

Slabikář kvantové mechaniky

Ladislav Hlavatý

1. února 2007

Obávám se, že není možno se naučit kvantovou mechaniku "pořádně a jednou provždy", nýbrž že se jedná o postupný proces. Cílem tohoto textu je především uvedení do problematiky a seznámení se s nejdůležitějšími příklady a některými důsledky kvantově mechanického popisu mikrosvěta.

Z tohoto důvodu neusiluji o matematickou rigoróznost na současné úrovni znalostí, nýbrž zhruba o takovou, kterou používali "otcové zakladatelé". To souvisí i s mým přesvědčením, že proces učení musí do jisté míry napodobovat historii vývoje daného oboru.

Lze jen doufat, že atraktivita fyzikálních důsledků a "paradoxů" kvantové mechaniky uvedených v této přednášce bude motivací ke studiu matematických struktur nutných k její přesnější matematické formulaci (viz např [1]) a tím i k hlubšímu pochopení.

Literatura

- [1] J. Blank, P. Exner, and M. Havlíček. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, Praha, 1993.
- [2] I. Štoll and J. Tolar. *Teoretická fyzika. Skripta*. ČVUT, Praha, 1984.
- [3] M. Uhlíř. *Úvod do atomové fyziky. Skripta FJFI*. Vydavatelství ČVUT, Praha, 1971,1975.
- [4] J. Klíma and B. Velický. *Kvantová mechanika I. Skripta*. MFF UK, Praha, 1992.
- [5] J. Formánek. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, Praha, 1983.
- [6] V.S. Vladimirov *Uravnenija matematičeskoj fiziki*. Nauka, Moskva, 1981.
- [7] I. Štoll. *Elektrina a magnetismus. Skripta*. ČVUT, Praha, 1994.

1 Charakteristické rysy kvantové mechaniky

Technická dokonalost přístrojů a metod dosáhla na přelomu 19. a 20. století takové kvality, že bylo možno zkoumat fyzikální jevy, na které mají podstatný vliv elementární procesy na úrovni atomů. (t.j. při charakteristických rozměrech 10^{-10} m a hybnostech řádu 10^{-24} kg m/s.). Při jejich zkoumání se objevují nové **fyzikální objekty** jako elektron či foton, **které nemají ani čistě částicové ani čistě vlnové vlastnosti**. Můžeme je nazývat **kvanta** (odtud kvantová mechanika – mechanika kvant) či **kvantové částice**. Teoreticko-fyzikální popis takových objektů je obsahem kvantové mechaniky.

Vzhledem k tomu, že s mikroskopickými jevy a procesy nemáme přímou smyslovou zkušenost, **chybí nám pro jejich popis přirozený jazyk**. Pomáháme si proto pojmy známými z makrosvěta, které ale nemusí být vždy adekvátní. (Příkladem toho jsou například různé pokusy vysvětlit pojem spinu analogiemi s momentem hybnosti.) Dokonce se zdá, že při popisu jevů v mikrosvětě někdy selhává i přirozená intuice a tzv. zdravý rozum. To ale nemusí být příliš překvapivé, neboť i ty jsou extrapolací a zevšeobecněním zkušeností z makrosvěta. Je proto třeba jako vždy se nakonec uchýlit k matematice a konfrontaci teorie s experimentem.

Hlavním matematickým nástrojem kvantové mechaniky je funkcionální analýza, neboť fyzikální stavy jsou popsány prvky Hilbertova prostoru a pozorovatelné lineárními operátory na něm. Jakkoliv se zdá tento popis při prvním setkání nepřirozený a abstraktní, je jediný známý, který dává správné předpovědi.

Předpovědi kvantové mechaniky mají **téměř výlučně statistický charakter**. Předpovídají pouze pravděpodobnosti fyzikálních jevů, nikoliv jejich deterministický vývoj. Tento statistický charakter není důsledkem matematického popisu předpokládané nedokonalosti našich přístrojů, nýbrž, jak uvidíme později, je přímým důsledkem postulátů kvantové mechaniky tzn. matematického popisu mikrosvěta.

Cvičení 1 *Jaká je pravděpodobnost nalezení klasického jednorozměrného oscilátoru s energií E v intervalu $(x, x + dx)$? Co potřebujeme znát, chceme-li tento pravděpodobnostní výrok změnit v deterministickou předpověď?*

Jako každá fundamentálně nová teorie, i kvantová mechanika mění naše představy o vlastnostech materiálního světa. Relace neurčitosti, které jsou jejím důsledkem, představují fyzikální zákon, který omezuje možnosti poznání přírody a má nemalý vliv na filosofické aspekty vědy.

Studium kvantové mechaniky a její postupné chápání je náročné nejen kvůli nutnosti naučit se mnoho nových faktů a matematiky, ale i kvůli psychologické bariéře, která vzniká, kdykoliv se setkáme s něčím, co nás nutí opustit zažitá schemata pramenící z extrapolace každodenní zkušenosti.

2 Zrod kvantové mechaniky

Základní úlohou všech odvětví teoretické fyziky (mechaniky, elektřiny a magnetismu, termodynamiky, ...) je popis *množiny stavů a určení časového vývoje* fyzikálních systémů. Jinými slovy to znamená určení měřitelných veličin tzv. *pozorovatelných*, které jsou pro zkoumaný systém relevantní, a předpovězení vývoje jejich hodnot. Jejich příkladem je poloha, hybnost, energie, elektrická a magnetická intenzita, teplota, objem atd.

Klasická fyzika popisuje pozorovatelné jako funkce na prostoru stavů. Jejich hodnoty pro daný stav jsou přesně určeny a fyzikální zákony určující jejich časový vývoj jsou popsány diferenciálními rovnicemi. Tímto způsobem lze popsat širokou třídu jevů, ve kterých interagují jak hmotné objekty, tak fyzikální pole či záření. Rozsah těchto jevů je tak velký, že na konci minulého století se zdálo, že vývoj fyziky je ukončen, že známe všechny fyzikální zákony. Bohužel či bohudík se ukázalo, že to není pravda, a že klasická fyzika nedokáže bezesporně popsat některé jevy, ke kterým dochází v důsledku interakcí na atomární úrovni.

Cvičení 2 *Popište jednorozměrný harmonický oscilátor Hamiltonovskou formulací klasické mechaniky. Napište a vyřešte pohybové rovnice. Napište rovnici pro fázové trajektorie. Hodnotou jaké fyzikální veličiny jsou určeny?*

Základní fyzikální objekty – **hmota a záření** – jsou v klasické fyzice **popsány zcela odlišným způsobem**. Hmotné objekty jsou lokalizované a řídí se Newtonovými pohybovými rovnicemi, zatímco záření je nelokalizované a řídí se Maxwellovými polními rovnicemi. Dochází u něj k vlnovým jevům např. interferenci a ohybu.

V makrosvětě je toto rozlišení plně oprávněné a odlišný způsob popisu kvalitativně různých objektů zcela logický. Pokusy prováděné počátkem tohoto století však ukázaly, že pro popis objektů v mikrosvětě jsou původní představy neadekvátní, ba dokonce vedou k předpovědím které jsou v rozporu s pozorováními.

Příkladem takového rozporu je Rutherfordův planetární model atomu, který předpokládá, že záporně nabitě elektrony obíhají okolo kladně nabitého jádra podobně jako planety okolo Slunce. Podle této představy jsou elektrony klasické, elektricky nabitě (na rozdíl od planet!) částice. Problém je však v tom, že z teorie elektromagnetického pole pak vyplývá, že by při pohybu po zakřivené dráze měly produkovat elektromagnetické záření na úkor své vlastní mechanické energie.

Předpovědi klasické teorie tedy je, že atomy by měly produkovat záření se spojitým spektrem energií a měly by mít konečnou, dokonce velmi krátkou (cca 10^{-10} sec) dobu života. Obě tyto předpovědi jsou v rozporu s pozorováním. Smířit tento rozpor teorie a experimentu se podařilo až kvantové mechanice za cenu opuštění některých zdánlivě přirozených představ, v tomto případě elektronu jako částice pohybující se po nějaké dráze.

Cvičení 3 Spočítejte charakteristickou dobu života elektronu v atomu vodíku pokud jej považujeme za klasickou částici pohybující se po kruhové dráze o (Bohrově) poloměru $a \approx 10^{-10}$ m. (viz [2], příklad 9.52)

K dalším klasicky nevysvětlitelným jevům, jež stály u zrodu kvantové mechaniky patří Planckova formule pro záření černého tělesa, fotoefekt a Comptonův rozptyl elektronů, které popíšeme v příštích podkapitolách. Ukáže se, že pro jejich vysvětlení se budeme muset vzdát i představy o čistě vlnové povaze elektromagnetického záření.

2.1 Planckův vyzařovací zákon

Jedním z problémů klasické fyziky je popsat spektrální rozdělení intenzity záření tzv. absolutně černého tělesa, přesněji její závislost na frekvenci záření a teplotě tělesa.

Absolutně černé těleso, tzn. těleso které neodráží žádné vnější záření, lze realizovat otvorem v dutině, jejíž vnější stěny jsou ohřáty na jistou teplotu T . Takto zahřátá dutina vyzařuje elektromagnetické záření, jehož experimentálně změřené spektrální rozdělení je v rozporu s klasickým popisem tohoto jevu.

Oscilací atomů stěn dutiny zahřáté na teplotu T se v dutině vytváří elektromagnetické pole (viz [2] Kap.8), jež je zdrojem záření černého tělesa. Jeho složky $\vec{E}(\vec{x}, t)$, $\vec{B}(\vec{x}, t)$ musí splňovat Maxwellovy–Lorentzovy rovnice beze zdrojů

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0. \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0. \quad (2)$$

a okrajové podmínky, které vyžadují, aby tečné složky elektrického a normálové složky magnetického pole byly na stěnách dutiny nulové, tj.

$$\vec{N} \cdot \vec{E} = 0, \quad \vec{N} \times \vec{B} = 0, \quad (3)$$

kde $\vec{N}$ je jednotkový vektor směřující ve směru normály ke stěně dutiny. Jako první krok odvození Planckova zákona ukážeme, že takovéto pole je ekvivalentní systému neinteragujících harmonických oscilátorů.

Nechť $\vec{E}$, $\vec{B}$ vyhovují podmínkám (1)–(3). Z II. serie Maxwellových –Lorentzových rovnic plyne, že elektromagnetické pole lze popsat čtveřicí potenciálů $(\phi(\vec{x}, t), \vec{A}(\vec{x}, t))$ způsobem

$$\vec{E} = -\operatorname{grad} \phi' - \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t}, \quad \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}'. \quad (4)$$

Pro Maxwellovy rovnice beze zdrojů lze kalibrační transformací dosáhnout toho, že elektromagnetické potenciály $(\phi, \vec{A})$ splňují $\phi = 0$, $\operatorname{div} \vec{A} = 0$ a okrajové podmínky $\vec{N} \times \vec{A} = 0$ na stěnách dutiny.

Kalibrační transformace

$$\phi(\vec{x}, t) = \phi'(\vec{x}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t}(\vec{x}, t) \quad (5)$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}'(\vec{x}, t) + \text{grad } \lambda(\vec{x}, t), \quad (6)$$

která zaručí splnění výše uvedených podmínek, je dána funkcí λ , která splňuje rovnice

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \phi' \quad (7)$$

$$\Delta \lambda = -\text{div } \vec{A}' \quad (8)$$

spolu s okrajovými podmínkami na stěnách

$$\vec{N} \times \text{grad } \lambda = -\vec{N} \times \vec{A}'. \quad (9)$$

Fakt, že všechny tyto podmínky lze splnit dostatečně hladkou funkcí λ je zaručen rovnicí $\text{div } \vec{E} = 0$ a požadavky na tečné a normálové složky intenzit na stěnách dutiny.

Předpokládejme dále, že dutina má tvar krychle o hraně L . Rozložíme složky vektorového potenciálu do trojné Fourierovy řady (viz např. [3]).

$$A_1(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3} Q_1(\vec{m}, t) \cos(m_1 x_1 \pi / L) \sin(m_2 x_2 \pi / L) \sin(m_3 x_3 \pi / L) \quad (10)$$

$$A_2(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3} Q_2(\vec{m}, t) \sin(m_1 x_1 \pi / L) \cos(m_2 x_2 \pi / L) \sin(m_3 x_3 \pi / L) \quad (11)$$

$$A_3(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3} Q_3(\vec{m}, t) \sin(m_1 x_1 \pi / L) \sin(m_2 x_2 \pi / L) \cos(m_3 x_3 \pi / L) \quad (12)$$

Důvod pro tento speciální výběr Fourierova rozvoje je následující: Okrajové podmínky $\vec{N} \times \vec{A} = 0$ na stěnách krychle implikují

$$A_1(x_1, x_2, 0, t) = 0, \quad A_1(x_1, 0, x_3, t) = 0$$

takže funkci A_1 , lze rozšířit na interval $< -L, L > \times < -L, L > \times < -L, L >$ jako spojitou funkci lichou v proměnných x_2, x_3 . O hodnotách $A_1(0, x_2, x_3)$ žádnou informaci nemáme, můžeme ji nicméně prodloužit sudě v x_1 . Fourierův rozklad liché spojitě funkce na intervalu $< -L, L >$ lze provést pomocí funkcí $\sin m x \pi / L$, zatímco rozklad sudé funkce pomocí funkcí $\cos m x \pi / L$. Odtud plyne možnost rozkladu (10). Důležité je, že podmínka

$$A_1(x_1, x_2, L, t) = 0, \quad A_1(x_1, L, x_3, t) = 0$$

neklade na koeficienty rozvoje žádné dodatečné omezení na rozdíl od případu, kdybychom užili jiné typy rozvoje, např. pomocí funkcí $\cos mx\pi/L$ pro sudá rozšíření A_1 v x_2, x_3 . Stejnou argumentací dostaneme rozklady funkcí A_2, A_3 způsobem (11,12).

Z rovnic pro potenciály ve vybrané kalibraci

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} A_i - \Delta A_i = 0, \quad (13)$$

které dostaneme z (1), pak plyne, že koeficienty $\vec{Q}_{\vec{m}}(t) \equiv \vec{Q}(\vec{m}, t)$ pro $\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3$ (trojice celých nezáporných čísel) splňují jednoduché rovnice

$$\ddot{\vec{Q}}_{\vec{m}} + \omega_{\vec{m}}^2 \vec{Q}_{\vec{m}} = 0 \quad (14)$$

kde

$$\omega_{\vec{m}} = \frac{\pi c}{L} \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2} \quad (15)$$

a c je rychlost světla.

Kalibrační podmínka $\text{div} \vec{A} = 0$ přejde na tvar

$$\vec{m} \cdot \vec{Q}_{\vec{m}} = 0 \quad (16)$$

ze kterého plyne, že pro každé $\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3$ existují dvě lineárně nezávislé funkce $Q_{\vec{m}}^\alpha(t)$, $\alpha = 1, 2$ splňující (14,16), což odpovídá dvěma polarizacím elektromagnetického záření.

Cvičení 4 Ze vzorců (10)–(12) odvoďte formule pro složky elektrického a magnetického pole $\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)$.

Energie elektromagnetického pole

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2) dV$$

po dosazení (10)–(12) a integraci přejde na tvar

$$\mathcal{E} = \frac{\epsilon_0 V}{16} \sum_{\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3} \sum_{\alpha=1,2} (\dot{Q}_{\vec{m}}^{\alpha 2} + \omega_{\vec{m}}^2 Q_{\vec{m}}^{\alpha 2}). \quad (17)$$

Z rovnic (14,17) vidíme, že elektromagnetické pole v uzavřené dutině je ekvivalentní soustavě nezávislých harmonických oscilátorů (stojatých vln) číslovaných vektory $\vec{m} \in \mathbf{Z}_+^3$.

Elektromagnetické intenzity nejsou plně určeny, neboť nejsou dány žádné počáteční podmínky. Na druhé straně však víme, že elektromagnetické pole je v termodynamické rovnováze se stěnami dutiny o teplotě T a lze jej tedy popsat metodami

statistické fyziky. Z tohoto hlediska je možno na *elektromagnetické pole v dutině pohlížet jako na soubor oscilátorů, přičemž každý z nich může interakcí s termostatem nabývat různých energií*. Nás budou zajímat střední energie $\overline{\epsilon(\nu, T)}$ oscilátorů s frekvencí $\nu_{\vec{m}} = \omega_{\vec{m}}/(2\pi)$ při teplotě T , neboť energii elektromagnetických vln, jejichž frekvence leží v intervalu $< \nu, \nu + d\nu >$, pak lze spočítat jako součet středních energií oscilátorů s frekvencemi v témže intervalu.

Vzhledem k tomu, že energie elektromagnetického pole (17) je dána součtem energií jednotlivých oscilátorů, jejichž pohybové rovnice (14) jsou vzájemně nezávislé, můžeme předpokládat, že statistický soubor oscilátorů se řídí Boltzmannovou statistikou s rozdělovací funkcí.

$$P = A e^{-\frac{\mathcal{E}}{kT}} = \prod_{\vec{m}, \alpha} P_{\vec{m}}^{\alpha}, \quad P_{\vec{m}}^{\alpha} \propto e^{-E_{\vec{m}}^{\alpha}/(kT)}, \quad (18)$$

kde k je Boltzmannova konstanta $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/grad}$.

Jednotlivé oscilátory jsou číslovány celočíselnými vektory $\vec{m}$ a směrem polarizace α . Přiřadíme-li každé dvojici oscilátorů s pevným $\vec{m}$ bod v $\mathbf{Z}_+^3$, pak v důsledku (15) množina oscilátorů s frekvencemi v intervalu $< \nu, \nu + d\nu >$ leží v jednom oktantu kulové slupky poloměru $\frac{2L\nu}{c}$ a tloušťky $\frac{2L}{c}d\nu$ v prostoru vektorů v $\mathbf{Z}^3$. Počet oscilátorů s frekvencemi v intervalu $< \nu, \nu + d\nu >$ je pak roven dvoj-násobku (kvůli polarizacím) počtu bodů v této slupce, tedy

$$n(\nu) = 2 \frac{1}{8} \left(\frac{2L\nu}{c} \right)^3 4\pi\nu^2 d\nu = V \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu, \quad (19)$$

kde V je objem dutiny a c je rychlost světla. Hustota energie oscilátorů (elektromagnetického pole) připadající na zmíněný interval frekvencí tedy je

$$\rho(\nu, T) d\nu = \overline{\epsilon(\nu, T)} \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (20)$$

Předpokládáme-li, že se jedná o klasické oscilátory, jejichž energie může nabývat libovolných kladných hodnot $E(q, p) = \alpha p^2 + \beta q^2$ a rozdělovací funkce souboru stavů oscilátoru daných hybností p a polohou q je

$$P(q, p) = a e^{-\frac{E(q, p)}{kT}},$$

pak střední hodnota oscilátorů je nezávislá na ν

$$\overline{\epsilon(\nu, T)} = kT \quad (21)$$

a hustota energie pole v dutině připadající na interval frekvencí $< \nu, \nu + d\nu >$ je

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 kT d\nu$$

(Rayleigh–Jeansova formule). Tato rozdělovací funkce však neodpovídá experimentálním hodnotám pro velké frekvence ν . Navíc celková hustota energie elektromagnetického pole

$$\epsilon = \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu \quad (22)$$

diverguje.

Cvičení 5 *Odvodte formuli (21).*

Experimentálně naměřené hodnoty spektrálního rozdělení hustoty energie dobře popisuje funkce navržená M. Planckem ve tvaru

$$\boxed{\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}}, \quad (23)$$

kde experimentálně určená hodnota konstanty $h = 6.62 \times 10^{-34}$ Js. (Viz obr.1)

Obrázek 1: Spektrální rozdělení hustoty energie absolutně černého tělesa pro teploty 900 K, 1100 K, 1300K, 1500 K

Cvičení 6 *Napište rovnice určující polohu maxima Planckovy rozdělovací funkce při dané teplotě. Jak se mění poloha maxima s teplotou (Wienův posunovací zákon)?*

Cvičení 7 *Určete přibližně teplotu, při níž se spektrální rozdělení hustoty energie záření černého tělesa spočtené na základě Rayleighova – Jeansova zákona liší ve viditelné oblasti od veličiny měřené o 5 procent. Jak velký je tento rozdíl v oblasti maxima ρ při této teplotě? Závisí poměr této odchylky na teplotě?*

Cvičení 8 *Napište rozdělovací funkci hustoty záření černého tělesa podle vlnových délek. Napište rovnici určující její maximum pro danou teplotu.*

K odvození rozdělovací funkce (23) je třeba učinit následující podivný předpoklad (Max Planck, 1900):

Harmonické oscilátory, jejichž soubor je z energetického hlediska ekvivalentní elektromagnetickému poli v dutině, nemohou nabývat libovolných hodnot energie, ale pouze takových, které jsou celým násobkem základního kvanta energie ϵ_0 , tzn. $E_n = n\epsilon_0$. Základní kvantum energie oscilátoru je úměrné jeho frekvenci.

$$\epsilon_0 = \epsilon_0(\nu) = h\nu.$$

Stavy harmonického oscilátoru jsou tedy číslovány kladnými celými čísly n a rozdělovací funkce stavů oscilátoru s frekvencí ν a energií E_n je

$$P_n = A^{-1} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}.$$

Hodnotu konstanty A dostaneme z normovací podmínky $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$. Sečtením geometrické řady

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}} = 1/[1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}].$$

Střední hodnota energie harmonických oscilátorů s frekvencí ν je pak

$$\overline{\epsilon(\nu, T)} = \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu P_n = A^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{kT}} = A^{-1} \left[-\frac{\partial A}{\partial (\frac{1}{kT})} \right] = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Energii elektromagnetického pole v dutině připadající na interval frekvencí $< \nu, \nu + d\nu >$ pak opět spočítáme jako součin střední hodnoty energie oscilátorů s frekvencí ν a počtu oscilátorů s frekvencemi uvnitř daného intervalu, z čehož dostaneme Planckovu formuli (23).

Celková hustota energie elektromagnetického pole (22) spočítaná z takto určené rozdělovací funkce nediverguje a její teplotní závislost odpovídá Stefan–Boltzmannovu zákonu.

$$\epsilon(T) = \frac{8\pi}{c^3} h \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{k^4 T^4}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \kappa T^4,$$

kde

$$\kappa = \frac{8\pi k^4}{c^3 h^3} \frac{\pi^4}{15}.$$

Závěr: Rozdělovací funkci záření absolutně černého tělesa lze odvodit pomocí předpokladu, že energie harmonického oscilátoru s frekvencí ν může nabývat pouze diskretních hodnot $E_n = nh\nu$, kde h je univerzální konstanta.

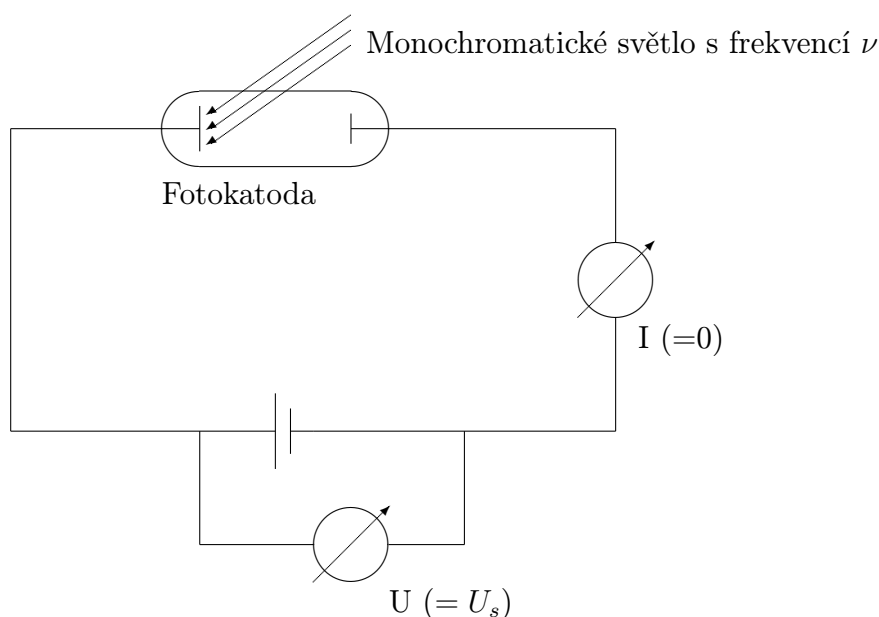
Uvědomme si, že jakkoliv je tento předpoklad zvláštní, není v rozporu s naší zkušeností, neboť díky velikosti Planckovy konstanty h jsou nespojitosti energií $h\nu$ i pro velmi rychlé mechanické oscilátory hluboko pod mezí pozorovacích chyb.

Existenci diskretních hodnot energie se podařilo prokázat i u atomů (konkrétně rtuti) v serii pokusů Francka a Hertze v letech 1914–1919 (viz [3]).

2.2 Fotoefekt

Potvrzením Planckovy hypotézy o kvantovém charakteru energie elektromagnetického pole bylo i Einsteinovo vysvětlení fotoefektu – emise elektronů stimulované světelným zářením, pozorované poprvé Lenardem v roce 1903.

Popíšme tento experiment v pozdějším uspořádání, které provedl Milikan v roce 1916 (viz obr.2). Na fotokatodu zapojenou do elektrického obvodu dopadá monochromatické světlo s frekvencí ν , která se postupně mění. Světlo produkuje elektrický proud. Zdroj stejnosměrného napětí je zapojen tak, že vytváří elektrické pole, které vrací elektrony emitované světelným zářením zpět.



Obrázek 2: Milikanovo zapojení pro měření fotoefektu

Při jisté velikosti napětí $U_s = U_s(\nu)$ proud přestane procházet. Experimentálně zjištěná závislost napětí U_s na frekvenci světelného záření je lineární.

$$U_s = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0)$$

Einsteinovo vysvětlení faktu, že od jisté frekvence níže nejsou fotokatodou emitovány žádné elektrony (neprochází proud), spočívá v tom, že v procesu emise elektronu působí vždy pouze určité celistvé kvantum záření – foton, jehož energie je ve shodě s Planckovou hypotézou úměrná frekvenci $E = h\nu$. („...the energy of a light ... consists of a finite number of energy quanta ... each of which moves without dividing and can only be absorbed and emitted as a whole.”) Kinetická energie

emitovaného elektronu je

$$E_{kin} = eU_s(\nu) = h(\nu - \nu_0) = E_{foton} - E_{ion}. \quad (24)$$

Pro frekvence nižší než $\nu_0 = E_{ion}/h$, kde E_{ion} je ionizační energie materiálu fotokatody, k emisi elektronů nedochází ani při zvětšování intenzity záření (tím se pouze zvětšuje počet neúspěšných pokusů překonat ionizační bariéru), zatímco pro $\nu > \nu_0$ získávají elektrony energii (24). Konstanta úměrnosti h , změřená z fotoefektu se shodovala s konstantou určenou ze záření černého tělesa.

Závěr: Existují *kvanta světelného záření – fotony*, která působí v elementárním procesu uvolňujícím jeden elektron. Energie jednoho fotonu je $h\nu$ kde ν je frekvence odpovídajícího záření a h je konstanta určená z Planckova vyzařovacího zákona.

Cvičení 9 *Kolik fotonů za vteřinu emituje stowattová sodíková výbojka mající 30 procentní světelnou účinnost? Kolik z nich se dostane do oka pozorovatele ve vzdálenosti 10 km? (Poloměr čočky oka je asi 5 mm.)*

2.3 Comptonův rozptyl

V roce 1923 provedl A.H. Compton pokus, který měl odhalit, zda se kvanta elektromagnetického záření chovají jako částice, tzn. zda vedle energie mají též definovanou hybnost. V tomto pokusu byl měřen rozptyl elektromagnetického (rentgenového) záření na grafitu, v jehož krystalické mříži jsou elektrony relativně volné.

Podle klasické teorie je elektromagnetické záření pohlcováno látkou a pak opět vyzařeno. Přitom dochází k předání hybnosti látce (tj. všem elektronům současně), což se interpretuje jako tzv. tlak světla. V klidové soustavě elektronu pak dojde k emisi záření se stejnou vlnovou délkou a nulovou střední hybností. V laboratorní soustavě, ve které mají elektrony hybnost $\vec{P}_e$ a energii E_e , pak pozorujeme podle Dopplerova principu změnu vlnové délky záření

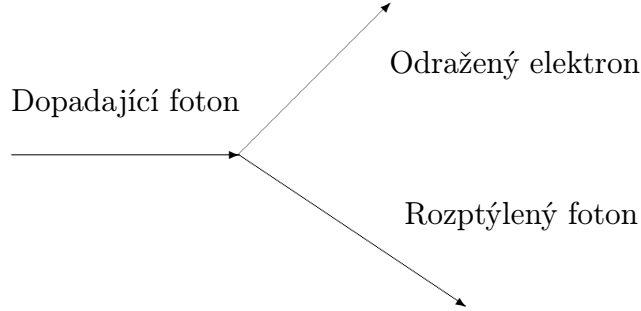
$$(\Delta\lambda)_{klas} = \lambda_0 \frac{cP_e}{E_e - cP_e} (1 - \cos\Theta), \quad (25)$$

kde λ_0 je délka dopadající vlny, Θ je úhel, pod kterým pozorujeme emitované záření, E_e, P_e jsou velikost energie a hybnosti elektronu, které s délkou ozařování rostou.

Podívejme se jak bude tento jev probíhat, pokud se fotony na atomární úrovni chovají jako částice s danou energií a hybností (viz Obr.3). V tom případě je třeba elementární proces rozptylu záření popsat jako srážku dvou částic, fotonu a elektronu ("... when an X-ray quantum is scattered it spends all of its energy and momentum upon some particular electron."), při které se celková energie a hybnost zachovává.

$$\epsilon_{\nu_0} + m_e c^2 = \epsilon_\nu + E_e \quad (26)$$

$$\vec{p}_{\nu_0} + 0 = \vec{p}_\nu + \vec{p}_e, \quad (27)$$



Obrázek 3: Rozptyl elektromagnetického záření na elektronu

kde

$$\vec{p}_e = \frac{m_e \vec{v}_e}{\sqrt{1 - v_e^2/c^2}}, \quad E_e = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - v_e^2/c^2}},$$

$$\epsilon_\nu = h\nu, \quad |\vec{p}_\nu| = h\nu/c = h/\lambda$$

a v_e je rychlost odraženého elektronu. Ze zákona zachování hybnosti plyne

$$(\vec{p}_{\nu_0} - \vec{p}_\nu)^2 = \frac{\hbar^2}{c^2}(\nu^2 + \nu_0^2 - 2\nu\nu_0 \cos \Theta) =$$

$$\vec{p}_e^2 = \frac{m_e^2 v_e^2}{1 - v_e^2/c^2} = E_e^2/c^2 - m_e^2 c^2.$$

Použijeme-li ještě zákon zachování energie, pak algebraickými úpravami dostaneme

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \Theta), \quad (28)$$

což je vzorec pro vlnovou délku emitovaného záření v závislosti na úhlu emise pro počáteční nulovou hybnost elektronu. Veličina $\frac{h}{m_e c}$ se často nazývá *Comptonova vlnová délka elektronu*. Její hodnota je $2.4 \times 10^{-12} m$.

Předpokládáme-li, že opakovaným rozptylem EM záření získaly elektrony hybnost rovnoběžnou se směrem dopadajícího záření velikosti P_e , pak vzorec pro Comptonovský rozptyl se změní na

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{(\lambda_0 P_e + h)c}{\sqrt{m_e^2 c^4 + P_e^2 c^2} - P_e c}(1 - \cos \Theta). \quad (29)$$

Pro $P_e \gg h/\lambda$ dostáváme klasickou formuli (25). Comptonovy vzorce (29) resp. (28) se však experimentálně potvrdily i pro krátkovlnné rentgenovské záření.

Závěr: Kvantá světelného či obecněji elektromagnetického záření mají nejen definovanou energii, ale i hybnost, jejíž velikost je nepřímo úměrná vlnové délce záření $|\vec{p}| = h/\lambda$.

Cvičení 10 *Určete hybnost fotonů viditelného světla a Röntgenova záření.*

Cvičení 11 *Jakou vlnovou délku má elektromagnetické záření, jehož zdrojem je elektron – pozitronová anihilace*

$$e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$$

v klidu?

2.4 Shrnutí

Z výše uvedených vysvětlení experimentálních fakt plyne, že v mikrosvětě, tj. při zkoumání atomárních jevů:

1. Existují fyzikální objekty – kvanta, kvantové částice – mající jak vlnový tak částicový charakter.
2. Množiny hodnot některých fyzikálních veličin, např. energie či momentu hybnosti, mohou být diskrétní tzn. tyto veličiny se mohou měnit pouze o konečné přírůstky.

Tato podivuhodná experimentální fakta se nepodařilo vysvětlit metodami klasické fyziky, ale bylo nutno vybudovat novou fyzikální teorii a použít nové matematické struktury a techniky. To vedlo ke zrodu kvantové teorie, která se obecně zabývá širokou třídou mikroskopických fyzikálních systémů.

Z pedagogických důvodů začneme její výklad popisem jedné kvantové částice bez vazeb, jejímž typickým reprezentantem je například elektron. Při studiu kvantové teorie je třeba mít na mysli, že jako u každé fyzikální teorie **se nejedná o odvození ve smyslu, na který jsme zvyklí z matematiky, nýbrž o sérii rozumných návrhů a předpokladů vedoucích k předpovědím, jejichž správnost musí prověřit experimenty.** Ostatně, klasickou mechaniku Newton také neodvodil, nýbrž postuloval.

2.5 De Broglieova hypotéza a Schrödingerova rovnice

Z vysvětlení experimentálních fakt v předchozích kapitolách plyne, že při zkoumání atomárních jevů záření přestává mít čistě vlnový charakter a chová se v některých aspektech jako soubor částic. Zdá se tedy užitečné zavést nový fyzikální pojem –

kvantové částice – popisující fyzikální objekty vyskytující se na atomárních a nižších úrovních.

Pod vlivem poznatků o duálním částicově–vlnovém charakteru světla De Broglie v roce 1923 usoudil, že tento dualismus je vlastností všech mikroskopických objektů a že nejen elektromagnetické záření, ale i hmotné objekty (např. elektrony) se mohou chovat buď jako vlna nebo jako částice, podle toho jaké jevy, v nichž se účastní, zkoumáme. Vyslovil hypotézu, že *pro popis jevů na atomární úrovni je třeba přiřadit volným kvantovým částicím s hybností $\vec{p}$ a energií E – nikoliv bod fázového prostoru nýbrž rovinou monochromatickou vlnu $\psi_{\vec{p},E}$, jejíž frekvence je (stejně jako pro foton) úměrná energii a jejíž vlnová délka je nepřímo úměrná hybnosti částice, přesněji funkci*

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)}, \quad (30)$$

kde A je zatím neurčená konstanta a $\hbar := h/2\pi = 1.054572 \times 10^{-34}$ Js.

Abychom plně docenili hloubku a smělost této hypotézy, je třeba si uvědomit, že v té době nebyly známy žádné pokusy dokazující vlnové vlastnosti hmotných částic jako je ohyb, či interference. Ty se objevily až o několik let později, při zkoumání rozptylu elektronů na krystalech.

Cvičení 12 Určete vlnovou délku a frekvenci de Broglieovy vlny pro molekulu kyslíku ve vzduchu vašeho pokoje a pro částici o hmotnosti $10 \mu\text{g}$ pohybující se rychlostí zvuku.

Cvičení 13 Podle de Broglieovy hypotézy určete ohyb způsobený průletem tenisového míčku ($m = 0.1 \text{ kg}$) obdélníkovitým otvorem ve zdi o rozměrech $1 \times 1.5 \text{ m}$.

Cvičení 14 Na jakou rychlost je třeba urychlit elektrony aby bylo možno pozorovat jejich difrakci na krystalové mříži s charakteristickou vzdáleností atomů 0.1 nm ?

Je-li vztah mezi hybností kvanta a jeho energií stejný jako u klasické volné částice $E = \vec{p}^2/2m$ (případně $E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ pro kvantum pohybující se rychlostí blízkou rychlosti světla), pak to znamená že de Broglieova vlna nesplňuje vlnovou rovnici (13), která plyne z teorie elektromagnetického pole. Otázkou tedy je, zda a jakou rovnici splňuje. Tuto rovnici našel v roce 1925 E. Schrödinger a nese jeho jméno.

K odvození rovnice pro de Broglieovy vlny je nejsnazší vyjít z výše uvedených klasických vztahů mezi energií a hybností, které vlastně představují disperzní relace, a použít identity

$$p_i \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi, E \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (31)$$

plynoucí z popisu kvant příslušnou de Broglieovou vlnou. Odtud již celkem přímočaře dostaneme rovnici pro de Broglieovu vlnu

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^3 \frac{p_i^2}{2m} \psi = -\frac{i}{2m\hbar} \sum_{i=1}^3 (-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}) \psi \quad (32)$$

E. Schrödinger postuloval platnost rovnice

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \psi \quad (33)$$

i pro kvantovou částici, která se pohybuje pod vlivem sil daných potenciálovým polem $V(\vec{x})$. Diferenciální rovnice pro vlnovou funkci takovéto kvantové částice se obvykle píše ve tvaru

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{x}) \psi} \quad (34)$$

a nazývá se *Schrödingerova rovnice*. Lineární operátor na pravé straně Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(\vec{x}) \quad (35)$$

se nazývá *hamiltonián*. (Použili jsme zde obvyklé konvence učebnic kvantové mechaniky, že symboly pro operátory jsou označeny stříškou.)

Řešením Schrödingerovy rovnice (32) pro "vlnou kvantovou částici" (což může být např. elektron pohybující se mimo elektromagnetické pole) není pouze de Broglieova vlna, ale i mnoho jiných funkcí čtyř proměnných. Díky linearitě Schrödingerovy rovnice je řešením (32) i lineární superpozice de Broglieových vln odpovídajících různým hybnostem

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - \frac{p^2}{2m}t)} d^3p. \quad (36)$$

To je velmi důležité, neboť monochromatická vlna (30) má jenom některé vlastnosti odpovídající volné částici, totiž rovnoměrnou a přímočarou rychlost šíření, ale nedává žádnou informaci o její poloze. Chceme-li do vlnového popisu částice zahrnout i další její vlastnosti, např. lokalizovatelnost v určité části prostoru, pak musíme použít jiný typ řešení než je čistá de Broglieova vlna.

Cvičení 15 *Nechť $V(\vec{x}) = 0$ (volná částice) a vlnová funkce částice má v čase t_0 ("lokalizovaný") tvar*

$$g(\vec{x}) = C \exp[-A\vec{x}^2 + \vec{B}\vec{x}] \quad (37)$$

Pomocí Fourierovy transformace určete řešení Schrödingerovy rovnice $\psi(\vec{x}, t)$, které v čase t_0 má tvar $g(\vec{x})$, tj. splňuje počáteční podmínku $\psi(\vec{x}, t_0) = g(\vec{x})$, kde $\text{Re } A > 0$, $\vec{B} \in \mathbf{C}^3$, $C \in \mathbf{C}$.

Cvičení 16 *Nechť $\psi(x, y, z, t)$ je řešením Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Ukažte, že*

$$\tilde{\psi}(x, y, z, t) := \exp[-i \frac{Mg}{\hbar}(zt + gt^3/6)] \psi(x, y, z + gt^2/2, t)$$

je řešením Schrödingerovy rovnice pro částici v homogenním gravitačním poli (Avron-Herbstova formule). Je možné tuto formuli a její použití nějak zobecnit?

2.6 Bornova interpretace vlnové funkce

Jakmile se objevila Schrödingerova rovnice, která vedle de Broglieovy vlny připouští i mnoho dalších řešení, vznikla přirozeně otázka, jaký je jejich význam, neboli problém *fyzikální interpretace řešení Schrödingerovy rovnice*.

Zatímco řešení pohybových rovnic klasické mechaniky jsou snadno a přirozeně interpretovatelná jako dráhy hmotných bodů v prostoru, fyzikální význam řešení Schrödingerovy rovnice je na první pohled nejasný. Problém interpretace ještě navíc komplikuje fakt, že Schrödingerova rovnice je rovnicí v komplexním oboru, takže její řešení jsou komplexní funkce. Podotázkou tohoto problému pak je, zda všechna řešení jsou fyzikálně upotřebitelná.

Po mnoha marných pokusech interpretovat řešení Schrödingerovy rovnice jako silové pole obdobné elektromagnetickému či gravitačnímu byla navržena jeho statistická interpretace (Max Born, 1926):

Řešení Schrödingerovy rovnice udává časový vývoj pravděpodobnosti nalezení částice v různých oblastech prostoru: Je-li $\psi(x, y, z, t)$ řešení Schrödingerovy rovnice popisující kvantovou částici, pak kvadrát její absolutní hodnoty $|\psi(x, y, z, t)|^2$ je úměrný hustotě pravděpodobnosti nalezení částice v okamžiku t v místě s kartézskými souřadnicemi (x, y, z) . (Bornův postulát)

Cvičení 17 *Čemu je úměrná pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou (30) v oblasti $(x_1, x_2) \times (y_1, y_2) \times (z_1, z_2)$?*

Cvičení 18 *Čemu je úměrná hustota pravděpodobnosti pro řešení*

$$\psi(\vec{x}, t) = C e^{\frac{B^2}{4A}} \chi(t)^{-3/2} \exp\left\{-A \frac{[\vec{x} - \vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}\right\} \quad (38)$$

$$\chi(t) = 1 + \frac{2iA\hbar}{m}(t - t_0)$$

z příkladu 15 pro $A > 0$? Jak se mění poloha jejího maxima s časem? Čemu je rovna její střední kvadratická odchylka? Jak se mění s časem? Za jak dlouho se zdvojnásobí "šířka" vlnového balíku pro elektron lokalizovaný s přesností 1 cm a pro hmotný bod o hmotě 1 gram jehož těžiště je lokalizováno s přesností $10^{-6}m$?

Jaká omezení klade Bornův postulát na řešení Schrödingerovy rovnice? Pravděpodobnost nalezení částice v oblasti $O \subset \mathbf{R}^3$ je úměrná

$$\int_O |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz.$$

Koeficient úměrnosti je možno nalézt z požadavku, aby pravděpodobnost nalezení částice "kdekoli" se rovnala jedné. Tuto podmínku lze snadno splnit, položíme-li hustotu pravděpodobnosti rovnou

$$w(x, y, z, t) = A(\psi)^{-1} |\psi(x, y, z, t)|^2, \quad (39)$$

kde

$$A(\psi) = \int_{\mathbf{R}^3} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz, \quad (40)$$

pokud tento integrál existuje.

Fyzikálně snadno interpretovatelná jsou tedy taková řešení Schrödingerovy rovnice, která splňují

$$\int_{\mathbf{R}^3} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz < \infty. \quad (41)$$

Těmi se budeme v následujícím textu zabývat především.

3 Popis stavů kvantové částice

Schrödingerova rovnice má v kvantové mechanice stejnou roli jako Newtonova rovnice v mechanice klasické, **popisuje časový vývoj fyzikálního systému**. Matematicky jsou však typy obou rovnic odlišné. Zatímco Newtonovy rovnice jsou soustavou obyčejných diferenciálních rovnic, Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnicí. Z tohoto rozdílu plyne i odlišný způsob popisu stavu v daném okamžiku v klasické a kvantové mechanice.

3.1 Stavový prostor

Stav klasického systému v daném okamžiku je určen hodnotou všech poloh a rychlostí či poloh a hybností jednotlivých hmotných bodů. Znalost okamžitých hodnot pak jednoznačně určuje řešení pohybových rovnic. Přirozená otázka je, jak popsat stav kvantové částice.

Schrödingerova rovnice je parciální lineární diferenciální rovnicí 1. řádu v čase a její řešení je (při daných okrajových podmínkách) určeno volbou počáteční podmínky $\psi(\vec{x}, t = t_0) = g(\vec{x})$. tj. funkcí g . Přijmeme-li předpoklad, že Schrödingerova rovnice (34) popisuje časový vývoj kvantové částice, pak docházíme k závěru, že **okamžitý stav kvantové částice je určen komplexní funkcí tří proměnných** (Jak zvláštní!). Této funkci se obvykle říká *stavová* či *vlnová funkce částice*.

Bornova interpretace řešení Schrödingerovy rovnice klade na stavové funkce jistá omezení. Podmínka (41) platí pro libovolný čas t a musíme proto požadovat, aby každá funkce $g(\vec{x})$ popisující stav kvantové částice splňovala podmínku ($\vec{x} \equiv (x, y, z)$)

$$\int_{\mathbf{R}^3} |g(\vec{x})|^2 d^3x < \infty. \quad (42)$$

Tyto funkce nazýváme *kvadraticky integrovatelné* (na $\mathbf{R}^3$ s mírou d^3x). Mimo to funkce g a Cg , kde C je libovolné komplexní číslo dávají stejnou pravděpodobnostní interpretaci a popisují tedy tentýž stav kvantové částice.

Cvičení 19 *Jaká je pravděpodobnost nalezení elektronu vodíkového obalu ve vzdálenosti $(r, r + dr)$ od jádra, je-li popsán (v čase t_0) funkcí*

$$g(x, y, z) = Ae^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}/a_0}, \quad (43)$$

kde $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$ cm je tzv. Bohrov poloměr vodíku? Viz [4].

Díky Minkovského nerovnosti

$$\left(\int_{\mathbf{R}^3} |f + g|^2 d^3x\right)^{1/2} \leq \left(\int_{\mathbf{R}^3} |f|^2 d^3x\right)^{1/2} + \left(\int_{\mathbf{R}^3} |g|^2 d^3x\right)^{1/2},$$

jež platí pro funkce splňující (42), tvoří kvadraticky integrovatelné funkce lineární prostor. Odtud plyne tzv. **princip lineární superpozice stavů kvantové mechaniky jedné částice**: *Může-li se částice nacházet ve stavech popsaných funkcemi ψ_1, ψ_2 , pak existuje stav popsáný funkcí $a\psi_1 + b\psi_2$, kde a, b jsou libovolná komplexní čísla.*

Cvičení 20 *Leží minimalizující vlnový balík ve výše uvedeném prostoru? Přesněji, je funkce g ze cvičení (15) kvadraticky integrovatelná?*

Cvičení 21 *Leží de Broglieova vlna (30) ve výše uvedeném prostoru?*

Na lineárním vektorovém prostoru stavových funkcí splňujících podmínku (41) je možno zavést ještě bohatší matematickou strukturu, která má pro konstrukci kvantové mechaniky zásadní význam. Ukážeme totiž, že tento prostor (po jisté faktORIZACI) je Hilbertův, což pak použijeme k předpovědi výsledku měření fyzikálních veličin provedených na kvantovém systému v daném stavu.

3.1.1 Matematická vsuvka 1: Hilbertovy prostory

Více či méně zevrubné poučení o Hilbertových prostorech je možno najít v mnoha učebnicích (viz např. [1] a citace tam uvedené). Zde uvedeme jen základní definice a fakta, která budeme používat v této přednášce.

Definice 3.1.1 Sesquilineární formou na komplexním lineárním vektorovém prostoru V (ne nutně konečně rozměrném) nazveme zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbf{C}$ splňující

$$F(f + g, h) = F(f, h) + F(g, h), \quad F(f, g + h) = F(f, g) + F(f, h),$$

$$F(af, g) = a^* F(f, g), \quad F(f, ag) = a F(f, g),$$

kde $a \in \mathbf{C}$, $f, g, h \in V$ a hvězdička znamená komplexní sdružení.

Příklad: Na lineárním prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí na $\mathbf{R}^N$ lze zavést sesquilineární formu předpisem

$$F(g_1, g_2) \equiv (g_1, g_2) := \int_{\mathbf{R}^N} g_1^*(\vec{x}) g_2(\vec{x}) d^N x. \quad (44)$$

Definice 3.1.2 Zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbf{C}$ nazveme symetrickou formou pokud pro všechna $f, g \in V$ platí

$$F(g, f) = [F(f, g)]^* \quad (45)$$

Cvičení 22 Ukažte, že sesquilineární forma je symetrická tehdy a jen tehdy, když $F(f, f) \in \mathbf{R}$.

Definice 3.1.3 Zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbf{C}$ nazveme pozitivní formou pokud pro všechna $f \in V$ platí

$$F(f, f) \geq 0. \quad (46)$$

Pokud navíc

$$F(f, f) = 0 \Leftrightarrow f = 0, \quad (47)$$

pak tuto formu nazveme striktně pozitivní.

Sesquilineární forma (44) je pozitivní (a tedy i symetrická).

Tvrzení 3.1 Pozitivní sesquilineární forma splňuje pro každé $f, g \in V$ Schwartzovu nerovnost

$$|F(f, g)|^2 \leq F(f, f) F(g, g). \quad (48)$$

Přitom rovnost nastává, právě když existuje $\alpha \in \mathbf{C}$ tak, že

$$F(f + \alpha g, f + \alpha g) = 0 \text{ nebo } F(\alpha f + g, \alpha f + g) = 0. \quad (49)$$

Důkaz: Nechť $f, g \in V$. Pak z positivity a sesquilinearity dostaneme pro každé $\beta \in \mathbf{C}$

$$0 \leq F(f + \beta g, f + \beta g) = F(f, f) + \beta F(f, g) + \beta^* F(f, g)^* + |\beta|^2 F(g, g) \quad (50)$$

Pokud $F(f, f) = F(g, g) = 0$ pak volbou $\beta = -F(f, g)^*$ dostaneme (48). Ze striktní positivity absolutní hodnoty komplexního čísla plyne $F(f, g) = 0$ a snadno dokážeme i druhou část tvrzení ($\alpha = 0$).

Bez újmy na obecnosti můžeme nadále předpokládat, že např. $F(g, g) \neq 0$. Volbou $\beta = -F(f, g)^*/F(g, g)$ v (50), pak dostaneme nerovnost (48). Druhou část tvrzení dokážeme takto: Nechť platí první rovnost v (49). Z nerovnosti

$$0 \leq |\alpha^* F(g, g) + F(f, g)|^2$$

pak plyne $|F(f, g)|^2 \geq F(f, f)F(g, g)$, což spolu s (48) dává $|F(f, g)|^2 = F(f, f)F(g, g)$. Pokud naopak tato rovnost platí, pak pro $\alpha = -F(g, f)/F(g, g)$ je splněna první rovnost v (49).

Q.E.D.

Definice 3.1.4 *Sesquilineární striktně pozitivní forma na komplexním lineárním vektorovém prostoru V se nazývá skalární součin. Lineární vektorový prostor vybavený skalárním součinem se nazývá unitární nebo též pre-hilbertův.*

Příklad: Na prostoru $\mathbf{C}^N$ lze zavést skalární součin způsobem

$$F(x, y) \equiv (x, y) := \sum_{j=1}^N x_j^* y_j \quad (51)$$

Ze cvičení 22 plyne, že skalární součin je symetrický a použitím Schwartzovy nerovnosti je snadné ukázat, že indukuje na prostoru V normu $\|f\| := \sqrt{(f, f)}$ a metriku $\rho(f, g) := \|f - g\|$

Definice 3.1.5 *Unitární prostor, který je (v indukované metrice ρ) úplný se nazývá Hilbertův.*

Příklad: Prostor $\mathbf{C}^N$ se skalárním součinem (51) je Hilbertův.

Sesquilineární forma (44) na prostoru kvadraticky integrabilních funkcí není striktně pozitivní. Považujeme-li však funkce lišící se na množině míry nula za "stejně", tzn. provedeme-li jistou faktorizaci (viz [1]), dostaneme opět lineární prostor označovaný obvykle $L_2(\mathbf{R}^N, dx^N)$, na kterém pak (44) definuje skalární součin. V normě určené tímto skalárním součinem je navíc tento prostor úplný, a tedy Hilbertův.

Příklad: Prostor tříd kvadraticky integrovatelných funkcí na intervalu $(a, b) \subset \mathbf{R}$, kde a i b mohou být i $\pm\infty$ a

$$(f, g) := \int_a^b f^*(x)g(x)dx$$

je Hilbertův.

V dalším textu obvykle nebudeme rozlišovat mezi kvadraticky integrabilními funkcemi a jim odpovídajícími třídami funkcí lišícími se na množině míry nula. Můžeme tedy shrnout, že **funkce (42) popisující stavy kvantové částice tvoří nekonečně rozměrný Hilbertův prostor.**

Tvrzení 3.2 (Rieszovo lemma) *Nechť Φ je spojitý lineární funkcionál na $\mathcal{H}$. Pak existuje právě jeden vektor $g_\Phi \in \mathcal{H}$ takový, že pro všechna $f \in \mathcal{H}$ platí*

$$\Phi(f) = (g_\Phi, f).$$

Toto tvrzení znamená že prostor lineárních funkcionálů na $\mathcal{H}$ je isomorfní $\mathcal{H}$. Jinými slovy, Hilbertovy prostory jsou samoduální: $\mathcal{H}^* = \mathcal{H}$. Tento fakt je základem tzv. "bra-ketového formalismu", který je v kvantové mechanice často používán.

Důležitým pojmem v teorii Hilbertových prostorů, který naopak mnohokrát využijeme, je tzv. ortonormální báze.

Definice 3.1.6 *Vektory x, y v Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ nazveme ortogonální pokud $(x, y) = 0$. Množinu $M \subset \mathcal{H}$ nenulových vektorů nazveme ortogonální množinou pokud každé dva její různé prvky jsou ortogonální. Pokud navíc pro každý prvek z množiny M platí $\|x\| = 1$ nazveme ji ortonormální*

Definice 3.1.7 *Vektor $x \in \mathcal{H}$ nazveme ortogonální k množině $M \subset \mathcal{H}$, pokud $(x, y) = 0$ pro každé $y \in M$. Množinu všech takových vektorů nazýváme ortogonálním doplňkem množiny M a značíme ji $M^\perp$.*

Je snadné ukázat, že ortogonální doplněk libovolné podmnožiny $\mathcal{H}$ je lineární podprostor $\mathcal{H}$.

Tvrzení 3.3 *Je-li G uzavřený podprostor H , pak pro každé $x \in \mathcal{H}$ existuje právě jedno $y \in G$ a $z \in G^\perp$, tak že $x = y + z$.*

Důsledkem tohoto tvrzení je existence lineárního operátoru $E_G : x \rightarrow y$, který se nazývá ortogonální projektor na G .

Definice 3.1.8 *Ortonormální bázi nazveme ortonormální množinu B , jejíž ortogonální doplněk je nulový prostor, $B^\perp = \{\vec{0}\} \subset \mathcal{H}$.*

Pozor! Poznamenejme, že ortonormální báze není bázi v obvyklém smyslu, totiž že libovolný prvek prostoru je možno zapsat jako konečnou(!) lineární kombinaci prvků báze. Jak uvidíme, obecný prvek budeme většinou schopni zapsat pouze jako "nekonečnou lineární kombinaci" prvků ortonormální báze, která je definována pomocí konvergence ve smyslu normy $\|f\| := (f, f)$.

Příklad: Nechť (a, b) je omezený interval v $\mathbf{R}$, $c := b - a$, $m \in \mathbf{Z}$. Funkce $f_m(x) := c^{-1/2} e^{2\pi i m x / c}$ jsou ortonormální bázi v prostoru tříd kvadraticky integrovatelných funkcí na intervalu (a, b) .

Definice 3.1.9 *Nechť B je ortonormální báze v Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$. Fourierovými koeficienty vektoru $f \in \mathcal{H}$ pro bázi B nazveme skalární součiny (b, f) , kde $b \in B$.*

Hilbertovy prostory, se kterými v kvantové mechanice pracujeme (například $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$), mají nejvýše spočetnou ortonormální bazi $B = \{e_j\}$. V takovýchto prostorech platí pro každé $f \in \mathcal{H}$

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} (e_j, f) e_j, \quad (52)$$

$$\|f\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |(e_j, f)|^2 \quad (53)$$

Tyto vztahy se nazývají *Fourierův rozvoj* a *Parsevalova rovnost*.

V kvantové mechanice hrají důležitou roli ortonormální baze, jejichž elementy jsou vlastní funkce nějakých operátorů.

Cvičení 23 Najděte ortonormální bazi v $\mathbf{C}^2$, jejíž prvky jsou vlastními vektory matice

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Příklady ortonormálních bazí v nekonečně rozměrných Hilbertových prostorech ukážeme v dalších kapitolách.

3.2 Pozorovatelné a jejich spektra

V klasické mechanice je možno ze znalosti stavu předpovědět výsledek měření okamžité hodnoty libovolné mechanické veličiny (energie, momentu hybnosti, ...).

Stav systému (např. jedné či více částic) je určen bodem fázového prostoru (polohou a rychlostí, nebo polohou a hybností, podle toho zda používáme Newtonovu (Lagrangeovu), či Hamiltonovu formulaci) a fyzikální veličiny – *pozorovatelné* jsou definovány jako reálné funkce na fázovém prostoru. Hodnotu každé mechanické veličiny pro systém v daném stavu dostaneme vyhodnocením příslušné funkce v odpovídajícím bodu fázového prostoru. Spektrum hodnot, které pro klasickou částici můžeme naměřit je dáno oborem hodnot této funkce. Např. kinetická energie stavu $(\vec{p}, \vec{q})$ je

$$E_{kin}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{2M} \sum_{j=1}^3 p_j^2$$

a její spektrum je $\mathbf{R}_+$.

Tento popis je nezávislý na dynamice tj. na časovém vývoji systému a je tak názorný, že se mu v klasické mechanice nevěnuje téměř žádná pozornost. Uvádíme jej zde proto, aby bylo možné sledovat jak podstatně odlišné matematické struktury se používají pro popis těchto kinematických pojmů v kvantové mechanice.

Otázka, na kterou chceme odpovědět v tomto paragrafu zní: Jaké matematické objekty přiřadíme v kvantové mechanice pozorovatelným? Jak bylo konstatováno v

minulém paragrafu, stavový prostor kvantové částice je množina kvadraticky integrovatelných funkcí tří proměnných. Pokud bychom pozorovatelným přiřazovali funkce na tomto (nekonečně rozměrném) prostoru, dostali bychom klasickou teorii pole, která se pro náš cíl – popis objektů mikrosvěta – ukázala neadekvátní. Místo toho **kvantová teorie přiřazuje pozorovatelným samosdružené lineární operátory na prostoru stavových funkcí**. Způsob přiřazení operátorů konkrétním fyzikálním veličinám je dán fyzikální intuicí, dlouholetým vývojem a následným experimentálním ověřováním teorie.

Pro sledování analogií s klasickou mechanikou jsou samozřejmě důležité operátory polohy a hybnosti. V kvantové mechanice hmotné částice je **kartézským složkám polohy částice přiřazen operátor násobení nezávislou proměnnou**

$$(\hat{Q}_j \psi)(\vec{x}) := x_j \psi(\vec{x}) \quad (54)$$

a **kartézským složkám hybnosti částice je přiřazen operátor parciální derivace**

$$(\hat{P}_j \psi)(\vec{x}) := -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}(\vec{x}) \quad (55)$$

Definici operátoru hybnosti už jsme de facto použili při odvozování Schrödingerovy rovnice (32) z de Broglieovy hypotézy.

Existuje mnoho zdůvodnění přiřazení (54,55). V každém z nich je však třeba vyslovit nějaké předpoklady, které jsou více či méně ekvivalentní (54,55).

Operátory odpovídající ostatním fyzikálním veličinám majících klasickou analogii jsou konstruovány podle *principu korespondence*, tzn. jsou formálně stejnými funkcemi operátorů $F(\hat{Q}_j, \hat{P}_j)$ jako odpovídající funkce $F(x_j, p_j)$ na fázovém prostoru v klasickém případě. Např. operátor celkové energie částice v silovém poli potenciálu V je

$$\hat{E} := E(\hat{Q}_j, \hat{P}_j) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{x}) = \hat{H},$$

kde $\Delta = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$.

Cvičení 24 *Napište operátory přiřazené složkám momentu hybnosti.*

Vzhledem k tomu, že $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ je nekonečně rozměrný prostor, důležitou součástí definice operátorů je i stanovení jejich definičních oborů, což je obecně dosti delikátní problém. Je samozřejmě nutné, aby příslušné operace byly na funkcích z definičního oboru definovány a jejich výsledek ležel v $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ (takže například funkce z definičního oboru operátorů $\hat{P}_j$ musí být (skoro všude) derivovatelné a derivace musí být kvadraticky integrovatelné). Mimo to je však třeba definiční obory operátorů zvolit tak, aby byl splněn ještě další požadavek kvantové mechaniky, totiž,

že spektrum lineárního operátoru přiřazeného fyzikální veličině musí být shodné s množinou hodnot, které lze pro danou veličinu naměřit.

Problémů s definičními obory operátorů se v tomto textu dotkneme jen občas a nesystematicky. Nejnutnější základy jsou shrnuty v následující vsuvce. Matematicky založenější čtenáře opět odkazujeme např. na [1].

Cvičení 25 Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní "nekonečně hluboké potenciálové jámě", tj. v potenciálu $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = \infty$ pro $|x| > a$.

Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

Cvičení 26 Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní potenciálové jámě tj. v potenciálu $V(x) = -V_0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = 0$ pro $|x| > a$.

Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou spojité a mají spojité derivace pro $x \in \mathbf{R}$.

3.2.1 Matematická vsuvka 2: Operátory v Hilbertově prostoru

Teorie operátorů v Hilbertově prostoru je téma samozřejmě velmi široké a nelze sem vměstnat obsah mnoha knih, které o něm byly napsány. Shrňme zde pouze nejdůležitější fakta, která budeme potřebovat.

Pod lineárním operátorem v Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$ budeme rozumět lineární zobrazení $\hat{T} : D_T \rightarrow \mathcal{H}$, kde definiční obor D_T je lineární podprostor $\mathcal{H}$. Je-li Hilbertův prostor konečně rozměrný pak teorie lineárních zobrazení je relativně jednoduchá a redukuje se na teorii matic. V kvantové teorii se však vyskytují především nekonečně rozměrné prostory, což přináší mnoho technických problémů. Některé z nich lze řešit, pokud budeme používat pouze *hustě definované* operátory, tj. takové pro které $\overline{D_T} = \mathcal{H}$, kde pruh značí uzávěr množiny ve smyslu topologie definované metrikou $\mathcal{H}$ plynoucí ze skalárního součinu.

Třídou operátorů, která má mnoho podobných vlastností jako operátory na konečně rozměrném prostoru, jsou omezené operátory.

Definice 3.2.1 Lineární operátor $\hat{B} : D_B \rightarrow \mathcal{H}$ je omezený, pokud existuje $c > 0$ tak, že pro všechna $g \in D_B$ platí

$$\|\hat{B}g\| \leq c\|g\|$$

Normou $\|g\|$ samozřejmě rozumíme normu indukovanou skalárním součinem $\|g\| := \sqrt{(g, g)}$. Omezené hustě definované operátory lze spojitě rozšířit na celé $\mathcal{H}$.

Příklad: Fourierův-Plancherelův operátor¹

$$\tilde{g}(\vec{p}) \equiv (\hat{F}g)(\vec{p}) := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\vec{p}\vec{x}} g(\vec{x}) dx^3$$

je omezený operátor na $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$. Navíc je bijekcí.

Definice 3.2.2 *Nechť $\hat{B}$ je omezený operátor na $\mathcal{H}$. Operátor $\hat{B}^\dagger$ nazveme sdruženým k $\hat{B}$, pokud pro všechna $f, g \in \mathcal{H}$*

$$(f, \hat{B}g) = (\hat{B}^\dagger f, g)$$

Z Rieszova lemmatu je snadné ukázat, že k danému omezenému operátoru existuje právě jeden sdružený operátor a platí

$$(\hat{B}^\dagger)^\dagger = \hat{B} \quad (56)$$

Omezené operátory na $\mathcal{H}$ tvoří komplexní algebru a platí

$$(a\hat{B} + \hat{C})^\dagger = a^* \hat{B}^\dagger + \hat{C}^\dagger, \quad (\hat{B}\hat{C})^\dagger = \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger. \quad (57)$$

Cvičení 27 *Nechť M_{jk} jsou prvky matice odpovídající lineárnímu operátoru $\hat{M}$ na konečně rozměrném prostoru. Jaká matice odpovídá operátoru $\hat{M}^\dagger$?*

Definice 3.2.3 *Operátor $\hat{B}$ na $\mathcal{H}$ nazýváme hermitovský, pokud je omezený a platí $\hat{B}^\dagger = \hat{B}$.*

Příklad: Operátor $\hat{Q}$ na prostoru $L^2(a, b)$, kde $b - a < \infty$, definovaný

$$(\hat{Q}f)(x) := xf(x)$$

je hermitovský. (Pro nekonečný interval $\hat{Q}$ není omezený.)

Tvrzení 3.4 *Operátor $\hat{E}$ je ortogonální projektor (na $\text{Ran } \hat{E}$) právě tehdy, když je hermitovský a splňuje $\hat{E}^2 = \hat{E}$.*

Rozšíření hermitovských operátorů na množinu neomezených, ale hustě definovaných operátorů představují samosdružené operátory. Jejich definice vychází z následujícího faktu:

Tvrzení 3.5 *Je-li $\hat{T}$ hustě definovaný operátor na $\mathcal{H}$, pak pro každé $f \in \mathcal{H}$ existuje nejvýše jedno $h \in \mathcal{H}$ takové, že pro všechna $g \in D_T$ platí*

$$(f, \hat{T}g) = (h, g) \quad (58)$$

¹Tato definice vyhovuje pouze pro $g \in L_2(\mathbf{R}^3, dx^3) \cap L^1(\mathbf{R}^3, dx^3)$. Pro ostatní funkce je třeba jej spojitě dodefinovat [1]

Odtud plyne, že má smysl zavést následující pojmy:

Definice 3.2.4 *Nechť $\hat{T}$ je hustě definovaný operátor. Definiční obor operátoru $\hat{T}^\dagger$ sdruženého k $\hat{T}$ je množina všech $f \in \mathcal{H}$, pro které existuje h splňující (58), přičemž $\hat{T}^\dagger f := h$*

Definice 3.2.5 *Operátor $\hat{T}$ je samosdružený, pokud je hustě definovaný a $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$.*

Je důležité odlišovat samosdružené operátory od symetrických.

Definice 3.2.6 *Operátor $\hat{S}$ je symetrický, pokud je hustě definovaný a pro všechna $f, g \in D_S$ platí $(f, \hat{S}g) = (\hat{S}f, g)$, tj. $D_S \subset D_{S^\dagger}$.*

Je zřejmé, že každý hermitovský operátor je samosdružený; opak neplatí.

Příklad: Operátor $\hat{Q}$, $(\hat{Q}\psi)(x) := x\psi(x)$ s definičním oborem $D_X := \{\psi \in L^2(\mathbf{R}, dx) : \int_{\mathbf{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$ je samosdružený.

Doplňme-li definici (55) operátoru $\hat{P}_j$ vhodným vymezením definičního oboru, pak i operátory složek hybnosti jsou samosdružené (viz [1], 7.2.7).

Hustě definované operátory netvoří algebru, neboť $D_T \neq \mathcal{H}$. Vztahy (57) musí být proto pro neomezené operátory náležitě modifikovány, stejně jako i (56).

Důležitý pojem, který jsme již zmínili, je spektrum operátoru, což je rozšíření pojmu vlastních hodnot matice.

Definice 3.2.7 *Spektrum $\sigma(\hat{T})$ operátoru $\hat{T}$ je množina komplexních čísel λ pro které operátor $(\hat{T} - \lambda \hat{\mathbf{1}})$ není bijekcí $D_T \rightarrow \mathcal{H}$.*

Všimněme si především, že do spektra operátoru spadají všechna vlastní čísla, neboť existuje-li nenulový vektor ψ takový, že $\hat{T}\psi = \lambda\psi$, pak operátor $\hat{T} - \lambda \hat{\mathbf{1}}$ není injektivní. Množinu $\sigma_p(\hat{T})$ vlastních čísel operátoru $\hat{T}$ nazýváme *bodovým spektrem*. Mimo těchto bodů však do spektra patří i komplexní čísla pro která operátor $\hat{T} - \lambda$ není surjektivní. Ty tvoří body tzv. *spojité či reziduální části spektra*.

Důvod, proč v kvantové teorii požadujeme, aby pozorovatelným byly přiřazeny samosdružené operátory tkví v tom, že platí

Tvrzení 3.6 *Spektrum samosdruženého operátoru je podmnožinou $\mathbf{R}$.*

To odpovídá tomu, že můžeme naměřit jen reálné hodnoty pozorovatelných.

Spektrum (čistě spojité) každého z operátorů (54,55) je $\mathbf{R}$ (viz [1]), což odpovídá experimentálnímu faktu, že ani pro kvantovou částici nebyla zjištěna žádná omezení na množinu hodnot souřadnic a hybností.

Na druhé straně jsou pro hodnoty energie harmonického oscilátoru podle Planckovy hypotézy omezení podstatná, a je proto velmi důležité zjistit, jak vypadá spektrum energie kvantové částice v silovém poli harmonického oscilátoru.

3.2.2 Energie harmonického oscilátoru

Ukážeme, že přiřazení (54,55) a princip korespondence vysvětlují Planckův předpoklad o diskretnosti spektra energie harmonického oscilátoru, což byl vedle výpočtu spektra vodíku (viz 3.4.5) jeden z hlavních argumentů pro správnost takto budované teorie. Operátor energie – hamiltonián kvantové částice pohybující se v silovém poli harmonického oscilátoru je podle principu korespondence

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\omega^2\vec{x}^2. \quad (59)$$

Ukážeme, že omezíme-li definiční obor tohoto operátoru na kvadraticky integrovatelné funkce, pak množina vlastních hodnot, tj. čísel λ pro která existuje funkce $\psi(\vec{x})$ splňující

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi, \quad (60)$$

je diskretní a odpovídá Planckově hypotéze.

Operátor (59) je součtem tří operátorů

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3,$$

$$H_j = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx_j^2} + \frac{M}{2}\omega^2x_j^2$$

a můžeme se pokusit hledat vlastní funkce operátoru (59) ve faktorizovaném tvaru

$$\psi(\vec{x}) = \psi(x_1)\psi(x_2)\psi(x_3). \quad (61)$$

Rovnice (60) pak přejde na tvar

$$(\hat{H}_1\psi_1)\psi_2\psi_3 + \psi_1(\hat{H}_2\psi_2)\psi_3 + \psi_1\psi_2(\hat{H}_3\psi_3) = \lambda\psi_1\psi_2\psi_3. \quad (62)$$

Nalezneme-li vlastní čísla λ_j (formálně stejných) operátorů $\hat{H}_j$

$$\hat{H}_j\psi_j = \lambda_j\psi_j,$$

pak získáme i vlastní čísla operátoru (59)

$$\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3. \quad (63)$$

Později ukážeme, že tímto postupem jsme získali všechna vlastní čísla.

Zkoumejme tedy napřed jednorozměrný případ, tedy operátor

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{M}{2}\omega^2x^2}. \quad (64)$$

Tento operátor lze považovat za operátor energie *jednorozměrného harmonického oscilátoru* tj. kvantové částice pohybující se pouze v jednom rozměru (na přímce).

Tvrzení 3.7 *Množina vlastních čísel operátoru (64) působícího v prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí jedné proměnné je tvořena reálnými čísly $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, kde $n \in \mathbf{Z}_+$. Pro každé n existuje až na multiplikativní konstantu právě jedna vlastní funkce*

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad (65)$$

kde $\xi = \sqrt{M\omega/\hbar}x$ a H_n jsou Hermitovy polynomy

$$H_n(z) := \sum_{k=0}^{[n/2]} (-)^k (2z)^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!}, \quad (66)$$

kde $[r]$ je celá část reálného čísla r .

Důkaz: Napřed je třeba nalézt čísla λ , pro která existují kvadraticky integrovatelná řešení $\psi : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$ diferenciální rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{M}{2} \omega^2 x^2 \psi = \lambda \psi. \quad (67)$$

Tato rovnice je lineární ODR 2.řádu a v oboru spojitě diferencovatelných funkcí má řešení pro každé λ . Ukážeme, že podmínka kvadratické integrability je splněna jen pro

$$\lambda = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}). \quad (68)$$

Přechodem k nové (bezrozměrné) proměnné $\xi = \sqrt{M\omega/\hbar}x$, $\psi(x) = \phi(\xi)$ dostaneme rovnici ve tvaru

$$\phi'' - \xi^2 \phi + \Lambda \phi = 0 \quad (69)$$

kde $\Lambda = 2\lambda/(\hbar\omega)$.

Z teorie řešení lineárních diferenciálních rovnic plyne, že jediný bod, ve kterém mohou mít řešení rovnice (69) singularitu, je nekonečno. Snadno se lze přesvědčit, že pro $\xi \rightarrow \pm\infty$ se řešení této rovnice chová jako

$$\phi(\xi) = e^{\pm\xi^2/2}. \quad (70)$$

Je zřejmé, že kvadraticky integrovatelná řešení může odpovídat pouze rychle ubývajícím funkcím, tedy zápornému znaménku v exponentě (70). Zvolíme tedy ansatz

$$\phi(\xi) = e^{-\xi^2/2} u(\xi) \quad (71)$$

a budeme se zajímat o řešení rovnice

$$u'' = 2\xi u' + (1 - \Lambda)u \quad (72)$$

kteřá v nekonečnu rostou pomaleji než $e^{+\xi^2/2}$.

Rozšíříme-li rovnici (72) do komplexní roviny, pak její pravá strana je holomorfní funkcí ξ , u a u' a její řešení je holomorfní funkcí ξ v celé komplexní rovině. Můžeme je tedy hledat ve tvaru řady

$$u(\xi) = \xi^s \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m, \quad a_0 \neq 0, \quad s \in \mathbf{Z}_+ \quad (73)$$

Jejím dosazením do (72) a porovnáním členů se stejnou mocninou ξ , dostaneme podmínky pro s a a_n

$$\begin{aligned} s(s-1) &= 0, \quad s(s+1)a_1 = 0 \\ a_{m+2} &= \frac{2(m+s)+1-\Lambda}{(m+s+2)(m+s+1)} a_m \end{aligned} \quad (74)$$

Pokud čitatel na pravé straně (74) je nenulový pro všechna m , pak se řada (73) pro $\xi \rightarrow \infty$ chová jako $\exp(\xi^2)$ a řešení rovnice (69) není kvadraticky integrovatelné. To lze usoudit např. z porovnání rekurentní formule (74) pro dosti velká m se stejným vztahem pro koeficienty řady $\exp(\xi^2)$. Kvadraticky integrovatelná řešení mohou existovat pouze tehdy, pokud řada (73) je konečná, tj. existuje N takové, že $a_m = 0$ pro $m > N$. To nastane tehdy a jen tehdy, když

$$a_1 = 0, \quad 2(N+s)+1-\Lambda = 0, \quad N \text{ sudé nezáporné.} \quad (75)$$

V tom případě se nekonečná řada stane polynomem stupně $n = N+s$ a funkce (71) je kvadraticky integrovatelná.

Z podmínky (75) plyne, že rovnice (72) má kvadraticky integrovatelné řešení tehdy a jen tehdy, pokud $\Lambda = 1 + 2n$, takže rovnice (67) má kvadraticky integrovatelné řešení tehdy a jen tehdy pokud platí (68).

Koeficienty $h_m^{(n)}$ polynomů stupně n

$$H_n(\xi) = \sum_{m=s}^n h_m^{(n)} \xi^m \quad (76)$$

jež řeší rovnici (72) jsou pak určeny rekurentní relací

$$h_{m+2}^{(n)} = 2 \frac{m-n}{(m+2)(m+1)} h_m^{(n)}, \quad (77)$$

přičemž pro sudá či lichá n (tj. $s = 0$ či $s = 1$) jsou nenulové pouze koeficienty se sudým respektive lichým m .

Zvolíme-li normalizaci polynomu způsobem $h_n^{(n)} = 2^n$, pak řešením relace (77) je

$$h_{n-2k}^{(n)} = (-)^k 2^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!}, \quad k = 0, 1, \dots, [n/2], \quad (78)$$

Q.E.D.

Cvičení 28 *Napište explicitní tvar Hermitových polynomů pro $n = 1, 2, 3, 4$.*

Cvičení 29 *Ukažte, že Hermitovy polynomy lze definovat též způsobem*

$$H_n(z) := (-)^n e^{z^2} \left(\frac{d}{dz} \right)^n e^{-z^2}. \quad (79)$$

Návod: Ukažte že pravá strana (79) splňuje rovnici (72).

Cvičení 30 *Ukažte, že*

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} \xi^n = \exp[x^2 - (x - \xi)^2]$$

Důsledkem tvrzení (3.7) je, že energie kvantového jednorozměrného harmonického oscilátoru s potenciálem $V(x) = \frac{M}{2} \omega^2 x^2$ může nabývat pouze hodnot z diskrétní množiny $\{\hbar\omega(n + \frac{1}{2}), n \in \mathbf{Z}_+\}$.

Tento závěr je ve shodě s Planckovou hypotézou použitou pro odvození spektrální závislosti intenzity záření absolutně černého tělesa až na člen $\frac{1}{2}\hbar\omega$, představující tzv. "nulové kmity". Jeho příspěvek k energii je možno považovat za aditivní konstantu, kterou (ve shodě s tzv. renormalizační procedurou kvantové teorie pole) je možno odečíst, což odpovídá stanovení nulové úrovně energie.

Cvičení 31 *Odhadněte amplitudu nulových kmitů matematického kyvadla délky 1 m a hmotnosti 1 kg.*

Nyní se můžeme vrátit k původnímu problému vlastních hodnot operátoru (59). Z rozkladu (62) je zřejmé, že funkce

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3), \quad (80)$$

kde $\psi_n(x)$ jsou dány vzorcem (65), jsou vlastními funkcemi operátoru (59) s vlastními čísly $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = (n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})\hbar\omega$.

Je třeba ještě ukázat, že žádná další vlastní čísla neexistují. To plyne z následujících dvou tvrzení (viz např [1] 4.3.4, 4.3.5).

Tvrzení 3.8 *Množina vlastních funkcí operátoru (64)*

$$\psi_n(x) = \frac{K}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} H_n(\sqrt{M\omega/\hbar}x), \quad K = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \quad (81)$$

je ortonormální bazí v Hilbertově prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $L_2(\mathbf{R}, dx)$.

Tvrzení 3.9 *Množina funkcí (80), kde $\psi_n(x)$ jsou dány vzorcem (81) je ortonormální bazí v Hilbertově prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$.*

Pro funkce (81) a (80) se často používá ketové značení $\psi_n \equiv |n\rangle$, $\psi_{n_1}\psi_{n_2}\psi_{n_3} \equiv |n_1n_2n_3\rangle$.

Z tvrzení 3.8 a 3.9 rovněž plyne, že spektra hamiltoniánů (64) a (59) jsou čistě bodová ([1] 7.3.9). Nejsou však stejná. Množina vlastních hodnot hamiltoniánu (64) – operátoru energie jednorozměrného harmonického oscilátoru – se liší od spektra trojrozměrného oscilátoru. Obsahuje navíc hodnotu $\frac{1}{2}\omega$.

Není to však jediný rozdíl. Zatímco pro jednorozměrný oscilátor každé vlastní hodnotě odpovídá právě jedna vlastní funkce až na multiplikativní konstantu, pro třírozměrný oscilátor závisí dimenze podprostoru vlastních funkcí na hodnotě vlastního čísla. Například podprostor vlastních funkcí operátoru (59) s vlastním číslem $\lambda = \frac{7}{2}\hbar\omega$ je tvořen lineárním obalem funkcí (80), kde trojice (n_1, n_2, n_3) nabývají hodnot $(0, 1, 1)$, $(1, 0, 1)$, $(1, 1, 0)$, $(0, 0, 2)$, $(0, 2, 0)$, $(2, 0, 0)$. Rozměr tohoto podprostoru je šest. Jednoduchou kombinatorickou úvahou lze zjistit, že rozměr podprostoru vlastních funkcí operátoru (59) s vlastním číslem $\lambda = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$ je $(n + 1)(n + 2)/2$.

Stav s nejnižší energií se obvykle nazývá *základním stavem*, zatímco ostatní stavy se nazývají *excitované*.

Cvičení 32 *Jak vypadá základní stav klasického harmonického oscilátoru a jaký je rozdíl mezi množinou kvantových a klasických excitovaných stavů?*

Cvičení 33 *Použitím vytvářející funkce ze cvičení 30 ukažte, že*

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = 2^n n! \pi^{1/2} \delta_{nm}.$$

Ukažte, že odtud plyne ortonormalita funkcí (81).

3.2.3 Složky momentu hybnosti kvantové částice

Další pozorovatelné jejichž spektrum lze snadno vyšetřit jsou složky momentu hybnosti. Podle principu korespondence jim odpovídají operátory

$$\hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{Q}_k \hat{P}_l = -i\hbar \epsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}. \quad (82)$$

Vyšetřování vlastních hodnot těchto operátorů se zjednoduší přechodem do sférických souřadnic (r, θ, ϕ)

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \quad (83)$$

$$\psi(x, y, z) = \Psi(r, \theta, \phi) \quad (84)$$

Cvičení 34 Jak vypadají operátory $\hat{Q}_j$, $\hat{P}_j$, $j = 1, 2, 3 \equiv x, y, z$ ve sférických souřadnicích?

Operátory $\hat{L}_j$ mají ve sférických souřadnicích tvar

$$\hat{L}_x = i\hbar(\cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta}) \quad (85)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} - \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta}) \quad (86)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}. \quad (87)$$

Vzhledem k tomu, že osy x, y, z jsou zcela rovnocenné musí mít i všechny operátory L_j stejné vlastní hodnoty. Technicky nejjednodušší však je hledat spektrum operátoru L_z , neboť to znamená řešit jednoduchou diferenciální rovnici

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \Psi(r, \theta, \phi) = \lambda \Psi(r, \theta, \phi). \quad (88)$$

Její řešení je

$$\psi(r, \theta, \phi) = \chi(r, \theta) e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \phi}, \quad (89)$$

kde χ je libovolná funkce a λ je libovolné komplexní číslo. Definiční obor operátoru $\hat{L}_z$ je tvořen spojitými funkcemi v $\mathbf{R}^3$ (jinak bychom je nemohli derivovat) a ϕ je azimutální souřadnice bodu třírozměrného prostoru. Musí tedy platit

$$\psi(r, \theta, \phi = 0) = \psi(r, \theta, \phi = 2\pi).$$

Z této podmínky plyne, že *vlastní hodnoty složek momentu hybnosti mohou nabývat pouze hodnot*

$$\lambda = m\hbar, \text{ kde } m \in \mathbf{Z}. \quad (90)$$

Cvičení 35 "Kvantové tuhé těleso" (např. dvouatomová molekula) s momentem setrvačnosti I_z volně rotuje v rovině. Najděte její možné hodnoty energie.

3.3 Stav kvantového systému

V analogii s klasickou mechanikou by přirozeným postupem při kinematickém popisu kvantové částice, např. elektronu, bylo zjistit, jakou komplexní funkcí popsat stav s danou polohou a hybností. Ač se to na první pohled bude zdát podivné, nepochopitelné ba protirečící zdravému rozumu (ve skutečnosti však pouze naší makroskopické zkušenosti), takový kvantově mechanický stav neexistuje. Důvod je zhruba řečeno ten, že měření hybnosti změní podstatně polohu kvantové částice a měření polohy její hybnost (což odpovídá např. experimentálně potvrzené difrakci elektronů).

Problém kinematického popisu kvantových systémů tedy spočívá mimo jiné v odpovědi na otázku: Jakými měřeními lze popsat stav kvantové částice? Stavem fyzikálního systému pak obecně budeme nazývat soubor hodnot všech měření, která jsme na daném systému v daném okamžiku schopni provést a otázka, kterou chceme zodpovědět v této podkapitole zní: **Jakou vlnovou funkci přiřadit fyzikálnímu systému** (např. elektronu v atomu vodíku), **který je v daném okamžiku v nějakém stavu?**

V příkladu kvantového lineárního harmonického oscilátoru studovaného v odstavci 3.2.2 se jeví celkem přirozené přiřadit kvantovému oscilátoru s energií $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ (vlastní) funkci $\psi_n(x)$. To je v souladu s následujícím postulátem kvantové mechaniky:

Stav kvantové částice, pro kterou naměříme hodnotu α pozorovatelné A je popsán funkcí g_α , která je vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$, přiřazeného pozorovatelné A

$$\hat{A}g_\alpha = \alpha g_\alpha. \quad (91)$$

Cvičení 36 *Jaká je hustota pravděpodobnosti nalezení kvantového jednorozměrného oscilátoru s energií $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ v bodě x ? Spočítejte a nakreslete grafy této hustoty pro $n = 0, 1, 2, \dots$ a srovnajte je s hustotou pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v daném místě.*

V případě jednorozměrného harmonického oscilátoru jsou vlnové funkce určeny jednoznačně vlastním číslem (až na multiplikativní konstantu, která nemá při jejich interpretaci žádný význam). To znamená, že stavy kvantového lineárního harmonického oscilátoru jsou jednoznačně určeny svou energií.

Cvičení 37 *Je stav klasické částice na přímce určen energií jednoznačně?*

Pro určení stavu kvantové částice ve více rozměrech však potřebujeme měřit více fyzikálních veličin. Při jejich výběru je však třeba být opatrnější než u částice klasické. Je představitelné, že i minimální interakce mikroobjektu s přístroji nutná pro měření může změnit jeho stav, který byl vyhodnocen z měření předchozích. Výsledky měření tedy mohou záležet na pořadí, v jakém měření jednotlivých veličin provedeme, což je z hlediska popisu stavu nepřipustné.

Pro *experimentální popis* stavu kvantového systému je proto třeba napřed zjistit, měření kterých veličin lze provést, aniž by výsledek jednoho znehodnotil platnost měření ostatních. Fyzikální veličiny – pozorovatelné, pro které je toto splněno nazýváme *kompatibilní*. Jejich výsledky provedené v jednom časovém okamžiku (či aspoň krátkém sledu časů) lze pak použít k definici stavu.

V klasické mechanice pojem kompatibility měření prakticky neexistuje, předpokládáme, že je vždy možno provést měření veličin nutných k určení stavu, aniž bychom jej narušili. Pro objekty na atomární úrovni a menší tomu tak být nemusí.

Při důkladnějším rozboru pojmu kompatibility pomocí podmíněných pravděpodobností (viz [1]) lze ukázat, že požadavek kompatibility pozorovatelných je ekvivalentní tomu, že **operátory $\hat{A}_j$ přiřazené kompatibilním fyzikálním veličinám $(A_1, \dots, A_K)$ vzájemně komutují**

$$[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = 0. \quad (92)$$

Pro operátory s čistě bodovými spektry plyne z této podmínky existence ortonormální baze, jejíž prvky jsou vlastní vektory operátorů $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_K)$.

Tento požadavek zpětně klade podmínky na kompatibilitu některých pozorovatelných. Například, pokud hybnostem a polohám částice přiřadíme operátory (54) a (55), pak docházíme k závěru (který je třeba experimentálně ověřit), že měření polohy a hybnosti v jednom směru jsou nekompatibilní, neboť

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (93)$$

To je mimo jiné důvod, proč v kvantové mechanice neexistuje obdoba klasického stavu částice – stav s danou polohou a hybností. Z relací neurčitosti se dovíme, že každý kvantový stav zaujímá "fázový objem" alespoň $(2\pi\hbar)^3$.

Cvičení 38 *Jsou kompatibilní složky polohy v různých směrech?*

Cvičení 39 *Jsou kompatibilní složky momentu hybnosti v různých směrech?*

Pro výsledek měření pozorovatelné A_1 , tedy jednu vlastní hodnotu operátoru, může existovat více lineárně nezávislých funkcí. Příkladem jsou například funkce (80), které jsou vlastními funkcemi hamiltoniánu (59) pro tutéž hodnotu energie $(n + \frac{3}{2})\hbar\omega$, $n = n_1 + n_2 + n_3$, ale pro různé hodnoty energie jsou lineárně nezávislé. V takových případech se dá očekávat, že existují jiné měřitelné veličiny $(A_2, \dots, A_K)$, výsledky jejichž měření mohou rozlišit, kterou funkci (opět až na konstantu) máme přiřadit danému stavu. Pozorovatelné $(A_2, \dots, A_K)$ musí být kompatibilní s pozorovatelnou A_1 , jejíž měření už jsme použili k částečnému určení (k zúžení prostoru kandidátů na) vlnové funkce daného stavu, a zároveň kompatibilní mezi sebou.

Přiřazení vlnové funkce g fyzikálnímu stavu, tj. souboru výsledků měření kompatibilních fyzikálních veličin se řídí požadavkem: **Vlnová funkce, která popisuje stav určený hodnotami $(\alpha_1, \dots, \alpha_K)$ měření kompatibilních fyzikálních veličin $(A_1, \dots, A_K)$, musí vyhovovat rovnicím**

$$\hat{A}_i g = \alpha_i g, \quad i = 1, \dots, K. \quad (94)$$

Znamená to tedy, že musí být společnou vlastní funkcí komutujících operátorů $\hat{A}_i$.

Množině kompatibilních fyzikálních veličin, hodnoty jejichž výsledků jednoznačně určí kvantový stav, říkáme *úplná množina pozorovatelných* a jim odpovídající množina operátorů se nazývá *úplný soubor komutujících operátorů*.

Tvrzení 3.10 Operátory $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_K)$ s čistě bodovými spektry tvoří úplný soubor komutujících operátorů tehdy a jen tehdy, pokud pro každou k -tici jejich vlastních čísel $(\alpha_1, \dots, \alpha_K)$ je rozměr podprostoru společných vlastních stavů roven jedné.

Důkaz je proveden v [1] (14.2.2).

Poznamenejme, že úplná množina pozorovatelných pro daný fyzikální systém (např. jednu částici) a jí odpovídající úplný soubor komutujících operátorů nejsou určeny jednoznačně a jejich výběr se řídí typem fyzikálního jevu, který chceme popsat. Důležitý je pak způsob přechodu od jedné množiny ke druhé a odpovídající reinterpretační výsledků.

Pro experimentální účely jsou velmi důležité úplné množiny pozorovatelných obsahujících energii, neboť pro většinu mikrosystémů je to relativně snadno měřitelná veličina.

Důležitým příkladem vhodného výběru úplné množiny pozorovatelných pro popis stavu kvantové částice v poli centrálních sil je energie, kvadrát momentu hybnosti a jedna jeho složka.

3.4 Kvantová částice v centrálně symetrickém potenciálu

Mnohé důležité fyzikální systémy je možno popsat pomocí centrálních sil, přesněji potenciálu vykazujícím sférickou symetrii. Příkladem je částice v Coulombově poli, či harmonický oscilátor ve třech rozměrech.

Operátor energie pro kvantovou částici v centrálně symetrickém potenciálu má obecný tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \hat{V}(r), \quad (95)$$

kde

$$[\hat{V}(r)\psi](x, y, z) := V(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})\psi(x, y, z). \quad (96)$$

Ukážeme, že pokud hamiltonián (95) má čistě bodové spektrum, pak stavy částice v centrálním poli je možno jednoznačně určit hodnotami její energie, kvadrátu momentu hybnosti a jednou jeho složkou. Jinými slovy, tyto tři pozorovatelné tvoří úplnou množinu pozorovatelných.

Cvičení 40 Spočítejte komutátory

$$[L_j, X_k], [L_j, P_k], [L_j, L_k], \quad (97)$$

kde

$$\hat{L}_j := \epsilon_{jkl}\hat{Q}_k\hat{P}_l. \quad (98)$$

Cvičení 41 Ukažte, že vzájemně komutují operátory (95), $L_3 \equiv L_z$ a

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (99)$$

Pro kvantově mechanický popis je důležité zjistit jakých hodnot mohou nabývat výše uvedené veličiny.

Pro výpočet vlastních hodnot je vhodné přejít do sférických souřadnic. Operátory $\hat{L}_z$, $\hat{L}^2$ a $\hat{H}$ pak mají tvar

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (100)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right] \quad (101)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right) \right] + \hat{V}(r) \quad (102)$$

Cvičení 42 *S použitím vzorců (85) – (87) ukažte, že operátor $\hat{L}^2$ má ve sférických souřadnicích tvar (101).*

Cvičení 43 *Dokažte formuli (102).*

3.4.1 Moment hybnosti

Ukážeme, že existují funkce, které jsou řešením rovnice pro vlastní hodnoty

$$\hat{L}^2 \psi = \lambda \psi \quad (103)$$

a zároveň vlastními funkcemi operátoru $\hat{L}_z$. Z vyjádření operátoru $\hat{L}^2$ ve tvaru (101) plyne, že řešením rovnice (103) budou kvadraticky integrovatelné funkce $\Psi(r, \theta, \phi)$, které splňují parciální diferenciální rovnici

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}) + \frac{\lambda}{\hbar^2} \Psi = 0. \quad (104)$$

Vzhledem k tomu, že hledáme řešení (103), která jsou zároveň vlastními funkcemi operátoru $\hat{L}_z$ a ty jsme v podkapitole 3.2.3 našli ve tvaru

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \chi(r, \theta) e^{im\phi}, \quad m \in \mathbf{Z}, \quad (105)$$

budeme hledat řešení rovnice (103) rovněž v tomto faktorizovaném tvaru.

Rovnice (104) přejde faktorizací (105) na obyčejnou diferenciální rovnici

$$\frac{d}{dt} \left[(1-t^2) \frac{dF}{dt} \right] + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-t^2} \right) F = 0, \quad (106)$$

kde $t = \cos \theta$, $F(r, t) = \chi(r, \theta)$ a proměnná r v této rovnici vystupuje pouze jako (např. předem zvolený) parametr. To je důsledkem toho, že operátor $\hat{L}^2$ ve sférických souřadnicích nezávisí na r . Podmínka integrability (41) pro F v tomto případě zní

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}^3} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz &= \int_{<0, \infty> \times <0, \pi> \times <0, 2\pi>} |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= 2\pi \int_{<0, \infty> \times <0, \pi>} |\chi(r, \theta)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 |F(r, t)|^2 dr dt < \infty. \end{aligned} \quad (107)$$

Definiční obor operátoru $\hat{L}^2$ však tvoří pouze funkce konečné na jednotkové kouli, takže F musí být rovněž konečná na $<0, \infty> \times <-1, 1>$.

Řešení rovnice (106) je poměrně pracné (viz např. [5], str. 70–72). Dá se vyjádřit způsobem

$$F(r, t) = (t^2 - 1)^{|m|/2} U(r, \frac{t+1}{2}), \quad (108)$$

kde U je funkce na intervalu $<0, 1>$ splňující Gaussovu diferenciální rovnici

$$x(x-1) \frac{d^2 U}{dx^2}(r, x) + (a+bx) \frac{dU}{dx}(r, x) + cU(r, x) = 0, \quad (109)$$

kde

$$x = (t+1)/2, \quad a = -1 - |m|, \quad b = 2(1 + |m|), \quad c = |m| + m^2 - \frac{\lambda}{\hbar^2}.$$

Obecné řešení Gaussovy rovnice lze zapsat jako lineární kombinaci

$$U(r, x) = R_1(r)U_1(x) + R_2(r)U_2(x), \quad (110)$$

kde U_1, U_2 jsou dvě lineárně nezávislá řešení, jež lze vyjádřit pomocí tzv. hypergeometrických funkcí. Pro obecné λ a m však tato řešení nejsou konečná v okolí koncových bodů intervalu $<0, 1>$. Podmínku konečnosti funkce F lze splnit pouze když U je polynom v x . Podobným postupem jako pro harmonický oscilátor pak dostaneme podmínky

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2, \quad l \in \mathbf{Z}_+, \quad m \in \mathbf{Z}, \quad |m| \leq l. \quad (111)$$

Řešení rovnice (106) v tomto případě má tvar

$$F(r, t) = R(r)P_l^m(t), \quad (112)$$

kde P_l^m jsou přidružené Legendrovy funkce definované způsobem

$$P_l^m(t) := \frac{(1-t^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} (t^2 - 1)^l. \quad (113)$$

Cvičení 44 Ukažte, že funkce $f_{lm}(\theta) := P_l^m(\cos \theta)$ jsou polynomy v $\sin \theta$ a $\cos \theta$.

Funkce

$$Y_{lm}(\theta, \phi) := C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (114)$$

které jsou řešením (104) a tedy společnými vlastními funkcemi operátorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ s vlastními čísly $\lambda = l(l+1)\hbar^2$, $\mu = m\hbar$ se nazývají **kulové funkce**. **Množina všech kulových funkcí**

$$\{Y_{lm}, l \in \mathbf{Z}_+, m \in \mathbf{Z}, |m| \leq l\},$$

kde

$$|C_{lm}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}, \quad (115)$$

tvoří ortonormální bazi v prostoru funkcí kvadraticky integrovatelných na jednotkové kouli, přesněji v $L^2(<0, \pi> \times <0, 2\pi>, \sin\theta d\theta d\phi)$. Odtud plyne, že množina

$$\{l(l+1)\hbar^2, l \in \mathbf{Z}_+\} \quad (116)$$

je spektrem operátoru $\hat{L}^2$ a spektrum je čistě bodové.

Čísla l a m se obvykle nazývají *orbitální* respektive *magnetické kvantové číslo* stavu. Neboť hodnota energie stavu často závisí na hodnotě orbitálního kvantového čísla, mají stavy s daným l ustálené spektroskopické značení $s, p, d, f, g, h, i, k, l, \dots$ pro $l = 0, 1, 2, \dots$

Z kulových funkcí je možno pro částici s daným momentem hybnosti charakterizovaným čísly (l, m) předpovědět **pravděpodobnost nalezení částice v daném prostorovém úhlu Ω**

$$dw = \rho(\theta, \phi) d\Omega = |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 d\Omega. \quad (117)$$

Cvičení 45 Odvoďte pravděpodobnosti nalezení částice v daném prostorovém úhlu pro stavy s, p, d .

3.4.2 Radiální část vlnové funkce

Ze vzorců (105), (112), (114) plyne, že vlnová funkce, která je současně vlastní funkcí $\hat{L}_z$ a $\hat{L}^2$ má tvar

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (118)$$

Tato faktorizace vlnové funkce je užitečná zejména pro výpočet energetického spektra částice v poli centrálních sil, neboť hamiltonián (95) má ve sférických souřadnicích tvar (102) a díky (101) jej lze vyjádřit způsobem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2 \right] + \hat{V}(r). \quad (119)$$

Použijeme-li faktorizaci vlnové funkce (118), pak pro výpočet vlastních čísel E a vlastních funkcí hamiltoniánu, které jsou zároveň vlastními funkcemi operátorů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$, dostaneme obyčejnou diferenciální rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \right] + V_{eff}(r)R(r) - ER(r) = 0, \quad (120)$$

kde

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (121)$$

Substitucí $R(r) = \chi(r)/r$ se tato rovnice zjednoduší na

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \chi''(r) + V_{eff}(r)\chi(r) - E\chi(r) = 0, \quad (122)$$

což je rovnice formálně shodná s rovnicí pro kvantovou částici na polopřímce v poli potenciálu V_{eff} . Podmínka integrability funkce Ψ přejde na podmínku

$$\int_{\mathbf{R}_+} |\chi(r)|^2 dr < \infty. \quad (123)$$

Vedle této podmínky však naložíme na funkce χ ještě dodatečnou okrajovou podmínku

$$\chi(0) = 0, \quad (124)$$

která plyne např. z požadavku konečnosti a jednoznačnosti funkce $\psi(\vec{x}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ v bodě 0. Tato podmínka rovněž zaručuje samosdruženost operátoru (102) (viz [1], Věta 8.6.7).

Uvědomme si, že v kartézských souřadnicích by problém nalezení spektra operátorů $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ byl krajně obtížný. Vhodným výběrem souřadnic se nám podařilo převést řešení parciálních diferenciálních rovnic na řešení ODR. Tomuto postupu se říká separace proměnných a je možný, pokud původní problém má nějakou symetrii, v tomto případě sférickou.

Úplná specifikace rovnice (122) je možná až tehdy zadáme-li konkrétní tvar potenciálu $V(r)$.

3.4.3 Matematická vsuvka 3: Degenerovaná hypergeometrická funkce

Pro hledání vlastních hodnot operátoru energie budeme potřebovat řešení diferenciální rovnice

$$xy''(x) + (ax + b)y'(x) + cy(x) = 0, \quad a \neq 0. \quad (125)$$

Transformací $y(x) = w(-ax)$ lze tuto rovnici převést na tvar

$$zw''(z) + (\gamma - z)w'(z) - \alpha w(z) = 0, \quad (126)$$

kde $\alpha = c/a$, $\gamma = b$.

Z teorie diferenciálních rovnic v komplexním oboru (shrnutí viz [5], dodatek D) plyne, že řešení (126) lze v okolí nuly zapsat jako řadu

$$w(z) = z^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad a_0 \neq 0. \quad (127)$$

Dosazením (127) do (126) a porovnáním koeficientů u mocnin z dostaneme

$$s(s-1+\gamma)a_0 = 0 \quad (128)$$

$$(n+s+1)(n+s+\gamma)a_{n+1} = (n+s+\alpha)a_n, \quad n \geq 0. \quad (129)$$

Dá se ukázat, že řady s takto určenými koeficienty konvergují pro všechna z a definují tzv. *degenerované hypergeometrické funkce*.

Pro $s = 0$ a $\gamma \neq -n \in \mathbf{Z}_-$ má řada (127) tvar $a_0 F(\alpha, \gamma, z)$, kde

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{1!\gamma}z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}z^2 + \dots \quad (130)$$

Pro $s = 1 - \gamma$, $\gamma - 2 \neq n \in \mathbf{Z}_+$

$$w(z) = z^{1-\gamma} F(\alpha + 1 - \gamma, 2 - \gamma, z). \quad (131)$$

Pro necelá γ je obecným řešením rovnice (126)

$$w(z) = A_1 F(\alpha, \gamma, z) + A_2 z^{1-\gamma} F(\alpha + 1 - \gamma, 2 - \gamma, z), \quad (132)$$

takže obecným řešením rovnice (125) pro necelá b je

$$y(x) = C_1 F\left(\frac{c}{a}, b, -ax\right) + C_2 x^{1-b} F\left(\frac{c}{a} + 1 - b, 2 - b, -ax\right). \quad (133)$$

Vzhledem k tomu, že $a_n/a_{n-1} \rightarrow 1/n$, chovají se degenerované hypergeometrické funkce pro $z \rightarrow \infty$ jako e^z . Pro $z \rightarrow -\infty$ $F(\alpha, \gamma, z) \approx 1$.

3.4.4 Isotropní harmonický oscilátor

V kapitole 3.2.2 jsme řešili problém spektra energie třírozměrného harmonického oscilátoru a zjistili jsme, že podprostory vlastních stavů energie jsou vícerozměrné, což znamená, že (na rozdíl od jednorozměrného harmonického oscilátoru) jeho stavy nejsou určeny energií jednoznačně. Díky sférické symetrii potenciálu harmonického potenciálu

$$V(r) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 \quad (134)$$

lze jeho stavy jednoznačně popsat úplnou množinou pozorovatelných tvořenou energií, kvadrátem momentu hybnosti a jeho průmětem do libovolného směru (směr osy z není ničím určen).

Zavedeme-li v rovnici (122) stejně jako u lineárního harmonického oscilátoru bezrozměrnou proměnou $\xi = r/a$, kde $a = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$, dostaneme pro $\Phi(\xi) = \chi(r)$ diferenciální rovnici

$$\Phi''(\xi) - (\xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi^2})\Phi(\xi) + \frac{2E}{\hbar\omega}\Phi(\xi) = 0. \quad (135)$$

Řešení této rovnice se v nekonečnu chová stejně jako řešení pro lineární harmonický oscilátor, $\Phi(\xi) = e^{\pm\xi^2/2}(const + O(\frac{1}{\xi}))$ zatímco v nule je $\Phi(\xi) = \xi^{l+1}(const + O(\xi))$ nebo $\Phi(\xi) = \xi^{-l}(const + O(\xi))$. Zvolíme ansatz

$$\Phi(\xi) = \xi^{l+1}e^{-\xi^2/2}w(\xi^2), \quad (136)$$

a dostaneme rovnici pro $w(z)$, $z = \xi^2$ ve tvaru (126)

$$zw''(z) + (\gamma - z)w'(z) - \alpha w(z) = 0, \quad (137)$$

kde $\alpha = l/2 + 3/4 - \frac{E}{2\hbar\omega}$, $\gamma = l + 3/2$. Zajímají nás kvadraticky integrabilní řešení této rovnice splňující podmínku (124). Obecné řešení rovnice (137) pro necelá γ má tvar (132), takže řešení, které vyhovuje podmínce (124) je dáno degenerovanou hypergeometrickou funkcí $F(\alpha, \gamma, z)$. V nekonečnu se tato funkce chová jako e^z a $\Phi(\xi)$ není kvadraticky integrabilní s výjimkou případů, kdy $\alpha = -n \in \mathbf{Z}_-$. V těchto případech přejde degenerovaná hypergeometrická funkce na tzv. *zobecněné Laguerrovy polynomy*

$$L_n^{\gamma-1}(z) = \binom{n+\gamma-1}{n} F(-n, \gamma, z), \quad (138)$$

definované též způsobem

$$L_n^\beta(z) := \frac{1}{n!} e^z z^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{n+\beta}). \quad (139)$$

Zjistili jsme tedy, že **vlastní hodnoty operátoru energie harmonického oscilátoru jsou $(2n+l+3/2)\hbar\omega$ a vlastní funkce, které jsou navíc vlastními funkcemi operátorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ s vlastními hodnotami $l(l+1)\hbar^2$ a $m\hbar$, kde $n, l \in \mathbf{Z}_+$, $m \in \{-l, \dots, l\}$ mají tvar**

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = C_{nlm} \xi^l e^{-\xi^2/2} L_n^{l+1/2}(\xi^2) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (140)$$

kde C_{nlm} je (normalizační) konstanta, $\xi = r\sqrt{M\omega/\hbar}$, L_n^α jsou zobecněné Laguerrovy polynomy a P_l^m jsou přidružené Legendrovy funkce. Obvykle se tyto funkce zapisují jako

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = K_{nl} \xi^l e^{-\xi^2/2} L_n^{l+1/2}(\xi^2) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (141)$$

a zvolíme-li

$$|K_{nl}| = \frac{2}{\pi^{1/4}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \left(\frac{2^{n+1}n!}{(2n+2l+1)!!} \right)^{1/2} \quad (142)$$

a Y_{lm} jsou normalizovány k jedné (viz (115)), pak tyto funkce jsou rovněž normalizovány k jedné.

Cvičení 46 *Napište všechny vlnové funkce pro stavy s energiemi $3/2\hbar\omega$, $5/2\hbar\omega$ a $7/2\hbar\omega$, které jsou zároveň vlastními funkcemi operátorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$.*

Kvantové číslo n se obvykle nazývá *radiální kvantové číslo* (udává příspěvek k energii od radiálního pohybu částice) a číslo $N := 2n + l$ se nazývá *hlavní kvantové číslo*.

Z faktu, že k danému l existuje $(2l + 1)$ různých stavů, jednoduchou kombinatorickou úvahou odvodíme, že *degenerace hladiny energie* harmonického oscilátoru je $(N + 3/2)\hbar\omega$, to jest počet stavů se stejnou energií, je $\frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$. Tento výsledek jsme již dostali v paragrafu 3.2.2, kde $N = n_1 + n_2 + n_3$.

3.4.5 Coulombův potenciál

Další velmi důležitý problém je spektrum energie pro potenciál

$$V(r) = -\frac{Q}{r}, \quad Q > 0, \quad (143)$$

neboť jej lze použít k popisu hladin energií elektronu v obalu vodíku atomu. Uvážíme-li totiž, že proton je víc než 1800 krát těžší než elektron je přirozené očekávat, že vnitřní energie (to jest odhlédneme-li od pohybu atomu jako celku) celého systému se bude jen málo lišit od energie elektronu v elektrostatickém poli (143), kde $Q = q_e^2/(4\pi\epsilon)$, kde q_e je náboj elektronu a ϵ je permitivita vakua. Dosadíme-li (143) do (121), pak rovnice (122) přejde na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\chi''(r) + \left[-\frac{Q}{r} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r) = E\chi(r), \quad (144)$$

Substitucí

$$\chi(r) = r^{l+1}w(r)e^{\kappa r}, \quad (145)$$

kde

$$\kappa^2 = -\frac{2ME}{\hbar^2} \quad (146)$$

převeďme tuto rovnici na tvar

$$rw''(r) + 2(l+1+\kappa r)w'(r) + 2[(l+1)\kappa + \frac{MQ}{\hbar^2}]w(r) = 0, \quad (147)$$

což je opět rovnice pro degenerované hypergeometrické funkce (125). Řešení splňující podmínku (124) je podle (133)

$$w(r) = C_1 F(l+1 + \frac{MQ}{\hbar^2 \kappa}, 2l+2, -2\kappa r). \quad (148)$$

Podmínka kvadratické integrability pak zní

$$\kappa < 0, \quad l+1 + \frac{MQ}{\hbar^2 \kappa} = -n \in \mathbf{Z}_-, \quad (149)$$

odkud díky (146) plyne, že **vlastní hodnoty operátoru energie kvantové částice v coulombickém poli (143) jsou**

$$\boxed{E = E_{n,l} = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2(n+l+1)^2} = -\frac{R}{N^2}, \quad N, n, l \in \mathbf{Z}_+}. \quad (150)$$

Číslo n se opět nazývá radiální kvantové číslo. Hlavní kvantové číslo určující hodnotu energie je $N = n + l + 1$. Konstanta $R = \frac{MQ^2}{2\hbar^2}$ se nazývá Rydbergova energie a hraje velkou roli v optické a rentgenovské spektroskopii. Její hodnota pro atom vodíku, kde $Q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon}$ a M je hmota elektronu, je $Q = 2,184 \times 10^{-18} J = 13,6 \text{ eV}$. Degenerovaná hypergeometrická funkce (148) pro (149) opět přejde na Laguerrovův polynom, takže **vlastní funkce operátoru energie kvantové částice v coulombickém poli, odpovídající vlastní hodnotě $-\frac{R}{N^2}$, která je navíc vlastní funkcí operátorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ s vlastními hodnotami $l(l+1)\hbar^2$, $m\hbar$**

$$l \in \{0, \dots, N-1\}, \quad m \in \{-l, \dots, l\} \quad (151)$$

má tvar

$$\psi_{N,l,m}(r, \theta, \phi) = C_{Nlm} r^l e^{-r/Na} L_{N-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{Na} \right) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (152)$$

kde $a = \frac{\hbar^2}{|Q|M}$, C_{Nlm} je (normalizační) konstanta, L_n^α jsou zobecněné Laguerrovy polynomy a P_l^m jsou přidružené Legendrovy funkce. Normalizované funkce $\psi_{N,l,m}$ se opět často značí jako kety

$$|Nlm\rangle = K_{Nl} \left(\frac{2r}{Na} \right)^l e^{-r/Na} L_{N-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{Na} \right) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (153)$$

kde

$$|K_{Nl}| = \frac{2}{n^2} \left(\frac{(N-l-1)!}{a^3(N+l)!} \right)^{1/2}$$

a Y_{lm} jsou normalizované kulové funkce. Konstanta a mající rozměr délky se nazývá Bohrovův poloměr. Pro vodík je $a = 0,53 \times 10^{-8} \text{ cm}$.

Cvičení 47 *Napište všechny vlnové funkce pro stavy s energiemi $-R$, $-R/4$, $-R/9$.*

Cvičení 48 *Porovnejte základní stav klasické a kvantové částice v Coulombově poli.*

Z výrazu (150) je zřejmé, že všechny stavy (152), pro které (l, m) leží v množině (151) mají tutéž energii. Degenerace hladiny energie s daným N , neboli počet stavů s energií R/N^2 je

$$D_N = \sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = N^2. \quad (154)$$

Hodnoty energie (150) částice v coulombické poli předpovězené kvantovou mechanikou lze snadno ověřit experimentálně, neboť jak už bylo řečeno v úvodu této kapitoly, je možno tímto systémem popsat vodíkový atom. Jeho záření má (v rozporu s klasickou teorií) čárové spektrum a empiricky bylo zjištěno, že frekvence záření splňují tzv. Rydberg–Ritzův kombinační princip

$$\nu = \text{const} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (155)$$

V rámci kvantové mechaniky je snadné tuto formuli vysvětlit předpokladem, že frekvence fotonů emitovaných elektrony v obalu atomů je dána rozdílem hladin energií elektronu. Pro vodík pak dostáváme

$$\nu = \frac{(E_{n_2} - E_{n_1})}{2\pi\hbar} = \frac{MQ^2}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (156)$$

kde $Q = q_e^2/4\pi\epsilon$. Numerická hodnota *Rydbergovy frekvence* $\nu_R = MQ^2/(4\pi\hbar^3)$ je v tomto případě $3.3 \cdot 10^{15} \text{ sec}^{-1}$ a pro $n_1 = 1, 2, \dots$, pak dostáváme frekvence, jež jsou v dobré shodě s naměřenými hodnotami Lymanovy, Balmerovy, ... serie.

Množina vlastních funkcí (152) je ortogonální, ale netvoří bazi Hilbertova prostoru $L^2(\mathbf{R}_+ \times (0, \pi) \times (0, 2\pi), r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi)$. Důvod je v tom, že operátor energie pro částici v Coulombově poli má vedle bodové i spojitou část spektra $\sigma_c(\hat{H}) = [0, \infty)$. Přiřazení vlnových funkcí této části spektra se věnuje podkapitola 3.6.

3.5 Posunovací operátory a bra–ketový formalismus

Posunovací operátory jsou důležitým prostředkem pro studium spekter a vlastních funkcí. Operátor $\hat{A}$ nazvu *posunovacím operátorem* k operátoru $\hat{B}$ s posunutím $\Delta \in \mathbb{C}$ pokud

$$[\hat{B}, \hat{A}] = \Delta \hat{A}. \quad (157)$$

Důvod pro tento název spočívá v tom, že pokud λ je vlastní hodnota operátoru $\hat{B}$ a ψ_λ příslušná vlastní funkce, pak ze (157) ihned plyne

$$\hat{B}\hat{A}\psi_\lambda = (\lambda + \Delta)\hat{A}\psi_\lambda, \quad (158)$$

což znamená, že $\hat{A}\psi_\lambda$ je buď nula nebo vlastní funkce operátoru $\hat{B}$ s vlastní hodnotou $\lambda + \Delta$.

Ze vztahu (157) rovněž ihned plyne, že pokud operátor $\hat{A}$ je posunovacím operátorem k operátoru $\hat{B}$ s posunutím Δ , pak $\hat{A}^\dagger$ je posunovacím operátorem k operátoru $\hat{B}^\dagger$ s posunutím $-\Delta^*$. Pokud navíc $\hat{B}$ je samosdružený (tzn. má pouze reálné vlastní hodnoty) a existuje aspoň jedna vlastní funkce ψ_λ operátoru $\hat{B}$ taková, že $\hat{A}\psi_\lambda \neq 0$ pak $\Delta \in \mathbf{R}$.

Je zřejmé, že posunovací operátory budou mít význam, zejména pro operátory které mají ekvidistantní spektrum. Uvedeme dva typické příklady.

3.5.1 Jednorozměrný harmonický oscilátor.

Budeme se zajímat o posunovací operátory pro operátor energie

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{M}{2} \omega^2 x^2 \quad (159)$$

Z komutačních relací mezi $\hat{H}$ a operátorem souřadnice a hybnosti lze odvodit, že posunovací operátory pro $\hat{H}$ jsou

$$\hat{a}_\pm := \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\hat{Q} \mp \frac{i}{M\omega} \hat{P} \right), \quad (160)$$

neboť

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \pm \hbar \omega \hat{a}_\pm. \quad (161)$$

Navíc platí

$$\hat{a}_-^\dagger = \hat{a}_+, [\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \mathbf{1}. \quad (162)$$

Ze (158) a vlastností spektra energie harmonického oscilátoru plyne pro jeho vlastní funkce ψ_n (65)

$$\hat{a}_\pm \psi_n = \alpha_n^\pm \psi_{n\pm 1} \quad (163)$$

Operátor $\hat{a}_+$ tedy "zvyšuje energii stavu" o $\hbar\omega$ a nazývá se obvykle *kreační* operátor, zatímco operátor $\hat{a}_-$ se z podobného důvodu nazývá *anihilační*.

Operátory $\hat{a}_\pm$ jsou normalizovány tak, že vedle relací (161), (162) platí

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}_- \hat{a}_+ + \hat{a}_+ \hat{a}_-) = \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right). \quad (164)$$

Důsledkem tohoto vztahu je, že operátor $\hat{a}_+\hat{a}_-$ se někdy nazývá "operátorem počtu energetických kvant".

Snadno lze ukázat, že spektrum energie harmonického oscilátoru je zdola omezené a využitím kreačních a anihilačních operátorů můžeme spočítat jeho vlastní čísla i vlastní funkce. Pro stav s nejnižší energií ψ_0 totiž musí platit

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0 \quad (165)$$

a dosadíme-li do (160) vyjádření operátorů $\hat{Q}$, $\hat{P}$ (54), (55), rovnice (165) přejde na tvar

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0 = 0, \quad (166)$$

kde $\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}x$. Tuto diferenciální rovnici 1. řádu se separovanými proměnnými snadno vyřešíme.

$$\psi_0(\xi) = Ce^{-\xi^2/2}. \quad (167)$$

Porovnáním této funkce s (65) zjistíme, že se skutečně jedná o vlastní funkci energie jednorozměrného harmonického oscilátoru s vlastním číslem $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Stavy s energiemi $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ dostaneme aplikací kreačního operátoru na stav s nejnižší energií

$$\psi_n(\xi) = K_n \hat{a}_+^n \psi_0(\xi) = \frac{K_n}{\sqrt{2^n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}, \quad K_n^{-1} = \left(\frac{\hbar\pi}{M\omega}\right)^{1/4} \prod_{k=0}^{n-1} \alpha_k^+. \quad (168)$$

Volba fáze normalizačních konstant (81) vlastních funkcí energie jednorozměrného harmonického oscilátoru určuje i fázi koeficientů $\alpha_n^\pm$. Volba fáze $\alpha_n^\pm > 0$ je ve shodě s přijatou fázovou konvencí (81), kde všechny normalizační koeficienty jsou kladné.

Cvičení 49 *Ukažte, že platí*

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = n \psi_n.$$

Cvičení 50 *Spočítejte koeficienty $\alpha_n^\pm$ v (163).*

Poznamenejme ještě nakonec, že stav s nejnižší energií je zvláštním případem koherentního stavu. *Koherentní stavy* ρ_λ jsou definovány jako vlastní stavy anihilačního operátoru

$$\hat{a}_-\rho_\lambda = \lambda\rho_\lambda. \quad (169)$$

Řešením této jednoduché diferenciální rovnice dostaneme

$$\rho_\lambda(\xi) = C_\lambda e^{-(\sqrt{2}\lambda - \xi)^2/2}. \quad (170)$$

Tyto stavy hrají významnou roli zejména v kvantové optice.

3.5.2 Moment hybnosti

Nejjednodušší posunovací operátor pro $\hat{L}_3$ je $A = e^{i\phi}$. Jeho nevýhodou je, že při působení na kulové funkce posunuje nejen m , ale i l . Alternativou jsou posunovací operátory

$$\hat{L}_{\pm} := L_1 \pm iL_2. \quad (171)$$

Pro ně lze snadno dokázat komutační relace

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0 \quad (172)$$

a přechodem do sférických souřadnic

$$\hat{L}_{\pm} Y_{lm} = \alpha_{lm}^{\pm} Y_{l, m \pm 1}, \quad (173)$$

$$\hat{L}_+ Y_{ll} = 0, \quad \hat{L}_- Y_{l, -l} = 0, \quad (174)$$

kde $\alpha_{lm}^{\pm} \in \mathbf{C}$ a $Y_{l,m}$ jsou kulové funkce definované v podkapitole 3.4.1. Na druhé straně je možno rovnice (174) a (173) použít pro výpočet kulových funkcí.

Cvičení 51 *Ověřte komutační relaci*

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3. \quad (175)$$

Cvičení 52 *Napište operátor $\hat{L}^2$ vyjádřený pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_{\pm}$ a $\hat{L}_3$.*

Koeficienty $\alpha_{lm}^{\pm}$ jsou určeny relací (173) až na fázi. Přijmeme-li tzv. Condon-Shortleyovu konvenci, že $\alpha_{lm}^{\pm}$ jsou reálné kladné a rovněž tak normalizační konstanta pro $Y_{l,0}$ je reálná kladná, pak je určena i fáze všech normalizačních konstant C_{lm} (115) pro $Y_{l,m}$ jako $(-1)^m$.

Cvičení 53 *Spočítejte koeficienty $\alpha_{lm}^{\pm}$.*

Cvičení 54 *Spočítejte "maticové elementy" $(Y_{lm}, \hat{L}_k Y_{l'm'})$.*

3.5.3 Bra-ketový formalismus

Na tomto místě je vhodné předvést příklady tzv. "ketů" $| \rangle$ a "bra" $\langle |$, což obecně není nic jiného než označení prvků Hilbertova prostoru a funkcionalů na něm. Označíme-li normovaný vlastní stav energie jednorozměrného harmonického oscilátoru $\psi_n = |n\rangle$, pak ketové vyjádření vztahu (168) je

$$|n\rangle = K_n \hat{a}_+^n |0\rangle.$$

Zavedeme-li nyní alternativní označení skalárního součinu pro libovolné $f \in L_2(\mathbf{R}, dx)$

$$(\psi_n, f) \equiv (|n\rangle, |f\rangle) = \langle n|f\rangle$$

(skalární součin = závorka = bracket = $\langle$ bra|ket $\rangle$), pak relace úplnosti neboli Parsevalova rovnost pro bazi vlastních funkcí energie jednorozměrného harmonického oscilátoru má v bra-ketovém formalismu velice jednoduchý tvar

$$f \equiv |f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|f\rangle, \quad (176)$$

což se často zapisuje jako $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{\mathbf{1}}$.

Z komutačních vlastností kreačních a anihilačních operátorů dostaneme vztahy

$$\hat{a}_-^m \hat{a}_+^n |0\rangle = 0 \text{ pro } n < m, \quad \hat{a}_-^m \hat{a}_+^n |0\rangle = n! \hat{a}_+^{n-m} |0\rangle \text{ pro } n \geq m, \quad (177)$$

ze kterých lze snadno odvodit ortonormalitu stavů

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_+^n |0\rangle,$$

která v bra-ketovém vyjádření má jednoduchý tvar

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}. \quad (178)$$

Operátory $\hat{O}$ v $L_2(\mathbf{R}, dx)$ lze zapsat v tzv. energetické reprezentaci pomocí maticových elementů $\langle n|\hat{O}|m\rangle$ způsobem

$$\hat{O}f \equiv \hat{O}|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\hat{O}|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\hat{O}|m\rangle \langle m|f\rangle, \quad (179)$$

kde

$$\langle n|\hat{O}|m\rangle := (\psi_n, \hat{O}\psi_m). \quad (180)$$

Cvičení 55 *Napište energetickou reprezentaci operátorů hybnosti a polohy v jednorozměrném případě*

Podobným způsobem je možno zapsat kulové funkce a vztahy mezi nimi pomocí ketů $|l, m\rangle$ nebo vlastní funkce isotrovního harmonického oscilátoru pomocí ketů $|N, l, m\rangle$.

3.6 Zobecněné vlastní funkce

Příkladem zobecněných vlastních funkcí jsou vlastní funkce souřadnice a hybnosti. Problém vlastních funkcí hybnosti se zdá na první pohled jednoduchý. Podmínka

$$\hat{P}_j \phi = p_j \phi \quad j = 1, 2, 3 \quad (181)$$

dává diferenciální rovnice

$$-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = p_j \phi \quad j = 1, 2, 3, \quad (182)$$

které mají řešení

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = A e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}, \quad (183)$$

jež se někdy nazývají vlastní funkcí operátoru hybnosti. Problém je v tom, že tyto funkce nejsou kvadraticky integrabilní pro žádné $\vec{p} \in \mathbf{C}^3$. To znamená, že složky operátoru hybnosti v Hilbertově prostoru stavových funkcí $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ žádné vlastní funkce nemají. Neznamená to však, že jejich spektrum je prázdné. Naopak, při náležitém určení definičního oboru je tvoří všechna reálná čísla. Patří však do spojitě nikoliv bodové části spektra.

Přiřazení vlnových funkcí hodnotám fyzikálních veličin způsobem (94) je možno provést pouze pro hodnoty z bodové části spektra odpovídajícího operátoru. Hodnotám α ze spojitě části spektra lze přiřadit pouze tzv. *zobecněné vlastní funkce* ϕ_α , které nejsou kvadraticky integrovatelné, avšak lze pro ně definovat skalární součiny (ϕ_α, ψ) a (ψ, ϕ_α) s funkcemi ležícími v husté podmnožině kvadraticky integrovatelných funkcí.

Příkladem takové husté podmnožiny je *prostor rychle ubývajících funkcí* $\mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$ obsahující funkce $f \in L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ splňující

$$\sup |x_1^{j_1} x_2^{j_2} x_3^{j_3} \frac{\partial^{k_1}}{\partial x_1^{k_1}} \frac{\partial^{k_2}}{\partial x_2^{k_2}} \frac{\partial^{k_3}}{\partial x_3^{k_3}} f| < \infty \quad (184)$$

pro všechna $(\vec{j}, \vec{k}) \in \mathbf{Z}_+^6$. Důležitá vlastnost funkcí z $\mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$ je, že Fourierova transformace

$$\tilde{f}(\vec{k}) \equiv (\mathcal{F}f)(\vec{k}) := (2\pi)^{-3/2} \int_{\mathbf{R}^3} e^{i\vec{k}\vec{x}} f(\vec{x}) d^3x \quad (185)$$

je bijekcí $\mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$ na $\mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$ (viz [1]). Příslušné inverzní zobrazení má tvar

$$(\mathcal{F}^{-1}\tilde{f})(\vec{x}) := (2\pi)^{-3/2} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\vec{k}\vec{x}} \tilde{f}(\vec{k}) d^3k. \quad (186)$$

Pro $f \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$ můžeme definovat skalární součiny $(\phi_{\vec{p}}, f)$ a $(f, \phi_{\vec{p}})$ stejně jako kdyby $\phi_{\vec{p}}$ ležely v $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$.

$$(f, \phi_{\vec{p}}) := \int_{\mathbf{R}^3} f^*(\vec{x}) A e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} d^3x = A(2\pi)^{3/2} (\mathcal{F}f)\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right), \quad (187)$$

$$(\phi_{\vec{p}}, f) := (f, \phi_{\vec{p}})^*, \quad (188)$$

neboť tyto integrály jsou (inverzní) Fourierovou transformací funkce f , která je definována pro všechny funkce z $\mathcal{S}(\mathbf{R}^3)$. Rovnice pro zobecněné vlastní funkce $\phi_{\vec{p}}$ má tvar

$$(\hat{P}_j \phi_{\vec{p}}, f) := (\phi_{\vec{p}}, \hat{P}_j f) = p_j(\phi_{\vec{p}}, f), \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^3) \quad (189)$$

a funkce (183) jsou tedy **zobecněné vlastní funkce hybnosti**. Tyto funkce lze na druhé straně libovolně přesně aproximovat funkcemi z $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$. To je také důvod proč je s úspěchem můžeme použít k popisu tzv. rozptylových stavů (viz kap. 9), jež jsou určeny počáteční a konečnou hybností.

Cvičení 56 *Nechť*

$$\phi_{p,\epsilon}(x) := \frac{A}{2\epsilon} \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon} dp' e^{ip'x/\hbar} = A e^{ipx/\hbar} \frac{\hbar}{\epsilon x} \sin \frac{\epsilon x}{\hbar}.$$

Ukažte, že $(\phi_{p,\epsilon}, \phi_{p,\epsilon}) = \frac{\pi\hbar}{\epsilon} |A|^2$.

Ještě výraznější je "zobecněnost" vlastních funkcí operátoru polohy částice. Rovnice

$$\hat{Q}_j \psi = \lambda_j \psi, \quad j = 1, 2, 3$$

má za řešení funkce, které jsou nenulové pouze pro $x_j = \lambda_j$. Takové funkce jsou však v $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ ekvivalentní nulové funkci takže pro řešení problému konstrukce zobecněných vlastních funkcí operátoru polohy je třeba použít jiné matematické objekty než funkce na $\mathbf{R}^3$, tzv. δ -funkce δ_λ mající formálně následující vlastnosti:

$$\delta_\lambda(x) \equiv \delta(\lambda - x) = 0, \quad \text{pro } x \neq \lambda \quad (190)$$

$$\int_{\mathbf{R}} \delta_\lambda(x) f(x) dx = f(\lambda). \quad (191)$$

Je zřejmé, že žádná funkce nemůže současně splnit obě podmínky (190,191), nicméně lze definovat jiné matematické objekty pro které lze obě podmínky splnit.

Příklad: Nejjednodušší způsob je pohlížet na δ -funkce jako na limity posloupnosti řádných funkcí. Nechť

$$f_{a,\lambda}(x) := 0 \quad \text{pro } |x - \lambda| > a$$

$$f_{a,\lambda}(x) := 1/2a \quad \text{pro } |x - \lambda| \leq a.$$

Pak podmínky (190), (191) jsou splněny pro $a \rightarrow 0$.

Z tohoto příkladu je snadno vidět, že i zobecněné vlastní funkce operátoru polohy (194) lze aproximovat funkcemi z prostoru $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ podobně jako zobecněné vlastní funkce operátoru hybnosti (183).

Přesnější definici pojmu δ -funkce je možno podat v rámci teorie temperovaných distribucí, což jsou spojitě lineární funkcionály na $\mathcal{S}(\mathbf{R}^n)$. Uvedeme pouze, že v této

teorii je (jednorozměrná) δ -funkce formálním analogem funkcionálu $(\delta_\lambda, \cdot)$ na $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ definovaného ve shodě s (191) způsobem

$$\int_{\mathbf{R}} \delta_\lambda(x) f(x) \equiv (\delta_\lambda, f) := f(\lambda). \quad (192)$$

rovnosti Rovnost

$$x\delta_\lambda(x) = \lambda\delta_\lambda(x)$$

pak znamená

$$(\hat{Q}\delta_\lambda, f) = (\delta_\lambda, \hat{Q}f) = \lambda(\delta_\lambda, f), \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^3), \quad (193)$$

(což je vztah analogický k (189)) a v tomto smyslu je

$$\delta_{\vec{a}}(\vec{x}) \equiv \delta(\vec{a} - \vec{x}) := \delta_{a_1}(x_1)\delta_{a_2}(x_2)\delta_{a_3}(x_3) \quad (194)$$

zobecněnou vlastní funkcí polohy s vlastní hodnotou $\vec{a}$.

Z definice Fourierovy transformace (185) a její inverze lze jednoduchým výpočtem ukázat, že

$$\int_{\mathbf{R}^3} e^{i\vec{z}(\vec{x}-\vec{y})} d^3z = (2\pi)^3 \delta(\vec{x} - \vec{y}) \quad (195)$$

Odtud plyne důležitá vlastnost funkcí (183), totiž že je lze "*normalizovat k δ -funkci*", neboť pro $A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$

$$(\phi_{\vec{p}'}, \phi_{\vec{p}}) \equiv \int_{\mathbf{R}^3} \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) \phi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) d^3x = \delta(\vec{p} - \vec{p}'). \quad (196)$$

Podobně i pro (194) platí

$$(\delta_{\vec{a}'}, \delta_{\vec{a}}) \equiv \int_{\mathbf{R}^3} \delta_{\vec{a}}(\vec{x}) \delta_{\vec{a}'}(\vec{x}) d^3x = \delta(\vec{a} - \vec{a}'), \quad (197)$$

Tyto identity je třeba chápat jako rovnosti na prostoru lineárních funkcionálů na $\mathcal{S}(\mathbf{R}^n)$ a zápis pomocí integrálů je poněkud formální.

Někdy se i zobecněným normalizovaným funkcím přiřazují kety $\delta_{\vec{a}} \equiv |\vec{a}\rangle$, $\phi_{\vec{p}} \equiv |\vec{p}\rangle$. Vztahy (183), (197), (196), (191) a (188) pak lze zapsat jako

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}, \quad \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}'),$$

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(\vec{x}), \quad \langle \vec{p} | \psi \rangle = \hbar^{-3/2} \tilde{\psi}\left(-\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)$$

a je možno psát analog relace úplnosti (176)

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbf{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbf{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle.$$

Zobecněné vlastní funkce lze přiřadit i hodnotám ze spojité části spektra jiných operátorů. Například vedle vlastních hodnot energie částice v coulombickém poli spočítaných v předchozím paragrafu leží ve spojité části spektra operátoru energie všechna kladná čísla. Stavům částice v Coulombově potenciálu s kladnou energií (tzv. rozptylové stavy) lze přiřadit zobecněné vlastní funkce

$$\psi_{klm} = R_{kl}Y_{lm}, \quad (198)$$

kde $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$, Y_{lm} jsou kulové funkce (114) a

$$R_{kl}(r, \theta, \phi) = C_{kl}r^l e^{ikr} F(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k}, 2l+2, -2ikr). \quad (199)$$

Lze ukázat, že tyto funkce jsou při vhodném výběru konstant C_{kl} normalizovány k δ -funkci, neboť platí

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{2l} e^{i(k'-k)r} F^*(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k}, 2l+2, -2ikr) F(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k'}, 2l+2, -2ik'r) r^2 dr \\ = K_{kl} \delta(k - k'), \end{aligned} \quad (200)$$

kde K_{kl} je konstanta.

Z výše uvedených faktů je zřejmé, že matematický popis rozptylových stavů je mnohem složitější, než popis stavů odpovídající vlastním hodnotám. Na druhé straně se mu však nemůžeme vyhnout, neboť rozptylové experimenty představují důležitý zdroj informací o chování objektů mikrosvěta.

Rigoróznější avšak matematicky náročnější popis stavů ze spojité části spektra pozorovatelných je možno provést pomocí projektorů [1].

4 Výsledky měření

Otázka, na kterou odpovíme v této kapitole, zní: **Jaké hodnoty fyzikálních veličin naměříme, je-li kvantová částice ve stavu popsaném funkcí g ?**

Částečná odpověď na tuto otázku byla poskytnuta již v sekci 3.2. V principu můžeme naměřit libovolnou hodnotu, která leží ve spektru operátoru, odpovídajícího dané veličině. Otázkou však je, která z nich to bude. Bornův postulát dává tušit, že odpověď na druhou otázku nemusí být jednoznačná, neboť pro měření polohy dostáváme pouze statistickou předpověď.

V minulých kapitolách jsme provedli popis stavů kvantové částice pomocí vlnové funkce. To však neznamená, že jsme schopni v daném čase určit hodnoty všech pozorovatelných jako v klasické mechanice. Jediné pozorovatelné, jejichž hodnoty jsme schopni pro daný stav určit, jsou zatím ty, které jsme použily k popisu stavu. V minulé kapitole to byly například energie, kvadrát momentu hybnosti a jeho třetí

složka. To ovšem nedává žádnou informaci například o hybnosti kvantové částice, ba dokonce ani o první a druhé složce momentu hybnosti. Jedinou další fyzikálně interpretovatelnou informací, kterou zatím o daném stavu máme, je *pravděpodobnostní rozdělení polohy* částice. O něm nás informuje Bornův postulát.

Z pravděpodobnostního rozdělení polohy jsme samozřejmě schopni určit i *střední hodnotu polohy částice ve stavu ψ* :

$$\langle X_j \rangle_\psi = \int_{\mathbf{R}^3} x_j |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \frac{\int_{\mathbf{R}^3} x_j |\psi(\vec{x})|^2 d^3x}{\int_{\mathbf{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x}. \quad (201)$$

Cvičení 57 Spočítejte střední hodnoty složek polohy kvantové částice popsané vlnovou funkcí (37).

4.1 Střední hodnoty pozorovatelných a pravděpodobnosti přechodu

Pokud kvantová mechanika má být plnohodnotnou fyzikální teorií, pak pro systém v daném stavu musí být schopna předpovědět výsledek měření nejen okamžité souřadnice částice, ale i ostatních fyzikálních veličin. Pokusíme se proto napřed najít předpis, kterým určíme střední hodnotu libovolné pozorovatelné v daném stavu, a potom i předpis pro její pravděpodobnostní rozdělení.

Pro určení předpisu pro střední hodnoty si napřed všimneme toho, že čitatel výrazu pro (201) je možno zapsat způsobem

$$\int_{\mathbf{R}^3} \psi^*(\vec{x}) x_j \psi(\vec{x}) d^3x = \int_{\mathbf{R}^3} \psi^*(\vec{x}) [\hat{Q}_j \psi](\vec{x}) d^3x = (\psi, \hat{X}_j \psi), \quad (202)$$

takže

$$\langle X_j \rangle_\psi = \frac{(\psi, \hat{Q}_j \psi)}{(\psi, \psi)}. \quad (203)$$

Na druhé straně není důvodu, proč by měla mít poloha částice privilegované postavení mezi ostatními pozorovatelnými a je proto přirozené očekávat, že pro libovolnou pozorovatelnou se její střední hodnota bude počítat podle stejného předpisu. Experimenty tuto hypotézu plně potvrzují a skutečně platí že **je-li systém v okamžiku měření ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ , pak střední hodnota měření pozorovatelné A , které jsme přiřadili operátor $\hat{A}$ je**

$$\boxed{\langle A \rangle_\psi = \frac{(\psi, \hat{A} \psi)}{(\psi, \psi)}}. \quad (204)$$

Pro normalizované vlnové funkce se tento vztah zjednoduší na $\langle A \rangle_\psi = (\psi, \hat{A} \psi)$.

Cvičení 58 Spočítejte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice popsané vlnovou funkcí (37). Napište tvar vlnové funkce popisující minimální vlnový balík se střední hodnotou hybnosti $\vec{p}_0$, který má v čase t_0 střední hodnotu polohy $\vec{x}_0$.

Cvičení 59 Spočítejte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice v Coulombově poli s energií $-\frac{MQ^2}{2\hbar^2}$ a nulovým momentem hybnosti (elektron v atomu vodíku ve stavu $1s$).

Cvičení 60 Spočítejte střední hodnotu energie jednorozměrného harmonického oscilátoru v koherentním stavu ρ_λ (170).

Všimněme si, že předpis (204) je ve shodě nejen s Bornovým postulátem, ale i s popisem stavu pomocí vlastních funkcí kompatibilních pozorovatelných. Skutečně, je-li A jedna z pozorovatelných, jež byly použity k určení stavu a vlnová funkce α je vlastní funkcí $\hat{A}$ pro vlastní hodnotu a , pak $\langle A \rangle_\alpha = a$.

Kvantová mechanika je však schopna poskytnout ještě detailnější informaci o výsledku měření pro částici v daném stavu. Podle Bornova postulátu jsme schopni určit pravděpodobnost, že poloha částice bude v jistém intervalu hodnot. Podobnou pravděpodobnost můžeme určit i pro ostatní pozorovatelné.

Vzhledem k tomu, že, jak už bylo řečeno, kvantová mechanika má popisovat objekty na atomární a nižší úrovni je rozumné předpokládat, že měření provedené na takovýchto objektech podstatným způsobem změní jejich stav. Dalším postulátem kvantové mechaniky je, že **měření pozorovatelné A , které dá hodnotu a převede kvantovou částici do stavu, který je popsán vlastní funkcí α operátoru $\hat{A}$ s vlastní hodnotou a .**

Předpokládejme zatím, že pro dané a je takový stav jen jeden, tzn. vlastní funkce je určena jednoznačně až na multiplikativní konstantu, kterou zvolíme tak, aby $(\alpha, \alpha) = 1$. Chceme-li určit pravděpodobnost naměření hodnoty a pro částici popsanou vlnovou funkcí ψ , stačí, budeme-li znát **pravděpodobnost přechodu kvantové částice z původního stavu ψ do stavu α .** Kvantová mechanika postuluje, že tato pravděpodobnost je rovna

$$W_{\psi \rightarrow \alpha} = \frac{|(\psi, \alpha)|^2}{(\psi, \psi)}. \quad (205)$$

Veličina $A_{\psi \rightarrow \alpha} := (\psi, \alpha) / \sqrt{(\psi, \psi)}$ se nazývá *amplitudou pravděpodobnosti přechodu $\psi \rightarrow \alpha$*

Cvičení 61 Nechť "jednorozměrná" částice v potenciálu harmonického oscilátoru je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x) = C e^{-x^2 + ikx}. \quad (206)$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty její energie rovné $\frac{1}{2}\hbar\omega$, resp. $\hbar\omega$, $\frac{3}{2}\hbar\omega$?

Výraz (205) je možno použít i k určení pravděpodobnosti naměření hodnoty a pozorovatelné A , jejíž vlastní podprostor má více rozměrů. Pokud množina $\{\alpha_k\}$ je ortonormální bazí v prostoru vlastních stavů operátoru $\hat{A}$ s vlastní hodnotou a , pak **pro částici ve stavu ψ je pravděpodobnost, že při měření pozorovatelné A dostaneme hodnotu a , součtem pravděpodobností přechodů ze stavu ψ do stavů α_k .**

$$W_{\psi, (A=a)} = \sum_k \frac{|(\alpha_k, \psi)|^2}{(\psi, \psi)}. \quad (207)$$

Je zřejmé, že vynásobení vlnové funkce ψ konstantou neovlivní pravděpodobnosti (205) a (207), což je ve shodě s předpokladem, že vlnové funkce lišící se multiplikační konstantou popisují tentýž fyzikální stav.

Cvičení 62 *Nechť částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = (4\pi)^{-1/2} (e^{i\phi} \sin \Theta + \cos \Theta) g(r) \quad (208)$$

Jaké hodnoty L_z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota L_z v tomto stavu?

Cvičení 63 *Nechť částice s hmotou M v potenciálu harmonického oscilátoru s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = C e^{-\vec{x}^2 + i\vec{k}\vec{x}}. \quad (209)$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty její energie rovné $\frac{5}{2}\hbar\omega$?

Nejsme-li z nějakých, například experimentálních, důvodů schopni rozlišit mezi dvěma či více různými vlastními hodnotami, pak pravděpodobnost naměření aspoň jedné z nich je opět dána vzorcem (207) s tím, že suma probíhá přes všechny vlastní funkce příslušné daným vlastním hodnotám. Tento fakt nabývá na významu zejména tehdy, když nějaká část spektra pokrývá souvislý interval hodnot.

Jsou-li body spektra (tj. hodnoty fyzikální veličiny), mezi kterými nejsme schopni experimentálně rozlišit, v intervalu (x, y) , což se stává zejména pro spojitou část spektra, pak zobecnění vzorce (207) na tento případ dá pravděpodobnost naměření hodnoty pozorovatelné A v intervalu (x, y)

$$W_{\psi, (A \in (x, y))} = \frac{\int_x^y da |(\alpha_a, \psi)|^2}{(\psi, \psi)}, \quad (210)$$

kde α_a jsou zobecněné vlastní funkce normalizované k δ -funkci. Všimněme si, že tento vzorec je zobecněním Bornova postulátu, neboť v tom případě $\alpha_a = \delta_a$. Podobně jej lze použít i pro nalezení pravděpodobnosti hybnosti. V tom případě je

třeba za α_a zvolit δ -normalizované zobecněné vlastní funkce hybnosti

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{x}). \quad (211)$$

Odtud pak plyne, že amplituda hustoty pravděpodobnosti nalezení částice s hybností $\vec{p}$ je dána Fourierovým obrazem její stavové funkce.

Cvičení 64 Určete pravděpodobnost nalezení hybnosti částice popsané vlnovou funkcí (209) v intervalu $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$. Určete hustotu pravděpodobnosti nalezení hybnosti v okolí hodnoty $\vec{p}_0$.

Vzorec (210) platí pro případ, že pro každý bod $a \in (x, y)$ existuje právě jedna (zobecněná) vlastní funkce normalizovaná k jedničce či δ -funkci. Obecnější případ zatím řešit nebudeme (vede na tzv. spektrální míru operátoru $\hat{A}$). Uveďme pouze, že například pravděpodobnost naměření hodnoty energie částice v Coulombově poli v intervalu $(E_1, E_2) \subset \mathbf{R}_+$ je dána součtem integrálů

$$W_{\psi, (E \in (E_1, E_2))} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[\int_{-k_2}^{-k_1} dk \frac{|(\phi_{klm}, \psi)|^2}{(\psi, \psi)} + \int_{k_1}^{k_2} dk \frac{|(\phi_{klm}, \psi)|^2}{(\psi, \psi)} \right], \quad (212)$$

kde $k_i = \sqrt{2ME_i/\hbar^2}$, $\phi_{klm} = R_{kl}Y_{lm}$ a Y_{lm}, R_{kl} jsou funkce (114, 199) normalizované k jedničce, resp. k δ -funkci.

4.2 Střední kvadratická odchylka a relace neurčitosti

Důležitá pravděpodobnostní a experimentálně měřitelná veličina je *střední kvadratická odchylka pozorovatelné A při měření na stavu ψ* . V kvantové mechanice je definována způsobem

$$\Delta_{\psi}(A) := \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_{\psi} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi}^2}. \quad (213)$$

Je snadné ukázat, že

$$[\Delta_{\psi}(A)]^2 = \langle (\widehat{\Delta_{\psi}A})^2 \rangle_{\psi} = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi})^2 \rangle_{\psi}, \quad (214)$$

kde $\widehat{\Delta_{\psi}A}$ je lineární operátor

$$\widehat{\Delta_{\psi}A}\phi = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi})\phi \quad (215)$$

a odtud okamžitě plyne, že pokud ψ je vlastním stavem pozorovatelné A, pak $\Delta_{\psi}(A) = 0$.

Cvičení 65 Ukažte, že pokud $\hat{A}$ je samosdružený operátor, pak výraz pod odmocninou (213) je nezáporný pro libovolné $\psi \in D_A$.

Cvičení 66 Spočítejte střední kvadratické odchylky složek polohy a hybnosti kvantové částice při měření na stavu popsaném vlnovou funkcí (37). Ukažte, že pro tento stav platí

$$\Delta_\psi(X_k)\Delta_\psi(P_k) = \hbar/2. \quad (216)$$

Vztah (216) je zvláštním případem tvrzení, kterému se obvykle, říká *relace neurčitosti*.

Tvrzení 4.1 Pro každé dva samosdružené operátory $\hat{A}, \hat{B}$ a $\psi \in D(\hat{A}\hat{B}) \cap D(\hat{B}\hat{A})$ platí

$$\Delta_\psi(A)\Delta_\psi(B) \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi | \quad (217)$$

Rovnost ve vztahu (217) nastává pro vlnové funkce, pro které platí

$$[\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi - i\alpha(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\psi)]\psi = 0, \quad (218)$$

kde $\alpha \in \mathbf{R}$.

Pro operátory (54, 55) platí

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad (219)$$

takže podle tvrzení 4.1 pro každé $\psi \in D(X_j P_k) \cap D(P_k X_j)$ platí relace neurčitosti

$$\boxed{\Delta_\psi(X_j)\Delta_\psi(P_k) \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{jk}}. \quad (220)$$

Cvičení 67 Ukažte, že podmínka (218) pro operátory $\hat{A} = \hat{X}_j, \hat{B} = \hat{P}_j$ dává integrodiferenciální rovnice, jejichž jedinými řešeními jsou funkce

$$g(\vec{x}) = C \exp[-Ax^2 + \vec{B}\vec{x}], \quad A > 0,$$

které jsme nazvali *minimální vlnové balíky*.

Z relací neurčitosti mezi polohou a hybností plyne, že v principu nejsme schopni současně provést měření polohy a hybnosti částice s libovolnou přesností. Znamená to tedy, že v rozporu s představami klasické mechaniky částici nelze přiřadit bod ve fázovém prostoru, nýbrž, že kvantovou částici si ve fázovém prostoru lze představit jako jistou rozmazanou oblast objemu

$$\Delta x \Delta p_x \Delta y \Delta p_y \Delta z \Delta p_z \geq \hbar^3/8.$$

Pro úlohy v makrosvětě, které řeší klasická mechanika jsou však tyto úvahy zcela irelevantní: Např. pro částice s hmotou ≥ 10 mg, jejichž polohu jsme schopni

určit s přesností $\leq 10 \mu\text{m}$, relace neurčitosti říkají, že rychlost částice nelze určit s chybou menší než 10^{-22} m/s , což je experimentálně nedosažitelná přesnost.

V mikrosvětě však relace neurčitosti hrají důležitou roli. Hmotnost elektronu je cca 10^{-27} g a je-li nepřesnost měření polohy menší než lineární rozměr atomu, což je řádově 10^{-8} cm , pak nepřesnost měření jeho rychlosti je větší než 10^8 cm/s , což je srovnatelné s klasickou rychlostí elektronu v atomu. Není tedy divu, že pro popis elektronů v atomovém obalu nelze použít klasickou mechaniku.

5 Časový vývoj kvantové částice

Veškeré úvahy v kapitolách 3 a 4 se týkaly stavu v daném časovém okamžiku. Nyní se vrátíme k důsledkům plynoucím z časového vývoje, který je v kvantové mechanice dán Schrödingerovou rovnicí.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (221)$$

5.1 Rovnice kontinuity

Definujeme-li vedle hustoty pravděpodobnosti $\rho(\vec{x}, t) := \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$ také *hustotu toku pravděpodobnosti*

$$\vec{j}(\vec{x}, t) := \frac{i\hbar}{2M} [\psi(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x}, t) - \psi^*(\vec{x}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x}, t)] \quad (222)$$

pak je snadné ukázat, že pro tyto veličiny platí *rovnice kontinuity*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) + \text{div } \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (223)$$

Důsledkem rovnice kontinuity je, že **normalizace vlnové funkce nezávisí na čase**. Přesnější vyjádření tohoto faktu je dáno rovností

$$\frac{d}{dt}(\psi, \psi) = 0 \quad (224)$$

plynoucím z rovnice kontinuity pro funkce ψ , které spolu se svými derivacemi jdou v nekonečnu dostatečně rychle k nule.

5.2 Stacionární stavy

Důležitou třídou stavů klasické mechaniky jsou rovnovážné stavy, neboli statická řešení pohybových rovnic $x(t) = x(t_0)$. Jejich obdobou v kvantové mechanice jsou tzv. *stacionární stavy*. Tyto stavy jsou popsány vlnovými funkcemi $\psi(\vec{x}, t)$, pro které

střední hodnota libovolné pozorovatelné nezávisí na čase. Jinými slovy pro ně musí platit

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\psi = 0 \quad (225)$$

pro libovolný samosdružený operátor, který explicitně nezávisí na čase.

Je snadné ukázat, že pokud kvantová částice je popsána vlnovou funkcí, která se v různých časech liší pouze faktorem nezávislým na $\vec{x}$

$$\psi(\vec{x}, t) = C(t)\psi(\vec{x}, t_0), \quad (226)$$

pak faktor $C(t)$ je fyzikálně nepodstatný, neboť neovlivní žádné fyzikálně interpretovatelné výsledky jako je pravděpodobnost nalezení v místě $\vec{x}$, pravděpodobnost přechodu do jiného stavu v důsledku měření, ani střední hodnotu operátoru ve stavu ψ . Znamená to tedy, že stavy popsané vlnovými funkcemi (226) jsou stacionární.

Na pravé straně Schrödingerovy rovnice (221) stojí operátor energie – hamiltonián. Není tedy překvapivé, že vlastní stavy operátoru energie budou hrát v časovém vývoji kvantové mechanických stavů důležitou roli. Pro vlnové funkce (226) lze snadno ukázat, že pokud vyhovují Schrödingerově rovnici, pak jsou vlastními stavy energie a $C(t) = C(t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar}$. Ze Schrödingerovy rovnice totiž plyne

$$C(t)\hat{H}\psi(\vec{x}, t_0) = i\hbar\dot{C}(t)\psi(\vec{x}, t_0). \quad (227)$$

Odtud dostáváme, že $\psi(\vec{x}, t_0)$ je vlastní funkcí hamiltoniánu s vlastní hodnotou $E = i\hbar\dot{C}(t)/C(t)$ a výše uvedený tvar funkce $C(t)$.

Na druhé straně, víme-li, že částice v čase t_0 je ve stavu ψ_E

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E, \quad (228)$$

pak v tomto stavu zůstane do té doby, dokud není ovlivněna nějakým vnějším zá-
sahem (například měřením veličiny nekompatibilní s energií), neboť řešením Schrödingerovy rovnice (221) s počáteční podmínkou (228) je

$$\boxed{\psi_E(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)}\psi_E(\vec{x})} . \quad (229)$$

Z právě uvedených důvodů se vlastní stavy operátoru energie nazývají stacionární stavy a rovnice pro vlastní hodnoty (228) se často nazývá *bezčasová Schrödingerova rovnice*.

Za jistých velmi obecných předpokladů (unitarita časového vývoje, viz [5]) lze ukázat i opak, totiž že všechny **stacionární stavy jsou vlastními stavy hamiltoniánu**.

Jednoduchý časový vývoj stacionárních stavů je možno využít i pro popis časového vývoje nestacionárních stavů tj. řešení Schrödingerovy rovnice s počáteční

podmínkou zadanou funkcí, která není vlastní funkcí hamiltoniánu. Stačí k tomu, aby existovala ortonormální báze $\{e_n\}$, jejíž prvky jsou vlastními stavy hamiltoniánu. Pak je možno zapsat počáteční vlnovou funkci způsobem

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n \psi_n e_n(\vec{x}) \quad (230)$$

a odpovídající řešení Schrödingerovy rovnice je

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n \psi_n e_n(\vec{x}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t-t_0)}. \quad (231)$$

Neznamená to však, že stav rozložený podle stacionárních stavů je stacionárním, neboť koeficient u každé komponenty má jinou časovou závislost.

Vyjímečnost stacionárních stavů byl jeden z důvodů, proč jsme v předchozích kapitolách hledali vlastní stavy operátorů energie, pro některé fyzikálně zajímavé případy jako byl harmonický oscilátor, či částice v Coulombově poli.

Cvičení 68 *Nechť Hamiltonián kvantového systému má čistě bodové spektrum. Na systému byla naměřena hodnota a pozorovatelné A , která má čistě bodové spektrum a a je nedegenerovaná vlastní hodnota. Jaká je pravděpodobnost, že naměříme stejnou hodnotu, budeme-li měření opakovat po čase t ?*

Cvičení 69 *Nechť částice hmoty M v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky $2a$ je v čase $t = 0$ popsána vlnovou funkcí, (která je superpozicí stacionárních stavů)*

$$\psi(x, 0) = 0, \text{ pro } |x| > a, \quad \psi(x, 0) = \sin\left[\frac{\pi}{2a}(x-a)\right] + \sin\left[\frac{\pi}{a}(x-a)\right], \text{ pro } |x| < a.$$

Jaká je pravděpodobnost, že částice se v čase $t = 0$ a $t = \frac{8Ma^2}{\pi\hbar}$ bude nacházet v intervalu $(-a, 0)$?

5.3 Integrály pohybu, časová derivace operátoru, Ehrenfestovy teoremy

V klasické mechanice známe zachovávající se veličiny – integrály pohybu, jejichž hodnota se během časového vývoje systému nemění, přestože jsou funkcemi jiných, časově proměnných veličin jako je například poloha či hybnost částice.

I v kvantové mechanice lze definovat integrály pohybu. Jejich definici však nelze převzít z klasické mechaniky, neboť zatím všechny operátory odpovídající fyzikálním veličinám jsou nezávislé na čase.

Zavedeme proto nejdříve užitečný pojem časové derivace operátoru: Nechť $\hat{A}$ je samosdružený operátor. Časovou derivací operátoru $\hat{A}$ nazveme operátor označený $\frac{\hat{d}A}{dt}$, definovaný jako

$$\boxed{\frac{\hat{d}A}{dt} := \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} . \quad (232)$$

Poslední člen na pravé straně je nenulový pouze tehdy závisí-li akce operátoru na čase, s čímž se setkáváme jen zřídka. Důvodem pro tuto definici je, že pro všechna ψ , která leží v nějakém uzavřeném podprostoru hustém v $\mathcal{H}$ platí

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \frac{\hat{d}A}{dt} \rangle_\psi . \quad (233)$$

Provedeme-li totiž (poněkud formálně) časovou derivaci na levé straně (233) dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\psi = (\psi, \psi)^{-1} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, \hat{A} \psi \right) + \left(\psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right) + \left(\psi, \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] . \quad (234)$$

a ze Schrödingerovy rovnice pak plyne vztah (233)

Cvičení 70 Nalezněte operátor rychlosti pro částici v poli konzervativních sil.

Cvičení 71 Ukažte jak závisí na čase střední kvadratická odchylka souřadnice jednorozměrného harmonického oscilátoru.

Integrálem pohybu v kvantové mechanice nazveme operátor $\hat{A}$, pro který $\frac{\hat{d}A}{dt} = 0$. Pro operátory, které nejsou explicitně závislé na čase to znamená, že jsou integrály pohybu pokud komutují s $\hat{H}$.

Speciálním případem vztahů (233) a (232) jsou tzv. Ehrenfestovy teoremy. Zvolíme-li za operátor $\hat{A}$ operátor souřadnice či hybnosti dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q}_j \rangle_\psi = \langle \frac{\hat{P}_j}{M} \rangle_\psi \quad (235)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_j \rangle_\psi = \langle -\widehat{\frac{\partial V}{\partial x_j}} \rangle_\psi . \quad (236)$$

Tyto vztahy připomínají do jisté míry Hamiltonovy rovnice klasické mechaniky. První z nich říká, že časová derivace střední hodnoty souřadnice ve stavu ψ je rovna střední hodnotě "operátoru rychlosti" $\hat{P}_j/M$. Analogie je úplná pokud pravá strana (236) je rovna hodnotě síly v bodě $\langle \hat{Q}_j \rangle_\psi$, neboli pokud

$$\langle -\widehat{\frac{\partial V}{\partial x_j}} \rangle_\psi = -\frac{\partial V}{\partial x_j}(\langle \vec{X} \rangle_\psi).$$

To je splněno pouze pro potenciály, které jsou maximálně kvadratickou funkcí souřadnic. Pro obecnější typy potenciálů je souvislost Ehrenfestových teorémů s pohybovými rovnicemi klasické mechaniky mnohem složitější (viz [4] kap. 1.7., [5] kap. 3.5) a očekávaná shoda s klasickou teorií nastává až pro stavy s dostatečně velkou energií.

6 Částice v elektromagnetickém poli. Spin

Doposud jsme se zabývali kvantově mechanickým popisem částice v poli konzervativních sil, jinými slovy předpokládali jsme, že hamiltonián je tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \hat{V}(\vec{x}).$$

Ne všechny síly však jsou konzervativní. Důležitým případem je Lorentzova síla

$$\vec{F} = \vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t) = e[\vec{E}(\vec{x}, t) + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}, t)], \quad (237)$$

která působí na nabitou částici v elektromagnetickém poli $\{\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)\}$. Tato síla není konzervativní, na druhé straně, z kursu teoretické fyziky (viz např. [2] U2.1), víme, že je ji možno vyjádřit pomocí zobecněného potenciálu

$$U(\vec{x}, \vec{v}, t) = e[\phi(\vec{x}, t) - \vec{v} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)],$$

kde ϕ a $\vec{A}$ jsou elektromagnetické potenciály, tzn.

$$\vec{E} = -\text{grad } \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (238)$$

Pohyb klasické částice v elektromagnetickém poli je možno popsat pohybovými rovnicemi v Hamiltonově formulaci s Hamiltonovou funkcí

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2M}[\vec{p} - e\vec{A}(\vec{x}, t)]^2 + e\phi(\vec{x}, t). \quad (239)$$

Hamiltonián kvantově mechanické částice v elektromagnetickém poli je pak možno odvodit z principu korespondence

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}[-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t)][-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t)] + e\hat{\phi}(\hat{\vec{x}}, t) \quad (240)$$

a snadnými úpravami je možno jej přepsat na tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{i\hbar e}{M}\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \cdot \vec{\nabla} + \frac{i\hbar e}{2M}\text{div } \vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) + \frac{e^2}{2M}\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \cdot \vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) + e\hat{\phi}(\hat{\vec{x}}, t). \quad (241)$$

Poznamenejme zde, že v tomto případě princip korespondence neurčuje hamiltonián jednoznačně, neboť operátory $\hat{P}_j, \hat{A}_j$ vyskytující se v prvním členu pravé strany (240) nekomutují. Znamená to, že hamiltonián (240) odpovídá jistému výběru uspořádání těchto nekomutujících oprátorů. Jiné výběry uspořádání by se lišily faktorem stojícím před členem $\text{div } \hat{A}(\vec{x}, t)$. Pro případ homogenních polí, který budeme v dalším uvažovat tento člen vymizí.

6.1 Částice v homogenním magnetickém poli

Budeme se zabývat případem kvantové částice v homogenním časově nezávislém magnetickém poli $\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}$.

Vektorový potenciál lze v tomto případě zvolit $\vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{x}$ a odpovídající hamiltonián lze zapsat způsobem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \frac{e}{2M}\vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} + \frac{e^2}{8M}(\vec{B} \times \hat{\vec{x}})^2 + e\hat{\phi}(\vec{x}), \quad (242)$$

kde $\hat{\vec{L}}$ je operátor momentu hybnosti.

Pro střední hodnoty souřadnice a momentu hybnosti charakteristické pro atomy a nikoliv extrémně silná magnetická pole je příspěvek od třetího členu zanedbatelný, takže hamiltonián lze psát způsobem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\vec{\mu}}_{orb} \cdot \vec{B}, \quad (243)$$

kde $\hat{H}_0$ je hamiltonián částice bez vlivu magnetického pole (pouze v poli konzervativních sil, což je problém který jsme studovali doposud) a

$$\hat{\vec{\mu}}_{orb} = \frac{e}{2M}\hat{\vec{L}} \quad (244)$$

je *operátor magnetického momentu částice* související s jejím orbitálním pohybem.

Je-li potenciál $V(\vec{x}) = e\phi(\vec{x})$ v $\hat{H}_0$ sféricky symetrický, což je například potenciál coulombického pole jádra atomu, pak lze nalézt vlastní funkce $\psi_{E,l,m}$ hamiltoniánu $\hat{H}_0$, které jsou současně vlastními funkcemi momentu hybnosti (viz 3.4).

$$\hat{H}_0\psi_{E,l,m} = E\psi_{E,l,m} \quad (245)$$

$$\hat{L}^2\psi_{E,l,m} = l(l+1)\hbar^2\psi_{E,l,m} \quad (246)$$

$$\hat{L}_z\psi_{E,l,m} = m\hbar\psi_{E,l,m} \quad (247)$$

Odtud plyne, že v tomto případě lze okamžitě určit vlastní energie i vlastní funkce částice v magnetickém poli. Sférická symetrie systému bez magnetického pole

totiž umožňuje zvolit osu z ve směru magnetického pole, a pokud platí (245, 247), pak rovněž platí

$$\hat{H}\psi_{E,l,m} = (E - \mu_0 m |\vec{B}|)\psi_{E,l,m}, \quad (248)$$

kde $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2M}$ je tzv. *Bohrův magneton*. Jeho hodnota pro elektron je $0,9274 \cdot 10^{-23} \text{ JT}^{-1}$.

Znamená to, že **hladiny energie částice**, které díky sférické symetrii původně nezávisely na m , a spektrum tedy bylo degenerované, **se podle takto navržené teorie vlivem homogenního magnetického pole rozštěpí na $2l + 1$ různých hladin vzdálených o $\mu_0 |\vec{B}|$** . Říkáme, že magnetické pole sejme degeneraci energie. Střed vzniklého multipletu hladin zůstane na místě a vzdálenosti hladin jsou úměrné intenzitě magnetického pole (pro jisté rozmezí jejích hodnot, mimo něj je třeba započítat další efekty).

Efekt rozštěpení hladin magnetickým polem byl experimentálně pozorován, jedná se o tzv. *Zeemanův jev*, avšak **počet hladin v multipletu neodpovídá předpovězenému číslu $2l + 1$** . Překvapivé je, že například dochází k rozštěpení hladiny energie základního stavu atomů, který by podle dosavadní teorie měl být nedegenerovaný, neboť v tomto stavu $l = 0$.

6.2 Vlastní magnetický moment a spin částice

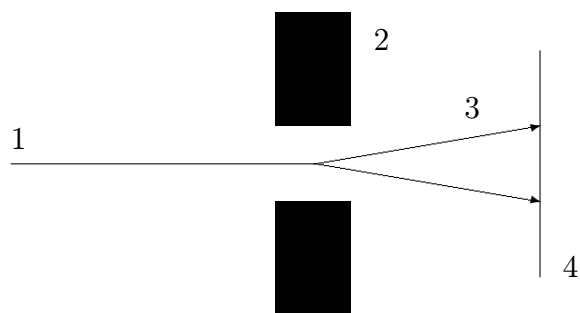
Uvedený rozpor teorie a experimentu řeší hypotéza (Landé, Stoner, Pauli 1923–25), podle které **elektron má** vedle magnetického momentu (244) souvisejícího s orbitálním pohybem ještě **vlastní magnetický moment $\vec{\mu}$, jehož projekce nabývají právě dvou hodnot $\pm |\mu|$** .

Tato hypotéza se opírá i o výsledky *Stern – Gerlachova pokusu*, při kterém prochází svazek atomů v základním stavu nehomogenním magnetickým polem kolmo na směr nehomogenity. Síla, která na atomy v tomto poli působí (viz např. [7] kap. 4.3) je

$$\vec{F}(\vec{x}) = \text{grad}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{x})),$$

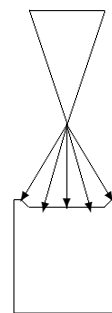
takže částice jsou urychlovány ve směru gradientu projekce magnetického momentu částice na směr magnetického pole. Svazek atomů v základním stavu se průchodem nehomogenním magnetickým polem rozdělí na dva, což je plně v souladu s představou vlastního magnetického momentu elektronu. Z úhlu, pod kterým tyto dva rozdělené svazky vylétají je možno určit i velikost vlastního magnetického momentu. Ukázalo se, že je ve velmi dobré shodě s velikostí Bohrova magnetonu, $|\mu| = \mu_0$.

Možnost rozštěpení hladiny energie základního stavu atomu vodíku na dvě svědčí o tom, že **základní stav je degenerovaný a jeho popis vlnovou funkcí $\psi_{E,0,0}$ není úplný** a je mu nutno přiřadit lineární kombinaci dvou lineárně nezávislých funkcí, jež jsou vlastními funkcemi energie s nejnižší vlastní hodnotou.



A) Schéma experimentu

1 Svazek atomů 3 Rozštěpené svazky částic
2 Póly magnetu 4 Stínítko



B) Bokyrs průběhu
siločar magnetického pole

Obrázek 4: Stern – Gerlachův pokus

Z předchozího však víme, že taková funkce je až na multiplikativní konstantu jen jedna. Východiskem z této situace je použití vlnových funkcí které mají dvě složky.

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (249)$$

Alternativní, avšak ekvivalentní přístup je použití vlnových funkcí, které vedle $\vec{x}$ závisí ještě na další proměnné ξ , která nabývá pouze dvou hodnot $\pm$, tj.

$$\psi = \psi(\vec{x}, \xi), \quad \psi(\vec{x}, +) \equiv \psi_1(\vec{x}), \quad \psi(\vec{x}, -) \equiv \psi_2(\vec{x}).$$

Přechod k vlnovým funkcím (249) znamená přechod od Hilbertova prostoru $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ k prostoru $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3) \otimes \mathbf{C}^2$. Skalární součin v tomto prostoru je

$$(\psi, \phi) = \sum_{k=1}^2 \int_{\mathbf{R}^3} \psi_k^*(\vec{x}) \phi_k(\vec{x}) d^3x = \sum_{\xi=\pm} \int_{\mathbf{R}^3} \psi^*(\vec{x}, \xi) \phi(\vec{x}, \xi) d^3x \quad (250)$$

a operátory jsou obecně zadány maticí operátorů $\hat{A} = \{\hat{A}_{ij}\}_{i,j=1}^2$. Neboť jsme se doposud zabývali jevy, ve kterých magnetický moment nehrál roli, mohli jsme používat operátory, které jsou násobkem jednotkové matice, např. hamiltonián je dán maticí $\hat{H}_{ij} = \hat{H} \delta_{ij}$, jinak vyjádřeno $\hat{H} = \hat{H} \otimes \mathbf{1}_{\mathbf{C}^2}$.

Projekci vlastního magnetického momentu do osy z (směru magnetického pole) naopak přiřadíme operátor $\hat{\mu}_z$, který působí netriviálně pouze v prostoru $\mathbf{C}^2$, zatímco v prostoru $L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$ působí pouze jako násobení konstantou.

$$\hat{\mu}_z := \begin{pmatrix} \mu_0 & 0 \\ 0 & -\mu_0 \end{pmatrix} \quad (251)$$

Souvislost orbitálního magnetického momentu s momentem hybnosti (244) přivedla G.E. Uhlenbecka a S. Goudsmita k hypotéze (1925), že podobně jako orbitální, i **vlastní magnetický moment částice je důsledkem nenulového vlastního momentu hybnosti – spinu**. Tato veličina *nemá analogii* v žádném druhu pohybu klasických hmotných těles. **Operátor spinu má stejně jako orbitální magnetický moment tři složky $\hat{S}_j$, které netriviálně působí pouze v $\mathbf{C}^2$ a vzájemně komutují stejným způsobem jako složky momentu hybnosti**

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l. \quad (252)$$

Snadno lze ukázat, že trojice matic $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j$, kde σ_j , $j = 1, 2, 3$ jsou tzv. *Pauliho matice*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (253)$$

splňuje relace (252).

Vztah mezi spinem a vlastním magnetickým momentem elektronu je

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{2\mu_0}{\hbar} \hat{\vec{S}}, \quad (254)$$

což je v souhlasu s (251). Faktor 2 je v rámci této teorie nutné brát jako fenomenologickou konstantu. Její vysvětlení je možno podat až v rámci relativistické kvantové mechaniky.

Cvičení 72 Ukažte, že vlastní čísla operátoru $\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$ jsou $\pm\mu_0|\vec{B}|$. Najděte vlastní funkce.

Cvičení 73 Napište vlnovou funkci $\psi(\vec{x}, \xi)$ základního stavu částice v poli Coulombova potenciálu s hodnotou z -ové, resp. x -ové, resp. y -ové složky spinu rovné $\hbar/2$.

Cvičení 74 Nechť pro volnou částici se spinem je naměřena hodnota z -ové složky spinu $s_z = \hbar/2$. Jestliže vzápětí měříme hodnotu spinu ve směru, který se z -ovou osou svírá úhel Θ , jaké můžeme naměřit hodnoty a s jakou pravděpodobností?

Vedle relace

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l, \quad (255)$$

ze které plyne (252), mají Pauliho matice ještě další vlastnosti užitečné při různých výpočtech. Uvedme nejdůležitější z nich

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger, \quad \text{Tr } \sigma_j = 0, \quad (256)$$

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}\mathbf{1}. \quad (257)$$

Mimo to spolu s jednotkovou maticí tvoří $\{\sigma_j, j = 1, 2, 3\}$ (hermitovskou) bazi v prostoru komplexních matic 2×2 . Násobení Pauliho matic

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i\epsilon_{jkl}\sigma_l \quad (258)$$

plyne okamžitě z (255, 257).

Cvičení 75 Ukažte, že $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{1}$. Porovnejte tento výsledek s (246).

Cvičení 76 Uvažujte systém (tzv. supersymetrický harmonický oscilátor) popsany na Hilbertovu prostoru $L^2(\mathcal{R}, dx) \otimes \mathcal{C}^2$ hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \otimes \mathbf{1} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \otimes \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\mathbf{1} \otimes \sigma_3.$$

Dále je dán operátor

$$\hat{Q} = \frac{1}{2\sqrt{m}}\sigma_1(\hat{P} + i\omega m\sigma_3\hat{X}).$$

Nalezněte $\hat{Q}^+$, $\hat{Q}^2$, $[\hat{H}, \hat{Q}]$ a výsledky vyjádřete pomocí operátorů $\hat{H}$, $\hat{Q}$. Jaké omezení lze vyvodit z těchto relací na spektrum hamiltoniánu (tj. zda je shora či zdola omezené a čím)? (Postačí uvažovat bodovou část spektra.)

6.3 Pauliho rovnice. Normální Zeemanův jev

Z výsledku Stern – Gerlachova pokusu a rozštěpení energetických hladin atomů v magnetickém poli jsme došli k hypotéze, že stavy částic v atomu jsou charakterizovány též hodnotou čistě kvantové veličiny nazývané spin. Síly, které působí na atomové částice v magnetickém poli jsou na spinu závislé a musí být proto zahrnuty do hamiltoniánu. W. Pauli navrhl rozšíření hamiltoniánu pro částici v elektromagnetickém poli na tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}[\hat{\vec{P}} - e\hat{\vec{A}}]^2 + e\hat{\phi} - \mu_0\hat{\vec{B}} \cdot \hat{\vec{\sigma}}. \quad (259)$$

Rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi,$$

kde $\hat{H}$ je tvaru (259) a ψ je dvoukomponentová funkce se nazývá *Pauliho rovnice*. Odpovídající rovnice $\hat{H}\psi = E\psi$ se pak nazývá bezčasová Pauliho rovnice.

Pro homogenní, časově nezávislé magnetické pole $\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}$ je možno řešení Pauliho rovnice převést na řešení Schrödingerovy rovnice, neboť přímým výpočtem lze ukázat, že pokud ϕ_j , $j = 1, 2$ jsou řešení Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{H}_1\phi,$$

kde $\hat{H}_1$ je spinově nezávislá část (259), pak řešení Pauliho rovnice lze zapsat způsobem

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}, t) \\ \psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}t\right] \begin{pmatrix} \phi_1(\vec{x}, t) \\ \phi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (260)$$

kde

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}t\right] = \cos\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right) + i\frac{\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{B}|} \sin\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right). \quad (261)$$

Cvičení 77 Částice se spinem $\hbar/2$ je umístěna v konstantním magnetickém poli směřujícím ve směru osy x . V čase $t = 0$ byla naměřena hodnota její z -ové složky spinu $+\hbar/2$. S jakou pravděpodobností nalezneme v libovolném dalším čase hodnotu její y -ové složky spinu $+\hbar/2$?

Cvičení 78 Ukažte, že pokud výraz $\exp[i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}]$ definujeme pomocí řady

$$\exp[i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}] := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^n}{n!}, \quad (262)$$

pak platí

$$\exp[i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}] = \cos(|\vec{a}|) + i\frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{a}|} \sin(|\vec{a}|). \quad (263)$$

Rozštěpení energetických hladin v důsledku existence vlastního magnetického momentu je pak možno popsat Pauliho hamiltoniánem

$$\hat{H}_P = \hat{H}_0 - \frac{\mu_0}{\hbar} \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} - \frac{2\mu_0}{\hbar} \vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}, \quad (264)$$

kde $\hat{H}_0$ (což je např. hamiltonián částice v coulombickém poli) popisuje částici bez magnetického pole. Řešením bezčasové Pauliho rovnice $\hat{H}_P \psi = E \psi$ lze dostat **energetické spektrum, které odpovídá rozštěpení hladin magnetickým polem pozorované v normálním Zeemanově jevu**. Toto řešení lze obdržet ze znalosti řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice.

Pro sféricky symetrický hamiltonián $\hat{H}_0$, lze bez újmy na obecnosti zvolit osu z ve směru magnetického pole. Je snadné se přesvědčit, že pokud částice má v nepřítomnosti magnetického pole energii $E_0 = E_{nl}$ (tzn. E_{nl} je vlastní hodnotou hamiltoniánu $\hat{H}_0$) a funkce $\psi_{n,l,m}$ jsou vlastní funkce $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z$, pak funkce

$$\psi_{n,l,m,+}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{n,l,m}(\vec{x}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{n,l,m,-}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{n,l,m}(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (265)$$

jsou vlastními funkcemi Pauliho hamiltoniánu odpovídajícími vlastním hodnotám $E_{n,l,m,\pm} = E_{nl} - \mu_0 B_z (m \pm 1)$. Počet hladin multipletu je $2l + 3$ pro $l = 1, 2, \dots$. Pro $l = 0$ dostáváme dvě hladiny energie, což je ve shodě i se Stern–Gerlachovým pokusem.

Poznamenejme ještě, že vedle normálního Zeemanova jevu existuje ještě tzv. anomální Zeemanův jev. Jeho popis a vysvětlení dané tzv. spin-orbitální vazbou zde provádět nebudeme (viz např [5] kap 7.5).

Na závěr této kapitoly je třeba ještě učinit důležitou poznámku: Existence nenulového spinu není univerzální vlastnost všech kvantových částic. V uvedených jevech, které nás přiměly zavést spin, mají rozhodující vliv valenční elektrony atomů. Znamená to tedy, že elektronům je třeba přiřadit spin (velikosti $1/2$). Na druhé straně existují částice, které spin nemají. Jsou to například mesony π důležité pro popis jaderných sil. Ty pak interagují s magnetickým polem pouze prostřednictvím svého orbitálního momentu hybnosti.

6.4 Algebraická teorie momentu hybnosti

Jak už jsme poznamenali v podkapitole 6.2, vlastní i orbitální moment hybnosti mají stejné komutační relace

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_m] = i\hbar \varepsilon_{kmn} \hat{J}_n. \quad (266)$$

Tyto relace lze zároveň považovat za definici násobení prvků baze v Lieovské algebře $su(2)$, která úzce souvisí s grupou otočení $S(3)$. V dalším odvodíme vlastnosti společných vlastních funkcí operátorů $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2 := \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$ a jejich vlastních hodnot **bez znalosti jejich konkrétních tvarů**, pouze využitím algebraických relací

(266). Jediné co budeme navíc předpokládat je samosdruženost. Z hlediska zmíněné Lieovské algebry, to znamená konstrukci jejích konečně rozměrných reprezentací.

Podstatným způsobem budeme při tom využívat tzv. posunovacích operátorů

$$\hat{J}_\pm := \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2, \quad [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm \quad (267)$$

s jejichž obdobou jsme se seznámili v podkapitole 3.5. Snadno pro ně odvodíme, že

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar\hat{J}_3 = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3 \quad (268)$$

Nechť $|\lambda, \mu\rangle$ je společná vlastní funkce operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ s vlastními hodnotami λ, μ

$$\hat{J}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad \hat{J}_3|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle. \quad (269)$$

Ze samosdruženosti operátorů $\hat{J}_1, \hat{J}_2$ plyne, že pro libovolný prvek Hilbertova prostoru ϕ platí

$$(\phi, (\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2)\phi) = \|\hat{J}_1\phi\|^2 + \|\hat{J}_2\phi\|^2 \geq 0,$$

takže

$$\langle \lambda, \mu | \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 | \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu | \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 | \lambda, \mu \rangle = (\lambda - \mu^2) \|\lambda, \mu\rangle^2$$

je rovněž nezáporné, z čehož plyne

$$\lambda \geq \mu^2. \quad (270)$$

Na druhé straně díky (267)

$$\hat{J}_+|\lambda, \mu\rangle = \alpha^{(+)}|\lambda, \mu + \hbar\rangle,$$

takže musí existovat maximální vlastní hodnota μ_{max} taková, že $\hat{J}_+|\lambda, \mu_{max}\rangle = 0$. V opačném případě by totiž byla porušena nerovnost (270). Aplikujeme-li operátor $\hat{J}_-\hat{J}_+$ na $|\lambda, \mu\rangle$ a použijeme (268) a (269), dostaneme

$$0 = \hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda, \mu_{max}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3)|\lambda, \mu_{max}\rangle = (\lambda - \mu_{max}^2 - \hbar\mu_{max})|\lambda, \mu_{max}\rangle,$$

odkud plyne

$$\lambda = \mu_{max}^2 + \hbar\mu_{max}. \quad (271)$$

Stejnými úvahami, kde zaměníme $\hat{J}_+$ a $\hat{J}_-$, zjistíme, že musí existovat minimální vlastní hodnota μ_{min} , pro kterou platí

$$\lambda = \mu_{min}^2 - \hbar\mu_{min}. \quad (272)$$

Porovnáním (271) a (272) dostaneme $\mu_{min} = -\mu_{max}$. Mimo to je zřejmé, že opakovaným působením operátoru $\hat{J}_+$ na $|\lambda, \mu_{min}\rangle$ dostaneme vektor úměrný $|\lambda, \mu_{max}\rangle$, takže existuje celé nezáporné k , tak že

$$\mu_{min} + k\hbar = \mu_{max} = -\mu_{min}.$$

Odtud

$$\begin{aligned} \mu_{max} = -\mu_{min} &= j\hbar, \quad j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}, \\ \lambda &= j(j+1)\hbar^2, \quad \mu \in \{-j, -j+1, -j+2, \dots, j\}. \end{aligned} \quad (273)$$

Je tedy vidět, že pokud jsme nepředpokládali operátory $\hat{J}_k$ ve tvaru operátorů momentu hybnosti, nýbrž vzali v úvahu pouze jejich komutační relace, zjistili jsme, že spektrum vlastních hodnot operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$, může nabývat hodnot (273) s j nejen celým jako v případě momentu hybnosti, nýbrž i polocelým, což je případ spinu. Z tohoto výsledku lze též usoudit, že mohou existovat částice nejen se spinem $\frac{1}{2}$ jako např. elektron, proton, neutron a další, ale také s vyššími (polo)celými spiny, což bylo experimentálně potvrzeno.

Cvičení 79 *S použitím výsledků cvičení 53 najděte $(2j+1) \times (2j+1)$ matice J_k splňující relace (266) (tyto matice určují reprezentace algebry $su(2)$). Ověřte, že pro $j = \frac{1}{2}$ jsou shodné se složkami spinu.*

7 Systémy více částic

Zatím jsme se věnovali kvantové mechanice jedné částice v poli vnějších sil. Není třeba zdůrazňovat, že pro popis reálných fyzikálních systémů je třeba rozšířit kvantově mechanický popis na systémy více částic, neboť i velmi jednoduchý reálný systém – atom vodíku, jehož elektronový obal jsme zatím modelovali jednou kvantovou částicí v coulombickém poli, se skládá ze dvou částic, protonu a elektronu. V této kapitole se proto budeme věnovat kvantové mechanice více částic bez vazeb.

Při budování kvantové mechaniky více částic je třeba, na rozdíl od mechaniky klasické, velmi důsledně rozlišovat, jestli jde o systém částic stejného typu či nikoliv. Pod částicemi stejného typu rozumíme částice, které se od sebe vzájemně neliší žádným ze svých vnitřních parametrů jako jsou hmota, náboj, magnetický moment atd., tedy parametrů, které jsou nezávislé na pohybovém stavu. Dvě částice, které mají všechny tyto parametry stejné považujeme za *nerozlišitelné*, zatímco v opačném případě je nazýváme *rozlišitelné*.

V klasické mechanice tento pojem není podstatný, neboť každá částice se pohybuje po dané křivce určené pohybovými rovnicemi a pokud si částice na začátku experimentu označíme např. jako "první", "druhá" atd., je možné v každém čase rozhodnout, o kterou částici se jedná a všechny částice lze tedy považovat za rozlišitelné.

Při popisu jevů na atomární a nižší úrovni, nejsme schopni sledovat ani teoreticky předpovědět dráhy jednotlivých částic a označení "první" či "druhá" pro nerozlišitelné částice ztrácí smysl, neboť při přechodu z jednoho stavu dvou či více nerozlišitelných částic do jiného (ať už časovým vývojem nebo měřením) není možno rozhodnout, které z nich je třeba přiřadit hodnoty pozorovatelných týkajících se jednotlivých částic.

7.1 Systémy rozlišitelných částic

Úkolem kvantové mechaniky systémů více částic je předpovědět pravděpodobnosti různých měření provedených na těchto systémech. Máme-li systém dvou bezspinových rozlišitelných částic, a víme-li, že pravděpodobnost nalézt první částici v oblasti O_1 je w_1 a pravděpodobnost nalézt druhou částici v oblasti O_2 je w_2 , pak (za předpokladu, že tyto pravděpodobnosti jsou nezávislé) pravděpodobnost nalézt první částici v oblasti O_1 a současně nalézt druhou částici v oblasti O_2 je $w_1 w_2$. Vzhledem k tomu, že podle Bornova postulátu je pravděpodobnost dána amplitudou vlnové funkce, je celkem přirozené přiřadit systému dvou částic, z nichž jedna je ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_1 a druhá ve stavu ψ_2 , vlnovou fci $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2)$.

To ovšem zdaleka neznamena, že všechny stavy systému dvou částic jsou popsány vlnovými funkcemi, jež lze zapsat jako součin funkcí proměnných $\vec{x}_1$, respektive $\vec{x}_2$. Pokud by tomu tak bylo, pak by libovolná pravděpodobnost týkající se první částice byla nezávislá na stavu druhé částice a mohli bychom popisovat pouze systémy nijak se neovlivňujících – neinteragujících částic. Taková teorie však nemá žádný smysl, přesněji je ekvivalentní jednočásticové teorii pro každou ze složek systému.

Obecně přiřadíme stavu systému N rozlišitelných bezspinových částic kvadraticky integrabilní vlnovou funkci

$$\psi : \mathbf{R}^{3N} \rightarrow \mathbf{C}, \quad \psi \in L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x)$$

a pozorovatelným samosdruženým operátory na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x)$. Platí (viz [1], 4.6.6), že

$$L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x) = L_2(\mathbf{R}^3, d^3x) \otimes L_2(\mathbf{R}^3, d^3x) \otimes \dots \otimes L_2(\mathbf{R}^3, d^3x)$$

$$\Leftrightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N,$$

kde $\mathcal{H}_j$ je Hilbertův prostor stavů j -té částice. Zároveň platí, že pokud $\{e_{n_j}^{(j)}, n_j \in \mathbf{Z}_+\}$ je ortonormální báze v $\mathcal{H}_j$, pak $\{e_{n_1}^{(1)} \otimes e_{n_2}^{(2)} \otimes \dots \otimes e_{n_N}^{(N)}, (n_1, n_2, \dots, n_N) \in \mathbf{Z}_+^N\}$, kde

$$e_{n_1}^{(1)} \otimes e_{n_2}^{(2)} \otimes \dots \otimes e_{n_N}^{(N)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) := e_{n_1}^{(1)}(\vec{x}_1)e_{n_2}^{(2)}(\vec{x}_2) \dots e_{n_N}^{(N)}(\vec{x}_N)$$

je rovněž ortonormální bazí v $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$.

Operátory, které působí netriviálním způsobem pouze v $\mathcal{H}_j$, tzn. $\hat{A}_j = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \otimes \hat{A} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}$ se nazývají *jednočásticové*. Typickým příkladem je například operátor kinetické energie první částice $\hat{T}_1 := -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_1$. Podobným způsobem lze definovat vícečásticové operátory.

Pro částice se spinem $\frac{1}{2}$, jejichž vlnové funkce mají dvě komponenty nebo alternativně závisí na dodatečné proměnné $\xi \in \{+, -\}$, je třeba výše uvedený formalismus modifikovat. Vlnové funkce systému N částic se spinem $\frac{1}{2}$ mají 2^N složek nebo alternativně závisí vedle $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N$ též na $\xi_1, \dots, \xi_N$, přičemž $\xi_j \in \{+, -\}$. Hilbertův stavový prostor je pak tensorovým součinem jednočásticových prostorů $L_2(\mathbf{R}^3, d^3x) \otimes \mathbf{C}^2$.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N = L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x) \otimes \mathbf{C}^{2^N}.$$

Skalární součin v tomto prostoru je definován způsobem

$$(\psi, \phi) = \sum_{\xi_1=\pm} \dots \sum_{\xi_N=\pm} \int_{\mathbf{R}^{3N}} \psi^*(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) \phi^*(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) d^{3N}x. \quad (274)$$

Cvičení 80 *Nechť hamiltonián dvou částic se spinem $\frac{1}{2}$ interagujících pouze prostřednictvím spinu má tvar*

$$\hat{H} = -\hbar\nu (\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \sigma_2 \otimes \sigma_2 + \sigma_3 \otimes \sigma_3)$$

Určete dimenzi Hilbertova prostoru, vlastní čísla a vlastní vektory $\hat{H}$ a degeneraci energetických hladin.

7.1.1 Problém dvou těles v kvantové mechanice

Problém dvou těles je v kvantové, stejně jako klasické, mechanice snadno řešitelný, pokud síly jsou dány potenciálem závislejícím pouze na rozdílu poloh jednotlivých částic $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$. Abychom mohli provést dynamický popis systému dvou kvantových částic, popíšeme napřed klasický systém hamiltonovským formalismem.

Zavedením nových proměnných

$$\vec{X} := \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{x} := \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad (275)$$

dostaneme Lagrangeovu funkci pro dvě částice ve tvaru

$$L(\vec{X}, \vec{x}, \dot{\vec{X}}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\vec{X}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}). \quad (276)$$

Kanonicky sdružené hybnosti jsou

$$\vec{P} := \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = (m_1 + m_2)\dot{\vec{X}} = m_1\dot{\vec{x}}_1 + m_2\dot{\vec{x}}_2 \quad (277)$$

$$\vec{p} := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{x}} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (278)$$

a Hamiltonova funkce má tvar součtu dvou Hamiltonových funkcí

$$H(\vec{X}, \vec{x}, \vec{P}, \vec{p}) = \frac{\vec{P}^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \vec{p}^2 + V(\vec{x}) = H_t(\vec{P}) + H_{rel}(\vec{x}, \vec{p}). \quad (279)$$

Hamiltonovy pohybové rovnice pro $\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \vec{p}_1(t), \vec{p}_2(t)$ pak přejdou na separované rovnice pro pohyb těžiště $\vec{X}(t), \vec{P}(t)$ a relativní pohyb částic daný $\vec{x}(t), \vec{p}(t)$.

Transformace souřadnic (275) vede i na zjednodušení kvantově mechanického popisu dvou částic. Zapišeme-li vlnovou funkci systému jako funkci nových souřadnic

$$\Psi(\vec{X}, \vec{x}) := \psi(\vec{x}_1(\vec{X}, \vec{x}), \vec{x}_2(\vec{X}, \vec{x})), \quad (280)$$

pak transformace (275) vede na transformaci parciálních derivací

$$\frac{\partial}{\partial X_j} = \frac{\partial}{\partial x_{1,j}} + \frac{\partial}{\partial x_{2,j}}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (281)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{1}{m_1 + m_2} (m_2 \frac{\partial}{\partial x_{1,j}} - m_1 \frac{\partial}{\partial x_{2,j}}), \quad j = 1, 2, 3, \quad (282)$$

která odpovídá transformaci operátorů hybnosti analogické (277, 278).

Hamiltonián systému dvou interagujících částic

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + \hat{V}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad (283)$$

transformací (275) přejde na tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_X - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_x + \hat{V}(\vec{x}), \quad (284)$$

který je ekvivalentní hamiltoniánu dvou neinteragujících částic. Jedna z nich je volná kvantová částice s hmotou $m_1 + m_2$ (těžiště) a druhá je částicí s hmotou $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ v poli potenciálu V .

Právě uvedená fakta ospravedlňují interpretaci hladin částice v coulombickém poli jako hladin vodíkového atomu, pokud do výrazu pro Rydbergovu energii dosadíme hmotu $M = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e (1 - \frac{m_e}{m_p})$, kde m_e, m_p jsou hmoty elektronu a protonu. Pokud se zajímáme o spektrum hladin deuteria, je třeba místo m_p použít hmotu deuteronu, která se přibližně rovná $2m_p$.

7.2 Skládání momentů hybnosti

V klasické mechanice je moment hybnosti složených systémů dán prostým sčítání vektorů, t.j. vektorovým součtem momentů hybnosti jednotlivých složek. Pro kvantově mechanické stavy tomu tak být nemůže, neboť víme, že projekce momentu hybnosti do libovolného směru může nabývat pouze celočíselných násobků $\hbar$. Je proto užitečné zjistit jaké stavy složeného systému odpovídají těmto celočíselným hodnotám. Složitost problému skládání momentů hybnosti narůstá s počtem složek a proto se v dalším omezíme na systém dvou částic, kde každá z nich je ve vlastním stavu momentu hybnosti, t.j. společném vlastním stavu $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$.

Nechť tedy máme systém složený ze dvou rozlišitelných částic pro které byly naměřeny hodnoty momentů hybnosti $l_1(l_1+1)\hbar^2, m_1\hbar$ a $l_2(l_2+1)\hbar^2, m_2\hbar$. Znamená to tedy, že první z částic mohu přiřadit funkci $\psi_{a_1, l_1, m_1} \equiv |a_1, l_1, m_1\rangle$ a druhé $\psi_{a_2, l_2, m_2} \equiv |a_2, l_2, m_2\rangle$, kde hodnoty a_1, a_2 představují hodnoty ostatních pozorovatelných kompatibilních s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$, např. celkové energie. Stav celého systému pak můžeme popsat vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = (\psi_{a_1, l_1, m_1} \otimes \psi_{a_2, l_2, m_2})(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{a_1, l_1, m_1}(\vec{x}_1) \psi_{a_2, l_2, m_2}(\vec{x}_2).$$

Zanedbáme-li závislost stavů na vlastních číslech a_1, a_2 můžeme této funkci přiřadit ket $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$ pro který platí

$$(\hat{L}^{(1)})^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = l_1(l_1+1)\hbar^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (285)$$

$$(\hat{L}^{(2)})^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = l_2(l_2+1)\hbar^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (286)$$

$$\hat{L}_z^{(1)} |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = m_1\hbar |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (287)$$

$$\hat{L}_z^{(2)} |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = m_2\hbar |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle. \quad (288)$$

Pro dané l_1, l_2 (a a_1, a_2) tvoří tyto stavy podprostor dimenze $(2l_1+1)(2l_2+1)$. Otázka je, jaké lze naměřit **hodnoty momentu hybnosti celého systému** a s jakou pravděpodobností?

Složkám celkového momentu hybnosti podle principu korespondence přiřadíme operátory $\hat{J}_k = \hat{L}_k^{(1)} + \hat{L}_k^{(2)}$, kde $\hat{L}_k^{(1)}$ působí pouze na funkce v proměnné $\vec{x}_1$ a $\hat{L}_k^{(2)}$ působí pouze na funkce v proměnné $\vec{x}_2$. Znamená to tedy, že operátory $\hat{L}_k^{(1)}$ a $\hat{L}_j^{(2)}$ komutují. Odtud je pak snadné ukázat, že

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{J}_m. \quad (289)$$

Z podkapitoly 6.4 pak plyne, že vlastní hodnoty operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$ mohou mít vlastní hodnoty pouze $j(j+1)\hbar^2$ a $m\hbar$, kde j a m jsou (polo)celá čísla, $|m| \leq j$. Zároveň lze snadno ukázat že

$$[\hat{J}_k, (\hat{L}^{(1)})^2] = 0, \quad [\hat{J}_k, (\hat{L}^{(2)})^2] = 0, \quad (290)$$

takže operátory $(\hat{L}^{(1)})^2$, $(\hat{L}^{(2)})^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ vzájemně komutují a mohou (spolu s dalšími operátory) být součástí úplné množiny pozorovatelných systému dvou částic. Označme tedy $|l_1, l_2, j, m\rangle$ ket, který je vlastním stavem těchto pozorovatelných. Znamená to, že splňuje rovnice

$$(\hat{L}^{(1)})^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = l_1(l_1 + 1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (291)$$

$$(\hat{L}^{(2)})^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = l_2(l_2 + 1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (292)$$

$$\hat{J}^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (293)$$

$$\hat{J}_z |l_1, l_2, j, m\rangle = m\hbar |l_1, l_2, j, m\rangle. \quad (294)$$

Naším úkolem nyní je tyto stavy nalézt, přesněji, sestavit je ze stavů $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$ popisujících momenty hybnosti jednotlivých částic.

V prvním kroku se přesvědčíme, že stav $|l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$ splňuje rovnice (291)–(294) pro $j = m = l_1 + l_2$. Rovnice (291), (292) se shodují s (285), (286) a rovnice (294) je jednoduchým důsledkem (285), (286). K odvození (293) se hodí formule

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = (\hat{L}^{(1)})^2 + (\hat{L}^{(2)})^2 + 2\hat{L}_3^{(1)}\hat{L}_3^{(2)} + \hat{L}_+^{(1)}\hat{L}_-^{(2)} + \hat{L}_-^{(1)}\hat{L}_+^{(2)}, \quad (295)$$

kterou lze snadno odvodit z definice posunovacích operátorů $L_\pm$. Znamená to tedy, že $|l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle = |l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle$

Ze stavu $|l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle$ nyní můžeme snadno vytvořit $2(l_1 + l_2) + 1$ stavů $|l_1, l_2, l_1 + l_2, m\rangle$ kde $m = -l_1 - l_2, \dots, l_1 + l_2$ působením posunovacích operátorů $J_\pm = J_1 \pm iJ_2 = \hat{L}_\pm^{(1)} + \hat{L}_\pm^{(2)}$. (Tyto stavy tvoří tzv. ireducibilní reprezentaci algebry $su(2)$.)

V dalších krocích (pro $l_1, l_2 \neq 0$) je možno vytvořit stavy $|l_1, l_2, j, m\rangle$ s $j < l_1 + l_2$. Je zřejmé, že ze stavů $|l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle$ a $|l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$ je možné vytvořit dva jiné lineárně nezávislé vektory. Jeden z nich je

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} J_- |l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} (\hat{L}_-^{(1)} + \hat{L}_-^{(2)}) |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} (\alpha_{l_1, l_1}^{(-)} |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle + \alpha_{l_2, l_2}^{(-)} |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle). \end{aligned} \quad (296)$$

O druhém, který je k němu ortogonální, totiž

$$\frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} (\alpha_{l_2, l_2}^{(-)} |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle - \alpha_{l_1, l_1}^{(-)} |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle),$$

lze ukázat že splňuje (291)–(294) pro $j = m = l_1 + l_2 - 1$, takže se jedná o stav, který označujeme $|l_1, l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$. Postupnou aplikací operátoru J_- na tento stav dostaneme $2(l_1 + l_2 - 1) - 1$ stavů s $j = l_1 + l_2 - 1$, $|m| \leq j$.

Stejným postupem dostaneme stavy s $j = l_1 + l_2 - 2, j = l_1 + l_2 - 3, \dots, j_{min}$. Zbývá zjistit kolik je j_{min} . Rozměr podprostoru stavů s daným j je $2j + 1$ a rozměr podprostoru s daným l_1, l_2 , z jehož stavů jsou vektory $|l_1, l_2, j, m\rangle$ tvořeny, je $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Musí tedy platit

$$(2l_1 + 1)(2l_2 + 1) = \sum_{j_{min}}^{l_1+l_2} (2j + 1) = (l_1 + l_2 + 1)^2 - j_{min}^2, \quad (297)$$

z čehož plyne $j_{min} = |l_1 - l_2|$.

Vzhledem k tomu, že stavy $|l_1, l_2, j, m\rangle$ splňují rovnice (291)–(294) pro různá vlastní čísla, musí být vzájemně ortogonální stejně jako stavy $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$. Dostáváme tedy dvě ortonormální baze v podprostoru dimenze $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Elementy matice přechodu mezi těmito dvěma přechody udávající mimo jiné pravděpodobnost nalezení stavu systému s daným j a m se nazývají Clebsch–Gordanovy koeficienty. Způsob jejich výpočtu je možno nalézt např. v [1].

Závěrem této podkapitoly je vhodné říci, že předvedená metoda neslouží jen pro konstrukci stavů systému složeného ze dvou kvant s daným momentem hybnosti. Při odvození jsme totiž použili pouze komutační relace momentů hybnosti. Ty jsou však shodné s komutačními relacemi spinu. Můžeme tedy skládat nejen stavy dvou různých částic, ale také orbitální moment hybnosti l_1 a spin $l_2 = \frac{1}{2}$ a hledat tak stavy částice se spinem mající danou hodnotu celkového momentu hybnosti $j = l \pm \frac{1}{2}$.

7.3 Systémy nerozlišitelných částic, Pauliho princip

Jak už bylo řečeno na počátku této kapitoly, při popisu jevů na atomární a nižší úrovni označení "první" či "druhá" pro nerozlišitelné částice ztrácí smysl. Tento fakt be se tedy měl odrazit i v teoretickém popisu těchto jevů.

Nechť $\{A, B, \dots\}$ je úplná množina pozorovatelných dvoučásticového systému. Vlnová funkce $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ dvoučásticového stavu, který je dán hodnotami $a, b, \dots$ pozorovatelných $A, B, \dots$ je pak určena podmínkami

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad \hat{B}\psi = b\psi, \quad \dots \quad (298)$$

Při záměně částic se stavová funkce $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ změní na $\tilde{\psi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) := \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$. Pro nerozlišitelné částice se ale výsledky měření na dvoučásticovém systému touto záměnou nemohou změnit. Současně s (298) musí tedy rovněž platit

$$\hat{A}\tilde{\psi} = a\tilde{\psi}, \quad \hat{B}\tilde{\psi} = b\tilde{\psi}, \quad \dots \quad (299)$$

Z předpokladu, že $\{A, B, \dots\}$ je úplná množina pozorovatelných plyne, že funkce ψ a $\tilde{\psi}$ jsou určeny jednoznačně až na konstantu. Musí tedy platit $\psi = C_\psi \tilde{\psi}$. Odtud však plyne, že

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = C_\psi \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = C_\psi^2 \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \quad (300)$$

takže $C_\psi = \pm 1$. Stavové funkce dvou nerozlišitelných částic musí tedy být buď symetrické, či antisymetrické při záměně svých argumentů.

Mimo to, pro jeden typ částic znaménko C_ψ nemůže záviset na vlnové funkci, neboť v opačném případě stavy popsané lineárními kombinacemi vlnových funkcí s různými symetriemi by nebyly ani symetrické ani antisymetrické. Částice, jejichž soubory jsou popsány symetrickými vlnovými funkcemi se nazývají *bosony* a částice, jejichž soubory jsou popsány antisymetrickými vlnovými funkcemi se nazývají *fermiony*.

V kvantové teorii pole lze ukázat, že **typ symetrie vlnových funkcí je určen spinem částic**. Částice s polocelým spinem (v jednotkách $\hbar$) jako např. elektron, proton či neutron jsou fermiony a částice s celým spinem jako např. π -mesony nebo foton jsou bosony. Vlnové funkce částic s nenulovým spinem však závisejí vedle souřadnic $\vec{x}_j$ též na "spinových" proměnných ξ_j nabývajících pouze diskretních hodnot. Symetrií či antisymetrií vlnové funkce se pak rozumí (anti)symetrie vůči záměně dvojic $(\vec{x}_j, \xi_j)$ a $(\vec{x}_k, \xi_k)$, $j \neq k$.

Z výše uvedeného ihned plyne, že **vlnová funkce systému více nerozlišitelných bosonů či fermionů je symetrická, respektive antisymetrická** vůči záměně libovolných (dvojic) argumentů, neboť analog podmínky (300) pro více částic lze interpretovat jako existenci jednorozměrné reprezentace grupy permutací P_N . Takovéto reprezentace jsou však buď totálně symetrické či antisymetrické. Příkladem je vlnová funkce tří částic, která má v první dvojici argumentů symetrii danou znaménkem C_1 a ve druhé znaménkem C_2 . Pak

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = C_1\psi(x_2, x_1, x_3) = C_1C_2\psi(x_2, x_3, x_1) = C_2\psi(x_3, x_2, x_1),$$

ale současně

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = C_2\psi(x_1, x_3, x_2) = C_1C_2\psi(x_3, x_1, x_2) = C_1\psi(x_3, x_2, x_1),$$

takže $C_1 = C_2$.

Podobně jako v případě rozlišitelných částic je možno vytvářet vícečásticové vlnové funkce z jednočásticových. Jsou-li $\psi_a(\vec{x})$ vlnové funkce jedné bezspinové částice, tzn. $\psi_a \in L_2(\mathbf{R}^3, dx^3)$, pak

$$\psi_{a_1, a_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) := \psi_{a_1}(\vec{x}_1)\psi_{a_2}(\vec{x}_2) + \psi_{a_1}(\vec{x}_2)\psi_{a_2}(\vec{x}_1)$$

je vlnová funkce dvou stejných bosonů a podobně

$$\psi_{a_1, a_2}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2) := \psi_{a_1}(\vec{x}_1, \xi_1)\psi_{a_2}(\vec{x}_2, \xi_2) - \psi_{a_1}(\vec{x}_2, \xi_2)\psi_{a_2}(\vec{x}_1, \xi_1)$$

je vlnová funkce dvou stejných fermionů. Je vhodné na tomto místě připomenout, že pro částice s nenulovým spinem je hodnota průmětu spinu do některé osy součástí definice jednočásticového stavu čili např. $a_1 = (n_1, l_1, m_1, \pm \frac{1}{2})$.

Obecně Hilbertovy prostory stavů $\mathcal{H}^S$, $\mathcal{H}^A$ systému N nerozlišitelných částic jsou podprostory totálně symetrických či antisymetrických funkcí z $L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x)$, respektive $L_2(\mathbf{R}^{3N}, d^{3N}x) \otimes \mathbf{C}^{2^N}$.

Vlnová funkce N nerozlišitelných bezspinových částic ve stavech $\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \dots, \psi_{a_N}$ je

$$\psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) := \sum_{\pi \in P_N} \psi_{a_1}(\vec{x}_{\pi 1}) \psi_{a_2}(\vec{x}_{\pi 2}) \dots \psi_{a_N}(\vec{x}_{\pi N}) \quad (301)$$

a vlnová funkce N nerozlišitelných fermionů ve stavech $\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \dots, \psi_{a_N}$ je

$$\begin{aligned} & \psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) := \\ & \sum_{\pi \in P_N} (-)^{grad \pi} \psi_{a_1}(\vec{x}_{\pi 1}, \xi_{\pi 1}) \psi_{a_2}(\vec{x}_{\pi 2}, \xi_{\pi 2}) \dots \psi_{a_N}(\vec{x}_{\pi N}, \xi_{\pi N}), \end{aligned} \quad (302)$$

kde P_N je grupa permutací N objektů a $grad \pi$ je počet transposic, ze kterých je možno složit permutaci π . Antisymetrická vlnová funkce (302) se dá zapsat jako tzv. *Slaterův determinant*.

$$\begin{aligned} & \psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) = \\ & \det \begin{pmatrix} \psi_{a_1}(\vec{x}_1, \xi_1) & \psi_{a_2}(\vec{x}_1, \xi_1) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_1, \xi_1) \\ \psi_{a_1}(\vec{x}_2, \xi_2) & \psi_{a_2}(\vec{x}_2, \xi_2) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_2, \xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{a_1}(\vec{x}_N, \xi_N) & \psi_{a_2}(\vec{x}_N, \xi_N) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_N, \xi_N) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (303)$$

Pozorovatelné pro systémy nerozlišitelných částic jsou pak popsány samosdruženými operátory v podprostorech $\mathcal{H}^S$ nebo $\mathcal{H}^A$. Znamená to že působení těchto operátorů musí zachovat (anti)symetrii funkcí na které působí, takže např. operátor potenciální energie v poli konzervativních sil musí být popsán funkcí $V(x_1, x_2, \dots, x_N)$, která je symetrická vůči záměně svých proměnných. Formálně lze tuto vlastnost vyjádřit tak, že pozorovatelné komutují s operátorem "záměny částic" P_π

$$P_\pi \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) := \psi(x_{\pi 1}, x_{\pi 2}, \dots, x_{\pi N}) \quad (304)$$

Z výrazu (303) je zřejmé, že pokud dva jednočásticové stavy jsou stejné, pak $\psi_{a_1, a_2, \dots, a_N} = 0$, což je matematické vyjádření Pauliho vylučovacího principu: **V souboru nerozlišitelných fermionů nemohou existovat dvě částice ve stejném stavu.** Tento princip má dalekosáhlé důsledky pro strukturu atomu.

Pokud jednočásticové vlnové funkce ψ_n tvoří ortonormální baze v prostorech $L_2(\mathbf{R}^3, d^3x)$, respektive $L_2(\mathbf{R}^3, d^3x) \otimes \mathbf{C}^2$, pak funkce (301) a (302) složené z jednočásticových stavů (po patřičné normalizaci) tvoří ortonormální bazi v prostoru $\mathcal{H}^S$ popisující soustavu bosonů, respektive $\mathcal{H}^A$ popisující soustavu fermionů.

Cvičení 81 Najděte energie a vlastní funkce základního a prvního excitovaného stavu dvou nerozlišitelných částic se spinem 0, respektive $\frac{1}{2}$ v poli harmonického oscilátoru.

Cvičení 82 Napište vlnovou funkci základního stavu atomového obalu helia zanedbáme-li odpuzivé síly mezi elektrony (tzv. nulová aproximace).

8 Přibližné metody výpočtu vlastních hodnot operátoru

Přesný výpočet vlastních čísel operátorů a vlastních funkcí je možné provést analytickými metodami jen u velmi omezeného počtu fyzikálně zajímavých případů. Některé z nich některé jsme již uvedli: energie harmonického oscilátoru, energie částice v Coulombově poli, moment hybnosti. Pro mnohé další případy se musíme většinou uchýlit k přibližným metodám. Jednou z nich je tzv. poruchová teorie, kterou popíšeme v následujících podkapitolách. Její podstatou je, že operátor, jehož vlastní čísla chceme spočítat, je možno zapsat jako $\hat{A} + \hat{B}$, kde spektrum operátoru $\hat{A}$ je možno řešit přesně a operátor $\hat{B}$ je možno v nějakém smyslu považovat za malou opravu – ”poruchu” – operátoru $\hat{A}$.

Přesněji, nechť $\hat{A}$, $\hat{B}$ jsou samosdružené operátory. Budeme zkoumat operátor

$$\hat{A} + \epsilon \hat{B}, \quad (305)$$

kde ϵ leží v okolí nuly a vlastnosti vlastních čísel a funkcí v závislosti na parametru ϵ . Dá se očekávat (ač to obecně nemusí být splněno), že pro $\epsilon \rightarrow 0$ se budou vlastní čísla a funkce blížit k odpovídajícím veličinám pro operátor $\hat{A}$ a pro $\epsilon \rightarrow 1$ za příznivých okolností též k vlastním číslům a funkcím operátoru $\hat{A} + \hat{B}$. V některých případech jako je např. Starkův jev, který vysvětlíme níže, lze navíc proměnné ϵ dát fyzikální smysl.

Než přejdeme k výsledkům poruchových metod rozeberme důsledky uvedených předpokladů. Nechť $\lambda(\epsilon)$, $\lambda_K^{(0)}$ a $\psi(\epsilon)$, $\psi_K^{(0)}$ jsou vlastní čísla a vlastní funkce operátorů $\hat{A} + \epsilon \hat{B}$ a $\hat{A}$

$$(\hat{A} + \epsilon \hat{B})\psi(\epsilon) = \lambda(\epsilon)\psi(\epsilon), \quad \hat{A}\psi_K^{(0)} = \lambda_K^{(0)}\psi_K^{(0)}. \quad (306)$$

Odtud snadno dostaneme

$$(\hat{A} - \lambda_K^{(0)})\Delta\psi_K = (\Delta\lambda_K - \epsilon\hat{B})\psi(\epsilon), \quad (307)$$

kde

$$\Delta\psi_K = \psi(\epsilon) - \psi_K^{(0)}, \quad \Delta\lambda_K = \lambda(\epsilon) - \lambda_K^{(0)}. \quad (308)$$

Vynásobíme-li skalárně rovnost (307) funkcí $\psi_J^{(0)}$, využijeme samosdruženost operátoru $\hat{A}$ a druhou rovnost v (306), dostaneme

$$(\lambda_J^{(0)} - \lambda_K^{(0)})(\psi_J^{(0)}, \Delta\psi_K) = \Delta\lambda_K(\psi_J^{(0)}, \psi(\epsilon)) - \epsilon(\psi_J^{(0)}, \hat{B}\psi(\epsilon)). \quad (309)$$

Pro $J = K$ odtud plyne

$$\Delta\lambda_K(\psi_K^{(0)}, \psi(\epsilon)) = \epsilon(\psi_K^{(0)}, \hat{B}\psi(\epsilon)). \quad (310)$$

Tyto dvě rovnice představují výchozí bod pro aplikaci poruchového počtu. Jako první rozebereme případ, kdy operátor $\hat{A}$ má čistě bodové spektrum a všechna vlastní čísla jsou navzájem různá.

8.1 Poruchová teorie pro nedegenerované čistě bodové spektrum

Nechť operátor $\hat{A}$ má čistě bodové spektrum s navzájem různými vlastními čísly $\lambda_k^{(0)}$. Odpovídající vlastní funkce označme $\psi_k^{(0)}$. Předpokládejme dále, že v okolí nuly lze vlastní čísla i vlastní funkce operátoru $\hat{A} + \epsilon\hat{B}$ napsat jako nekonečnou řadu v proměnné ϵ s nenulovým poloměrem konvergence. Neboť pro $\epsilon = 0$ operátor $\hat{A} + \epsilon\hat{B}$ přejde na $\hat{A}$, lze očekávat, že

$$\lambda(\epsilon) = \lambda_k^{(0)} + \epsilon\lambda_k^{(1)} + \epsilon^2\lambda_k^{(2)} + \dots \quad (311)$$

$$\psi(\epsilon) = \psi_k^{(0)} + \epsilon\psi_k^{(1)} + \epsilon^2\psi_k^{(2)} + \dots \quad (312)$$

Ideální by bylo, kdybychom uměli vypočítat všechny koeficienty řad (311) a (312) a odtud usoudit na konvergenci či dokonce provést součet. V praxi se nám obvykle podaří vypočítat pouze několik nejnižších členů, jejichž příspěvky však často překvapivě dobře odpovídají experimentálně naměřeným hodnotám fyzikálních pozorovatelných. Vzorce pro výpočet koeficientů lze odvodit dosazením (311) a (312) do (309) a (310). Porovnáním členů u první mocniny ϵ v (310) zjistíme, že první oprava vlastního čísla je střední hodnota operátoru $\hat{B}$ ve stavu $\psi_k^{(0)}$.

$$\lambda_k^{(1)} = \langle \hat{B} \rangle_{\psi_k^{(0)}}. \quad (313)$$

Porovnáním členů u první mocniny ϵ v (309) dostaneme

$$(\psi_j^{(0)}, \psi_k^{(1)}) = \frac{(\psi_j^{(0)}, \hat{B}\psi_k^{(0)})}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}}, \quad j \neq k, \quad (314)$$

odkud plyne, že první oprava vlastní funkce $\psi(\epsilon)$ tedy je

$$\psi_k^{(1)} = \gamma\psi_k^{(0)} + \sum_{j \neq k} \frac{(\psi_j^{(0)}, \hat{B}\psi_k^{(0)})}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}} \psi_j^{(0)}, \quad (315)$$

kde γ je libovolná konstanta, kterou můžeme použít například pro normalizaci vlastní funkce $\psi(\epsilon)$.

Opravu vlastního čísla do druhého řádu v ϵ vypočteme porovnáním členů (310) u druhé mocniny ϵ .

$$\lambda_k^{(2)} = \frac{(\psi_k^{(0)}, (\hat{B} - \lambda_k^{(1)})\psi_k^{(1)})}{(\psi_k^{(0)}, \psi_k^{(0)})} = \sum_{j \neq k} \frac{|(\psi_j^{(0)}, \hat{B}\psi_k^{(0)})|^2}{(\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)})(\psi_k^{(0)}, \psi_k^{(0)})}, \quad (316)$$

přičemž v druhém rovnítku jsme použili vztahy (313), (315).

Analogickými operacemi bychom mohli dostat vzorce pro další opravy vlastních čísel a vlastních funkcí. Bohužel formule jsou pak již tak komplikované, že pro většinu případů jsou prakticky nepoužitelné. Použijeme-li však dodatečnou normovací podmínku (ze které m.j. plyne $\gamma = 0$)

$$(\psi(\epsilon), \psi_k^{(0)}) = 1 \Leftrightarrow (\Delta\psi(\epsilon), \psi_k^{(0)}) = 0, \quad (317)$$

tyto formule se podstatně zjednoduší. Porovnáním členů (310) a (309) u s -té mocniny ϵ pak dostaneme relativně jednoduché rekurentní relace

$$\lambda_k^{(s)} = \frac{(\psi_k^{(0)}, \hat{B}\psi_k^{(s-1)})}{(\psi_k^{(0)}, \psi_k^{(0)})} \quad (318)$$

$$\psi_k^{(s)} = \sum_{j \neq k} \frac{(\psi_j^{(0)}, \hat{B}\psi_k^{(s-1)}) - \sum_{r=1}^{s-1} \lambda_k^{(r)} (\psi_j^{(0)}, \psi_k^{(s-r)})}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}} \psi_j^{(0)}, \quad (319)$$

kteří nám umožní počítat opravy vlastních čísel i vlastních funkcí do libovolně vysokého řádu ϵ .

Cvičení 83 *Poruchovou metodou spočítejte energie do druhého řádu jednorozměrné kvantové částice na kterou působí síla $M\omega^2 x + F$ (harmonický oscilátor v homogenním poli).*

Cvičení 84 *Poruchovou metodou spočítejte energie do druhého řádu jednorozměrné kvantové částice v potenciálu*

$$V(x) = \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4.$$

(Anharmonický oscilátor.)

8.2 Poruchová teorie pro vícenásobná vlastní čísla

V předchozí kapitole jsme využili faktu, že ke každému vlastnímu číslu existovala právě jedna vlastní funkce. Nyní ukážeme jak postupovat pro **konečně násobná** vlastní čísla $\lambda_k^{(0)}$ operátoru $\hat{A}$, tedy v případě, kdy vlastní funkce příslušné k číslu $\lambda_k^{(0)}$ tvoří lineární podprostor dimenze $N > 1$. Nechť $\{f_{k,i}\}_{i=1}^N$ je ortonormální base v prostoru vlastních funkcí operátoru $\hat{A}$ příslušných k vlastnímu číslu operátoru $\lambda_k^{(0)}$.

Zaměníme-li operátor $\hat{A}$ operátorem $\hat{A} + \epsilon \hat{B}$, pak se v obecném případě změní i vlastní čísla i jejich násobnost. Opět budeme předpokládat, že v okolí nuly lze vlastní čísla i vlastní funkce operátoru $\hat{A} + \epsilon \hat{B}$ napsat jako nekonečnou řadu v proměnné ϵ s nenulovým poloměrem konvergence, takže vlastní čísla operátoru $\hat{A} + \epsilon \hat{B}$, která pro $\epsilon \rightarrow 0$ konvergují k $\lambda_k^{(0)}$, lze zapsat jako

$$\lambda_{k,n}(\epsilon) = \lambda_k^{(0)} + \epsilon \lambda_{k,n}^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_{k,n}^{(2)} + \dots, \quad (320)$$

a

$$\psi_{k,n}(\epsilon) = \psi_{k,n}^{(0)} + \epsilon \psi_{k,n}^{(1)} + \epsilon^2 \psi_{k,n}^{(2)} + \dots, \quad (321)$$

kde $n = 1, \dots, N$.

Funkce $\psi_{k,n}^{(0)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi_{k,n}(\epsilon)$, na rozdíl od případu nedegenerovaného spektra, nejsou určeny řešením úlohy pro vlastní čísla a funkce operátoru $\hat{A}$. Víme pouze, že jsou jistou lineární kombinací funkcí $f_{k,i}$

$$\psi_{k,n}^{(0)} = \sum_{i=1}^N a_{kn,i} f_{k,i}. \quad (322)$$

tedy napřed určit funkce $\psi_{k,n}^{(0)}$. Dosadíme opět řady (320), (321) do úlohy pro vlastní čísla

$$(\hat{A} + \epsilon \hat{B})\psi_{k,n} = \lambda_{k,n} \psi_{k,n} \quad (323)$$

a porovnáme členy úměrné první mocnině ϵ . Dostaneme

$$\hat{A}\psi_{k,n}^{(1)} + \hat{B}\psi_{k,n}^{(0)} = \lambda_{k,n}^{(0)}\psi_{k,n}^{(1)} + \lambda_{k,n}^{(1)}\psi_{k,n}^{(0)}. \quad (324)$$

Vynásobíme-li tuto rovnost skalárně zprava funkcí $f_{k,j}$, použijeme samosdruženost $\hat{A}$ a toho, že $f_{k,j}$ je vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$, dostaneme

$$(f_{k,j}, \hat{B}\psi_{k,n}^{(0)}) = \lambda_{k,n}^{(1)}(f_{k,j}, \psi_{k,n}^{(0)}). \quad (325)$$

Dosadíme-li sem (322) a využijeme ortonormálnost funkcí $f_{k,j}$, pak můžeme tuto rovnost přepsat způsobem

$$\sum_{i=1}^N B_{ji} a_{kn,i} = \lambda_{k,n}^{(1)} a_{kn,j}, \quad (326)$$

což je úloha pro vlastní čísla matice

$$B_{ji} := (f_{k,j}, \hat{B}f_{k,i}), \quad i, j := 1, \dots, N. \quad (327)$$

První opravy vlastních čísel $\lambda_{k,n}^{(1)}$ pak dostaneme z řešení úlohy (326), tedy jako kořeny sekulární rovnice

$$\det(B_{ji} - \lambda_{k,n}^{(1)} \delta_{ji}) = 0. \quad (328)$$

Řešením úlohy (326) pak dostaneme též koeficienty $a_{kn,i}$, které určují "nultou opravu" $\psi_{k,n}^{(0)}$ vlastních funkcí $f_{k,i}$. Výpočet dalších oprav je opět dosti komplikovaný a příslušné vzorce zde nebudeme uvádět.

8.2.1 Starkův jev na vodíku

Starkovým jevem nazýváme rozštěpení spektrálních čar atomu vlivem homogenního elektrostatického pole. Elektron v atomu vodíku v homogenním elektrostatickém poli $\vec{\mathcal{E}}$ můžeme popsat Hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - e\vec{\mathcal{E}}\vec{x}. \quad (329)$$

Pro slabé elektrické pole tj. $\frac{e^2}{a} \gg |\vec{\mathcal{E}}|$, kde a je Bohrov poloměr atomu vodíku, je možno poslední člen považovat za malou opravu předchozí části Hamiltoniánu $\hat{H}_0$ popisující atom vodíku bez přítomnosti vnějšího elektrického pole. Jeho vlastní čísla i vlastní funkce známe z podkapitoly 3.4.5. Víme, že vlastní čísla (kromě nejnižší energie) jsou degenerovaná, takže musíme použít poruchovou metodu pro degenerované spektrum.

Bez újmy na obecnosti (neporušený hamiltonián je isotropní), můžeme předpokládat, že $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \epsilon)$. Oprava $\epsilon \hat{B}$ hamiltoniánu $\hat{H}_0$ je $-\epsilon \epsilon \hat{X}_3 = -\epsilon \epsilon r \cos \theta$ a zajímá nás změna k -té energetické hladiny vodíku $E_k = -R/k^2$ v závislosti na síle elektrického pole ϵ .

Vlastní funkce $\psi_{k,l,m}$ příslušné k E_k jsou vyjádřeny vzorcem (152), kde $N = k$. Matice B_{ji} , jejíž vlastní hodnoty, představují první opravy energie má v tomto případě elementy

$$\begin{aligned} B_{ji} &\equiv B_{lm,l'm'} = -e(\psi_{klm}, r \cos \theta \psi_{kl'm'}) = \\ &= \int R_{kl}(r) R_{kl'}(r) r^3 dr \int Y_{lm}(\theta, \phi) \cos \theta Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega. \end{aligned} \quad (330)$$

Druhý integrál je roven (viz např [5] G.29)

$$\int Y_{lm}(\theta, \phi) \cos \theta Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{mm'} (\delta_{l,l'+1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l+1,l'} \sqrt{\frac{l'^2 - m^2}{4l'^2 - 1}}), \quad (331)$$

takže maticové elementy jsou nenulové pouze pro $m = m'$ a $l' = l \pm 1$. Výpočet prvního integrálu v (330) je obecně dosti složitý a proto se omezíme na výpočet prvních oprav základní a první excitované hladiny. Pro nejnižší energii $k = 1$ je $l = l' = 0$ a $(\psi_{100}, r \cos \theta \psi_{100}) = 0$, takže základní hladina se do prvního řádu v ϵ nezmění. Pro první excitovanou hladinu je $k = 2$ a $l, l' = 0, 1$. Jediné nenulové elementy B_{ji} v důsledku (331) jsou

$$-e(\psi_{210}, r \cos \theta \psi_{200}) = -e(\psi_{200}, r \cos \theta \psi_{210})^* = 3ea. \quad (332)$$

Matice B_{ij} v tomto případě má tvar

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3ea & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3ea & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (333)$$

a kořeny sekulární rovnice (328) jsou $0, 0, 3ea, -3ea$. Znamená to, že první excitovaná hladina vodíku, která je čtyřnásobně degenerovaná, se ve slabém vnějším elektrickém poli rozštěpí na tři s hodnotami $-3, 4eV$ a $-3, 4eV \pm 3ea\epsilon$, kde e je náboj elektronu, a je Bohrov poloměr vodíku $a = 0, 53 \times 10^{-8}$ cm a ϵ je hodnota intenzity vnějšího elektrického pole. Původní hladina $-3, 4eV$ zůstane degenerovaná i v elektrickém poli, avšak pouze dvakrát – její vlastní funkce tvoří dvourozměrný prostor lineárních kombinací $a_+ \psi_{2,1,1} + a_- \psi_{2,1,-1}$, zatímco hladiny $-3, 4eV \pm 3ea\epsilon$ jsou již nede degenerované a odpovídají jim vlastní funkce $a(\psi_{2,1,0} \mp \psi_{2,0,0})$, kde $\psi_{2,1,0}, \psi_{2,0,0}$ jsou normalizované k jedničce. Všimněme si, že šířka rozštěpení je úměrná intenzitě elektrického pole. Podobně se rozštěpí i vyšší excitované hladiny. Toto experimentálně pozorované rozštěpení hladin se nazývá (lineární) Starkův jev.

Cvičení 85 Spočítejte rozštěpení druhé excitované hladiny atomu vodíku při Starkově jevu.

Cvičení 86 Existuje lineární Starkův jev pro isotropní oscilátor?

8.3 Struktura atomu, Hartreeho metoda

[5] 10.6 Atomy se skládají z kladně nabitého jádra a záporně nabitého obalu. Vzhledem k rozdílu hmotností částic jádra aproximací popisovat jako stavy soustavy záporně nabitých částic - elektronů - pohybujících se v potenciálovém poli jádra.

Zabývejme se tedy atomem s atomovým číslem Z . Hamiltonián systému Z elektronů elektrostaticky interagujících s jádrem a mezi sebou je

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{j=1}^Z \Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^Z \frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|}. \quad (334)$$

Cvičení 87 Spočítejte prouchovou metodou energii základního stavu helia, považujeme-li poslední člen v (334) za poruchu.

Přesné nalezení vlastních (Z-částicových) stavů hamiltoniánu (334) je prakticky nemožné. Ukazuje se však, že stavy atomu a jeho energie je možné popsat pomocí antisymetrických kombinací jednočásticových vlnových funkcí v poli sféricky symetrického potenciálu. Jeho tvar lze dostat tzv. Hartreeho metodou self-konzistentního pole, kterou nyní popíšeme.

Předpokládejme, že jsou známy polohy všech elektronů obalu atomu kromě j-tého. Hamiltonián j-tého elektronu pak má tvar

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{j\neq k}^Z \frac{e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|}, \quad (335)$$

kde $\vec{x}_k$, $k \neq j$ jsou parametry hamiltoniánu. Tento předpoklad však bohužel není splněn, neboť polohy všech elektronů jsou kvantově mechanické pozorovatelné a informace o jejich okamžité hodnotě je ukryta ve vlnových funkcích. Modifikujeme-li tedy náš předpoklad tak, že známe vlnové funkce ϕ_k , $k \neq j$, pak můžeme hamiltonián (335) nahradit hamiltoniánem

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{j\neq k}^Z \int_{R^3} \frac{|\phi_k(\vec{x}_k)|^2 e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|} d^3x_k. \quad (336)$$

Problém je v tom, že funkce ϕ_k neznáme stejně jako ϕ_j . Mohli bychom se nicméně pokusit řešit soustavu rovnic

$$\hat{H}_j\phi_j = E_j\phi_j, \quad j = 1, \dots, Z \quad (337)$$

pro funkce ϕ_j . Avšak díky přítomnosti ϕ_k , $k \neq j$ v (336) se opět jedná o prakticky neřešitelný (dokonce nelineární) problém.

Hartreeho metoda spočívá v iteračním postupu, kde na začátku jsou zvoleny jednočásticové funkce ϕ_k^0 , které splňují některé základní fyzikální požadavky na očekávaný tvar řešení. Ty jsou v prvním kroku dosazeny do hamiltoniánu (336), přičemž je respektován Pauliho princip, že každý stav může být obsazen maximálně jedním elektronem, a (obvykle numerickou metodou) vypočítány energie E_j^1 a funkce ϕ_j^1 , které splňují

$$\hat{H}_j^0\phi_j^1 = E_j^1\phi_j^1. \quad (338)$$

Funkce ϕ_j^1 se opět dosadí do hamiltoniánu (336) a tento postup se opakuje tak dlouho až $\phi_j^{n+1} \approx \phi_j^n$ a $E_j^{n+1} \approx E_j^n$, takže

$$\hat{H}_j^n\phi_j^n = E_j^n\phi_j^n. \quad (339)$$

Mimo to se obvykle při podobných výpočtech používá přiblížení sféricky symetrického pole, kdy se poslední člen (336) vystředuje přes prostorové úhly, tzn. nahradí se členem

$$V_{int}(r_j) = \frac{1}{(4\pi)^2 \epsilon_0} \int_{\Omega} \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \sum_{j \neq k}^Z \int_{R^3} \frac{|\phi_k(\vec{x}_k)|^2 e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|} d^3 x_k. \quad (340)$$

Díky sférické symetrii takto zkonstruovaného hamiltoniánu pak lze hledat vlastní funkce energie ve tvaru

$$\phi_j(\vec{x}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (341)$$

a vlastní čísla nezávisí na m .

$$E_j = E_{nl} \quad (342)$$

Tímto způsobem lze získat dosti dobrou aproximaci vlnových funkcí částic pohybujících se v odpudivém elektrostatickém poli ostatních.

Vlnovou funkci atomového obalu Z proměnných $\vec{x}_j$ pak dostaneme např. jako Slaterův determinant (303), kde $\alpha_j = (n_j, l_j, m_j, \pm \frac{1}{2})$, neboť elektrony mají spin $1/2$ a jsou tedy fermiony.

Celková vnitřní energie atomu ve výše uvedené aproximaci je součtem energií jednotlivých elektronů obalu

$$E_{atom} = \sum_{j=1}^Z E_{n_j, l_j}. \quad (343)$$

Vzhledem k tomu, že energie jednočásticových stavů (342) nezávisí na projekci spinu ani magnetickém kvantovém čísle m má každá hladina $E_{n,l}$ degeneraci $2(2l+1)$. Jednočásticové stavy se stejným n_j a l_j tvoří tzv. *slupky atomu*. Z Pauliho principu plyne, že *žádná energetická slupka nemůže být obsazena víc než $2(2l+1)$ elektrony*.

Pro atomy v základním stavu jsou obsazeny všechny nejnižší jedoelektronové hladiny. Je zřejmé, že energie spočítané Hartreeho metodou nelze vyjádřit vzorcem, nicméně se ukazuje, že pořadí nejnižších hladin téměř nezávisí na atomovém čísle. Platí

$$E_{10} \ll E_{20} < E_{21} \ll E_{30} < E_{31} \ll (E_{40}, E_{32}) < E_{41} \ll (E_{50}, E_{42}) < E_{51} \ll \dots$$

Energie uvedené v závorkách jsou velmi blízké a jejich pořadí je dáno atomovým číslem Z . Naopak, skupiny energií oddělené $\ll$ jsou relativně velmi vzdálené. Chemické vlastnosti prvků určují elektrony s největší energií (klasicky: nejvzdálenější orbitou) a atomy, které v základním stavu mají "obsazené" energie stejných skupin tvoří periody Mendělejevovy tabulky prvků. Je snadné se přesvědčit, že počty stavů v jednotlivých skupinách 2,8,8,18,18,... odpovídají délkám period.

Cvičení 88 Atom uhlíku má čtyři valenční elektrony (přesvědčte se). Můžeme na něj tedy nahlížet jako na systém čtyř elektronů ve sféricky symetrickém poli. Jaká je pak degenerace jeho základního stavu?

9 Potenciálový rozptyl, tunelový jev

Rozptylový experiment je obvykle uspořádán tak, že proud částic s dobře určenými vlastnostmi (hmota, energie, hybnost, ...) dopadá na nějaký objekt (tenká folie) či dokonce se sráží s jiným proudem částic a měří se charakteristiky rozptýlených částic. Klasický popis takovýchto experimentů se provádí pomocí výpočtu drah daných pohybovými rovnicemi (viz např. Rutherfordův rozptyl v [2] kap 3.4). V této kapitole popíšeme nejjednodušší popis rozptylu metodami kvantové mechaniky.

První předpoklad je, že dosah vzájemné interakce částic je mnohem menší než jsou charakteristické vzdálenosti částic v terčovém objektu, takže problém rozptylu lze redukovat na interakci dvou částic se známou interakcí popsanou potenciálem $V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ s konečným dosahem. Dále předpokládáme, že terč je dost tenký, takže nemusíme uvažovat vícenásobnou interakci. To nám umožňuje převést problém rozptylu na úlohu o pohybu jedné částice (s redukovanou hmotou) v potenciálu $V(\vec{x})$.

Dopadající částici můžeme popsat vlnovým balíkem ψ_{in} a s grupovou rychlostí ve směru dopadu. Kvantově mechanický popis rozptylu pak spočívá především ve výpočtu pravděpodobnosti nalezení částice v oblasti prostoru vymezené prostorovým úhlem $d\Omega$.

Proces rozptylu lze v kvantové mechanice popsat časovým vývojem stavu daného počáteční podmínkou $\psi(t_0) = \psi_{in}$, přičemž v čase t_0 je interakce částic nulová. Je tedy třeba nalézt řešení časové Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou $\psi(t_0) = \psi_{in}$. Nalézt příslušné řešení Schrödingerovy rovnice se však obvykle nepodaří a je třeba se uchýlit k aproximativním metodám. Ukážeme, že výše popsanou nestacionární úlohu lze převést na úlohu stacionární a některé důležité charakteristiky rozptylu lze získat ze znalosti zobecněných stacionárních stavů odpovídajících danému potenciálu.

9.1 Rozptyl částic na přímce

Začneme s nejjednodušším případem rozptylu bezspinových částic na přímce, kde jsou jen dva možné úhly rozptylu totiž 0 a 180 stupňů. Po redukcii úlohy dvou těles vede tento případ na problém časového vývoje vlnové funkce v jednorozměrném potenciálu, pro který navíc budeme předpokládat že má konečný dosah, tzn. $V(x) = 0$ pro $|x| > a$. Dopadající částici lokalizovanou v čase t_0 v okolí $x_0 < -a$ můžeme dobře posat vlnovým balíkem

$$\psi_{in}(x) = \psi_{x_0, p_0, \sigma_0}(x) = C e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_0^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x}, \quad (344)$$

kde $p_0 > 0$ a σ_0 je střední kvadratická odchylka souřadnice, která s časem roste (viz cvičení 18). Čas počátku interakce t_1 , tj. čas kdy "okraj vlnového balíku" dospěje

do oblasti interakce, lze definovat způsobem

$$x_0 + 2\sigma(t_1) + \frac{p_0}{M}(t_1 - t_0) = -a. \quad (345)$$

Pro $t \in (t_0, t_1)$ se částice pohybuje téměř jako volná, přesněji, časový vývoj vlnového balíku se příliš neliší od

$$\psi_0(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} dp, \quad (346)$$

kde

$$F(p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \psi(x', t_0) dx' = C e^{-\sigma^2 \frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2} - i\frac{p}{\hbar}x_0}, \quad (347)$$

Pro časy srovnatelné a větší než t_1 (346) již nevystihuje skutečný časový vývoj dopadající částice, neboť je superposicí funkcí $e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)}$, což jsou zobecněné vlastní stavy energie pouze pro $V = 0$ zatímco pro $t \geq t_1$ se podstatným způsobem začne projevovat vliv potenciálu na řešení Schrödingerovy rovnice.

Chceme-li dostat přesný časový vývoj funkce ψ_{in} musíme nahradit zobecněné vlastní funkce $e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ hamiltoniánu volné částice vlastními stavy $\Phi_{p/\hbar}$ úplného hamiltoniánu, tj. funkcemi splňujícími bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \Phi_{\frac{p}{\hbar}}}{dx^2} + V \Phi_{\frac{p}{\hbar}} = E \Phi_{\frac{p}{\hbar}}, \quad E = \frac{p^2}{2M}, \quad (348)$$

takže časový vývoj částice je dán funkcí

$$\boxed{\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} \Phi_{p/\hbar}(x) dp.} \quad (349)$$

Zde předpokládáme, že díky vlastnostem funkce $F(p)$, nejdůležitější roli hraje oblast energií v okolí $\frac{p_0^2}{2M}$ a k časovému vývoji rozhodujícím způsobem přispějí tedy pouze stacionární stavy s kladnou energií.

Pro účely teorie rozptylu je vhodné zapsat Schrödingerovu rovnici (348) v integrálním (Lippmann–Schwingerově) tvaru

$$\Phi_k(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} G_k(x - x') U(x') \Phi_k(x') dx', \quad (350)$$

kde

$$U(x) := \frac{2M}{\hbar^2} V(x) \quad (351)$$

a $G_k(x)$ je Greenova funkce bezčasové Schrödingerovy rovnice pro volnou jednorozměrnou částici splňující

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) G_k(x) = \delta(x). \quad (352)$$

Cvičení 89 Ukažte, že funkce

$$G_k^{(+)}(x) := \frac{e^{ik|x|}}{2ik} \quad (353)$$

splňuje rovnici (352) přesněji

$$(G_k'', h) \equiv (G_k, h'') = -k^2(G_k, h) + h(0)$$

pro $h \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$.

Pomocí (352) lze snadno ukázat, že Φ_k splňující (350) jsou též řešením (348).

Dosazením explicitního tvaru Greenovy funkce do (350) dostaneme

$$\Phi_k(x) = e^{ikx}(1 + C(k, x)) + A(k, x)e^{-ikx}, \quad (354)$$

kde

$$A(k, x) = \int_x^a \frac{e^{ikx'}}{2ik} U(x') \Phi_k(x') dx', \quad (355)$$

$$C(k, x) = \int_{-a}^x \frac{e^{-ikx'}}{2ik} U(x') \Phi_k(x') dx'. \quad (356)$$

Odtud je ihned vidět, že v oblasti nulového potenciálu je funkce $\Phi_{\frac{p}{\hbar}}$ superposicí zobecněných vlastních funkcí hybnosti $e^{\pm i\frac{p}{\hbar}x}$.

$$\Phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \text{ pro } x < -a, \quad (357)$$

$$\Phi_k(x) = B(k)e^{ikx} \text{ pro } x > a, \quad (358)$$

kde $A(k) := A(k, -a)$, $B(k) := 1 + C(k, a)$.

Dosazením (354) do (349), zjistíme, že vlnovou funkci částice v libovolném čase je možno zapsat jako součet tří členů

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) + \psi_A(x, t) + \psi_C(x, t). \quad (359)$$

První člen je dán vzorcem (346) a představuje volně se pohybující vlnový balík s rychlostí $\frac{p_0}{M}$, o kterém víme, že absolutní hodnota vlnové funkce exponenciálně klesá k nule všude kromě okolí $x_0 + \frac{p_0}{M}t$ nacházející se pro $t \gg t_0$ v oblasti $x > a$.

Podobně funkce

$$\psi_A(x, t) := \int_{-\infty}^{\infty} dp F(p) A\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{-i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} \quad (360)$$

$$\psi_C(x, t) := \int_{-\infty}^{\infty} dp F(p) C\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} \quad (361)$$

jsou nulové v oblastech $x > a$ resp. $x < -a$ a pomocí tzv. Riemann-Lebesgueovy věty lze dokázat, že konvergují k 0 pro $t \rightarrow \infty$ v oblastech $x > -a$, resp. $x < a$. Znamená to, že pro $t \rightarrow \infty$ funkce ψ je nenulová pouze pro $|x| > a$.

Veličiny, které nás z hlediska rozptylu zajímají především a které jsou experimentálně měřitelné, jsou tzv. koeficienty odrazu a průniku potenciálem

$$R := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{-\infty}^{-a} |\psi(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2}, \quad P := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_a^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2}, \quad (362)$$

udávající pravděpodobnosti, že za dost dlouhou dobu bude částice nalezena v oblasti "před potenciálem" (odrazí se) či "za potenciálem" (projde). Vzhledem k tomu, že pro $t \rightarrow \infty$ amplituda vlnové funkce v oblasti potenciálu vymizí platí

$$P + R = 1. \quad (363)$$

Ukážeme, že k výpočtu těchto koeficientů nebude nakonec zapotřebí řešit pohybovou Schrödingerovu rovnici, nýbrž pouze její bezčasovou variantu určující stacionární stavy.

Pro $t \gg t_0$ je funkce ψ superposicí dvou vlnových balíků pohybujících se přibližně rychlostmi $\pm \frac{p_0}{M}$. Z (360) a (361)

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp F(p) e^{\frac{i}{\hbar}[-px - \frac{p^2}{2M}(t-t_0)]} A\left(\frac{p}{\hbar}\right) \text{ pro } x < -a, \quad (364)$$

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) + \psi_2(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp F(p) e^{\frac{i}{\hbar}[px - \frac{p^2}{2M}t(t-t_0)]} B\left(\frac{p}{\hbar}\right) \text{ pro } x > a. \quad (365)$$

Všimněme si, že koeficienty $A(k)$, $B(k)$ dané původně integrálními formulami můžeme též určit řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice (348) s okrajovými podmínkami (357) a (358). Nalezneme-li tedy řešení rovnice (348) splňující tyto okrajové podmínky, pak koeficienty odrazu a průchodu potenciálem jsou dány vzorci (362), (365) a (364).

Pro dopadající vlnové balíky s malou disperzí, tj. takové, že funkce $F(p)$ je soustředěna v malém okolí p_0 , kde funkce $A(\frac{p}{\hbar})$, $B(\frac{p}{\hbar})$ lze nahradit jejich hodnotou v $\frac{p_0}{\hbar}$, dostaneme zvláště jednoduché vyjádření koeficientů odrazu a průniku.

$$\begin{aligned} P &= |B(\frac{p_0}{\hbar})|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_a^{\infty} |\psi_0(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2} = \\ &= |B(\frac{p_0}{\hbar})|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t_0)\|^2} = |B(\frac{p_0}{\hbar})|^2, \end{aligned} \quad (366)$$

kde jsme použili nezávislost normy stavu na čase a vymizení funkce ψ_0 pro $t \rightarrow \infty$, $x < a$. Podobně

$$R = |A(\frac{p_0}{\hbar})|^2, \quad (367)$$

kde p_0 je hybnost dopadající částice.

9.2 Tunelový jev pro pravoúhlou bariéru

Jako ilustraci použití předchozího postupu předvedeme výpočet koeficientů odrazu a průchodu potenciálem

$$V(x) = 0, \quad \text{pro } |x| > a, \quad V(x) = V_0, \quad \text{pro } |x| < a. \quad (368)$$

Jako první krok je třeba řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici (348) s okrajovými podmínkami.

Ze tvaru potenciálu a podmínek (357), (358) ihned plyne, že

$$\begin{aligned} \Phi_k(x) &= e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \quad \text{pro } x < -a, \\ \Phi_k(x) &= C(k)e^{ik'x} + D(k)e^{-ik'x} \quad \text{pro } -a < x < a, \\ \Phi_k(x) &= B(k)e^{ikx} \quad \text{pro } a < x, \end{aligned} \quad (369)$$

kde

$$k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}, \quad k'^2 = \frac{2M(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (370)$$

a E je energie nalétávající částice $E > 0$, $E > V_0$.

Z podmínek spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodech $\pm a$ dostaneme soustavu čtyř lineárních nehomogenních rovnic pro koeficienty A, B, C, D . Vyloučením C a D dostaneme

$$B(k) = e^{2ik'a} \left[e^{-2ika} + \frac{k' - k}{k' + k} A(k) \right], \quad (371)$$

$$A(k) = e^{-2ika} V_0 [2E - V_0 + 2i\sqrt{E(E - V_0)} \cot(2k'a)]^{-1}. \quad (372)$$

Dosazením do vzorců (367), (366) pak dostaneme koeficienty odrazu a průchodu pravoúhlou bariérou (368) pro částici s energií $E > 0$, $E > V_0$

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(2k'a)} \right]^{-1}, \quad (373)$$

$$P = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2k'a)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}. \quad (374)$$

Tyto vzorce poskytují zajímavé srovnání s chováním klasické částice v témže potenciálu. Ta, pro $E > V_0$, bariérou vždy projde zatímco pro $E < V_0$ se vždy odrazí. Kvantová částice naopak projde s pravděpodobností 1 pouze pro $2k'a = \pi n$, neboli pro tzv. *resonanční energie*

$$E_n = V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{8Ma^2} n^2, \quad n \in \mathbf{Z} \setminus \{0\}. \quad (375)$$

(Porovnejte tyto energie s vlastními hodnotami energie v "nekonečné potenciálové jámě" ze cvičení 25.) Mimo to se lze snadno přesvědčit, že uvedený postup nezávisí na znaménku V_0 , takže dochází k odrazu dokonce i na potenciálové jámě. Na druhé straně pro $E \gg V_0$ $P \approx 1$, takže tyto kvantové jevy přecházejí v klasické chování.

Pro energie částice které jsou menší než "výška bariéry" $0 < E < V_0$ je $k'^2 < 0$ a ve formulích (373) a (374) je třeba zaměnit $\sin(2k'a)$ na $i \sinh |2k'a|$, takže např.

$$P = \left[1 - \frac{V_0^2 \sinh^2 |2k'a|}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}, \quad (376)$$

což pro $|2k'a| \gg 1$ (mohutné potenciálové bariéry) přejde na

$$P \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\sqrt{2M(V_0 - E)} \frac{4a}{\hbar}}, \quad (377)$$

takže pravděpodobnost průchodu bariérou klesá exponenciálně s její šířkou, nicméně je nenulová. Tomuto experimentálně pozorovanému faktu se říká tunelový jev.

Cvičení 90 Spočítejte koeficienty odrazu a průchodu pro $E = V_0 > 0$ a porovnejte je s (374) a (376)

9.3 Prostorový rozptyl

Rozptyl částic v 3-rozměrném prostoru se řeší analogicky, tedy analýzou časového vývoje počátečního stavu

$$\psi_{in}(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, t_0) = \int_{\mathbf{R}^3} F(\vec{p}) e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar} d^3p, \quad (378)$$

representující vlnový balík soustředěný v oblasti, ve které je potenciál nulový a pohybující se grupovou rychlostí $\vec{p}_0/M$.

Časový vývoj vlnové funkce opět popíšeme pomocí stacionárních stavů, $\Phi_{\vec{p}/\hbar}$, přesněji řešeními Lippmann–Schwingerovy rovnice v $\mathbf{R}^3$

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + \int_{\mathbf{R}^3} G_{\vec{k}}(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \Phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x', \quad (379)$$

kde nyní

$$G_{\vec{k}}(\vec{x}) = -\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{x}|}}{4\pi|\vec{x}|} \quad (380)$$

je Greenova funkce 3-rozměrné bezčasové Schrödingerovy rovnice pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta = E\Phi, \quad E = \frac{p^2}{2M}, \quad (381)$$

splňující

$$(\Delta + \vec{k}^2)G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}). \quad (382)$$

Dosadíme-li (380) do (379), kde U odpovídá potenciálu s konečným dosahem, tj. $U(\vec{x}) = \frac{2M}{\hbar^2}V(\vec{x}) = 0$ pro $|\vec{x}| > R$, pak pro $|\vec{x}| \gg R$

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\vec{\xi}, \vec{k}) \frac{e^{i|\vec{k}||\vec{x}|}}{|\vec{x}|}, \quad (383)$$

kde $\vec{\xi} = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}|\vec{k}|$ a

$$f(\vec{\xi}, \vec{k}) := \frac{-1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\vec{\xi}\vec{x}'} U(\vec{x}') \Phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x'. \quad (384)$$

Z Lippmann–Schwingerovy rovnice plyne, že časový vývoj vlnové funkce

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbf{R}^3} F(\vec{p}) e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} \Phi_{\vec{p}/\hbar}(\vec{x}) d^3p \quad (385)$$

lze zapsat jako součet (analogický (359))

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0(\vec{x}, t) + \psi_R(\vec{x}, t), \quad (386)$$

kde první člen představuje volně se pohybující vlnový balík zatímco druhý představuje rozptýlenou vlnu, která pro $t \gg t_0$ exponenciálně klesá k nule všude kromě tenké kulové slupky rozbíhající se z centra konstantní rychlostí.

Fyzikálně důležitá veličina pro prostorový rozptyl je **diferenciální účinný průřez** $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi)$ definovaný jako počet částic, které se rozptýlí za jednotku času do jednotkového prostorového úhlu okolo (θ, φ) při jednotkové intenzitě dopadajících částic. V kvantové mechanice je tato veličina dána pravděpodobností nalezení částice v oblasti prostoru vymezené prostorovým úhlem $d\Omega$. Z Bornova interpretačního postulátu pak plyne, že

$$d\sigma = d\Omega \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty |\psi(r, \theta, \varphi, t)|^2 r^2 dr \cdot \|\psi(t)\|^{-2} \quad (387)$$

Podobnými úvahami jako v podkapitole 9.1 lze ukázat, že

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = |f(\frac{\vec{p}_{out}}{\hbar}, \frac{\vec{p}_{in}}{\hbar})|^2}, \quad (388)$$

kde (θ, φ) jsou sférické souřadnice vektoru $\vec{p}_{out}$ v soustavě kde vektor $\vec{p}_{in}$ směřuje ve směru z . (Analogií tohoto vzorce v jednorozměrném případě jsou (367), (366)).

Obsah

1	Charakteristické rysy kvantové mechaniky	2
2	Zrod kvantové mechaniky	3
2.1	Planckův vyzařovací zákon	4
2.2	Fotoefekt	10
2.3	Comptonův rozptyl	11
2.4	Shrnutí	13
2.5	De Broglieova hypotéza a Schrödingerova rovnice	13
2.6	Bornova interpretace vlnové funkce	16
3	Popis stavů kvantové částice	17
3.1	Stavový prostor	17
3.1.1	Matematická vsuvka 1: Hilbertovy prostory	18
3.2	Pozorovatelné a jejich spektra	22
3.2.1	Matematická vsuvka 2: Operátory v Hilbertově prostoru	24
3.2.2	Energie harmonického oscilátoru	27
3.2.3	Složky momentu hybnosti kvantové částice	31
3.3	Stav kvantového systému	32
3.4	Kvantová částice v centrálně symetrickém potenciálu	35
3.4.1	Moment hybnosti	36
3.4.2	Radiální část vlnové funkce	38
3.4.3	Matematická vsuvka 3: Degenerovaná hypergeometrická funkce	39
3.4.4	Isotropní harmonický oscilátor	40
3.4.5	Coulombův potenciál	42
3.5	Posunovací operátory a bra-ketový formalismus	44
3.5.1	Jednorozměrný harmonický oscilátor.	45
3.5.2	Moment hybnosti	47
3.5.3	Bra-ketový formalismus	47
3.6	Zobecněné vlastní funkce	49
4	Výsledky měření	52
4.1	Střední hodnoty pozorovatelných a pravděpodobnosti přechodu	53
4.2	Střední kvadratická odchylka a relace neurčitosti	56
5	Časový vývoj kvantové částice	58
5.1	Rovnice kontinuity	58
5.2	Stacionární stavy	58
5.3	Integrály pohybu, časová derivace operátoru, Ehrenfestovy teoremy	60

6	Částice v elektromagnetickém poli. Spin	62
6.1	Částice v homogenním magnetickém poli	63
6.2	Vlastní magnetický moment a spin částice	64
6.3	Pauliho rovnice. Normální Zeemanův jev	68
6.4	Algebraická teorie momentu hybnosti	69
7	Systémy více částic	71
7.1	Systémy rozlišitelných částic	72
7.1.1	Problém dvou těles v kvantové mechanice	73
7.2	Skládání momentů hybnosti	75
7.3	Systémy nerozlišitelných částic, Pauliho princip	77
8	Přibližné metody výpočtu vlastních hodnot operátoru	80
8.1	Poruchová teorie pro nede degenerované čistě bodové spektrum	81
8.2	Poruchová teorie pro vícenásobná vlastní čísla	83
8.2.1	Starkův jev na vodíku	84
8.3	Struktura atomu, Hartreeho metoda	85
9	Potenciálový rozptyl, tunelový jev	88
9.1	Rozptyl částic na přímce	88
9.2	Tunelový jev pro pravoúhlou bariéru	92
9.3	Prostorový rozptyl	93