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

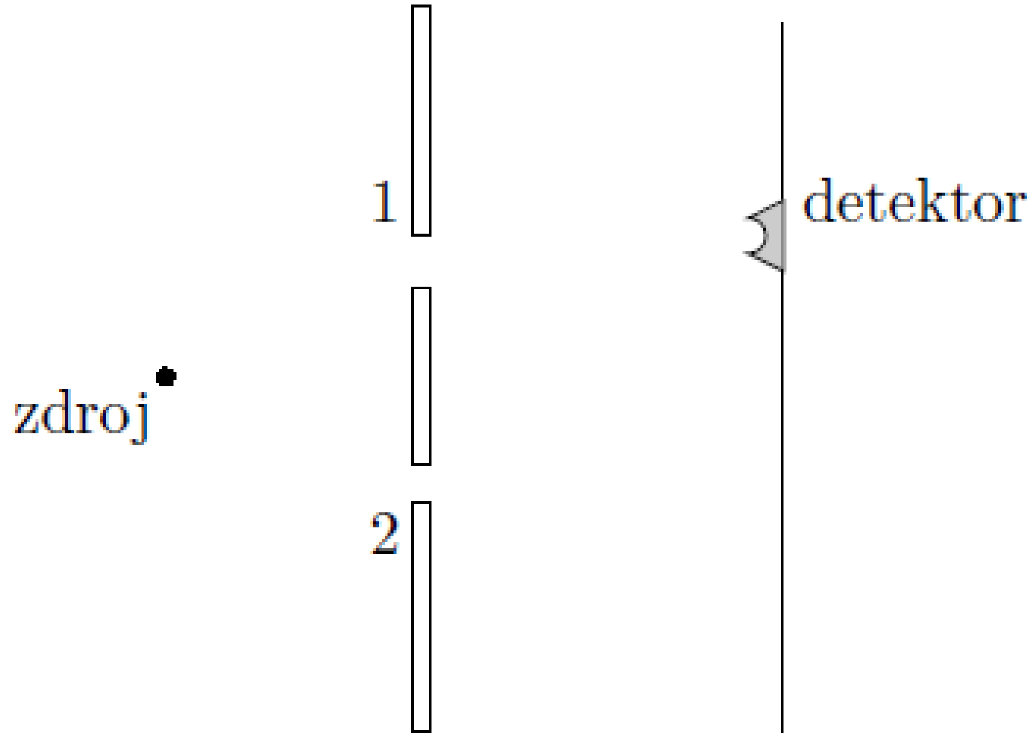
2. Pravděpodobnost jevu J je kvadrátem amplitudy pravděpodobnosti A

$$J = |A|^2$$

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

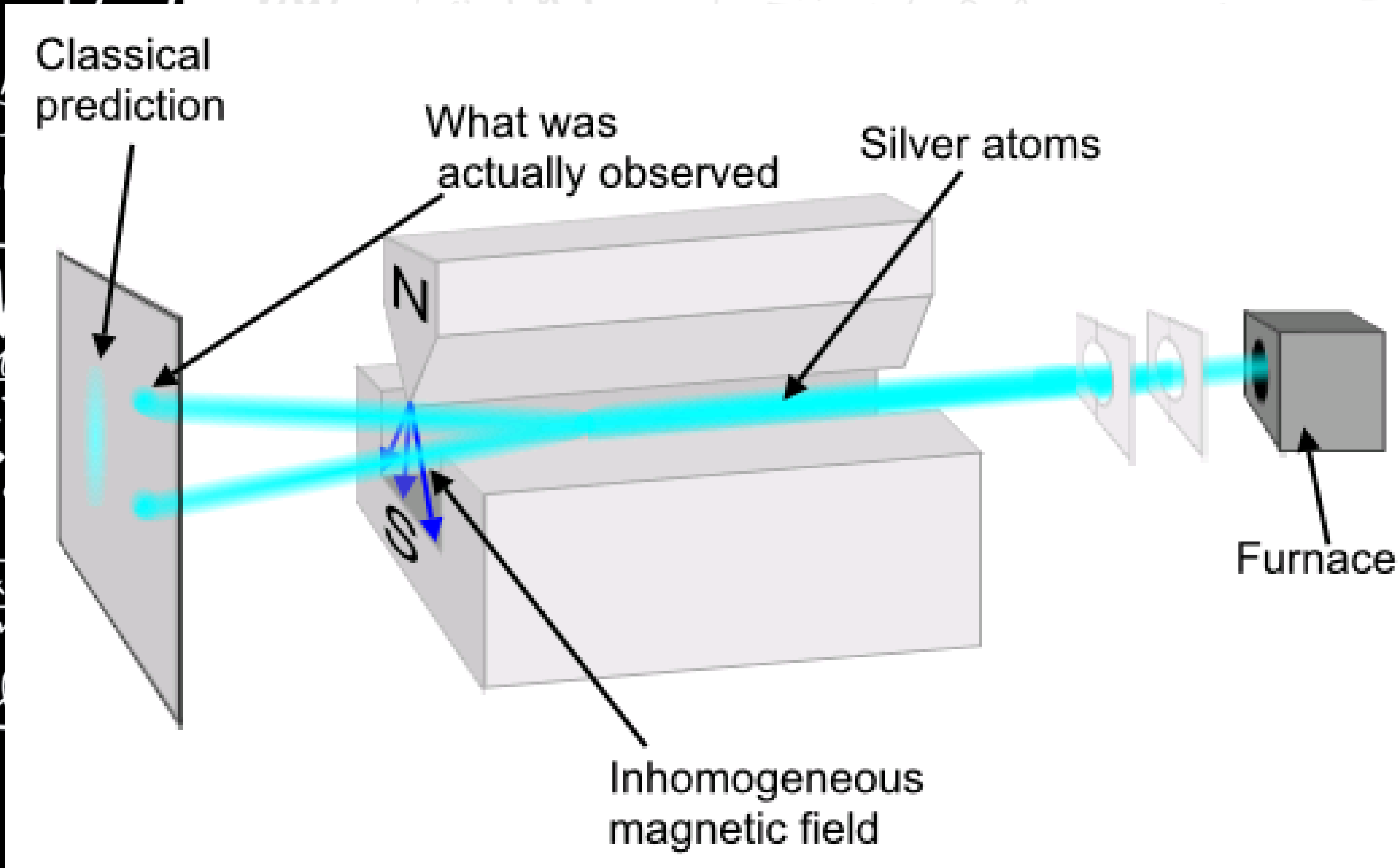


$$P(Z \to D) = |A(Z \to 1)A(1 \to D) + A(Z \to 2)A(2 \to D)|^2$$

Sternův-Gerlachův E

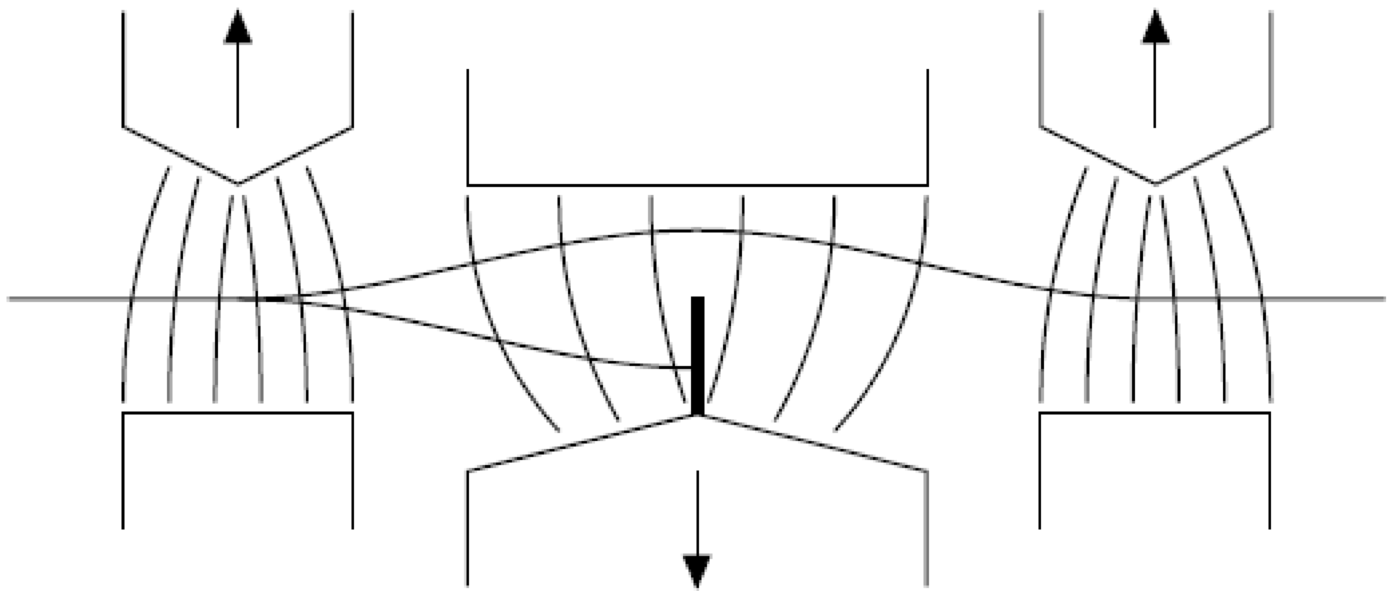
- Experimenty (1922) se zabývají měřením spinu elektronu (původně Ag).
- Využívá elektromagnetických vlastností částic a nehomogenního magnetického pole.
- Krásně demonstruje fungování kvantové fyziky.

Sternův-Gerlachův E



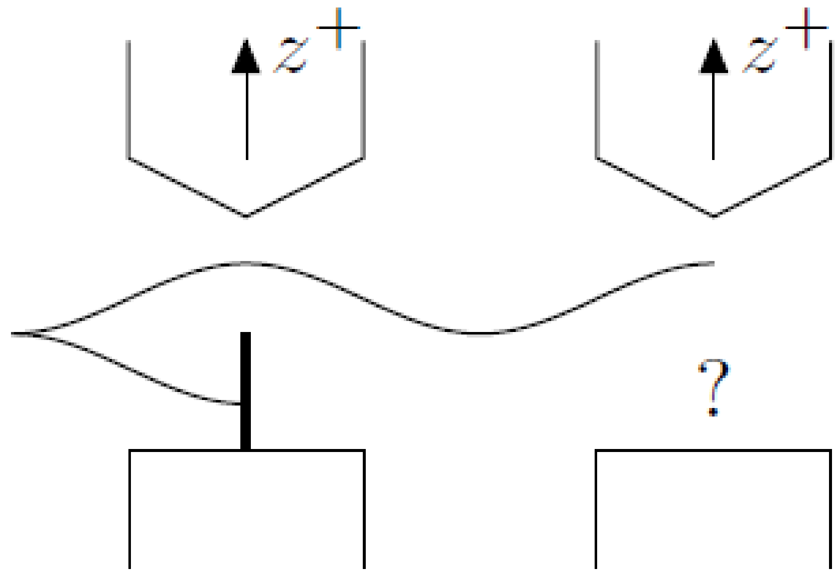
[Podrobněji]

Vylepšený S-G exp



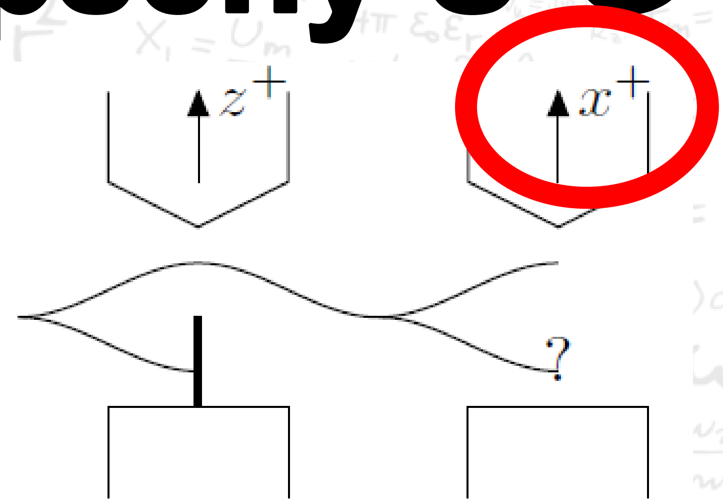
- Tři páry magnetů a stínítko/detektor, zachytávající částice s danou projekcí spinu.

Vylepšený S-G exp



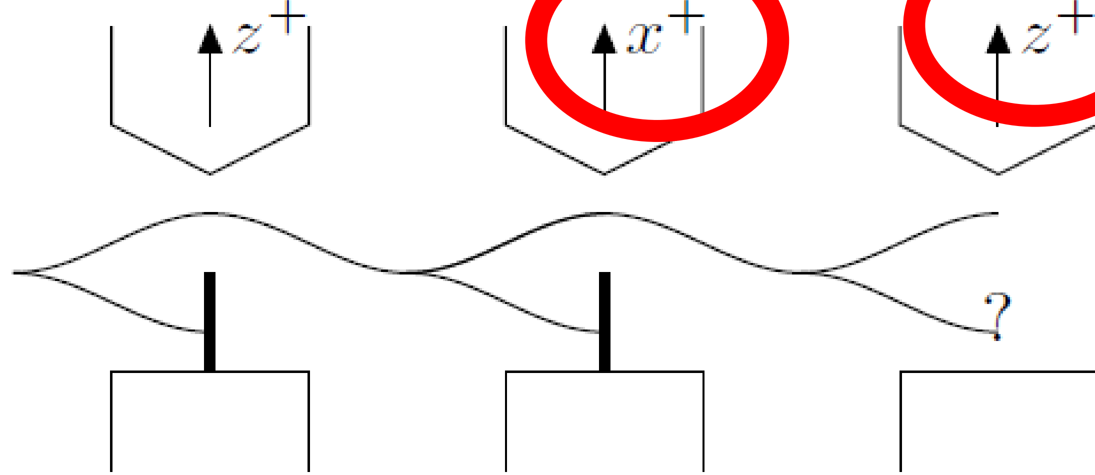
- S jakou pravděpodobností detekujeme částice s projekcí spinu -1/2 do osy z?
- Pravděpodobnost je 0, protože jsem je všechny vyfiltrovali v první části.

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 ¼.

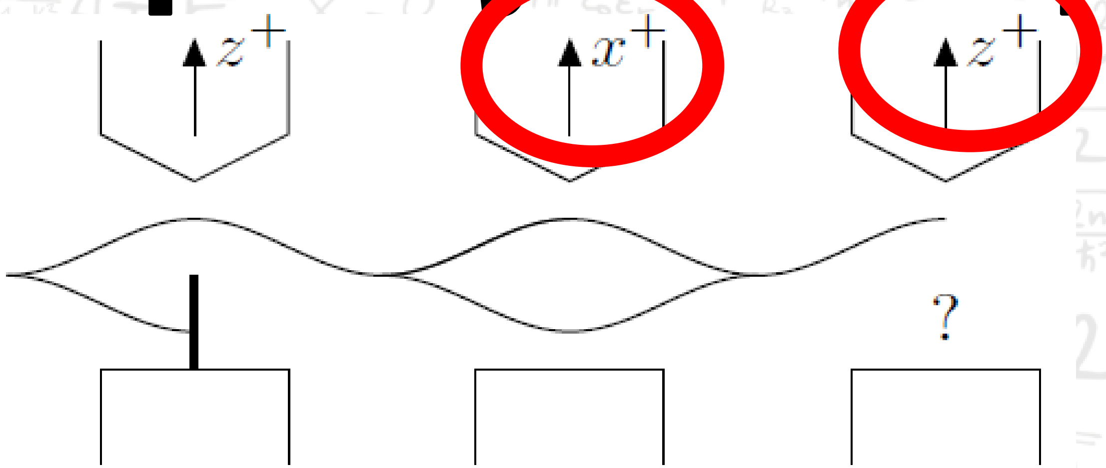
Vylepšený S-G exp

Detekujeme ¼ 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 ½ a když je vynásobíme, dostáváme ¼. 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

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, neznamená 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

- Bohrův 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.**

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

Schrödinger

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

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

Podrobněji

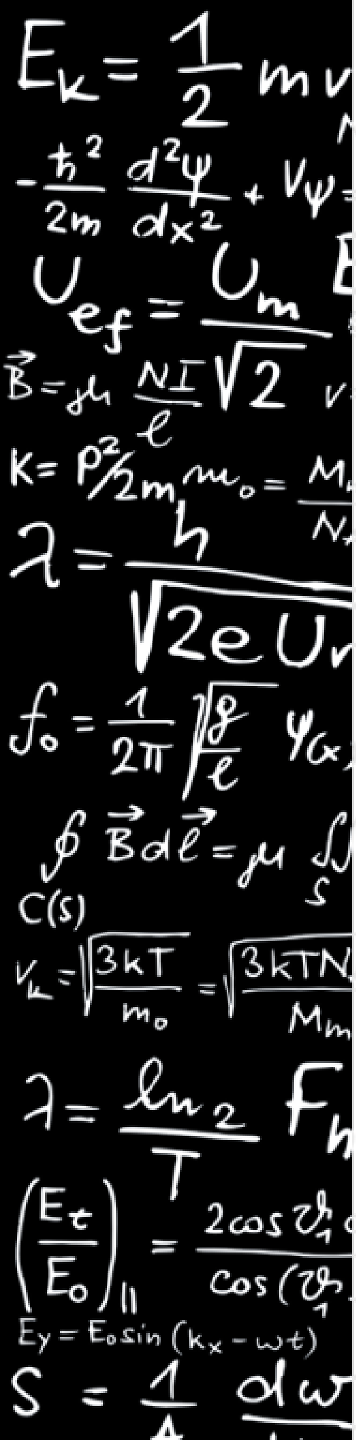
Schrödinger

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

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

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

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



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

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 $\vec{F} = \nabla(\vec{\mu}.\vec{B})$.
- Pro změnu práce (neboli energie) platí diferenciální vztah $dW = F\,ds = dE$.

zpět

Dodatky 1

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

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

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

zpět

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:**

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

zpět

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.

Konec 1. dodatku

zpět

Dodatky 2

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

zpět

Dodatky 2

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

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

- Výstupní stav popisuje bra-vektor:

$$<\Psi| = (a^* \;\; b^*)$$

- Skalární součin se značí:

$$<\Psi|\Psi> = (a^*a + b^*b)$$

zpět

Dodatky 2

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

$$P(\Psi, \varphi) = |< \Psi|\varphi >|^2$$

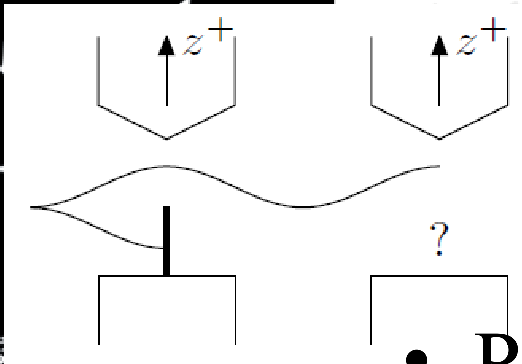
- Nejjednodušší popis stavu spinu elektronu můžeme volit pro stav +1/2

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

a pro stav -1/2

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

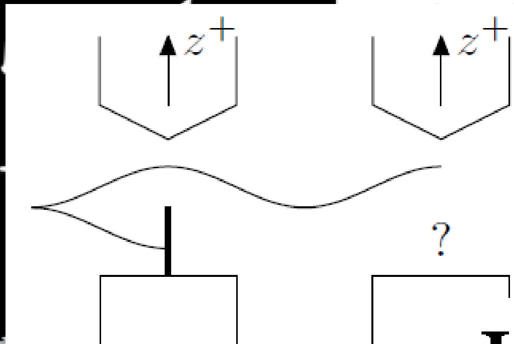
zpět



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.

zpět



Dodatky 2

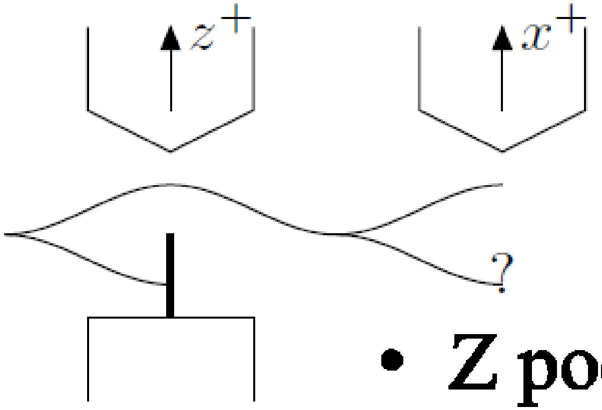
- Jaká je pravděpodobnost, že spin elektronu přejde ze stavu +z do –z?

$$P(+z,-z) = |< +z| - z >|^2$$
$$= \left|\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right|^2 = |1.0 + 0.1|^2 = 0$$

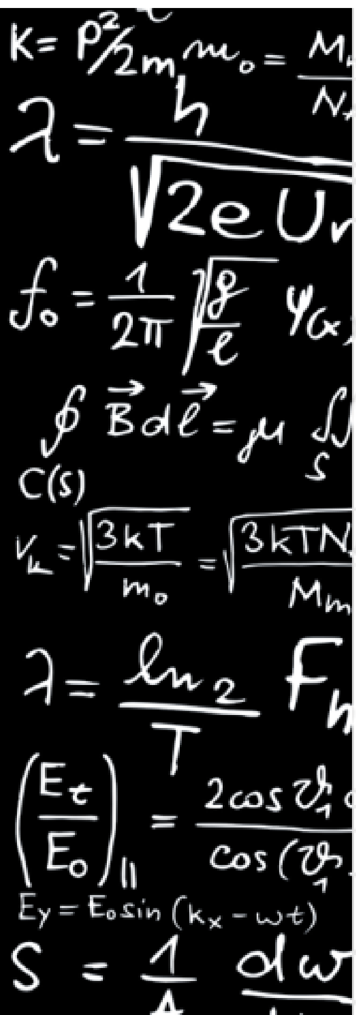
- Jaká je pravděpodobnost, že spin elektronu přejde ze stavu +z do +z?

$$P(+z,+z) = |< +z| + z >|^2$$
$$= \left|\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2 = |1.1 + 0.0|^2 = 1$$

zpět



Dodatky 2



- Z podmínek, které zde není potřeba vypisovat můžeme stavy ±x popsat:

$$|+x>=\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}\ ;\ \ |-x>=\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{-1}$$

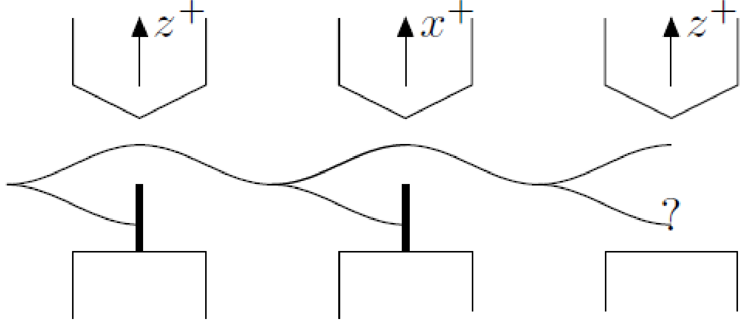
- Pravděpodobnost detekce elektronu ve stavu –x po předchozí filtraci na +z je:

$$P(+z,-x)=|<+z|-x>|^2$$

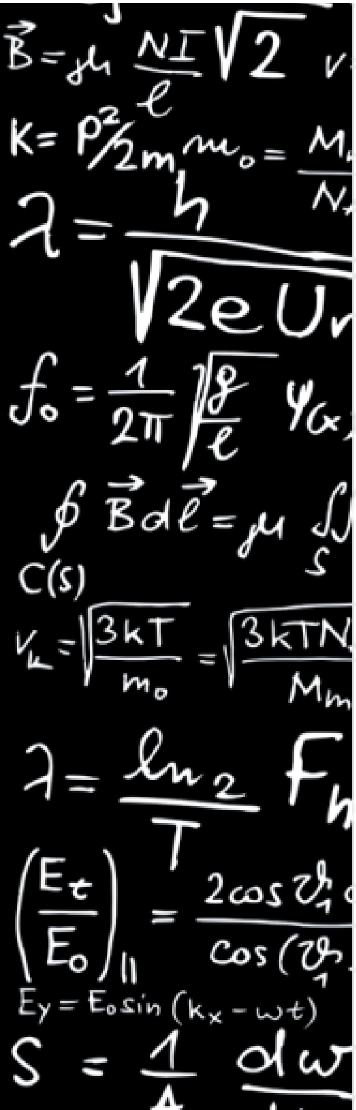
$$=\left|(1\ \ 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{-1}\right|^2$$

$$=\frac{1}{2}|1.1+0.(-1)|^2=\frac{1}{2}$$

zpět



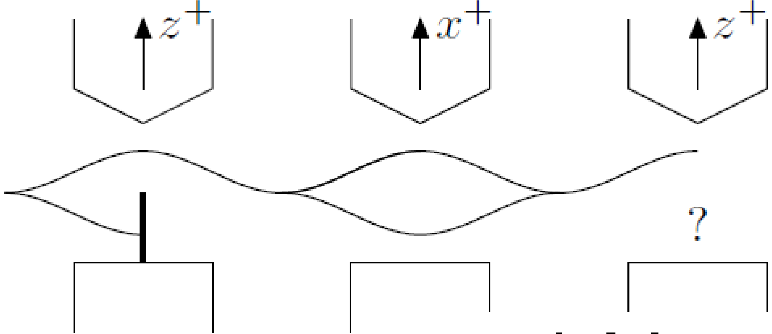
Dodatky 2



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

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

zpět



Dodatky 2

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

$$P(+z, \pm x, \pm x, -z) = |< +z|+x >< +x|-z >+ < +z|-x >< -x|-z >|^2 = \left|(1\ \ 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + (1\ \ 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ -1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right|^2 = 0$$

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.

zpět

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, \mathrm{d}V$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, \mathrm{d}V = 1 \,, \qquad \textit{Normování vlnové funkce} \tag{7.1}$$

jelikož

$$\int_{-\infty}^{\infty} P \, \mathrm{d}V = 1$$

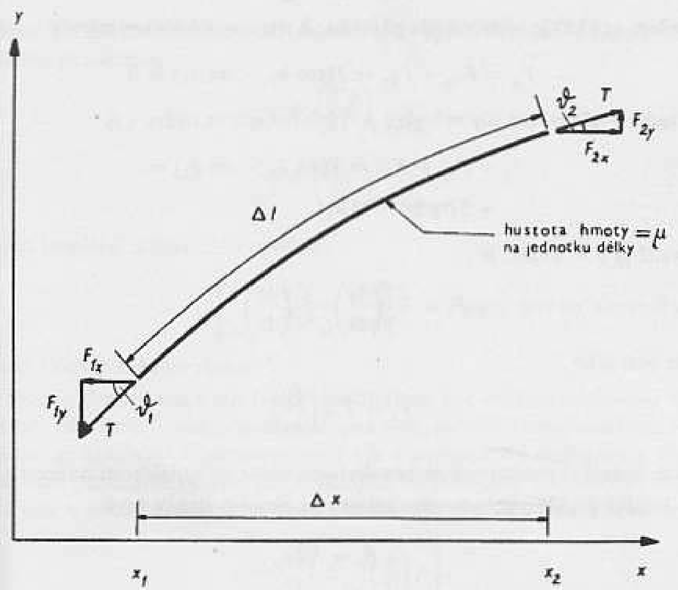
je matematickým vyjádřením toho, že částice někde v prostoru v každém okamžiku existuje. O vlnové funkci splňující vztah (7.1) říkáme, že je *normovaná*. Každá přípustná vlnová funkce se dá normovat vynásobením vhodnou konstantou; v kap. 8 uvidíme přesně, jakým způsobem to lze provést.

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 diferenciální rovnice popisující šíření vln strunou budeme aplikovat druhý pohybový zákon, $\boldsymbol{F} = m\boldsymbol{a}$, 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 zvětšená.

Omezíme naši diskusi na malé výchylky struny, jež nezpůsobují náhlé změny jeho 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

$$\cos\vartheta_1 \approx \cos\vartheta_2 \approx 1 \,, \tag{7.2}$$

$$\sin\vartheta_1 \approx \operatorname{tg}\vartheta_1 \,, \tag{7.3}$$

$$\sin\vartheta_2 \approx \operatorname{tg}\vartheta_2 \,. \tag{7.4}$$

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

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

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

zpět

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

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

Poněvadž $\operatorname{tg}\vartheta = \mathrm{d}y/\mathrm{d}x$, je

$$F_y = T\left[\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)_{x_2} - \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)_{x_1}\right],$$

což lze psát jako

$$F_y = T\Delta\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right).$$

Veličina $\Delta(\mathrm{d}y/\mathrm{d}x)$ představuje změnu derivace $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x$ na vzdálenosti Δx mezi x_1 a x_2.

Použití druhého pohybového zákona na element struny dává

$$F_y = \Delta m a_y\,,$$

$$T\Delta\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right) = \mu\,\Delta x\,\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}\,,$$

(7.5) $$\frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\mu}{T}\,\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}\,.$$

Veličina

$$\frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)$$

je rychlost změny derivace $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x$ s x. Při $\Delta x \to 0$ je

$$\frac{\Delta}{\Delta x}\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right) \to \frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2}\,,$$

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

(7.6) $$\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mu}{T}\,\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}\,.$$

Tento vztah však není zcela správný, neboť y je funkcí jak t, tak x a $\mathrm{d}^2y/\mathrm{d}x^2$ se tudíž mění s časem t a $\mathrm{d}^2y/\mathrm{d}t^2$ 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

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

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

Výsledná parciální diferenciální rovnice

(7.7) $$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\mu}{T}\,\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$ *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) $$y = F\left[t \pm \sqrt{\left(\frac{\mu}{T}\right)}\,x\right],$$

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

tedy vlnová rovnice napnuté struny bude

(7.10) $$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\,\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}\,.$$ *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, kmitočet 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 zajímat 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

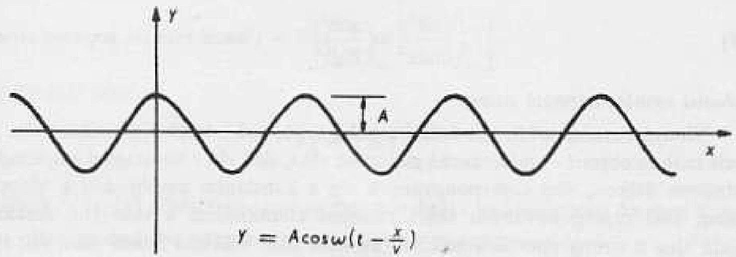
zpět

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

$$y = A \exp\left[-\mathrm{i}\omega(t - x/v)\right] . \tag{7.11}$$

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

$$\exp(-\mathrm{i}\vartheta) = \cos\vartheta - \mathrm{i}\sin\vartheta , \tag{7.12}$$



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

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

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

$$\Psi = A\exp\left[-\mathrm{i}\omega(t - x/v)\right] . \tag{7.14}$$

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

$$\Psi = A\exp\left[-2\pi\mathrm{i}(\nu t - x/\lambda)\right] ; \tag{7.15}$$

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

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

a

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

máme

$$\Psi = A\exp\left[-(\mathrm{i}/\hbar)(Et - px)\right] . \tag{7.16}$$

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

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

a jednou podle t

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}\Psi . \tag{7.18}$$

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,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V . \tag{7.19}$$

Vynásobením obou stran tohoto vztahu vlnovou funkcí Ψ máme

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

Ze (7.17) a (7.18) vidíme, že je

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{7.21}$$

zpět

a

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

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi. \tag{7.23}$$

Jednorozměrná časová Schrödingerova rovnice

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

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

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

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \tag{7.25}$$

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

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{7.26}$$

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - V\Psi \tag{7.27}$$

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 nejsnáze 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.

Vraťme se ke způsobu, jímž jsme získali Schrödingerovu rovnici vycházejíce z vlnové funkce pro volnou částici. Rozšíření Schrödingerovy rovnice z tohoto speciálního případu částice bez jakýchkoli omezení (potenciální energie $V =$ 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 jedině 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 se $|\Psi|^2$ *nezachovává*, pak

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

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

zpět

Dodatky 3

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

Konec 3. dodatku

zpět

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“.

zpět

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.

zpět

Dodatky 4

- Druhý člen Hamiltoniánu $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 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 $E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

zpět

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

zpět

Dodatky 5

- Diracovi při hledání relativistické pohybové rovnice vyplynuly 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).

zpět

Dodatky 5

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

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

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} & \sigma_i \\ \sigma_i & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \end{pmatrix}$$

kde σ_i jsou Pauliho matice 2x2

Konec 4. dodatku

zpět

Děkuji za pozornost

Konec
5. přednášky

Prezentace vznikla v rámci projektu fondu rozvoje MU 1515/2014