

Radiologická fyzika a radiobiologie

5. přednáška



Kvantová fyzika

- Fyzika mikrosvěta je odlišná od klasické fyziky.
- Z experimentálních měření byly zjištěny dva základní pilíře QF.
- Nelze je logicky odůvodnit.
- Musíme se s nimi smířit a přijat je.

Kvantová fyzika

1. Jsme schopni předpovědět pouze pravděpodobnost děje.

- Například u jaderného rozpadu nejsme schopni určit přesně kdy se jádro rozpadne. Umíme pouze určit pravděpodobnost rozpadu daného jádra a tudíž známe pouze střední hodnotu počtu částic, které se za určitou dobu rozpadnou.

Kvantová fyzika

- Při studiu vyzařování absolutně černého tělesa si A. Einstein jako první uvědomil potřebu použití pravděpodobnostního popisu. Dobu kdy dojde k deexcitaci elektronu do základního stavu a vyzáření fotonu lze stanovit pouze statisticky. Einstein se ovšem se statistickým popisem fyziky nikdy nesmířil. Fyzika přestává být deterministická.

Kvantová fyzika

2. Pravděpodobnost jevu J je kvadrátem amplitudy pravděpodobnosti A

$$J = |A|^2$$

Amplitudy nezávislých procesů se násobí.

V případě více nerozlišitelných způsobů jak se systém může dostat z počátečního do finálního stavu, tak se amplitudy procesů sčítají.

Kvantová fyzika

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi = E \psi$$

$$U_{ef} = \frac{U_m}{2}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \frac{NI \sqrt{2}}{2\pi r}$$

$$k = \frac{p^2}{2m} = \frac{M_r \cdot 10^{-3}}{M_r \cdot 10^{-3}}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2eUm_e}}$$

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{e}}$$

$$\oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{J} d\vec{S}$$

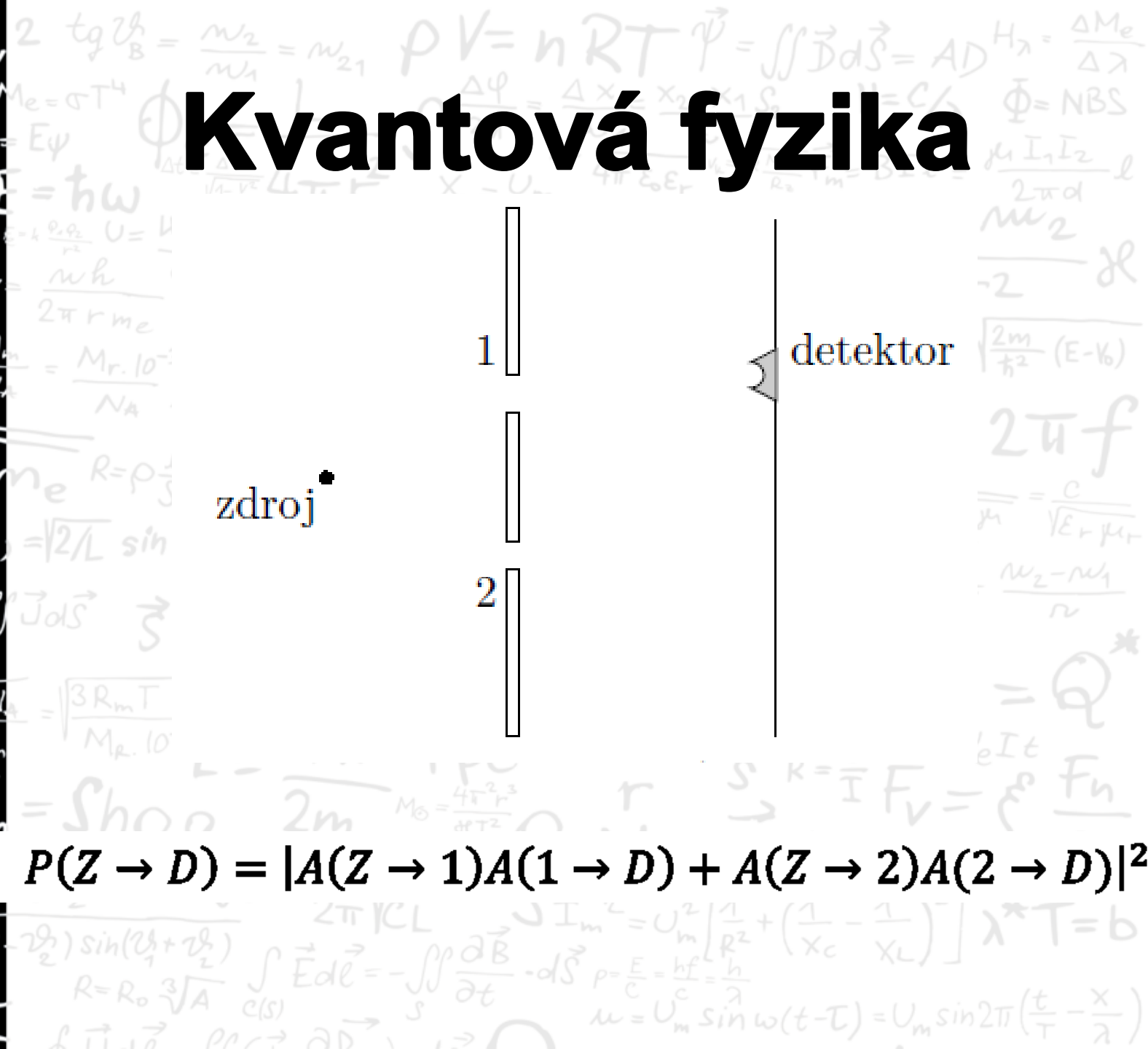
$$v_k = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}} = \sqrt{\frac{3kTN_A}{M_m}}$$

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T} F_h$$

$$\left(\frac{E_t}{E_0}\right)_{\parallel} = \frac{2 \cos \vartheta_1}{\cos(\vartheta_1 - \vartheta_2) \sin(\vartheta_1 + \vartheta_2)}$$

$$E_y = E_0 \sin(kx - \omega t)$$

$$S = \frac{1}{A} \frac{d\omega}{dt}$$



Sternův-Gerlachův E

- Experimenty (1922) se zabývají měřením spinu elektronu (původně Ag).
- Využívá elektromagnetických vlastností částic a nehomogenního magnetického pole.
- Krásně demonsturuje fungování kvantové fyziky.

Sternův-Gerlachův E

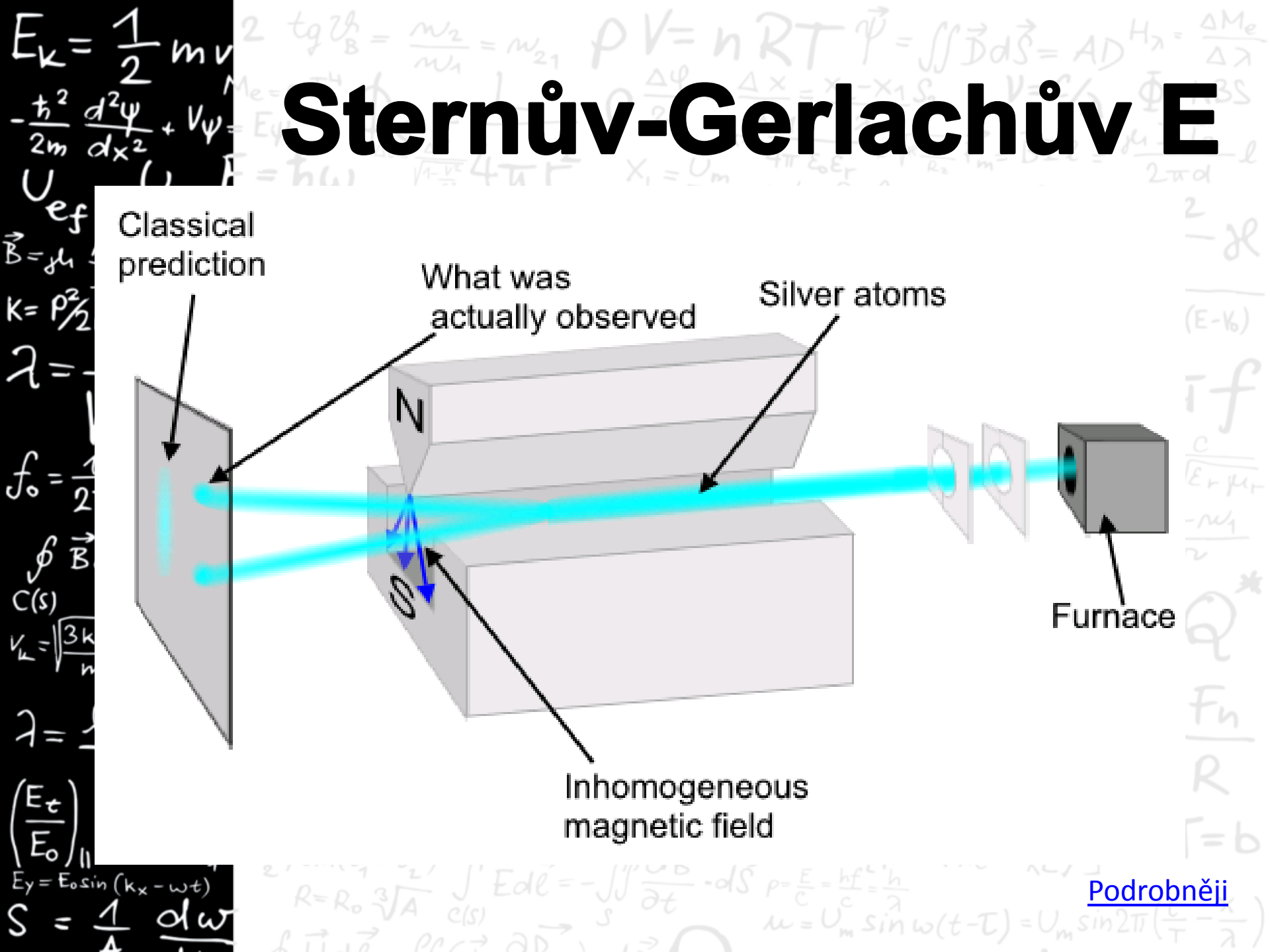
Classical prediction

What was actually observed

Silver atoms

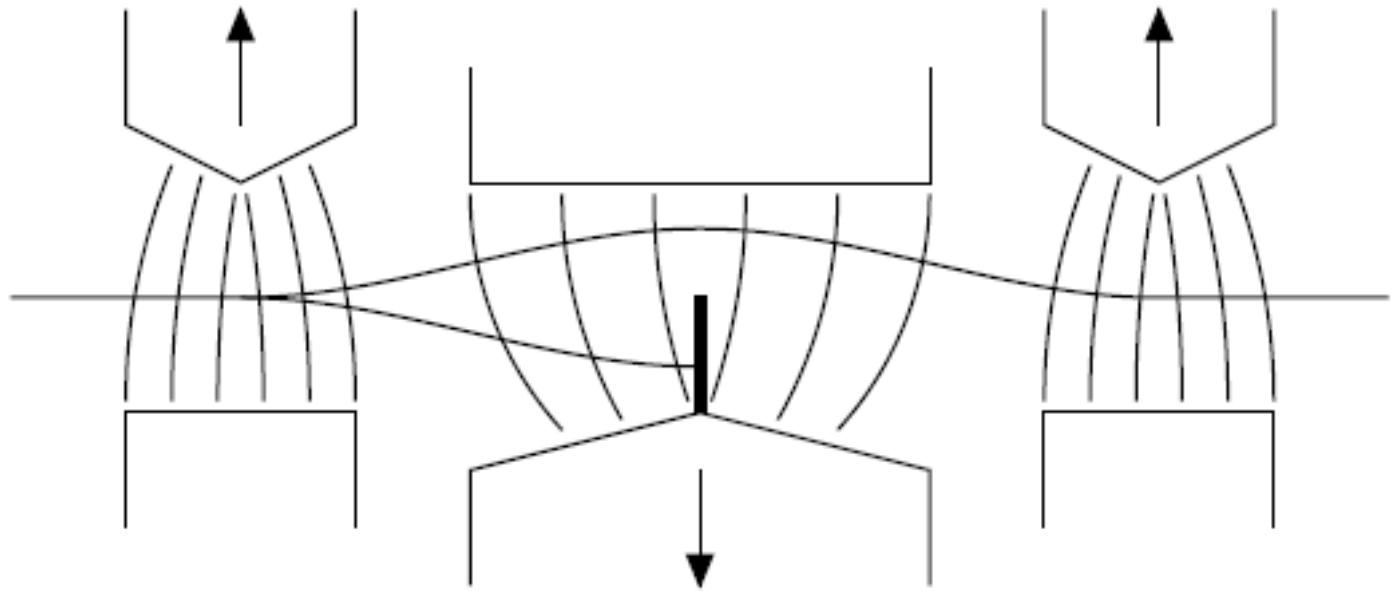
Inhomogeneous magnetic field

Furnace



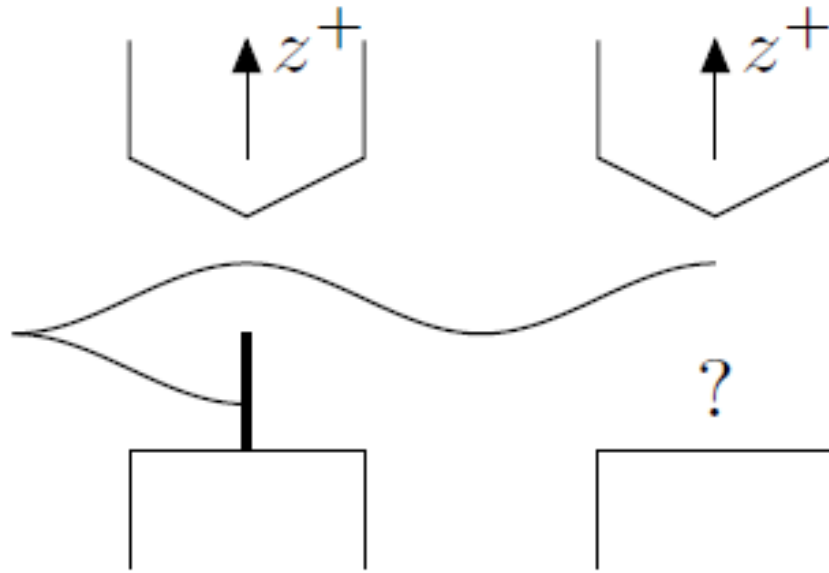
[Podrobněji](#)

Vylepšený S-G exp



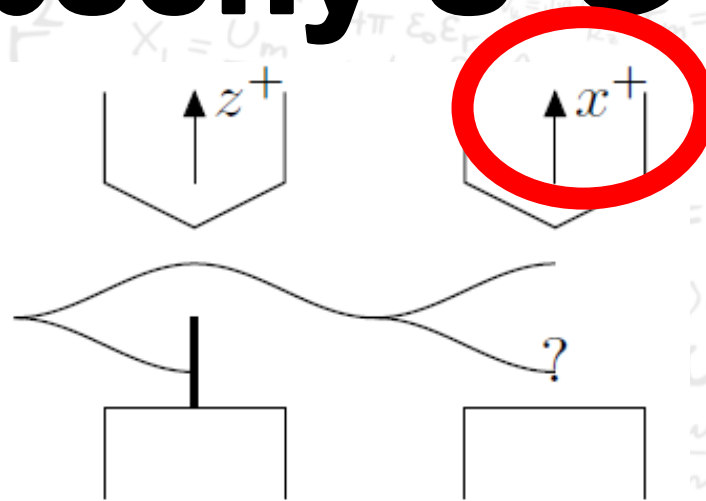
- Tři páry magnetů a stínítko/detektor, zachytávající částice s danou projekcí spinu.

Vylepšený S-G exp



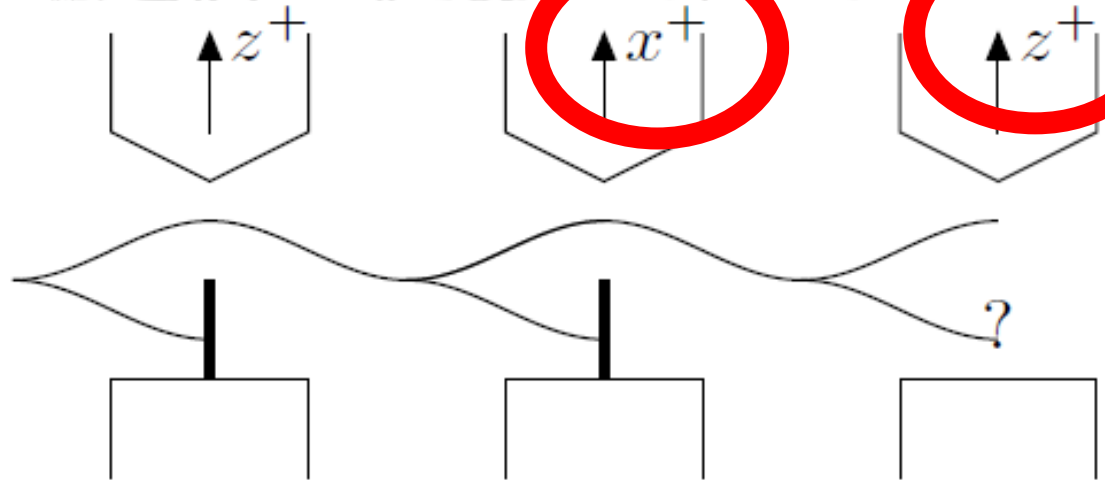
- S jakou pravděpodobností detekujeme částice s projekcí spinu $-1/2$ do osy z ?
- Pravděpodobnost je 0, protože jsem je všechny vyfiltrovali v první části.

Vylepšený S-G exp



- S jakou pravděpodobností detekujeme částice s projekcí spinu $-1/2$ do osy x ?
- Pravděpodobnost je $1/2$, ale nejsme schopni říci, který e^- bude mít projekci v ose x $+1/2$ a který $-1/2$ (pouze pravděpodobnost viz 1. pilíř QF).

Vylepšený S-G exp



- S jakou pravděpodobností detekujeme částice s projekcí spinu $-1/2$ do osy z ?
- Pravděpodobnost je $1/4$.

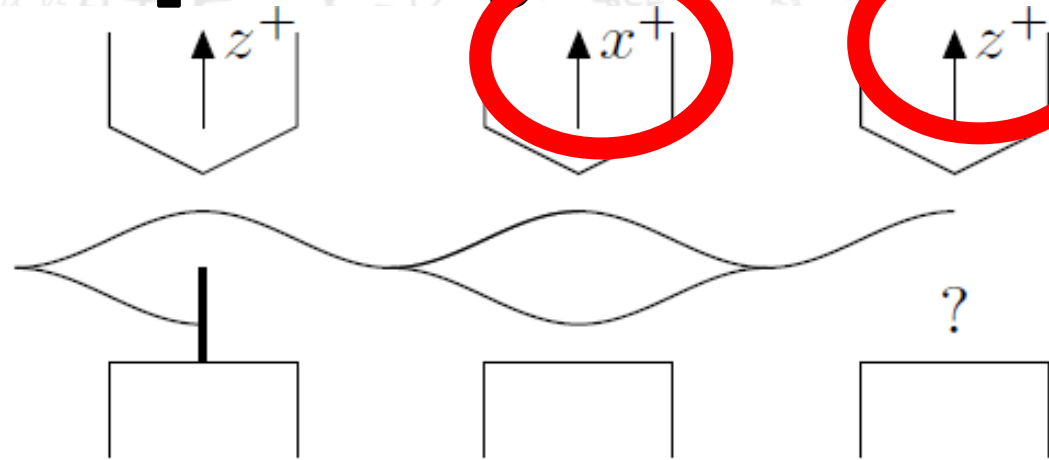
Vylepšený S-G exp

Detekujeme $\frac{1}{4}$ elektronů oproti počtu, který vystupuje z 1. přístroje. Proč? Však jsme je vyfiltrovaly v 1. přístroji!!!!

My víme, že z prvního přístroje všechny spiny míří „nahoru“. Víme, že z druhého přístroje všechny spiny míří „doleva“, ale už nevíme kam míří v ose z. Informace o orientaci v ose x nám „smazala“ (zrušila, přebila) informaci o směru spinu v ose z. Je to divné? Asi ano, ale je to v plném souladu s 2. pilířem QF, který říká: „Amplitudy nezávislých procesů se násobí.“

To jestli sledujeme směr spinu ve směru osy z nebo x jsou dva nezávislé procesy s pravděpodobností $\frac{1}{2}$ a když je vynásobíme, dostáváme $\frac{1}{4}$. Takže výsledek opravdu souhlasí.

Vylepšený S-G exp



- S jakou pravděpodobností detekujeme částice s projekcí spinu $-1/2$ do osy z ?
- Pravděpodobnost je 0.

Vylepšený S-G exp

Tím, že v ose x neprovádíme žádné měření, neovlivňujeme stav systému a nemá nám co „přemazat“ informaci o orientaci spinu v ose z. Proto nedetekujeme žádný elektron (pravděpodobnost je 0). To je v plně v souladu s 2. pilířem QF. Při průchodu druhým přístrojem (v ose x) dochází ke dvěma nerozlišitelným procesům, což má za následek sčítání amplitud pravděpodobností, díky čemuž dojde k vynulování celkové pravděpodobnosti děje.

[Podrobněji](#)

Pauza



$E_k = \frac{1}{2} m v^2$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi = E \psi$
 $U_{ef} = \frac{U_m}{\sqrt{2}}$
 $\vec{B} = \mu_0 \frac{NI \sqrt{2}}{2\pi r}$
 $k = \frac{p^2}{2m} = \frac{M_p}{\lambda}$
 $\lambda = \frac{h}{p}$
 $\sqrt{2eUm_e}$
 $f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{l}}$
 $\oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{J} d\vec{S}$
 $C(s)$
 $v_k = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}} = \sqrt{\frac{3kTN_A}{M_m}}$
 $\lambda = \frac{h \ln 2}{T}$
 $\left(\frac{E_t}{E_0}\right)_{\parallel} = \frac{2 \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2}{\cos(\vartheta_1 - \vartheta_2) \sin(\vartheta_1 + \vartheta_2)}$
 $E_y = E_0 \sin(kx - \omega t)$
 $S = \frac{1}{A} \frac{d\omega}{dt}$

$2 \tan \vartheta_B = \frac{m_2}{m_1} = m_{21}$
 $M_e = \sigma T^4$
 $\phi_e = \frac{L}{4\pi r^2}$
 $U = \frac{W_{AB}}{q} = \frac{|E_{PA} - E_{PB}|}{q} = \frac{|\varphi_A - \varphi_B|}{q}$
 $l_t = l_0(1 + \alpha \Delta T)$
 $R = \rho \frac{l}{S}$
 $E = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2} \mu_0 H^2$
 $\vec{J} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{A}$
 $E = \hbar \omega$
 $F_0 = \frac{1}{2\pi \sqrt{CL}}$
 $\sigma = \frac{Q}{S}$
 $M = F d \cos \alpha$
 $S I_m^2 = U_m^2 \left[\frac{1}{R^2} + \left(\frac{1}{X_C} - \frac{1}{X_L} \right)^2 \right]$
 $\int \vec{E} d\vec{l} = - \int \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{S}$
 $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$
 $u = U_m \sin \omega(t - \tau) = U_m \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right)$

$\rho V = n R T$
 $\vec{\Psi} = \iint \vec{D} d\vec{S} = A D$
 $H_{\lambda} = \frac{\Delta M_e}{\Delta \lambda}$
 $V = c/\lambda$
 $\Phi = NBS$
 $X_L = \frac{U_m}{I_m} = \omega L = 2\pi f L$
 $F_m = \vec{B} I l = \frac{\mu I_1 I_2}{2\pi d} l$
 $F_g = \frac{m_1 m_2}{r^2}$
 $\frac{m}{T} k = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$
 $\omega = 2\pi f$
 $v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \cdot \mu}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon \cdot \mu}}$
 $F_x = \frac{1}{2} C_x p^2$
 $\frac{m_1}{x} + \frac{m_2}{x'} = \frac{m_2 - m_1}{v}$
 $\vec{D} d\vec{S} = Q^*$
 $\vec{U} \cdot \vec{v}_2 = U_e I t$
 $\int \frac{F_n}{R}$
 $\lambda^* T = b$

Vlnová funkce

- Značí se Ψ
- Charakterizuje de Broglieho vlnu.
- Hodnota vlnové funkce, příslušející pohybujícímu se tělesu v daném bodě prostoru a v daném čase, souvisí s pravděpodobností výskytu tělesa v tomto bodě a čase.
- Samotná funkce nemá přímý fyzikální význam.

Vlnová funkce

- Amplituda vlny může být kladná i záporná, takže Ψ nemůže být interpretována jako pravděpodobnost výskytu tělesa v daném bodě a čase.
- Ovšem $|\Psi|^2$ je vždy větší rovna 0 a může sloužit k popisu pravděpodobnosti experimentálního nalezení tělesa popsaného touto vlnovou funkcí.
- Tuto interpretaci poprvé navrhl Max Born v roce 1926.

Vlnová funkce

- Když mluvíme o vlnové funkci a jejím prostorovém rozložení, neznamena to, že samotná částice je rozložena v prostoru.
- Pokud detekujeme částici, tak ji buď detekujeme nebo nedetekujeme v bodě, kde je prostorové rozložení vlnové funkce nenulové.
- Kvadrát Ψ nám pak říká s jakou pravděpodobností ji detekujeme.

Vlnová funkce

- Vlnová funkce může být popsána komplexním číslem a nalezení jejího přesného popisu nemusí být vždy triviální záležitostí.

Schrödinger

- Bohrov model atomu relativně dobře popisuje spektrální čáry vodíku a vodíku podobných atomů, ale pro složitější atomu není aplikovatelná.
- Proto se v letech 1925 - 1926 Erwin Schrödinger a Werner Heisenberg pokusili najít obecnější popis atomů. Tak vznikla kvantová mechanika.

Schrödinger

- Z logiky věci můžeme na vlnovou funkci klást předpoklady, aniž bychom přesně znali její podobu.
- Musí platit, že $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV$ je konečný.
- Nejedná se o nic jiného než o matematické vyjádření skutečnosti, že v celém prostoru musí být pravděpodobnost výskytu částice nenulová. Tj. částice někde musí existovat.

Schrödinger

- Vlnová funkce popisuje stav částice a obsahuje veškerou informaci o měřitelných veličinách.
- Proto musí být jednoznačnou funkcí místa a času.
- Parciální derivace musí být v celém prostoru spojité.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z}$$

Schrödinger

- Z těchto podmínek a znalosti klasické rovnice vlny můžeme odvodit Schrödingerovu časovou rovnici.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi$$

[Podrobněji](#)

Schrödinger

- Obecně se Schrödingerova rovnice zapisuje za pomoci Hamiltonova operátoru (tzv. hamiltonián).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \Psi(\vec{r}, t)$$

- Pokud budeme mít speciální případ, kdy hamiltonián je časově nezávislý, pak dostáváme stacionární Schröd.r.

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Schrödinger

- Konstanta E ve stacionární Schrödingerově rovnice má rozměr energie.
- Např. hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru je:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

[Podrobněji](#)

Dirac

- Schrödingerova rovnice má problém, že není relativistická.
- To se snažila vyřešit Klein-Gordonova rovnice.
- Ovšem při řešení rovnice může hustota pravděpodobnosti vlnové funkce nabývat záporných hodnot, což se nelíbilo Diracovi, protože záporná hustota pravděpodobnosti nemá fyzikální interpretaci.

Dirac

- Proto Dirac hledal rovnici, která musí splňovat pět základních podmínek.
- Tyto podmínky splňuje rovnice:

$$\frac{1}{c} \frac{d\Psi}{dt} + \sum_{i=0}^3 \alpha_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} + \frac{imc}{\hbar} \beta \Psi = 0$$

- Kde α_i a β jsou konstantní matice 4x4.
- Předpověď existence antičástice.

[Podrobněji](#)

Shrnutí

- Známe základní principy kvantové fyziky.
- Umíme popsat a okomentovat Sternův-Gerlachův experiment.
- Známe pojem vlnová funkce a jsme schopni jej interpretovat.
- Víme proč byly zavedeny Schrödingerova a Diracova rovnice.

Konec

THE END



www.teleinterferencias.blogspot.com

$E_k = \frac{1}{2} m v^2$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi = E \psi$
 $U_{ef} = U_m$
 $\vec{B} = \mu_0 \frac{NI \sqrt{2}}{2\pi r}$
 $k = \rho \frac{e^2}{2m} m_0 = \frac{M}{N}$
 $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2eUm_e}}$
 $f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{e}}$
 $\oint \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int \vec{J} d\vec{S}$
 $v_k = \sqrt{\frac{3kT}{m_0}} = \sqrt{\frac{3kTN}{Mm}}$
 $\lambda = \frac{\ln 2}{T} F_h$
 $\left(\frac{E_t}{E_0}\right)_{\parallel} = \frac{2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{\cos(\theta_1 - \theta_2) \sin(\theta_1 + \theta_2)}$
 $E_y = E_0 \sin(kx - \omega t)$
 $S = \frac{1}{A} \frac{d\omega}{dt}$

$2 \tan \theta_B = \frac{m_2}{m_1} = m_{21}$
 $\rho V = n R T$
 $\vec{\Psi} = \iint \vec{D} d\vec{S} = AD$
 $H_{\lambda} = \frac{\Delta Me}{\Delta \lambda}$
 $V = c/\lambda$
 $\Phi = NBS$
 $\phi_e = \frac{L}{4\pi r^2}$
 $X_L = \frac{U_m}{I_m} = \omega L = 2\pi f L$
 $F_m = \vec{B} I l = \frac{\mu I_1 I_2}{2\pi d} l$
 $F_g = \frac{m_1 m_2}{r^2}$
 $R_m = \frac{c}{\tau v} = \sqrt{2m} (E - V_0)$
 $U = \frac{W_{AB}}{q} = \frac{|E_{PA} - E_{PB}|}{q} = \frac{|V_A - V_B|}{q}$
 $T = \frac{4 n_1 n_2}{(n_2 + n_1)^2}$
 $\Phi_E = \frac{E_e - E_p}{r} = k \frac{Q}{r}$
 $m = N \cdot m_0 = \frac{Q}{M_m}$
 $\vec{J} d\vec{S}$
 $\sigma = \frac{\Psi}{M} = F d \cos \alpha$
 $S I_m^2 = U_m^2 \left[\frac{1}{R^2} + \left(\frac{1}{X_C} - \frac{1}{X_L} \right)^2 \right]$
 $\lambda^* T = b$
 $p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$
 $u = U_m \sin \omega(t - \tau) = U_m \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right)$
 $R = R_0 \sqrt[3]{A}$
 $\int \vec{E} d\vec{l} = - \int \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{S}$

Dodatky 1

- Podíváme se na Sternův - Gerlachův experiment o něco podrobněji.
- Pro magnetický dipólový moment platí:
$$\vec{\mu} = \frac{\gamma e}{m_e} \vec{S}$$
- Na dipól v magnetickém poli působí síla $\vec{F} = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$.
- Pro změnu práce (neboli energie) platí diferenciální vztah $dW = F ds = dE$.

Dodatky 1

- Mějme magnetické pole $\vec{B} = (0,0,B)$.
- Pak pro energii dipólu platí:

$$E = \int \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) ds = \dots = -(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = -\frac{\gamma e}{m_e} s_z B$$

- Tři tečky ve výpočtu značí aplikaci pokročilejších znalostí matematické analýzy a práce s potenciály, která pro nás momentálně není podstatná.

Dodatky 1

- V tomto případě je energie úměrná průmětu spinu do jedné osy. Protože je magnetické pole pouze v ose z je v této ose i průmět spinu.
- Sílu působící na elektron lze vypočíst z předchozího vztahu:

$$F_z = -\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{\gamma e}{m_e} S_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

Dodatky 1

$$F_z = \frac{\gamma e}{m_e} s_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

- Vidíme, že síla vychylující elektrony je úměrná velikosti nehomogenit magnetického pole (člen s derivací), konstantám a průmětu spinu do osy z, který je kvantován.

Dodatky 2

- Pro výpočty v kvantové mechanice se využívá několik různých matematických notací.
- Nyní si jen pro zajímavost ukážeme Diracovu notaci a demonstrováme si ji na Stern-Gerlachových experimentech.

Dodatky 2

- Stav systému se popisuje vektorem z abstraktního (Hilbertova) prostoru.
- Při vstupu systému do měřícího přístroje se používá ket-vektor.

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

- Výstupní stav popisuje bra-vektor:

$$\langle\Psi| = (a^* \ b^*)$$

- Skalární součin se značí:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = (a^*a + b^*b)$$

Dodatky 2

- Pravděpodobnost přechodu ze stavu Ψ do stavu φ je dána skalárním součinem:

$$P(\Psi, \varphi) = |\langle \Psi | \varphi \rangle|^2$$

- Nejjednodušší popis stavu spinu elektronu můžeme volit pro stav $+1/2$

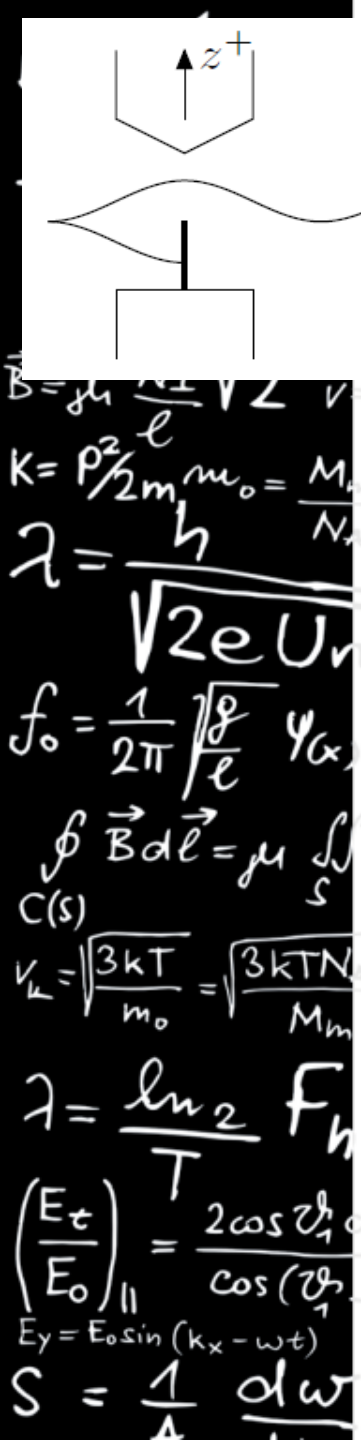
$$|+z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

a pro stav $-1/2$

$$|-z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dodatky 2

- Pokud se nyní podíváme na nejjednodušší S-G experiment a pravděpodobnost naměření stavu $-1/2$.
- Z pohledu Diracova formalismu se ptáme na pravděpodobnost s jakou se elektron dostane ze stavu $+1/2$ (výstup z 1. magnetu a vstup do 2. magnetu) do stavu $-1/2$ při výstupu z 2. magnetu.



Dodatky 2

- Jaká je pravděpodobnost, že spin elektronu přejde ze stavu $+z$ do $-z$?

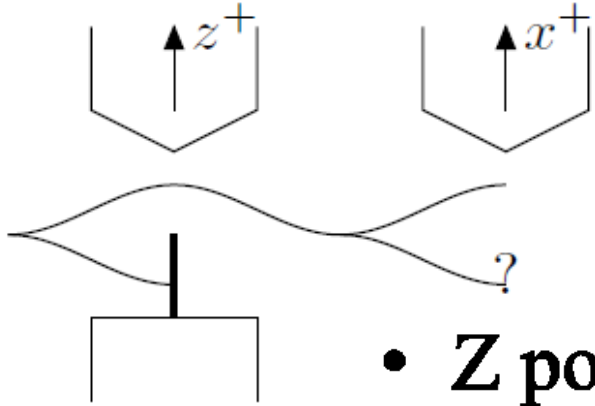
$$P(+z, -z) = |\langle +z | -z \rangle|^2$$

$$= \left| (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = |1.0 + 0.1|^2 = 0$$

- Jaká je pravděpodobnost, že spin elektronu přejde ze stavu $+z$ do $+z$?

$$P(+z, +z) = |\langle +z | +z \rangle|^2$$

$$= \left| (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 = |1.1 + 0.0|^2 = 1$$



Dodatky 2

- Z podmínek, které zde není potřeba vypisovat můžeme stavy $\pm x$ popsat:

$$|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

- Pravděpodobnost detekce elektronu ve stavu $-x$ po předchozí filtraci na $+z$ je:

$$\begin{aligned} P(+z, -x) &= |\langle +z | -x \rangle|^2 \\ &= \left| (1 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1)|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Dodatky 2

- 3. případ je trochu složitější. Jaká je pravděpodobnost přechodu z +z do +x a posléze z +x do -z?

$$P(+z, +x, +x, -z)$$

$$\begin{aligned}
 &= |\langle +z | +x \rangle \langle +x | -z \rangle|^2 = \\
 &= \left| (1 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \\
 &= \frac{1}{4}
 \end{aligned}$$

Dodatky 2

- Jaká je pravděpodobnost přechodu z +z do +x nebo -x a posléze z +x nebo -x do -z?

$$P(+z, \pm x, \pm x, -z)$$

$$= |\langle +z | +x \rangle \langle +x | -z \rangle + \langle +z | -x \rangle \langle -x | -z \rangle|^2 =$$

$$= \left| (1 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right.$$

$$+ \left. (1 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ -1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2$$

$$= 0$$

Konec 2. dodatku

[zpět](#)

Dodatky 3

- Pro lepší pochopení Schrödingerovi rovnice se nejprve podíváme na rovnici šíření vlny na napjaté struně.
- Poté přejdeme z klasické mechaniky na kvantovou mechaniku.
- Vše je z důvodu pohodlnosti a přehlednějšího výkladu převzato z BEISER, Arthur. *Úvod do moderní fyziky*. Vyd. 2. Praha: Academia, 1978, 628 s.

místě) musí být integrál čtverce $|\Psi|^2$ přes celý prostor konečný – částice se přece někde, v nějakém místě prostoru vyskytuje. Kdyby byl

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV$$

nula, částice by neexistovala, a kdyby se integrál rovnal ∞ , pak by částice mohla být zároveň všude; $|\Psi|^2$ nemůže být záporné nebo komplexní z důvodu své definice, zbývá tedy jediná možnost, že integrál tohoto čtverce je konečná veličina, má-li Ψ správně popisovat reálné těleso.

Obvykle je vhodnější mít $|\Psi|^2$ nikoli jenom úměrné, nýbrž rovné pravděpodobnosti P nalezení částice popsané pomocí Ψ . Je-li $|\Psi|^2$ rovno P , pak musí platit, že

$$(7.1) \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1, \quad \text{Normování vlnové funkce}$$

jelikož

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dV = 1$$

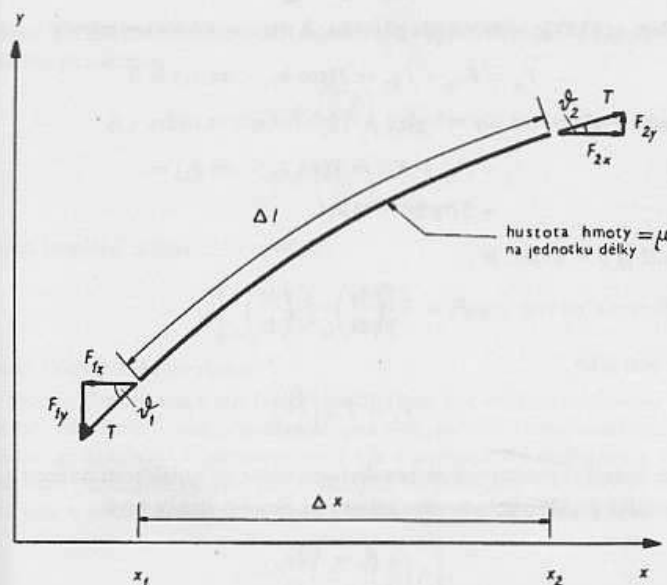
je matematickým vyjádřením toho, že částice někde v prostoru v každém okamžiku existuje. O vlnové funkci splňující vztah (7.1) říkáme, že je *normovaná*. Každá přípustná vlnová funkce se dá normovat vynásobením vhodnou konstantou; v kap. 8 uvidíme přesně, jakým způsobem to lze provést.

Jak uvidíme dále, je vlnová funkce v kvantové mechanice popisem stavu částice, neboť na základě Ψ můžeme získat veškerou informaci o všech měřitelných veličinách v daném fyzikálním stavu částice. Proto musí být Ψ jednoznačnou funkcí místa a času; potom bude mít logicky také P v každém místě a čase jen jednu hodnotu. A další podmínka, kterou musí Ψ splňovat, konečně požaduje, aby parciální derivace $\partial\Psi/\partial x$, $\partial\Psi/\partial y$, $\partial\Psi/\partial z$ byly všude spojité.

Schrödingerova rovnice – základní rovnice kvantové mechaniky v témže smyslu, jako je druhý pohybový zákon základní rovnicí newtonovské mechaniky – je jistým typem vlnové rovnice v proměnné Ψ . Bude zde tedy prospěšné zopakovat si přehledně vlastnosti a řešení jednodušší vlnové rovnice, a to rovnice popisující šíření vln podél napnuté struny, dříve než se pustíme do Schrödingerovy rovnice samé.

7.3 Vlnová rovnice

Uvažujme strunu napjatou podél osy x , jejíž výchylky leží v rovině xy . Napětí ve struně označíme T a její hmotu na jednotku délky označíme μ . K odvození diferenciálních rovnic popisujících šíření vln strunou budeme aplikovat druhý pohybový zákon, $F = ma$, na malý element Δl struny (viz obr. 7.1).



Obr. 7.1 Element napjaté struny vychýlený ze své normální polohy podél osy x při průchodu vlny. Výchylka je zde značně zvětšena.

Omezíme naši diskusi na malé výchylky struny, jež nezpůsobují náhlé změny tvaru. Pro takové výchylky platí řada aproximací:

1. Napětí struny má všude stejnou velikost T .
2. Úhly ϑ_1 a ϑ_2 jsou dostatečně malé, takže

$$(7.2) \quad \cos \vartheta_1 \approx \cos \vartheta_2 \approx 1,$$

$$(7.3) \quad \sin \vartheta_1 \approx \text{tg } \vartheta_1,$$

$$(7.4) \quad \sin \vartheta_2 \approx \text{tg } \vartheta_2.$$

3. Délka Δl vychýleného elementu je téměř stejná jako jeho normální délka Δx . Je tedy $\Delta l \approx \Delta x$ a hmota elementu je

$$\Delta m \approx \mu \Delta x.$$

Z obr. 7.1 vidíme, že

$$F_{1x} = -T \cos \vartheta_1, \quad F_{2x} = T \cos \vartheta_2,$$

$$F_{1y} = -T \sin \vartheta_1, \quad F_{2y} = T \sin \vartheta_2.$$

S ohledem na (7.2) je výsledná síla působící na element struny ve směru x

$$F_x = F_{1x} + F_{2x} = T(\cos \vartheta_2 - \cos \vartheta_1) = 0.$$

Stačí tudíž uvažovat jen síly ve směru y . Výsledná síla ve směru y je

$$\begin{aligned} F_y &= F_{1y} + F_{2y} = T(\sin \vartheta_2 - \sin \vartheta_1) = \\ &= T(\operatorname{tg} \vartheta_2 - \operatorname{tg} \vartheta_1). \end{aligned}$$

Poněvadž $\operatorname{tg} \vartheta = dy/dx$, je

$$F_y = T \left[\left(\frac{dy}{dx} \right)_{x_2} - \left(\frac{dy}{dx} \right)_{x_1} \right],$$

což lze psát jako

$$F_y = T \Delta \left(\frac{dy}{dx} \right).$$

Veličina $\Delta(dy/dx)$ představuje změnu derivace dy/dx na vzdálenosti Δx mezi x_1 a x_2 .

Použití druhého pohybového zákona na element struny dává

$$F_y = \Delta m a_y,$$

$$T \Delta \left(\frac{dy}{dx} \right) = \mu \Delta x \frac{d^2 y}{dt^2},$$

$$(7.5) \quad \frac{\Delta}{\Delta x} \left(\frac{dy}{dx} \right) = \frac{\mu}{T} \frac{d^2 y}{dt^2}.$$

Veličina

$$\frac{\Delta}{\Delta x} \left(\frac{dy}{dx} \right)$$

je rychlost změny derivace dy/dx s x . Při $\Delta x \rightarrow 0$ je

$$\frac{\Delta}{\Delta x} \left(\frac{dy}{dx} \right) \rightarrow \frac{d^2 y}{dx^2},$$

takže v limitě nekonečně malého elementu struny rovnice (7.5) zní

$$(7.6) \quad \frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{\mu}{T} \frac{d^2 y}{dt^2}.$$

Tento vztah však není zcela správný, neboť y je funkcí jak t , tak x a $d^2 y/dx^2$ se tudíž mění s časem t a $d^2 y/dt^2$ s polohou x . V rovnici (7.6) máme na mysli derivování

v určitém daném čase a místě, což znamená, že úplné derivace je nutno nahradit derivacemi parciálními

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \left(\frac{d^2 y}{dx^2} \right)_{t=\text{konst}},$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \left(\frac{d^2 y}{dt^2} \right)_{x=\text{konst}}.$$

Výsledná parciální diferenciální rovnice

$$(7.7) \quad \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\mu}{T} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad \text{Vlnová rovnice napnuté struny}$$

je vlnová rovnice napnuté struny.

Vlnová rovnice může mít řešení mnoha typů, což odráží rozmanitost vln, jež se zde mohou objevit – jednoduchá postupná vlna, sled vln s konstantní amplitudou a vlnovou délkou, sled superponovaných vln s konstantní amplitudou a vlnovou délkou, sled superponovaných vln s různými amplitudami a vlnovými délkami, stojatá vlna u struny upevněné na obou koncích atd. Všechna řešení musí mít tvar

$$(7.8) \quad y = F \left[t \pm \sqrt{\left(\frac{\mu}{T} \right) x} \right],$$

kde F je libovolná diferencovatelná funkce. Řešení $F[t - (\mu/T)^{1/2} x]$ představují vlny šířící se ve směru $+x$ a řešení $F[t + (\mu/T)^{1/2} x]$ vlny šířící se ve směru $-x$.

Srovnání (7.8) se (4.5) ukazuje, že veličina $(T/\mu)^{1/2}$ se rovná fázové (vlnové) rychlosti, kterou budeme nyní a v dalším textu značit symbolem v . Při

$$(7.9) \quad \sqrt{\left(\frac{T}{\mu} \right)} = v$$

tedy vlnová rovnice napnuté struny bude

$$(7.10) \quad \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}. \quad \text{Vlnová rovnice}$$

Tento tvar vlnové rovnice platí pro vlny v libovolném prostředí, v němž fázová rychlost v nezávisí na bližším charakteru vln, tj. kde v je stejná bez ohledu na daný tvar, limityčet a vlnovou délku uvažovaných vln. Vlny v napjaté struně, zvukové vlny ve vzduchu a světelné vlny ve vakuu jsou konkrétními příklady vln, jež splňují rovnici (7.10); ve všech těchto případech závisí rychlost v pouze na vlastnostech prostředí.

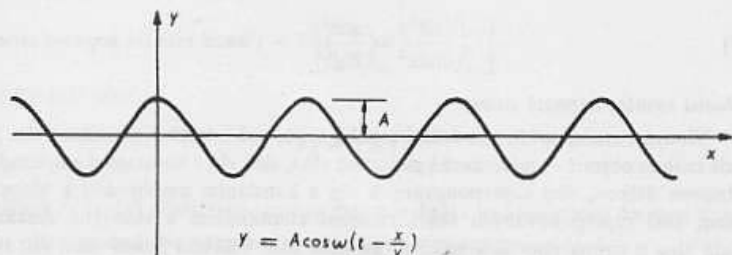
Budeme se nyní zabývat o vlnový ekvivalent „volné částice“, tj. částice, na kterou nepůsobí žádné síly, a která se tudíž pohybuje po přímočaré dráze s konstantní rychlostí. Tento ekvivalent odpovídá obecnému řešení rovnice (7.10) pro

netlumené monochromatické (tj. s konstantní amplitudou A , resp. s konstantní kruhovou frekvencí ω) harmonické vlny ve směru $+x$

$$(7.11) \quad y = A \exp[-i\omega(t - x/v)].$$

V tomto vzorci je y komplexní veličina s nenulovou reálnou i imaginární částí. Poněvadž je

$$(7.12) \quad \exp(-i\vartheta) = \cos \vartheta - i \sin \vartheta,$$



Obr. 7.2 Vlny v rovině xy šířící se ve směru $+x$ podél napjaté struny ležící v ose x .

lze (7.11) přepsat ve tvaru

$$(7.13) \quad y = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) - i A \sin \omega \left(t - \frac{x}{v} \right).$$

Pro vlnění napnuté struny má význam jen reálná část výrazu (7.13), kde y představuje výchylku struny z normální polohy (obr. 7.2); v tomto případě se imaginární část vynechává jako bezpředmětná.

7.4 Schrödingerova rovnice: časově závislý tvar

Vlnová funkce Ψ v kvantové mechanice odpovídá výchylce y vlnění struny. Na rozdíl od y však Ψ sama o sobě není přímo měřitelnou veličinou, a může být tudíž komplexní. Proto budeme předpokládat, že Ψ má ve směru x tvar

$$(7.14) \quad \Psi = A \exp[-i\omega(t - x/v)].$$

Dosadíme-li v tomto výrazu $2\pi\nu$ za ω a $\lambda\nu$ za v , dostaneme

$$(7.15) \quad \Psi = A \exp[-2\pi i(\nu t - x/\lambda)];$$

to je výhodný tvar, protože již známe souvislost v a λ s celkovou energií E a hybností p částice popsané vlnovou funkcí Ψ . Jelikož

$$E = h\nu = 2\pi h\nu$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi h}{p},$$

máme

$$(7.16) \quad \Psi = A \exp[-(i/\hbar)(Et - px)].$$

Výraz (7.16) je matematickým popisem vlnového ekvivalentu volné částice s celkovou energií E a hybností p , pohybující se ve směru $+x$, stejně, jako je výraz (7.11) matematickým popisem výchylky harmonické vlny šířící se volně podél napjaté struny.

Výraz (7.16) pro vlnovou funkci Ψ je správný jen pro volnou částici, avšak nás především zajímají situace, kdy pohyb částice je podroben různým omezením. Důležitým případem je například elektron vázaný v atomu elektrickým polem jeho jádra. Musíme tedy nyní získat základní diferenciální rovnici pro Ψ , kterou bychom pak mohli řešit pro konkrétní případy. Začneme derivováním (7.16) dvakrát podle x , což dává

$$(7.17) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi,$$

a jednou podle t

$$(7.18) \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi.$$

Při rychlostech malých ve srovnání s rychlostí světla je celková energie E částice součtem její kinetické energie $p^2/2m$ a potenciální energie V , kde V je obecně funkcí polohy x a času t ,

$$(7.19) \quad E = \frac{p^2}{2m} + V.$$

Vynásobením obou stran tohoto vztahu vlnovou funkcí Ψ máme

$$(7.20) \quad E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + V\Psi.$$

Ze (7.17) a (7.18) vidíme, že je

$$(7.21) \quad E\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

a

$$(7.22) \quad p^2 \Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

Dosazením těchto výrazů pro $E\Psi$ a $p^2\Psi$ do (7.20) dostaneme

$$(7.23) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi. \quad \text{Jednorozměrná časová Schrödingerova rovnice}$$

Rovnice (7.23) představuje časově závislý tvar Schrödingerovy rovnice (časovou Schrödingerovu rovnici). V trojrozměrném případě časová Schrödingerova rovnice zní

$$(7.24) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) - V\Psi,$$

kde potenciální energie V částice je funkcí x , y , z a t . Jakákoli omezení, jež mohou být kladena na pohyb částice, se projeví ve funkci potenciální energie V . Jakmile je známo V , je možno Schrödingerovu rovnici řešit pro vlnovou funkci Ψ částice, a tak určit i hustotu pravděpodobnosti $|\Psi|^2$ pro dané x , y , z , t .

Veličina

$$(7.25) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

se často zkracuje jako $\nabla^2 \Psi$, kde ∇^2 je Laplaceův operátor^{7.3}), definovaný vztahem

$$(7.26) \quad \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad \text{Laplaceův operátor v kartézských souřadnicích}$$

Operátor je matematická instrukce, která nám říká, jakou operaci máme provést s veličinou, která za ním následuje. Objeví-li se ve výrazu Laplaceův operátor ∇^2 , okamžitě víme, že máme provést druhou parciální derivaci toho, co za ním následuje (v našem případě vlnové funkce Ψ), podle každé souřadnice a výsledek sečíst. Výhodou použití $\nabla^2 \Psi$ k vyjádření (7.25) je, že $\nabla^2 \Psi$ není symbolem specifickým pro kartézské souřadnice; Schrödingerova rovnice ve tvaru

$$(7.27) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V\Psi \quad \text{Trojrozměrná časová Schrödingerova rovnice}$$

tak platí ve všech souřadnicových systémech za předpokladu, že operátor ∇^2 je v každém z nich příslušným způsobem definován. Vhodná volba souřadnicového systému často usnadňuje řešení diferenciální rovnice; uvidíme například, že Schrödingerova rovnice pro vodíkový atom se nejnáze řeší pro Ψ vyjádřenou ve sférických

^{7.3}) Laplaceův operátor ∇^2 se též velmi často značí symbolem Δ . Pozn. překl.

souřadnicích, kdežto v případě iontu vodíkové molekuly H_2^+ (stabilní systém složený ze dvou protonů a jednoho elektronu) jsou vhodné eliptické souřadnice.

Vratme se ke způsobu, jímž jsme získali Schrödingerovu rovnici vycházející z vlnové funkce pro vlnou částici. Rozšíření Schrödingerovy rovnice z tohoto speciálního případu částice bez jakýchkoli omezení (potenciální energie $V = \text{konst.}$) na obecný případ částice podrobené libovolným silám, proměnným v prostoru a v čase ($V = V(x, y, z, t)$), zdá se zcela přijatelné, avšak a priori nelze nijak dokázat, že toto rozšíření je správné. Můžeme jediné Schrödingerovu rovnici postulovat, vyřešit ji pro řadu fyzikálních problémů a srovnat výsledky výpočtů s výsledky experimentu. Souhlasí-li navzájem tyto výsledky, je postulát reprezentovaný Schrödingerovou rovnicí platný; kdyby výsledky nesouhlasily, museli bychom tento postulát odmítnout a hledat nějaký jiný přístup. Jinými slovy, Schrödingerova rovnice se nedá odvodit ze „základních zákonů“, nýbrž je základním zákonem sama o sobě.

V praxi se však Schrödingerova rovnice při předpovídání experimentálních výsledků ukázala jako zcela přesná. Musíme ovšem mít na paměti, že rovnici (7.27) lze použít jen k řešení nerelativistických problémů; máme-li co činit s rychlostmi částic, srovnatelnými s rychlostí světla, je zapotřebí složitější formulace. Protože Schrödingerova rovnice souhlasí s experimentem v oblasti své použitelnosti, jsme oprávněni považovat ji za vyjádření úspěšného postulátu, týkajícího se určitých aspektů fyzikálního světa. Avšak přes veškerý svůj úspěch tato rovnice zůstává postulátem v témže smyslu jako postuláty speciální teorie relativity nebo termodynamické zákony: žádný z nich nelze odvodit z některého jiného základního principu a každý z nich je fundamentálním zobecněním, které neplatí o nic více ani o nic méně než empirická data, na nichž spočívá. V této souvislosti je třeba poznamenat, že Schrödingerova rovnice neznamená zvýšení počtu postulátů, potřebných k popisu fyzikálního světa, neboť druhý Newtonův pohybový zákon, v klasické mechanice považovaný za postulát, dá se odvodit ze Schrödingerovy rovnice, chápeme-li veličiny vystupující v rovnici nikoli jako jejich určité, ale střední hodnoty.

7.5 Tok pravděpodobnosti

O veličině $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ jsme hovořili jako o hustotě pravděpodobnosti výskytu částice popisované vlnovou funkcí Ψ . Tato interpretace se dá ospravedlnit, budeme-li uvažovat pohyb částice ve směru x . Je-li $|\Psi|^2$ skutečně hustota pravděpodobnosti výskytu částice, měla by se při pohybu částice z místa na místo zachovávat; jestliže $\neq |\Psi|^2$ nezachovávat, pak

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

nemůže platit v každém okamžiku a $|\Psi|^2$ nemůže představovat hustotu pravděpodobnosti výskytu reálné částice.

Dodatky 3

- Vidíme, že Schrödingerova rovnice opravdu popisuje vlnu a její odvození může vycházet z klasické vlnové rovnice.

Dodatky 4

- Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru (LHO) je jedním z nejjednodušších.
- Člen $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ nám defakto popisuje kinetickou energii LHO, protože operátor $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ můžeme chápat jako „kvantovou hybnost“.

Dodatky 4

- Takže můžeme psát $-\frac{\hbar^2}{2m}p^2$, což kdybychom upravili jako rovnici v klasické mechanice, dostáváme výraz $-\frac{\hbar^2}{2}mv^2$.
- Až na rozdílnou konstantu a znaménko dostáváme výraz pro kinetickou energii.

Dodatky 4

- Druhý člen Hamiltoniánu $\frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ můžeme chápat jako potenciální energii LHO.
- Pokud bychom pravili stacionární Schrödingerovu rovnici pro LHO, což podrobně nebudeme provádět, dostáváme, že konstanta E musí být rovna $E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Dodatky 4

- Z tohoto výsledku $E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ vidíme, že zde vystupuje n pro které platí, že smí nabývat pouze přirozené hodnoty (1,2,3,4,5...), tudíž energie LHO je kvantována a nemůže nabývat libovolných hodnot.
- Příklad Hamiltonova operátoru pro atom vodíku. http://artemis.osu.cz/mmfyz/am/am_6_3.htm

Dodatky 5

- Diracovi při hledání relativistické pohybové rovnice vplynuly tyto předpoklady:
 1. Měla by být parciální diferenciální rovnicí 1. řádu v čase.
 2. Vzhledem k prostorovým proměnným předpokládáme též první derivace.
 3. Čas a prostor jsou homogenní a proto by mělo jít o rovnici s konstantními koeficienty.
 4. Kvůli principu superpozice by měla být rovnice lineární.
 5. Rovnice neuvažuje zdroje částic, proto by měla být homogenní (pravá strana je nulová).

Dodatky 5

- Řešení Diracovi rovnice pro elektron nám dává konstantní matice α_i a β

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & & \\ & & \sigma_i & \\ \sigma_i & & 0 & 0 \\ & & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

kde σ_i jsou Pauliho matice 2x2

Děkuji za pozornost

Konec

5. přednášky

**Prezentace vznikla v rámci projektu
fondu rozvoje MU 1515/2014**