

Slabikář kvantové mechaniky

Ladislav Hlavatý a Martin Štefaňák

18. září 2018

Obáváme 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 neusilujeme o matematickou rigoróznost na současné úrovni znalostí, nýbrž zhruba o takovou, kterou používali „otcové zakladatelé“. To souvisí i s naším 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.

Obsah

1	Charakteristické rysy kvantové mechaniky	5
2	Zrod kvantové mechaniky	7
2.1	Planckův vyzařovací zákon	8
2.2	Fotoefekt	14
2.3	Comptonův rozptyl	15
2.4	Shrnutí	17
2.5	De Broglieova hypotéza a Schrödingerova rovnice	17
2.6	Bornova interpretace vlnové funkce	19
2.7	Dvouštěrbínový experiment	21
3	Stavy a pozorovatelné v kvantové mechanice	24
3.1	Stavový prostor	24
3.2	Matematická vsuvka 1: Hilbertovy prostory	25
3.3	Pozorovatelné a jejich spektra	29
3.4	Matematická vsuvka 2: Operátory v Hilbertově prostoru	31
4	Jednoduché kvantové systémy	34
4.1	Energie harmonického oscilátoru	34
4.2	Složky momentu hybnosti kvantové částice	38
5	Příprava stavu kvantové částice	40
5.1	Stav kvantového systému a měření	40
5.2	Kompatibilní pozorovatelné	42
6	Kvantová částice v centrálně symetrickém potenciálu	45
6.1	Moment hybnosti, kulové funkce	46
6.2	Radiální část vlnové funkce	48
6.3	Matematická vsuvka 3: Degenerovaná hypergeometrická funkce	49
6.4	Isotropní harmonický oscilátor	50
6.5	Coulombův potenciál	52
7	Zobecněné vlastní funkce	55

8	Bra-ketový formalismus a posunovací operátory	59
8.1	Bra-ketový formalismus	59
8.2	Vztah mezi ketem a vlnovou funkcí	62
8.3	Posunovací operátory	63
8.3.1	Lineární harmonický oscilátor	63
8.3.2	Moment hybnosti	66
9	Předpovědi výsledků měření	69
9.1	Pravděpodobnosti výsledků měření	69
9.1.1	Operátor s prostým čistě bodovým spektrem	69
9.1.2	Operátor s vícenásobným bodovým spektrem	70
9.1.3	Operátor se spojitým spektrem	71
9.2	Střední hodnoty pozorovatelných	72
9.3	Střední kvadratická odchylka a relace neurčitosti	74
9.4	Kvantová mechanika ve fázovém prostoru	76
10	Časový vývoj kvantové částice	78
10.1	Zachování normy a rovnice kontinuity	78
10.2	Stacionární stavy	79
10.3	Unitarita časového vývoje	81
10.4	Integrály pohybu, Ehrenfestovy teoremy	82
11	Částice v elektromagnetickém poli. Spin	85
11.1	Částice v homogenním magnetickém poli	86
11.2	Vlastní magnetický moment a spin částice	87
11.3	Pauliho rovnice. Normální Zeemanův jev	91
11.4	Algebraická teorie momentu hybnosti	93
12	Systémy více částic	96
12.1	Systémy rozlišitelných částic	96
12.1.1	Matematická vsuvka 4 - tenzorový součin Hilbertových prostorů	97
12.1.2	Problém dvou těles v kvantové mechanice	100
12.2	Skládání momentů hybnosti	101
12.2.1	Hyperjemná struktura základního stavu vodíku	104
12.2.2	Skládání orbitálního momentu hybnosti a spinu elektronu	106
12.3	Systémy nerozlišitelných částic, Pauliho princip	107
13	Přibližné metody výpočtu vlastních hodnot operátoru	112
13.1	Poruchová teorie pro nedegenerované čistě bodové spektrum	113
13.2	Poruchová teorie pro vícenásobná vlastní čísla	115
13.2.1	Starkův jev na vodíku	116
13.3	Struktura atomu, Hartreeho metoda	118
13.4	Jemná struktura vodíku. Anomální Zeemanův jev	120

13.4.1 Spin-orbitální vazba	121
13.4.2 Relativistická korekce	123
13.4.3 Jemná struktura vodíku	123
13.4.4 Anomální Zeemanův jev	124
14 Potenciálový rozptyl, tunelový jev	128
14.1 Rozptyl částic na přímce	128
14.2 Tunelový jev pro pravoúhlou bariéru	132
14.3 Prostorový rozptyl	133

Kapitola 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 (tj. 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 kvant jsou popsány prvky Hilbertova prostoru a pozorovatelné veličiny lineárními operátory na něm. Jakkoliv se zdá tento popis při prvním setkání nepřirozený a abstraktní, dává správné předpovědi experimentálních výsledků.

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 hustota pravděpodobnosti 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.

Kapitola 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} s) 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 [13], 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 představ 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 vodivé a 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 [13], 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

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0, \quad (2.1)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.2)$$

a okrajové podmínky, které vyžadují, aby tečné složky elektrického a normálové složky magnetického pole byly na stěnách dutiny nulové (viz např. [13] U9.1 a [14] I.2), tj.

$$\vec{N} \cdot \vec{E} = 0, \quad \vec{N} \times \vec{B} = 0, \quad (2.3)$$

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 (2.1)-(2.3). Z II. serie Maxwellových-Lorentzových rovnic plyne, že elektromagnetické pole lze popsat čtveřicí potenciálů $(\phi(\vec{x}, t), \vec{A}(\vec{x}, t))$ způsobem

$$\vec{E} = -\operatorname{grad} \phi' - \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t}, \quad \vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}'. \quad (2.4)$$

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

Kalibrační transformace

$$\phi(\vec{x}, t) = \phi'(\vec{x}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t}(\vec{x}, t) \quad (2.5)$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}'(\vec{x}, t) + \text{grad } \lambda(\vec{x}, t), \quad (2.6)$$

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

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \phi' \quad (2.7)$$

$$\Delta \lambda = -\text{div } \vec{A}' \quad (2.8)$$

spolu s okrajovými podmínkami na stěnách

$$\vec{N} \times \text{grad } \lambda = -\vec{N} \times \vec{A}'. \quad (2.9)$$

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. [14])

$$A_1(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3} Q_1(\vec{m}, t) \cos\left(\frac{m_1 x_1 \pi}{L}\right) \sin\left(\frac{m_2 x_2 \pi}{L}\right) \sin\left(\frac{m_3 x_3 \pi}{L}\right), \quad (2.10)$$

$$A_2(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3} Q_2(\vec{m}, t) \sin\left(\frac{m_1 x_1 \pi}{L}\right) \cos\left(\frac{m_2 x_2 \pi}{L}\right) \sin\left(\frac{m_3 x_3 \pi}{L}\right), \quad (2.11)$$

$$A_3(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3} Q_3(\vec{m}, t) \sin\left(\frac{m_1 x_1 \pi}{L}\right) \sin\left(\frac{m_2 x_2 \pi}{L}\right) \cos\left(\frac{m_3 x_3 \pi}{L}\right). \quad (2.12)$$

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 $\langle -L, L \rangle \times \langle -L, L \rangle \times \langle -L, L \rangle$ 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 $\langle -L, L \rangle$ lze provést pomocí funkcí $\sin\left(\frac{mx\pi}{L}\right)$, zatímco rozklad sudé funkce pomocí funkcí $\cos\left(\frac{mx\pi}{L}\right)$. Odtud plyne možnost rozkladu (2.10). Důležité je, že podmínka

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

už neklade na koeficienty rozvoje žádné dodatečné omezení na rozdíl od případu, kdy bychom užili jiné typy rozvojů, např. pomocí funkcí $\cos\left(\frac{m x \pi}{L}\right)$ pro sudá rozšíření A_1 v x_2, x_3 . Stejnou argumentací dostaneme rozklady funkcí A_2, A_3 způsobem (2.11), (2.12).

Z rovnic pro potenciály ve vybrané kalibraci

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} A_i - \Delta A_i = 0, \quad (2.13)$$

které dostaneme z (2.1), pak plyne, že koeficienty $\vec{Q}_{\vec{m}}(t) \equiv \vec{Q}(\vec{m}, t)$ pro $\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3$ (trojice celých nezáporných čísel) splňují jednoduché rovnice

$$\ddot{\vec{Q}}_{\vec{m}} + \omega_{\vec{m}}^2 \vec{Q}_{\vec{m}} = 0, \quad (2.14)$$

kde

$$\omega_{\vec{m}} = \frac{\pi c}{L} \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2} \quad (2.15)$$

a c je rychlost světla.

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

$$\vec{m} \cdot \vec{Q}_{\vec{m}} = 0, \quad (2.16)$$

ze kterého plyne, že pro každé $\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3$ existují dvě lineárně nezávislé funkce $Q_{\vec{m}}^\alpha(t)$, $\alpha = 1, 2$ splňující (2.14), (2.16), což odpovídá dvěma polarizacím elektromagnetického záření.

Cvičení 4. Ze vzorců (2.10)-(2.12) odvoďte formule pro složky elektrického a magnetického pole $\vec{E}(\vec{x}, t)$ a $\vec{B}(\vec{x}, t)$.

Energie elektromagnetického pole

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int (\varepsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2) dV$$

po dosazení (2.10)-(2.12) a integraci přejde na tvar

$$\mathcal{E} = \frac{\varepsilon_0 L^3}{16} \sum_{\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3} \sum_{\alpha=1,2} (\dot{Q}_{\vec{m}}^{\alpha 2} + \omega_{\vec{m}}^2 Q_{\vec{m}}^{\alpha 2}). \quad (2.17)$$

Z rovnic (2.14), (2.17) vidíme, že elektromagnetické pole v uzavřené dutině je ekvivalentní soustavě nezávislých harmonických oscilátorů (stojatých vln) číslovaných vektory $\vec{m} \in \mathbb{Z}_+^3$.

Elektromagnetické intenzity nejsou plně určeny, neboť nejsou dány žádné počáteční podmínky a není tedy ani možno určit energii elektromagnetického pole ani energie jednotlivých harmonických oscilátorů v sumě (2.17). 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. Pravděpodobnost výskytu oscilátoru ve stavu s s energií $\varepsilon(s)$ je dána Boltzmannovou statistikou s rozdělovací funkcí

$$P(s, T) = A(T) e^{-\frac{\varepsilon(s)}{kT}}, \quad (2.18)$$

kde k je Boltzmannova konstanta $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ a $A(T)$ je normalizační konstanta daná podmínkou

$$\sum_s P(s, T) = 1.$$

Nás budou zajímat střední hodnoty energií oscilátorů s vlastními frekvencemi $\nu = \frac{\omega_{\vec{m}}}{2\pi} = \frac{c\|\vec{m}\|}{2L}$

$$\overline{\varepsilon(\nu, T)} = \sum_s \varepsilon(s) P(s, T),$$

neboť energii elektromagnetických vln, jejichž frekvence leží v intervalu $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$, pak lze spočítat jako součet středních energií oscilátorů s frekvencemi v témže intervalu.

Jednotlivé oscilátory jsou číslovány celočíselnými vektory $\vec{m}$ a směrem polarizace α . Přiřadíme-li každé dvojici oscilátorů s pevným $\vec{m}$ bod v $\mathbb{Z}_+^3$, pak v důsledku (2.15) množina oscilátorů s frekvencemi v intervalu $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$ leží v jednom oktantu kulové slupky poloměru $2L\nu/c$ a tloušťky $2Ld\nu/c$ v prostoru vektorů v $\mathbb{Z}^3$. Energie oscilátorů s frekvencemi v intervalu $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$ je pak rovna součtu energií (2.17) avšak pouze přes body v této slupce, tedy

$$d\bar{\mathcal{E}} = 2 \frac{1}{8} \overline{\varepsilon(\nu, T)} 4\pi m^2 dm = \overline{\varepsilon(\nu, T)} \left(\frac{2L}{c} \right)^3 \pi \nu^2 d\nu = V \overline{\varepsilon(\nu, T)} \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu, \quad (2.19)$$

kde V je objem dutiny a c je rychlost světla. Hustota energie oscilátorů (elektromagnetického pole) s danou frekvencí tedy je

$$\rho(\nu, T) = \overline{\varepsilon(\nu, T)} \frac{8\pi}{c^3} \nu^2. \quad (2.20)$$

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

$$\overline{\varepsilon(\nu, T)} = kT \quad (2.21)$$

a energie pole v dutině připadající na interval frekvencí $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$ 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

$$\varepsilon = \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu \quad (2.22)$$

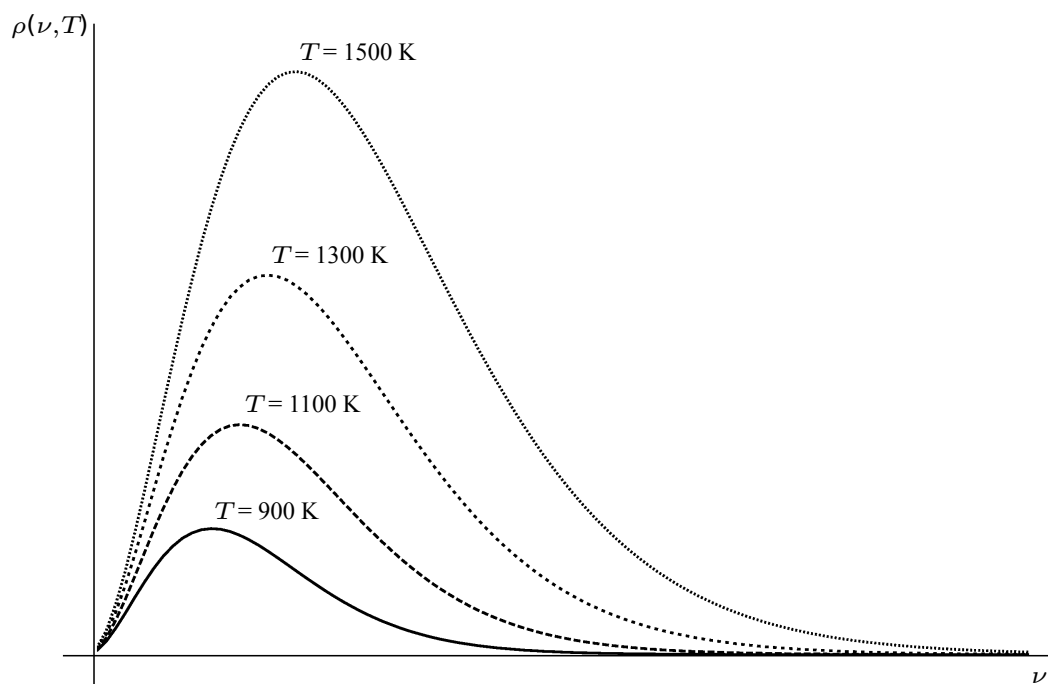
diverguje.

Cvičení 5. *Odvodte formuli (2.21).*

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

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (2.23)$$

kde experimentálně určená hodnota konstanty $h = 6.62 \times 10^{-34}$ Js (viz obr. 2.1).



Obrázek 2.1: Spektrální rozdělení hustoty energie absolutně černého tělesa pro teploty 900 K, 1100 K, 1300 K, 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 (2.23) 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. $E_n = n\varepsilon_0$. Základní kvantum energie oscilátoru je úměrné jeho frekvenci.*

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\nu) = h\nu.$$

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

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

Střední hodnota energie harmonických oscilátorů s frekvencí ν je pak

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

Energii elektromagnetického pole v dutině připadající na interval frekvencí $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$ pak opět spočítáme jako součin (2.19) střední hodnoty energie oscilátorů s frekvencí ν a počtu oscilátorů s frekvencemi uvnitř daného intervalu, z čehož dostaneme Planckovu formuli (2.23).

Celková hustota energie elektromagnetického pole (2.22) spočítaná z takto určené rozdělovací funkce nediverguje a její teplotní závislost odpovídá Stefanovu-Boltzmannovu zákonu.

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

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 diskrétních hodnot $E_n = nh\nu$, kde h je univerzální konstanta.*

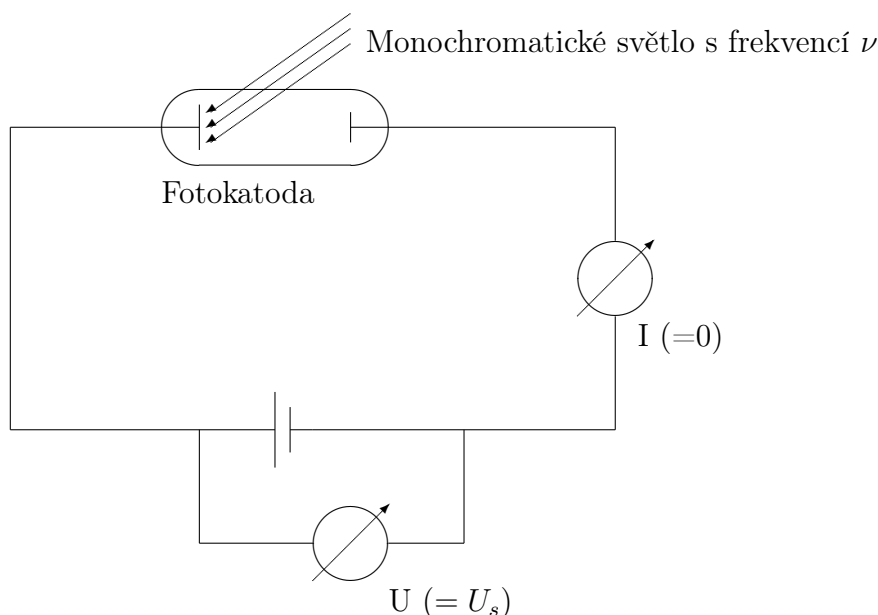
Uvědomme si, že jakkoliv je tento předpoklad zvláštní, není v rozporu s naší zkušeností, neboť díky velikosti Planckovy konstanty h jsou nespojitosti energií $h\nu$ i pro velmi rychlé mechanické oscilátory hluboko pod mezí pozorovacích chyb.

Existenci diskretních hodnot energie se podařilo prokázat i u atomů (konkrétně rtuti) v sérii pokusů Francka a Hertze v letech 1914-1919 (viz [14]).

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.

Popišme tento experiment v pozdějším uspořádání, které provedl Millikan v roce 1916 (viz obr. 2.2). 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 2.2: Millikanovo 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

$$E_{\text{kin}} = eU_s(\nu) = h(\nu - \nu_0) = E_{\text{foton}} - E_{\text{ion}}. \quad (2.24)$$

Pro frekvence nižší než $\nu_0 = E_{\text{ion}}/h$, 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 (2.24). 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

$$(\Delta\lambda)_{\text{klas}} = \lambda_0 \frac{cP_e}{E_e - cP_e} (1 - \cos \Theta), \quad (2.25)$$

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. 2.3).

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.

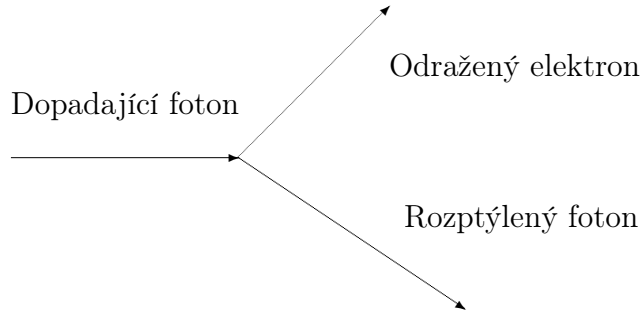
$$\varepsilon_{\nu_0} + m_e c^2 = \varepsilon_\nu + E_e \quad (2.26)$$

$$\vec{p}_{\nu_0} + 0 = \vec{p}_\nu + \vec{p}_e, \quad (2.27)$$

kde

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

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



Obrázek 2.3: Rozptyl elektromagnetického záření na elektronu

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

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \Theta), \quad (2.28)$$

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 2.4×10^{-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 změnil na

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{(\lambda_0 P_e + h)c}{\sqrt{m_e^2 c^4 + P_e^2 c^2} - P_e c}(1 - \cos \Theta). \quad (2.29)$$

Pro $P_e \gg h/\lambda$ dostáváme klasickou formuli (2.25). Comptonovy vzorce (2.29) resp. (2.28) se však experimentálně potvrdily i pro krátkovlnné rentgenové záření.

Závěr: Kvanty 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 které 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 rovinnou 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*

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x}, t) = Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)}, \quad (2.30)$$

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 $E = \frac{p^2}{2m}$ (případně $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ pro kvantum pohybující se rychlostí blízkou rychlosti světla), pak to znamená že de Broglieova vlna nesplňuje vlnovou rovnici (2.13), 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

$$p_j \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi, \quad E \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (2.31)$$

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

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \frac{p_j^2}{2m} \psi = -\frac{i}{2m\hbar} \sum_{j=1}^3 \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \right) \psi. \quad (2.32)$$

E. Schrödinger postuloval platnost rovnice

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \psi \quad (2.33)$$

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

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{x}) \psi} \quad (2.34)$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(\vec{x}) \quad (2.35)$$

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

Řešením Schrödingerovy rovnice (2.32) pro „vlnou kvantovou částicí“ (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 (2.32) i lineární superpozice de Broglievých vln odpovídajících různým hybnostem

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m} t \right)} d^3 p. \quad (2.36)$$

To je velmi důležité, neboť monochromatická vlna (2.30) 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

$$g(\vec{x}) = C \exp \left\{ -A\vec{x}^2 + \vec{B}\vec{x} \right\} \quad (2.37)$$

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 $\text{Re } A > 0$, $\vec{B} \in \mathbb{C}^3$, $C \in \mathbb{C}$.

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

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

je řešením Schrödingerovy rovnice pro částici v homogenním gravitačním poli (Avronova-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 Broglievovy 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 (2.30) 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

$$\psi(\vec{x}, t) = C e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} \chi(t)^{-3/2} \exp \left\{ -A \frac{\left(\vec{x} - \frac{\vec{B}}{2A} \right)^2}{\chi(t)} \right\} \quad (2.38)$$

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

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 g, jehož těžiště je lokalizováno s přesností 10^{-6} m?

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

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

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

$$w(x, y, z, t) = A(\psi)^{-1} |\psi(x, y, z, t)|^2, \quad (2.39)$$

kde

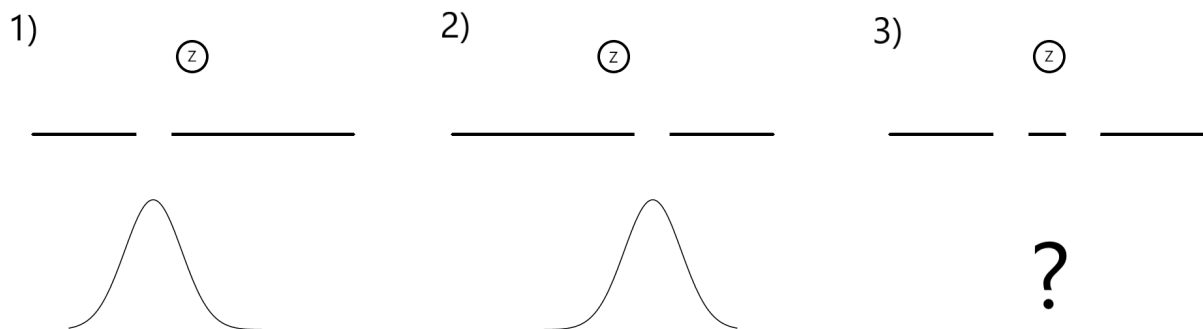
$$A(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz, \quad (2.40)$$

pokud tento integrál existuje.

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

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz < \infty. \quad (2.41)$$

Těmi se budeme v následujícím textu zabývat především.



Obrázek 2.4: Tři varianty experimentu - 1) pouze šterbina S_1 , 2) pouze šterbina S_2 , 3) obě šterbiny otevřené. Z představuje zdroj klasických částic, vlnění nebo kvantových částic. V poslední konfiguraci závisí průběh intenzity na stínítku na tom, s čím experiment provádíme.

2.7 Dvoušterbinový experiment

Na závěr této úvodní kapitoly si rozebereme dvoušterbinový experiment, na kterém lze krásně ilustrovat rozdíly mezi chováním klasických částic, klasické vlny a kvantových částic. V tomto experimentu měříme intenzitu na stínítku po průchodu šterbinami v překážce. Budeme uvažovat tři konfigurace experimentu (viz. obrázek 2.4): 1) jen šterbina S_1 , 2) jen šterbina S_2 , 3) obě šterbiny otevřené. V situacích 1) a 2) bude intezita na stínítku v bodě x dána nějakou funkcí $I_j(x)$, $j = 1, 2$, nezávisle na tom, s čím experiment provádíme. V poslední konfiguraci, kdy jsou obě šterbiny otevřené, tomu už tak nebude.

a) Klasické částice

Předpokládáme, že zdroj Z vysílá částice náhodně a rovnoměrně v rozmezí nějakého úhlu tak, aby mohly projít oběma šterbinami. V konfiguraci 1) a 2) je intenzita $I_j(x)$ úměrná pravděpodobnosti dopadu $p_j(x)$ jedné částice do místa x po průchodu šterbinou S_j . Pokud jsou otevřené obě šterbiny, je pravděpodobnost dopadu do x rovna součtu pravděpodobností $p_1(x)$ a $p_2(x)$. Intenzity se tedy sčítají

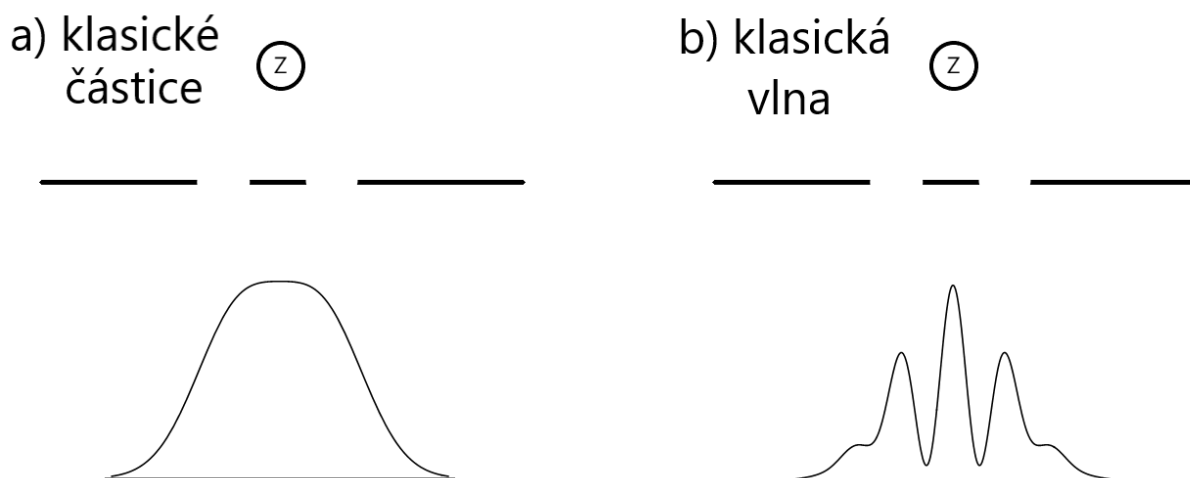
$$I_3(x) = I_1(x) + I_2(x).$$

Tvar výsledné intenzity je na obrázku 2.5 vlevo.

b) Klasická vlna

Vlnění po průchodu šterbinou S_j můžeme popsat nějakou komplexní funkcí (amplitudou) $A_j(x)$, intenzita na stínítku je pak dána kvadrátem absolutní hodnoty z amplitudy, tj. $I_j(x) = |A_j(x)|^2$. Ve třetí konfiguraci experimentu je amplituda vlny dána součtem amplitud

$$A_3(x) = A_1(x) + A_2(x).$$



Obrázek 2.5: Vlevo: Dvoušterbinový experiment s klasickými částicemi. Intenzity dopadů se sčítají. Vpravo: Dvoušterbinový experiment s klasickou vlnou. Sčítají se amplitudy, ne intenzity.

Výsledná intezita pak není součtem intezit $I_1(x)$ a $I_2(x)$, ale liší se o interferenční člen

$$I_3(x) = |A_3(x)|^2 = I_1(x) + I_2(x) + \overline{A_1}(x)A_2(x) + A_1(x)\overline{A_2}(x).$$

Ten může být kladný nebo záporný, v závislosti na vzájemné fázi amplitud $A_j(x)$. V některých bodech tedy dojde ke zvýšení intenzity (konstruktivní interference), v některých ke snížení (destruktivní interference), viz. interferenční obrazec na obrázku 2.5 vpravo.

c) Kvantové částice

V případě kvantových částic jsou intezity úměrné pravděpodobnostem dopadu do daného bodu, stejně jako pro klasické částice. Ta je dle Bornova postulátu dána kvadrátem absolutní hodnoty vlnové funkce, tedy $I_j(x) \sim |\psi_j(x)|^2$, kde $\psi_j(x)$ je vlnová funkce popisující stav částice po průchodu šterbinou S_j . Pokud jsou otevřené obě šterbiny, je vlnová funkce částice dána superpozicí

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x).$$

Stejně jako v případě vlnění se sčítají amplitudy a výsledná intezita dopadů vytváří interferenční obrazec

$$I_3(x) \sim |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \overline{\psi_1}(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\overline{\psi_2}(x),$$

podobně jako na obrázku 2.5 vpravo. **To platí i v případě, kdy tok kvantových částic (např. elektronů) bude velmi slabý, tj. kdy v experimentu je každém okamžiku maximálně jedna částice.** Na stínítko budou dopadat jednotlivé

elektrony náhodně podle pravděpodobnostního rozdělení $|\psi(x)|^2$ a interferenční obrazec se objeví po dostatečně dlouhém sbírání dat. Kvantová částice tedy „*interferuje sama se sebou*“.

Podstatné pro získání interferenčního obrazce je to, že v této konfiguraci experimentu není možné určit, kterou ze šterbin S_1 nebo S_2 částice prošla. Pokud se to pokusíme určit (resp. pokud je byť jen v principu možné informaci o trajektorii získat), experimenty ukazují, že interferenční obrazec zmizí. Uvažujme čtvrtou konfiguraci experimentu, kde mezi šterbiny umístíme zdroj světla. Elektrony budou se světlem interagovat a u šterbiny S_1 nebo S_2 uvidíme záblesk. Tímto měřením můžeme určit, kterou šterbinou elektron prošel. Stav elektronu pak už ale nebude popsán superpozicí $\psi_1(x) + \psi_2(x)$, ale jen vlnovou funkcí $\psi_1(x)$ nebo $\psi_2(x)$. Intezita dopadu elektronů na stínítko pak bude dána součtem intezit, stejně jako v pro klasické částice.

Závěrem můžeme říci, že mikroskopické objekty mají jak vlastnosti částic, tak vlastnosti vlnění. Tyto vlastnosti jsou ale komplementární - podle typu experimentu se chovají buď jako částice, nebo jako vlny, nikdy oboje naráz. Pokud se snažíme určit částicové vlastnosti (jako např. trajektorii v dvoušterbinovém experimentu) tak vlnové vlastnosti (jako interference) zmizí.

Kapitola 3

Stavy a pozorovatelné v kvantové mechanice

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 (2.34) popisuje časový vývoj kvantové částice, pak docházíme k závěru, že **okamžitý stav kvantové částice v $\mathbb{R}^3$ je určen komplexní funkcí tří proměnných** (Jak zvláštní!). Této funkci se obvykle říká *vlnová funkce částice*.

Bornova interpretace řešení Schrödingerovy rovnice klade na vlnové funkce jistá omezení. Podmínka (2.41) platí pro libovolný čas t a musíme proto požadovat, aby každá funkce $g(\vec{x})$ popisující stav kvantové částice splňovala podmínku ($\vec{x} \equiv (x, y, z)^T$)

$$\int_{\mathbb{R}^3} |g(\vec{x})|^2 d^3x < \infty. \quad (3.1)$$

Tyto funkce nazýváme *kvadraticky integrovatelné* (na $\mathbb{R}^3$ s mírou d^3x) a značíme $g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Mimo to funkce g a αg , kde $\alpha \in \mathbb{C}$ je libovolné nenulové 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

$$g(x, y, z) = Ae^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a_0}}, \quad (3.2)$$

kde $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$ cm je tzv. Bohrovův poloměr vodíku? Viz [2].

Díky Minkowského nerovnosti

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

jež platí pro funkce splňující (3.1), 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 popsaný funkcí $a\psi_1 + b\psi_2$, kde a, b jsou libovolná nenulová 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 (2.30) ve výše uvedeném prostoru?

Na lineárním vektorovém prostoru vlnových funkcí splňujících podmínku (2.41) 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.

3.2 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. *Sesquilineární formou* na komplexním lineárním vektorovém prostoru V (ne nutně konečně rozměrném) nazveme zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ splňující

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

$$F(\alpha f, g) = \alpha^* F(f, g), \quad F(f, \alpha g) = \alpha F(f, g),$$

kde $\alpha \in \mathbb{C}$, $f, g, h \in V$ a hvězdička značí komplexní sdružení.

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

$$F(g_1, g_2) \equiv (g_1, g_2) := \int_{\mathbb{R}^N} g_1^*(\vec{x}) g_2(\vec{x}) d^N x. \quad (3.3)$$

Definice 3.2. Zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ nazveme **symetrickou formou** pokud pro všechna $f, g \in V$ platí

$$F(g, f) = [F(f, g)]^* \stackrel{\text{ozn.}}{=} F^*(f, g) \quad (3.4)$$

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

Definice 3.3. Zobrazení $F : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ nazveme **pozitivní formou** pokud pro všechna $f \in V$ platí

$$F(f, f) \geq 0. \quad (3.5)$$

Pokud navíc

$$F(f, f) = 0 \Leftrightarrow f = 0, \quad (3.6)$$

pak tuto formu nazveme **pozitivně definitní**, resp. **striktně pozitivní**.

Příklad: Sesquilineární forma (3.3) je pozitivní (a tedy i symetrická).

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

$$|F(f, g)|^2 \leq F(f, f)F(g, g). \quad (3.7)$$

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

$$F(f + \alpha g, f + \alpha g) = 0 \text{ nebo } F(\alpha f + g, \alpha f + g) = 0. \quad (3.8)$$

Důkaz. Necht' $f, g \in V$. Pak z positivity a sesquilinearity dostaneme pro každé $\beta \in \mathbb{C}$

$$0 \leq F(f + \beta g, f + \beta g) = F(f, f) + \beta F(f, g) + \beta^* F(f, g)^* + |\beta|^2 F(g, g) \quad (3.9)$$

Pokud $F(f, f) = F(g, g) = 0$ pak volbou $\beta = -F^*(f, g)$ dostaneme (3.7). 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 $\beta = -\frac{F(g, f)}{F(g, g)}$ v (3.9), pak dostaneme nerovnost (3.7). Druhou část tvrzení dokážeme takto: Necht' platí první rovnost v (3.8). 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 (3.7) dává $|F(f, g)|^2 = F(f, f)F(g, g)$. Pokud naopak tato rovnost platí, pak pro $\alpha = -\frac{F(g, f)}{F(g, g)}$ je splněna první rovnost v (3.8). $\square$

Definice 3.4. Sesquilineární pozitivně definitní 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 $\mathbb{C}^N$ lze zavést skalární součin způsobem

$$F(x, y) \equiv (x, y) := \sum_{j=1}^N x_j^* y_j \quad (3.10)$$

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

Definice 3.5. *Unitární prostor, který je (v indukované metrice ρ) úplný se nazývá **Hilbertův**.*

Příklad: Prostor $\mathbb{C}^N$ se skalárním součinem (3.10) je Hilbertův.

Sesquilineární forma (3.3) 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 $L^2(\mathbb{R}^N, d^N x)$, na kterém pak (3.3) definuje skalární součin. V normě určené tímto skalárním součinem je navíc tento prostor úplný, a tedy Hilbertův. Je třeba rozlišovat $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N, d^N x)$ (obsahuje funkce) a $L^2(\mathbb{R}^N, d^N x)$ (obsahuje třídy ekvivalence).

Příklad: Prostor tříd kvadraticky integrovatelných funkcí na intervalu $(a, b) \subset \mathbb{R}$, kde a i b mohou být i $\pm\infty$, tj. $L^2((a, b), dx) \stackrel{\text{ozn.}}{=} L^2(a, b)$ se skalárním součinem

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

je Hilbertův.

V dalším textu obvykle nebudeme rozlišovat mezi kvadraticky integrabilními funkcemi a jím odpovídajícími třídami funkcí lišícími se na množině míry nula. Můžeme tedy shrnout, že **funkce (3.1) popisující stavy kvantové částice v $\mathbb{R}^3$ tvoří nekonečně rozměrný Hilbertův prostor $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3 x)$.**

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 izomorfní $\mathcal{H}$, přesněji, existuje kanonická antilineární bijekce $\mathcal{H}^* \leftrightarrow \mathcal{H}$, tj. $\mathcal{H}^* \cong \mathcal{H}$. Tento fakt je základem tzv. „bra-ketového formalismu“, který je v kvantové mechanice často používán, a se kterým se podrobněji seznámíme v kapitole 8.1.

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

Definice 3.6. *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 x z množiny M platí $\|x\| = 1$ nazveme ji **ortonormální**.*

Definice 3.7. 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 $\mathcal{H}$, tj. $M^\perp \subset \mathcal{H}$.

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

Důsledkem tohoto tvrzení je existence lineárního operátoru $E_{\mathcal{G}} : x \mapsto y$, který se nazývá **ortogonální projektor** na $\mathcal{G}$.

Definice 3.8. **Ortonormální bázi** nazveme ortonormální množinu B , jejíž ortogonální doplněk je nulový prostor, tj. $B^\perp = \{\vec{0}\} \subset \mathcal{H}$.

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 $\mathbb{R}$, $c := b - a$, $m \in \mathbb{Z}$. Funkce $f_m(x) := c^{-1/2} e^{2\pi i m x / c}$ jsou ortonormální bázi prostoru $L^2(a, b)$.

Definice 3.9. 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 (např. $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$), jsou **separabilní** - mají nejvýše spočetnou ortonormální bázi $B = (e_j)_{j=1}^\infty$. V takovýchto prostorech platí pro každé $f \in \mathcal{H}$

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} (e_j, f) e_j, \quad (3.11)$$

$$\|f\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |(e_j, f)|^2. \quad (3.12)$$

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

V kvantové mechanice hrají důležitou roli ortonormální báze, jejichž elementy jsou vlastní funkce nějakých operátorů. Příklady ortonormálních bází v nekonečně rozměrných Hilbertových prostorech ukážeme v dalších kapitolách.

Cvičení 23. Najděte ortonormální bázi v $\mathbb{C}^2$, jejíž prvky jsou vlastními vektory matice

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

Obecně můžeme shrnout popis možných stavů kvantové částice do následujícího postulu:

Postulát 1. *Stavový prostor kvantové částice je separabilní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$. Stav kvantové částice je popsán nenulovým vektorem $\psi \in \mathcal{H}$.*

Striktně vzato stavu kvantové částice odpovídá paprsek, tj. jednorozměrný podprostor v $\mathcal{H}$ (viz. postulát q1-b v [1]). Každý paprsek je ale jednoznačně určen nějakým nenulovým vektorem ψ . Vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci stavu v kvantové mechanice budeme (až na výjimky, kde to explicitně zmíníme) uvažovat normalizované vektory, tj. $\|\psi\| = 1$.

Volba Hilbertova prostoru závisí na konkrétním problému. Budeme ji provádět "intuitivně", např. pro částici v prostoru je přirozené zvolit $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, protože pak můžeme přímo interpretovat vlnové funkce $\psi(\vec{x}) \in \mathcal{H}$ jako amplitudy pravděpodobnosti nalezení částice v daném bodě prostoru. Analogicky, pro částici na přímce (např. lineární harmonický oscilátor) volíme $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$. V některých případech bude mít Hilbertův prostor konečnou dimenzi, např. pro spin $\frac{1}{2}$, který má dva jednoznačně rozlišitelné stavy (spin nahoru/dolů do pevně zvoleného směru), je $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

3.3 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. Možné hodnoty, které pro klasickou částici můžeme naměřit, jsou dány oborem hodnot této funkce. Např. kinetická energie stavu $(\vec{p}, \vec{q})$ je

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

a její obor hodnot je $\mathbb{R}^+$.

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 integrabilních 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 v $\mathbb{R}^3$ je **kartézským složkám polohy částice přiřazen operátor násobení nezávislou proměnnou**

$$(\hat{Q}_j \psi)(\vec{x}) := x_j \psi(\vec{x}) \quad (3.13)$$

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

$$(\hat{P}_j \psi)(\vec{x}) := -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}(\vec{x}) \quad (3.14)$$

Definici operátoru hybnosti už jsme de facto použili při odvozování Schrödingerovy rovnice (2.32) z de Broglieovy hypotézy.

Existuje mnoho zdůvodnění přiřazení (3.13), (3.14). V každém z nich je však třeba vyslovit nějaké předpoklady, které jsou více či méně ekvivalentní (3.13), (3.14).

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

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

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

Cvičení 24. *Napište operátory přiřazené složkám momentu hybnosti.*

Vzhledem k tomu, že $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ 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 $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ (takže například funkce z definičního oboru operátorů $\hat{P}_j$ musí být (skoro všude) diferencovatelné a jejich derivace musí být kvadraticky integrabilní). 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 $x \in \mathbb{R}$.

3.4 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 $\hat{T} : \text{Dom } \hat{T} \rightarrow \mathcal{H}$, kde $\text{Dom } \hat{T} \subset \subset \mathcal{H}$. Definiční obor zobrazení $\hat{T}$ budeme značit $\text{Dom } \hat{T}$, obor hodnot $\text{Ran } \hat{T}$. Je-li Hilbertův prostor konečné dimenze, pak je teorie lineárních zobrazení 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 $\text{Dom } \hat{T} = \mathcal{H}$, kde pruh značí uzávěr množiny ve smyslu topologie indukované metrikou $\mathcal{H}$ plynoucí ze skalárního součinu.

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

Definice 3.10. Lineární operátor $\hat{B} : \text{Dom } \hat{B} \rightarrow \mathcal{H}$ je **omezený**, pokud existuje $c > 0$ tak, že pro všechna $g \in \text{Dom } \hat{B}$ 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

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

je omezený operátor na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Navíc je bijekcí.

¹Tato definice vyhovuje pouze pro $g \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \cap L^1(\mathbb{R}^3, d^3x)$. Pro ostatní funkce je třeba jej spojitě dodefinovat [1].

Definice 3.11. 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

$$(\hat{B}^\dagger)^\dagger = \hat{B} \quad (3.15)$$

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

$$(a\hat{B} + \hat{C})^\dagger = a^* \hat{B}^\dagger + \hat{C}^\dagger, \quad (\hat{B}\hat{C})^\dagger = \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger. \quad (3.16)$$

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 3.12. 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 $g \in \text{Dom } \hat{T}$ platí

$$(f, \hat{T}g) = (h, g) \quad (3.17)$$

Odtud plyne, že má smysl zavést následující pojmy:

Definice 3.13. 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 (3.17), přičemž $\hat{T}^\dagger f := h$

Definice 3.14. Operátor $\hat{T}$ je **samosdružený**, pokud je hustě definovaný a $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$.

Je důležité odlišovat samosdružené operátory od symetrických.

Definice 3.15. Operátor $\hat{S}$ je **symetrický**, pokud je hustě definovaný a pro všechna $f, g \in \text{Dom } \hat{S}$ platí $(f, \hat{S}g) = (\hat{S}f, g)$, tj. $\text{Dom } \hat{S} \subset \text{Dom } \hat{S}^\dagger$.

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

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

Doplňme-li definici (3.14) 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 $\text{Dom } \hat{T} \neq \mathcal{H}$. Vztahy (3.16) musí být proto pro neomezené operátory náležitě modifikovány, stejně jako i (3.15).

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

Definice 3.16. *Spektrum $\sigma(\hat{T})$ operátoru $\hat{T}$ je množina komplexních čísel λ , pro které operátor $(\hat{T} - \lambda\hat{I})$ není bijekcí $\text{Dom } \hat{T} \mapsto \mathcal{H}$.*

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 $\hat{T} - \lambda\hat{I}$ není injektivní. Množinu vlastních čísel operátoru $\hat{T}$ nazýváme **bodovým spektrem** a značíme $\sigma_p(\hat{T})$. Mimo těchto bodů však do spektra patří i komplexní čísla, pro která operátor $\hat{T} - \lambda\hat{I}$ není surjektivní. Ty tvoří tzv. **spojité spektrum** $\sigma_c(\hat{T})$ (obor hodnot operátoru $\hat{T} - \lambda\hat{I}$ je hustý v $\mathcal{H}$) a **reziduální spektrum** $\sigma_r(\hat{T})$ (obor hodnot operátoru $\hat{T} - \lambda\hat{I}$ není hustý v $\mathcal{H}$). Pro samosdružené operátory je reziduální spektrum prázdné.

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 $\mathbb{R}$.*

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

Popis pozorovatelných v kvantové mechanice můžeme shrnout do následující postulátu:

Postulát 2. *Pozorovatelným veličinám v kvantové mechanice odpovídají samosdružené operátory na stavovém prostoru $\mathcal{H}$. Možné výsledky měření pozorovatelné tvoří spektrum příslušného operátoru.*

Spektrum (čistě spojité) každého z operátorů (3.13), (3.14) je $\mathbb{R}$ (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.

Kapitola 4

Jednoduché kvantové systémy

4.1 Energie harmonického oscilátoru

Ukážeme, že přiřazení (3.13), (3.14) a princip korespondence vysvětlují Planckův předpoklad o diskrétnosti spektra energie harmonického oscilátoru, což byl vedle výpočtu spektra vodíku (viz 6.5) 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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2. \quad (4.1)$$

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

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (4.2)$$

je diskrétní a odpovídá (až na jistou aditivní konstantu) Planckově hypotéze.

Operátor (4.1) je součtem tří operátorů

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \\ H_j &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx_j^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 x_j^2 \end{aligned}$$

a můžeme se pokusit hledat vlastní funkce operátoru (4.1) ve faktorizovaném tvaru

$$\psi(\vec{x}) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3). \quad (4.3)$$

Rovnice (4.2) pak přejde na tvar

$$(\hat{H}_1\psi_1)\psi_2\psi_3 + \psi_1(\hat{H}_2\psi_2)\psi_3 + \psi_1\psi_2(\hat{H}_3\psi_3) = E\psi_1\psi_2\psi_3. \quad (4.4)$$

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

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

pak získáme i vlastní čísla operátoru (4.1)

$$E = E_1 + E_2 + E_3. \quad (4.5)$$

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

Zkoumejme tedy napřed jednorozměrný případ, tedy operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 x^2. \quad (4.6)$$

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

Tvrzení 4.1. *Množina vlastních čísel operátoru (4.6) působícího v prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí jedné proměnné je tvořena reálnými čísly $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, kde $n \in \mathbb{Z}_+$. Pro každé n existuje až na multiplikativní konstantu právě jedna vlastní funkce*

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad (4.7)$$

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

$$H_n(z) := \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k (2z)^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!}, \quad (4.8)$$

kde $\lfloor r \rfloor$ je dolní celá část reálného čísla r .

Důkaz. Napřed je třeba nalézt čísla E , pro která existují kvadraticky integrabilní řešení $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ diferenciální rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{M}{2} \omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (4.9)$$

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

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}_+. \quad (4.10)$$

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

$$\phi'' - \xi^2 \phi + \lambda \phi = 0 \quad (4.11)$$

kde $\lambda := \frac{2E}{\hbar\omega}$.

Z teorie řešení lineárních diferenciálních rovnic plyne, že jediný bod, ve kterém mohou mít řešení rovnice (4.11) singularitu, je nekonečno. Snadno se lze přesvědčit, že pro $\xi \rightarrow \pm\infty$ se řešení této rovnice chová jako

$$\phi(\xi) = e^{\pm\xi^2/2}. \quad (4.12)$$

Je zřejmé, že kvadraticky integrabilní řešení může odpovídat pouze rychle ubývající funkci, tedy zápornému znaménku v exponentě (4.12). Zvolíme tedy ansatz

$$\phi(\xi) = e^{-\xi^2/2}u(\xi) \quad (4.13)$$

a budeme se zajímat o řešení rovnice

$$u'' = 2\xi u' + (1 - \lambda)u \quad (4.14)$$

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

Rozšíříme-li rovnici (4.14) 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

$$u(\xi) = \xi^s \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m, \quad a_0 \neq 0, \quad s \in \mathbb{Z}_+ \quad (4.15)$$

Jejím dosazením do (4.14) a porovnáním členů se stejnou mocninou ξ , dostaneme podmínky pro s a a_n

$$\begin{aligned} s(s-1) &= 0, \quad s(s+1)a_1 = 0 \\ a_{m+2} &= \frac{2(m+s)+1-\lambda}{(m+s+2)(m+s+1)}a_m \end{aligned} \quad (4.16)$$

Pokud čítec na pravé straně (4.16) je nenulový pro všechna m , pak se řada (4.15) pro $\xi \rightarrow \infty$ chová jako $\exp(\xi^2)$ a řešení rovnice (4.11) není kvadraticky integrovatelné. To lze usoudit např. z porovnání rekurentní formule (4.16) pro dosti velká m se stejným vztahem pro koeficienty řady $\exp(\xi^2)$. Kvadraticky integrabilní řešení mohou existovat pouze tehdy, pokud řada (4.15) je konečná, tj. existuje N takové, že $a_m = 0$ pro $m > N$. To nastane tehdy a jen tehdy, když

$$a_1 = 0, \quad 2(N+s)+1-\lambda = 0, \quad N \text{ sudé nezáporné.} \quad (4.17)$$

V tom případě se nekonečná řada stane polynomem stupně $n = N + s$ a funkce (4.13) je kvadraticky integrabilní.

Z podmínky (4.17) plyne, že rovnice (4.14) má kvadraticky integrovatelné řešení tehdy a jen tehdy, pokud $\lambda = 1 + 2n$, takže rovnice (4.9) má kvadraticky integrovatelné řešení tehdy a jen tehdy pokud platí (4.10).

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

$$H_n(\xi) = \sum_{m=s}^n h_m^{(n)} \xi^m \quad (4.18)$$

jež řeší rovnici (4.14) jsou pak určeny rekurentním vztahem

$$h_{m+2}^{(n)} = 2 \frac{m-n}{(m+2)(m+1)} h_m^{(n)}, \quad (4.19)$$

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 (4.19) je

$$h_{n-2k}^{(n)} = (-1)^k 2^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!}, \quad k = 0, 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor, \quad (4.20)$$

□

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

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

$$H_n(z) := (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \quad (4.21)$$

Návod: Ukažte že pravá strana (4.21) splňuje rovnici (4.14).

Cvičení 30. Ukažte, že

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

Důsledkem tvrzení 4.1 je, že energie kvantového jednorozměrného harmonického oscilátoru s potenciálem $V(x) = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2$ může nabývat pouze hodnot z diskrétní množiny $\{\hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \mid n \in \mathbb{Z}_+\}$.

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 (4.1). Z rozkladu (4.4) je zřejmé, že funkce

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2, x_3) \equiv \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \psi_{n_3}(x_3), \quad (4.22)$$

kde $\psi_n(x)$ jsou dány vzorcem (4.7), jsou vlastními funkcemi operátoru (4.1) s vlastními čísly

$$E_N = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad N = n_1 + n_2 + n_3.$$

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 4.2. Množina vlastních funkcí operátoru (4.6)

$$\psi_n(x) = \frac{K}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}x\right), \quad K = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \quad (4.23)$$

je ortonormální bází v Hilbertově prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $L^2(\mathbb{R}, dx)$.

Tvrzení 4.3. Množina funkcí (4.22), kde $\psi_n(x)$ jsou dány vzorcem (4.23) je ortonormální bází v Hilbertově prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$.

Z tvrzení 4.2 a 4.3 rovněž plyne, že spektra hamiltoniánů (4.6) a (4.1) jsou čistě bodová ([1, 7.3.9]). Nejsou však stejná. Množina vlastních hodnot hamiltoniánu (4.6) — operátoru energie jednorozměrného harmonického oscilátoru — se liší od spektra trojrozměrného oscilátoru. Obsahuje navíc hodnotu $\frac{1}{2}\hbar\omega$. 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 (4.1) s vlastním číslem $E_{N=2} = \frac{7}{2}\hbar\omega$ je tvořen lineárním obalem funkcí (4.22), 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 (4.1) s vlastním číslem $E_N = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$ je $\frac{(N+1)(N+2)}{2}$.

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 vytvořující funkce ze cvičení 30 ukažte, že

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

Ukažte, že odtud plyne ortonormalita funkcí (4.23).

4.2 Složky momentu hybnosti kvantové částice

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

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl} \hat{Q}_k \hat{P}_l = -i\hbar \varepsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}. \quad (4.24)$$

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

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (4.25)$$

$$\psi(x, y, z) = \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (4.26)$$

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

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (4.27)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(\sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (4.28)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.29)$$

Vzhledem k tomu, že osy x, y, z jsou zcela rovnocenné musí mít i všechny operátory $\hat{L}_j$ stejné vlastní hodnoty. Technicky nejjednodušší však je hledat spektrum operátoru $\hat{L}_z$, neboť to znamená řešit jednoduchou diferenciální rovnici

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi(r, \theta, \varphi) = \mu \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (4.30)$$

Její řešení je

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) e^{\frac{i}{\hbar} \mu \varphi}, \quad (4.31)$$

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

$$\Psi(r, \theta, \varphi = 0) = \Psi(r, \theta, \varphi = 2\pi).$$

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

$$\mu = m\hbar, \quad \text{kde } m \in \mathbb{Z}. \quad (4.32)$$

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

Kapitola 5

Příprava stavu kvantové částice

5.1 Stav kvantového systému a měření

V Hamiltonově formulaci klasické mechaniky je stav částice určen její polohou a hybností. To jsou pozorovatelné veličiny, které je možné změřit v experimentu. Stav klasické částice je tedy sám o sobě přímo pozorovatelný.

V kvantové mechanice už to ale neplatí. Stav částice je popsán nenulovým vektorem z nějakého Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$, zatímco pozorovatelným veličinám odpovídají samosdružené operátory na $\mathcal{H}$. Jedná se o matematicky zcela jiné objekty. Kvantové částici musíme stav přiřadit na základě výsledků měření nějakých pozorovatelných veličin. Otázkou je, jaká měření musíme při přípravě stavu provést, aby byl určen jednoznačně.

Uvažujme nyní kvantový lineární harmonický oscilátor, který jsme studovali v kapitole 4.1. Víme, že spektrum hamiltoniánu, tj. možné hodnoty výsledků měření energie, je tvořeno vlastními čísly $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$. Každé vlastní hodnotě odpovídá jeden vlastní vektor ψ_n , přesněji, jednorozměrný podprostor komplexního Hilbertova prostoru. Jeví se tedy přirozené říci, že pokud naměříme energii oscilátoru rovnou E_n , jeho stav bude popsán vlnovou funkcí $\psi_n(x)$.

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.*

Tento princip můžeme obecněji formulovat v následujícím postulátu (pro jednoduchost se zatím omezíme na pozorovatelné s čistě bodovými spektry):

Postulát 3. *Po měření pozorovatelné $\hat{A}$ s výsledkem a_j je stav kvantové částice popsán vektorem $\frac{\hat{P}_j \psi}{\|\hat{P}_j \psi\|}$, kde ψ je normovaný stav částice před měřením a $\hat{P}_j$ je ortogonální projektor na podprostor odpovídající vlastní hodnotě a_j . Pravděpodobnost výsledku a_j je rovna $\|\hat{P}_j \psi\|^2$.*

Pro pozorovatelné s prostým spektrem, kdy každé vlastní hodnotě a_j odpovídá (až na fázi) jeden normovaný vlastní vektor ψ_j

$$\hat{A}\psi_j = a_j\psi_j,$$

působí ortogonální projektor $\hat{P}_j$ na vektor ψ způsobem

$$\hat{P}_j\psi = (\psi_j, \psi)\psi_j.$$

Stav částice po měření s výsledkem a_j je pak popsán vlastním vektorem ψ_j , protože

$$\frac{\hat{P}_j\psi}{\|\hat{P}_j\psi\|} = \frac{(\psi_j, \psi)}{|(\psi_j, \psi)|}\psi_j = e^{i\phi}\psi_j,$$

a fázový faktor $e^{i\phi}$ je irrelevantní. Pravděpodobnost tohoto výsledku měření je

$$\|\hat{P}_j\psi\|^2 = |(\psi_j, \psi)|^2.$$

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

Logickým důsledkem postulátu je to, že stav částice se může aktem měření **nevratně změnit**. Uvažujme opět LHO, který je ve stavu superpozice

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1). \quad (5.1)$$

Tento stav není vlastní vektor hamiltoniánu, takže energie oscilátoru není jednoznačně určena. Z postulátu 3 pak plyne, že pokud budeme měřit energii oscilátoru ve stavu (5.1), můžeme dostat pouze hodnoty $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, nebo $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Obě možnosti mají pravděpodobnost 50%, protože

$$\|\hat{P}_n\psi\|^2 = |(\psi_n, \psi)|^2 = \begin{cases} \frac{1}{2}, & n = 0, 1 \\ 0, & n \neq 0, 1 \end{cases}.$$

Po měření musíme změnit popis stavu - podle výsledku bude stav LHO popsán buď vlastním vektorem ψ_0 , nebo ψ_1 . Na tomto příkladu je vidět další rozdíl mezi stavem částice v klasické a kvantové mechanice, pokud jde o výsledky měření pozorovatelných. V klasické mechanice každý stav jednoznačně určuje hodnoty všech pozorovatelných, měření pak pouze odhalí jejich objektivní hodnotu. Naproti tomu, stav kvantové částice určuje potenciální možnosti výsledků měření pozorovatelných. Pokud stav není vlastní vektor dané pozorovatelné, její hodnota není jednoznačně určena. Měření náhodně vyberu jednu z možností a popis stavu musíme změnit odpovídajícím způsobem. Kvantová mechanika nám umožní určit pravděpodobnosti jednotlivých výsledků, ale nedokáže předpovědět výsledek jednoho konkrétního měření. Jedinou výjimkou je, pokud stav částice je vlastní vektor pozorovatelné, kterou měříme. V takovém případě je výsledkem měření s jistotou odpovídající vlastní číslo a stav částice se nezmění.

5.2 Kompatibilní pozorovatelné

V případě LHO jsou vlastní funkce ψ_n určeny jednoznačně vlastním číslem E_n (až na multiplikativní konstantu, která nemá při jejich interpretaci žádný význam). Všechny ortogonální projektory $\hat{P}_n$ jsou tedy jednorozměrné. To znamená, že po měření energie je stav kvantového LHO určen jednoznačně - je popsán vlastním vektorem ψ_n bez ohledu na předchozí stav oscilátoru. Pro izotropní oscilátor už to ale neplatí. Až na základní stav je spektrum energií degenerované - energii E_N odpovídá $D_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$ lineárně nezávislých vlastních vektorů ψ_{n_1, n_2, n_3} , pro které platí $n_1 + n_2 + n_3 = N$. D_N je i dimenze podprostoru, na který projektuje ortogonální projektor $\hat{P}_N$, jenž odpovídá hodnotě měření energie s výsledkem E_N . Projektor $\hat{P}_N$ působí na vektor ψ způsobem

$$\hat{P}_N \psi = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \\ n_1 + n_2 + n_3 = N}} (\psi_{n_1, n_2, n_3}, \psi) \psi_{n_1, n_2, n_3}.$$

Stav izotropního oscilátoru po měření energie ale stále částečně závisí na jeho stavu před měřením, který obecně neznáme. Pro určení stavu kvantové částice ve více rozměrech musíme 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.

Aby byla příprava stavu kvantové částice s více stupni volnosti jednoznačná (tj. nezávislá na stavu před měřením), musíme měřit více fyzikálních veličin. Při jejich výběru je třeba být opatrnější než u částice klasické. V analogii s klasickou mechanikou by přirozeným postupem při kinematickém popisu kvantové částice, např. elektronu, bylo zjistit, jakou vlnovou 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).

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

Přiblížme si kompatibilitu na příkladu dvou pozorovatelných $\hat{A}$ a $\hat{B}$ s čistě bodovými spektry. Řekněme, že změříme pozorovatelnou $\hat{A}$ a dostaneme nějakou vlastní hodnotu a_i . Poté změříme pozorovatelnou $\hat{B}$ a dostaneme hodnotu b_j . Pozorovatelné budou kompatibilní, pokud při opakování měření $\hat{A}$ nebo $\hat{B}$ dostaneme vždy tytéž hodnoty a_i a b_j . To

zjevně platí, pokud $\hat{A}$ a $\hat{B}$ mají společné vlastní vektory

$$\hat{A}\psi_{m,n} = a_m\psi_{m,n}, \quad (5.2)$$

$$\hat{B}\psi_{m,n} = b_n\psi_{m,n}, \quad (5.3)$$

kteřé jsou pro každou dvojici vlastních čísel a_m a b_n určeny jednoznačně a tvoří ortonormální bázi stavového prostoru. Po první sadě měření $\hat{A}$ a $\hat{B}$ s výsledky a_i a b_j je stav částice podle postulátu 3 popsán společným vlastním vektorem $\psi_{i,j}$. Opakování měření $\hat{A}$ nebo $\hat{B}$ vždy zreprodukuje původní výsledek a stav částice se nezmění. Lze tedy říci, že kompatibilní pozorovatelné mají současně dobře definované („ostré“) hodnoty - ve stavu $\psi_{i,j}$ má pozorovatelná $\hat{A}$ hodnotu a_i a pozorovatelná $\hat{B}$ hodnotu b_j . V tomto smyslu je můžeme „měřit současně“.

Zatím jsme uvažovali pozorovatelné s čistě bodovými spektry, pro které kompatibilita znamená existenci ortonormální báze tvořené jejich společnými vlastními vektory. Snadno to ale převedeme na ekvivalentní podmínku, kterou lze použít i pro pozorovatelné se spojitým spektrem. Pokud na rovnici (5.2) aplikujeme operátor $\hat{B}$, na rovnici (5.3) aplikujeme operátor $\hat{A}$, pak jejich odečtením dostaneme identitu

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_{m,n} = 0, \quad \forall m, n. \quad (5.4)$$

Protože vektory $\psi_{m,n}$ tvoří ortonormální bázi, znamená to že, operátor na levé straně 5.4 je roven nule. Kompatibilní pozorovatelné jsou tedy takové, že jim přiřazené operátory komutují

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (5.5)$$

Zatím jsme uvažovali dvě kompatibilní pozorovatelné. Rozšíření na K veličin je přímočaré. Řekneme, že pozorovatelné $(A^{(1)} \dots, A^{(K)})$ jsou kompatibilní právě tehdy když jim přiřazené operátory vzájemně komutují

$$[\hat{A}^{(j)}, \hat{A}^{(k)}] = 0, \quad j, k = 1, \dots, K. \quad (5.6)$$

V klasické mechanice jsou všechny pozorovatelné kompatibilní, protože každá veličina má v každém stavu jednoznačně určenou hodnotu. V kvantové mechanice tomu tak ale není. Například, pokud hybnostem a polohám částice přiřadíme operátory (3.13) a (3.14), pak docházíme k závěru (který je třeba experimentálně ověřit), že měření polohy a hybnosti v jednom směru nejsou kompatibilní, neboť

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (5.7)$$

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

Dalším příkladem nekompatibilních pozorovatelných jsou složky momentu hybnosti, pro které platí komutační relace

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k. \quad (5.8)$$

Složky momentu hybnosti tedy nemají společné vlastní vektory. Pokud změříme hodnotu projekce momentu hybnosti do směru osy z , pak hodnoty projekce do os x a y určené nejsou.

Cvičení 38. Jsou kompatibilní složky polohy v různých směrech?

Množině kompatibilních fyzikálních veličin, jejichž měření jednoznačně určí kvantový stav, říkáme *úplná množina pozorovatelných* a jim odpovídající množina operátorů se nazývá *úplný soubor komutujících operátorů*. Pro operátory s čistě bodovými spektry platí následující tvrzení:

Tvrzení 5.1. 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 $(\alpha_{i_1}^{(1)}, \dots, \alpha_{i_K}^{(K)})$ je rozměr podprostoru společných vlastních vektorů roven jedné.

Důkaz. Důkaz je proveden v [1], Věta 14.2.2. □

Po změření pozorovatelných tvořící úplnou množinu s výsledky $\alpha_{i_1}^{(1)}, \dots, \alpha_{i_K}^{(K)}$ je stav částice popsán společným vlastním vektorem $\psi_{i_1, \dots, i_K}$ operátorů $\hat{A}^{(1)}, \dots, \hat{A}^{(K)}$, který splňuje rovnice

$$\hat{A}^{(j)} \psi_{i_1, \dots, i_K} = \alpha_{i_j}^{(j)} \psi_{i_1, \dots, i_K}, \quad j = 1, \dots, K. \quad (5.9)$$

Výsledný stav nezávisí na pořadí, v jakém jsou pozorovatelné $A^{(j)}$ měřené, ani na stavu částice před měřením. Z kompatibility pozorovatelných $A^{(j)}$ totiž plyne, že ortogonální projektory $\hat{P}_{\alpha_{i_j}^{(j)}}$ pro různá j komutují. Protože je to úplná množina, je projektor

$$\hat{P}_{\alpha_{i_1}^{(1)}, \dots, \alpha_{i_K}^{(K)}} = \hat{P}_{\alpha_{i_1}^{(1)}} \cdots \hat{P}_{\alpha_{i_K}^{(K)}},$$

který odpovídá jejich společnému měření, jednodimenzionální.

Poznamenejme, že úplná množina pozorovatelných pro daný fyzikální systém (například 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 reinterpretace 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.

Kapitola 6

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \hat{V}(r), \quad (6.1)$$

kde

$$[\hat{V}(r)\psi](x, y, z) := V\left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right)\psi(x, y, z). \quad (6.2)$$

Ukážeme, že pokud hamiltonián (6.1) 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 39. Spočítejte komutátory

$$[\hat{L}_j, \hat{Q}_k], [\hat{L}_j, \hat{P}_k], [\hat{L}_j, \hat{L}_k], \quad (6.3)$$

kde

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl}\hat{Q}_k\hat{P}_l. \quad (6.4)$$

Cvičení 40. Ukažte, že vzájemně komutují operátory (6.1), $\hat{L}_3 \equiv \hat{L}_z$ a

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (6.5)$$

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

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (6.6)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (6.7)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \right] + \hat{V}(r) \quad (6.8)$$

Cvičení 41. *S použitím vzorců (4.27)-(4.29) ukažte, že operátor $\hat{L}^2$ má ve sférických souřadnicích tvar (6.7).*

Cvičení 42. *Dokažte formuli (6.8).*

6.1 Moment hybnosti, kulové funkce

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

$$\hat{L}^2 \psi = \lambda \psi \quad (6.9)$$

a zároveň vlastními funkcemi operátoru $\hat{L}_z$. Z vyjádření operátoru $\hat{L}^2$ ve tvaru (6.7) plyne, že řešením rovnice (6.9) budou kvadraticky integrovatelné funkce $\Psi(r, \theta, \varphi)$, které splňují parciální diferenciální rovnici

$$\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{\lambda}{\hbar^2} \Psi = 0. \quad (6.10)$$

Vzhledem k tomu, že hledáme řešení (6.9), která jsou zároveň vlastními funkcemi operátoru $\hat{L}_z$ a ty jsme v podkapitole 4.2 našli ve tvaru

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (6.11)$$

budeme hledat řešení rovnice (6.9) rovněž v tomto faktorizovaném tvaru.

Rovnice (6.10) přejde faktorizací (6.11) na obyčejnou diferenciální rovnici

$$\frac{d}{dt} \left[(1-t^2) \frac{dF}{dt} \right] + \left(\frac{\lambda}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-t^2} \right) F = 0, \quad (6.12)$$

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 oprátor $\hat{L}^2$ ve sférických souřadnicích nezávisí na r . Podmínka integrability (2.41) pro F v tomto případě zní

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz &= \int_{\langle 0, \infty \rangle \times \langle 0, \pi \rangle \times \langle 0, 2\pi \rangle} |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \\ &= 2\pi \int_{\langle 0, \infty \rangle \times \langle 0, \pi \rangle} |\chi(r, \theta)|^2 \sin \theta dr d\theta = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 |F(r, t)|^2 r^2 dr dt < \infty. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Definiční obor operátoru $\hat{L}^2$ však tvoří pouze funkce konečné na jednotkové kouli, takže F pro dané r musí být rovněž konečná na $\langle -1, 1 \rangle$.

Řešení rovnice (6.12) je poměrně pracné (viz např. [3], str. 70–72). Dá se vyjádřit způsobem

$$F(r, t) = (t^2 - 1)^{|m|/2} U(r, \frac{t+1}{2}), \quad (6.14)$$

kde U je funkce na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ splňující Gaussovu diferenciální rovnici

$$x(x-1) \frac{d^2 U}{dx^2}(r, x) + (a+bx) \frac{dU}{dx}(r, x) + cU(r, x) = 0, \quad (6.15)$$

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

$$U(r, x) = R_1(r)U_1(x) + R_2(r)U_2(x), \quad (6.16)$$

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 $\langle 0, 1 \rangle$. Podmínku konečnosti funkce F lze splnit pouze když U je polynom v x . Podobným postupem jako pro harmonický oscilátor pak dostaneme podmínky

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2, \quad l \in \mathbb{Z}_+, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad |m| \leq l. \quad (6.17)$$

Řešení rovnice (6.12) v tomto případě má tvar

$$F(r, t) = R(r)P_l^m(t), \quad (6.18)$$

kde P_l^m jsou přidružené Legendrovy funkce definované způsobem

$$P_l^m(t) := \frac{(1-t^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}}(t^2-1)^l. \quad (6.19)$$

Cvičení 43. Ukažte, že funkce $f_{lm}(\theta) := P_l^m(\cos \theta)$ jsou polynomy v $\sin \theta$ a $\cos \theta$.

Funkce

$$\boxed{Y_{lm}(\theta, \varphi) := C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}}, \quad (6.20)$$

které jsou řešením (6.10) 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**

$$\{Y_{lm} : l \in \mathbb{Z}_+, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad |m| \leq l\},$$

kde

$$|C_{lm}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}, \quad (6.21)$$

tvorí ortonormální bázi v prostoru funkcí kvadraticky integrovatelných na jednotkové kouli, přesněji v $L_2(\langle 0, \pi \rangle \times \langle 0, 2\pi \rangle, \sin \theta d\theta d\varphi)$. Odtud plyne, že spektrum operátoru $\hat{L}^2$ je čistě bodové a je tvořeno množinou

$$\sigma(\hat{L}^2) = \sigma_p(\hat{L}^2) = \{l(l+1)\hbar^2 : l \in \mathbb{Z}_+\}. \quad (6.22)$$

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 kvantovými čísly (l, m) , předpovědět **pravděpodobnost nalezení částice v daném prostorovém úhlu Ω**

$$dw = w(\theta, \varphi) d\Omega = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (6.23)$$

Cvičení 44. Odvoďte pravděpodobnosti nalezení částice v daném prostorovém úhlu pro stavy s, p, d .

6.2 Radiální část vlnové funkce

Ze vzorců (6.11), (6.18), (6.20) plyne, že vlnová funkce, která je současně vlastní funkcí $\hat{L}_z$ a $\hat{L}^2$ má tvar

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.24)$$

Tato faktorizace vlnové funkce je užitečná zejména pro výpočet energetického spektra částice v poli centrálních sil, neboť hamiltonián (6.1) má ve sférických souřadnicích tvar (6.8) a díky (6.7) jej lze vyjádřit způsobem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2 \right] + \hat{V}(r). \quad (6.25)$$

Použijeme-li faktorizaci vlnové funkce (6.24), 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

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) \right] + V_{\text{ef}}(r) R(r) - E R(r) = 0, \quad (6.26)$$

kde

$$V_{\text{ef}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (6.27)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \chi''(r) + V_{\text{ef}}(r) \chi(r) - E \chi(r) = 0, \quad (6.28)$$

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

$$\int_{\mathbb{R}_+} |\chi(r)|^2 dr < \infty. \quad (6.29)$$

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

$$\chi(0) = 0, \quad (6.30)$$

která plyne např. z požadavku konečnosti a jednoznačnosti funkce $\psi(\vec{x}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ v bodě 0. Tato podmínka rovněž zaručuje samosdruženost operátoru (6.8) (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 (6.28) je možná až tehdy, zadáme-li konkrétní tvar potenciálu $V(r)$.

6.3 Matematická vsuvka 3: Degenerovaná hypergeometrická funkce

Pro hledání vlastních hodnot operátoru energie budeme potřebovat řešení diferenciální rovnice

$$xy''(x) + (ax + b)y'(x) + cy(x) = 0, \quad a \neq 0. \quad (6.31)$$

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

$$zw''(z) + (\gamma - z)w'(z) - \alpha w(z) = 0, \quad (6.32)$$

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

Z teorie diferenciálních rovnic v komplexním oboru (shrnutí viz [3], dodatek D) plyne, že řešení (6.32) lze v okolí nuly zapsat jako řadu

$$w(z) = z^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad a_0 \neq 0. \quad (6.33)$$

Dosazením (6.33) do (6.32) a porovnáním koeficientů u mocnin z dostaneme

$$s(s - 1 + \gamma)a_0 = 0 \quad (6.34)$$

$$(n + s + 1)(n + s + \gamma)a_{n+1} = (n + s + \alpha)a_n, \quad n \geq 0. \quad (6.35)$$

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

Pro $s = 0$ a $\gamma \neq -n \in \mathbb{Z}_-$ má řada (6.33) tvar $a_0 F(\alpha, \gamma, z)$, kde

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{1!\gamma} z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)} z^2 + \dots \quad (6.36)$$

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

$$w(z) = z^{1-\gamma} F(\alpha + 1 - \gamma, 2 - \gamma, z). \quad (6.37)$$

Pro necelá γ je obecným řešením rovnice (6.32)

$$w(z) = A_1 F(\alpha, \gamma, z) + A_2 z^{1-\gamma} F(\alpha + 1 - \gamma, 2 - \gamma, z), \quad (6.38)$$

takže obecným řešením rovnice (6.31) pro necelá b je

$$y(x) = C_1 F\left(\frac{c}{a}, b, -ax\right) + C_2 x^{1-b} F\left(\frac{c}{a} + 1 - b, 2 - b, -ax\right). \quad (6.39)$$

Vzhledem k tomu, že $\frac{a_n}{a_{n-1}} \rightarrow \frac{1}{n}$, chovají se degenerované hypergeometrické funkce pro $z \rightarrow \infty$ jako e^z , přesněji (viz [17])

$$F(\alpha, \gamma, z \rightarrow +\infty) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} [1 + O(|z|^{-1})]. \quad (6.40)$$

Pro $z \rightarrow -\infty$

$$F(\alpha, \gamma, z \rightarrow -\infty) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} [1 + O(|z|^{-1})]. \quad (6.41)$$

6.4 Isotropní harmonický oscilátor

V kapitole 4.1 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 oscilátoru

$$V(r) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 \quad (6.42)$$

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 (6.28) stejně jako u lineárního harmonického oscilátoru bezrozměrnou proměnou $\xi = \frac{r}{a}$, kde $a = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}$, dostaneme pro $\Phi(\xi) = \chi(r)$ diferenciální rovnici

$$\Phi''(\xi) - \left(\xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right) \Phi(\xi) + \frac{2E}{\hbar\omega} \Phi(\xi) = 0. \quad (6.43)$$

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

$$\Phi(\xi) = \xi^{l+1} e^{-\xi^2/2} w(\xi^2), \quad (6.44)$$

a dostaneme rovnici pro $w(z)$, $z = \xi^2$ ve tvaru (6.32)

$$zw''(z) + (\gamma - z)w'(z) - \alpha w(z) = 0, \quad (6.45)$$

kde $\alpha = l/2 + 3/4 - \frac{E}{2\hbar\omega}$, $\gamma = l + 3/2$. Zajímají nás kvadraticky integrabilní řešení této rovnice splňující podmínku (6.30). Obecné řešení rovnice (6.45) pro necelá γ má tvar (6.38), takže řešení, které vyhovuje podmínce (6.30) 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 $\alpha = -n \in \mathbb{Z}_-$. V těchto případech přejde degenerovaná hypergeometrická funkce na tzv. *zobecněné Laguerrovy polynomy*

$$L_n^{\gamma-1}(z) = \binom{n+\gamma-1}{n} F(-n, \gamma, z), \quad (6.46)$$

definované též způsobem

$$L_n^\beta(z) := \frac{1}{n!} e^z z^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{n+\beta}). \quad (6.47)$$

Zjistili jsme tedy, že **vlastní hodnoty operátoru energie harmonického oscilátoru jsou $(2n + l + \frac{3}{2})\hbar\omega$ 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 $n, l \in \mathbb{Z}_+$, $m \in \{-l, \dots, l\}$ mají tvar**

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = C_{nlm} \xi^l e^{-\xi^2/2} L_n^{l+1/2}(\xi^2) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (6.48)$$

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

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = K_{nl} \xi^l e^{-\xi^2/2} L_n^{l+1/2}(\xi^2) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (6.49)$$

a zvolíme-li

$$|K_{nl}| = \frac{2}{\pi^{1/4}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \left(\frac{2^{n+l} n!}{(2n+2l+1)!!} \right)^{1/2} \quad (6.50)$$

a Y_{lm} jsou normalizovány k jedné (viz (6.21)), pak tyto funkce jsou rovněž normalizovány k jedné.

Cvičení 45. Napište všechny vlnové funkce pro stavy s energiemi $\frac{3}{2}\hbar\omega$, $\frac{5}{2}\hbar\omega$ a $\frac{7}{2}\hbar\omega$, 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 $(N + 3/2)\hbar\omega$, to jest počet stavů se stejnou energií, je $\frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$. Tento výsledek jsme již dostali v paragrafu 4.1, kde $N = n_1 + n_2 + n_3$.

6.5 Coulombův potenciál

Další velmi důležitý problém je spektrum energie pro potenciál

$$V(r) = -\frac{Q}{r}, \quad Q > 0, \quad (6.51)$$

neboť jej lze použít k popisu hladin energií elektronu v obalu atomu vodíku. 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 (6.51), kde $Q = e^2/(4\pi\varepsilon_0)$, kde e je elementární náboj a ε_0 je permitivita vakua. Dosadíme-li (6.51) do (6.27), pak rovnice (6.28) přejde na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\chi''(r) + \left[-\frac{Q}{r} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r) = E\chi(r). \quad (6.52)$$

Substitucí

$$\chi(r) = r^{l+1}w(r)e^{\kappa r}, \quad (6.53)$$

kde

$$\kappa^2 = -\frac{2ME}{\hbar^2} \quad (6.54)$$

převědeme tuto rovnici na tvar

$$rw''(r) + 2(l+1+\kappa r)w'(r) + 2\left[(l+1)\kappa + \frac{MQ}{\hbar^2}\right]w(r) = 0, \quad (6.55)$$

což je opět rovnice pro degenerované hypergeometrické funkce (6.31). Řešení splňující podmínku (6.30) je podle (6.39)

$$w(r) = C_1 F\left(l+1 + \frac{MQ}{\hbar^2\kappa}, 2l+2, -2\kappa r\right). \quad (6.56)$$

Podmínka kvadratické integrability pak zní

$$\kappa < 0, \quad l+1 + \frac{MQ}{\hbar^2\kappa} = -n \in \mathbb{Z}_-, \quad (6.57)$$

odkud díky (6.54) plyne, že **vlastní hodnoty operátoru energie kvantové částice v coulombickém poli (6.51) jsou**

$$E_N = E_{n,l} = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2(n+l+1)^2} = -\frac{R}{N^2}, \quad n, l \in \mathbb{Z}_+, \quad N \in \mathbb{N}. \quad (6.58)$$

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 $Q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ a M je hmota elektronu, je $R = 2,184 \times 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$. Degenerovaná hypergeometrická funkce (6.56) pro (6.57) 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 $l(l+1)\hbar^2$, $m\hbar$**

$$l \in \{0, \dots, N-1\}, \quad m \in \{-l, \dots, l\} \quad (6.59)$$

má tvar

$$\Psi_{N,l,m}(r, \theta, \varphi) = K_{Nl} \left(\frac{2r}{Na} \right)^l e^{-\frac{r}{Na}} L_{N-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{Na} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (6.60)$$

kde $a = \frac{\hbar^2}{|Q|M}$, K_{Nl} je normalizační konstanta, L_n^α jsou zobecněné Laguerrovy polynomy a Y_{lm} jsou kulové funkce. Konstanta a , mající rozměr délky, se nazývá *Bohrův poloměr*. Pro vodík je $a = 0,53 \times 10^{-8} \text{ cm}$. Zvolíme-li normovací konstantu jako

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

je množina vlastních funkcí (6.60) ortonormální, tj. platí

$$(\Psi_{Nlm}, \Psi_{N'l'm'}) = \delta_{N,N'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}.$$

Netvoří ale bázi Hilbertova prostoru $L^2(\mathbb{R}_+ \times (0, \pi) \times (0, 2\pi), r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi)$. Důvod je v tom, že hamiltonián pro částici v Coulombově poli má vedle bodové i spojitou část spektra $\sigma_c(\hat{H}) = \langle 0, \infty \rangle$. Přiřazení vlnových funkcí této části spektra se věnuje podkapitola 7.

Cvičení 46. Napište všechny vlnové funkce pro stavy s energiemi $-R$, $-R/4$, $-R/9$.

Cvičení 47. Porovnejte základní stav klasické a kvantové částice v Coulombově poli.

Z výrazu (6.58) je zřejmé, že všechny stavy (6.60), pro které (l, m) leží v množině (6.59) mají tutéž energii. Degenerace hladiny energie s daným N , neboli počet stavů s energií $-R/N^2$, je

$$D_N = \sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = N^2. \quad (6.61)$$

Hodnoty energie (6.58) částice v coulombickém 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

$$\nu = \text{konst} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (6.62)$$

objevený ještě před vznikem kvantové mechaniky. 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

$$\nu = \frac{(E_{N_2} - E_{N_1})}{2\pi\hbar} = \frac{MQ^2}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{N_1^2} - \frac{1}{N_2^2} \right), \quad (6.63)$$

kde $Q = e^2/4\pi\epsilon$. Numerická hodnota *Rydbergovy frekvence* $\nu_R = MQ^2/(4\pi\hbar^3)$ je v tomto případě $3.3 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ a pro $N_1 = 1, 2, \dots$, pak dostáváme frekvence, jež jsou v dobré shodě s naměřenými hodnotami Lymanovy ($N_1 = 1$), Balmerovy ($N_1 = 2$), $\dots$ serie.

Kapitola 7

Zobecněné vlastní funkce

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

$$\hat{P}_j \phi = p_j \phi \quad j = 1, 2, 3 \quad (7.1)$$

dává diferenciální rovnice

$$-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = p_j \phi \quad j = 1, 2, 3, \quad (7.2)$$

které mají řešení

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = A e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}. \quad (7.3)$$

Problém je v tom, že tyto funkce nejsou kvadraticky integrovatelné pro žádné $\vec{p} \in \mathbb{C}^3$. To znamená, že složky operátoru hybnosti v Hilbertově prostoru stavových funkcí $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ 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 bodově, části spektra.

Přiřazení vlnových funkcí hodnotám fyzikálních veličin způsobem (5.9) 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 **Schwartzův prostor** $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ obsahující tzv. *rychle ubývající funkce*, pro něž platí: $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ a

$$\|\psi\|_{\vec{j}, \vec{k}} = \sup \left| x_1^{j_1} x_2^{j_2} x_3^{j_3} \frac{\partial^{k_1}}{\partial x_1^{k_1}} \frac{\partial^{k_2}}{\partial x_2^{k_2}} \frac{\partial^{k_3}}{\partial x_3^{k_3}} f \right| < \infty \quad (7.4)$$

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

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) \equiv (\mathcal{F}\psi)(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) d^3x \quad (7.5)$$

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

$$\psi(\vec{x}) = (\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi})(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3p, \quad (7.6)$$

odkud snadno dostaneme, že platí

$$(\mathcal{F}\psi, \mathcal{F}\phi) = (\psi, \phi) \quad (7.7)$$

Pro $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ můžeme definovat „skalární součin“ $(\phi_{\vec{p}}, \psi)$ stejně jako kdyby $\phi_{\vec{p}}$ ležely v $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$(\phi_{\vec{p}}, \psi) = A^* \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) d^3x = A^* (2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}} (\mathcal{F}\psi)(\vec{p}), \quad (7.8)$$

neboť tento integrál je Fourierovou transformací funkce ψ , která je definována pro všechny funkce z $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Zobecněné vlastní funkce hybnosti tak můžeme chápat jako temperované distribuce, tj. spojitě lineární funkcionály na prostoru testovacích funkcí $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Rovnice pro funkcionály $\Phi_{\vec{p}} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)^*$ má tvar

$$(\hat{P}_j \Phi_{\vec{p}})(\psi) = (\hat{P}_j \phi_{\vec{p}}, \psi) = (\phi_{\vec{p}}, \hat{P}_j \psi) = p_j (\phi_{\vec{p}}, \psi) = p_j \Phi_{\vec{p}}(\psi), \quad \forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3). \quad (7.9)$$

Její řešení má tvar (7.3). Tyto funkce pak nazýváme **zobecněné vlastní funkce hybnosti**. Dá se ukázat, že je můžeme libovolně přesně aproximovat funkcemi z $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$. To je také důvod proč je s úspěchem můžeme použít k popisu tzv. rozptylových stavů (viz kap. 14), jež jsou určeny počáteční a konečnou hybností.

Cvičení 48. *Nechť*

$$\phi_{p,\varepsilon}(x) := \frac{A}{2\varepsilon} \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x} = A e^{\frac{i}{\hbar}px} \frac{\hbar}{\varepsilon x} \sin \frac{\varepsilon x}{\hbar}. \quad (7.10)$$

Ukažte, že platí

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\phi_{p,\varepsilon}, \psi) = A^* \sqrt{2\pi\hbar} \tilde{\psi}(p), \quad \forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

Z definice Fourierovy transformace (7.5) a její inverze lze jednoduchým výpočtem ukázat, že

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} d^3z = \delta(\vec{x}-\vec{y}). \quad (7.11)$$

Odtud plyne důležitá vlastnost funkcí (7.3), totiž že je lze „normalizovat k δ -funkci“, neboť pro $A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$ platí

$$(\phi_{\vec{p}'}, \phi_{\vec{p}}) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) \phi_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) d^3x = \delta(\vec{p}-\vec{p}'). \quad (7.12)$$

Pro tuto volbu konstanty A je skalární součin (7.8) přímo roven Fourierově transformaci funkce ψ . Můžeme pak odvodit následující identitu

$$\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (\phi_{\vec{p}}, \psi) \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) d^3p,$$

která připomíná rozklad vektoru do ortonormální báze.

Ještě výraznější je „zobecněnost“ vlastních funkcí operátoru polohy částice. Rovnice

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

má za řešení funkce, které jsou nenulové pouze pro $x_j = a_j$. Takové funkce jsou však v $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ ekvivalentní nulové funkci. V rámci distribucí ale rovnice má řešení, je jím Diracova δ -funkce

$$\delta_{\vec{a}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{a}), \quad (7.13)$$

která působí na testovací funkce $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ způsobem

$$(\delta_{\vec{a}}, \psi) = \psi(\vec{a}).$$

Snadno ověříme, že skutečně platí

$$(\hat{Q}_j \delta_{\vec{a}}, \psi) = (\delta_{\vec{a}}, \hat{Q}_j \psi) = a_j (\delta_{\vec{a}}, \psi), \quad \forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3). \quad (7.14)$$

Podobně jako zobecněné vlastní funkce operátoru hybnosti (7.3) i zobecněné vlastní funkce operátoru polohy (7.13) lze libovolně přesně aproximovat funkcemi z prostoru $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$.

Cvičení 49. *Necht*

$$\delta_{a,\varepsilon}(x) := \begin{cases} 0 & \text{pro } |x - a| > \varepsilon \\ \frac{1}{2\varepsilon} & \text{pro } |x - a| \leq \varepsilon \end{cases} \quad (7.15)$$

Ukažte, že platí

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\delta_{a,\varepsilon}, \psi) = \psi(a), \quad \forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

Analogicky vztahu (7.12) platí rovnost

$$(\delta_{\vec{a}'}, \delta_{\vec{a}}) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \delta_{\vec{a}}(\vec{x}) \delta_{\vec{a}'}(\vec{x}) d^3x = \delta(\vec{a} - \vec{a}'), \quad (7.16)$$

tedy i zobecněné vlastní funkce polohy jsou normalizovány k δ -funkci. Identity (7.12) a (7.16) je třeba chápat jako rovnosti na prostoru lineárních funkcionalů na $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ a zápis pomocí integrálů je poněkud formální.

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

$$\phi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (7.17)$$

kde $k = \pm \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$, Y_{lm} jsou kulové funkce (6.20) a

$$R_{kl}(r) = C_{kl} r^l e^{ikr} F\left(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k}, 2l+2, -2ikr\right). \quad (7.18)$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^{2l} e^{i(k'-k)r} F^*\left(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k}, 2l+2, -2ikr\right) F\left(l+1 - i\frac{MQ}{\hbar^2 k'}, 2l+2, -2ik'r\right) r^2 dr \\ = K_{kl} \delta(k - k'), \end{aligned} \quad (7.19)$$

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 spojitě části spektra pozorovatelných je možno provést pomocí projektorů [1].

Kapitola 8

Bra-ketový formalismus a posunovací operátory

8.1 Bra-ketový formalismus

V kvantové mechanice často nepotřebujeme znát explicitní tvar vlnové funkce $\psi(x)$ popisující stav částice. Stačí vědět, že stav je vlastní vektor nějakých pozorovatelných (resp. superpozice vlastních vektorů) a znát příslušná kvantová čísla. Vhodný způsob pro takový popis stavu kvantové částice představuje Diracův bra-ketový formalismus, se kterým se nyní seznámíme.

Uvažujme abstraktní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$. Vektory z $\mathcal{H}$ budeme značit pomocí tzv. ketů - $|\psi\rangle$. Skalární součin dvou vektorů $|\psi\rangle$ a $|\varphi\rangle$ zapíšeme ve tvaru $\langle\psi|\varphi\rangle$. Prvky duálního prostoru $\mathcal{H}^*$ (spojité lineární funkcionály) označíme jako tzv. bra - $\langle\psi|$. Díky Rieszově lemmatu je každý bra $\langle\psi|$ jednoznačně spojený s ketem $|\psi\rangle$ pomocí skalárního součinu (skalární součin = závorka = bracket = $\langle\text{bra}|\text{ket}\rangle$)

$$\langle\psi| \left(|\phi\rangle \right) = \langle\psi|\phi\rangle, \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Příklad: Uvažujme $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ se standardním skalárním součinem. Označme vektory standardní báze pomocí ketů

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Příslušné bra dostaneme jejich hermitovským sdružením

$$\langle 1| = |1\rangle^\dagger = (1, 0), \quad \langle 2| = |2\rangle^\dagger = (0, 1).$$

Kety $|1\rangle$ a $|2\rangle$ jsou ortonormální, tj. platí

$$\langle 1|1\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = 0, \quad \langle 2|2\rangle = 1.$$

Pomocí braketového formalismu můžeme snadno zapsat i operátory. Platí totiž následující vztahy

$$|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Speciálně operátor $|i\rangle\langle i|$ je ortogonální projektor na podprostor určený ketem $|i\rangle$. Libovolný operátor $\hat{A}$ v $\mathbb{C}^2$ pak můžeme zapsat ve tvaru

$$\hat{A} = A_{1,1}|1\rangle\langle 1| + A_{1,2}|1\rangle\langle 2| + A_{2,1}|2\rangle\langle 1| + A_{2,2}|2\rangle\langle 2|.$$

Čísla $A_{i,j}$ jsou koeficienty matice operátoru $\hat{A}$ ve standardní bázi.

Příklad: Uvažujme nyní Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ dimenze n , $\hat{A}$ bude hermitovský operátor s prostým spektrem. Označme jeho vlastní vektory pomocí ketů $|i\rangle$, ty splňují vztahy

$$\hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle,$$

kde a_i jsou příslušná vlastní čísla. Množina vektorů $\{|1\rangle, \dots, |n\rangle\}$ tvoří ortonormální bázi $\mathcal{H}$, což můžeme zapsat pomocí relací ortogonality

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij},$$

a relací úplnosti (resp. rozkladu jednotky)

$$\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| = \hat{I}.$$

Z těchto vztahů pak snadno plyne Fourierův rozvoj do ortonormální báze

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \left(\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| \right) |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \langle i|\psi\rangle |i\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H},$$

a Parsevalova rovnost

$$||\psi||^2 = \langle \psi|\psi\rangle = \langle \psi| \left(\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| \right) |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \langle \psi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |\langle i|\psi\rangle|^2.$$

Pro operátor $\hat{A}$ pak platí spektrální rozklad

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^n a_i |i\rangle\langle i|. \tag{8.1}$$

Jak známo z lineární algebry, matice operátoru v bázi jeho vlastních vektorů je diagonální a na diagonále jsou vlastní čísla. Jiný operátor $\hat{B}$, který s $\hat{A}$ nekomutuje, už diagonální nebude

$$\hat{B} = \hat{I}\hat{B}\hat{I} = \left(\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| \right) \hat{B} \left(\sum_{j=1}^n |j\rangle\langle j| \right) = \sum_{i,j=1}^n \langle i|\hat{B}|j\rangle |i\rangle\langle j|.$$

Čísla $\langle i|\hat{B}|j\rangle$ jsou maticové elementy operátoru $\hat{B}$ v bázi ketů $\{|1\rangle, \dots, |n\rangle\}$. Poznamenejme, že libovolnou funkci f operátoru $\hat{A}$ můžeme pomocí spektrálního rozkladu (8.1) zapsat ve tvaru

$$f(\hat{A}) = \sum_{i=1}^n f(a_i) |i\rangle \langle i|.$$

V kvantové mechanice typicky pracujeme se separabilními Hilbertovými prostory se spočetnou ortonormální bází. Vztahy známé z lineární algebry jako rozklad jednotky, Fourierův rozvoj, Parsevalova rovnost nebo spektrální rozklad operátoru (s čistě bodovým spektrem) v nich platí podobně, jen je třeba konečné sumy nahradit nekonečnými řadami. Vyvstává pak otázka jejich konvergence, která je ale zaručena úplností Hilbertova prostoru.

Uvažujme nyní kvantový lineární oscilátor. Označme vlastní vektory hamiltoniánu pomocí ketů $|n\rangle$, pro které platí

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n \in \mathbb{Z}_+. \quad (8.2)$$

Množina vlastních vektorů $\{|n\rangle, n \in \mathbb{Z}_+\}$ tvoří ortonormální bázi Hilbertova prostoru, což můžeme zapsat pomocí relací ortogonality a relací úplnosti

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{I}.$$

Vztah mezi abstraktním ketem $|n\rangle$ a funkcí ψ_n popíšeme v následující části.

Analogicky jako na konečné dimenzi platí Fourierův rozvoj a Parsevalova rovnost

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\psi\rangle |n\rangle, \quad \langle \psi|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \psi|n\rangle|^2, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Hamiltonián je v bázi svých vlastních vektorů (v tzv. energetické reprezentaci) diagonální

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |n\rangle \langle n|.$$

Operátory polohy a hybnosti v energetické reprezentaci diagonální nejsou

$$\hat{Q} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle n|\hat{Q}|m\rangle |n\rangle \langle m|, \quad \hat{P} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle n|\hat{P}|m\rangle |n\rangle \langle m|.$$

Maticové elementy $\langle n|\hat{Q}|m\rangle$, resp. $\langle n|\hat{P}|m\rangle$, lze snadno spočítat s využitím posunovacích operátorů, které si představíme v části 8.3.1.

Podobně jako v případě lineárního oscilátoru můžeme zavést kety pro libovolný kvantový systém. Do ketů typicky zapisujeme kvantová čísla, která označují vlastní čísla relevantních pozorovatelných. Například společné vlastní vektory operátorů $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$, označíme pomocí ketů $|l, m\rangle$ (odpovídající kulovým funkcím Y_{lm}), pro které platí

$$\begin{aligned} \hat{L}_3|l, m\rangle &= \hbar m|l, m\rangle, \\ \hat{L}^2|l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \quad l \in \mathbb{Z}_+, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad |m| \leq l. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Kety $|l, m\rangle$ tvoří bázi uvažovaného Hilbertova prostoru, tj. platí

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}, \quad \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |l, m\rangle \langle l, m| = \hat{I}$$

Operátory $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ jsou v této bázi diagonální

$$\hat{L}_3 = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \hbar m |l, m\rangle \langle l, m|, \quad \hat{L}^2 = \sum_{l=0}^{\infty} \hbar^2 l(l+1) \sum_{m=-l}^l |l, m\rangle \langle l, m|.$$

Operátory $\hat{L}_{1,2}$ diagonální nejsou

$$\hat{L}_{1,2} = \sum_{l,l'=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{m'=-l'}^{l'} \langle l', m' | \hat{L}_{1,2} | l, m \rangle |l', m'\rangle \langle l, m|,$$

jejich maticové elementy lze opět snadno spočítat pomocí posunovacích operátorů, viz. část [8.3.2](#).

8.2 Vztah mezi ketem a vlnovou funkcí

V této části se podíváme na souvislost mezi popisem stavu kvantové částice pomocí abstraktního ketu $|\psi\rangle$ a pomocí vlnové funkce $\psi(\vec{x})$. Zobecněným vlastním vektorům polohy, resp. hybnosti, přiřadíme kety $|\vec{x}\rangle$, resp. $|\vec{p}\rangle$. Tyto kety splňují rovnice

$$\langle \vec{x} | \hat{Q}_j | \psi \rangle = x_j \langle \vec{x} | \psi \rangle, \quad \langle \vec{p} | \hat{P}_j | \psi \rangle = p_j \langle \vec{p} | \psi \rangle,$$

a jsou normované k δ -funkci, tj. platí ¹

$$\langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad \langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}').$$

Tyto vztahy představují analogii relací ortogonalit pro prvky ortonormální báze. Podobně platí pro kety i analogie relací úplnosti ve tvaru

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \hat{I}, \quad \int_{\mathbb{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \hat{I}.$$

Libovolný ket $|\psi\rangle$ pak můžeme rozložit do „báze“ zobecněných vlastních vektorů polohy způsobem

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle,$$

tj. identifikujeme vlnovou funkci s Fourierovým koeficientem

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle.$$

¹Srovnej s (7.9), (7.12), (7.14), (7.16).

O vlnové funkci $\psi(\vec{x})$ pak mluvíme jako o $\vec{x}$ -reprezentaci (resp. „souřadnicové reprezentaci“) stavu $|\psi\rangle$. Vztah mezi ketem $|n\rangle$ a funkcí ψ_n pak je $\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$. Podobným způsobem můžeme rozepsat ket $|\psi\rangle$ do „báze“ zobecněných vlastních vektorů hybnosti

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{p} | \psi \rangle |\vec{p}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle,$$

kde

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle,$$

je $\vec{p}$ -reprezentace (resp. „impulsová reprezentace“) stavu $|\psi\rangle$. Pro úplnost si ukážeme, že funkce ψ a $\tilde{\psi}$ jsou spojeny Fourierovou transformací. Postupně najdeme

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right) |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi_{\vec{p}}^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) = (\mathcal{F}\psi)(\vec{p}). \end{aligned} \quad (8.4)$$

8.3 Posunovací operátory

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

$$[\hat{B}, \hat{A}] = \Delta \hat{A}. \quad (8.5)$$

Důvod pro tento název spočívá v tom, že pokud λ je vlastní hodnota operátoru $\hat{B}$ a $|\lambda\rangle$ příslušný vlastní vektor, pak z (8.5) ihned plyne

$$\hat{B}\hat{A}|\lambda\rangle = (\lambda + \Delta)\hat{A}|\lambda\rangle, \quad (8.6)$$

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

Ze vztahu (8.5) 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 alespoň jeden vlastní vektor $|\lambda\rangle$ operátoru $\hat{B}$ takový, že $\hat{A}|\lambda\rangle \neq 0$ pak $\Delta \in \mathbb{R}$.

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

8.3.1 Lineární harmonický oscilátor

Budeme se zajímat o posunovací operátory pro hamiltonián LHO

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2. \quad (8.7)$$

Z komutačních relací mezi $\hat{H}$ a operátorem polohy a hybnosti lze odvodit, že posunovací operátory pro $\hat{H}$ lze zapsat ve tvaru

$$\hat{a}_{\pm} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\hat{Q} \mp \frac{i}{M\omega} \hat{P} \right), \quad (8.8)$$

neboť platí

$$[\hat{H}, \hat{a}_{\pm}] = \pm \hbar\omega \hat{a}_{\pm}. \quad (8.9)$$

Obecně jsou posunovací operátory podmínkou (8.5) určeny až na multiplikativní konstantu. Faktor $\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}$ ve vztahu (8.8) je vhodně zvolen tak, že pro komutátor $\hat{a}_-$ a $\hat{a}_+$ platí

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{I}. \quad (8.10)$$

Označme vlastní vektory $\hat{H}$ pomocí ketů $|n\rangle$ jako ve vztahu (8.2). Posunovací operátory na ně působí takto

$$\hat{a}_{\pm}|n\rangle = \alpha_n^{\pm}|n \pm 1\rangle, \quad (8.11)$$

kde $\alpha_n^{\pm}$ jsou čísla ($|n\rangle$ je normován k jedné, ale $\hat{a}_{\pm}|n\rangle$ obecně normovaný k jedné být nemusí). 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*.

Pomocí kreačního a anihilačního operátoru můžeme zpětně vyjádřit operátory polohy, hybnosti a hamiltonián. Snadno zjistíme, že platí

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-).$$

Tyto vztahy jsou vhodné pro určení matic operátorů polohy a hybnosti v energetické reprezentaci. S použitím vztahu (8.11) zjistíme, že maticové elementy $\hat{Q}$ a $\hat{P}$ jsou

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{Q}|m\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\alpha_m^+ \delta_{n,m+1} + \alpha_m^- \delta_{n,m-1}), \\ \langle n|\hat{P}|m\rangle &= i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\alpha_m^+ \delta_{n,m+1} - \alpha_m^- \delta_{n,m-1}). \end{aligned}$$

Matice $\hat{Q}$ a $\hat{P}$ v energetické reprezentaci mají tedy nenulové prvky jen v pásech nad a pod diagonálou.

Hamiltonián LHO můžeme pomocí kreačního a anihilačního operátoru zapsat několika ekvivalentními způsoby (díky komutačním relacím (8.10))

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}_- \hat{a}_+ + \hat{a}_+ \hat{a}_-) = \hbar\omega \left(\hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2} \right) \quad (8.12)$$

$$= \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right). \quad (8.13)$$

Z posledního vztahu vyplývá identita

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

Operátor $\hat{a}_+ \hat{a}_-$ se pak někdy nazývá „operátorem počtu energetických kvant“. Ze vztahů (8.12) a (8.13) lze snadno ukázat, že pro koeficienty $\alpha_n^\pm$ platí

$$|\alpha_n^-| = \sqrt{n}, \quad |\alpha_n^+| = \sqrt{n+1}. \quad (8.14)$$

Jejich fázi zvolíme později tak, aby x reprezentace ketů $|n\rangle$ odpovídala už spočítaným vlastním funkcím $\psi_n(x)$ ve vztahu (4.7).

Ukážeme si, jak lze s použitím kreačního a anihilačního operátoru odvodit vlastní čísla i vlastní vektory hamiltoniánu LHO. Z existence posunovacích operátorů přímo plyne, že bodové spektrum hamiltoniánu LHO je ekvidistantní a rozdíl dvou po sobě jdoucích energií je $\hbar\omega$. Dále se snadno ukáže, že spektrum $\hat{H}$ je zdola omezené nulou. Řekněme, že $|\psi\rangle$ je vlastní vektor s vlastním číslem E , normovaný k jedné. Pak platí nerovnost

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \frac{1}{2M} \langle \psi | \hat{P}^2 | \psi \rangle + \frac{1}{2} M \omega^2 \langle \psi | \hat{Q}^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2M} \|\hat{P}\psi\|^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 \|\hat{Q}\psi\|^2 \geq 0.$$

Odtud plyne, že $\hat{H}$ má základní stav, tj. stav s nejnižší energií, pro který platí

$$\hat{a}_- |0\rangle = 0. \quad (8.15)$$

S použitím (8.13) zjistíme, že $|0\rangle$ odpovídá vlastnímu číslu $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Bodové spektrum $\hat{H}$ je tedy tvořeno vlastními čísly $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{Z}_+$.

S použitím posunovacích operátorů lze získat i příslušné vlastní funkce v x -reprezentaci, tj. $\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$. Začneme se základním stavem $\psi_0(x)$. Když vyjádříme anihilační operátor v x -reprezentaci, tak rovnice (8.15) přejde do tvaru

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0 = 0, \quad (8.16)$$

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

$$\psi_0(\xi) = C e^{-\xi^2/2}. \quad (8.17)$$

Porovnáním této funkce s (4.7) 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

$$\psi_n(\xi) = K_n \hat{a}_+^n \psi_0(\xi) = \frac{K_n}{\sqrt{2^n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}, \quad K_n^{-1} = \left(\frac{\hbar\pi}{M\omega} \right)^{1/4} \prod_{k=0}^{n-1} \alpha_k^+. \quad (8.18)$$

Fáze normalizačních konstant (4.23) vlastních funkcí energie jednorozměrného harmonického oscilátoru určuje i fázi koeficientů $\alpha_n^\pm$. Volba $\alpha_n^\pm > 0$ je ve shodě s přijatou fázovou konvencí (4.23), kde všechny normalizační koeficienty jsou kladné. Platí tedy

$$\alpha_n^- = \sqrt{n}, \quad \alpha_n^+ = \sqrt{n+1}.$$

Odtud plyne další užitečný vztah

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

Cvičení 50. Spočítejte koeficienty $\alpha_n^\pm$.

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

$$\hat{a}_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \text{ resp. } \hat{a}_-\phi_\alpha(x) = \alpha\phi_\alpha(x)$$

V x -reprezentaci má rovnice jednoduchý tvar

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \phi_\alpha = \alpha \phi_\alpha,$$

jejímž řešením je funkce

$$\phi_\alpha(\xi) = C_\alpha e^{-\frac{(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2}{2}}. \quad (8.19)$$

Ta je kvadraticky integrabilní pro všechna komplexní čísla α , tj. bodové spektrum anihilačního operátoru je celá komplexní rovina. To nevede k žádnému sporu, protože anihilační operátor není samosdružený (platí $\hat{a}_-^\dagger = \hat{a}_+$), takže jeho vlastní vektory netvoří ortonormální bázi. Koherentní stavy mají řadu zajímavých vlastností (např. minimalizují Heisenbergovy relace neurčitosti, mají jednoduchý časový vývoj) se kterými se seznámíme na cvičeních.

8.3.2 Moment hybnosti

Složky momentu hybnosti mají ekvidistantní spektrum s $\Delta = \hbar$, lze tedy očekávat, že pro ně opět budou existovat posunovací operátory. Typicky pracujeme v bázi společných vlastních vektorů $|l, m\rangle$ operátorů $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ splňujících vztahy (8.3). Posunovací operátory $\hat{L}_\pm$ hledáme tak, aby neměnily hodnotu orbitálního kvantového čísla l , a magnetické kvantové číslo m změnilo o ± 1 , tj. aby platilo

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

Z komutačních relací pro složky momentu hybnosti

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k,$$

se snadno ukáže, že posunovací operátory lze zvolit ve tvaru

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2. \quad (8.20)$$

Působení posunovacích operátorů na kety $|l, m\rangle$ je dáno vztahy

$$\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \alpha_{l,m}^\pm |l, m \pm 1\rangle. \quad (8.21)$$

Z (8.20) můžeme vyjádřit operátory $\hat{L}_1$ a $\hat{L}_2$ ve tvaru

$$\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-), \quad \hat{L}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-).$$

Z těchto vztahů plyne pro maticové elementy operátorů $\hat{L}_{1,2}$

$$\begin{aligned} \langle l', m' | \hat{L}_1 | l, m \rangle &= \frac{1}{2} \delta_{l,l'} (\alpha_{l,m}^+ \delta_{m',m+1} + \alpha_{l,m}^- \delta_{m',m-1}), \\ \langle l', m' | \hat{L}_2 | l, m \rangle &= \frac{1}{2i} \delta_{l,l'} (\alpha_{l,m}^+ \delta_{m',m+1} - \alpha_{l,m}^- \delta_{m',m-1}). \end{aligned}$$

Matice operátorů $\hat{L}_{1,2}$ v bázi $\{|l, m\rangle\}$ mají tedy nenulové prvky jen v pásech nad a pod diagonálou.

Pomocí posunovacích operátorů a $\hat{L}_3$ můžeme vyjádřit operátor kvadrátu momentu hybnosti jako

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_3^2 - \hbar \hat{L}_3 + \hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3 + \hat{L}_- \hat{L}_+.$$

Odtud snadno zjistíme, že pro koeficienty $\alpha_{lm}^\pm$ platí

$$|\alpha_{lm}^\pm| = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}.$$

Koeficienty $\alpha_{lm}^\pm$ jsou určeny relací (8.21) 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} (6.21) pro $Y_{l,m}$ jako $(-1)^m$.

Cvičení 51. *Ověřte komutační relaci*

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3. \quad (8.22)$$

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

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

Cvičení 54. *Spočítejte maticové elementy $\langle l', m' | \hat{L}_k | l, m \rangle$.*

Pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$ lze odvodit spektrum $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$, jak si detailně ukážeme v algebraické teorii momentu hybnosti v kapitole 11.4. Posunovací operátory rovněž intenzivně využijeme při skládání momentů hybnosti v kapitole 12.2. Na závěr této kapitoly si ukážeme, jak lze s použitím posunovacích operátorů odvodit explicitní tvar kulových funkcí $Y_{l,m}$. Využijeme toho, že m je v absolutní hodnotě omezené velikostí l . Platí tedy

$$\hat{L}_+ Y_{l,l} = 0. \quad (8.23)$$

Z explicitního tvaru operátorů $\hat{L}_{1,2}$ ve sférických souřadnicích (4.27), (4.28) nalezneme

$$\hat{L}_\pm = i\hbar \cot \theta e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta}.$$

Závislost kulových funkcí na úhlu φ známe, takže je můžeme hledat ve tvaru

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = f_{l,m}(\theta)e^{im\varphi}.$$

Rovnice (8.23) potom přejde v obyčejnou diferenciální rovnici prvního řádu

$$f'_{l,l} - lf_{l,l} \cot \theta = 0,$$

jejímž řešením je funkce

$$f_{l,l}(\theta) = C \sin^l \theta.$$

Kulová funkce s maximální možnou hodnotou $m = l$ je tedy rovna

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = C \sin^l \theta e^{il\varphi}.$$

Funkce s nižší hodnotou m získáme s použitím posunovacího operátoru $\hat{L}_-$.

Kapitola 9

Předpovědi výsledků měření

V této kapitole detailně probereme, jakým způsobem kvantová mechanika předpovídá výsledky měření fyzikálních veličin na částici, která je ve stavu popsaném vektorem ψ . V postulátu 2 jsme řekli, že možné výsledky měření dané pozorovatelné patří tvoří spektrum příslušného operátoru. Z diskuse v kapitole 5 víme, že předpovědi mají až na výjimky pravděpodobnostní charakter - můžeme určit pouze pravděpodobnost daného výsledku měření, ale ne přesný výsledek jednoho měření.

9.1 Pravděpodobnosti výsledků měření

V postulátu 3 jsme uvedli, že pravděpodobnost naměření hodnoty a_j pozorovatelné A na částici ve stavu popsaném normovaným vektorem ψ , je dána vztahem

$$P_{\psi, (A=a_j)} = \|\hat{P}_j \psi\|^2, \quad (9.1)$$

kde $\hat{P}_j$ je projektor na podprostor odpovídající vlastní hodnotě a_j .

9.1.1 Operátor s prostým čistě bodovým spektrem

Pokud příslušný operátor $\hat{A}$ má prosté čistě bodové spektrum (tj. všechna vlastní čísla mají násobnost jedna), pak projektory můžeme zapsat (s použitím bra-ketového formalismu) ve tvaru

$$\hat{P}_j = |j\rangle\langle j|,$$

kde kety $|j\rangle$ jsou normované vlastní vektory $\hat{A}$

$$\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle.$$

Vztah (9.1) se pak zjednoduší do tvaru

$$P_{\psi, (A=a_j)} = |\langle j|\psi\rangle|^2. \quad (9.2)$$

Ukažme, že takto zavedené předpovědi výsledků měření jsou v souladu s teorií pravděpodobnosti. Využijeme toho, že kety $|j\rangle$ tvoří ortonormální bázi $\mathcal{H}$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} |j\rangle\langle j| = \hat{I}.$$

Vektor $|\psi\rangle$ můžeme rozložit do báze vlastních vektorů $\hat{A}$ způsobem

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \langle j|\psi\rangle |j\rangle.$$

Z Parsevalovi rovnosti pak plyne

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1 = \sum_{j=0}^{\infty} |\langle j|\psi\rangle|^2,$$

tedy $|\langle j|\psi\rangle|^2$ jsou nezáporná reálná čísla, jejichž součet je jedna, a můžeme je interpretovat jako pravděpodobnosti nějakého jevu. Protože ve stavu $|j\rangle$ má pozorovatelná A jednoznačně určenou hodnotu a_j , má smysl postulovat, že $|\langle j|\psi\rangle|^2$ je pravděpodobnost naměření hodnoty a_j na částici ve stavu $|\psi\rangle$.

Cvičení 55. *Nechť je lineární harmonický oscilátor ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-x^2+ikx}. \quad (9.3)$$

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

Připomeňme, že podle postulátu 3 je stav částice po měření A s výsledkem a_j popsán vlastním vektorem $|j\rangle$. Výraz $|\langle j|\psi\rangle|^2$ pak můžeme interpretovat jako pravděpodobnost přechodu ze stavu $|\psi\rangle$ do stavu $|j\rangle$. Obecněji v kvantové mechanice postulujeme, že pravděpodobnost přechodu ze stavu ψ do stavu ϕ , které jsou popsány normovanými vektory $|\psi\rangle, |\phi\rangle$, je rovna

$$P_{\psi \rightarrow \phi} = |\langle \phi|\psi\rangle|^2. \quad (9.4)$$

Skalární součin $\langle \phi|\psi\rangle$ má význam amplitudy pravděpodobnosti přechodu $\psi \rightarrow \phi$.

Cvičení 56. *Uvažujme lineární oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ v koherentním stavu ϕ_α , $\alpha \in \mathbb{C}$. S jakou pravděpodobností ho najdeme v koherentním stavu ϕ_β , $\beta \in \mathbb{C}$?*

9.1.2 Operátor s vícenásobným bodovým spektrem

Uvažujme nyní případ, kdy vlastní hodnota $a \equiv a_j$ pozorovatelné A má konečnou degeneraci $n > 1$. V příslušném podprostoru zvolíme nějakou ortonormální bázi tvořenou vektory $|a, k\rangle$

$$\hat{A}|a, k\rangle = a|a, k\rangle, \quad \langle a, k|a, l\rangle = \delta_{k,l}.$$

Ortogonalní projektor $\hat{P}_a$ na vlastní podprostor pak můžeme zapsat ve tvaru

$$\hat{P}_a = \sum_{k=1}^n |a, k\rangle \langle a, k|.$$

Vztah (9.1) pro pravděpodobnost výsledku měření bude tedy mít následující tvar

$$P_{\psi, (A=a)} = \sum_{k=1}^n |\langle a, k | \psi \rangle|^2. \quad (9.5)$$

V případě degenerované vlastní hodnoty musíme sečíst pravděpodobnosti přechodů ze stavu $|\psi\rangle$ do všech (jednoznačně odlišitelných) vlastních stavů $|a, k\rangle$. Snadno se lze přesvědčit, že výsledná pravděpodobnost nezávisí na konkrétní volbě báze $\{|a, k\rangle | k = 1, \dots, n\}$.

Cvičení 57. *Nechť je isotropní harmonický oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(\vec{x}) = Ce^{-x^2 + i\vec{k} \cdot \vec{x}}. \quad (9.6)$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnotu energie oscilátoru rovnou $\frac{5}{2}\hbar\omega$?

Nejsme-li z nějakých, například experimentálních, důvodů schopni rozlišit mezi dvěma či více různými vlastními hodnotami, pak pravděpodobnost naměření alespoň jedné z nich je opět dána vzorcem (9.5) s tím, že suma probíhá přes všechny vlastní funkce příslušné daným vlastním hodnotám.

9.1.3 Operátor se spojitým spektrem

Na závěr této části uvažujme pozorovatelnou A se spojitým spektrem. Jak jsme si ukázali v kapitole 7, bodům ze spojitého spektra lze přiřadit zobecněné vlastní vektory $|a\rangle$ normované k δ -funkci

$$\langle a | \hat{A} | \psi \rangle = a \langle a | \psi \rangle, \quad \langle a | a' \rangle = \delta(a - a').$$

Kvantová mechanika postuluje, že výraz

$$w_{\psi}(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2, \quad (9.7)$$

představuje hustotu pravděpodobnosti naměření hodnoty a na částici ve stavu $|\psi\rangle$. Pravděpodobnost, že výsledek měření pozorovatelné $\hat{A}$ padne do intervalu (a_1, a_2) , je pak určena vztahem

$$P_{\psi, (A \in (a_1, a_2))} = \int_{a_1}^{a_2} |\langle a | \psi \rangle|^2 da, \quad (9.8)$$

Pokud za pozorovatelnou $\hat{A}$ zvolíme polohu částice (pro jednoduchost uvažujme částici na přímce), pak (9.7) přejde do tvaru

$$w_\psi(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = |\psi(x)|^2, \quad (9.9)$$

což odpovídá Bornově statistické interpretaci vlnové funkce $\psi(x)$ (tj. x -reprezentace stavu $|\psi\rangle$). Vztah (9.7) je zobecněním Bornovy interpretace pro libovolné pozorovatelné se spojitým spektrem. Speciálně pro hybnost částice je hustota pravděpodobnosti rovna

$$w_\psi(p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 = |\tilde{\psi}(p)|^2.$$

Vlnová funkce v p -reprezentaci má tedy význam amplitudy pravděpodobnosti naměření hybnosti částice rovné p . Připomeňme, že funkce $\psi(x)$ a $\tilde{\psi}(p)$ jsou spojeny Fourierovou transformací, viz. (8.4).

Cvičení 58. Určete pravděpodobnost nalezení hybnosti částice popsané vlnovou funkcí (9.6) 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 (9.8) platí pro případ, že pro každý bod $a \in (a_1, a_2)$ existuje právě jedna zobecněná vlastní funkce normalizovaná k δ -funkci. Obecnější případ zde řešit nebudeme (vede na tzv. spektrální míru operátoru $\hat{A}$). Uveďme pouze, že například pravděpodobnost naměření hodnoty energie částice v Coulombově poli v intervalu $(E_1, E_2) \subset \mathbb{R}_+$ je dána součtem integrálů

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

kde $k_i = \sqrt{\frac{2ME_i}{\hbar^2}}$, a ϕ_{klm} jsou zobecněné vlastní funkce (7.17) normované k δ -funkci.

9.2 Střední hodnoty pozorovatelných

Pro kvantovou částici ve stavu ψ známe díky vztahům (9.2), (9.5) a (9.8) pravděpodobnosti výsledků měření libovolné pozorovatelné. Z pravděpodobnostních rozdělení pak můžeme určit střední hodnoty pozorovatelných podle vztahů známých z matematické statistiky. Pro pozorovatelnou A s čistě bodovým spektrem platí

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_j a_j P_{\psi, (A=a_j)}. \quad (9.10)$$

Podobně, pro pozorovatelnou A se spojitým spektrem je střední hodnota ve stavu ψ rovna

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int_{\sigma(\hat{A})} a w_\psi(a) da. \quad (9.11)$$

Tyto vzorce můžeme převést do jednoho kompaktního vztahu, který se v kvantové mechanice často využívá. Odvodíme si ho na příkladu střední hodnoty polohy částice na přímce, pro kterou je hustota pravděpodobnosti dána Bornovým postulátem (9.9). Vztah (9.11) pro střední hodnotu polohy přepíšeme do tvaru

$$\langle \hat{Q} \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x w_\psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) [\hat{Q}\psi](x) dx = (\psi, \hat{Q}\psi), \quad (9.12)$$

kde $\psi(x)$ je opět normovaná funkce. Není důvodu, proč by měla mít poloha částice privilegiované postavení mezi ostatními pozorovatelnými, a je proto přirozené očekávat, že pro libovolnou pozorovatelnou se její střední hodnota bude počítat podle stejného předpisu. Pro pozorovatelné s čistě bodovým spektrem to snadno ukážeme s použitím spektrálního rozkladu operátoru $\hat{A}$

$$\hat{A} = \sum_j a_j |j\rangle \langle j|.$$

Dosadíme-li vztah pro pravděpodobnost (9.2) do vzorce pro střední hodnotu (9.10), pak postupně dostaneme

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_j a_j |\langle j|\psi \rangle|^2 = \sum_j a_j \langle \psi|j \rangle \langle j|\psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_j a_j |j\rangle \langle j| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

Pro pozorovatelné se spojitým spektrem lze vztah odvodit analogicky s použitím spektrální míry operátoru $\hat{A}$. Platí tedy, že **je-li systém v okamžiku měření ve stavu popsaném vektorem $|\psi\rangle$, pak střední hodnota měření pozorovatelné A , které jsme přiřadili operátor $\hat{A}$, je rovna**

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}. \quad (9.13)$$

Všimněme si, že předpis (9.13) 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 vektor $|\alpha\rangle$ je vlastní vektor $\hat{A}$ pro vlastní hodnotu a , pak $\langle \hat{A} \rangle_\alpha = a$.

Cvičení 59. Spočítejte střední hodnoty složek polohy kvantové částice popsané vlnovou funkcí (2.37).

Cvičení 60. Spočítejte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice popsané vlnovou funkcí (2.37). 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 61. Spočítejte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice v Coulombově poli s energií $-MQ^2/2\hbar^2$ a nulovým momentem hybnosti (elektron v atomu vodíku ve stavu 1s).

Cvičení 62. Spočítejte střední hodnotu energie jednorozměrného harmonického oscilátoru v koherentním stavu ϕ_α (8.19).

Cvičení 63. *Nechť částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = (4\pi)^{-1/2}(e^{i\varphi} \sin \theta + \cos \theta)g(r) \quad (9.14)$$

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

9.3 Střední kvadratická odchylka a relace neurčitosti

Důležitá pravděpodobnostní a experimentálně měřitelná veličina je *střední kvadratická odchylka pozorovatelné A při měření na stavu ψ* . Ta je definována vztahem

$$(\Delta_\psi A) := \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi}, \quad (9.15)$$

který je snadné přepsat do tvaru

$$(\Delta_\psi A) = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2}. \quad (9.16)$$

Cvičení 64. *Ukažte, že pokud $\hat{A}$ je samosdružený operátor, pak výraz pod odmocninou (9.15) je nezáporný pro libovolné $\psi \in D_A$.*

Střední kvadratická odchylka indikuje, jak dobře je ve stavu ψ hodnota pozorovatelné A určena. Pokud ψ je vlastním vektorem operátoru $\hat{A}$, pak $(\Delta_\psi A) = 0$. Hodnota pozorovatelné A je tedy ve vlastním stavu určena s absolutní přesností. Na druhou stranu, čím větší je $(\Delta_\psi A)$, tím větší je neurčitost hodnoty A .

Hodnota pozorovatelné se spojitým spektrem není v žádném stavu kvantové částice určena s absolutní přesností, protože bodům ze spojitého spektra odpovídají pouze zobecněné vlastní vektory, které nepopisují fyzikálně realizovatelný stav. Zobecněné vlastní vektory však můžeme vždy libovolně přesně aproximovat pomocí vektorů z Hilbertova prostoru. Kvantová mechanika tedy nijak neomezuje přesnost, s jakou může být daná pozorovatelná určena, viz. tvrzení 16.1.5 v [1]. Zdůrazněme, že zde nemluvíme o experimentálně dosažitelné přesnosti.

Cvičení 65. *Uvažujte částici na přímce ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\delta_{a,\varepsilon}(x)$ (7.15). Ukažte, že platí*

$$\langle \hat{Q} \rangle_{\delta_{a,\varepsilon}} = a, \quad (\Delta_{\delta_{a,\varepsilon}} Q) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{3}}.$$

Cvičení 66. *Uvažujte částici na přímce ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\phi_{p,\varepsilon}(x)$ (7.10). Ukažte, že platí*

$$\langle \hat{P} \rangle_{\phi_{p,\varepsilon}} = p, \quad (\Delta_{\phi_{p,\varepsilon}} P) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{3}}.$$

V principu tedy můžeme kvantovou částici připravit ve stavu, kde je její poloha určena s libovolně malou nepřesností Δx . Podobně ji můžeme připravit v jiném stavu s libovolně malou neurčitostí hybnosti Δp . Otázka ale je, zda můžeme určit **současně** polohu a hybnost částice libovolně přesně. Z relací neurčitosti vyplývá, že to obecně možné není.

Tvrzení 9.1. Pro každé dva samosdružené operátory $\hat{A}, \hat{B}$ a $\psi \in D(\hat{A}\hat{B}) \cap D(\hat{B}\hat{A})$ platí

$$(\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B) \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi| \quad (9.17)$$

Rovnost ve vztahu (9.17) nastává pro vlnové funkce, pro které platí

$$[\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi - i\kappa(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\psi)]\psi = 0, \quad (9.18)$$

kde $\kappa \in \mathbb{R}$.

Pro operátory polohy a hybnosti platí komutační relace

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad (9.19)$$

takže podle tvrzení 9.1 pro každé $\psi \in D(Q_j P_k) \cap D(P_k Q_j)$ platí **Heisenbergovy relace neurčitosti**

$$\boxed{(\Delta_\psi Q_j)(\Delta_\psi P_k) \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{jk}}. \quad (9.20)$$

Cvičení 67. Spočítejte střední kvadratické odchylky složek polohy a hybnosti kvantové částice při měření na stavu popsaném vlnovou funkcí (2.37). Ukažte, že pro $A > 0$ platí

$$(\Delta_\psi Q_k)(\Delta_\psi P_k) = \frac{\hbar}{2}. \quad (9.21)$$

Cvičení 68. Ukažte, že podmínka (9.18) pro operátory $\hat{A} = \hat{Q}_j, \hat{B} = \hat{P}_j$ dává integrodiferenciální rovnice, jejichž jedinými řešeními jsou funkce

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

které jsme nazvali minimální vlnové balíky.

Relace neurčitosti dávají omezení na stavy kvantové částice v důsledku existence nekompatibilních pozorovatelných. Pro kompatibilní pozorovatelné je nerovnost triviální, protože střední kvadratické odchylky jsou vždy nezáporné. Pro nekompatibilní pozorovatelné relace neurčitosti představují netriviální spodní mez na součin středních kvadratických odchylek ve stavu ψ . Neexistuje tedy stav, ve kterém jsou obě nekompatibilní pozorovatelné současně určeny libovolně přesně.

Z Heisenbergových relací neurčitosti 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

$$\Delta x \Delta p_x \Delta y \Delta p_y \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar^3}{8}.$$

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 ≤ 10 μ 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. Hmota 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.

9.4 Kvantová mechanika ve fázovém prostoru

Na závěr této kapitole poznamenejme, že je možné popisovat kvantovou mechaniku pomocí funkcí na fázovém prostoru (tzv. kvazidistribucí). Dají se využít např. pro hledání klasické limity kvantové mechaniky a přechodu ke klasické statistické fyzice.

Pro jednoduchost se opět omezíme na částici na přímce, tj. fázový prostor je $\mathbb{R}^2$. Jednu z možných kvazidistribucí popisující stav kvantové částice ve fázovém prostoru představuje Wignerova funkce. Ta je pro vlnovou funkci $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ definována předpisem

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{\hbar\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{2i}{\hbar}py} \psi^*(x+y) \psi(x-y) dy.$$

Jedná se o reálnou funkci na fázovém prostoru, která má řadu zajímavých vlastností, např. vede na správná marginální rozdělení polohy a hybnosti

$$\int_{\mathbb{R}} W_\psi(x, p) dp = |\psi(x)|^2, \quad \int_{\mathbb{R}} W_\psi(x, p) dx = |\tilde{\psi}(p)|^2.$$

Mohli bychom ji tedy považovat za hustotu pravděpodobnosti na fázovém prostoru a použít k porovnání kvantové mechaniky s klasickou statistickou fyzikou. Obecně tak postupovat nelze, protože Wignerova funkce může nabývat záporných hodnot (odtud označení kvazidistribuce). Pro některé třídy stavů to však možné je, např. pro koherentní stavy LHO (8.19) snadno najdeme, že jejich Wignerova funkce je rovna

$$W_\alpha(x, p) = \frac{1}{\hbar\pi} \exp\left(-(\kappa x - \sqrt{2}\operatorname{Re}(\alpha))^2 - \left(\frac{p}{\hbar\kappa} - \sqrt{2}\operatorname{Im}(\alpha)\right)^2\right),$$

kde $\kappa = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$. Wignerova funkce koherentního stavu má tvar Gaussova rozdělení se středními hodnotami

$$\langle x \rangle = \frac{\sqrt{2}}{\kappa} \operatorname{Re}(\alpha), \quad \langle p \rangle = \sqrt{2}\hbar\kappa \operatorname{Im}(\alpha),$$

a středními kvadratickými odchylkami

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\kappa}, \quad \Delta p = \frac{\hbar\kappa}{\sqrt{2}}.$$

Odtud je vidět, že koherentní stavy minimalizují relace neurčitosti. Popis koherentních stavů ve fázovém prostoru můžeme dále zjednodušit přechodem k bezrozměrným proměnným

$$\xi = \kappa x, \quad \rho = \frac{p}{\hbar \kappa},$$

ve kterých má Wignerova funkce symetrický tvar

$$W_\alpha(\xi, \rho) = \frac{1}{\pi} \exp \left(-(\xi - \sqrt{2}\operatorname{Re}(\alpha))^2 - (\rho - \sqrt{2}\operatorname{Im}(\alpha))^2 \right).$$

Gaussovo rozdělení je jednoznačně určeno střední hodnotou a střední kvadratickou odchylkou, navíc s rostoucí vzdáleností od střední hodnoty velmi rychle klesá k nule. Koherentní stavy ve fázovém prostoru se pak velmi často zobrazují jako kruh se středem v bodě $(\langle \xi \rangle = \sqrt{2}\operatorname{Re}(\alpha), \langle \rho \rangle = \sqrt{2}\operatorname{Im}(\alpha))$ a poloměrem $\Delta\xi = \Delta\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Kapitola 10

Časový vývoj kvantové částice

Veškeré úvahy v kapitolách 3 až 9 se týkaly stavu kvantové částice v daném časovém okamžiku. Nyní se zaměříme vývoj stavu s časem. Omezíme se na případ tzv. uzavřeného systému, kdy uvažovaná kvantová částice neinteraguje s jiným kvantovým systémem. V takovém případě je časový vývoj částice popsán Schrödingerovou rovnicí, se kterou jsme se seznámili již v kapitole 2.5. Připomeňme, že Schrödingerovu rovnici není možné odvodit. Musíme ji zahrnout mezi základní postuláty kvantové mechaniky.

Postulát 4. *Nechť je v čase t_0 stav kvantové částice s hamiltoniánem $\hat{H}$ popsán vektorem $|\psi\rangle$. Stav částice $|\psi(t)\rangle$ v čase $t > t_0$ je určen řešením Schrödingerovy rovnice*

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}, \quad (10.1)$$

s počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$.

Poznamenejme, že časový vývoj popsáný Schrödingerovou rovnicí platí jen do okamžiku měření. Podívejme se nyní na důsledky Schrödingerovy rovnice.

10.1 Zachování normy a rovnice kontinuity

Snadno se ukáže, že Schrödingerova rovnice zachovává normu vektoru $|\psi(t)\rangle$. Derivaci kvadrátu normy $|\psi(t)\rangle$ podle času můžeme napsat ve tvaru

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \right).$$

Ze Schrödingerovy rovnice dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}, \quad (10.2)$$

kde jsme využili samosdruženosti hamiltoniánu. Dosazením do předchozího vztahu pak zjistíme, že

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \left(\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle \right) = 0$$

Časový vývoj tedy nemění normu vektoru - pokud je počáteční podmínkou pro Schrödingerovu rovnici vektor $|\psi(t_0)\rangle$ normovaný k jedné, pak i vektor $|\psi(t)\rangle$ zůstává normovaný pro všechna $t > t_0$. Tento výsledek je důležitý pro pravděpodobnostní interpretaci kvantové mechaniky.

V x -reprezentaci, kde má Schrödingerova rovnice tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi + V(\vec{x}, t) \psi, \quad (10.3)$$

můžeme odvodit zachování normy vlnové funkce $\psi(\vec{x}, t)$ z tzv. *rovnice kontinuity*. Definujeme-li vedle hustoty pravděpodobnosti $\rho(\vec{x}, t) := \psi^*(\vec{x}, t)\psi(\vec{x}, t)$ také *hustotu toku pravděpodobnosti*

$$\vec{j}(\vec{x}, t) := \frac{i\hbar}{2M} [\psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) - \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t)], \quad (10.4)$$

pak je snadné ukázat, že pro tyto veličiny platí

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) + \text{div } \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (10.5)$$

Z rovnice kontinuity vyplývá existence „zachovávajícího se náboje“

$$q = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{x}, t) d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = (\psi(t), \psi(t)),$$

tj. normalizace vlnové funkce $\psi(\vec{x}, t)$ nezávisí na čase

$$\frac{dq}{dt} = \frac{d}{dt}(\psi(t), \psi(t)) = 0.$$

10.2 Stacionární stavy

Uvažujme nyní Schrödingerovu rovnici v x -reprezentaci pro potenciál $V(\vec{x})$ (a tedy i hamiltonián) nezávisící na čase. V takovém případě existují řešení, která mají separovaný tvar

$$\psi(\vec{x}, t) = f(t) \psi_E(\vec{x}).$$

Dosazením řešení v tomto tvaru do rovnice (10.3) a podělením obou stran $f(t) \psi_E(\vec{x})$ (všude, kde je to možné) dostaneme

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi_E(\vec{x})} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi_E(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi_E(\vec{x}) \right).$$

Zatímco levá strana této rovnice závisí pouze na čase, pravá závisí pouze na poloze. Musí tedy být rovny konstantě, která má rozměr energie; označme ji E . Schrödingerovu rovnici pak můžeme separovat na dvě rovnice, z nichž jedna určuje časovou závislost vlnové funkce

$$i\hbar \frac{df}{dt} = E f(t), \quad (10.6)$$

a druhá určuje její prostorovou závislost

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

Vidíme tedy, že $\psi_E(\vec{x})$ je vlastní vektor hamiltoniánu s vlastním číslem E

$$\hat{H} \psi_E = E \psi_E. \quad (10.7)$$

Pokud budeme pro Schrödingerovu rovnici uvažovat počáteční podmínku

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \psi_E(\vec{x}), \quad \text{tj. } f(t_0) = 1,$$

pak řešením rovnice (10.6) je $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)}$. Časový vývoj vlastních vektorů hamiltoniánu má tedy jednoduchý tvar

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

Faktor $e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)}$ 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 libovolné pozorovatelné. Všechny výsledky jsou tedy nezávislé na čase. Z tohoto důvodu se vlastním vektorům hamiltoniánu říká *stacionární stavy* a rovnice pro vlastní hodnoty (10.7) se často nazývá *bezčasová Schrödingerova rovnice*. Vlastní vektory hamiltoniánu jsou obdobou rovnovážných stavů v klasické mechanice, tj. statických řešení pohybových rovnic $x(t) = x(t_0)$.

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 $\{\psi_n\}$, tvořená vlastními stavy hamiltoniánu

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n.$$

Pak je možno zapsat počáteční vlnovou funkci způsobem

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n (\psi_n, \psi) \psi_n(\vec{x}) \quad (10.8)$$

a odpovídající řešení Schrödingerovy rovnice je

$$\boxed{\psi(\vec{x}, t) = \sum_n (\psi_n, \psi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \psi_n(\vec{x})}. \quad (10.9)$$

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

Cvičení 70. *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 $t > 0$ bude nacházet v intervalu $(-a, 0)$?

10.3 Unitarita časového vývoje

Ze Schrödingerovy rovnice plyne, že systém, který v čase t_0 byl ve stavu $|\psi\rangle$, je v čase $t \geq t_0$ (pokud na něm nebylo provedeno měření) v jednoznačně určeném stavu $|\psi(t)\rangle$. Existuje tedy lineární operátor $\hat{U}(t, t_0)$, pro který platí

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi\rangle. \quad (10.10)$$

Tento operátor se nazývá *evoluční operátor*. Ukážeme, že je unitární. Podobným postupem jako v části 10.1 odvodíme, že pro dvě libovolná řešení Schrödingerovy rovnice $|\psi(t)\rangle$ a $|\varphi(t)\rangle$ je jejich skalární součin nezávislý na čase

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \varphi(t) \rangle = 0. \quad (10.11)$$

S použitím evolučního operátoru předchozí rovnost přepíšeme do tvaru

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \varphi(t) \rangle = \langle \psi | \frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) | \varphi \rangle = 0.$$

Protože identita platí pro libovolné $|\psi\rangle$ a $|\varphi\rangle$, musí být operátor $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)$ nezávislý na čase. Z definice evolučního operátoru (10.10) plyne

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad (10.12)$$

a tedy

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t_0, t_0) \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I},$$

což je podmínka unitarity evolučního operátoru.

Dosazením (10.10) do Schrödingerovy rovnice odvodíme diferenciální rovnici

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0),$$

která spolu s počáteční podmínkou (10.12) určuje evoluční operátor. V případě, kdy je hamiltonián částice nezávislý na čase, můžeme tuto rovnici zintegrovat a jejím řešením je

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right).$$

Pokud má navíc hamiltonián čistě bodové spektrum, tj. existuje báze tvořená vlastními vektory $\hat{H}$ splňujícími

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle,$$

pak evoluční operátor $\hat{U}(t, t_0)$ můžeme zapsat v energetické reprezentaci ve tvaru

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|.$$

Řešení Schrödingerovy rovnice (10.10) v čase $t > t_0$ je tedy rovno

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |\psi_n\rangle.$$

Poznamenejme, že výraz (10.9) není nic jiného, než zápis předchozího vztahu v x -reprezentaci.

Cvičení 71. Určete operátor časového vývoje v energetické reprezentaci pro lineární harmonický oscilátor. Ukažte, že pro libovolný počáteční stav $|\psi\rangle$ se oscilátor po čase $T = \frac{2\pi}{\omega}$ vrátí do původního stavu.

10.4 Integrály pohybu, Ehrenfestovy teorémy

V klasické mechanice známe zachovávající se veličiny — integrály pohybu (IP), jejichž hodnota se během časového vývoje systému nemění. Připomeňme, že v klasické mechanice jsou pozorovatelné reprezentovány funkcemi $f(q_j, p_j, t)$ na fázovém prostoru, které mohou i explicitně záviset na čase. Integrálem pohybu jsou takové funkce, které po dosazení řešení Hamiltonových pohybových rovnic $q_j = q_j(t)$, $p_j = p_j(t)$, zůstávají konstantní, tj. $\frac{df}{dt} = 0$.

I v kvantové mechanice lze definovat integrály pohybu. Jejich definici však nelze převzít z klasické mechaniky, protože pozorovatelné nejsou funkcemi stavů. Navíc, hodnota pozorovatelné je určena až po měření, a pokud stav kvantové částice $|\psi(t)\rangle$ není vlastní vektor pozorovatelné, pak v každém opakování experimentu může měření na stavu $|\psi(t)\rangle$ dát jiný výsledek. Správnou definicí integrálu pohybu v kvantové mechanice je tedy následující: A

je integrál pohybu právě tehdy když pro každé řešení Schrödingerovy rovnice $|\psi(t)\rangle$ je střední hodnota A nezávislá na čase

$$A \text{ je IP} \iff \forall |\psi(t)\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = 0 \quad . \quad (10.13)$$

Za určitých podmínek (viz. věta 17.1.2 v [1]) můžeme odvodit ekvivalentní podmínku, kterou integrál pohybu musí splňovat. Z definice střední hodnoty (9.13) dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | \right) \hat{A} |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \right) + \langle \psi(t) | \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) |\psi(t)\rangle.$$

S využitím vztahů (10.2) pak najdeme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_{\psi(t)} . \quad (10.14)$$

Aby pozorovatelná A byla integrálem pohybu, musí být předchozí vztah roven nule pro všechna řešení Schrödingerovy rovnice. To platí právě tehdy když je operátor na pravé straně (10.14) roven nule, tedy

$$A \text{ je IP} \iff \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \quad . \quad (10.15)$$

Pro operátory, které nejsou explicitně závislé na čase to znamená, že jsou integrály pohybu, pokud komutují s $\hat{H}$. Připomeňme, že v Hamiltonovské formulaci klasické mechaniky platí vztah obdobný (10.15) — A je integrálem pohybu, pokud $\{H, A\} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0$, kde $\{, \}$ značí Poissonovu závorku.

Cvičení 72. Nalezněte operátor rychlosti pro částici v poli konzervativních sil.

Cvičení 73. Ukažte jak závisí na čase střední kvadratická odchylka souřadnice jednorozměrného harmonického oscilátoru.

Vztah (10.14) můžeme chápat jako pohybovou rovnici pro střední hodnotu pozorovatelné A . Speciálním případem tohoto vztahu jsou tzv. Ehrenfestovy teoremy, kde za operátor $\hat{A}$ zvolíme složky souřadnice či hybnosti. V tom případě dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q}_j \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{\hat{P}_j}{M} \right\rangle_{\psi(t)} , \quad (10.16)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_j \rangle_{\psi(t)} = \left\langle -\frac{\partial \hat{V}}{\partial x_j} \right\rangle_{\psi(t)} . \quad (10.17)$$

Tyto vztahy připomínají do jisté míry Hamiltonovy rovnice klasické mechaniky, kde přesné hodnoty q_j a p_j nahradíme jejich středními hodnotami. Skutečně, první z Ehrenfestových teorémů říká, že časová derivace střední hodnoty souřadnice ve stavu $\psi(t)$ je rovna střední hodnotě rychlosti. Ve druhém vztahu však na pravé straně obecně vystupuje střední hodnota síly působící na částici. Analogie s klasickou pohybovou rovnicí bude platit pouze pokud pravá strana (10.17) je rovna hodnotě síly v bodě $\langle \hat{Q}_j \rangle_{\psi(t)}$, neboli pokud

$$\left\langle -\frac{\partial \hat{V}}{\partial x_j} \right\rangle_{\psi(t)} = -\frac{\partial V}{\partial x_j} \left(\langle \vec{Q} \rangle_{\psi(t)} \right).$$

To je splněno pouze pro potenciály, které jsou maximálně kvadratickou funkcí souřadnic. V takovém případě střední hodnoty polohy a hybnosti kvantové částice sledují klasickou trajektorii, a to pro všechna řešení Schrödingerovy rovnice. Speciálně toto tvrzení platí pro LHO. Pro obecnější typy potenciálů je souvislost Ehrenfestových teorémů s pohybovými rovnicemi klasické mechaniky mnohem složitější (viz [2, kap. 1.7] a [3, kap. 3.5]) a očekávaná shoda s klasickou teorií nastává až pro stavy s dostatečně velkou energií.

Cvičení 74. *Lineární harmonický oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je v čase $t = 0$ v koherentním stavu s amplitudou $\alpha \in \mathbb{R}$. V jakém stavu je v libovolném čase $t > 0$? Jak se mění střední hodnota polohy a hybnosti oscilátoru s časem?*

Kapitola 11

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

$$\vec{F} = \vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t) = q[\vec{E}(\vec{x}, t) + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}, t)], \quad (11.1)$$

která působí na nabitou částici s nábojem q 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. [13, U2.1]), víme, že je ji možno vyjádřit pomocí zobecněného potenciálu

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

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

$$\vec{E} = -\text{grad } \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (11.2)$$

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

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2M}[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t)]^2 + q\phi(\vec{x}, t). \quad (11.3)$$

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{P}} - q\hat{\vec{A}}(\vec{x}, t) \right)^2 + q\hat{\phi}(\vec{x}, t). \quad (11.4)$$

Poznamenejme zde, že v tomto případě princip korespondence neurčuje hamiltonián jednoznačně, neboť operátory $\hat{\vec{P}}$ a $\hat{\vec{A}}$ vyskytující se v prvním členu pravé strany (11.4) obecně nekomutují

$$[\hat{\vec{P}}, \hat{\vec{A}}] = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A}.$$

Tato nejednoznačnost odpadá, pokud zvolíme Coulombovu kalibraci, kde $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$. Hamiltonián (11.4) pak můžeme snadnými úpravami přepsat do tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{q}{M} \hat{A}(\vec{x}, t) \cdot \hat{\vec{P}} + \frac{q^2}{2M} \hat{A}^2(\vec{x}, t) + q\hat{\phi}(\vec{x}, t). \quad (11.5)$$

Cvičení 75. Ukažte, že požadavek samosdruženosti neurčuje uspořádání operátoru odpovídajícímu klasické pozorovatelné px^2 , kde p a x jsou hybnost a souřadnice jednorozměrného systému.

11.1 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

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{q}{2M} \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} + \frac{q^2}{8M} (\vec{B} \times \hat{\vec{x}})^2 + q\hat{\phi}(\vec{x}), \quad (11.6)$$

kde $\hat{\vec{L}}$ je operátor momentu hybnosti částice.

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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\vec{\mu}}_{\text{orb}} \cdot \vec{B}, \quad (11.7)$$

kde $\hat{H}_0$ je hamiltonián částice bez vlivu magnetického pole (pouze v poli konzervativních sil, což je problém který jsme studovali doposud) a

$$\hat{\vec{\mu}}_{\text{orb}} = \frac{q}{2M} \hat{\vec{L}} \quad (11.8)$$

je operátor magnetického momentu částice související s jejím orbitálním pohybem.

Je-li potenciál $V(\vec{x}) = q\phi(\vec{x})$ 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 6)

$$\hat{H}_0 \psi_{E,l,m} = E \psi_{E,l,m}, \quad (11.9)$$

$$\hat{L}^2 \psi_{E,l,m} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{E,l,m}, \quad (11.10)$$

$$\hat{L}_z \psi_{E,l,m} = m\hbar \psi_{E,l,m}. \quad (11.11)$$

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 (11.9), (11.11), pak rovněž platí

$$\hat{H}\psi_{E,l,m} = (E \mp \mu_0 m B) \psi_{E,l,m}, \quad (11.12)$$

kde znaménko $-$ odpovídá kladně nabitě a $+$ záporně nabitě částici, $B = \|\vec{B}\|$ a $\mu_0 = \frac{|q|\hbar}{2M}$ je tzv. *magneton* částice. V případě elektronu ($q = -e$) ho nazýváme *Bohrovým magnetonem* a jeho hodnota je $0.9274 \times 10^{-23} \text{ JT}^{-1}$.

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 $\mu_0 B$** . 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 $l = 0$.

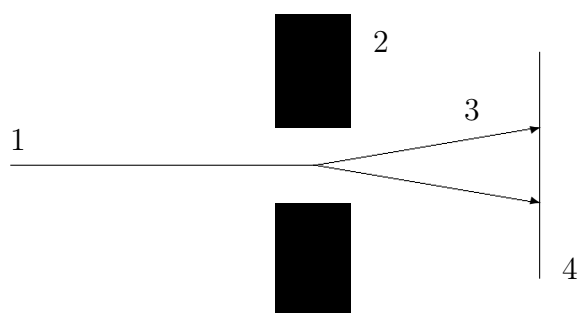
11.2 Vlastní magnetický moment a spin částice

Uvedený rozpor teorie a experimentu řeší hypotéza (Landé, Stoner, Pauli 1923–25), podle které **elektron má** vedle magnetického momentu (11.8) 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 *Sternova-Gerlachova pokusu*, při kterém prochází svazek atomů stříbra v základním stavu nehomogenním magnetickým polem kolmo na směr nehomogenity. Síla, která na atomy v tomto poli působí (viz např. [16, kap. 4.3]) je

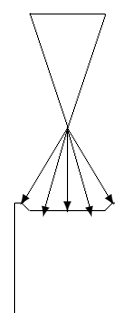
$$\vec{F}(\vec{x}) = \text{grad}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{x})),$$

takže částice jsou urychlovány ve směru gradientu projekce magnetického momentu částice na směr magnetického pole. Atom stříbra má jeden valenční elektron. V určitém přiblížení ho tedy můžeme popsat jako vázaný systém dvou částic - valenčního elektronu a jádra s elektrony uzavřených slupek. V základním stavu je valenční elektron ve slupce $5s$, takže jeho orbitální magnetický moment je nulový a se svazkem atomů by se po průchodu nehomogenním magnetickým polem nemělo nic stát. V experimentu se však svazek atomů rozdělí na dva, což je plně v souladu s představou vlastního magnetického momentu elektronu. Z úhlu, pod kterým tyto dva rozdělené svazky atomů stříbra vylétají je možno určit i velikost vlastního magnetického momentu elektronu. Ukázalo se, že je ve velmi dobré



A) Schéma experimentu

1 Svazek atomů 3 Rozštěpené svazky částic
2 Póly magnetu 4 Stínítko



B) Běh průběhu
síločar magnetického pole

Obrázek 11.1: Sternův-Gerlachův pokus

shodě s velikostí Bohrova magnetonu, $|\mu| = \mu_0$. Poznamenejme, že později byl analogický experiment proveden i s atomárním vodíkem se stejným výsledkem.

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. 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

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (11.13)$$

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 (11.13) znamená přechod od Hilbertova prostoru $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ k prostoru $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$. Skalární součin v tomto prostoru je definován vztahem

$$(\Psi, \Phi) := \sum_{k=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} \psi_k^*(\vec{x}) \phi_k(\vec{x}) d^3x = \sum_{\xi=\pm} \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{x}, \xi) \phi(\vec{x}, \xi) d^3x \quad (11.14)$$

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 $\hat{H} = \hat{H} \otimes \mathbb{I}_{\mathbb{C}^2}$.

Projekci vlastního magnetického momentu do osy z (směru magnetického pole) naopak přiřadíme operátor $\hat{\mu}_3$, který působí netriviálně pouze v prostoru $\mathbb{C}^2$, zatímco v prostoru $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ působí pouze jako násobení konstantou

$$\hat{\mu}_3 := \begin{pmatrix} \mu_0 & 0 \\ 0 & -\mu_0 \end{pmatrix}. \quad (11.15)$$

Standardní bázi $\mathbb{C}^2$ tedy ztotožníme s vlastními vektory $\hat{\mu}_3$, které odpovídají kladné, resp. záporné, projekci vlastního magnetického momentu do osy z .

Souvislost orbitálního magnetického momentu s momentem hybnosti (11.8) přivedla G. E. Uhlenbecka a S. Goudsmita k hypotéze (1925), že podobně jako orbitální, i **vlastní magnetický moment elektronu 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 $\mathbb{C}^2$ a vzájemně komutují stejným způsobem jako složky momentu hybnosti**

$$\boxed{[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{S}_l}. \quad (11.16)$$

Vztah mezi spinem a vlastním magnetickým momentem elektronu je

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{2\mu_0}{\hbar} \hat{\vec{S}}, \quad (11.17)$$

Faktor 2 je v rámci této teorie nutné brát jako fenomenologickou konstantu. Její vysvětlení je možno podat až v rámci relativistické kvantové mechaniky.

Operátory projekce spinu $\hat{S}_j$ jsou ve standardní bázi $\mathbb{C}^2$, kterou stejně jako v (11.15) spojíme s vlastními vektory $\hat{\mu}_3$ (a tedy i $\hat{S}_3$), reprezentovány pomocí tzv. *Pauliho matic* σ_j

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Přímým výpočtem lze ukázat, že Pauliho matice splňují komutační relace

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkl}\sigma_l, \quad (11.19)$$

ze kterých plyne (11.16). Pro Pauliho matice platí další vztahy užitečné při různých výpočtech. Uveďme nejdůležitější z nich

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger, \quad (11.20)$$

$$\text{Tr } \sigma_j = 0, \quad (11.21)$$

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}\mathbb{I}. \quad (11.22)$$

Mimo to spolu s jednotkovou maticí tvoří $\{\sigma_j \mid j = 1, 2, 3\}$ (hermitovskou) bazi v prostoru komplexních matic 2×2 . Násobení Pauliho matic

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk}\mathbb{I} + i\varepsilon_{jkl}\sigma_l \quad (11.23)$$

plyne okamžitě z (11.19), (11.22).

Cvičení 76. Ukažte, že vlastní čísla operátoru projekce spinu do směru $\vec{n}$, definovaného předpisem $\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}$, kde $\vec{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$, jsou $\pm \frac{\hbar}{2}$. Najděte odpovídající vlastní vektory.

Cvičení 77. Napište vlnovou funkci $\Psi(\vec{x})$ základního stavu částice v poli Coulombova potenciálu s hodnotou z -ové, resp. x -ové, resp. y -ové složky spinu rovné $\frac{\hbar}{2}$.

Cvičení 78. Nechť pro volnou částici se spinem je naměřena hodnota z -ové složky spinu $s_z = \frac{\hbar}{2}$. Jestliže vzápětí měříme hodnotu spinu ve směru, který se z -ovou osou svírá úhel Θ , jaké můžeme naměřit hodnoty a s jakou pravděpodobností?

Snadno se ukáže, že spektrum všech tří operátorů $\hat{S}_j$ je tvořeno vlastními čísly $\pm \frac{\hbar}{2}$. Obdobně to platí pro projekci spinu do jakéhokoli směru, viz. cvičení (76). Neznamená to však že hodnoty všech tří složek spinu v jednom stavu jsou $\pm \frac{\hbar}{2}$. Pokud je např. částice ve stavu odpovídajícím kladné projekci spinu do z -ové osy, pak hodnota projekce jejího spinu do směru kolmého na osu z není vůbec určena - podle cvičení (78) je pravděpodobnost naměření kladné i záporné projekce spinu rovna $\frac{1}{2}$.

Cvičení 79. Ukažte, že $\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{I}$.

Ze cvičení (79) plyne, že operátor $\hat{S}^2$ je násobek jednotkové matice, a můžeme ho zapsat ve tvaru $\hat{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)\hat{I}$, kde $s = \frac{1}{2}$. V případě elektronu tedy hovoříme o částici se spinem $\frac{1}{2}$. Poznamenejme, že existují i kvantové částice s jinou velikostí spinu než $\frac{1}{2}$. Možné hodnoty velikosti spinu určíme v kapitole 11.4.

Cvičení 80. Uvažujte systém (tzv. supersymetrický harmonický oscilátor) popsany na Hilbertovu prostoru $L^2(\mathbb{R}, dx) \otimes \mathbb{C}^2$ hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \otimes \mathbb{I} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \otimes \mathbb{I} + \frac{\hbar\omega}{2}\mathbb{I} \otimes \sigma_3.$$

Dále je dán operátor

$$\hat{Q} = \frac{1}{2\sqrt{m}}\sigma_1(\hat{P} + i\omega m\sigma_3\hat{X}).$$

Nalezněte $\hat{Q}^\dagger$, $\hat{Q}^2$, $[\hat{H}, \hat{Q}]$ 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.)

11.3 Pauliho rovnice. Normální Zeemanův jev

Z výsledku Sternova-Gerlachova pokusu a rozštěpení energetických hladin atomů v magnetickém poli jsme došli k hypotéze, že stavy elektronu v atomu jsou charakterizovány též hodnotou čistě kvantové veličiny nazývané spin. Síly, které působí na elektron v magnetickém poli jsou na spinu závislé a musí být proto zahrnuty do hamiltoniánu. W. Pauli navrhl rozšíření hamiltoniánu pro elektron (kde $q = -e$) v elektromagnetickém poli na tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}[\vec{\hat{P}} + e\vec{\hat{A}}]^2 - e\hat{\phi} + \frac{2\mu_0}{\hbar}\vec{\hat{B}} \cdot \vec{\hat{S}}. \quad (11.24)$$

Rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

kde $\hat{H}$ je tvaru (11.24) 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

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{H}_1\phi, \quad (11.25)$$

kde $\hat{H}_1$ je spinově nezávislá část (11.24), pak řešení Pauliho rovnice lze zapsat způsobem

$$\Psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}, t) \\ \psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}}t\right) \begin{pmatrix} \phi_1(\vec{x}, t) \\ \phi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (11.26)$$

kde

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}}t\right) = \cos\left(\frac{\mu_0}{\hbar}Bt\right) - i\frac{\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{B} \sin\left(\frac{\mu_0}{\hbar}Bt\right). \quad (11.27)$$

Pokud má navíc počáteční podmínka (v čase $t_0 = 0$) pro Pauliho rovnici faktorizovaný tvar

$$\Psi(\vec{x}, 0) = \phi(\vec{x}, 0)\psi_S(0), \quad \phi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x), \quad \psi_S \in \mathbb{C}^2,$$

pak tento tvar zůstává i pro $t > 0$, tj.

$$\Psi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}, t)\psi_S(t),$$

kde $\phi(\vec{x}, t)$ je řešením Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem $\hat{H}_1$ (11.25) a

$$\psi_S(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}}t\right) \psi_S(0).$$

Cvičení 81. 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 82. Ukažte, že pokud výraz $\exp\{i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}\}$ definujeme pomocí řady

$$\exp\{i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}\} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^n}{n!}, \quad (11.28)$$

pak platí

$$\exp\{i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}\} = \cos(a) + i\frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{a} \sin(a), \quad a = \|\vec{a}\|. \quad (11.29)$$

Rozštěpení energetických hladin v důsledku existence vlastního magnetického momentu elektronu je pak možno popsat Pauliho hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\mu_0}{\hbar}\vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} + \frac{2\mu_0}{\hbar}\vec{B} \cdot \hat{\vec{S}}, \quad (11.30)$$

kde $\hat{H}_0$ (což je např. hamiltonián elektronu v coulombickém poli) popisuje elektron bez magnetického pole. Řešením bezčasové Pauliho rovnice $\hat{H}\Psi = E\Psi$ 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 elektron 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

$$\Psi_{n,l,m,+}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{n,l,m}(\vec{x}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{n,l,m,-}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{n,l,m}(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (11.31)$$

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 Sternovým-Gerlachovým pokusem.

Cvičení 83. *Liší se rozštěpení N -té excitované hladiny pro částici v Coulombickém poli a v poli harmonického oscilátoru?*

Poznamenejme, že normální Zeemanův jev je experimentálně pozorován v silném magnetickém poli. Ve slabém poli dochází k tzv. anomálnímu Zeemanovu jevu, kde je spektrum podstatně složitější - multiplety obsahují sudý počet hladin, jejichž vzdálenost navíc závisí na projekci spinu elektronu do směru magnetického pole. S jeho popisem a vysvětlením se seznámíme v kapitole (13.4), detailněji je pak zpracováno např. [3, kap. 8.5].

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.

11.4 Algebraická teorie momentu hybnosti

Jak už jsme poznamenali v podkapitole 11.2, vlastní i orbitální moment hybnosti mají stejné komutační relace

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_m] = i\hbar \varepsilon_{kmn} \hat{J}_n. \quad (11.32)$$

Tyto relace lze zároveň považovat za definici násobení prvků baze v Lieovské algebře $\mathfrak{su}(2)$, která úzce souvisí s grupou otočení $SO(3)$. V dalším odvodíme vlastnosti společných vlastních vektorů 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 (11.32). Jediné, co budeme navíc předpokládat, je samosdruženost. Z hlediska zmíněné Lieovské algebry to znamená konstrukci jejich konečně rozměrných ireducibilních reprezentací.

Podstatným způsobem budeme při tom využívat tzv. posunovacích operátorů

$$\hat{J}_{\pm} := \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2, \quad [\hat{J}_3, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{J}_{\pm} \quad (11.33)$$

s jejichž obdobou jsme se seznámili v podkapitole 8.3. Snadno pro ně odvodíme, že

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - \hbar \hat{J}_3 = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3. \quad (11.34)$$

Nechť $|\lambda, \mu\rangle$ je společný vlastní vektor operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ s vlastními hodnotami λ, μ

$$\hat{J}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad \hat{J}_3|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle. \quad (11.35)$$

Prozkoumejme, jaké jsou možné hodnoty vlastních čísel λ a μ . Ze samosdruženosti operátorů $\hat{J}_1$ a $\hat{J}_2$ plyne, že pro libovolný prvek Hilbertova prostoru $|\phi\rangle$ platí

$$\langle\phi|\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2|\phi\rangle = \|\hat{J}_1|\phi\rangle\|^2 + \|\hat{J}_2|\phi\rangle\|^2 \geq 0,$$

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

$$\lambda \geq \mu^2. \quad (11.36)$$

Na druhé straně díky (11.33)

$$\hat{J}_+|\lambda, \mu\rangle = \alpha_{\lambda, \mu}^{(+)}|\lambda, \mu + \hbar\rangle,$$

takže musí existovat maximální vlastní hodnota $\mu_{\max}$ taková, že $\hat{J}_+|\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0$. V opačném případě by totiž byla porušena nerovnost (11.36). Aplikujeme-li operátor $\hat{J}_- \hat{J}_+$ na $|\lambda, \mu\rangle$ a použijeme (11.34) a (11.35), 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

$$\lambda = \mu_{\max}^2 + \hbar \mu_{\max}. \quad (11.37)$$

Stejnými úvahami, kde zaměníme $\hat{J}_+$ a $\hat{J}_-$, zjistíme, že musí existovat minimální vlastní hodnota $\mu_{\min}$, pro kterou platí

$$\lambda = \mu_{\min}^2 - \hbar \mu_{\min}. \quad (11.38)$$

Porovnáním (11.37) a (11.38) dostaneme $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$. Mimo to je zřejmé, že opakovaným působením operátoru $\hat{J}_+$ na $|\lambda, \mu_{\min}\rangle$ dostaneme vektor úměrný $|\lambda, \mu_{\max}\rangle$. Tj. existuje celé nezáporné k tak, že

$$\mu_{\min} + k\hbar = \mu_{\max} = -\mu_{\min}.$$

Odtud

$$\mu_{\max} = -\mu_{\min} = j\hbar, \quad j \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\right\},$$

$$\lambda = j(j+1)\hbar^2, \quad \mu = m\hbar, \quad m \in \{j, j-1, j-2, \dots, -j\} \quad (11.39)$$

K označení vlastních vektorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ se pak místo vlastních čísel λ, μ častěji používá kvantových čísel j, m , tj. přiřadíme jim kety $|j, m\rangle$, které splňují

$$\hat{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle, \quad \hat{J}_3|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle.$$

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 (11.39) 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 $1/2$ jako např. elektron, proton, neutron a další, ale také s vyššími (polo)celými spiny, což bylo experimentálně potvrzeno.

Cvičení 84. *Jak vypadají posunovací operátory $\hat{J}_\pm$ pro spin $\frac{1}{2}$ zavedený v kapitole 11.2?*

Cvičení 85. *S použitím výsledků cvičení 53 najděte $(2j+1) \times (2j+1)$ matice J_k splňující relace (11.32), které reprezentují operátory $\hat{J}_k$ v bázi $\{|j, m\rangle | m = j, j-1, \dots, -j\}$ tvořené vlastními vektory $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2$ (tyto matice určují ireducibilní reprezentace algebry $\mathfrak{su}(2)$). Ověřte, že pro $j = \frac{1}{2}$ jsou shodné se složkami spinu.*

Kapitola 12

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. Označíme-li si částice na začátku experimentu 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.

12.1 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 funkci $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2)$.

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, tj. neinteragujících částic. Taková teorie však nemá žádný smysl, přesněji je ekvivalentní jednočásticové teorii pro každou ze složek systému. Obecný stav systému dvou rozlišitelných bezspinových částic je tedy popsán kvadraticky integrabilní funkcí šestice proměnných $\vec{x}_1, \vec{x}_2$. Množina všech takových funkcí tvoří Hilbertův prostor $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^6, d^6x)$, který můžeme zapsat jako tenzorový součin jednočásticových Hilbertových prostorů

$$L^2(\mathbb{R}^6, d^6x) = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x).$$

12.1.1 Matematická vsuvka 4 - tenzorový součin Hilbertových prostorů

V této matematické vsuvce zavedeme konstruktivně tenzorový součin Hilbertových prostorů, uvedeme jeho základní vlastnosti a ukážeme několik jednoduchých příkladů. Omezíme se na tenzorový součin dvou Hilbertových prostorů, rozšíření pro více prostorů je přímočaré. Pro rigoróznější popis, zejména pokud jde o tenzorový součin prostorů nekonečné dimenze, odkazujeme na literaturu [1].

Uvažujme dva Hilbertovy prostory $\mathcal{H}^{(1)}$ a $\mathcal{H}^{(2)}$. Pro rozlišení budeme vektory z $\mathcal{H}^{(k)}$ značit kety $|\psi^{(k)}\rangle$. Definujeme bilineární a bijektivní zobrazení $\otimes : \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathcal{H}$, které každé dvojici vektorů $|\psi^{(1)}\rangle$ a $|\psi^{(2)}\rangle$ přiřadí vektor, který značíme $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle$. Z bilinearity a bijektivnosti zobrazení $\otimes$ plyne, že $\mathcal{H}$ je vektorový prostor dimenze $\dim \mathcal{H}^{(1)} \cdot \dim \mathcal{H}^{(2)}$. Skalární součin v $\mathcal{H}$ zavedeme pomocí skalárních součinů v $\mathcal{H}^{(k)}$. Pro vektory

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle, \quad |\Phi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle, \quad (12.1)$$

definujeme skalární součin způsobem

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \phi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle \langle \phi^{(2)} | \psi^{(2)} \rangle,$$

a na lineární kombinace ho rozšíříme tak, aby to byla sesquilineární forma. Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ nazýváme **tenzorovým součinem** Hilbertových prostorů $\mathcal{H}^{(1)}$ a $\mathcal{H}^{(2)}$ a značíme $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$.

Jsou-li množiny $\{|\psi_i^{(1)}\rangle\}$ a $\{|\psi_j^{(2)}\rangle\}$ ON baze v $\mathcal{H}^{(1)}$ a $\mathcal{H}^{(2)}$, pak množina $\{|\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle\}$ tvoří ON bazi v $\mathcal{H}$. Nechtě vektory $|\phi^{(k)}\rangle$ mají následující rozvoj do výše zmíněných ON bazí

$$|\phi^{(1)}\rangle = \sum_i a_i |\psi_i^{(1)}\rangle, \quad |\phi^{(2)}\rangle = \sum_j b_j |\psi_j^{(2)}\rangle.$$

Jejich tenzorovým součinem je vektor

$$|\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle. \quad (12.2)$$

Jeho složky jsou tedy dány součinem složek vektorů $|\phi^{(k)}\rangle$.

Poznámka: ve fyzikální literatuře se často symbol $\otimes$ vynechává, tj.

$$|\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle \equiv |\phi^{(1)}\rangle |\phi^{(2)}\rangle.$$

Příklad: Uvažujme $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3 \cong \mathbb{C}^6$, a dva vektory vyjádřené ve standardních bazích

$$\phi^{(1)} = (1, 2)^T, \quad \phi^{(2)} = (3, 4, 5)^T.$$

Jejich tenzorový součin je vektor

$$\phi^{(1)} \otimes \phi^{(2)} = (3, 4, 5, 6, 8, 10)^T.$$

Obecné vektory z tenzorového součinu $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ lze zapsat ve tvaru

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{i,j} |\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle, \quad |\Phi\rangle = \sum_{m,n} d_{m,n} |\psi_m^{(1)}\rangle \otimes |\psi_n^{(2)}\rangle, \quad (12.3)$$

a jejich skalární součin je roven

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_{m,n,i,j} d_{m,n}^* c_{i,j} \langle \psi_m^{(1)} | \psi_i^{(1)} \rangle \langle \psi_n^{(2)} | \psi_j^{(2)} \rangle = \sum_{i,j} d_{i,j}^* c_{i,j}.$$

Zmíňme se krátce o operátorech na tenzorovém součinu. Operátory působící na prostorech $\mathcal{H}^{(k)}$ lze doplnit jednotkou a rozšířit na celý $\mathcal{H}$

$$\hat{A}^{(1)} = \hat{A} \otimes \mathbb{I}, \quad \hat{A}^{(2)} = \mathbb{I} \otimes \hat{A}.$$

Platí-li

$$\hat{A} |\psi^{(1)}\rangle = a |\psi^{(1)}\rangle,$$

pak libovolný vektor tvaru $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $\hat{A}^{(1)}$ s vlastním číslem a . Spektra operátorů $\hat{A}$ a $\hat{A}^{(k)}$ jsou tedy stejná, ale změní se násobnost vlastních čísel.

Uvažujme operátory $\hat{A}^{(1)}$, $\hat{B}^{(2)}$ a jejich součet $\hat{C} = \hat{A}^{(1)} + \hat{B}^{(2)}$. Nechť platí

$$\hat{A} |\alpha_i^{(1)}\rangle = a_i |\alpha_i^{(1)}\rangle, \quad \hat{B} |\beta_j^{(2)}\rangle = b_j |\beta_j^{(2)}\rangle.$$

Operátory $\hat{A}^{(1)}$ a $\hat{B}^{(2)}$ komutují

$$[\hat{A}^{(1)}, \hat{B}^{(2)}] = 0,$$

a jejich společné vlastní vektory jsou $|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\beta_j^{(2)}\rangle$. Ty jsou navíc vlastními vektory operátoru $\hat{C}$

$$\hat{C}|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\beta_j^{(2)}\rangle = (a_i + b_j)|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\beta_j^{(2)}\rangle.$$

Vraťme se ke kvantově-mechanickému popisu rozlišitelných částic. Označme Hilbertův prostor j -té částice jako $\mathcal{H}^{(j)}$. Hilbertův prostor systému N rozlišitelných částic je pak dán tenzorovým součinem

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}^{(j)}.$$

Obecný stav systému je popsán nějakým jednotkovým vektorem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Necht' množiny $\{|\psi_{n_j}^{(j)}\rangle\}$ tvoří ortonormální baze v $\mathcal{H}^{(j)}$. Pak vektory $|\psi_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{n_N}^{(N)}\rangle$ tvoří ortonormální bazi v $\mathcal{H}$. Stav systému rozlišitelných částic tedy můžeme zapsat ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_N} c_{n_1, \dots, n_N} |\psi_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{n_N}^{(N)}\rangle.$$

Poznamenejme, že pokud existují jednočásticové stavy $|\phi^{(j)}\rangle$ takové, že

$$|\psi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi^{(N)}\rangle, \quad (12.4)$$

pak stav $|\psi\rangle$ nazýváme *separovaný*. V tomto případě jsou stavy jednotlivých částic na sobě nezávislé. Ne každý vektor z $\mathcal{H}$ je možné zapsat tímto způsobem; stavy, které nelze zapsat ve tvaru (12.4), označujeme jako *provázané*.

Příklad: Stavový prostor systému N rozlišitelných částic se spinem $1/2$, jejichž vlnové funkce závisejí na dodatečné proměnné $\xi \in \{+, -\}$ (viz kapitola 11.2), je tenzorovým součinem jednočásticových prostorů $\mathcal{H}^{(j)} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N}, d^{3N}x) \otimes \mathbb{C}^{2^N}.$$

Jeho prvky jsou kvadraticky integrabilní funkce proměnných $\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N$ a skalární součin v tomto prostoru je definován způsobem

$$(\psi, \phi) := \sum_{\xi_1 = \pm} \cdots \sum_{\xi_N = \pm} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \psi^*(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) \phi(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) d^{3N}x.$$

Pozorovatelným systému rozlišitelných částic odpovídají samosdružené operátory na $\mathcal{H}$. Zvláštní roli mezi nimi hrají tzv. *jednočásticové* pozorovatelné, které působí netriviálně pouze v $\mathcal{H}^{(j)}$, tzn. mají tvar

$$\hat{A}^{(j)} = \underbrace{\mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}}_{(j-1)\text{-krát}} \otimes \hat{A} \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}$$

Typickým příkladem je operátor kinetické energie první částice $\hat{T}^{(1)} := \frac{1}{2M_1} \hat{P}^2 \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}$. Operátor celkové kinetické energie systému je pak dán součtem

$$\hat{T} = \sum_{j=1}^N \hat{T}^{(j)}.$$

Některé pozorovatelné nemusí mít tvar součtu jednočásticových pozorovatelných. Například operátor popisující interakci první a druhé částice lze zapsat jako

$$\hat{U}^{(1,2)} = \hat{U} \otimes \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I},$$

kde $\hat{U}$ působí netriviálně na prostoru $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$.

12.1.2 Problém dvou těles v kvantové mechanice

Problém dvou těles je v kvantové, stejně jako v 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

$$\vec{X} := \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{x} := \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad (12.5)$$

dostaneme Lagrangeovu funkci pro dvě částice ve tvaru

$$L(\vec{X}, \vec{x}, \dot{\vec{X}}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{\vec{X}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}). \quad (12.6)$$

Kanonicky sdružené hybnosti jsou

$$\vec{P} := \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = (m_1 + m_2)\dot{\vec{X}} = m_1 \dot{\vec{x}}_1 + m_2 \dot{\vec{x}}_2, \quad (12.7)$$

$$\vec{p} := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{x}} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (12.8)$$

a Hamiltonova funkce má tvar součtu dvou Hamiltonových funkcí

$$H(\vec{X}, \vec{x}, \vec{P}, \vec{p}) = \frac{\vec{P}^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \vec{p}^2 + V(\vec{x}) = H_t(\vec{P}) + H_{\text{rel}}(\vec{x}, \vec{p}). \quad (12.9)$$

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 (12.5) vede i na zjednodušení kvantově mechanického popisu dvou částic. Zapišeme-li vlnovou funkci systému jako funkci nových souřadnic

$$\Psi(\vec{X}, \vec{x}) := \psi(\vec{x}_1(\vec{X}, \vec{x}), \vec{x}_2(\vec{X}, \vec{x})), \quad (12.10)$$

pak transformace (12.5) vede na transformaci parciálních derivací

$$\frac{\partial}{\partial X_j} = \frac{\partial}{\partial x_{1,j}} + \frac{\partial}{\partial x_{2,j}}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (12.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{1}{m_1 + m_2} \left(m_2 \frac{\partial}{\partial x_{1,j}} - m_1 \frac{\partial}{\partial x_{2,j}} \right), \quad j = 1, 2, 3, \quad (12.12)$$

která odpovídá transformaci operátorů hybnosti analogické (12.7), (12.8).

Hamiltonián systému dvou interagujících částic

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + \hat{V}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad (12.13)$$

transformací (12.5) přejde na tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_X - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_x + \hat{V}(\vec{x}), \quad (12.14)$$

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 $2m_p$.

12.2 Skládání momentů hybnosti

V klasické mechanice je moment hybnosti složených systémů dán prostým sčítáním vektorů, tj. 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 nebo poločíslných násobků $\hbar$. Je proto užitečné zjistit jaké stavy složeného systému odpovídají těmto hodnotám. Složitost problému skládání momentů hybnosti narůstá s počtem složek, a proto se v dalším omezíme na systém složený ze dvou podsystémů, kde každý je v nějakém vlastním stavu momentu hybnosti, tj. společném vlastním stavu $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. Poznamenejme, že se nemusí nutně jednat o skládání momentů hybnosti dvou různých částic. Postup bude využívat pouze komutační relace složek momentu hybnosti, a lze ho tak využít i pro skládání orbitálního momentu hybnosti a spinu jedné částice.

Nechť tedy máme systém složený ze dvou rozlišitelných podsystémů, pro které byly naměřeny hodnoty momentů hybnosti odpovídající kvantovým číslům l_i, m_i . Znamená to tedy, že prvnímu lze přiřadit ket $|a_1, l_1, m_1\rangle$ a druhému $|a_2, l_2, m_2\rangle$, kde hodnoty a_1, a_2 představují hodnoty ostatních pozorovatelných kompatibilních s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$, např. celkové energie. Zanedbáme-li závislost stavů na vlastních číslech a_1, a_2 , pak stav celého systému můžeme popsat ketem $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$, pro který platí

$$(\hat{L}^{(1)})^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = l_1(l_1 + 1)\hbar^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (12.15)$$

$$(\hat{L}^{(2)})^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = l_2(l_2 + 1)\hbar^2 |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (12.16)$$

$$\hat{L}_3^{(1)} |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = m_1\hbar |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle \quad (12.17)$$

$$\hat{L}_3^{(2)} |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = m_2\hbar |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle. \quad (12.18)$$

Pro dané l_1, l_2 (a a_1, a_2) tvoří tyto stavy Hilbertův prostor $\mathcal{H}^{(l_1, l_2)}$ dimenze $(2l_1+1)(2l_2+1)$, který můžeme zapsat jako tenzorový součin

$$\mathcal{H}^{(l_1, l_2)} = \mathcal{H}^{(l_1)} \otimes \mathcal{H}^{(l_2)}, \quad \mathcal{H}^{(l_i)} = [\{|l_i, m_i\rangle, m_i = l_i, l_i - 1, \dots, -l_i\}]_\lambda.$$

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 netriviálně pouze na $\mathcal{H}^{(l_1)}$ a $\hat{L}_k^{(2)}$ působí pouze na $\mathcal{H}^{(l_2)}$. Znamená to tedy, že operátory $\hat{L}_k^{(1)}$ a $\hat{L}_j^{(2)}$ komutují. Odtud je pak snadné ukázat, že

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{J}_m, \quad (12.19)$$

a tedy operátory $\hat{J}_k$ komutují jako složky momentu hybnosti. Z podkapitoly 11.4 pak plyne, že vlastní hodnoty operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ 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

$$[\hat{J}_k, (\hat{L}^{(1)})^2] = 0, \quad [\hat{J}_k, (\hat{L}^{(2)})^2] = 0, \quad (12.20)$$

takže operátory $(\hat{L}^{(1)})^2$, $(\hat{L}^{(2)})^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_3$ jsou kompatibilní 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

$$(\hat{L}^{(1)})^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = l_1(l_1+1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (12.21)$$

$$(\hat{L}^{(2)})^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = l_2(l_2+1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (12.22)$$

$$\hat{J}^2 |l_1, l_2, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |l_1, l_2, j, m\rangle \quad (12.23)$$

$$\hat{J}_3 |l_1, l_2, j, m\rangle = m\hbar |l_1, l_2, j, m\rangle. \quad (12.24)$$

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 (12.21)–(12.24) pro $j = m = l_1 + l_2$. Rovnice (12.21), (12.22) se shodují s (12.15), (12.16) a rovnice (12.24) je jednoduchým důsledkem (12.15), (12.16). K odvození (12.23) se hodí formule

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = (\hat{L}^{(1)})^2 + (\hat{L}^{(2)})^2 + 2\hat{L}_3^{(1)}\hat{L}_3^{(2)} + \hat{L}_+^{(1)}\hat{L}_-^{(2)} + \hat{L}_-^{(1)}\hat{L}_+^{(2)}, \quad (12.25)$$

kterou lze snadno odvodit z definice posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$. Znamená to tedy, že $|l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle = |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$.

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

$$|l_1, l_2, l_1 + l_2, m\rangle, \text{ kde } m = l_1 + l_2, \dots, -l_1 - l_2$$

působením posunovacích operátorů $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 = \hat{L}_\pm^{(1)} + \hat{L}_\pm^{(2)}$.

V dalších krocích (pro $l_1, l_2 \neq 0$) je nutné vytvořit stavy $|l_1, l_2, j, m\rangle$ s $j < l_1 + l_2$. Začneme s vektorem $|l_1, l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$. Z vlastnosti

$$\hat{J}_3|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle,$$

je zřejmé, že musí být lineární kombinací stavů $|l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle$ a $|l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$. Z předchozího víme, že vektor $|l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle$ je rovněž lineární kombinací stejných ketů

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} \hat{J}_- |l_1, l_2, l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} (\hat{L}_-^{(1)} + \hat{L}_-^{(2)}) |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} \left(\alpha_{l_1, l_1}^{(-)} |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle + \alpha_{l_2, l_2}^{(-)} |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle \right). \end{aligned} \quad (12.26)$$

Protože kety $|l_1, l_2, j, m\rangle$ splňují rovnice (12.21)–(12.24) pro různá vlastní čísla, jsou pro různá j nebo m navzájem ortogonální. Musí tedy platit

$$|l_1, l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle = \frac{1}{\alpha_{l_1+l_2, l_1+l_2}^{(-)}} \left(\alpha_{l_2, l_2}^{(-)} |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle - \alpha_{l_1, l_1}^{(-)} |l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - 1\rangle \right). \quad (12.27)$$

Přímým výpočtem lze ukázat, že tento vektor splňuje rovnice (12.21)–(12.24) pro $j = m = l_1 + l_2 - 1$. Postupnou aplikací operátoru $\hat{J}_-$ 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 $j = l_1 + l_2 - 2, j = l_1 + l_2 - 3, \dots, j_{min}$. Vektor $|l_1, l_2, l_1 + l_2 - k, l_1 + l_2 - k\rangle$ musí být lineární kombinací $k + 1$ ketů $|l_1, l_1\rangle \otimes |l_2, l_2 - k\rangle, |l_1, l_1 - 1\rangle \otimes |l_2, l_2 - k + 1\rangle, \dots, |l_1, l_1 - k\rangle \otimes |l_2, l_2\rangle$. k vektorů $|l_1, l_2, l_1 + l_2 - n, l_1 + l_2 - k\rangle$, $n = 0, 1, \dots, k - 1$, které rovněž leží v tomto podprostoru, již známe. Ket $|l_1, l_2, l_1 + l_2 - k, l_1 + l_2 - k\rangle$ je pak jednoznačně určený jako jejich ortogonální doplněk. Zbývá zjistit, kolik je j_{min} . Rozměr podprostoru stavů s daným j je $2j + 1$ a rozměr Hilbertova prostoru $\mathcal{H}^{(l_1, l_2)}$ pro dané l_1, l_2 je $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Musí tedy platit

$$(2l_1 + 1)(2l_2 + 1) = \sum_{j=j_{min}}^{l_1+l_2} (2j + 1) = (l_1 + l_2 + 1)^2 - j_{min}^2, \quad (12.28)$$

z čehož plyne $j_{min} = |l_1 - l_2|$.

Množiny stavů $\{|l_1, l_2, j, m\rangle | j = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2, m = j, \dots, -j\}$ a $\{|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle | m_1 = l_1, \dots, -l_1, m_2 = l_2, \dots, -l_2\}$ tvoří dvě ortonormální baze v prostoru $\mathcal{H}^{(l_1, l_2)}$. Elementy matice přechodu mezi těmito dvěma bazemi se nazývají Clebschovy–Gordanovy koeficienty a značí se

$$(l_1, l_2, m_1, m_2 | j, m) \equiv \left(\langle l_1, m_1 | \otimes \langle l_2, m_2 | \right) | l_1, l_2, j, m \rangle.$$

Způsob jejich výpočtu je možno nalézt např. v [1]. Pro Condon-Shortleyovu konvenci, kdy $\alpha_{lm}^{\pm} \geq 0$, jsou Clebschovy–Gordanovy koeficienty reálné. Platí tedy

$$|l_1, l_2, j, m\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (l_1, l_2, m_1, m_2 | j, m) |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle,$$

a současně

$$|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = \sum_{j=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-j}^j (l_1, l_2, m_1, m_2 | j, m) |l_1, l_2, j, m\rangle.$$

Pokud je tedy systém ve stavu $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$, pak pravděpodobnost naměření hodnoty celkového momentu hybnosti s danými kvantovými čísly j a m je rovna $|(l_1, l_2, m_1, m_2 | j, m)|^2$. Pro Clebschovy–Gordanovy koeficienty platí výběrová pravidla

$$(l_1, l_2, m_1, m_2 | j, m) \neq 0 \Leftrightarrow m_1 + m_2 = m, |l_1 - l_2| \leq j \leq l_1 + l_2.$$

Na závěr této části se podíváme na úlohu skládání momentů hybnosti z hlediska teorie reprezentací. Operátory $\hat{L}_k^{(i)}$ představují reprezentace Lieovy algebry $\mathfrak{su}(2)$ na prostorech $\mathcal{H}^{(l_i)}$. Tyto reprezentace jsou ireducibilní, tj. operátory $\hat{L}_k^{(i)}, k = 1, 2, 3$, nemají společný invariantní podprostor. Operátory celkového momentu hybnosti $\hat{J}_k$ tvoří opět reprezentaci $\mathfrak{su}(2)$ na $\mathcal{H}^{(l_1, l_2)}$. Tato reprezentace je ale reducibilní - operátory $\hat{J}_k$ mají společné vlastní podprostory, které jsou určeny hodnotou celkového momentu hybnosti, resp. kvantového čísla j . V bázi tvořené vlastními vektory celkového momentu hybnosti $|l_1, l_2, j, m\rangle$ jsou matice operátorů $\hat{J}_k$ blokově diagonální, jak se lze snadno přesvědčit přímým výpočtem s použitím posunovacích operátorů $\hat{J}_{\pm}$. Reducibilní reprezentaci $\mathcal{H}^{(l_1, l_2)}$ tak lze rozložit na direktní součet ireducibilních reprezentací

$$\mathcal{H}^{(l_1, l_2)} = \mathcal{H}^{(l_1)} \otimes \mathcal{H}^{(l_2)} = \mathcal{H}^{(j=|l_1-l_2|)} \oplus \mathcal{H}^{(j=|l_1-l_2|+1)} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}^{(j=l_1+l_2)},$$

kde

$$\mathcal{H}^{(j=k)} = [\{|l_1, l_2, k, m\rangle, m = k, k-1, \dots, -k\}]_{\lambda}.$$

12.2.1 Hyperjemná struktura základního stavu vodíku

Jako příklad využití teorie skládání momentů hybnosti si ukážeme tzv. hyperjemnou strukturu elektronového obalu vodíku. V důsledku interakce spinu elektronu a spinu protonu (jádra vodíku) bude energie záviset na hodnotě celkového spinu. Pro jednoduchost se přitom omezíme na základní stav, jehož energie je bez interakce spinů rovna

$$E_1 = -R = -13,6 \text{ eV}.$$

Pracujeme v Hilbertově prostoru

$$\mathcal{H}^{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})} = \mathcal{H}^{(\frac{1}{2})} \otimes \mathcal{H}^{(\frac{1}{2})} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{C}^4.$$

Hamiltonián popisující interakci spinů má tvar

$$\hat{H} = E_1 \hat{\mathbb{I}} + \tilde{A} \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)},$$

kde $\tilde{A}$ je zatím neurčená konstanta a $\hat{\vec{S}}^{(e,p)}$ jsou operátory spinu elektronu a protonu, které jsou ve standardní bázi vyjádřeny pomocí matic

$$\hat{\vec{S}}^{(e)} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}, \quad \hat{\vec{S}}^{(p)} = \mathbb{I} \otimes \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}.$$

Spektrum hamiltoniánu lze snadno určit přímým výpočtem. Označíme-li $A = \frac{\hbar^2}{4} \tilde{A}$, pak matice hamiltoniánu je

$$\hat{H} = E_1 \hat{\mathbb{I}} + A \sigma_i \otimes \sigma_i = \begin{pmatrix} E_1 + A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 - A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & E_1 - A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_1 + A \end{pmatrix}.$$

Její vlastní čísla jsou rovna

$$E_{1,1} = E_1 + A, \quad E_{1,0} = E_1 - 3A, \quad (12.29)$$

přičemž hodnota $E_{1,1}$ je trojnásobně degenerovaná. Tento výsledek můžeme obdržet s využitím teorie skládání momentů hybnosti. Obecně můžeme ukázat, že vlastní vektory celkového momentu hybnosti jsou i vlastní vektory operátoru $\hat{\vec{L}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}^{(2)}$. Platí totiž vztah

$$\hat{\vec{L}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^{(1)2} - \hat{L}^{(2)2} \right),$$

odkud už snadno nalezneme

$$\hat{\vec{L}}^{(1)} \cdot \hat{\vec{L}}^{(2)} |l_1, l_2, j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1) \right) |l_1, l_2, j, m\rangle. \quad (12.30)$$

V našem případě je $l_1 = l_2 = \frac{1}{2}$, takže platí

$$\begin{aligned} \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m \right\rangle, \quad m = 1, 0, -1, \\ \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle &= -\frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle. \end{aligned}$$

Vlastní čísla hamiltoniánu jsou tedy skutečně (12.29), přičemž kety $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle$, $m = 1, 0, -1$, odpovídají hodnotě $E_{1,1}$ a ket $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle$ přísluší hodnotě $E_{1,0}$. Vidíme, že při započtení interakce spinů elektronu a protonu se základní energie rozdělí na dvě hladiny podle velikosti celkového spinu atomu vodíků, resp. kvantového čísla j . Z měření spektra vodíku je možné určit hodnotu konstanty A . Přeskoku mezi dvěma hladinami hyperjemné struktury odpovídá mikrovlnné záření o frekvenci $\nu \approx 1420\text{MHz}$, tj. $\Delta E = E_{1,1} - E_{1,0} =$

$4A = h\nu \approx 5,9\mu\text{eV}$. Tato spektrální linie hraje důležitou roli v radioastronomii, kde poskytuje informace o množství a pohybu (díky Dopplerově posunu) atomárního vodíku v galaxiích.

Na závěr uveďme explicitní tvar vlastních vektorů celkového momentu hybnosti (a tedy i Hamiltoniánu) v bázi vlastních vektorů spinu elektronu a protonu. Kety odpovídající hodnotě $j = 1$ a $m = 1, -1$ jsou rovny

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Stav s $j = 1$ a $m = 0$ dostaneme aplikací posunovacího operátoru $\hat{J}_- = \hat{S}_-^{(e)} + \hat{S}_-^{(p)}$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle = \frac{1}{\alpha_{1,1}} \hat{J}_- |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right).$$

Zbývající vektor s $j = m = 0$ leží ve stejném dvourozměrném podprostoru (který odpovídá $m = 0$) jako $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0\rangle$ a je na něj ortogonální, takže

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right).$$

Trojice stavů $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle$, $m = 1, 0, -1$, tvoří tzv. *tripletní podprostor*, k němu ortogonální stav $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle$ se označuje jako *singlet*.

12.2.2 Skládání orbitálního momentu hybnosti a spinu elektronu

Celkový moment hybnosti elektronu je dán součtem jeho orbitálního momentu hybnosti a spinu

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k + \hat{S}_k.$$

V tomto případě jde o skladání momentů hybnosti s $l_1 = l \in \mathbb{Z}_+$ a $l_2 = \frac{1}{2}$. Příklad $l = 0$ je triviální, protože $\mathcal{H}^{(0)}$ má dimenzi jedna. Vlastní vektory celkového momentu hybnosti jsou v tomto případě

$$\begin{aligned} |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \tag{12.31}$$

Pro $l \geq 1$ má Hilbertův prostor

$$\mathcal{H}^{(l, \frac{1}{2})} = \mathcal{H}^{(l)} \otimes \mathcal{H}^{(\frac{1}{2})},$$

dimenzi $2(2l + 1)$ a můžeme ho rozdělit na direktní součet dvou podprostorů lišících se velikostí celkového momentu hybnosti, resp. kvantového čísla $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\mathcal{H}^{(l, \frac{1}{2})} = \mathcal{H}^{(j=l+\frac{1}{2})} \oplus \mathcal{H}^{(j=l-\frac{1}{2})}.$$

Ortonormální baze v těchto podprostorech tvoří vlastní vektory celkového momentu hybnosti $|l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle$, které můžeme rezeptovat do bazí orbitálního momentu hybnosti a spinu způsobem (12.26), (12.27)

$$|l, \frac{1}{2}, l \pm \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m + \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} |l, m - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \quad (12.32)$$

Kromě toho, že se jedná o vlastní vektory $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$, jsou to i vlastní vektory operátoru $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$. Ze vztahu (12.30) plyne

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} |l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m\rangle &= l \frac{\hbar^2}{2} |l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m\rangle, \\ \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} |l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m\rangle &= -(l+1) \frac{\hbar^2}{2} |l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, m\rangle. \end{aligned}$$

Operátor $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ hraje roli u tzv. *spin-orbitální vazby*, která ovlivňuje jemnou strukturu energetických hladin vodíku. S ní se seznámíme v kapitole 13.4.

12.3 Systémy nerozlišitelných částic, Pauliho princip

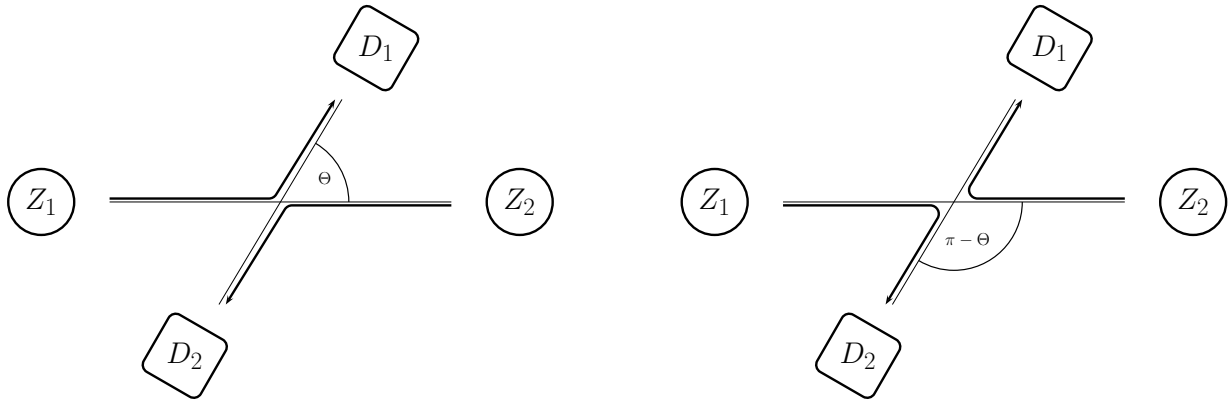
Jak už bylo řečeno na počátku této kapitoly, při popisu jevů na atomární a nižší úrovni označení „první“ či „druhá“ pro nerozlišitelné částice ztrácí smysl. Jak si ukážeme na následujícím myšlenkovém experimentu (podrobněji viz [18], kapitola 1.4), důvodem je to, že kvantová mechanika nepopisuje trajektorie částic.

Uvažujme pružnou srážku dvou částic vyletujících ze zdrojů Z_1 a Z_2 . Problém budeme popisovat v težiškové soustavě. Pod úhly Θ , resp. $\pi - \Theta$ umístíme detektory D_1 a D_2 , viz obrázek 12.1. Detektor D_1 zaznamená buď dopad částice ze zdroje Z_1 (tj. dojde k jejímu rozptylu o úhel Θ), nebo dopad částice ze zdroje Z_2 . Ve druhém případě se částice ze zdroje Z_1 rozptýlí pod úhlem $\pi - \Theta$ a dopadne do detektoru D_2 . Označme počáteční stav částic v čase $t_0 = 0$ jako $|\psi_i\rangle$ a evoluční operátor systému $\hat{U}(t)$. Stav částic těsně před okamžikem detekce t_D bude

$$|\psi_{t_D}\rangle = \hat{U}(t_D)|\psi_i\rangle.$$

Bude nás zajímat pravděpodobnost P , že detektor D_1 zaznamená dopad nějaké částice (tj. že nastane jedna ze situací z obrázku 12.1). Pravděpodobnost P se bude lišit podle typu částic, se kterými experiment provádíme.

Začněme s případem, kdy částice ze zdrojů Z_1 a Z_2 jsou různého druhu. Pak jsou dvě situace z obrázku 12.1 od sebe principiálně odlišitelné, a fakt, že nerozlišujeme mezi spuštěním detektoru D_1 částicí ze zdroje Z_1 nebo Z_2 na tom nic nemění. První situaci z obrázku 12.1, kdy částice ze Z_1 dopadne do D_1 a částice ze Z_2 dopadne do D_2 , odpovídá koncový stav částic který symbolicky zapíšeme jako $|D_1\rangle|D_2\rangle$. Koncový stav ve druhém případě zapíšeme analogicky ve tvaru $|D_2\rangle|D_1\rangle$. Označme $P(Z_i \rightarrow D_1)$ pravděpodobnost



Obrázek 12.1: Rozptyl částic ze zdrojů Z_1 a Z_2 v težišťové soustavě. Pokud detektor D_1 zaznamená dopad, mohla to být buď částice ze zdroje Z_1 , nebo částice ze Z_2 .

dopadu částice ze zdroje Z_i do detektoru D_1 . Ty jsou dány projekcemi dvoučásticového stavu $|\psi_{t_D}\rangle$ na koncové stavy $|D_1\rangle|D_2\rangle$, resp. $|D_2\rangle|D_1\rangle$,

$$P(Z_1 \rightarrow D_1) = |\langle D_1 | \langle D_2 | \psi_{t_D} \rangle|^2, \quad P(Z_2 \rightarrow D_1) = |\langle D_2 | \langle D_1 | \psi_{t_D} \rangle|^2.$$

Pravděpodobnost spuštění detektoru D_1 v případě rozlišitelných částic je pak rovna součtu pravděpodobností obou možností

$$P^{(R)} = P(Z_1 \rightarrow D_1) + P(Z_2 \rightarrow D_1). \quad (12.33)$$

Uvažujme stejný experiment, ale zdroje Z_1 a Z_2 budou nyní vysílat identické částice. V takovém případě není možné zjistit z kterého zdroje vyšla částice, jež spuštění způsobila a pravděpodobnosti $P(Z_i \rightarrow D_1)$ nelze vůbec zavést. Pravděpodobnost spuštění detektoru D_1 bude dána projekcí stavu $|\psi_{t_D}\rangle$ na koncový stav obou částic $|\psi_f\rangle$

$$P = |\langle \psi_f | \psi_{t_D} \rangle|^2.$$

Neboť se jedná o nerozlišitelné částice, zdá se, že stav $|\psi_f\rangle$ může být popsán ketem $|D_1\rangle|D_2\rangle$ stejně jako $|D_2\rangle|D_1\rangle$. Obecně dokonce jejich lineární kombinací

$$|\psi_f\rangle = \alpha|D_1\rangle|D_2\rangle + \beta|D_2\rangle|D_1\rangle.$$

Tento popis je však nepřipustný, neboť pravděpodobnost spuštění detektoru D_1 by pak závisela na neurčených konstantách α, β . Je tedy třeba určit jakými kety (vlnovými funkcemi) budeme popisovat stavy několika nerozlišitelných částic.

Uvažujme systém dvou stejných částic ve stavu popsáném vlnovou funkcí $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$. Označme jako $\tilde{\psi}$ funkci, která z ψ vznikne záměnou proměnných $\vec{x}_1 \leftrightarrow \vec{x}_2$, tj. $\tilde{\psi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) := \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$. Protože částice jsou nerozlišitelné, změnou očíslování se fyzikální stav systému nezmění, a tedy funkce ψ a $\tilde{\psi}$ popisují stejný stav. Musí tedy ležet ve stejném paprsku,

takže se mohou lišit maximálně o násobek nenulovou konstantou C_ψ . Odtud však plyne, že

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = C_\psi \tilde{\psi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = C_\psi \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = C_\psi^2 \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \quad (12.34)$$

takže $C_\psi = \pm 1$. Vlnové 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*. Poznamenejme, že v rozptylovém experimentu rozebíraném na úvod této sekce bude předpověď i výsledek měření pro bosony jiný než pro fermiony. Koncový stav bosonů musí být symetrický

$$|\psi_f^{(B)}\rangle = |D_1\rangle|D_2\rangle + |D_2\rangle|D_1\rangle,$$

zatímco pro fermiony bude antisymetrický

$$|\psi_f^{(F)}\rangle = |D_1\rangle|D_2\rangle - |D_2\rangle|D_1\rangle.$$

Pravděpodobnost spuštění detektoru D_1 v případě bosonů je tedy

$$P^{(B)} = |\langle D_1 | \langle D_2 | \psi_{t_D} \rangle + \langle D_2 | \langle D_1 | \psi_{t_D} \rangle|^2.$$

Pro fermiony dostaneme vztah

$$P^{(F)} = |\langle D_1 | \langle D_2 | \psi_{t_D} \rangle - \langle D_2 | \langle D_1 | \psi_{t_D} \rangle|^2.$$

Rozdílný vztah pro pravděpodobnost spuštění detektoru D_1 je důsledkem symetrie (resp. antisymetrie) dvoučásticové vlnové funkce. Poznamenejme, že výrazy $\langle D_1 | \langle D_2 | \psi_{t_D} \rangle$ a $\langle D_2 | \langle D_1 | \psi_{t_D} \rangle$ představují amplitudy pravděpodobnosti dvou procesů vedoucích ke spuštění detektoru D_1 . Pro bosony tyto amplitudy interferují konstruktivně, pro fermiony destruktivně. V případě rozlišitelných částic sčítáme pravděpodobnosti (12.33), tj. kvadráty amplitud.

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 velikosti s však závisejí vedle souřadnic $\vec{x}_j$ též na proměnných ξ_j nabývajících pouze diskrétních hodnot $s, s-1, \dots, -s$. 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 argumentů, neboť analog podmínky (12.34) 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

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = C_1 \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1, \vec{x}_3) = C_1 C_2 \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_1) = C_2 \psi(\vec{x}_3, \vec{x}_2, \vec{x}_1),$$

ale současně

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = C_2 \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_3, \vec{x}_2) = C_1 C_2 \psi(\vec{x}_3, \vec{x}_1, \vec{x}_2) = C_1 \psi(\vec{x}_3, \vec{x}_2, \vec{x}_1),$$

takže $C_1 = C_2$.

Podobně jako v případě rozlišitelných částic je možno vytvářet vícečásticové vlnové funkce z jednočásticových. Označme symbolem a soubor všech kvantových čísel nutných k jednoznačnému popisu jednočásticového stavu (např. ve sféricky symetrickém poli to budou kvantová čísla N, l, m ; pro částici s nenulovým spinem navíc přibude hodnota projekce spinu). Uvažujme nejprve dvě částice v různých jednočásticových stavech a_1, a_2 . Jsou-li $\psi_{a_j}(\vec{x}, \xi)$ příslušné normalizované vlnové funkce jedné částice, pak

$$\psi_{a_1, a_2}^{(B)}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2) := \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{a_1}(\vec{x}_1, \xi_1) \psi_{a_2}(\vec{x}_2, \xi_2) + \psi_{a_1}(\vec{x}_2, \xi_2) \psi_{a_2}(\vec{x}_1, \xi_1))$$

je vlnová funkce dvou stejných bosonů, a podobně

$$\psi_{a_1, a_2}^{(F)}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2) := \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{a_1}(\vec{x}_1, \xi_1) \psi_{a_2}(\vec{x}_2, \xi_2) - \psi_{a_1}(\vec{x}_2, \xi_2) \psi_{a_2}(\vec{x}_1, \xi_1))$$

je vlnová funkce dvou stejných fermionů. Číselný faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ jsme přidali tak, aby dvoučásticový stav byl normován k jedné. Pokud jsou jednočásticové stavy stejné ($a_1 = a_2 = a$), pak vlnová funkce dvou bosonů je

$$\psi_{a, a}^{(B)}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2) := \psi_a(\vec{x}_1, \xi_1) \psi_a(\vec{x}_2, \xi_2).$$

Dva fermiony ve stejném stavu být nemohou, protože antisymetrizací dostaneme funkci identicky rovnou nule. Tento fakt je speciálním případem Pauliho principu (viz dále).

Vlnová funkce N nerozlišitelných bosonů ve stavech $\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \dots, \psi_{a_N}$ je rovna

$$\psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}^{(B)}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) := \mathcal{N} \sum_{\pi \in S_N} \psi_{a_1}(\vec{x}_{\pi 1}, \xi_{\pi 1}) \dots \psi_{a_N}(\vec{x}_{\pi N}, \xi_{\pi N}), \quad (12.35)$$

kde S_N je grupa permutací N objektů a $\mathcal{N}$ značí normalizační faktor. Pokud jsou jednočásticové stavy a_j různé, pak $\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{N!}}$, v jiném případě je určení $\mathcal{N}$ složitější. Analogicky, vlnová funkce N nerozlišitelných fermionů ve stavech $\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \dots, \psi_{a_N}$ je

$$\psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}^{(F)}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) := \mathcal{N} \sum_{\pi \in S_N} \text{sgn } \pi \psi_{a_1}(\vec{x}_{\pi 1}, \xi_{\pi 1}) \dots \psi_{a_N}(\vec{x}_{\pi N}, \xi_{\pi N}), \quad (12.36)$$

kde $\text{sgn } \pi$ je znaménko permutace π . Antisymetrická vlnová funkce (12.36) se dá zapsat jako tzv. *Slaterův determinant*.

$$\psi_{a_1, a_2, \dots, a_N}(\vec{x}_1, \xi_1, \vec{x}_2, \xi_2, \dots, \vec{x}_N, \xi_N) = \mathcal{N} \det \begin{pmatrix} \psi_{a_1}(\vec{x}_1, \xi_1) & \psi_{a_2}(\vec{x}_1, \xi_1) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_1, \xi_1) \\ \psi_{a_1}(\vec{x}_2, \xi_2) & \psi_{a_2}(\vec{x}_2, \xi_2) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_2, \xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{a_1}(\vec{x}_N, \xi_N) & \psi_{a_2}(\vec{x}_N, \xi_N) & \dots & \psi_{a_N}(\vec{x}_N, \xi_N) \end{pmatrix}. \quad (12.37)$$

Z výrazu (12.37) 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. Normalizační faktor $\mathcal{N}$ pro stav N fermionů je roven $\frac{1}{\sqrt{N!}}$.

Obecně je Hilbertův prostor souboru N nerozlišitelných bosonů (resp. fermionů), roven podprostoru totálně symetrických vektorů $\mathcal{H}^S$ (resp. antisymetrických vektorů $\mathcal{H}^A$), v prostoru $\mathcal{H}_1^{\otimes N}$, kde $\mathcal{H}_1$ je Hilbertův prostor jedné částice. Pokud jednočásticové vlnové funkce ψ_{a_i} tvoří ortonormální bazi v prostoru $\mathcal{H}_1$, pak funkce (12.35), resp. (12.36), složené z jednočásticových stavů tvoří ortonormální bazi v prostoru $\mathcal{H}^S$ popisující soustavu bosonů, resp. $\mathcal{H}^A$ popisující soustavu fermionů.

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 $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$, která je symetrická vůči záměně svých proměnných. Formálně lze tuto vlastnost vyjádřit tak, že pozorovatelné komutují s operátory „záměny částic“ $\hat{P}_\pi$, $\pi \in S_N$,

$$\hat{P}_\pi \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) := \psi(\vec{x}_{\pi 1}, \vec{x}_{\pi 2}, \dots, \vec{x}_{\pi N}) \quad (12.38)$$

Cvičení 86. Najděte energie a vlastní funkce základního a prvního excitovaného stavu dvou nerozlišitelných částic se spinem 0, resp. $\frac{1}{2}$ v poli harmonického oscilátoru.

Cvičení 87. Napište vlnovou funkci základního stavu atomového obalu helia zanedbáme-li odpudivé síly mezi elektrony (tzv. nulová aproximace).

Cvičení 88. Uvažujte dvě částice v (ortogonálních) jednočásticových stavech $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$. Na obou částicích změříme stejnou pozorovatelnou $\hat{A}$, která má čistě bodové spektrum a vlastní vektory

$$\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle.$$

S jakou pravděpodobností $P_{m,n}$ naměříme dvě různé hodnoty a_m a a_n , pokud jsou částice

- a) rozlišitelné
- b) identické bosony
- c) identické fermiony

Jaká bude pravděpodobnost naměření stejných hodnot a_m ?

Kapitola 13

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 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 $\hat{A}$ a $\hat{B}$ jsou samosdružené operátory. Budeme zkoumat operátor

$$\hat{A} + \varepsilon \hat{B}, \quad (13.1)$$

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 $\varepsilon \rightarrow 0$ se budou vlastní čísla a funkce blížit k odpovídajícím veličinám pro operátor $\hat{A}$ a pro $\varepsilon \rightarrow 1$ 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 $\lambda(\varepsilon)$, $\lambda_k^{(0)}$ a $|\psi(\varepsilon)\rangle$, $|\psi_k^{(0)}\rangle$ jsou vlastní čísla a vlastní vektory operátorů $\hat{A} + \varepsilon \hat{B}$ a $\hat{A}$

$$(\hat{A} + \varepsilon \hat{B})|\psi(\varepsilon)\rangle = \lambda(\varepsilon)|\psi(\varepsilon)\rangle, \quad \hat{A}|\psi_k^{(0)}\rangle = \lambda_k^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle. \quad (13.2)$$

Odtud snadno dostaneme

$$(\hat{A} - \lambda_k^{(0)})|\Delta\psi_k\rangle = (\Delta\lambda_k - \varepsilon\hat{B})|\psi(\varepsilon)\rangle, \quad (13.3)$$

kde

$$|\Delta\psi_k\rangle = |\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi_k^{(0)}\rangle, \quad \Delta\lambda_k = \lambda(\varepsilon) - \lambda_k^{(0)}. \quad (13.4)$$

Vynásobíme-li skalárně rovnost (13.3) vektorem $|\psi_j^{(0)}\rangle$, využijeme samosdruženost operátoru $\hat{A}$ a druhou rovnost v (13.2), dostaneme

$$(\lambda_j^{(0)} - \lambda_k^{(0)})\langle\psi_j^{(0)}|\Delta\psi_k\rangle = \Delta\lambda_k\langle\psi_j^{(0)}|\psi(\varepsilon)\rangle - \varepsilon\langle\psi_j^{(0)}|\hat{B}|\psi(\varepsilon)\rangle. \quad (13.5)$$

Pro $j = k$ odtud plyne

$$\Delta\lambda_k\langle\psi_k^{(0)}|\psi(\varepsilon)\rangle = \varepsilon\langle\psi_k^{(0)}|\hat{B}|\psi(\varepsilon)\rangle. \quad (13.6)$$

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.

13.1 Poruchová teorie pro nedegenerované čistě bodové spektrum

Nechť operátor $\hat{A}$ má čistě bodové spektrum s navzájem různými vlastními čísly $\lambda_k^{(0)}$ a příslušné vlastní vektory $|\psi_k^{(0)}\rangle$ tvoří ortonormální bazi

$$\langle\psi_j^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle = \delta_{j,k}, \quad \sum_j |\psi_j^{(0)}\rangle\langle\psi_j^{(0)}| = \hat{I}.$$

Předpokládejme dále, že v okolí nuly lze vlastní čísla i vlastní vektory operátoru $\hat{A} + \varepsilon\hat{B}$ napsat jako nekonečnou řadu v proměnné ε s nenulovým poloměrem konvergence. Neboť pro $\varepsilon = 0$ operátor $\hat{A} + \varepsilon\hat{B}$ přejde na $\hat{A}$, lze očekávat, že

$$\lambda(\varepsilon) = \lambda_k^{(0)} + \varepsilon\lambda_k^{(1)} + \varepsilon^2\lambda_k^{(2)} + \dots \quad (13.7)$$

$$|\psi(\varepsilon)\rangle = |\psi_k^{(0)}\rangle + \varepsilon|\psi_k^{(1)}\rangle + \varepsilon^2|\psi_k^{(2)}\rangle + \dots \quad (13.8)$$

Ideální by bylo, kdybychom uměli vypočítat všechny koeficienty řad (13.7) a (13.8) 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 (13.7) a (13.8) do (13.5) a (13.6). Porovnáním členů u první mocniny ε v (13.6) zjistíme, že první oprava vlastního čísla je rovna střední hodnotě operátoru $\hat{B}$ ve stavu $|\psi_k^{(0)}\rangle$

$$\boxed{\lambda_k^{(1)} = \langle\hat{B}\rangle_{\psi_k^{(0)}}}. \quad (13.9)$$

Poznamenejme, že pro platnost tohoto vztahu stačí, aby vlastní hodnota $\lambda_k^{(0)}$ měla násobnost jedna, zbytek spektra může být degenerovaný.

Pro výpočet oprav vyšších řádů vlastního čísla je vhodné uvažovat vlastní vektor $|\psi(\varepsilon)\rangle$, který není nutně normován k jedné. Poznamenejme, že norma vektoru $|\psi(\varepsilon)\rangle$ nehraje v odvození vztahů (13.5) a (13.5) žádnou roli. Z rozvoje (13.8) plyne, že pro dostatečně malá ε je

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi(\varepsilon) \rangle \neq 0.$$

Díky tomu můžeme zvolit normu a fázi vektoru $|\psi(\varepsilon)\rangle$ tak, že platí

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi(\varepsilon) \rangle = 1 \Leftrightarrow \langle \psi_k^{(0)} | \Delta \psi_k \rangle = 0. \quad (13.10)$$

Opravu vlastního vektoru $|\Delta \psi_k\rangle$ tedy budeme hledat v ortogonálním doplňku k původnímu vektoru $|\psi_k^{(0)}\rangle$. Vztah (13.6) se pak zjednoduší do tvaru

$$\Delta \lambda_k = \varepsilon \langle \psi_k^{(0)} | \hat{B} | \psi(\varepsilon) \rangle,$$

z čehož pro opravu řádu s vlastního čísla plyne

$$\lambda_k^{(s)} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(s-1)} \rangle. \quad (13.11)$$

Musíme tedy nalézt opravu vlastního vektoru řádu $s-1$. Pro ty je možné z rovnice (13.5) odvodit rekurentní vztah

$$|\psi_k^{(s)}\rangle = \sum_{j \neq k} \frac{\langle \psi_j^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(s-1)} \rangle - \sum_{r=1}^{s-1} \lambda_k^{(r)} \langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(s-r)} \rangle}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}} |\psi_j^{(0)}\rangle. \quad (13.12)$$

Speciálně, oprava prvního řádu vlastního vektoru je

$$|\psi_k^{(1)}\rangle = \sum_{j \neq k} \frac{\langle \psi_j^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(0)} \rangle}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}} |\psi_j^{(0)}\rangle, \quad (13.13)$$

Pro opravu vlastního čísla do druhého řádu v ε pak dostaneme vztah

$$\lambda_k^{(2)} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(1)} \rangle = \sum_{j \neq k} \frac{|\langle \psi_j^{(0)} | \hat{B} | \psi_k^{(0)} \rangle|^2}{\lambda_k^{(0)} - \lambda_j^{(0)}}. \quad (13.14)$$

Pro nejmenší vlastní číslo operátoru $\hat{A}$ (tj. $\lambda_k^{(0)} < \lambda_j^{(0)}$, $\forall j$) je oprava druhého řádu vždy nekladná. Vztah (13.14) (a analogické vzorce pro opravy vlastních čísel vyšších řádů) je možné odvodit i bez dodatečné podmínky (13.10), je to však podstatně náročnější.

Cvičení 89. 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 90. 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.)

13.2 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 **konečněnásobné** vlastní číslo $\lambda^{(0)}$ operátoru $\hat{A}$, tedy v případě, kdy vlastní vektory příslušné k číslu $\lambda^{(0)}$ tvoří lineární podprostor $\mathcal{H}_{\lambda^{(0)}}$ dimenze $N > 1$. V tomto podprostoru si zvolíme nějakou ortonormální bazi $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$, tj. pro její vektory platí

$$\hat{A}|\phi_i\rangle = \lambda^{(0)}|\phi_i\rangle, \quad \langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat{I}_{\lambda^{(0)}},$$

kde $\hat{I}_{\lambda^{(0)}}$ značí jednotkový operátor v podprostoru $\mathcal{H}_{\lambda^{(0)}}$.

Zaměníme-li operátor $\hat{A}$ operátorem $\hat{A} + \varepsilon\hat{B}$, pak se v obecném případě změní i vlastní čísla a jejich násobnost. Opět budeme předpokládat, že v okolí nuly lze vlastní čísla i vlastní vektory operátoru $\hat{A} + \varepsilon\hat{B}$ napsat jako nekonečnou řadu v proměnné ε s nenulovým poloměrem konvergence, takže vlastní čísla operátoru $\hat{A} + \varepsilon\hat{B}$, která pro $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergují k $\lambda^{(0)}$, lze zapsat jako

$$\lambda_n(\varepsilon) = \lambda^{(0)} + \varepsilon\lambda_n^{(1)} + \varepsilon^2\lambda_n^{(2)} + \dots, \quad (13.15)$$

a

$$|\psi_n(\varepsilon)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \varepsilon|\psi_n^{(1)}\rangle + \varepsilon^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots, \quad (13.16)$$

kde $n = 1, \dots, N$.

Vektory $|\psi_n^{(0)}\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} |\psi_n(\varepsilon)\rangle$, na rozdíl od případu nede degenerovaného spektra, nejsou určeny řešením úlohy pro vlastní čísla a vektory operátoru $\hat{A}$. Víme pouze, že je lze napsat jako lineární kombinaci námi zvolené baze $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{i=1}^N a_{n,i}|\phi_i\rangle. \quad (13.17)$$

Musíme tedy napřed určit vektory $|\psi_n^{(0)}\rangle$, resp. koeficienty $a_{n,i}$. Dosadíme opět řady (13.15), (13.16) do úlohy pro vlastní čísla

$$(\hat{A} + \varepsilon\hat{B})|\psi_n(\varepsilon)\rangle = \lambda_n(\varepsilon)|\psi_n(\varepsilon)\rangle \quad (13.18)$$

a porovnáme členy úměrné první mocnině ε . Dostaneme

$$\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{B}|\psi_n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (13.19)$$

Vynásobíme-li tuto rovnost skalárně zprava vektorem $|\phi_j\rangle$, použijeme samosdruženost $\hat{A}$ a toho, že $|\phi_j\rangle$ je vlastní vektor operátoru $\hat{A}$, dostaneme sadu rovnic

$$\langle\phi_j|\hat{B}|\psi_n^{(0)}\rangle = \lambda_n^{(1)}\langle\phi_j|\psi_n^{(0)}\rangle, \quad j = 1, \dots, N. \quad (13.20)$$

Dosadíme-li sem (13.17) a využijeme ortonormalnost vektorů $|\phi_j\rangle$, pak můžeme tyto rovnice přepsat způsobem

$$\sum_{i=1}^N B_{j,i} a_{n,i} = \lambda_n^{(1)} a_{n,j}, \quad j = 1, \dots, N \quad (13.21)$$

což je úloha pro vlastní čísla matice $B_{\lambda^{(0)}}$ s maticovými elementy

$$B_{ji} = \langle \phi_j | \hat{B} | \phi_i \rangle, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (13.22)$$

$B_{\lambda^{(0)}}$ je tedy matice operátoru poruchy $\hat{B}$ zúženého na podprostor $\mathcal{H}_{\lambda^{(0)}}$ vyjádřená v naší zvolené bazi $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$. První opravy vlastních čísel $\lambda_n^{(1)}$ pak dostaneme z řešení úlohy (13.21), tedy jako kořeny sekulární rovnice

$$\det(B_{\lambda^{(0)}} - \lambda I_{\lambda^{(0)}}) = 0. \quad (13.23)$$

Řešením rovnic (13.21) získáme koeficienty $a_{n,i}$, které určují „správné“ vlastní vektory $|\psi_n^{(0)}\rangle$ operátoru $\hat{A}$ vzhledem k poruše $\hat{B}$. Výpočet dalších oprav je opět dosti komplikovaný a příslušné vzorce zde nebudeme uvádět.

13.2.1 Starkův jev na vodíku

Starkovým jevem nazýváme rozštěpení spektrálních čar atomu vlivem homogenního elektrostatického pole. Atom vodíku popíšeme jako dipól s dipólovým momentem $\vec{d} = e(\vec{x}_e - \vec{x}_p) = e\vec{x}$, který má v homogenním elektrostatickém poli $\vec{\mathcal{E}}$ potenciální energii

$$\hat{V} = -\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}} = e\vec{x} \cdot \vec{\mathcal{E}}.$$

Celkový hamiltonián atomu vodíku v elektrickém poli (po odečtení pohybu těžiště) je tedy roven

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{x}|} + e\vec{\mathcal{E}}\vec{x}, \quad (13.24)$$

kde $M = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ je redukovaná hmotnost. Pro slabé elektrické pole, tj. $\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} \gg |\vec{\mathcal{E}}|$, kde a_0 je Bohrov poloměr atomu vodíku, je možno V považovat za malou opravu $\hat{H}_0$ popisující atom vodíku bez přítomnosti vnějšího elektrického pole. Jeho vlastní čísla i vlastní funkce známe z podkapitoly 6.5. Víme, že vlastní čísla (kromě nejnižší energie) jsou degenerovaná, takže musíme použít poruchovou metodu pro degenerované spektrum.

Bez újmy na obecnosti (neporušený hamiltonián $\hat{H}_0$ je isotropní), můžeme předpokládat, že $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \varepsilon)$. Oprava $\varepsilon\hat{B}$ hamiltoniánu $\hat{H}_0$ je $\hat{V} = e\varepsilon \hat{X}_3 = e\varepsilon r \cos\theta$ a zajímá nás změna N -té energetické hladiny vodíku $E_N = -\frac{R}{N^2}$ v závislosti na síle elektrického pole ε .

Vlastní funkce $\psi_{N,l,m}$ příslušné k E_N jsou vyjádřeny vzorcem (6.60). Matice B_{E_N} , jejíž vlastní hodnoty představují první opravy energie E_N , má v tomto případě elementy

$$\begin{aligned} B_{ji} &\equiv B_{lm,l'm'} = e(\psi_{N,l,m}, r \cos\theta \psi_{N,l',m'}) \\ &= e \int R_{Nl}^*(r) R_{Nl'}(r) r^3 dr \int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \cos\theta Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega. \end{aligned} \quad (13.25)$$

Druhý integrál je roven (viz např. [3, G.29])

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \cos \theta Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{mm'} \left(\delta_{l,l'+1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l+1,l'} \sqrt{\frac{l'^2 - m^2}{4l'^2 - 1}} \right), \quad (13.26)$$

takže maticové elementy jsou nenulové pouze pro $m = m'$ a $l' = l \pm 1$. Výpočet prvního integrálu v (13.25) je obecně dosti složitý a proto se omezíme na výpočet prvních oprav základní a první excitované hladiny. Pro nejnižší energii $N = 1$ je $l = l' = 0$, takže

$$E_1^{(1)} = (\psi_{1,0,0}, er \cos \theta \psi_{1,0,0}) = 0.$$

Základní hladina se tedy do prvního řádu v ε nezmění. Pro první excitovanou hladinu je $N = 2$ a $l, l' = 0, 1$. Jediné nenulové elementy B_{ji} v důsledku (13.26) jsou

$$(\psi_{2,1,0}, er \cos \theta \psi_{2,0,0}) = (\psi_{2,0,0}, er \cos \theta \psi_{2,1,0})^* = -3ea_0. \quad (13.27)$$

Matice B_{E_1} v tomto případě má tvar

$$B_{E_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -3ea_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3ea_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (13.28)$$

kde jsme zvolili pořadí bazických vektorů $\psi_{2,0,0}, \psi_{2,1,1}, \psi_{2,1,0}, \psi_{2,1,-1}$. Kořeny sekulární rovnice (13.23) jsou $E_{2,0}^{(0)} = 0$, $E_{2,\pm}^{(0)} = \pm 3ea_0$, přičemž 0 je dvojnásobně degenerovaná. Znamená to, že první excitovaná hladina vodíku $E_1 \approx -3,4$ eV, která je čtyřnásobně degenerovaná, se ve slabém vnějším elektrickém poli rozštěpí na tři s hodnotami

$$E_{2,0}(\varepsilon) = -3,4 \text{ eV}, \quad E_{2,\pm}(\varepsilon) = -3,4 \text{ eV} \pm 3ea_0\varepsilon,$$

kde e je náboj elektronu, a_0 je Bohrov poloměr vodíku $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$ cm a ε je hodnota intenzity vnějšího elektrického pole. Původní hladina $-3,4$ eV zůstane degenerovaná i v elektrickém poli, avšak pouze dvakrát. Vlastní funkce $\psi_{2,0}^{(0)}$ tvoří dvourozměrný prostor lineárních kombinací $a_+\psi_{2,1,1} + a_-\psi_{2,1,-1}$. Hladiny $-3,4$ eV $\pm 3ea\varepsilon$ jsou již nedegenerované a v nultém řádu jim odpovídají vlastní funkce $\psi_{2,\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,0} \mp \psi_{2,0,0})$. 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 91. Spočítejte rozštěpení druhé excitované hladiny atomu vodíku při Starkově jevu.

Cvičení 92. Existuje lineární Starkův jev pro isotrovní oscilátor?

13.3 Struktura atomu, Hartreeho metoda

Podrobnosti k této části viz [3, kap. 10.6]. Atomy se skládají z kladně nabitého jádra a záporně nabitého obalu. Vzhledem k rozdílu hmotností jádra a obalu je možno různé stavy atomů s dobrou 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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{j=1}^Z \Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^Z \frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j<k} \frac{e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|}. \quad (13.29)$$

Cvičení 93. Spočítejte prouchovou metodou energii základního stavu helia, považujeme-li poslední člen v (13.29) za poruchu.

Přesné nalezení vlastních (Z -částicových) stavů hamiltoniánu (13.29) 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

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq k}^Z \frac{e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|}, \quad (13.30)$$

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 (13.30) nahradit hamiltoniánem

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_j - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq k}^Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\phi_k(\vec{x}_k)|^2 e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|} d^3x_k. \quad (13.31)$$

Problém je v tom, že funkce ϕ_k neznáme stejně jako ϕ_j . Mohli bychom se nicméně pokusit řešit soustavu rovnic

$$\hat{H}_j \phi_j = E_j \phi_j, \quad j = 1, \dots, Z \quad (13.32)$$

pro funkce ϕ_j . Avšak díky přítomnosti ϕ_k , $k \neq j$ v (13.31) 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 (13.31), 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

$$\hat{H}_j^0 \phi_j^1 = E_j^1 \phi_j^1. \quad (13.33)$$

Funkce ϕ_j^1 se opět dosadí do hamiltoniánu (13.31) 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

$$\hat{H}_j^n \phi_j^n = E_j^n \phi_j^n. \quad (13.34)$$

Mimo to se obvykle při podobných výpočtech používá přiblížení sféricky symetrického pole, kdy se poslední člen (13.31) vystředuje přes prostorové úhly, tzn. nahradí se členem

$$V_{int}(r_j) = \frac{1}{(4\pi)^2 \varepsilon_0} \int_{\Omega} \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \sum_{j \neq k}^Z \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\phi_k(\vec{x}_k)|^2 e^2}{|\vec{x}_j - \vec{x}_k|} d^3 x_k. \quad (13.35)$$

Díky sférické symetrii takto zkonstruovaného hamiltoniánu pak lze hledat vlastní funkce energie ve tvaru

$$\phi_j(\vec{x}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (13.36)$$

a vlastní čísla nezávisí na m .

$$E_j = E_{nl} \quad (13.37)$$

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 (12.37), kde $a_j = (n_j, l_j, m_j, \pm \frac{1}{2})$, neboť elektrony mají spin $1/2$ a jsou tedy fermiony.

Celková vnitřní energie atomu ve výše uvedené aproximaci je součtem energií jednotlivých elektronů obalu

$$E_{atom} = \sum_{j=1}^Z E_{n_j, l_j}. \quad (13.38)$$

Vzhledem k tomu, že energie jednočásticových stavů (13.37) 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 94. 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?

13.4 Jemná struktura vodíku. Anomální Zeemanův jev

V kapitole 6.5 jsme vyšetřovali spektrum hamiltoniánu elektronu s hmotností M v atomu vodíku v přiblížení nekonečně těžkého jádra

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(r), \quad V(r) = -\frac{Q}{r}, \quad Q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}. \quad (13.39)$$

Nalezli jsme vlastní čísla

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

Do celkového popisu stavu je třeba započítat i spin elektronu. Odpovídající vlastní vektory určené kvantovými čísly $N \in \mathbb{N}$, $l \in \mathbb{Z}_+$, $m_l \in \{l, l-1, \dots, -l\}$ a $m_s = \pm\frac{1}{2}$, splňují rovnice

$$\begin{aligned} \hat{H}_0|N, l, m_l, m_s\rangle &= E_N|N, l, m_l, m_s\rangle, \\ \hat{L}^2|N, l, m_l, m_s\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|N, l, m_l, m_s\rangle, \\ \hat{L}_3|N, l, m_l, m_s\rangle &= m_l \hbar |N, l, m_l, m_s\rangle, \\ \hat{S}_3|N, l, m_l, m_s\rangle &= m_s \hbar |N, l, m_l, m_s\rangle. \end{aligned} \quad (13.40)$$

V tomto přiblížení má hladina E_N degeneraci $2N^2$. Při bližším zkoumání se ale ukazuje, že spektrum vodíku je složitější. Excitované hladiny jsou rozštěpené na multiplety hladin vzdálených řádově o 10^{-4} eV. Tuto tzv. *jemnou strukturu* spektrálních linií atomu vodíku určíme poruchovým výpočtem. Hamiltonián jemné struktury, který bereme jako poruchu hamiltoniánu $\hat{H}_0$, je dán součtem dvou členů

$$\hat{H}_{FS} = \hat{H}_{SO} + \hat{H}_R, \quad \hat{H}_{SO} = \frac{\mu_0 e}{4\pi\epsilon_0 M \hbar c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}, \quad \hat{H}_R = -\frac{\hat{P}^4}{8M^3 c^2}.$$

Operátor $\hat{H}_{SO}$ popisuje tzv. spin-orbitální vazbu. Operátor $\hat{H}_R$ představuje relativistickou korekci ke kinetické energii elektronu. Jejich tvar zdůvodníme v následujících kapitolách. Příspěvky k opravě vlastních čísel E_N od $\hat{H}_{SO}$ a $\hat{H}_R$ do prvního řádu je možné určit zvlášť a s použitím vztahů pro nedegenerované vlastní hodnoty (13.9), přestože jsou původní hodnoty E_N degenerované. V podprostoru stavů s hlavním kvantovým číslem N je totiž možné zvolit bázi (tvořenou vlastními vektory celkového momentu hybnosti), ve které jsou zúžení operátorů $\hat{H}_0$, $\hat{H}_{SO}$ i $\hat{H}_R$ diagonální. Jak uvidíme dále, opravy pocházející od spin-orbitální vazby a relativistické korekce jsou srovnatelně velké. Pro určení jemné struktury je tak nutné zahrnout oba příspěvky, i když jsou fyzikálně rozdílné.

13.4.1 Spin-orbitální vazba

Spin-orbitální vazba popisuje interakci spinu elektronu a magnetického pole protonu. Začneme s klasickým modelem, ve kterém se elektron pohybuje rychlostí $\vec{v}$ okolo protonu. V klidové soustavě elektronu se proton pohybuje rychlostí $-\vec{v}$ a generuje magnetické pole

$$\vec{B}' = -\frac{1}{c^2}\vec{v} \times \vec{E} = \frac{e}{Mc^2}\vec{E} \times \vec{p},$$

kde $\vec{E}$ je coulombické pole protonu

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3}.$$

Magnetické pole v klidové soustavě elektronu můžeme přepsat do tvaru

$$\vec{B}' = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 Mc^2} \frac{1}{r^3} \vec{L}$$

Interakci mezi vlastním magnetickým momentem elektronu a magnetickým polem protonu by pak měla odpovídat energie

$$H_{SO} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}'. \quad (13.41)$$

Skutečná energie je poloviční. Důvodem je, že veličiny ve vztahu (13.41) jsou vyjádřeny v klidové soustavě elektronu, která není inerciální. Při transformaci do laboratorní soustavy (tj. klidové soustavy protonu, který považujeme za nekonečně těžký) pak dochází k dodatečné rotaci vlastního magnetického momentu elektronu (tzv. Thomasova precese).

Přejdeme ke kvantově-mechanickému popisu. Vlastnímu magnetickému momentu elektronu odpovídá operátor (11.17). Hamiltonián popisující spin-orbitální vazbu tedy bude roven

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\mu_0 e}{4\pi\epsilon_0 M \hbar c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}, \quad \mu_0 = \frac{|e|\hbar}{2M}.$$

Zavedeme-li konstantu jemné struktury

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137},$$

pak $\hat{H}_{SO}$ zapíšeme ve tvaru

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\alpha \hbar}{2Mc} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}.$$

Poznamenejme, že pomocí konstanty jemné struktury lze Rydbergovu energii vyjádřit způsobem

$$R = \frac{1}{2} M c^2 \alpha^2.$$

Uvažujme nyní $\hat{H}_{SO}$ jako poruchu $\hat{H}_0$. Baze tvořená vektory (13.40) není pro hledání oprav vlastních čísel E_N vhodná, protože operátor $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ nekomutuje s $\hat{L}_3$ ani $\hat{S}_3$. Matice

zúžení operátoru $\hat{H}_{SO}$ na podprostor E_N v bazi (13.40) není diagonální, takže bychom museli použít poruchovou teorii pro degenerované spektrum. Operátor $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ ale komutuje s $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$, kde

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

je celkový moment hybnosti elektronu. Operátory $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_3$ jsou navíc kompatibilní s $\hat{H}_0$ a $\hat{L}^2$ a jejich společné vlastní vektory splňují rovnice

$$\begin{aligned}\hat{H}_0|N, l, j, m\rangle &= E_N|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{L}^2|N, l, j, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{J}^2|N, l, j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|N, l, j, m\rangle, \\ \hat{J}_3|N, l, j, m\rangle &= m\hbar|N, l, j, m\rangle,\end{aligned}\tag{13.42}$$

kde $j = l \pm \frac{1}{2}$ pro $l \geq 1$ (resp. $j = \frac{1}{2}$ pro $l = 0$) a kvantové číslo m probíhá hodnoty $j, j-1, \dots, -j$. S použitím vztahu (12.30) snadno nalezneme

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}|N, l, j, m\rangle = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) |N, l, j, m\rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) |N, l, j, m\rangle.\tag{13.43}$$

Díky sférické symetrii $\frac{1}{r^3}$ pak platí

$$\langle N, l, j, m | \hat{H}_{SO} | N, l', j', m' \rangle \sim \delta_{l,l'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'},$$

takže pro dané N je zúžení operátoru $\hat{H}_{SO}$ v bazi $\{|N, l, j, m\rangle\}$ reprezentováno diagonální maticí. První opravu vlastních čísel $\hat{H}_0$ v důsledku spin-orbitální vazby tak můžeme určit pomocí vztahu (13.9)

$$E_{SO}^{(1)} = \langle N, l, j, m | \hat{H}_{SO} | N, l, j, m \rangle.$$

S použitím (13.43) dostaneme

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{\alpha \hbar^3}{4M^2 c} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle.$$

Výpočet střední hodnoty $\frac{1}{r^3}$ ve stavu $|N, l, j, m\rangle$ je poměrně pracný, ale pro $l \geq 1$ je možné ukázat, že platí

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{N^3 l(l+1)(2l+1) a_0^3},$$

kde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 M}$ Bohrov poloměr vodíku. Pro stavy s $l \geq 1$ je první oprava vlastního čísla v důsledku spin-orbitální vazby rovna

$$E_{SO}^{(1)} = -E_N \frac{\alpha^2}{N} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)}.\tag{13.44}$$

Jedná se tedy o korekci řádu $\alpha^2 \sim 10^{-4}$. Energie s -stavů se spin-orbitální vazbou do prvního řádu poruchové teorie nemění, protože

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}|N, 0, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle = 0.$$

13.4.2 Relativistická korekce

Relativistická kinetická energie elektronu je rovna

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + M^2 c^4} - M c^2 \simeq \frac{p^2}{2M} - \frac{p^4}{8M^3 c^2} + \dots$$

Druhý člen Taylorova rozvoje představuje relativistickou korekci. Operátor $\hat{H}_R$ je tedy roven

$$\hat{H}_R = -\frac{\hat{P}^4}{8M^3 c^2}.$$

Díky sférické symetrii je matice zúžení $\hat{H}_R$ v bazi (13.42) diagonální (je diagonální i v bazi (13.40), protože $\hat{H}_R$ nezávisí na spinu, ale chceme-li vyjádřit opravu způsobenou $\hat{H}_{FS} = \hat{H}_{SO} + \hat{H}_R$ je vhodnější použít bazi (13.42)). Opět můžeme využít poruchovou teorii pro nede degenerované spektrum a pro první opravy vlastních čísel v důsledku relativistické korekce dostaneme

$$E_R^{(1)} = -\frac{1}{8M^3 c^2} \langle \hat{P}^4 \rangle.$$

Pro výpočet střední hodnoty $\hat{P}^4$ využijeme vztah

$$\hat{P}^2 |N, l, j, m\rangle = 2M(\hat{H}_0 - V) |N, l, j, m\rangle = 2M(E_N - V) |N, l, j, m\rangle,$$

ze kterého plyne

$$E_R^{(1)} = -\frac{1}{2Mc^2} \langle (E_N - V)^2 \rangle = -\frac{1}{2Mc^2} \left(E_N^2 + 2E_N Q \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + Q^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right).$$

Zbývající střední hodnoty je opět možné spočítat analyticky

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{N^2 a_0}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2}{N^3 a_0^2 (2l+1)}.$$

Celkem pro relativistickou korekci vlastních čísel $\hat{H}_0$ dostaneme vztah

$$E_R^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{2N}{2l+1} - \frac{3}{4} \right). \quad (13.45)$$

Stejně jako v případě spin-orbitální vazby se jedná o korekci řádu α^2 .

13.4.3 Jemná struktura vodíku

Korekce jemné struktury pro stavy s $l \geq 1$ je dána součtem příspěvků spin-orbitální vazby (13.44) a relativistické opravy (13.45)

$$E_{FS}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right). \quad (13.46)$$

Tento výsledek ve skutečnosti platí i pro $l = 0$. Pro s -stavy je sice příspěvek spin-orbitální vazby nulový, ale jemnou strukturu ovlivňuje další, tzv. Darwinův člen. Ten má původ v nerelativistické aproximaci Diracovy rovnice pro elektron v coulombickém poli. Jeho odvození zde provádět nebudeme. Operátor poruchy má v tomto případě tvar

$$\hat{H}_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2M^2 c^2} \delta(\vec{r}).$$

Díky δ -funkci je střední hodnota $\hat{H}_D$ ve stavu $|N, l, m, j\rangle$ rovna

$$\langle \hat{H}_D \rangle = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2M^2 c^2} |\psi_{N,l,j,m}(0)|^2.$$

Protože $\psi_{N,l,j,m}(0) = 0$ pro $l \geq 1$ (viz 6.60), ovlivňuje Darwinův člen pouze s -stavy. Pro $l = 0$ pak nalezneme hodnotu opravy

$$E_D^{(1)} = -E_N \frac{\alpha^2}{N}.$$

Pro $l = 0$ je tedy korekce jemné struktury rovna

$$E_{FS}^{(1)} = E_R^{(1)} + E_D^{(1)} = E_N \frac{\alpha^2}{N^2} \left(N - \frac{3}{4} \right),$$

což souhlasí se vztahem (13.46) pro $j = \frac{1}{2}$.

Při započítání jemné struktury energetické hladiny elektronu v atomu vodíku závisí kromě hlavního kvantového čísla N i na kvantovém čísle j

$$E_{N,j} = E_N \left[1 + \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (13.47)$$

Pro hladiny jemné struktury, respektive stavy $|N, l, j, m\rangle$, které jsou „správnými“ vlastními vektory $\hat{H}_0$ vzhledem k poruše $\hat{H}_{FS}$, se používá spektroskopické značení tvaru NL_j , kde $L = S, P, D, F, \dots$, pro $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Pro ilustraci je na obrázku 13.1 znázorněna jemná struktura hladin s hlavním kvantovým číslem $N = 1, 2, 3$.

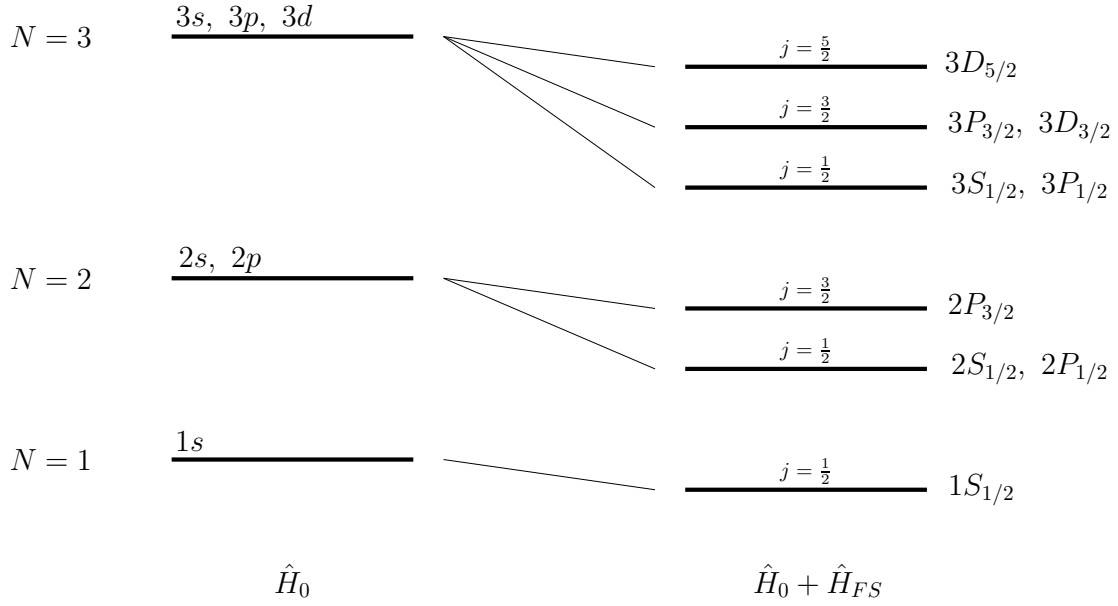
13.4.4 Anomální Zeemanův jev

V části 11.3 jsme zkoumali normální Zeemanův jev, tedy vliv silného magnetického pole na energetické hladiny elektronu v coulombickém poli. Pro atom vodíku v magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$ má celkový hamiltonián elektronu tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_Z,$$

kde $\hat{H}_0$ je dán vztahem (13.39) a Zeemanův člen je roven

$$\hat{H}_Z = \frac{\mu_0}{\hbar} B (\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3). \quad (13.48)$$



Obrázek 13.1: Spektrální linie vodíku a jejich rozštěpení po započítání jemné struktury.

Ukázali jsme, že vlivem silného magnetického pole dojde k rozštěpení hladiny E_{nl} hamiltoniánu $\hat{H}_0$ na multiplet $2l + 3$ hladin. Vzdálenost hladin v multipletu je $\Delta E = \mu_0 B$. Tento výpočet ale nezahrnoval příspěvek jemné struktury, která bude ve slabém magnetickém poli dominantní. V takovém případě je celkový hamiltonián

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} + \hat{H}_Z,$$

a $\hat{H}_Z$ je třeba brát jako dodatečnou poruchu.

Pro poruchový výpočet opět použijeme vektory (13.42). Oprava prvního řádu je

$$E_Z^{(1)} = \langle N, l, j, m | \hat{H}_Z | N, l, j, m \rangle.$$

V dalším je vhodné vyjádřit Zeemanův člen ve tvaru $\hat{H}_Z = \frac{\mu_0}{\hbar} B (\hat{J}_3 + \hat{S}_3)$. Oprava je pak rovna

$$E_Z^{(1)} = \frac{\mu_0}{\hbar} B \left(m\hbar + \langle \hat{S}_3 \rangle \right).$$

Zbývající střední hodnotu lze spočítat s využitím vztahů (12.31) a (12.32). V případě $l = 0$ dostaneme

$$\langle N, 0, \frac{1}{2}, m | \hat{S}_3 | N, 0, \frac{1}{2}, m \rangle = m\hbar, \quad m = \pm \frac{1}{2}.$$

Pro $l \geq 1$ nalezneme

$$\langle N, l, l \pm \frac{1}{2}, m | \hat{S}_3 | N, l, l \pm \frac{1}{2}, m \rangle = -\frac{\hbar l \mp m + \frac{1}{2}}{2} + \frac{\hbar l \pm m + \frac{1}{2}}{2} = \pm \frac{m\hbar}{2l+1}.$$

Příspěvek Zeemanova členu je pak možné zapsat ve tvaru

$$E_Z^{(1)} = \mu_0 B m g_j,$$

kde g_j je Landého faktor, jehož hodnota je pro $l \geq 1$ rovna

$$g_{j=l \pm \frac{1}{2}} = 1 \pm \frac{1}{2l+1},$$

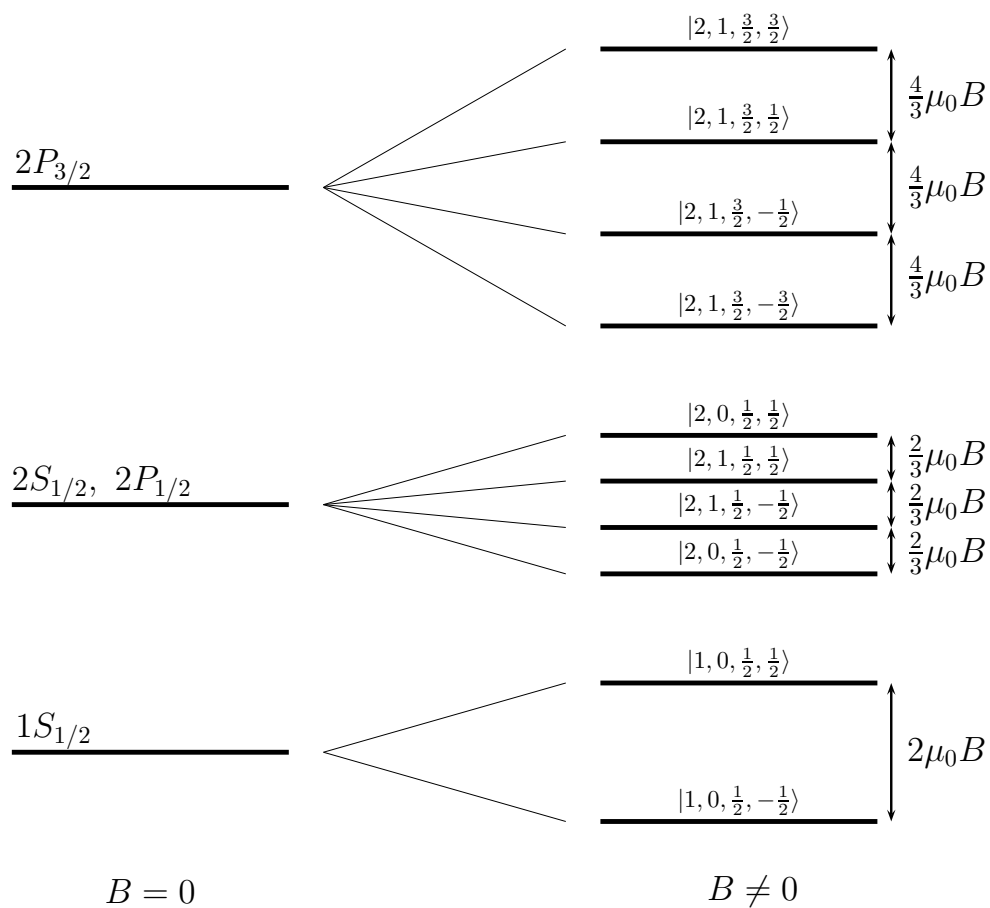
a pro $l = 0$ je $g_{\frac{1}{2}} = 2$. Landého faktor lze pro všechny hodnoty j a l zapsat ve tvaru

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)}.$$

Celková energie elektronu v atomu vodíku ve slabém magnetickém poli je pak rovna

$$E_{N,j,m} = E_N + E_{FS}^{(1)} + E_Z^{(1)} = E_N \left[1 + \frac{\alpha^2}{N^2} \left(\frac{N}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] + \mu_0 B m g_j.$$

Ve slabém magnetickém poli se hladina jemné struktury $E_{N,j}$ rozštěpí na multiplet $2j+1$ hladin, tj. sudý počet, protože j je polocelé. Vzdálenost hladin navíc závisí na kvantovém čísle j . Pro $j = l + \frac{1}{2}$ je rozdíl hladin $\Delta E_+ = \mu_0 B \frac{2l+2}{2l+1}$, ve druhém případě ($j = l - \frac{1}{2}$) je vzdálenost hladin rovna $\Delta E_- = \mu_0 B \frac{2l}{2l+1}$. Toto nerovnoměrné rozštěpení spektrálních linií ve slabém magnetickém poli se nazývá *anomální Zeemanův jev*. Rozštěpení hladin jemné struktury $1S_{1/2}$, $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ a $2P_{3/2}$ je znázorněno na obrázku [13.2](#).



Obrázek 13.2: Rozštěpení jemné struktury spektrálních linií vodíku vlivem slabého magnetického pole.

Kapitola 14

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 [13, kap. 3.4]). V této kapitole představíme 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 $\psi(t_0) = \psi_{\text{in}}$, přičemž v čase t_0 je interakce částic nulová. Je tedy třeba nalézt řešení časové Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou $\psi(t_0) = \psi_{\text{in}}$. 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.

14.1 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

$$\psi_{in}(x) = \psi_{x_0, p_0, \sigma_0}(x) = C e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_0^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x}, \quad (14.1)$$

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

$$x_0 + 2\sigma(t_1) + \frac{p_0}{M}(t_1 - t_0) = -a. \quad (14.2)$$

Pro $t \in (t_0, t_1)$ se částice pohybuje téměř jako volná, přesněji, časový vývoj vlnového balíku se příliš neliší od

$$\psi_0(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} dp, \quad (14.3)$$

kde

$$F(p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \psi(x', t_0) dx' = C e^{-\sigma^2 \frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2} - i\frac{p}{\hbar}x_0}, \quad (14.4)$$

Pro časy srovnatelné a větší než t_1 , (14.3) již nevystihuje ani přibližně 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

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \Phi_{\frac{p}{\hbar}}}{dx^2} + V \Phi_{\frac{p}{\hbar}} = E \Phi_{\frac{p}{\hbar}}, \quad E = \frac{p^2}{2M}, \quad (14.5)$$

takže časový vývoj částice je dán funkcí

$$\boxed{\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} \Phi_{p/\hbar}(x) dp.} \quad (14.6)$$

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 (14.5) v integrálním (Lippmannově–Schwingerově) tvaru

$$\Phi_k(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} G_k(x-x') U(x') \Phi_k(x') dx', \quad (14.7)$$

kde

$$U(x) := \frac{2M}{\hbar^2} V(x) \quad (14.8)$$

a $G_k(x)$ je Greenova funkce bezčasové Schrödingerovy rovnice pro volnou jednorozměrnou částici splňující

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right) G_k(x) = \delta(x). \quad (14.9)$$

Cvičení 95. Ukažte, že funkce

$$G_k^{(+)}(x) := \frac{e^{ik|x|}}{2ik} \quad (14.10)$$

splňuje rovnici (14.9) přesněji

$$(G_k'', h) \equiv (G_k, h'') = -k^2(G_k, h) + h(0)$$

pro $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Pomocí (14.9) lze snadno ukázat, že Φ_k splňující (14.7) jsou též řešením (14.5).

Dosazením explicitního tvaru Greenovy funkce do (14.7) dostaneme

$$\Phi_k(x) = e^{ikx}(1 + C(k, x)) + A(k, x)e^{-ikx}, \quad (14.11)$$

kde

$$A(k, x) = \int_x^a \frac{e^{ikx'}}{2ik} U(x') \Phi_k(x') dx', \quad (14.12)$$

$$C(k, x) = \int_{-a}^x \frac{e^{-ikx'}}{2ik} U(x') \Phi_k(x') dx'. \quad (14.13)$$

Odtud je ihned vidět, že v oblasti nulového potenciálu je funkce $\Phi_{\frac{p}{\hbar}}$ superposicí zobecněných vlastních funkcí hybnosti $e^{\pm i\frac{p}{\hbar}x}$.

$$\Phi_k(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \text{ pro } x < -a, \quad (14.14)$$

$$\Phi_k(x) = B(k)e^{ikx} \text{ pro } x > a, \quad (14.15)$$

kde $A(k) := A(k, -a)$, $B(k) := 1 + C(k, a)$.

Dosazením (14.11) do (14.6), zjistíme, že vlnovou funkci částice v libovolném čase je možno zapsat jako součet tří členů

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) + \psi_A(x, t) + \psi_C(x, t). \quad (14.16)$$

První člen je dán vzorcem (14.3) 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 $x > a$. Mimo to, funkce

$$\psi_A(x, t) := \int_{-\infty}^{\infty} F(p) A\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{-i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} dp \quad (14.17)$$

$$\psi_C(x, t) := \int_{-\infty}^{\infty} F(p) C\left(\frac{p}{\hbar}, x\right) e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2M\hbar}(t-t_0)} dp \quad (14.18)$$

jsou nulové v oblastech $x > a$ resp. $x < -a$ a pomocí tzv. Riemannova–Lebesgueova lemmatu

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(\xi)| d\xi < \infty \Rightarrow \lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-i\tau\xi} d\xi = 0.$$

lze dokázat, že funkce (14.17) a (14.18) konvergují k 0 pro $t \rightarrow \infty$ dokonce i v oblastech $x > -a$, resp. $x < a$. Transformací $p = \mp\sqrt{\xi}$ pro $p \lesseqgtr 0$ přejdou totiž pravé strany (14.17) a (14.18) na součet integrálů tvaru

$$\int_0^{\infty} g_x(\xi) e^{-i(t-t_0)\frac{\xi}{2M\hbar}} d\xi,$$

a o odpovídajících funkcích $g_x(\xi)$ se dá ukázat, že pro $x > -a$, resp. $x < a$ leží v $L^1(\mathbb{R}, dx)$, tj. splňují předpoklad Riemannova–Lebesgueova lemmatu. Znamená to, že pro $t \rightarrow \infty$ je funkce ψ 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

$$R := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{-\infty}^{-a} |\psi(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2}, \quad P := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_a^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2}, \quad (14.19)$$

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

$$P + R = 1. \quad (14.20)$$

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 (14.17) a (14.18)

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{\frac{i}{\hbar}[-px - \frac{p^2}{2M}(t-t_0)]} A\left(\frac{p}{\hbar}\right) dp \quad \forall x < -a, \quad (14.21)$$

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) + \psi_2(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{\frac{i}{\hbar}[px - \frac{p^2}{2M}t(t-t_0)]} B\left(\frac{p}{\hbar}\right) dp \quad \forall x > a. \quad (14.22)$$

Všimněme si, že koeficienty $A(k)$, $B(k)$ dané původně integrálními formulami můžeme též určit řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice (14.5) s okrajovými podmínkami (14.14) a (14.15). Nalezneme-li tedy řešení rovnice (14.5) splňující tyto okrajové podmínky, pak koeficienty odrazu a průchodu potenciálem jsou dány vzorci (14.19), (14.22) a (14.21).

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.

$$P = \left| B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right) \right|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_a^{\infty} |\psi_0(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t)\|^2} = \left| B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right) \right|^2 \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x, t)|^2 dx}{\|\psi(t_0)\|^2} = \left| B\left(\frac{p_0}{\hbar}\right) \right|^2, \quad (14.23)$$

kde jsme použili nezávislost normy stavu na čase a vymizení funkce ψ_0 pro $t \rightarrow \infty$, $x < a$. Podobně

$$R = \left| A \left(\frac{p_0}{\hbar} \right) \right|^2, \quad (14.24)$$

kde p_0 je hybnost dopadající částice.

14.2 Tunelový jev pro pravoúhlou bariéru

Jako ilustraci použití předchozího postupu předvedeme výpočet koeficientů odrazu a průchodu potenciálem

$$V(x) = 0, \text{ pro } |x| > a, \quad V(x) = V_0, \text{ pro } |x| < a. \quad (14.25)$$

Jako první krok je třeba řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici (14.5) s okrajovými podmínkami.

Z tvaru potenciálu a podmínek (14.14), (14.15) ihned plyne, že

$$\begin{aligned} \Phi_k(x) &= e^{ikx} + A(k)e^{-ikx} \text{ pro } x < -a, \\ \Phi_k(x) &= C(k)e^{ik'x} + D(k)e^{-ik'x} \text{ pro } -a < x < a, \\ \Phi_k(x) &= B(k)e^{ikx} \text{ pro } a < x, \end{aligned} \quad (14.26)$$

kde

$$k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}, \quad k'^2 = \frac{2M(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (14.27)$$

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

$$B(k) = e^{2ik'a} \left[e^{-2ika} + \frac{k' - k}{k' + k} A(k) \right], \quad (14.28)$$

$$A(k) = e^{-2ika} V_0 [2E - V_0 + 2i\sqrt{E(E - V_0)} \cot(2k'a)]^{-1}. \quad (14.29)$$

Dosazením do vzorců (14.24), (14.23) pak dostaneme koeficienty odrazu a průchodu pravoúhlou bariérou (14.25) pro částici s energií $E > 0$, $E > V_0$

$$R = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(2k'a)} \right]^{-1}, \quad (14.30)$$

$$P = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(2k'a)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}. \quad (14.31)$$

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*

$$E_n = V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{8Ma^2} n^2, \quad n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}. \quad (14.32)$$

(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 (14.30) a (14.31) je třeba zaměnit $\sin(2k'a)$ na $i \sinh |2k'a|$, takže např.

$$P = \left[1 - \frac{V_0^2 \sinh^2 |2k'a|}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}, \quad (14.33)$$

což pro $|2k'a| \gg 1$ (mohutné potenciálové bariéry) přejde na

$$P \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\sqrt{2M(V_0 - E)} \frac{4a}{\hbar}}, \quad (14.34)$$

takže pravděpodobnost průchodu bariérou klesá exponenciálně s její šířkou, nicméně je nenulová. Tento experimentálně pozorovaný fakt, kterému se říká tunelový jev, je důsledkem vlnových vlastností kvantových částic. Závislost pravděpodobnosti průchodu na podílu E/V_0 je znázorněna na obrázku 14.1.

Cvičení 96. Spočítejte koeficienty odrazu a průchodu pro $E = V_0 > 0$ a porovnejte je s (14.31) a (14.33).

14.3 Prostorový rozptyl

Rozptyl částic v 3-rozměrném prostoru se řeší analogicky, tedy analýzou časového vývoje počátečního stavu

$$\psi_{in}(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, t_0) = \int_{\mathbb{R}^3} F(\vec{p}) e^{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} d^3p, \quad (14.35)$$

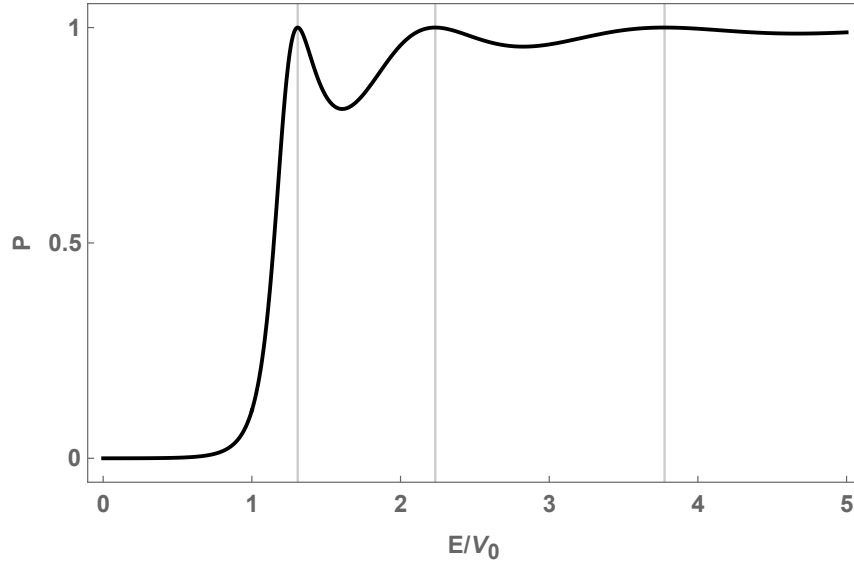
representující vlnový balík soustředěný v oblasti, ve které je potenciál nulový a pohybující se grupovou rychlostí $\vec{p}_0/M$.

Časový vývoj vlnové funkce opět popíšeme pomocí stacionárních stavů, $\Phi_{\vec{p}/\hbar}$, přesněji řešeními Lippmannovy–Schwingerovy rovnice v $\mathbb{R}^3$

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \int_{\mathbb{R}^3} G_{\vec{k}}(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \Phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x', \quad (14.36)$$

kde nyní

$$G_{\vec{k}}(\vec{x}) = -\frac{e^{i\|\vec{k}\|\|\vec{x}\|}}{4\pi \|\vec{x}\|} \quad (14.37)$$



Obrázek 14.1: Pravděpodobnost průchodu bariérou v závislosti na poměru energie dopadající částice E k výšce bariéry V_0 . Svislými čarami jsou naznačeny hodnoty rezonančních energií (14.32).

je Greenova funkce 3-rozměrné bezčasové Schrödingerovy rovnice pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta = E\Phi, \quad E = \frac{p^2}{2M}, \quad (14.38)$$

splňující

$$(\Delta + \vec{k}^2)G_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}), \quad (14.39)$$

G_k je tedy fundamentální řešení. Dosadíme-li (14.37) do (14.36), 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 $\|\vec{x}\| \gg R$

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\vec{\xi}, \vec{k}) \frac{e^{i\|\vec{k}\|\|\vec{x}\|}}{\|\vec{x}\|}, \quad (14.40)$$

kde $\vec{\xi} = \frac{\vec{x}}{\|\vec{x}\|} \|\vec{k}\|$ a

$$f(\vec{\xi}, \vec{k}) := \frac{-1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\vec{\xi}\vec{x}'} U(\vec{x}') \Phi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x'. \quad (14.41)$$

Z Lippmannovy–Schwingerovy rovnice plyne, že časový vývoj vlnové funkce

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} F(\vec{p}) e^{-i\frac{E}{\hbar}(t-t_0)} \Phi_{\vec{p}/\hbar}(\vec{x}) d^3p \quad (14.42)$$

lze zapsat jako součet (analogický (14.16))

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0(\vec{x}, t) + \psi_R(\vec{x}, t), \quad (14.43)$$

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

$$d\sigma = d\Omega \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty |\psi(r, \theta, \varphi, t)|^2 r^2 dr \cdot \|\psi(t)\|^{-2} \quad (14.44)$$

Podobnými úvahami jako v podkapitole 14.1 lze ukázat, že

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \left| f\left(\frac{\vec{p}_{\text{out}}}{\hbar}, \frac{\vec{p}_{\text{in}}}{\hbar}\right) \right|^2}, \quad (14.45)$$

kde (θ, φ) jsou sférické souřadnice vektoru $\vec{p}_{\text{out}}$ v soustavě kde vektor $\vec{p}_{\text{in}}$ směřuje ve směru z . (Analogií tohoto vzorce v jednorozměrném případě jsou (14.24), (14.23)).

Literatura

- [1] J. Blank, P. Exner, M. Havlíček. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, Praha, 1993.
- [2] J. Klíma, B. Velický. *Kvantová mechanika I. Skripta*. MFF UK, Praha, 1992.
- [3] J. Formánek. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, Praha, 1993.
- [4] Albert Messiah. *Quantum Mechanics*. North Holland, 1963.
- [5] Leonard I. Schiff. *Quantum Mechanics*. Osborne-McGraw-Hill, 1968.
- [6] V. A. Fock. *Fundamentals of Quantum Mechanics*. Mir Moscow, 1978.
- [7] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, USA, 1992.
- [8] Nouredine Zettili. *Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons, 2004.
- [9] C. Cohen-Tannoudji et al. *Quantum Mechanics*. Herman and John Wiley and Sons, 2005.
- [10] Bernd Thaller. *Visual Quantum Mechanics*. Springer, 2000.
- [11] Yung-Kuo Lim. *Problems and Solutions on Quantum Mechanics*. World Scientific, 1998.
- [12] G. L. Squires. *Problems in Quantum Mechanics with Solutions*. Cambridge University Press, 1995.
- [13] I. Štoll, J. Tolar. *Teoretická fyzika. Skripta*. ČVUT, Praha, 1984.
- [14] M. Uhlíř. *Úvod do atomové fyziky. Skripta FJFI*. Vydavatelství ČVUT, Praha, 1971, 1975.
- [15] V. S. Vladimirov. *Uravenenija matematičeskoj fiziki*. Nauka, Moskva, 1981.
- [16] I. Štoll. *Elektrina a magnetismus. Skripta*. ČVUT, Praha, 1994.

- [17] H. Bateman, A. Erdelyi. *Higher Transcendental Functions*. Vol I. McGraw-Hill, New York.
- [18] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *Feynmanovy přednášky z fyziky 3*. Fragment, Praha, 2013