VI Částice ve 3D

Stavový prostor $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$

ÚSKO: (úplné syst. komutujících oper = různé reprezentace)

1) Operátory polohy: $\vec{X} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ = ÚSKO

→ souřadnicová reprezentace: $\langle x_1, x_2, x_3 | \psi \rangle \equiv \psi(x_1, x_2, x_3) \equiv \psi(\vec{x})$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\vec{x})\, \psi(\vec{x})\, d^3x$$

2) Operátor hybnosti (impulzu) .. $\vec{P} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$ = ÚSKO

transformace $x \leftrightarrow p$: $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \equiv \langle x_1 x_2 x_3 | p_1 p_2 p_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$

↑ vl. fce odp. vl. č. $(p_1, p_2, p_3) = \vec{p}$

→ v x-reprezentaci $\vec{P}\psi(\vec{x}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x})$

→ normalizace k δ: $\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$ $\left[= \delta(p_1 - p_1')\,\delta(p_2 - p_2')\,\delta(p_3 - p_3')\right]$

ověření: $\int d^3\vec{x}\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}(\vec{p}' - \vec{p})} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dx_1}{\hbar}\, e^{i\frac{x_1}{\hbar}(p_1' - p_1)} \int \frac{dx_2}{\hbar}\, e^{i\frac{x_2}{\hbar}(p_2' - p_2)} \int \frac{dx_3}{\hbar}\, e^{i\frac{x_3}{\hbar}(p_3' - p_1)}$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\, 2\pi\delta(p_1' - p_1)\, 2\pi\delta(p_2' - p_2)\, 2\pi\delta(p_3' - p_3) = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

3) Energie a směr hybnosti = ÚSKO

.. volná částice $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\sum_\alpha \hat{p}_\alpha \cdot \hat{p}_\alpha$; $\vec{n} = \frac{\vec{p}}{p}$

platí $[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0 \to [\hat{p}_\alpha, \hat{H}_0] = 0$ $H_0 = f(p_\alpha)$; $\vec{n} = \vec{g}(p_\beta)$

→ vl. funkce $|\vec{p}\rangle$ jsou i vl. fcemi $|E, \vec{n}\rangle$ až na normování:

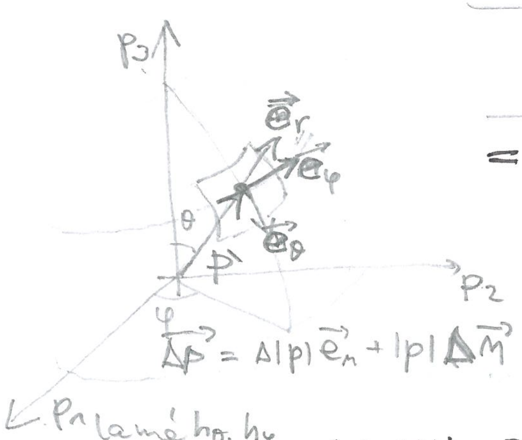
$$\langle E, \vec{n} | E', \vec{n}' \rangle = \delta_2(\vec{n} - \vec{n}')\, \delta(E - E')$$

↑ δ-fce na 1 sféře ↑ δ-fce na $\langle 0, \infty)$

tj $|E, \vec{n}\rangle = N|\vec{p}\rangle$

tj $\langle E, \vec{n} | E', \vec{n}' \rangle = |N|^2 \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') = |N|^2 \delta_1(p_1 - p_1')\, \delta_1(p_2 - p_2')\, \delta_1(p_3 - p_3')$

$\vec{p} = \vec{p}' + \Delta\vec{p} = \vec{p}' + (|p| - |p'|)\vec{e}_n + (\Delta n_\theta \vec{e}_\theta + \Delta n_\varphi \vec{e}_\varphi)\, p$



$\Delta\vec{p} = \Delta|p|\,\vec{e}_n + |p|\,\Delta\vec{n}$

$= \frac{|N|^2}{p^2}\, \delta_2(\vec{n} - \vec{n}')\, \delta(|p| - |p'|)$

↳ $p = \sqrt{2mE}$ $\frac{dp}{dE} = \sqrt{\frac{m}{2E}} = \frac{m}{p}$

$= \frac{|N|^2}{p^2} \cdot \frac{p}{m}\, \delta_2(\vec{n} - \vec{n}')\, \delta(E - E') \longrightarrow N = \sqrt{mp}$

$$\longrightarrow \boxed{|E\,\vec{n}\rangle = \sqrt{mp}\,|\vec{p}\rangle = \sqrt{\frac{pm}{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot\underbrace{\vec{n}\sqrt{2mE}}_{\vec{p}_{E,\vec{n}}}}}$$

Lamého h_θ, h_φ pro $r=1$

$\delta(\vec{n} - \vec{n}') = \delta(\theta - \theta')\, \delta(\sin\theta(\varphi - \varphi'))$

mimochodem: tj: $\int f(\vec{n}')\, \delta(\vec{n} - \vec{n}')\, d\Omega = f(\vec{n})$ = (na sféře) $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(\theta', \varphi')\, \delta(\theta - \theta')\, \frac{\delta(\varphi - \varphi')}{|\sin\theta|}\, \sin\theta'\, d\varphi'\, d\theta' = f(\theta, \varphi)$

QM-C3-2

4) Orbitální moment hybnosti

(do ÚSKO lze přibrat např. E nebo $|\vec{P}|$)

$$\hat{L}_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{Q}_\beta \hat{P}_\gamma \quad \text{tj.} \quad \vec{L} = \vec{x} \times \vec{P}$$

$\hat{Q}_\beta \overset{\shortparallel}{=} x$

+ již dříve jsme ukázali: $[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\gamma$ ... nelze hledat společ. vl. v. L_1, L_2, L_3

~~potom~~ ale $[L^2, L_1] = \underbrace{[L_1^2, L_1]}_{=0} + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1]$

$$= -i\hbar (L_2 L_3 + L_3 L_2) + i\hbar (L_3 L_2 + L_2 L_3) = 0$$

podobně $[L^2, L_\alpha] = 0 \quad \forall \alpha = 1,2,3$

→ standardní volby ÚSKO: $\{\hat{A}, \hat{L}^2, \underbrace{\hat{L}_z}_{=L_3}\}$ kde $\hat{A} = |\hat{p}|$ nebo $\hat{H}_0$

~~operátory L_α, L^2 v x reprezentaci~~

Delší odbočka : Kvantová teorie momentu hybnosti

obecně: sada operátorů splňující $[J_\alpha, J_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} J_\gamma$

→ reprezentace grupy rotací na $\mathcal{H}$; generátory

- def: $J^2 \equiv J_\alpha J_\alpha \quad \longrightarrow \quad [J^2, J_\alpha] = 0$
- ⇒ ∃ sada vl. v. $J^2 |\beta, m\rangle = \hbar^2 \beta |\beta, m\rangle$ ... β, m .. bezrozměrné
  $J_3 |\beta, m\rangle = \hbar m |\beta, m\rangle$ (ještě může být degener. ... další indexy λ_1, λ_2.. potlačíme)
- platí: $\beta = \langle \beta, m | \frac{J^2}{\hbar^2} | \beta, m\rangle = \langle \beta, m | \left(\frac{J_1}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{J_2}{\hbar}\right)^2 + m^2 | \beta, m\rangle \geq 0$

  ≥ 0 ... skal. součin → axiom $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ pro $|\psi\rangle = J_\alpha |\beta m\rangle$

  tj. $\beta \geq m^2 \geq 0$

  → spektrum J_3 je omezené

- posunovací operátory a jejich vlastnosti:

def: $\boxed{\begin{aligned} J_+ &\equiv J_1 + i J_2 \\ J_- &\equiv J_1 - i J_2 \end{aligned}} \equiv J_+^\dagger$ ⇒
$$[J_3, J_+] = i\hbar J_2 - i(i\hbar) J_1 = \hbar J_+ \quad (+)$$
$$[J_3, J_-] = -\hbar J_- \quad (-)$$
$$[J_+, J_-] = i[J_2, J_1] - i[J_1, J_2] = 2\hbar J_3 \quad (+-)$$

- význam J_+ :

$$J_3 (J_+ |\beta m\rangle) = (J_+ J_3 + \underbrace{[J_3, J_+]}_{(+)}) |\beta m\rangle = (\hbar m + \hbar) J_+ |\beta m\rangle$$

→ $J_+ |\beta m\rangle$ je vl. v. J_3 odp. hodnotě $(m+1)$ nebo nulový vektor

pozn: $J_\pm |\beta m\rangle$ zůstávají vl. v. J^2 odpov. vl. č. $\hbar^2 \beta$ neboť $[J^2, J_\pm] = 0$!

- význam J_- :

$$J_3 (J_- |\beta m\rangle) = (J_- J_3 + \underbrace{[J_3, J_-]}_{(-)}) |\beta m\rangle = \hbar (m-1) J_- |\beta m\rangle$$

→ vl. v. J_3 pro $(m-1)$ nebo 0

• maximální hodnota m: $\equiv_{def}\ j$ (existuje ... spektrum J_3 omezené)

musí $\|J_+|\beta,j\rangle\|^2=0$

tj. $\langle\beta j|J_-J_+|\beta j\rangle = \langle\beta j|\underbrace{J_1^2+J_2^2+i(J_1J_2-J_2J_1)}|\beta j\rangle = \hbar^2(\beta-j^2-j)=0$

obecně: $\boxed{J_-J_+ = J^2-J_3^2-\hbar J_3}$ (−+) $\Rightarrow$ $\beta = j(j+1)$

podobně:

• minimální hodnota m: $\equiv k$

$J_-|\beta k\rangle = 0$

$\rightarrow \langle\beta k|J_+J_-|\beta k\rangle = \langle\beta k|\underbrace{J_-J_+ + [J_+,J_-]}|\beta k\rangle = \hbar^2(\beta-k^2+k)=0$

$\boxed{J_+J_- = J^2-J_3^2+\hbar J_3}$ (+−) tj. $\beta = j(j+1) = k^2-k$

$\Rightarrow$ ~~$\beta=$~~ $k=-j$ { nebo $(j+1) > j$ ale ↗ nemůže být min > max

• závěr:

spektrum J_3: ($\hbar\times$) $m = -j, -j+1, \dots, j$

přičemž rozdíl $j-k = 2j$ = celé číslo $\Rightarrow$ $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

tj. pro $\forall j$ $\exists$ $2j+1$ vektorů s různým m

změna značení: $J_3|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$ ... $m=-j,\dots,j$ (*)

$J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle$

která j se realizují záleží na $\mathcal{H}$ a konkr. tvaru $\hat{J}_\alpha$

PŘ: • částice se spinem $\frac{1}{2}$: $\vec{J} = \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2}\left(\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right)$

... víme že $[\sigma_\alpha,\sigma_\beta] = 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$ $\longrightarrow$ $[J_\alpha,J_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma$

... σ_z má vl. č. ± 1 $\Rightarrow$ S_z vl. č. $\pm\hbar/2$ ... odpovídá $j=\frac{1}{2}$

• za chvíli ukážeme, že $L_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}Q_\beta P_\gamma$ odpovídá $(j=)\ l = 0,1,2,\dots$

• normalizace:

$J_+|jm\rangle = C|j\,m+1\rangle$ ... už víme $\langle jm|J_-J_+|jm\rangle \overset{(-+)}{=} \hbar^2[j(j+1)-m(m+1)]$

$\rightarrow$ $J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|j\,m+1\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j\,m+1\rangle$

podobně z (+−):

$J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,|j\,m-1\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j\,m-1\rangle$

... podobně jako u LHO .. obsahuje fázovou konvenci

vektor o němž víme jen (*) $\longrightarrow$ $e^{i\alpha}|jm\rangle$!

OBECNĚ

Maticová reprezentace J_1, J_2, J_3 ve vl. podpr. J^2 $\boxed{QM-C_3-4}$

(souvisí s ireducibilními reprezent. grupy rotací ... viz teor. grup)

$\rightarrow$ J^2, J_z se doplní na ÚSKO : $J^2, J_z, A \longrightarrow |\alpha, jm\rangle$ $\quad [A, J^2]=0$, $[A, J_z]=0$

$\hookrightarrow$ diagonální v $\mathfrak{J}$ $\quad$ (předp: $[A, J_k]=0 \;\forall k$)

tj
$$\langle \alpha, jm | J^2 | \alpha', j'm' \rangle = \hbar^2 j(j+1)\, \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\alpha\alpha'}$$
$$\langle \alpha, jm | J_z | \alpha', j'm' \rangle = \hbar m\, \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\alpha\alpha'}$$
$$\langle \alpha, jm | J_1 | \alpha', j'm' \rangle = (J_1)^{(j)}_{mm'}\, \delta_{jj'} \delta_{\alpha\alpha'} \qquad \text{podob. } J_2$$

$(J_1)_{mm'}$ lze najít explicitně: $\quad J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \qquad J_2 = \frac{J_+ - J_-}{2i}$

+ we víme
$$\langle \alpha, jm | J_+ | \alpha', j'm' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{jj'} \underbrace{\delta_{m\, m'+1}\, \hbar \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)}}_{(J_+)_{mm'}}$$
$$J_- = J_+^+$$

ČÁSTICE SE SPINEM 1/2, 1, 3/2, ... atd ; pro celé j → orb. moment

TABULKA:

	$\boxed{j=0}$	$\boxed{j=\frac{1}{2}}$	$\boxed{j=1}$	$\boxed{j=\frac{3}{2}}$	...
$J_+ =$	(0)	$\hbar \begin{array}{c\|c} & m' = \frac{1}{2} \;\; -\frac{1}{2} \\ \hline & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{matrix} \\ & \uparrow m \end{array}$	$\hbar \begin{array}{c} m' = 1 \;\; 0 \;\; -1 \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix} \end{array}$	$\hbar \begin{array}{c} \frac{3}{2} \;\; \frac{1}{2} \;\; -\frac{1}{2} \;\; -\frac{3}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{matrix} \end{array}$	...
$J_x =$		$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ 0 & \sqrt{4} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$	...
$J_y =$		$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -i\sqrt{4} & 0 \\ 0 & i\sqrt{4} & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$	...

konec odbočky

---

zpět orbitální moment hybnosti:

L_k splňují komut. relace generátorů rotací

$\Rightarrow \exists$ báze $|\alpha, lm\rangle$: $\quad L^2 |\alpha, lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\alpha, lm\rangle$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad L_z |\alpha, lm\rangle = \hbar m |\alpha, lm\rangle$

kde $m = -l, \dots, l$, ale nevíme jaká l jsou dovolená

($\sigma(L^2)$ je podmnožinou $\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$)

- operátor $\vec{L}$ v x-reprezentaci

samosdruženost: $L_\alpha^+ = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} P_\gamma^+ Q_\beta^+ = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_\beta P_\gamma = L_\alpha$

$\llcorner\; Q^+ = Q,\ P^+ = P;\ [Q, P] = 0$ pro $\gamma \neq \beta$

$\vec{L} = \vec{Q} \times (-i\hbar \vec{\nabla}_Q)$ ... $L_x = -i\hbar\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right)$ $L_y = -i\hbar\,(z\partial_x - x\partial_z)$

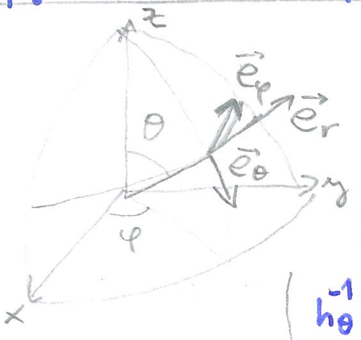
$L_z = -i\hbar\,(x\partial_y - y\partial_x)$

pozn: p-reprezentace:

$\vec{L} = (i\hbar\vec{\nabla}_p) \times \vec{p} = -i\hbar\, \vec{p} \times \vec{\nabla}_p$ ... např.: $L_x = -i\hbar\left(p_y \frac{\partial}{\partial p_z} - p_z \frac{\partial}{\partial p_y}\right)$

... totožný tvar $\Rightarrow$ $\langle \vec{x} | l m\rangle$; $\langle \vec{p} | l m\rangle$ budou mít totožné (jen úhlová závislost) funkční tvar (až na fázi)

vyjádření ve sférických souřadnicích:



$x = r\cos\varphi\sin\theta$

$y = r\sin\varphi\sin\theta$

$z = r\cos\theta$

Lamé: $h_r = 1$, $h_\theta = r$, $h_\varphi = r\sin\theta$ $\quad h = \left\|\frac{\partial}{\partial\theta}(x,y,z)\right\|$

$\vec{e}_r = \frac{\partial}{\partial r}(x,y,z) = \cos\varphi\sin\theta\cdot\vec{e}_x + \sin\varphi\sin\theta\cdot\vec{e}_y + \cos\theta\cdot\vec{e}_z$

$h_\theta^{-1}\vec{e}_\theta = \frac{\partial}{\partial\theta}(x,y,z) = \cos\varphi\cos\theta\cdot\vec{e}_x + \sin\varphi\cos\theta\,\vec{e}_y - \sin\theta\,\vec{e}_z$

$h_\varphi^{-1}\vec{e}_\varphi = \frac{\partial}{\partial\varphi}(x,y,z) = -\sin\varphi\,\vec{e}_x + \cos\varphi\,\vec{e}_y$

pozn: $\begin{pmatrix} e_r \\ e_\theta \\ e_\varphi \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix}$ kde M je OG matice: $M^{-1} = M^T$ ... zpětná transf.

operátor $\vec{L}$: $\boxed{\vec{L} = -i\hbar\,\vec{Q}\times D = -i\hbar\,(r\vec{e}_r)\times\left(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\theta}{h_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\vec{e}_\varphi}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}$

přitom: $\vec{e}_r\times\vec{e}_r = 0$ $\quad \vec{e}_r\times\vec{e}_\theta = \vec{e}_\varphi$ $\quad \vec{e}_r\times\vec{e}_\varphi = -\vec{e}_\varphi$

$$\rightarrow\quad \vec{L} = -i\hbar\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \begin{pmatrix} -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix} \begin{matrix} = L_x \\ = L_y \\ = L_z \end{matrix}$$

pozn: vyjádření $\vec{L}$ operátorem neobsahuje r! .. působí jen na úhl. část.

$|l m\rangle$ tvoří bázi v úhlových prom. tj na 1-sféře

v ÚSKO (L^2, L_z, A) .. operátor A dělá kvantování v r

A ... komutuje s $\vec{L}$ $\rightarrow$ sfér. sym. ... tj skalár

např. délka vektoru, stopa tenzoru

$L_\pm = (L_x \pm iL_y) = \hbar e^{\pm i\varphi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\cdot$

• vyjádření L^2

1) $$L^2 = -\hbar^2\left[\vec e_\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec e_\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[\vec e_\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\vec e_\theta}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

+ užití: $\frac{\partial e_\varphi}{\partial\theta}=0$ $\quad \frac{\partial \vec e_\varphi}{\partial\varphi} = -(\cos\varphi,\sin\varphi,0) = -\vec e_r\sin\theta - \vec e_\theta\cdot\cos\theta$

$\frac{\partial e_\theta}{\partial\theta} = -\vec e_r$ $\quad \frac{\partial e_\theta}{\partial\varphi} = \cos\theta\cdot\vec e_\varphi$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

---

srovn. ... Δ ve sfér. souř.

$$\Delta = \frac{1}{h_r h_\theta h_\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial r}\frac{h_\theta h_\varphi}{h_r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial\theta}\frac{h_r h_\varphi}{h_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{h_r h_\theta}{h_\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$= \underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}}_{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}} + \frac{1}{r^2}\left\{\underbrace{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}}_{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\boxed{= \text{Rad} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}}$$

jiné odvození:

$$L^2 = -\hbar^2(\vec Q\times\vec D)\cdot(\vec Q\times\vec D) = -\hbar^2\left[(\vec Q\times\vec D)\times\vec Q\right]\cdot\vec D$$

$$\overset{\text{BAC-CAB}}{=} -\hbar^2\left[(\vec Q\cdot\vec Q)\vec D - \vec Q(\vec D\cdot\vec Q)\right]\cdot\vec D = -\hbar^2\left\{r^2\Delta + r\cdot\frac{\partial}{\partial r} - 3r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right\}$$

$\vec Q\cdot D = \frac{\partial}{\partial r}$ $\quad \vec D\vec Q = I$ $\quad \vec D\cdot\vec Q = 3$

tj $L^2 = -\hbar^2\left(r^2\Delta - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2r\frac{\partial}{\partial r}\right)$ ... úhlová část Δ-operátoru

---

• vlastní podprostory L^2, L_z ... obecné pozn.:

homogenní polynomy stupně l ... $p_l(\lambda x,\lambda y,\lambda z) = \lambda^l p_l(x,y,z)$

PŘ: $x^2+y^2-\frac{1}{3}z^2$ ... $p_2(x,y,z)$

$(x+iy)^3 = x^3+3ix^2y-3xy^2-iy^3$ ... $p_3(x,y,z)$

platí: 1) $p_l(x,y,z) = r^l f(\theta,\varphi)$

opět homogenní st. l

2) $L_\alpha p_l(x,y,z) = \tilde p_l(x,y,z)$ ... je vidět z x-repr. L_α

3) $$\Delta p_l(x,y,z) = f(\theta,\varphi)\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}r^l}_{l(l+1)r^{l-2}} - \frac{L^2}{\hbar^2}r^{l-2}f(\theta,\varphi)$$

tj pokud $\Delta p_l(x,y,z)=0 \Rightarrow L^2 f(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) f(\theta,\varphi)$

4) pokud $\Delta p_l = 0 \Rightarrow \Delta\tilde p_l = 0$ kde $\tilde p_l = L_\alpha p_l$

... plyne z $[L^2, L_\alpha]=0$ a vyjádření Δ pomocí L^2

závěr: $|lm\rangle$ lze hledat v prostoru polynomů
.. homogenních stupně l splňujících $\Delta p = 0$

- počet homog. pol. stupně l:
= počet koef. u $x^a y^b z^c$; $a+b+c=l$ $\rightarrow (l+1)+l+\dots+1 = \frac{(l+2)(l+1)}{2}$
$= N(l)$

počet p_l splňujících $\Delta p_l = 0$:
Δ sníží stupeň p_l o dva ... $\Delta p = 0$ je $N(l-2)$ podmínek
$\rightarrow = N(l) - N(l-2) = \frac{1}{2}\left[(l+2)(l+1) - l(l-1)\right] = 2l+1$ ... konzistentní

.. obvyklé značení $f(\theta,\varphi) \equiv Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ... $\boxed{\begin{aligned} L^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \\ L_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \end{aligned}}$

$\rightarrow$ nalezení Y_{lm}: $-i\partial_\varphi Y = mY$

$\Rightarrow Y_{lm} = e^{im\varphi} = (\cos\varphi + i\sin\varphi)^m = \frac{1}{r^m}(x+iy)^m$

$\rightarrow$ funguje jen pro $m=l$ ... jinak nebrán θ-část,
ale ostatní pomocí L_-

nebo $Y_{l-m} = e^{-im\varphi} = (\cos\varphi - i\sin\varphi)^m = \frac{1}{r^m}(x-iy)^m$ ... proč?

tradiční způsob nalezení $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ .. separace proměnných

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = f(\theta)\, g(\varphi)$$

- $\rightarrow L_z g(\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} g(\varphi) = \hbar m\, g(\varphi)$ s period. podm.: $g(\varphi+2\pi) = g(\varphi)$

$\rightarrow g(\varphi) = e^{im\varphi}$; $m = 0, \pm1, \pm2, \dots$ (+ z dřívějška víme $|m| \le l$)
$\rightarrow$ jen celočíselná l

+ dosazení $Y_{lm}(\theta,\varphi) = f(\theta) e^{im\varphi}$ do $L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$:

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m^2}{(\sin\theta)^2}\right] f(\theta) = l(l+1) f(\theta)$$

+ substituce $z = \cos\theta$ ... $dz = -\sin\theta\, d\theta$

$\lambda \equiv l(l+1)$

$$\rightarrow \left\{\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\right]\frac{d}{dz} + \lambda - \frac{m^2}{1-z^2}\right\} f(\theta) = 0$$

hledáme řešení nesingulární v ±1

$\rightarrow$ přidružené Legendre funkce:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$

kde $P_l^m(\xi) = \frac{1}{2^l l!}(1-\xi^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}}(\xi^2-1)^l$

Relace ortogonality:
$$\int Y^*_{lm}(\vec{n})\, Y_{l'm'}(\vec{n})\, d\Omega_n = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Relace úplnosti:
$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\vec{n})\, Y^*_{lm}(\vec{n}') = \delta_2(\vec{n}-\vec{n}')$$

$= \frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')}{|\sin\theta|}$
$= \delta(\cos\theta - \cos\theta')\delta(\varphi-\varphi')$

rozebrat .. $Y(\vec{n}) = Y(\theta,\varphi) = Y(\cos\theta,\varphi)$ .. záměna diferenciálu; také v

Detailnější odvození $Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$$0 = L_- Y_{ll}(\theta,\varphi) = \hbar e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] f(\theta)e^{il\varphi} = \hbar e^{i(l-1)\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} - l\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right] f(\theta) = 0$$

tj $\quad \frac{f'}{f} = l\frac{\cos\theta}{\sin\theta} \longrightarrow f(\theta) = c_l(\sin\theta)^l$

c_l z normalizace: $\int d\varphi \int \sin\theta\, d\theta\, |c_l|^2 \sin\theta^{2l} = 1 \rightarrow c_l = \frac{1}{\sqrt{2\pi I}}$

kde $I_l = \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \sin\theta^{2l} = \frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!} \longrightarrow c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$

fázová konvence
$\rightarrow P_{l0}(\theta=0) > 0$
$\dots Y_{l0}(\theta,\varphi) > 0$

trošku hraní s L_+: ... platí: $\frac{d}{d(\cos\theta)} = -\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{d}{d\theta}$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\cos\theta}\left((\sin\theta)^{-m} f\right) = -\frac{1}{\sin\theta}\left[(\sin\theta)^{-m} f' - m(\sin\theta)^{-m-1}\cos\theta\, f\right]$$

$$= -\sin^{-m-1}\left[f' - m\frac{\cos\theta}{\sin\theta} f\right]$$

$$\rightarrow L_+ f e^{im\varphi} = \hbar e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} - m\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right] f(\theta) e^{im\varphi} = -\hbar e^{i(m+1)\varphi}(\sin\theta)^{m+1}\frac{d}{d\cos\theta}\left[(\sin\theta)^{-m} f(\theta)\right]$$

$$\Rightarrow L_+^p f e^{im\varphi} = (-\hbar)^p e^{i(m+p)\varphi}(\sin\theta)^{m+p}\frac{d^p}{(d\cos\theta)^p}\left[(\sin\theta)^{-m} f\right]$$

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

$$N\,|l\,m\rangle = (L_+)^{l+m}|l\,-l\rangle = \hbar^{l+m}\sqrt{2l}\cdot\sqrt{(2l-1)}\cdots\sqrt{l-m+1}\cdot\sqrt{1}\cdot\sqrt{2}\cdots\sqrt{l+m}\,|l\,m\rangle$$

$$\rightarrow N = \frac{1}{\hbar^{l+m}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\frac{1}{2l!}}$$

vše dohromady: $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, e^{im\varphi}(\sin\theta)^m\frac{d^{l+m}}{(d\cos\theta)^{l+m}}(\sin\theta)^{2l}$

+ substituce $\xi = \cos\theta \quad \sqrt{1-\xi^2} = \sin\theta \longrightarrow$ vzorec na předch. str.

pozn: $Y_{l0}(\theta)$ ... Legendreův polynom. (v prom. $\cos\theta$)

podrobněji: $Y_{l0}(\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\left.\underbrace{\frac{d^l}{d\xi^l}(1-\xi^2)^l}_{\text{polynom st } 2l-l}\right|_{\xi=\cos\theta} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$

relace ortogonality:

$$\delta_{ll'} = \int Y_{l0}(n)Y^*_{l'0}(n)\,d^2n = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \underbrace{\sin\theta\, d\theta}_{d\xi}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}}P_l(\xi)P_{l'}(\xi)$$

$$\longrightarrow \int_{-1}^1 P_l(\xi)P_{l'}(\xi)\,d\xi = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

... ortogonální polynomy
s vahou $w(\xi) = 1$
na intervalu $\langle -1, 1\rangle$
$\rightarrow$ souvislost ... Gauss

pozn: symetrie: $Y_{lm}(-\vec{n}) = Y_{lm}(\vec{n})(-1)^l$

$$Y^*_{lm}(\vec{n}) = (-1)^m Y_{l\,-m}(\vec{n})$$

faktor $(-1)^m$ není vidět, dá se odv. podl. vzorce s L operátory (Cohen-Tannoudji) pozn: reálné harmoniky: $C_{\ell m} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{\ell m} + Y^*_{\ell m})$

+ $Y_{\ell 0}$ beze změny $S_{\ell m} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{\ell m} - Y^*_{\ell m})$ ← někdy se čísí faktorem $(-1)^{m+1}$

→ $Y^*_{\ell m} \sim Y_{\ell -m}$ .. tj. jen unit. transf. v rovině $\pm m$

→ fázový faktor $e^{im\varphi}$ na 1-kouli $r=1$: $\boxed{m>0}$

→ je vždy doplněn faktorem $(\sin\theta)^m$: $(r\sin\theta)^m e^{im\varphi} = (x+iy)^m$

tj. $C_{\ell m} \sim \cos m\varphi$ $S_{\ell m} \sim \sin m\varphi$ Re/Im.. $(x+iy)^m \pm (x-iy)^m$

navíc $P_{\ell m}$ je zjevně $\sim \sin m\varphi \cdot \mathrm{poly}_{\ell-m}(\cos\theta)$ ... homog. poly st. m

konec odbočky

4) ÚSKO obsahující L^2, L_z ... přidání A

.. většinou ~~povahy~~ máme $[A, L_\alpha]=0$ → $[A, L_\pm]=0$

... obecně .. ve vl. podpr. ℓ, m diagonalizujeme A → vl. č. $a_0, a_1, \dots a_\alpha$

... v principu a závisí na ℓ, m, ale $A L_\pm |a\rangle = L_\pm A |a\rangle$ ⇒ nezáv. na m

→ $L^2|\alpha;\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1)|\ell m,\alpha\rangle$ $\ell = 0,1,2,\dots$

$L_z|\ell m,\alpha\rangle = \hbar m|\ell m,\alpha\rangle$ $m = -\ell, -\ell+1, \dots \ell$

$A|\ell m,\alpha\rangle = a^{(\ell)}_\alpha |\ell m,\alpha\rangle$

→ spektrum a závisí na konkr. volbě ... kvantuje radiální pohyb.

4a) $A = H_0 \equiv p^2/2m$ – řešení v p-reprezentaci

→ ihned $\langle\vec{p}|E\ell m\rangle = N\,\delta(E_p - E)\,Y_{\ell m}(\hat{p})$ $\hat{p} \equiv \frac{\vec{p}}{|p|}$

normování: $\langle E\ell m|E'\ell' m'\rangle = \int d^3p\,|N|^2\,\delta(E-\frac{p^2}{2m})\,\delta(E'-\frac{p^2}{2m})\,Y^*_{\ell m}(\hat{p})\,Y_{\ell' m'}(\hat{p})$

$$= \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}|N|^2\int p^2dp\,\frac{\delta(p-p_E)}{p/m}\,\delta(E'-\frac{p^2}{2m})$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{pm}} = (2Em^3)^{-\frac{1}{4}} \qquad = pm\,|N|^2\,\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\,\delta(E-E')$$

závěr: $\boxed{\langle\vec{p}|E\ell m\rangle = \frac{1}{\sqrt{pm}}\,\delta(E-\frac{p^2}{2m})\,Y_{\ell m}(\hat{p})}$

4b) $A = H_0 \equiv p^2/2m$ – řešení v x-reprezentaci

→ v principu Fourier.-transformace předchozího, ale def. spec. fce

$\psi_{E\ell m}(\vec{x}) = \int d^3p\,\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|E\ell m\rangle$ ... dá se odvodit z rozkladu:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi\sum_\ell\sum_m i^\ell j_\ell(kr)\,Y^*_{\ell m}(\hat{k})\,Y_{\ell m}(\hat{x}) \qquad \vec{k} \equiv \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

následující lze chápat jako odvození ↑ a definice $j_\ell(kr)$

hledáme $\psi_{klm}(\vec{Q}) \equiv \langle \vec{Q} | klm \rangle = R_{kl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

kde $E = \frac{p^2}{2m}$ $\quad k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $\quad \dots \; H_0 |klm\rangle = E|klm\rangle$

normování a skal. součin: $\langle klm | k'l'm' \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \int dr \cdot r^2 R^*_{k'l} R_{kl}$

→ je výhodné zavést $\dots \; \chi_{kl} \equiv \frac{1}{\sqrt{\ }}\, r R_{kl}(r)$ … radiální skal. souč.: $\langle \chi | \chi' \rangle = \int \chi^* \chi \, dr$

$$\longrightarrow \psi_{klm}(\vec{Q}) = \frac{1}{r}\chi_{kl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$H_0 \psi_{klm}(\vec{Q}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{klm} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - l(l+1)\right]\psi = E\psi$$

$$\longrightarrow \underbrace{R''_{kl}(r) + \frac{2}{r}R'_{kl}}_{\frac{1}{r}(rR)'' = \frac{1}{r}(R+rR')' = \frac{1}{r}(2R'+rR'')} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{kl} = 0$$

↳ centrifugální člen (jako v klas. fyzice) $\quad \frac{L^2}{2mr^2}$

$$\longrightarrow \chi''(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r) = 0$$

jako 1D (SR) s $V_l(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$

řešení pro $l=0$: $\quad \chi(r) = A\sin kr + B\cos(kr)$

okrajové podmínky: … spojitost ψ a ψ' ($\nabla\psi$) v počátku

tj. $R(r=0)=0$ pro $l>0$; $\chi_l(0)=0 \;\; \forall l$

→ bezrozm. jednotky: $z = kr \longrightarrow R(r) = j_l(kr) = j_l(z)$

tj $\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d}{dz} + 1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right] j_l(z) = 0$ … univerz. rovnice nezáv. na E

~~nalezení výpočení~~ ~~asympt. chování … $j_l(z) = z^{l+1}$~~ $\quad$ + def $\hat{j}_l(z) = z\, j_l(z)$

$$\longrightarrow \hat{j}''(z) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right]\hat{j}(z) = 0 \quad \dots \text{asymptotika } \hat{j} \approx z^{\alpha} \;\; z\to 0$$

$$\dots\; \alpha(\alpha-1)z^{\alpha-2} - l(l+1)z^{\alpha-2} = 0 \longrightarrow \alpha = l+1$$

$\boxed{\cancel{\alpha = -l}}$ → nevyhovuje poč. podm.

vytažení asymptotiky: $\quad \hat{j}(z) = z^{l+1}\varphi(z)$

$$\hat{j}'(z) = z^{l+1}\left(\varphi' + \frac{l+1}{z}\varphi\right)$$

$$\hat{j}''(z) = z^{l+1}\left(\varphi'' + \frac{2}{z}(l+1)\varphi' + \frac{l(l+1)}{z^2}\varphi\right)$$

$\rightarrow \quad \varphi'' + \frac{2}{r}(l+1)\varphi' + \varphi = 0$

... řešení $l=0$: $\varphi_0(z) = \frac{\sin z}{z}$ (v koor. pro $\hat{j}$)

+ pozorujte: funkce $\psi = \frac{\varphi'}{r}$ splňuje: $\psi'' + \frac{2(l+2)}{r}\psi' + \psi = 0$

$\Rightarrow \quad \varphi_{l+1}(z) = \psi(z) = \frac{1}{z}\frac{d}{dz}\varphi_l(z)$ ... přitom: $R_{kl}(r) = j(kr) = \frac{\hat{j}(kr)}{kr} = (kr)^l \varphi(kr)$

tj $R_{kl}(r) = C\, j(kr)$, kde: $j_l(z) \equiv (-1)^l z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin z}{z}$

druhé LNZ řešení: $n_l(z) \equiv (-1)^{l+1} z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos z}{z}$

$\rightarrow$ sférické cylindrické funkce ... Besselova a Neumannova

asymptotické chování: $z \to 0 \quad j_l(z) = \frac{z^l}{(2l+1)!!} \quad n_l(z) = \frac{(2l+1)!!}{z^{l+1}}$

DK nesplňuje

$z \to \infty$ ... jen největší mocnina z: derivujeme jen sin / cos :

přitom $\frac{d}{dz}\sin(z+\delta) = \sin(z - \frac{\pi}{2} + \delta) \rightarrow$

$j_l(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} \frac{1}{z}\sin(z - \frac{\pi}{2}l) \qquad n_l(z) = -\frac{1}{z}\cos(z - \frac{\pi}{2}l)$

Normování: Platí $\int_0^\infty j_l(kr)\, j_l(k'r)\, r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k')$

Důkaz: z toho že H_0 je samosdružený víme, že $\int j(kr)j(k'r) \sim \delta$

$\rightarrow$ zajímá nás jen singulární (δ-chování)

posun o kvadraticky integ. fci neovlivní: $\int (j_l - f)(j_l - f) \sim$

$\sim$ regulární $F(k,k') + \delta$

.. stačí asymptotika:

$\int_0^\infty \sin(kr+\delta)\sin(k'r+\delta)\frac{1}{kk'}dr = \frac{1}{kk'}\left(-\frac{1}{4}\right)\int_0^\infty \underbrace{(e^{iA} - e^{-iA})(e^{iA'} - e^{-iA'})}_{e^{i(A+A')} + e^{-i(A+A')} - e^{i(A-A')} - e^{-i(A-A')}} dr$

$\rightarrow \sim \delta(k+k')$ .. nepřispívá $k,k'>0$

$= \frac{1}{2kk'}\int_{-\infty}^{\infty} \cos(k-k')r\, dr = \frac{1}{4kk'}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')r} dr$

$= \frac{2\pi}{4kk'}\delta(k-k') \quad \rightarrow$ normalizované: $R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, j_l(kr)$

$(\dots \delta(k-k'))$

Algebraické řešení dle Cohena-Tannoudji:

... ukázali jsme: tvrzení: $[L_\alpha, P_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} P_\gamma$

$\Rightarrow$ 1) $[L_z, P_+] = [L_z, P_x] + i[L_z, P_y] = \hbar(iP_y + P_x) = \hbar P_+$

$\hookrightarrow$ def $\boxed{P_+ = P_x + iP_y}$

2) $[L_+, P_z] = [L_x, P_z] + i[L_y, P_z] = \hbar(-iP_y - P_x) = -\hbar P_+$

3) $[L^2, P_+] = [L_y^2 + L_z^2, P_x] + i[L_x^2 + L_z^2, P_y] = \hbar\Big[i(-L_y P_z - P_z L_y + L_z P_y + P_y L_z) + L_x P_z - P_z L_x + L_z P_x + P_x L_z\Big]$

$= \hbar\{L_z P_+ + P_+ L_z - P_z L_+ - L_+ P_z) = 2\hbar(P_+ L_z - P_z L_+) + \hbar\big(\underbrace{[L_z, P_+]}_{\hbar P_+} - \underbrace{[L_+, P_z]}_{-\hbar P_+}\big)$

$= 2\hbar(P_+ L_z - P_z L_+) + 2\hbar^2 P_+$

Lemma: $P_+ |k\,l\,m\rangle\big|_{m=l} \sim |k\ l+1, l+1\rangle$

DK: • $[P_\alpha, H_0] \Rightarrow P_+|klm\rangle$ je vl. v. H_0 s vl. č. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

viz 2) • $[L_z, P_+] \Rightarrow L_z P_+ |klm\rangle = P_+ L_z|klm\rangle + [L_z, P_+]|klm\rangle = \hbar(m+1)P_+|klm\rangle$

3) $\Rightarrow L^2 P_+|klm\rangle = P_+ L^2 |klm\rangle\big|_{m=l} + [L^2, P_+]|kll\rangle\big|_{m=l} = [\hbar^2 l(l+1) + 2\hbar^2 l - 0 + 2\hbar^2]P_+|kll\rangle$

$= \hbar^2(l+1)(l+2)P_+|kll\rangle$ ... + jednoznačnost

4) $[P_+, x+iy] = [P_x, x] + (i)^2[P_y, y] = -i\hbar + i\hbar = 0$

Postup: $|k00\rangle \xrightarrow{P_+} |k11\rangle \xrightarrow{P_+} |k22\rangle \xrightarrow{P_+} \dots$

$|k11\rangle \xrightarrow{L_-} |k1m\rangle$, $|k22\rangle \xrightarrow{L_-} |k2m\rangle$ ...

L_- působí jen na θ, φ

přitom $\langle\vec{Q}|klm\rangle = N\, j_l(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$\rightarrow$ jak působí P_+? ... $Y_{ll}(\theta,\varphi) = A(\sin\theta)^l e^{il\varphi} = A\left(\frac{x+iy}{r}\right)^l$

$P_+ \frac{\sin kr}{kr}$ ... $-i\hbar(\partial_x + i\partial_y) f(r) \sim \underbrace{\left(\frac{\partial r}{\partial x} + i\frac{\partial r}{\partial y}\right)}_{\frac{x+iy}{r}} \frac{\partial f}{\partial r} \sim \underbrace{(x+iy)}_{\sim Y_{11}(\theta,\varphi)} \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial r}$

indukce: $P_+ (x+iy)^l \underbrace{\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l f(r)}_{g(r)} = (x+iy)^l P_+ g(r) \sim (x+iy)^{l+1} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} g(r)$

$= (x+iy)^{l+1}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)^{l+1} f(r)$

$\Rightarrow$ (def) $j_l(z) \equiv (-1)^l z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin z}{z}$ ... $z = kr$

druhé LNZ řešení $n_l(z) \equiv (-1)^{l+1} z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos z}{z}$

<u>Chování pro malé z:</u>

Taylorova řada pro sin z / cos z $\xrightarrow[z\to 0]{} j_\ell(z) \approx \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!}$ $\quad n_\ell(z) \approx \frac{(2\ell+1)!!}{z^{\ell+1}}$

<u>Asymptotické chování pro velké z:</u>

... největší mocnina z ... derivuje se jen sin/cos:

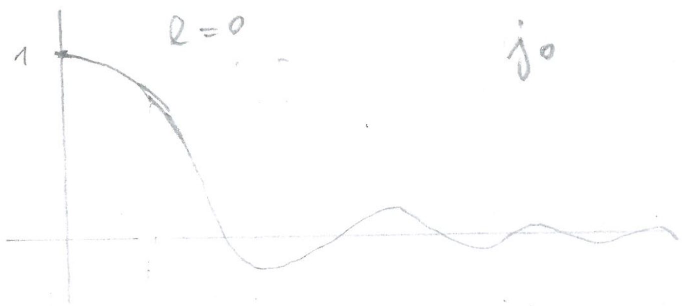
$$\frac{d}{dz}\sin(z+\delta) = \sin\left(z-\frac{\pi}{2}+\delta\right) \xrightarrow[z\to\infty]{} j_\ell(z) \simeq \frac{1}{z}\sin\left(z-\frac{\pi}{2}\ell\right) \quad n_\ell \simeq -\frac{1}{z}\cos\left(z-\frac{\pi}{2}\ell\right)$$

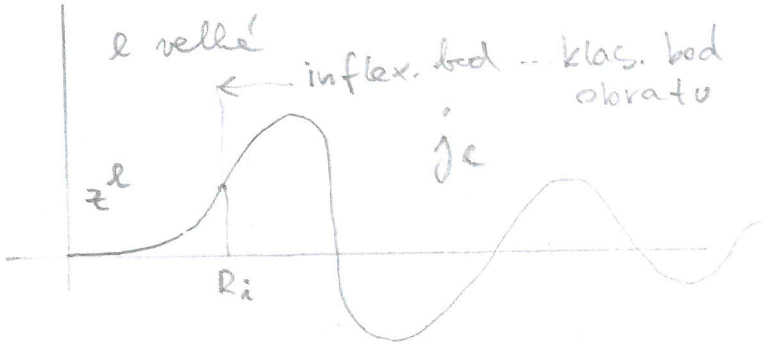
<u>První pár funkcí:</u>

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \qquad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^3} - \frac{\cos z}{z} \qquad n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z}\right)\sin z - \frac{3}{z^2}\cos z \qquad n_2(z) = -\left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z}\right)\cos z - \frac{3}{z^2}\sin z$$





+ <u>Normování:</u> $\int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r)\, r^2\, dr = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k-k')$

+; $\{ \langle k'\ell'm' | k\ell m\rangle = \int_0^\infty r^2 dr \int d^2\vec{n}\; \psi^*_{k'\ell'm'}(r\vec{n})\, \psi_{k\ell m}(r\vec{n}) = \delta(k-k')\,\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$$\sum_{\ell m}\int_0^\infty dk\; \psi_{k\ell m}(\vec{Q})\, \psi^*_{k\ell m}(\vec{Q}') = \delta(\vec{Q}-\vec{Q}')$$

kde $\psi_{k\ell m}(r\vec{n}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, j_\ell(kr)\, Y_{\ell m}(\vec{n})$

Energetická normalizace: $\langle E'\ell'm' | E\ell m\rangle = \delta(E-E')\,\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$$\psi_{E\ell m}(r\vec{n}) = \boxed{\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, j_\ell(kr)\, Y_{\ell m}(\vec{n}) \qquad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$\rightarrow \left[\frac{dE}{dk}\right]^{-1/2} = 1\Big/\sqrt{\frac{\hbar^2 k}{m}}$ $\qquad \hookrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

<u>pozn:</u> Po částech konstantní potenciál radiální rovnice ve 3D:

napojování ~~pro~~ $R_{k\ell}(r) = a\, j_\ell(\tilde{k}r) + b\, n_\ell(\tilde{k}r)$, — spojité R, R'

kde $\tilde{k} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V)}$

+ asymptotika $h^{(\pm)}_\ell(z) \equiv j_\ell \pm i n_\ell \xrightarrow{z\to\infty} \frac{1}{z}\underbrace{e^{\mp i(\ell+1)\frac{\pi}{2}}}_{(\mp i)^{\ell+1}} e^{\pm iz}$

L.. pro $\tilde{k} = i\varkappa$ ... jen $h^{(+)}$ povolena v $+\infty$

~~Srovnání s počátkem~~:

5) Částice v radiálním poli → ÚSKO.. H, L^2, L_z [QM-C3-13]

$$\langle \vec{Q} | l m E \rangle = \psi(x,y,z) = \psi(r,\theta,\varphi) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$H\psi = E\psi \Rightarrow \quad -\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}} \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - l(l+1)\right] R_{kl}(r) + V(r) R_{kl} = E R_{kl} \quad .. \ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\rightarrow \quad R''_{kl}(r) + \frac{2}{r} R'_{kl} + \Big[\underbrace{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)}\Big] R_{kl}(r) = 0$$

$$-V^{(l)}_{eff}(r)\cdot\frac{2m}{\hbar^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(r) + \overbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}}^{L^2}\Big)$$

kde: $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$ nebo ↗

nebo $\chi''(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)\right]\chi(r) = 0$

některé řešitelné případy:

5a) Po částech konstantní potenciál:

zavedeme na každé části $\varkappa^2 = k^2 - U$, řešení známe:

$R_{kl}(r) = a\, j_l(\varkappa r) + b\, n_l(\varkappa r)$

nebo $\chi(r) = a\, r j_l(\varkappa r) + b\, r n_l(\varkappa r)$ ← hodí se hlavně pro $l=0$
kde $j_l = \frac{\sin z}{z}$ $\quad n_l = -\frac{\cos z}{z}$

+ okrajové podmínky: $\chi(r)\big|_{r=0} = 0$ → $b = 0$ na prvním úseku

pro vázané stavy: na úsecích kde $E < V$ .. tj. $k^2 < U$ ... $\varkappa$ ryze imag $= i\lambda$

hodí se zavést: $h_l^{(\pm)}(z) = j_l(z) \pm i n_l(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} (\mp i)^{l+1}\frac{1}{z} e^{\pm i z}$

př: pro $h^{(+)} \approx \frac{1}{z}\left(\sin(kr - \frac{l}{2}\pi) - i\cos(kr - \frac{l}{2}\pi)\right) = \frac{-i}{z} e^{kr - \frac{l}{2}\pi}$

... na posledním úseku $R_{kl}(r) = a\, h_l^{(+)}(\varkappa r) + \cancel{b\, h^{(-)}(\varkappa r)}$ $\quad b=0$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \downarrow e^{-\lambda r} \qquad \downarrow e^{+\lambda r}$

$r \to \infty$

napojování: spojité R, R' nebo χ, χ' ... dá se dělat pomocí $\frac{(\ln \chi)'}{(\ln R)'}$
.. nezávislé na norm.

5b) Částice v Coulombickém poli $\quad V(r) = \frac{\gamma}{r}$ ... $\gamma < 0$ .. přitažlivý
(rozptyl. stavy později)

pozn: • důležitý případ → atom vodíku + ionty
→ muonium, protonium, pozitronium ....
→ baze se využívá při výpočtech

• vyšší symetrie (dynamická) — Runge Lenzův vektor
→ . "náhodná" degenerace
– separabilní ve sférických, parabolických, eliptických souř.
(což se někdy hodí)

• kvalitativní diskuse v termínech $V^{(l)}_{eff}(r)$

Radiální (SR): ... opět se dá řešit algebraicky pomocí posun. oper.
→ zde ... stručné shrnutí řešení difro

$$\chi''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E \pm \frac{|\gamma|}{r} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2}\right]\chi(r) = 0$$

... $+|\gamma|$ .. přitažlivý, $-|\gamma|$ ... odpudivý

...diskutovat obrázkem

přepis do bezrozm: $\rho = \beta r$ .. β .. 1/délka .. $\chi(r) = u(\rho)$

$$\rightarrow \quad u'' + \boxed{\frac{2mE}{\hbar^2\beta^2}}\,u \pm \boxed{\frac{\gamma 2m}{\hbar^2\beta}}\cdot\frac{u}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u = 0$$

↳ bezrozm ... standard $= -\frac{1}{4}$ ... tj; $\beta = \sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}$

pro $E<0$ jinak $+$ → $\lambda = \frac{2m|\gamma|}{\beta\hbar^2} = \frac{|\gamma|}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2|E|}}$

pro $\gamma<0$ jinak $-$

$$\rightarrow \quad u'' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]u = 0$$

asymptotika: $\rho\to 0$ ... stejné jako volná č. ($\frac{\lambda}{\rho}$ méně singul než $\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}$)
... tj; $u(\rho) \sim \rho^{\ell+1}$ .. regulární řešení

$\rho\to\infty$ ... $u'' = \frac{1}{4}u \longrightarrow u(\rho) = e^{\pm\rho/2}$, $\longrightarrow$ přežije $-$

položíme: $u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho/2} w(\rho)$:

$$\rho w'' + (2\ell+2-\rho)\,w' + [\lambda-(\ell+1)]\,w = 0$$

ODBOČKA: ... široká třída ODR 2. ř. lze převést na (Formánek):

Gaussova rovnice:

$$z(1-z)\,\bar{w}'' + [c-(1+a+b)z]\,\bar{w}' - ab\,\bar{w} = 0$$

definuje hypergeometrickou funkci:
$F(a,b,c,z)$ ... lze řešit řadou

Degenerovaný případ:

$$\rho w'' + (c-\rho)w' - a w = 0$$

$$\longrightarrow F(a,c,\rho) = \lim_{\beta\to\infty} F\left(a,b,c,\frac{\rho}{b}\right)$$

.. řešení řadou dá: $w_1(\rho) = F(a,c,\rho) = 1 + \frac{1}{1!}\frac{a}{c}\rho + \frac{1}{2!}\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\rho^2 + \dots$

druhé řeš: $w_2(\rho) = \rho^{1-c}F(1+a-c, 2-c, \rho)$ ... singul. v poč.

náš problém: $c = 2(\ell+1)$ $\quad a = \ell+1-\lambda$

řada se pro $a = 0,-1,-2,\dots$ redukuje na polynom.
jinak se dá DK: $F(a,c,\rho)\sim e^{\rho}$ ... tj; $u = \rho^{\ell+1} w\, e^{-\rho/2} \sim e^{+\rho/2}$ špatné

$\Rightarrow$ kvantovací podmínka: $a = \ell+1-\lambda = -\nu$ ... $\nu = 0,1,2,\dots$

⌊ lze splnit jen pro $\gamma<0$, jinak je tady $+$

↳ tj $\lambda^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2}\frac{m}{2|E|} \rightarrow \boxed{E_n = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 n^2}} = \frac{-R_y}{n^2}$, ← vodík $\gamma = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ (SI)

→ $1\,\mathrm{Ry} = 13.6\,\mathrm{eV} = \frac{1}{2}\,\mathrm{Ha}$

kde $n = \nu+\ell+1$ ... hlavní kvantové číslo
... význam ν ... řád polynomu = počet nul $R_{n\ell}(r)$
radiální kvantové číslo

systematizace hladin: $n = l+1, l+2, \dots$

nebo $n = 1, 2, 3, \dots;\ l = 0, 1, \dots n-1;\ m = -l, -l+1, \dots l$

stupeň degenerace pro danou E_n ... $N = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$

→ "Náhodná degenerace"

... ve skutečném H .. další vl. vlastnosti: spin e^- ... $2n^2$; spin p^+ ... $4n^2$

} sejmutí degenerace po započtení korekcí .. Dirac, pole

typické rozměry atomu: $\rho = \beta r = \frac{\sqrt{8m|E_n|}}{\hbar} r = \frac{\sqrt{4m\frac{m\gamma^2}{\hbar^2 n^2}}}{\hbar} = \frac{2m|\gamma|}{\hbar^2 n}\cdot r$

$$\rho = \frac{2r}{na} \quad \dots \text{ kde } \boxed{a = \left[\frac{m|\gamma|}{\hbar^2}\right]^{-1} \doteq 0.53\,Å \quad \text{Bohrův poloměr}}$$

Vlnové funkce:

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\underbrace{\left(\frac{2r}{na}\right)}_{\rho}^{l}\underbrace{F(-\nu, 2(l+1), \rho)}_{\text{(zobecněný) Laguerův polynom}}e^{-\rho/2}$$

def: $L_n^{\alpha}(x) \equiv \binom{n+\alpha}{n} F(-n, \alpha+1, x)$

$$\longrightarrow R_{nl}(r) = \frac{2}{n}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\, a^{-\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{na}\right)^{l} L_{\nu}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)e^{-\frac{r}{na}}, \quad \nu = n-l-1$$

více o laguer. polynomech

- altern. def: $L_n^{\alpha}(x) = \sum_{m=0}^{n}(-1)^m\binom{n+\alpha}{n-m}\frac{x^m}{m!} = \frac{1}{n!}e^{x}x^{-\alpha}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^{n+\alpha}\right)$
- ortogonální systém vůči míře $e^{-z}z^{\alpha}$

tj. $\int_0^{\infty} L_n^{\alpha}(x)L_{n'}^{\alpha}(x)\, x^{\alpha} e^{-x}dx = \delta_{nn'}\frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!}$

Pár prvních stavů:

$R_{10}(r) = 2\sqrt{\frac{1}{a^3}}\, e^{-r/a}$ ← základní

$R_{20}(r) = \sqrt{\frac{1}{2a^3}}\left[1 - \frac{r}{2a}\right]e^{-r/2a}$

$R_{21}(r) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6a^3}}\,\frac{r}{a}\, e^{-r/2a}$

⋮

5c) Izotropní 3D LHO

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \quad \left(= \frac{1}{2} m \left(\omega^2 x^2 + \omega^2 y^2 + \omega^2 z^2\right)\right)$$

$\to \quad \psi_{E\ell m}(x) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad \dots \quad \chi = rR$

$\to \quad \chi''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}\right)\chi = 0$

... škálování $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ... $r = \rho x_0$ $\quad \chi(r) = u(\rho)$

$\to \quad u'' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \rho^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right) u = 0$ ... $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ... bezrozm. energie

... asymptotika $\to \quad u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{1}{2}\rho^2} w(\rho)$

$\to \quad w''(\rho) + \frac{2}{\rho}\left((\ell+1) - \rho^2\right) w'(\rho) + (\lambda - 2\ell - 3)\, w(\rho) = 0$

subst: $z = \rho^2$ ... $w(\rho) = v(z)$

$\to \quad z v'' + (\underbrace{\ell + \tfrac{3}{2}}_{c} - z) v' + (\underbrace{\tfrac{\lambda}{4} - \tfrac{\ell}{2} - \tfrac{3}{4}}_{-a}) w = 0$

... opět rovnice pro degener. hypgeom. fci.

→ řešení ... Laguerrovy polynomy $v(z) = F(a, c, z)$

kvantovací podmínka: $\frac{3}{4} + \frac{\ell}{2} - \frac{\lambda}{4} = a = -\nu$

$\Rightarrow \quad E = 4 \cdot \frac{\hbar\omega}{2}\left(\nu + \frac{\ell}{2} + \frac{3}{4}\right) = \hbar\omega\,(\underbrace{2\nu + \ell}_{\Lambda \text{ ... hlavní kvantové číslo}} + \tfrac{3}{2})$ $\quad \nu = 0, 1, \dots \quad \ell = 0, 1, \dots$

pro fixní Λ: ... sudé: $\ell = 0, 2, \dots, \Lambda$ ... $N_{deg} = \sum_{\ell=0,2}^{\Lambda} (2\ell+1) = \frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2)$ $\quad \frac{1}{2}\left(\frac{\Lambda}{2}+1\right)(2\Lambda+2)$

liché: $\ell = 1, 3, \dots, \Lambda$ ... $N_{deg} = \sum_{\ell=1,3}^{\Lambda} (2\ell+1) = \frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2)$ $\quad \frac{1}{2}\left(\frac{\Lambda+1}{2}\right)(2\Lambda+4)$

6) Separabilní systém

... na Hilb. prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ ... $H = H_1 + H_2$

↳ ÚSKO ... (H_1, A) $\quad (H_2, B)$

$\Rightarrow \quad H_1, A, H_2, B$ ... ÚSKO na $\mathcal{H}$

navíc $|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle = |E_1 \alpha\rangle \otimes |E_2 \beta\rangle$

a $\quad H|\psi\rangle = \left(H_1 |E_1\alpha\rangle\right) \otimes |E_2\beta\rangle + |E_1\alpha\rangle \otimes \left(H_2 |E_2\beta\rangle\right) = (E_1 + E_2)|\psi\rangle$

PŘ: Izotropní LHO: $\quad E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega\,(\tfrac{3}{2} + \underbrace{n_x + n_y + n_z}_{\Lambda})$

$\psi(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\, \psi_{n_y}(y)\, \psi_{n_z}(z)$

stupeň degenerace? $\quad \overbrace{\underbrace{\bullet}_{n_x} \,|\, \underbrace{\bullet\ \bullet\ \bullet}_{n_y} \,|\, \underbrace{\bullet\ \bullet\ \bullet}_{n_z}}^{\Lambda} \in (0, \Lambda)$

... volíme 2 přihrádky z $\Lambda+1$

... kombinace s opakováním $\quad N_{deg} = \binom{\Lambda+1}{2} + \Lambda + 1 = \frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2)$

jiný příklad:

Dvě částice interagující prostřednictvím $V(Q^{(1)}-Q^{(2)})$

v klasické mechanice: $L(\vec{Q}^{(1)},\vec{Q}^{(2)},\dot{\vec{Q}}^{(1)}\dot{\vec{Q}}^{(2)}) = \frac{1}{2}M^{(1)}\dot{\vec{Q}}^{(1)2}+\frac{1}{2}M^{(2)}\dot{\vec{Q}}^{(2)2}+V$

nové proměnné:

$\vec{X} = \frac{M^{(1)}\vec{Q}^{(1)}+M^{(2)}\vec{Q}^{(2)}}{M^{(1)}+M^{(2)}}$ ... CMS

$\vec{x} = \vec{Q}^{(1)}-\vec{Q}^{(2)}$ ... relat. poloha

$\Rightarrow$

$\vec{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{X}}} = \vec{P}^{(1)}+\vec{P}^{(2)}$

$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = \frac{M^{(2)}\vec{P}^{(1)}-M^{(1)}\vec{P}^{(2)}}{M^{(1)}+M^{(2)}}$

+ dá s DK: $H = \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2M}}_{\text{CMS}} + \underbrace{\boxed{\frac{\vec{p}^2}{2\mu}+V(\vec{x})}}_{\text{rel}}$ kde $\mu = \frac{M_1M_2}{M_1+M_2}$

v kvantové mechanice:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M^{(1)}}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2M^{(2)}}\Delta^{(2)} + V(Q^{(1)}-Q^{(2)})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{CMS} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{rel} + V(\vec{x}) = H_{0\,CMS} + H_{rel}$$

DK: $\frac{\partial}{\partial Q^{(1)}} = \frac{\partial X}{\partial Q_1}\nabla_X + \frac{\partial x}{\partial Q_1}\nabla_x = \frac{M_1}{M}\nabla_X + \nabla_x \rightarrow \Delta_Q^{(1)} = \frac{M_1^2}{M^2}\cdot\Delta_X + \Delta_x + \frac{2M_1}{M}\nabla_X\cdot\nabla_x$

$\nabla_{Q^{(2)}} = \frac{\partial X}{\partial Q_2}\nabla_X + \frac{\partial x}{\partial Q_2}\cdot\nabla_x = \frac{M_2}{M}\nabla_X - \nabla_x \rightarrow \Delta_Q^{(2)} = \frac{M_2^2}{M^2}\Delta_X + \Delta_x - \frac{2M_2}{M}\nabla_X\cdot\nabla_x$

$$\frac{1}{M_1}\Delta^{(1)} + \frac{1}{M_2}\Delta^{(2)} = \frac{1}{M}\Delta_X + \frac{M_1+M_2}{M_1M_2}\Delta_x$$

Důsledek: $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)}\otimes\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}^{(CMS)}\otimes\mathcal{H}^{(rel)}$

$H = H_{0\,CMS} + H_{rel}$

pro $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$ ... sfér. symetrie

$\downarrow$

$\rightarrow$ stacionární stavy $|\psi\rangle = |\vec{P}_{CMS}\rangle \otimes |E\,l\,m\rangle$

.. tj. např. atom vodíku v souř. reprezentaci:

$$\psi(\vec{X},\underset{r\,\vec{n}}{\vec{x}}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}e^{i\vec{P}_{CMS}\cdot\vec{X}}\cdot R_{nl}(r)Y_{lm}(\vec{n})$$

$\rightarrow$ jediné čím se pozná, že 2-částicový systém ... $M \rightarrow \mu = \frac{M_1M_2}{M_1+M_2}$

... stejné jako $H = pe$ je e^+e^- (pozitronium), $p^+\mu^-$, p^+p^- (protonium), $d\bar{e}$ (deuterium)

$\rightarrow$ liší se jen μ ... př... m_e od μ pro H se liší o méně než 1‰