mn}(t) & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Stanja predstavljajo stolpci $\vec{c}(t)$ in dinamika je določena z

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\vec{c} = \lambda\underline{\underline{V}}(t)\vec{c}(t)$$

Temu se reče interakcijska ali Diracova slika.

## Šibka motnja

Do sedaj smo obravnavali sistem točno. Obravnavajmo sedaj šibko motnjo, ki se začne ob času $t = 0$

$$V(t) = \begin{cases} 0; & t < 0 \\ V(t); & t \geq 0 \end{cases}$$

Predpostavimo, da je začetno stanje sistema eno od lastnih stanj $|\psi(0)\rangle = |m\rangle$ oziroma

$$c_k^{(0)} = \delta_{km}$$

To vstavimo v enačbo kjer potem v vsoti ostane samo en člen

$$i\hbar \frac{\partial c_k^{(1)}}{\partial t} = \sum_n V_{kn}(t) c_n^{(0)}(t) = V_{km}(t) c_m^{(0)}$$

vzamemo $c_m^{(0)} \approx 1$ in koeficienti so tako podani z

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{km}(t')dt$$

Rezultat velja če je motnja šibka $\left|c_k^{(1)}\right| \ll 1$. S tem je stanje $|\psi(t)\rangle$ določeno v prvem redu razvoja po $\lambda$ kot

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \left( c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right) e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} |k\rangle$$

## Fermijevo zlato pravilo

Imejmo motnjo, ki je od časa neodvisen operator $V$, ki se vključi ob času $t = 0$

$$V(t) = \begin{cases} 0; & t < 0 \\ V; & t \geq 0 \end{cases}$$

Začetno stanje sistema je $|m\rangle$ in zanima nas verjetnost, da bo sistem po času $t$ v končnem stanju $|k\rangle$. Matrični element $V_{km} = \langle k|V|m\rangle$ je konstanta in velja

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{km} e^{-i\frac{E_k - E_m}{\hbar}t'} dt' = \frac{V_{km}}{i\hbar} \frac{e^{-i\omega_{km}t} - 1}{-i\omega_{km}}$$

kjer je $\hbar\omega_{km} = E_k - E_m$. Verjetnost za prehod $|m\rangle \to |k\rangle$ je podana z

$$P_{km} = \frac{|V_{km}|^2}{\hbar^2} \frac{\left|e^{-i\omega_{km}t} - 1\right|^2}{\omega_{km}^2} = \frac{|V_{km}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{km}t\right)}{\left(\frac{1}{2}\omega_{km}\right)^2}$$

Ena parametrizacija delta funkcije je

$$\delta_t(x) = \frac{\frac{1}{\pi}\sin^2 xt}{x^2 t}; \qquad \lim_{t\to\infty} \delta_t(x) = \delta(x)$$

Tako imamo torej

$$P_{km} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|V_{km}|^2\delta_t(E_k - E_m)t$$

Da velja razvoj v prvem redu mora veljati $P_{km} \ll 1$. Po dolgem času se $\delta_t$ zoži in preide v $\delta$ torej je v $t \to \infty$

$$P_{km} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{km}|^2\delta(E_k - E_m)t$$

Pomemben je primer, ko je sistem v začetnem stanju v enem od lastnih stanj nezmotenega hamiltoniana in opazujemo prehod v končno stanje. Naj bo v bližini končnega stanje $E_k$ možnih veliko drugih energij. V energijskem intervalu $dE$ naj bo na voljo $dN_{stanj}$ energijskih stanj, kar lahko opišemo z gostoto stanj

$$\rho(E_k) = \frac{dN_{stanj}}{dE_k}$$

Kadar nas ne zanima, v katero končno stanje sistem preide, seštejemo vse možnosti

$$P(t) = \int P_{km}(t)\rho(E_k)dE_k$$

iz česar sledi verjetnost $P(t)$, ki po dolgem času linearno narašča s časom. To pomeni, da je hitrost naraščanja konstantna, kar predstavlja **Fermijevo zlato pravilo**

$$\frac{dP}{dt} = w_{k\leftarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|V_{km}|^2\rho(E_m)$$

## Adiabatne spremembe in kvantne faze

Zamislimo si, da imamo sistem, pri katerem se s časom spreminja nek modelski parameter $\lambda$ in se s tem spreminja tudi Hamiltonov operator $H = H(\lambda(t))$. Obravajmo praktičen primer, kjer imamo delec v osnovnem stanju neskončne potencialne jame z časovno odvisno širino $L(t)$, ki po zelo dolgem času doseže dvojno širino. Časovna sprememba, ki je dovolj počasna, da stanje ves čas ostane v istem kvantnem stanju spremenjenega se imenuje **adiabatna**. Težko je postaviti zahtevo za nek parameter, da bo sprememba adiabatna. Vzemimo

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} \ll \frac{|E_m - E_k|}{\hbar}\lambda(t)$$

kar nam zagotavlja, da je verjetnost za zasedbo vzbujenih stanj med adiabatno spremembo. Obravnavajmo sedaj splošnejši primer, kjer imamo podano $N$-terico parametrov sistema, ki so časovno odvisni

$$\vec{Q} = (q_1, q_2, \dots, q_N), \qquad H = H\left(\vec{Q}(t)\right)$$

Naj bo $|\psi_n(\vec{Q})\rangle$ nedegenerirano lastno stanje za dani $\vec{Q}$

$$H(\vec{Q})|\psi_n(\vec{Q})\rangle = E_n(\vec{Q})|\psi_n(\vec{Q})\rangle$$

Preverimo če je $\Psi_n^0(\vec{r}, t) = \langle\vec{r}|\psi_n(\vec{Q})\rangle$ rešitev SE

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_n^0(\vec{r},t)\rangle \neq H\left(\vec{Q}(t)\right)|\Psi_n^0(\vec{r},t)\rangle$$

**Ni** rešitev. Obravnavajmo zdaj adiabatno spremembo parametrov. Po definicije adiabatne spremembe sistem ves čas ostaja v $n$-tem lastnem stanju $H(\vec{Q})$, vendar je pri lastnem vektorju $|\psi_n(\vec{Q})\rangle$ dopuščena sprememba od časa neodvisne in še neznane faze $\phi_n(t)$. Uporabimo nastavek

$$|\psi_n\rangle = e^{i\phi_n(t)}|\Psi_n^0\rangle$$

To vstavimo v SE iz česar sledi

$$i\hbar\left(i\frac{d\phi_n}{dt}e^{i\phi_n}|\Psi_n^0\rangle + e^{i\phi_n}\ \frac{\partial}{\partial t}|\Psi_n^0\rangle\right) = He^{i\phi_n}|\Psi_n^0\rangle = E_n e^{i\phi_n}|\Psi_n^0\rangle$$

Pomnožimo to sedaj s $\langle\Psi_n^0|$ da dobimo

$$i\hbar\left(i\frac{d\phi_n}{dt}\langle\Psi_n^0|\Psi_n^0\rangle + \left\langle\Psi_n^0\left|\frac{\partial}{\partial t}\right|\Psi_n^0\right\rangle\right) = E_n\langle\Psi_n^0|\Psi_n^0\rangle$$

Ločimo sedaj na dva dela $\phi_n = \theta_n + \gamma_n$ in sicer tako, da velja

$$i\hbar\left(i\frac{d\gamma_n}{dt} + \left\langle\Psi_n^0\left|\frac{\partial}{\partial t}\right|\Psi_n^0\right\rangle\right) = \left(E_n + \hbar\frac{d\theta_n}{dt}\right) = 0$$

Torej velja

$$\theta_n = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'$$

in enačba za drugi del faze je podana kot

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i\left\langle\Psi_n^0\left|\frac{\partial}{\partial t}\right|\Psi_n^0\right\rangle = i\left\langle\Psi_n^0\middle|\frac{\partial\Psi_n^0}{\partial t}\right\rangle$$

Parametri ki definirajo stanje so odvisni od časa zato lahko odvod zapišemo posredno še na drug način

$$\frac{\partial\Psi_n^0}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N}\frac{\partial\Psi_n^0}{\partial q_k}\frac{dq_k}{dt} = \left(\nabla_{\vec{Q}}\psi_n\right)\cdot\dot{\vec{Q}}$$

in fazo kot

$$\gamma_n(t) = \int_0^t i\left\langle\psi_n\middle|\nabla_{\vec{Q}}\psi_n\right\rangle\cdot\dot{\vec{Q}}\,dt = \int_{\vec{Q}(0)}^{\vec{Q}(t)} i\left\langle\psi_n\middle|\nabla_{\vec{Q}}\psi_n\right\rangle\cdot d\vec{Q}$$

Ta v adiabatni limiti ni odvisna od časa, ampak samo od poti, ki jo vektor $\vec{Q}$ izriše v prostoru parametrov, zato imenuje **geometrijska ali Berryjeva faza**. $\theta_n$ pa se imenuje **dinamična faza**.

$$\gamma_{\text{Berry}} = i\oint\left\langle\psi_n\middle|\nabla_{\vec{Q}}\psi_n\right\rangle\cdot d\vec{Q}$$

$$\phi_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt' + \int_{\vec{Q}(0)}^{\vec{Q}(t)} i\left\langle\psi_n\middle|\nabla_{\vec{Q}}\psi_n\right\rangle\cdot d\vec{Q}$$