

OSTRAVSKÁ UNIVERZITA

Přírodovědecká fakulta



Kvantová fyzika

Daniel Hrivňák

OSTRAVA 2004

Kvantová fyzika

Studijní opora pro kombinovanou formu studia v rámci celoživotního vzdělávání.

Autor: Mgr. Daniel Hrivňák, Ostravská univerzita v Ostravě

Recenzoval: Mgr. František Karlický, Ostravská univerzita v Ostravě

Vydání: první

Tisk: Ediční středisko Ostravské univerzity, Ostrava 2004

© Ostravská univerzita, 2004.

OBSAH

Obsah	3
Úvod.....	5
1. Experimentální východiska kvantové teorie	7
1.1. Historický exkurz.....	7
1.2. Záření dokonale černého tělesa.....	8
1.3. Fotoelektrický jev	9
2. Stará kvantová teorie.....	11
2.1. Planckova kvantová hypotéza.....	11
2.2. Einsteinova fotonová hypotéza	13
2.3. Einsteinova teorie fotoelektrického jevu.....	14
3. Vlnové vlastnosti částic	17
3.1. De Broglieho vlnová hypotéza.....	17
3.2. Davissonův - Germerův pokus.....	19
4. Kvantová mechanika.....	23
4.1. Vlnová funkce	24
4.1.1. Monochromatické de Broglieho vlny	26
4.1.2. Princip superpozice	28
4.1.3. X a P- reprezentace vlnové funkce	28
4.1.4. První Bornův postulát	29
4.1.5. Druhý Bornův postulát.....	31
4.1.6. Střední hodnoty a fluktuace polohy a hybnosti.....	31
4.1.7. Heisenbergovy relace neurčitosti pro polohu a hybnost.....	33
4.1.8. Obecná reprezentace stavu v kvantové teorii.....	34
4.1.9. Bra-ketová symbolika	36
4.2. Stacionární Schrödingerova rovnice	38
4.2.1. Energetické spektrum.....	40
4.3. Nestacionární Schrödingerova rovnice	43
4.3.1. Rovnice kontinuity pro hustotu pravděpodobnosti	45
4.3.2. Obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice	47
4.3.3. Kvantový determinismus	49
4.4. Korespondence mezi klasickou a kvantovou mechanikou	51
4.5. Jednoduché kvantově-mechanické systémy.....	54
4.5.1. Volná částice	55

4.5.2.	Jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma nekonečné hloubky	56
4.5.3.	Pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky	58
4.5.4.	Lineární harmonický oscilátor	61
4.5.5.	Tuhý rotátor	63
4.5.6.	Jednorozměrná potenciálová bariéra	65
4.5.7.	Jednorozměrná pravoúhlá potenciálová bariéra	67
4.6.	Moderní formulace kvantové mechaniky	72
4.6.1.	Dirakovy kvantovací podmínky	74
4.6.2.	Poloha a hybnost	75
4.6.3.	Energie	77
4.6.4.	Moment hybnosti	79
4.6.5.	Střední hodnoty a střední kvadratické fluktuace	81
4.6.6.	Relace neurčitosti	81
4.7.	Systémy více částic	84
4.7.1.	Spin	84
4.7.2.	Nerozlišitelné částice	86
4.7.3.	Slaterovy determinanty	89
4.7.4.	Pauliho vylučovací princip	89
5.	Kvantová teorie pole	91
6.	Matematické dodatky	93
6.1.	Metoda separace proměnných	93
6.2.	Fourierova transformace	94
6.3.	Pravděpodobnost	95
6.4.	Hilbertův prostor	97
6.5.	Operátory na Hilbertově prostoru	99
6.6.	Vlastní hodnoty a vlastní vektory samosdružených operátorů	101
6.7.	Algebraické operace s operátory na Hilbertových prostorech	102
6.8.	Permutace	104
	Vysvětlivky	107
	Literatura	113

ÚVOD

Studijní opora je určena studentům učitelství fyziky v kombinované a distanční formě studia. Vychází z materiálů nezištně poskytnutých mým kolegou Dr. René Kalusem, který v nich zúročil dlouholeté zkušenosti z výuky předmětu „Kvantová fyzika“ na katedře fyziky Ostravské univerzity. Tyto materiály jsem upravil do formy vhodné pro kombinované a distanční studium. Veškeré chyby a nedostatky, které zjistíte v tomto učebním textu, padají výhradně na mne.



Autor

Po absolvování kurzu budete znát:

- všechny důležité pojmy z oblasti kvantové fyziky;
- metody řešení základních problémů z oblasti kvantové fyziky.

Budete schopni:

- definovat základní pojmy z oblasti kvantové fyziky;
- popsat stručně historii kvantové fyziky a uvést stěžejní momenty jejího vývoje;
- vysvětlit, na jakých představách a principech stojí moderní kvantová teorie;
- matematicky analyzovat vybrané kvantově-mechanické problémy.



Čas potřebný k absolvování předmětu:

40 hodin

1. EXPERIMENTÁLNÍ VÝCHODISKA KVANTOVÉ TEORIE

Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- vyjmenovat nejdůležitější experimentální výsledky, se kterými si klasická fyzika na počátku dvacátého století nevěděla rady;
- stručně popsat historické milníky vzniku kvantové fyziky;
- objasnit neuspokojivou situaci v oblasti výzkumu záření absolutně černého zářiče na počátku dvacátého století;
- definovat vnější fotoelektrický jev a objasnit, v čem klasická fyzika selhala při snaze o jeho vysvětlení.



Pojmy k zapamatování:

záření dokonale černého tělesa (ideálního zářiče), vnější a vnitřní fotoelektrický jev, měrné teplo, absorpční a emisní spektrum, radioaktivita, zákon Rayleighův – Jeansův, zákon Wienův, zákon Planckův, fotonová hypotéza.



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

1 hodina

1.1. HISTORICKÝ EXKURZ

Kvantová teorie se zrodila na počátku 20. století z pokusů řešit rozpory mezi výsledky některých experimentů na jedné straně a jejich klasickým popisem na straně druhé. Podobně jako u ostatních fyzikálních teorií stály i u zrodu nově vznikající kvantové teorie experimenty. Hovoříme proto o experimentálních východiscích kvantové teorie. Její základy byly položeny v prvních dvou desetiletích 20. století v teoretických pracích, které krok za krokem odstraňovaly výše zmíněné rozpory a paradoxy. Vůdčí ideou této první fáze rozvoje kvantové teorie, která se obvykle nazývá *stará kvantová teorie*, bylo kvantování fyzikálních veličin, zejména energie, *ad hoc* včleněné do jinak bezezbytku klasického popisu světa.

Stará kvantová teorie

Mocným impulzem pro další rozvoj kvantové teorie byla *de Broglieho hypotéza* o dualitě částicových a vlnových vlastností klasických částic. Z podloží této hypotézy totiž ve druhé polovině dvacátých let 20. století vyrostla moderní kvantová fyzika soustav s konečně mnoha stupni volnosti (soustavy hmotných bodů), *kvantová mechanika*. Její zobecnění na soustavy s nekonečně mnoha stupni volnosti (fyzikální pole), *kvantová teorie pole*, následovalo v průběhu let třicátých a čtyřicátých.

de Broglieho hypotéza

Jak kvantová mechanika, tak i kvantová teorie pole jsou dodnes aktivně rozvíjeny předními pracovišti na celém světě. Jsou totiž mimořádně úspěšné při popisu široké škály jevů, zejména těch, které probíhají v mikrosvětě. Jsou proto základním teoretickým nástrojem atomové a jaderné fyziky i fyziky elementárních částic.

Chronologicky stojí na samotném počátku rozvoje kvantové teorie několik původně experimentálně zkoumaných jevů, které byly v zjevném rozporu s teorií klasickou. Mezi nejvýznamnější patří především

Fyzikální jevy
nevysvětlitelné
klasickou
fyzikou

- [záření dokonale černého tělesa](#),
- [fotoelektrický jev](#),
- chování měrných tepel pevných látek při nízkých teplotách,
- struktura emisních a absorpčních spekter atomů a molekul,
- přirozená radioaktivita.

Některé z těchto rozporů a paradoxů se podařilo odstranit již v počátečních fázích rozvoje kvantové teorie, které obvykle označujeme jako [starou kvantovou teorii](#). Jiné si musely na objasnění počkat déle - až do doby, kdy byla zformulována moderní [kvantová mechanika](#) a [kvantová teorie pole](#).

1.2. ZÁŘENÍ DOKONALE ČERNÉHO TĚLESA



Záření dokonale černého tělesa

Dokonale černé těleso (absolutně černé těleso, ideální zářič) je tepelný zářič dokonale absorbující veškeré elektromagnetické záření, které dopadne na jeho povrch.

Ve skutečnosti se jedná o idealizovaný model, v přírodě se dokonale černá tělesa nevyskytují. Mnohé tepelné zářiče se však svými vlastnostmi tomuto modelu velmi blíží (např. Slunce a ostatní hvězdy, nebo i vlákno žárovky). V pozemských podmínkách bývá dokonale černé těleso reprezentováno dutinovým zářičem.

Spektrální
hustota energie

Tepelné záření v dutině, které je v termodynamické rovnováze s jejími stěnami o teplotě T , je obvykle popisováno tzv. *spektrální hustotou energie* $\mathcal{E}(\omega, T)$. Teoretická formulace závislosti spektrální hustoty energie na frekvenci (vlnové délce) byla velkou výzvou pro fyziky konce 19. století. Popisuje ji několik empirických zákonů.

Prvním z nich je Rayleighův-Jeansův zákon. Lze jej odvodit v rámci klasické teorie.

Elektromagnetické pole (záření) uzavřené v dutině konečného objemu V je možno chápat jako soustavu nezávislých lineárních harmonických oscilátorů. Například pro dutinu ve tvaru kvádra lze Maxwellovy rovnice převést pomocí Fourierových řad na nekonečnou soustavu nezávislých obyčejných diferenciálních rovnic, které svým tvarem odpovídají pohybovým rovnicím pro netlumené lineární harmonické oscilátory. Tyto oscilátory mají obecně různé charakteristické úhlové frekvence ([záření dokonale černého tělesa](#) není monochromatické) a jednoduchým výpočtem je možno určit, kolika z nich přísluší úhlové frekvence ze zadaného intervalu $(\omega, \omega + \Delta\omega)$:

$$\Delta N(\omega, \Delta\omega) \approx \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} \Delta\omega.$$

Z klasické statistické fyziky je známo, že střední energie $\epsilon(T)$ lineárního harmonického oscilátoru, který je v kontaktu s termostatem o teplotě T , je dána vztahem (viz též ekvipartiční teorém)

$$e(T) \equiv \frac{\int_0^{+\infty} E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE}{\int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE} = k_B T,$$

kde k_B je Boltzmannova konstanta. Pro energii oscilátorů reprezentujících elektromagnetické pole v dutině, jejichž frekvence jsou z intervalu $(\omega, \omega + \Delta\omega)$, můžeme tedy psát

$$\Delta\mathcal{E}(\omega, \Delta\omega, T) = \Delta N(\omega, \Delta\omega) e(T) \approx \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} k_B T \Delta\omega$$

a pro spektrální hustotu energie

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{1}{V} \lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \frac{\Delta\mathcal{E}(\omega, \Delta\omega, T)}{\Delta\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$$



Poslední uvedený vztah nese na paměť anglických fyziků, kteří jej odvodili, název **Rayleighův-Jeansův zákon**.

Rayleighův-Jeansův zákon platí však pouze v oblasti nízkých frekvencí a osudově selhává pro frekvence vysoké.

Další empirický zákon, *Wienův*, popisuje vyzařování dokonale černého tělesa v oblasti vysokých frekvencí, selhává ale naopak pro frekvence nízké.

Teprve *zákon Planckův* přinesl úplný popis záření dokonale černého tělesa. V rámci klasické fyziky jej však není možno odvodit. Pro jeho teoretické zdůvodnění musel Max Planck postulovat svou proslulou kvantovou hypotézu. Problém záření dokonale černého tělesa tak stál u samotného zrodu kvantové fyziky.

Zákony popisující záření absolutně černého tělesa.

1.3. FOTOELEKTRICKÝ JEV

Emise elektronů z látky, na kterou dopadá elektromagnetické záření, se nazývá fotoelektrickým jevem.



Při *vnějším fotoelektrickém jevu* jsou elektrony uvolňovány z vodivostního pásu kovů a samotný krystal kovu opouštějí. V polovodičích pak může docházet pod vlivem elektromagnetického záření k uvolňování elektronů z elektronových obalů atomů. Tyto elektrony zpravidla samotný polovodič neopouštějí, pouze zvyšují jeho vodivost. Pak hovoříme o tzv. *vnitřním fotoelektrickém jevu*. Fotoelektrický jev sehrál fundamentální roli při formulování základů kvantové teorie světla.

Vnější a vnitřní fotoelektrický jev.

Vnější fotoelektrický jev byl objeven v poslední čtvrtině 19. století nezávisle na sobě vícero fyziky (Hertz 1887, Stoletov 1888) a následně velmi podrobně experimentálně prostudován Lenardem. Samotný fakt fotoemise elektronů z kovu nebyl pro klasickou fyziku překvapující, neboť již od dob Maxwellových bylo známo, že elektromagnetické záření nese energii. V mezích klasické fyziky byly však nepochopitelné některé experimentální závěry:

K fotoemisi elektronů dochází bezprostředně po dopadu elektromagnetického záření, a to bez ohledu na jeho intenzitu. Dokonce i pro velmi slabé intenzity dopadajícího záření, kdy klasická teorie předpovídá prodlevu několika měsíců, je zpoždění kratší než 10^{-8} - 10^{-9} s.

Pro každý kov existuje maximální vlnová délka dopadajícího záření, λ_{\max} , pro kterou ještě může dojít k fotoemisi. Pro větší vlnové délky k emisi elektronů nedochází ani při velmi vysokých hodnotách intenzity dopadajícího záření.

Maximální hodnota kinetické energie $E_{kin}^{(\max)}$ elektronů vylétávajících z krystalu kovu ozařovaného elektromagnetickým zářením nezávisí na jeho intenzitě, ale pouze na jeho vlnové délce $\lambda < \lambda_{\max}$. Experimentálně byl zjištěn vztah $E_{kin}^{(\max)} = C(1/\lambda - 1/\lambda_{\max})$, kde C je konstanta nezávislá na použitém kovu.

Klasická teorie předpovídá ale závěry zcela odlišné. Např. časová prodleva mezi počátkem ozařování povrchu kovu světlem a emisí elektronů z něj může být podle klasické fyziky velmi dlouhá - hodiny, dny, týdny či dokonce i měsíce, je-li dopadající světlo slabé. To, zda k fotoemisi dojde, záleží podle klasických představ pouze na intenzitě dopadajícího záření, nikoliv na jeho vlnové délce. A konečně i kinetická energie emitovaných elektronů by měla být ovlivněna pouze množstvím elektromagnetické energie absorbované v krystalu kovu. O její závislosti na vlnové délce dopadajícího záření nemůže být v rámci klasických představ vůbec řeč. Jednoduché vysvětlení fotoelektrického jevu podal v roce 1905 na základě své *fotonové hypotézy* A. Einstein.



Shrnutí kapitoly

Kvantová teorie vznikala postupně počátkem dvacátého století jako reakce na několik málo experimentálních výsledků, které tvrdošjně vzdorovaly všem pokusům o vysvětlení v rámci klasické fyziky. Podrobněji jsou popsány dva z těchto experimentů: záření absolutně černého zářiče a vnější fotoelektrický jev.

Pro záření černého tělesa lze v rámci klasické fyziky odvodit formuli zvanou Rayleighův-Jeansův zákon, která však totálně selhává v oblasti krátkých vlnových délek.

U vnějšího fotoelektrického jevu byla neřešitelnou záhadou rychlá odezva i při malých intenzitách záření a existence prahové frekvence, pod kterou k tomuto jevu vůbec nedochází.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Vyjmenujte základní experimentální východiska kvantové teorie.
- 2) Popište podrobně problémy, které měla klasická fyzika s objasněním záření absolutně černého tělesa (zářiče). Jaké empirické zákony v této oblasti byly známy?
- 3) Definujte vnější fotoelektrický jev. Čím se liší od vnitřního fotoelektrického jevu?
- 4) Co konkrétně se u vnějšího fotoelektrického jevu nedařilo vysvětlit klasicky?



Korespondenční úkol č. 1

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na otázku č. 2 nebo č. 4 kapitoly 1.

2. STARÁ KVANTOVÁ TEORIE

Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- objasnit pojem stará kvantová teorie;
- formulovat Planckovu kvantovou hypotézu a popsat okolnosti jejího vzniku;
- formulovat Einsteinovu fotonovou hypotézu a vysvětlit pomocí ní empirické poznatky o vnějším fotoelektrickém jevu.



Pojmy k zapamatování:

Planckova kvantová hypotéza, záření absolutně černého tělesa, Einsteinova fotonová hypotéza, fotoelektrický jev, Bohrov model atomu, De Brogliho vlnová hypotéza.



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

1 hodina

První práce věnované rozporům mezi výsledky některých experimentů a klasickou teorií (viz [Experimentální východiska kvantové teorie](#)) byly založeny na podivuhodné symbióze klasického obrazu světa a kvantování vybraných fyzikálních veličin - zpravidla energie, ale také momentu hybnosti a dalších. Mezi nejvýznamnější výsledky těchto prací zde zařazujeme

- [Planckovu kvantovou hypotézu](#) a [teorii záření dokonale černého tělesa](#),
- [Einsteinovu fotonovou hypotézu](#),
- [Einsteinovu teorii fotoelektrického jevu](#).

Dále zde patří např. Bohrov model atomu a Sommerfeldův model atomu. Souhrnně označujeme tuto epochu rozvoje kvantové teorie, která trvala prakticky až do konce dvacátých let 20. století a nějakou dobu dokonce koexistovala s moderní [kvantovou mechanikou](#), jako [starou kvantovou teorií](#). Přes zřejmé nedostatky a mnohá omezení byly výše uvedené teorie a hypotézy schopny kvalitativně i kvantitativně velmi uspokojivě vysvětlit širokou škálu jevů mikrosvěta, které se rámci klasické fyziky zcela vymykaly. [Einsteinova fotonová hypotéza](#) byla navíc bezprostřední inspirací pro francouzského fyzika L. de Broglieho při formulaci jeho hypotézy o [vlnových vlastnostech částic](#). Ta pak prostřednictvím prací E. Schrödingera nalezla svého naplnění v moderní [kvantové mechanice](#).

2.1. PLANCKOVA KVANTOVÁ HYPOTÉZA

Podle Maxe Plancka nemůže lineární harmonický oscilátor kmitající s frekvencí ν (resp. úhlovou frekvencí $\omega = 2\pi\nu$) nabývat všech klasicky přípustných, tj. nezáporných energií, ale pouze těch, které splňují tzv. *Planckovu kvantovou podmínku*

Planckova kvantová podmínka.

$$E_n = nh\nu = n\hbar\omega,$$

kde h je univerzální fyzikální konstanta, která dnes nese Planckovo jméno, *Planckova konstanta*, $\hbar = h/2\pi$ je tzv. „škrtnutá“ *Planckova konstanta* a n nezáporné celé číslo. Ve skutečnosti je však množina přípustných energií (*energetické spektrum*) lineárního harmonického oscilátoru poněkud odlišná od té, která vyplývá z Planckovy kvantové podmínky. Přesný tvar kvantovací podmínky pro lineární harmonický oscilátor, $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$, poskytuje až řešení *stacionární Schrödingerovy rovnice*.

Planckově konstantě byla jako jedné z fundamentálních fyzikálních konstant věnována experimentátory velmi velká pozornost. Její v současnosti uváděná hodnota činí



$$h = 6,626\,068\,76 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s},$$

$$\hbar = 1,054\,571\,596 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}.$$

Kvantové hypotézy formulované pro lineární harmonický oscilátor využil Planck k vytvoření *kvantové teorie záření dokonale černého tělesa*.

Planckova teorie záření dokonale černého tělesa (ideálního zářiče) vychází z teorie klasické, v jejímž rámci je aplikována kvantová hypotéza pro lineární harmonický oscilátor.

Podle této hypotézy (a statistické mechaniky) je nutno střední energii lineárního harmonického oscilátoru o charakteristické úhlové frekvenci ω počítat podle vztahu

$$e(T) = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)}{\sum_{n=0}^{+\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)},$$

kde k_B je *Boltzmannova konstanta* a $E_n = n\hbar\omega$. Dosazením za E_n se jmenovatel uvedené formule změní na prostou geometrickou řadu $\sum_{n=0}^{+\infty} q^n$, kde

$$q = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right).$$

Její součet nalezneme snadno pomocí známého vzorce

$$\sum_{n=0}^{+\infty} q^n = (1-q)^{-1}.$$

Obdobně získáme pro čitatele výše uvedené formule pro $e(T)$ po dosazení za E_n a po úpravách

$$\sum_{n=0}^{+\infty} E_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = \hbar\omega \sum_{n=0}^{+\infty} nq^n = \hbar\omega q \frac{d}{dq} \sum_{n=0}^{+\infty} q^n = \frac{\hbar\omega q}{(1-q)^2}.$$

A nakonec kombinací výrazů pro jmenovatele a čitatele, do nichž dosadíme zpět za pomocnou proměnnou $q = \exp(-\hbar\omega/k_B T)$, získáme konečný vzorec pro střední tepelnou energii lineárního harmonického oscilátoru

$$e(T) = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}.$$

Ten pak užijeme postupem stejným jako v případě *klasické teorie* k nalezení formule udávající závislost spektrální hustoty energie dutinového záření na zadané teplotě a úhlové frekvenci.

Tato formule tentokrát nabývá tvaru

$$\varepsilon(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1},$$

což je proslulý *Planckův zákon*.

Tento zákon dokonale souhlasí s *empirickým Planckovým zákonem*, a tudíž velmi přesně vystihuje dostupná experimentální data.

V limitě nízkých frekvencí, $\hbar \omega \ll k_B T$, je možno užít přibližného výrazu

$$\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{k_B T},$$

který po dosazení převede Planckův zákon na klasický zákon *Rayleighův-Jeansův*. Můžeme tedy formulovat následující závěr:

Klasický popis záření dokonale černého tělesa je vhodný, pokud střední tepelná energie lineárních harmonických oscilátorů, jejichž pomocí elektromagnetické pole popisujeme, je mnohem větší než odpovídající Planckovo kvantum energie.

2.2. EINSTEINOVA FOTONOVÁ HYPOTÉZA

Chápeme-li elektromagnetické pole jako soustavu nezávislých lineárních harmonických oscilátorů, můžeme podle *Planckovy kvantové hypotézy* předpokládat, že se jeho celková energie bude měnit skokem - pro danou vlnovou délku λ (resp. frekvenci ν) o kvantum $h\nu$, kde h je (neškrtnutá) *Planckova konstanta*.

Zatímco Planck pohlížel na elektromagnetické pole jako na zvláštní typ kontinua, jehož energie se mění skokem, německý fyzik A. Einstein šel v této představě ještě dále. Předpokládal, že toto kontinuum je ve skutečnosti samo tvořeno kvanty elektromagnetické energie, částicemi pohybujícími se rychlostí světla. Ty byly později nazvány *fotony*. Celková energie každé z těchto částic je podle Einsteina dána vztahem

$$E = h\nu.$$

Již dříve však bylo známo, že elektromagnetické záření nese nenulovou hybnost, která souvisí s jeho energií prostřednictvím jednoduchého vztahu $E = pc$. Sloučením této rovnice a Einsteina vztahu pro energii fotonu získáme proto pro jeho hybnost

$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

Skoková změna celkové energie elektromagnetického pole je pak ovšem podmíněna procesem vzniku (vyzářením) či zániku (absorpcí) jednoho fotonu.

Částicové představy o elektromagnetickém záření byly s velkým úspěchem využity samotným Einsteinem při vysvětlení v rámci klasické fyziky nepochopitelného chování elektronů v tzv. *fotoelektrickém jevu* (*Einsteinova*

Fotony.



Comptonův jev. [teorie fotoelektrického jevu](#)) a experimentálně prokázány A. H. Comptonem při rozptylu paprsků X na volných elektronech (*Comptonův jev*).

Zatímco fyzika 19. století nahlížela na světlo jako na vlnění, Einstein se svou fotonovou hypotézou částečně navrácí k částicovým představám Newtonovým. Ve skutečnosti však elektromagnetické záření (a tedy i světlo) není pouze vlněním, ani pouze proudem částic: je současně obojím. Vše totiž závisí na experimentálních podmínkách, v nichž se nachází. Elektromagnetické pole je fyzikální objekt, u nějž za jistých okolností převažují vlnové vlastnosti a jindy zase vlastnosti částicové. Hovoříme proto o *vlnově-korpuskulárním dualismu* světla. Konzistentní interpretaci Einsteinovy fotonové hypotézy poskytla až [kvantová elektrodynamika](#).

2.3. EINSTEINOVA TEORIE FOTOELEKTRICKÉHO JEVU

Při teoretickém zdůvodnění některých klasicky nepochopitelných závěrů, které byly učiněny na základě experimentálního studia fotoemise elektronů z kovu ([vnější fotoelektrický jev](#)), vycházel A. Einstein ze své [fotonové hypotézy](#).

Podle Einsteina je fotoemise každého elektronu důsledkem pohlcení (absorpce) jednoho kvanta elektromagnetického záření, fotonu. Během tohoto procesu foton zaniká a předává svou energii elektronu. Ta je pak částečně využita k úniku elektronu z kovu a zbytek přeměněn na jeho kinetickou energii.

Výstupní práce. Einstein pracoval s velmi jednoduchým modelem krystalu kovu, který si představoval jako krabici, v níž je elektron vázán konstantní vazebnou energií. K opuštění krystalu musíme proto elektronu dodat energii, která je alespoň rovna této energii vazebné. Ta se obvykle nazývá *výstupní práce* a je pro daný kov charakteristickou konstantou.

Ze zákona zachování energie vyplývá

$$h\nu = A + \Delta E + E_{kin},$$

kde $h\nu$ je energie dopadajícího fotonu, A výstupní práce, E_{kin} kinetická energie emitovaného elektronu a ΔE reprezentuje energetické ztráty elektronu doprovázející jeho emisi z krystalu kovu (např. v důsledku nepružných srážek s krystalickou mřížkou). Maximální kinetické energie dosáhne elektron, pokud jsou ztráty ΔE nulové. Pak můžeme psát

$$h\nu = A + E_{kin}^{(max)}$$

a po přechodu k vlnovým délkám

$$E_{kin}^{(max)} = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{max}} \right),$$

kde h je Planckova konstanta, c rychlost světla ve vakuu a kde jsme zavedli

$$A = \frac{hc}{\lambda_{max}}.$$

Výraz získaný Einsteinem pro maximální kinetickou energii elektronů vylétávajících z kovu po ozáření elektromagnetickým zářením je v dokonalé shodě, na rozdíl od závěrů klasických, s *experimentálním zákonem*. Také další experimentální fakta jsou v rámci Einsteinovy teorie vysvětlena zcela přirozeně:

- Časová prodleva mezi dopadem záření na krystal kovu a fotoemisí elektronů je dána typickým časem absorpce fotonu elektronem. Ten je, jak bylo experimentálně zjištěno, řádově roven 10^{-9} s.
- Existence maximální vlnové délky záření, pro kterou ještě může dojít k fotoemisi elektronu, vyplývá z nezápornosti kinetické energie. Musí totiž platit

$$0 \leq E_{kin}^{(max)} = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{max}} \right),$$

a tedy i

$$\lambda \leq \lambda_{max}.$$



Velký význam fotoelektrického jevu pro další rozvoj fyziky na přelomu 19. a 20. století spočíval především v tom, že byl prvním pozorovaným dokladem částicového chování elektromagnetického záření.

Shrnutí kapitoly

Starou kvantovou teorií rozumíme poněkud nesourodý soubor několika hypotéz o kvantování vybraných fyzikálních veličin, jejichž zavedení bylo vedeno snahou vysvětlit experimentální výsledky, se kterými si jinak velmi úspěšná klasická fyzika nevěděla rady.

Mezi uvedené hypotézy patří např. Planckova hypotéza o kvantování energie elektromagnetického pole, Einteinova fotonová hypotéza, Bohrův model atomu (kvantování momentu hybnosti atomu) a v neposlední řadě také De Brogliho vlnová hypotéza.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Vysvětlete pojem stará kvantová teorie. Kdy vznikla a s jakými převratnými ideami je spojena?
- 2) Formulujte přesně Planckovu hypotézu o kvantování elektromagnetické energie.
- 3) Formulujte přesně Einsteinovu fotonovou hypotézu a vysvětlete rozdíl mezi touto hypotézou a Planckovou kvantovou hypotézou.
- 4) Jak Einstein pomocí své fotonové hypotézy vysvětlil podivné výsledky výzkumu vnějšího fotoelektrického jevu?



Korespondenční úkol č. 2

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na jednu z otázek kapitoly 2.



3. VLNOVÉ VLASTNOSTI ČÁSTIC

Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- formulovat de Broglieho vlnovou hypotézu;
- vypočítat vlnovou délku a frekvenci de Broglieho vlny;
- formulovat disperzní relaci pro de Broglieho vlnu;
- určit fázovou a grupovou rychlost de Broglieho vlny;
- popsat Davissonův – Germerův pokus a objasnit jeho význam.



Pojmy k zapamatování:

De Broglieho vlnová hypotéza, vlnově – částicový dualismus, de Broglieho vztah, disperzní relace, grupová rychlost, vlnový balík, Davissonův – Germerův pokus, ohyb elektronů na krystalu.



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

1 hodina

3.1. DE BROGLIEHO VLNOVÁ HYPOTÉZA

Inspirován [Einsteinovou fotonovou hypotézou](#) předložil francouzský fyzik Louis de Broglie v roce 1924 ve své disertační práci a navazujících časopiseckých článcích hypotézu o vlnových vlastnostech částic. Byl přitom veden touhou po symetrii světa, v němž by podle něj mělo být dovoleno klasické částici chovat se za jistých okolností jako vlnění, má-li být naopak podle Einsteina dovoleno světlu chovat se částicově.

Všem bodovým částicím přiřazujeme proto podle *de Broglieho hypotézy* speciální typ vlnění, tzv. de Broglieho vlny. Pro popis klasických částic pomocí de Broglieho vln pak používáme termín vlnová mechanika.



Protože se částice někdy chovají, jako by byly vlněním, a jindy naopak vlnění vykazuje částicové vlastnosti, hovoříme též o *vlnově-korpuskulárním (částicovém) dualismu* fyzikálního popisu světa.

Vlnově-částicový dualismus.

Ačkoliv se v rámci klasické fyziky jeví de Broglieho hypotéza jako velmi neobvyklá, získala si v nově vznikající kvantové fyzice své nezastupitelné místo. A to především díky tomu, že byla nade vše pochybnost potvrzena experimentálně (viz [Davissonův-Germerův experiment](#)).

De Broglieho vztahy

De Broglie postuloval, že *frekvence* ν a *vlnová délka* λ vln přiřazených bodové částici souvisí s její energií E a hybností p prostřednictvím *Einsteinových vztahů* pro foton

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Disperzní relace
pro de Broglieho
vlnu.

K nim připojil *disperzní relaci* uvádějící do souvislosti vlnovou délku a frekvenci bodové částice. V případě volné částice zapsal de Broglie tuto dodatečnou podmínku ve tvaru *Einsteinovy relativistické rovnice pro energii a hybnost*

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}.$$

Fázová a grupová rychlost de Broglieho vln

Z disperzní relace a ze vztahů pro frekvenci a vlnovou délku de Broglieho vln vyplývá pro *fázovou rychlost* de Broglieho vlny přiřazené volné částici

$$v_f \equiv \lambda \nu = \frac{c^2}{v},$$

Fázová rychlost de
Broglieho vlny.

kde c je rychlost světla ve vakuu a $v = p/m$ je rychlost částice. Vidíme tedy, že fázová rychlost de Broglieho vln je vždy větší než rychlost světla ve vakuu. To je ale podle speciální teorie relativity, mají-li být de Broglieho vlny reálnými fyzikálními objekty, nemožné.

Získaný výsledek je však překvapující jen na první pohled. V rámci [Bornovy statistické interpretace vlnové funkce](#) nejsou totiž stavy volné částice s přesně definovanou energií (a tedy ani s přesně definovanou frekvencí odpovídající de Broglieho vlny) přípustné. Ukazuje se, že volnou částici musíme v rámci de Broglieho vlnové teorie reprezentovat tzv. [vlnovým balíkem](#), jehož rychlost

pohybu prostorem je dána tzv. *grupovou rychlostí* $v_g \equiv \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v$,

Vlnový balík a
grupová rychlost
de Broglieho vlny.

kde $\omega \equiv 2\pi\nu$ je úhlová frekvence de Broglieho vln a $k \equiv 2\pi/\lambda$ velikost jejich vlnového vektoru.

Grupová rychlost vlnového balíku tedy odpovídá rychlosti studované částice a samotné vlnové balíky se proto pohybují prostorem tak, jak bychom to od nich jakožto vlnových reprezentantů bodových částic očekávali.

Animace ukazuje šíření vlnového balíku. Vlnový balík se postupně rozplývá.



3.2. DAVISSONŮV - GERMERŮV POKUS

Roku 1927 prokázali Američané Davisson a Germer, a nezávisle na nich i Angličan G. P. Thomson správnost de Broglieho *vlnové hypotézy* prostřednictvím experimentu, v němž pozorovali difrakci elektronů na krystalické mřížce niklu.



Samotná de Broglieho hypotéza předpokládající za jistých okolností vlnové chování částic je v rámci klasické fyziky natolik neobvyklá, že by byla bez experimentálního potvrzení jistě zavržena. S trochou nadsázky můžeme proto říci, že jí pevné místo v rámci moderní fyziky zajistila teprve Davissonova, Germerova a Thomsonova měření.

Jak ovšem vlnové chování klasických částic experimentálně prokázat? Inspiraci mohli zmínění experimentátoři hledat, a taky najít, v optice první poloviny 19. století. Tehdy se totiž podařilo nade vší pochybnost prokázat vlnové vlastnosti světla prostřednictvím jeho ohybu (difrakce) na malých aperturách (viz např. slavný experiment Youngův).

Podat experimentální důkaz vlnových vlastností klasických částic znamená proto pozorovat jejich difrakci.

To ovšem může být technicky velmi obtížné, protože ohybové (difrakční) jevy pozorujeme v optice jen tehdy, je-li charakteristický rozměr soustavy, na niž difrakci hodláme pozorovat - např. mřížková konstanta - srovnatelný s vlnovou délkou použitého záření.

Předpokládáme, že stejné omezení zůstává v platnosti i pro vlny de Broglieho. Proto si nejdříve udělejme alespoň namátkovou inventuru vlnových délek, které můžeme podle de Broglieho hypotézy u některých těles očekávat.

Objekt	Rychlost [m/s]	Hmotnost [kg]	De Broglieho vlnová délka [m]
běžící člověk	2	70	$4,7 \cdot 10^{-36}$
zrnko písku	1	10^{-3}	$6,6 \cdot 10^{-31}$
molekula dusíku ^a	502	$5,0 \cdot 10^{-26}$	$2,6 \cdot 10^{-11}$
proton ^b	$4,3 \cdot 10^4$	$1,7 \cdot 10^{-27}$	$9,0 \cdot 10^{-12}$
elektron ^c	$1,8 \cdot 10^6$	10^{-30}	$3,7 \cdot 10^{-10}$

De Broglieho
vlnové délky pro
uvedené objekty

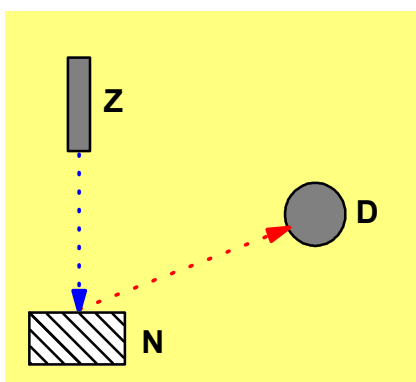
(a) Molekula dusíku pohybující rychlostí odpovídající střední kvadratické rychlosti molekul v plynu při teplotě 300 K, (b) proton urychlený potenciálovým rozdílem 10 V, (c) elektron urychlený potenciálovým rozdílem 10 V.

Z uvedené tabulky, jakkoliv neúplné, je zřejmé, že de Broglieho vlnové délky přiřazené makroskopickým objektům (A, B) jsou beznadějně malé na to, abychom

pro ně vůbec nějakou difrakci mohli pozorovat. I pro těžší objekty mikrosvěta (molekuly, atomy či protony) jsou získané vlnové délky velmi malé. K pozorování difrakce bychom museli mít v případě těchto objektů k dispozici příliš jemnou mřížku.

Naopak poměrně příznivá situace nastává pro lehké, nepříliš urychlené elektrony. Jejich vlnové délky totiž odpovídají zhruba vzdálenostem krystalických rovin v krystalech pevných látek. Přímo se proto nabízí možnost pokusit se pozorovat difrakci lehkých elektronů na krystalických rovinách vhodně zvoleného monokrystalu. Tato idea nebyla koneckonců v roce 1927 nová. Již dříve ji využil německý fyzik Max von Laue k důkazu vlnového charakteru Röntgenových paprsků X.

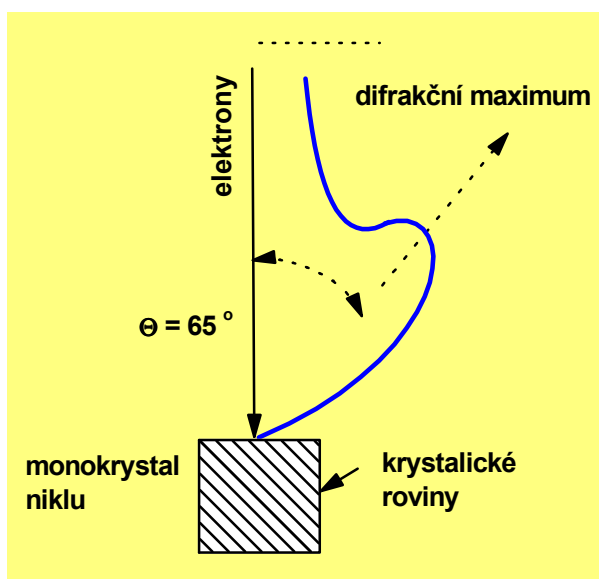
Schéma
uspořádání
Davissonova-
Germerova



Davisson a Germer pozorovali difrakci elektronů na krystalických rovinách monokrystalu niklu. Elektronovým dělem Z ozařovali ve vysokoteplotní peci vyžehnaný monokrystal niklu N a detektorem D měřili počet odražených elektronů v různých směrech. A získali velmi zajímavé výsledky: Kromě výrazného a v rámci částicové interpretace dobře pochopitelného maxima počtu elektronů odražených od povrchu krystalu ve směru zpět k elektronovému dělu pozorovali navíc i další maximum. To souviselo s difrakčními efekty.

Velmi zřetelné bylo toto maximum pro elektrony urychlené potenciálovým rozdílem 54 V, kdy se elektrony odrážely, jak ukazuje připojený obrázek, s převahou do směru svírajícího s krystalovými rovinami monokrystalu niklu úhel $\theta = 65^\circ$.

Směr difrakčního
maxima
elektronového svazku
v Davissonově-
Germerově pokusu.



Tomuto výraznému ohybovému maximu odpovídá vlnová délka dopadajících elektronů $\lambda = 0,165$ nm. Z experimentálních dat ji můžeme vypočítat, zanedbáme-li výstupní práci krystalu niklu, z *Braggovy rovnice*

$$N\lambda = 2a \sin \theta,$$

v níž položíme řád difrakčního maxima $N = 1$ a kde a je vzdálenost krystalových rovin v monokrystalu niklu (0,091 nm) a θ výše uvedený úhel. Podle de Broglieho teorie je vlnová délka elektronu urychleného na energii $E_k = 54$ eV rovna $\lambda = 0,166$ nm, což je ovšem v dokonalé shodě s hodnotou experimentální.

Braggova rovnice.

Na základě výše uvedeného můžeme tedy vyslovit závěr, že elektrony vykazují při rozptylu na krystalu niklu vlnové chování. Experimentální data jsou navíc v kvantitativní shodě s teoretickou předpovědí plynoucí z de Broglieho vztahů.



Difrakce na krystalických mřížkách byla pozorována nejen pro elektrony, ale i pro těžší částice. Tak např. v roce 1930 němečtí fyzikové Esterman, Frisch a Stern pozorovali difrakční efekty pro atomy helia bombardující monokrystal fluoridu lithia (LiF) a později Mitchell a Powers i pro neutrony bombardující monokrystal oxidu hořečnatého (MgO).

Shrnutí kapitoly

Luis de Broglie, inspirován Einsteinovou představou o částicovém chování elektromagnetického vlnění, formuloval hypotézu o vlnovém charakteru hmotných částic.

Tato tzv. vlnová hypotéza připisuje každé pohybující se částici vlnu o vlnové délce nepřímo úměrné hybnosti tělesa a frekvenci úměrné její energii. Fázová rychlost této vlny vychází větší než rychlost světla, zatímco grupová rychlost je rovna rychlosti částice. To je důvodem pro ztotožnění částice s vlnovým balíkem, nikoliv přímo s de Broglieho vlnou.

Davisson a Germer pozorovali ohyb elektronů na krystalu niklu a tím nade vší pochybnost prokázali vlnové vlastnosti elektronů. Později byly vlnové vlastnosti prokázány i u jiných částic.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Formulujte přesně de Broglieho vlnovou hypotézu.
- 2) Jaký je vztah mezi frekvencí de Broglieho vlny a energií částice, resp. mezi vlnovou délkou a hybností částice?
- 3) Jaká je fázová a grupová rychlost de Broglieho vlny? Co z toho plyne?
- 4) Co udává tzv. disperzní relace pro de Broglieho vlnu? Napište matematický vztah!
- 5) Popište Davissonův – Germerův pokus. V čem spočívá jeho význam?



Korespondenční úkol č. 3

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na otázku č. 2, č. 3 nebo č. 4 kapitoly 3.



4. KVANTOVÁ MECHANIKA

Kvantová mechanika se zabývá soustavami obsahujícími konečný počet bodových částic s nenulovou klidovou hmotností. Na rozdíl od kvantové teorie pole zůstávají v rámci kvantově-mechanického popisu typ i počet částic neměnnými během časového vývoje i vnějších zásahů do systému. Kvantová mechanika je zobecněním a rozšířením mechaniky klasické.

Kvantová mechanika je základním teoretickým nástrojem studia objektů mikrosvěta v podmínkách, v nichž nejsou významné vzájemné přeměny částic. Jako taková tvoří teoretické základy moderní *atomové fyziky* a již dávno pronikla za hranice fyziky v jejím běžném chápání. Je např. součástí dnes bouřlivě rozvíjené *kvantové chemie* a neobejdeme se bez ní ani v technických aplikacích, z nichž uvedme alespoň moderní materiálový výzkum.

Pojmový aparát kvantové mechaniky

Pojmový i matematický aparát kvantové mechaniky je od jazyka mechaniky klasické značně odlišný.

Stav systému popisujeme *vlnovými funkcemi*, a nikoliv polohami a rychlostmi (hybnostmi) jednotlivých částic, jak je to obvyklé v mechanice klasické.

Dynamické veličiny jsou kvantovány a nemohou nadále nabývat všech klasicky přípustných hodnot. Speciálně to platí o energii, jejíž kvantování popisuje tzv. *stacionární Schrödingerova rovnice*.

I pohybová rovnice kvantové mechaniky, *nestacionární Schrödingerova rovnice*, je značně odlišná od pohybových rovnic klasických. Přesto je však možno najít zřetelnou souvislost mezi klasickým a kvantovým popisem, jak je to ukázáno na příkladě jednočásticového systému ve *speciální podkapitole*.

Vůbec nejzřetelnější rozdíl mezi klasickým a kvantověmechanickým přístupem je v *reprezentaci dynamických proměnných* (poloha, hybnost, energie apod.). V rámci kvantové mechaniky jim totiž odpovídají samosdružené *operátory* na *Hilbertově prostoru stavů*.

Matematická struktura kvantové mechaniky je velmi komplikovaná. Řešení kvantově-mechanických úloh (např. stacionární Schrödingerovy rovnice) je pomocí jednoduchých matematických prostředků možné jen pro *vybrané modelové systémy*. V obecnějších případech musíme často použít *přibližných metod*.

V rámci tohoto textu se soustředíme v naprosté většině případů na studium jediné částice nacházející se v poli vnějších sil, které je možno popsat skalárním potenciálem. V zájmu přehlednosti se navíc omezíme na systémy, u nichž je možno zcela zanedbat relativistické efekty.



Pojmový aparát kvantové mechaniky.

Neznamená to však, že si kvantová mechanika nedokáže poradit i se systémy obecnějšími. Do jejího popisu lze zahrnout i nepotenciálové interakce, z nichž nejdůležitější je bezesporu *interakce elektromagnetická*. S jistou přesností je dokonce možno vzít v úvahu i *relativistické efekty*, i když úplné zahrnutí speciální teorie relativity je možné až v rámci *kvantové teorie pole*. Ani *vícečásticové systémy* nejsou pro kvantovou mechaniku neřešitelným problémem.

4.1. VLNOVÁ FUNKCE



Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- objasnit pojem vlnové funkce a vyjádřit matematicky rovinnou i obecnou monochromatickou de Broglieho vlnu;
- formulovat princip superpozice a osvětlit jeho význam jako základního principu kvantové mechaniky;
- vysvětlit pojem x - a p - reprezentace vlnové funkce;
- formulovat první a druhý Bornův postulát a vysvětlit jejich důsledky pro statistickou interpretaci vlnové funkce;
- vypočítat střední hodnotu a kvadratickou fluktuaci dynamické veličiny ze znalosti vlnové funkce;
- matematicky formulovat a objasnit Heisenbergovy relace neurčitosti pro polohu a hybnost částice;
- vysvětlit Dirakovo zobecnění popisu stavu v kvantové mechanice včetně tzv. bra-ketové symboliky.

Pojmy k zapamatování:



Monochromatické de Broglieho vlny, princip superpozice, x - a p - reprezentace vlnové funkce, první a druhý Bornův postulát, střední hodnota a fluktuace polohy a hybnosti, Heisenbergovy relace neurčitosti, obecná Dirakova reprezentace stavu v kvantové teorii, bra-ketová symbolika.

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

2,5 hodiny

Vlnová funkce - proč a jak?

Nový pohled, jenž do částicové mechaniky vnesla [de Broglie vlnová hypotéza](#), vyžaduje přebudování aparátu, jehož pomocí popisujeme stav a časový vývoj částicových systémů. V tuto chvíli se věnujme reprezentaci stavu. Popis časového vývoje, tj. formulaci [pohybové rovnice kvantové mechaniky](#), uvádíme na jiném místě.

Pro inspiraci se obraťme k těm oborům fyziky, kterým jsou vlnové představy vlastní. Například k teorii elektromagnetického pole. I zde se totiž setkáváme s vlněním, tzv. elektromagnetickými vlnami reprezentovanými periodickými prostoročasovými změnami vektorových polí elektrické a magnetické intenzity. Elektromagnetické vlny proto popisujeme dvojicí vektorových funkcí, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ a $\vec{H}(\vec{r}, t)$, čtyř reálných proměnných - tří souřadnic polohového vektoru a jedné proměnné časové. Na uvedené vektorové funkce můžeme rovněž pohlížet, odhlédneme-li od transformačních vlastností trojrozměrných vektorů, jako na šestici funkcí skalárních.

Je jistě přijatelný předpoklad, že obdobně můžeme postupovat i nyní, tj.:

De Broglieho vlnu přiřazenou studované částici popíšeme v obecném případě n komplexními funkcemi $\psi_1(\vec{r}, t), \dots, \psi_n(\vec{r}, t)$ polohového vektoru a času. O těchto funkcích hovoříme zpravidla jako o funkcích vlnových.



Vícekomponentní
vlnové funkce

V rámci nerelativistické kvantové fyziky vystačíme obvykle s jedinou vlnovou funkcí. Ovšem i vícekomponentní vlnové funkce mají v kvantové teorii své nezastupitelné místo. Používají se tehdy, je-li nutno explicitně započítat spin studované částice, a zejména pak v rámci relativistické kvantové teorie. Jednokomponentní vlnovou funkci ψ naopak používáme při popisu částice s nulovým spinem nebo pokud spin částice zanedbáváme.

Výše uvedený aparát popisu jednočásticového systému pomocí vlnových funkcí je možno zobecnit i na systémy vícečásticové. Je pouze nutné rozšířit počet argumentů vlnové funkce tak, aby každé částici odpovídal jeden polohový vektor. V nejjednodušším případě tedy můžeme systému N částic přiřadit vlnovou funkci $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$, neboli $\psi: \square^{3N} \times \square \rightarrow \square$. Podrobněji však o popisu vícečásticových systémů pojednáváme na jiném místě. V následujícím výkladu se budeme věnovat výhradně systémům jednočásticovým.

Speciální tvary vlnových funkcí

Mezi všemi vlnovými funkcemi jednočásticového systému si některé zaslouhují zvýšenou pozornost. Jsou to zejména vlnové funkce odpovídající

- rovinným monochromatickým de Broglieho vlnám reprezentujícím stavy volné částice s ostře definovanou hybností a energií,
- monochromatickým de Broglieho vlnám reprezentujícím stavy částice s ostře definovanou energií v poli vnějších sil,
- vlnovým balíkům reprezentujícím fyzikálně realizovatelné stavy volné částice s dostatečně ostře definovanou energií a hybností.

Speciální vlnové
funkce.

Samotné rovinné monochromatické de Broglieho vlny sice nerepresentují žádný fyzikálně realizovatelný stav volné částice (viz též důsledky prvního Bornova postulátu), jsou však velmi významné při formulaci jednoho z ústředních principů kvantové mechaniky - principu superpozice - a při přechodu k tzv. p-representaci vlnové funkce.

Jednorozměrné vlnové funkce

V jistých situacích, zpravidla z důvodu jednoduchosti, je výhodné pracovat s částicí vázanou na přímce. Stavy takové částice popisujeme pomocí vlnové funkce, která z pochopitelných důvodů závisí pouze na jediné prostorové proměnné, obvykle označované x : $\psi = \psi(x, t)$.

Jednorozměrná
vlnová funkce.

Statistická interpretace vlnové funkce

Velmi názornou interpretaci dal vlnové funkci ve druhé polovině 20. let 20. století německý fyzik M. Born. Jeho myšlenky je možno shrnout do dvou postulátů - dnes nazývaných první a druhý Bornův postulát, které jsou nedílnou součástí axiomatického základu moderní kvantové teorie. Pomocí Bornových postulátů určujeme střední hodnoty a fluktuace polohy a hybnosti částice ve stavu

Interpretace
vlnové funkce.

popsaném zadanou vlnovou funkcí. Hrají rovněž významnou roli při formulaci proslulého [Heisenbergova principu neurčitosti](#).

Obecná reprezentace stavu v kvantové teorii

Popis stavů kvantových systémů pomocí vlnových funkcí, který je přímo inspirován [de Broglieho vlnovou hypotézou](#), není jediný možný. Souběžně s formulací vlnové mechaniky vytvořil německý fyzik W. Heisenberg svou *mechaniku maticovou*. Zobecnění obou popisů provedl a jejich ekvivalenci dokázal na přelomu 20. a 30. let 20. století anglický fyzik P. Dirac. Podrobná analýza Dirakova přístupu však zcela překračuje rámec této encyklopedie, stručné nastínění základních idejí je možno nalézt v kapitole „[Moderní formulace kvantové mechaniky](#)“. Z nich využijeme především proslulou Dirakovu [bra-
ketovou symboliku](#), která často významně zjednodušuje zápisu formulí a vzorců, s nimiž se v kvantové teorii setkáváme, a tím činí matematický formalismus kvantové teorie přehlednějším.

Heisenbergova a
Dirakova kvantová
mechanika.

Všimněte si, že v kvantové teorii pracujeme obecně s komplexními vlnovými funkcemi. Vždy ovšem můžeme přejít k rovnocennému popisu pomocí dvojnásobného počtu funkcí reálných, kdy každou komplexní funkci reprezentujeme její reálnou a imaginární částí.

4.1.1. MONOCHROMATICKÉ DE BROGLIEHO VLNY

Rovinné monochromatické de Broglieho vlny

De Broglie přiřazuje volné částici s přesně zadanou hybností \vec{p} a energií E vlny charakterizované ostrou hodnotou vlnového vektoru \vec{k} a úhlové frekvence ω . Souvislost mezi částicovými a vlnovými parametry udávají [de Broglieho vztahy](#).



Volné částici je přiřazena rovinná monochromatická vlna $\psi(\vec{r}, t) = A \exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\}$, kterou můžeme pomocí de Broglieho vztahů přepsat též do tvaru $\psi(\vec{r}, t) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right\}$.

Připomeňme, že stav volné částice s přesně definovanou hybností a energií není v rámci kvantové mechaniky přípustný.

Obecné monochromatické de Broglieho vlny

To, co není přípustné pro volné částice, je možno za jistých okolností realizovat v případě částic nacházejících se ve vnějším silovém poli. Částice se v takovém případě může nacházet ve stavu s přesně definovanou energií a v rámci [de Broglieho teorie](#) jí přiřazujeme *monochromatickou vlnu*, tentokrát však již nikoliv rovinnou. Speciální charakter takové vlny se projeví v separaci prostorové a časové závislosti odpovídající vlnové funkce:



$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp(-i\omega t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Vlnové funkce výše uvedeného tvaru se obvykle nazývají *stacionárními vlnovými funkcemi*. Jejich prostorová část Ψ je dána řešením [stacionární Schrödingerovy rovnice](#).

Stacionární vlnová funkce odpovídá částici s přesně definovanou a během časového vývoje se zachovávající energií. Z klasické mechaniky však víme, že se energie hmotného bodu zachovává pouze v časově neproměnných *potenciálových polích*. Monochromatická de Broglieho vlna tedy reprezentuje speciální stav bodové částice v časově neproměnném poli vnějších sil.

Časově
neproměnná
potenciálová pole.

Podle *prvního Bornova postulátu* (viz dále) je fyzikálně relevantní pouze kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce. Pro stacionární vlnové funkce však platí $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2$ a fyzikálně relevantní část vlnové funkce je tedy časově nezávislá. Odtud je zřejmý i původ názvu „stacionární vlnová funkce“.

Částice vázaná na přímku

Často je výhodné, zejména z důvodu snadné řešitelnosti konkrétních problémů a úloh, předpokládat, že se studovaná částice může pohybovat pouze podél zadané přímky. Souřadnici takové částice pak popisujeme jediným reálným parametrem x .

Částice vázaná
na přímku..

V takovém případě nabývají vlnové funkce reprezentující de Broglieho monochromatické vlny jednodušších tvarů:

$$\psi(x, t) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\} \text{ pro rovinnou monochromatickou vlnu a}$$

$$\psi(x, t) = \Psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \text{ pro monochromatickou vlnu obecnou.}$$

Uvedené tvary vlnových funkcí částice vázané na přímku budeme nazývat *jednorozměrnými stacionárními vlnovými funkcemi*.

V tuto chvíli by mohla být vyslovena oprávněná námitka, proč v případě rovinných monochromatických de Broglieho vln neuvažujeme i tvar

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp\{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)\} = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} + Et)\right\},$$

který rovněž vyhovuje vlnové rovnici, a pro obecnou monochromatickou vlnu i tvar

$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp(i\omega t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right).$$

Důvod je poměrně prostý. Ukážeme si jej na jednoduchém případě rovinné monochromatické vlny.

Vlnová funkce $\psi(\vec{r}, t) = A \exp\{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\}$ popisuje totiž vlnu, jejíž rovinné vlnoplochy se šíří ve směru vlnového vektoru \vec{k} , a tedy i ve směru hybnosti \vec{p} částice, jíž je tato vlna přiřazena. Na druhé straně však vlnová funkce $\psi(\vec{r}, t) = A \exp\{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)\}$ zadává vlnoplochy šířící se ve směru $-\vec{k}$, tedy proti směru pohybu studované částice. První vlnová funkce je proto pro vlnový popis částice s hybností \vec{p} přijatelná a druhá musí být odmítnuta jako nefyzikální.

Ač podobnou úvahu nemůžeme provést pro obecnou monochromatickou vlnu, jistě nepřekvapí, že i v tomto, obecnějším případě předpokládáme časový faktor ve tvaru $\exp(-i\omega t)$ a nikoliv ve tvaru $\exp(i\omega t)$. Abychom však byli korektní, uveďme, že zde odmítnuté tvary monochromatických vlnových funkcí hrají jistou roli v rámci *relativistické kvantové mechaniky*.

4.1.2. PRINCIP SUPERPOZICE



Libovolnou vlnovou funkci popisující fyzikálně přípustný stav daného systému je možno získat jako lineární kombinaci vlnových funkcí odpovídajících de Broglieho monochromatickým vlnám (stacionárních vlnových funkcí). Zmíněná lineární kombinace může mít podle okolností konečně i nekonečně mnoho členů.

Podle prvního Bornova postulátu (kap. 4.1.4) jsou přípustné vlnové funkce nutně kvadraticky integrovatelné. Princip superpozice proto říká, že každou kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkci můžeme získat jako lineární kombinaci vlnových funkcí stacionárních.

Monochromatické de Broglieho vlny (stacionární vlnové funkce) odpovídají řešením stacionární Schrödingerovy rovnice (kap. 4.2). Princip superpozice říká, že stacionárních vlnových funkcí je pro daný systém dostatek k tomu, aby jejich pomocí bylo možno zkonstruovat libovolnou vlnovou funkci popisující přípustný stav systému.

Vlnový balík.

Speciální aplikací principu superpozice je konstrukce vlnového balíku reprezentujícího vlnovou funkci volné částice pomocí rovinných monochromatických vln.

4.1.3. X A P-REPREZENTACE VLNOVÉ FUNKCE

Podle principu superpozice je možno libovolnou vlnovou funkci odpovídající fyzikálně realizovatelnému stavu volné částice získat jako lineární kombinaci rovinných monochromatických de Broglieho vln

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{\square^3} \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\} d^3 \vec{k} = \int_{\square^3} \hat{\psi}(\vec{k}, t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3 \vec{k},$$

kde jsme ve druhém integrálu provedli formální náhradu $\hat{\psi}(\vec{k}, t) = \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp(-i\omega t)$. Z uvedeného vyjádření je vidět, že vlnová funkce $\psi(\vec{r}, t)$ je Fourierovou transformací funkce $\hat{\psi}(\vec{k}, t)$.

Na souvislost mezi funkcemi ψ a $\hat{\psi}$ můžeme tedy nahlížet jako na vztah čistě matematický a na chvíli odhlédnout od fyzikálního pozadí problému. Platnost výše uvedené formule není proto omezena pouze na vlnové funkce odpovídající volné částici, ale můžeme ji rozšířit i na obecnou (kvadraticky integrovatelnou) vlnovou funkci. Formulí

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\square^3} \hat{\psi}(\vec{p}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) d^3 \vec{p},$$

v níž jsme místo vlnového vektoru \vec{k} užili hybnost \vec{p} a doplnili formálně výhodný multiplikatívni faktor $1/(2\pi\hbar)^{3/2}$, můžeme tedy použít i pro částici nacházející se v poli vnějších sil. V obecném případě již ale neplatí $\hat{\psi}(\vec{k}, t) = \tilde{\psi}(\vec{k}) \exp(-i\omega t)$, časová závislost $\hat{\psi}$ je zpravidla komplikovanější.

Funkci $\hat{\psi}$ je možno určit, známe-li vlnovou funkci ψ , pomocí inverzní Fourierovy transformace

Souřadnicová a impulsová reprezentace jsou spojeny Fourierovou transformací.

$$\hat{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\square^3} \psi(\vec{r}, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) d^3\vec{r}.$$

Obě funkce, ψ i $\hat{\psi}$, jsou tedy ve vzájemně jednoznačném vztahu a jsou pro popis stavu částice stejně vhodné. Proto budeme o obou hovořit jako o funkcích vlnových. První z nich je závislá na souřadnicích částice, hovoříme proto o *vlnové funkci v souřadnicové* nebo prostě *x-representaci*. Druhá vlnová funkce závisí naopak na složkách hybnosti (impulzu) částice. Proto o ní hovoříme jako o *vlnové funkci v impulzové* nebo stručněji *p-representaci*.



Obě vyjádření vlnové funkce hrají významnou roli při její fyzikální interpretaci. Zatímco vlnová funkce v x-representaci je interpretována prostřednictvím *prvního Bornova postulátu*, vlnová funkce v p-representaci hraje ústřední roli při formulaci *druhého Bornova postulátu*.

X a P- reprezentace jednorozměrné vlnové funkce

Pro jednorozměrné vlnové funkce používáme vztahy

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{\square} \hat{\psi}(p, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp,$$

$$\hat{\psi}(p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{\square} \psi(x, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx,$$

Vztah mezi souřadnicovou a impulsovou reprezentací pro

v nichž změněná mocnina v multiplikativním faktoru $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$ odpovídá redukci prostorových proměnných na jedinou.

4.1.4. PRVNÍ BORNŮV POSTULÁT

První Bornův postulát podává fyzikální interpretaci *vlnové funkce* částice v *x-representaci*. Obdobným způsobem je pomocí *druhého Bornova postulátu* interpretována vlnová funkce částice v *p-representaci*.

Výraz

$$\frac{\int_{\Omega} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}}{\int_{\square^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}}$$

udává *pravděpodobnost*, že částici ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ nalezneme v čase t v prostorové oblasti Ω (*pravděpodobnost výskytu částice*).



Důsledky prvního Bornova postulátu

Všimněme si několika velmi významných důsledků výše uvedeného tvrzení.

Především první Bornův postulát implicitně předpokládá, že kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce je integrovatelný na libovolné měřitelné podmnožině \square^3 , speciálně i na celém \square^3 . Zkráceně v takovém případě hovoříme o *kvadraticky integrovatelné vlnové funkci*. Na vlnovou funkci popisující fyzikálně realizovatelný stav bodové částice takto klademe významnou omezující

Kvadratická integrovatelnost vlnové funkce.

podmínku. Jedním z důsledků této podmínky je fakt, že rovinná monochromatická vlna nereprezentuje žádný fyzikálně realizovatelný stav volné částice. Odpovídající vlnová funkce totiž na \square^3 kvadraticky integrovatelná není.

Pouze výše uvedená pravděpodobnost je měřitelnou veličinou. Samotnou vlnovou funkci měřit neumíme - obsahuje tudíž částečně i informaci, která není fyzikálně relevantní. Například měřitelné důsledky teorie se nezmění, pokud zadanou vlnovou funkci násobíme nenulovou, obecně imaginární konstantou.

Vždy proto můžeme přejít k nové vlnové funkci

Normovaná vlnová funkce.

$$\tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \frac{\psi(\vec{r}, t)}{\sqrt{\int_{\square^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}}}$$

splňující *normovací podmínku* $\int_{\square^3} |\tilde{\psi}(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$. O takto zavedené funkci

Hustota pravděpodobnosti.

hovoříme jako o *vlnové funkci normované k jednotce*. Kvadrát její absolutní hodnoty má pak význam *hustoty pravděpodobnosti* nalezení částice v čase t v místě zadaném polohovým vektorem \vec{r} . Mějme ovšem na paměti, že samotný stav částice je stejně dobře popsán normovanou i nenormovanou vlnovou funkcí.

Ani po normování není vlnová funkce určena jednoznačně. Stále ještě můžeme měnit její fázi (násobit ji imaginární jednotkou $e^{i\alpha}$), aniž se to jakkoliv dotkne měřitelných výsledků teorie. Proto se obvykle hovoří o fázi vlnové funkce jako o nefyzikálním stupni volnosti.

Měření v kvantové mechanice je statisticky regulární proces.

V rámci Bornovy statistické interpretace vlnové funkce hovoříme o pravděpodobnosti nalezení částice v jisté oblasti prostoru. Znamená to, že odpovídající pravděpodobnost vždy existuje, a měření polohy částice je tedy statisticky regulární proces. K podobnému závěru docházíme na základě druhého Bornova postulátu i pro měření hybnosti částice. A uvedené tvrzení se dokonce v rámci kvantové teorie rozšiřuje i na všechna ostatní měření, která mají zpravidla, podobně jako měření polohy a hybnosti, pouze pravděpodobnostní charakter.



V kvantové teorii tudíž vždy pohlížíme na měření jako na *statisticky regulární proces*.

Jednorozměrné vlnové funkce

V případě částice vázané na přímku je nutno výše uvedené trojrozměrné integrály nahradit integrály jednorozměrnými. Pravděpodobnost nalezení částice popsané v čase t vlnovou funkcí $\psi(x, t)$ na intervalu (a, b) je pak dána výrazem

$$\frac{\int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx}$$

4.1.5. DRUHÝ BORNŮV POSTULÁT

Druhý Bornův postulát podává měřitelnou interpretaci *vlnové funkce* částice v *p-representaci*. Hraje tedy pro vlnové funkce v p-representaci obdobnou roli jako *první Bornův postulát* pro vlnové funkce v *x-representaci*.

Budiž $\hat{\psi}$ vlnová funkce částice v p-representaci,

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\square^3} \hat{\psi}(\vec{p}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) d^3 \vec{p}, \text{ pak výraz } \frac{\int_{\Pi} |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3 \vec{p}}{\int_{\square^3} |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3 \vec{p}}$$

udává pravděpodobnost, že částice bude mít v čase t hybnost z oblasti Π impulzového prostoru.



Také druhý Bornův postulát má, podobně jako postulát první, některé velmi významné důsledky. Nejdůležitější z nich jsou

- kvadratická integrovatelnost vlnové funkce v p-representaci,
- *statistická regularita* procesu měření hybnosti bodové částice.

Jednorozměrná vlnová funkce

V případě částice vázané na přímku je nutno výše uvedené trojrozměrné integrály nahradit integrály jednorozměrnými. Tak například přechod mezi x- a p-representací vlnové funkce je dán vztahem

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(p, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp$$

a pravděpodobnost, že částice bude mít hybnost z intervalu (α, β) , výrazem

$$\frac{\int_{\alpha}^{\beta} |\hat{\psi}(p, t)|^2 dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{\psi}(p, t)|^2 dp}.$$

4.1.6. STŘEDNÍ HODNOTY A FLUKTUACE POLOHY A HYBNOSTI

Měření polohy a hybnosti

Podle *prvního* a *druhého Bornova postulátu* můžeme pro částici v zadaném stavu (popsaném kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkcí) určit pouze pravděpodobnosti, že ji nalezneme v konkrétním místě prostoru a že bude mít jistou konkrétní hybnost. Při opakovaném měření polohy i hybnosti částice získáme proto různé číselné výsledky. Četnosti takto změřených hodnot polohy a hybnosti odpovídají při dostatečně velkém počtu opakování s vysokou přesností pravděpodobnostem v obou zmíněných postulátech vystupujícím.

Sledujeme-li obvyklý experimentální postup, vyhodnotíme provedená měření tak, že určíme pro získaný soubor dat *střední hodnotu* měřené veličiny a *odhad chyby*

- buď jednotlivého měření, nebo vypočítané střední hodnoty. Pomocí Bornových postulátů můžeme obě veličiny určit, známe-li odpovídající vlnovou funkci, i výpočtem.

Střední hodnota a střední kvadratická fluktuace polohy

Podle prvního Bornova postulátu a na základě úvahy uvedené na [jiném místě](#) můžeme **střední hodnotu polohy** bodové částice ve stavu popsaném normovanou vlnovou funkcí ψ určit pomocí vztahu

$$\bar{\vec{r}} = \int_{\square^3} \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r},$$

Střední hodnota a
střední chyba
polohy.

který můžeme zapsat rovněž po složkách

$$\bar{x}_i = \int_{\square^3} x_i |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Odpovídající **střední kvadratické fluktuace** jednotlivých složek polohy pak počítáme pomocí normované vlnové funkce jako

$$\Delta x_i = \sqrt{\int_{\square^3} (x_i - \bar{x}_i)^2 |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}}.$$

Tyto střední fluktuace odpovídají ve výše naznačené experimentální proceduře střední kvadratické chybě jednotlivého měření polohy částice.

Střední hodnota a střední kvadratická fluktuace hybnosti

Pomocí vlnové funkce $\hat{\psi}$ v [p-reprezentaci](#),

Střední hodnota a
střední chyba
hybnosti.

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\square^3} \hat{\psi}(\vec{p}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) d^3\vec{p},$$

a druhého Bornova postulátu můžeme určit **střední hodnotu hybnosti** částice prostřednictvím formule

$$\bar{\vec{p}} = \frac{\int_{\square^3} \vec{p} |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3\vec{p}}{\int_{\square^3} |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3\vec{p}},$$

nebo ekvivalentně pro normovanou vlnovou funkci $\hat{\psi}$ pomocí formule

$$\bar{\vec{p}} = \int_{\square^3} \vec{p} |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3\vec{p}.$$

I formuli zadávající střední hodnotu hybnosti můžeme zapsat po složkách

$$\bar{p}_i = \int_{\square^3} p_i |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3\vec{p}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Střední kvadratické fluktuace složek hybnosti částice v zadaném stavu, které reprezentují současně střední kvadratické chyby jednotlivého měření složek hybnosti, určíme pro normovanou vlnovou funkci $\hat{\psi}$ pomocí vztahu

$$\Delta p_i = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} (p_i - \bar{p}_i)^2 |\hat{\psi}(\vec{p}, t)|^2 d^3 \vec{p}}.$$

4.1.7. HEISENBERGOVY RELACE NEURČITOSTI PRO POLOHU A HYBNOST

Statistická interpretace de Broglieho vlnového modelu (*první* a *druhý Bornův postulát*) vede k mnoha v klasické fyzice neočekávaným závěrům. Jedním z nejpodivuhodnějších z nich je zjištění, že

polohu a hybnost bodové částice není možno současně měřit neomezeně přesně.



Uvedený závěr, který poprvé odvodil německý fyzik Werner Heisenberg, je možno rozšířit i na *další měřitelné veličiny*. V této kapitole se ale soustředíme pouze na vzájemný vztah polohy a hybnosti. Dříve, než zformulujeme *obecné relace neurčitosti* pro polohu a hybnost, uveďme jeden inspirující příklad.

Gaussův vlnový balík

Proveďme výpočet středních hodnot polohy a hybnosti a odpovídajících středních kvadratických fluktuací pro částici, jejíž stav je reprezentován speciální *jednorozměrnou vlnovou funkcí* ve tvaru *Gaussova vlnového balíku*

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}\right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right).$$

Gaussův vlnový balík.

Časová závislost vlnové funkce ψ není v tuto chvíli podstatná, proto ji ve formuli explicitně neuvádíme. Skryta je v možné závislosti „konstant“ σ_x , x_0 a p_0 na čase.

Je jen otázkou technické zručnosti ověřit, že

- uvedená vlnová funkce je *normovaná k jedničce*,
- *střední hodnota polohy* je rovna x_0 a
- *střední kvadratická fluktuace polohy* je rovna σ_x .

Nalezneme dále *p-reprezentaci* výše uvedené vlnové funkce. Pomocí *inverzní Fourierovy transformace* je to opět jen výpočetní problém. Máme totiž určit integrál

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) dx,$$

který po provedení naznačené integrace vede k

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_p^2}} \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x_0\right\},$$

kde $\sigma_p = \hbar/(2\sigma_x)$.

Stejně jako pro vlnovou funkci v x-reprezentaci i nyní snadno ověříme, že

- vlnová funkce v p-reprezentaci je *normovaná k jedničce*,

- střední hodnota hybnosti je rovna p_0 a
- střední kvadratická fluktuace hybnosti je rovna σ_p .

V tuto chvíli je pro nás nejzajímavější vztah mezi středními kvadratickými fluktuacemi polohy a hybnosti studované částice. Z výše uvedeného plyne závěr

$$\Delta x \Delta p = \sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}.$$

Poslední vztah má velmi zajímavý důsledek: čím přesněji bude lokalizována poloha částice reprezentované Gaussovým vlnovým balíkem, tím méně ostře bude zadána její hybnost a naopak.

Hybnost a polohu bodové částice nelze současně zadat ani změřit neomezeně přesně!

Obecná formulace relací neurčitosti pro polohu a hybnost

Výše uvedené závěry, které jsme získali pro Gaussov vlnový balík, je možno po malé modifikaci rozšířit i na obecné vlnové funkce.

Pro částici vázanou na přímku je možno ukázat, že střední kvadratické fluktuace její polohy a hybnosti jsou v libovolném stavu svázány podmínkou



$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Ta se od výše uvedeného vztahu pro Gaussov vlnový balík liší pouze náhradou rovnosti znamením nerovnosti.

Heisenbergovy
relace neurčitosti.

V trojrozměrném případě jsou Heisenbergovy relace neurčitosti poněkud komplikovanější - poloha a hybnost jsou totiž v tomto případě trojrozměrné vektory:

$$\Delta x_k \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \text{ a } \Delta x_j \Delta p_k \geq 0 \text{ (pro } j \neq k \text{)}$$

$$\Delta x_j \Delta x_k \geq 0 \text{ a } \Delta p_j \Delta p_k \geq 0 \text{ (} j, k \text{ libovolná).}$$

Způsobem obdobným jako v případě částice vázané na přímku se tedy ovlivňují pouze odpovídající si složky polohy a hybnosti. Křížové efekty pro $j \neq k$ ani vzájemná ovlivnění jednotlivých složek polohy, resp. hybnosti, neexistují.

4.1.8. OBECNÁ REPREZENTACE STAVU V KVANTOVÉ TEORII

Prostor stavů

Stavy jednočásticového systému popisujeme obvykle v kvantové mechanice pomocí kvadraticky integrovatelných vlnových funkcí (viz důsledky prvního Bornova postulátu). Kvadraticky integrovatelná vlnová funkce zadává tedy v konkrétním čase *kvantový stav* studovaného systému. Odhlédněme v tuto chvíli od všudypřítomného časového vývoje a závislost vlnových funkcí na čase neuvažujme. Množinu všech stavů jednočásticového systému můžeme takto ztotožnit s množinou všech (komplexních) kvadraticky integrovatelných funkcí tří reálných proměnných. O této množině však fyzikové i matematikové v době formulování základů kvantové teorie věděli, že má speciální matematickou

Kvantový stav

strukturu. Množina všech kvadraticky integrovatelných funkcí je separabilní Hilbertův prostor. Toto poznání vedlo anglického fyzika P. Diraka k postulování tvrzení:

Množina všech stavů libovolného kvantověmechanického systému je jistý abstraktní Hilbertův prostor, obvykle nekonečné dimenze.



Prvky tohoto abstraktního prostoru můžeme v konkrétních výpočtech a aplikacích reprezentovat speciálním způsobem - vlnovými funkcemi v *x-reprezentaci*, vlnovými funkcemi v *p-reprezentaci*, či dokonce úplně jinak - např. nekonečnými posloupnostmi komplexních čísel. Podrobnější analýza ukazuje, že konkrétní speciální reprezentace stavového Hilbertova prostoru odpovídají, zhruba řečeno, speciálním volbám báze na něm.

Konstrukce prostoru stavů

Při konstrukci abstraktního Hilbertova prostoru stavů zohlednil Dirac dvě vůdčí ideje kvantové teorie

- kvantování některých veličin (tj. fakt, že některé veličiny mohou nabývat jen vybraných hodnot, kterých je obvykle spočetně mnoho),
- existenci veličin, které nelze současně měřit neomezeně přesně (viz např. *Heisenbergovy relace neurčitosti*).

Stěžejní ideje Dirakovy formulace kvantové mechaniky.

Měření vůbec hraje v kvantové teorii dominantní roli. Spolu s teorií relativity totiž kvantová teorie snad poprvé v dějinách novodobé vědy explicitně přiznává, že úkolem každé teorie je systematizace, popis a vysvětlení výsledků pozorování a experimentů, měření. Proto Dirac ve své konstrukci stavového prostoru z pojmu měření vychází.

Stav systému v kvantové mechanice zadáváme hodnotami měřitelných veličin, *pozorovatelných*. Veličiny, které můžeme současně měřit neomezeně přesně (např. složky polohového vektoru), budeme nazývat *kompatibilními pozorovatelnými*. Podle potřeby je můžeme sdružovat do skupin, které nazýváme *množinami kompatibilních pozorovatelných*. Pozor však, kompatibilita pozorovatelných není tranzitivní! Významnou roli hrají v kvantové teorii tzv. *úplné množiny kompatibilních pozorovatelných (ÚMKP)*, k nimž již žádnou další pozorovatelnou, kompatibilní se všemi ostatními, nemůžeme přidat.

Úplná množina kompatibilních pozorovatelných.

Vyberme si jednu z těchto ÚMKP - $\{A^{(1)}, \dots, A^{(n)}\}$. Necht' všechny v ní obsažené veličiny jsou kvantovány a výsledky jejich současného měření tvoří spočetnou množinu uspořádaných n -tic reálných čísel $[a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}]$. Přípustné výsledky měření veličin $A^{(1)}, \dots, A^{(n)}$ přitom odlišujeme pomocí tzv. *kvantových čísel* k_1, \dots, k_n . Dirac předpokládal, že každé takové n -tici odpovídá vektor ve stavovém prostoru systému. Tento vektor obvykle označujeme symbolem $|a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\rangle$. Podle Diraka jsou navíc vektory odpovídající různým výsledkům měření zvolené ÚMKP navzájem ortogonální a na Hilbertově prostoru stavů tvoří bázi. Každý stavový vektor $|\xi\rangle$ můžeme tedy zapsat jako (obecně spočetnou) lineární kombinaci vektorů $|a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\rangle$,

$$|\xi\rangle = \sum_{k_1, \dots, k_n} \xi_{k_1, \dots, k_n} |a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\rangle,$$

kde ξ_{k_1, \dots, k_n} jsou komplexní konstanty – souřadnice vektoru $|\xi\rangle$ v bázi $|a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\rangle$.

Reprezentujeme-li Hilbertův prostor stavů pomocí množiny kvadraticky integrovatelných vlnových funkcí, odpovídají vektorům $|a_{k_1}^{(1)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\rangle$ vlnové funkce speciálního tvaru.

Výše naznačenou konstrukci můžeme pochopitelně provést i pro další ÚMKP, které definují na prostoru stavů alternativní báze. Každá ÚMKP je ke konstrukci Hilbertova stavového prostoru stejně vhodná.

Podrobná analýza obecné reprezentace stavu v kvantové teorii se zcela vymyká rámci této encyklopedie. Vynikající pojednání o tomto problému je možno najít např. v původní práci Dirakově nebo v monografii Formánkové.

4.1.9. BRA-KETOVÁ SYMBOLIKA

Popis stavu studovaného systému pomocí vlnové funkce ψ je jen jednou z možných reprezentací abstraktního stavového vektoru systému. Anglický fyzik P. Dirac přiřadil takovému vektoru speciální symbol $|\psi\rangle$ a nazval jej *ket-vektorem* ψ . Název pochází z anglického výrazu pro hranaté závorky $\langle \rangle$ - *bracket*, z nichž jsme použili jen pravou polovinu (tedy *ket*).

Přestože v rámci našeho výkladu pracujeme důsledně s vlnovými funkcemi, je občas výhodné přejít k bra-ketovému značení. To může totiž mnohé vztahy a vzorce, alespoň formálně, významně zjednodušit. Často se například setkáváme s výrazy typu $\int_{\square^3} \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$, pro něž v rámci bra-ketové symboliky zavádíme

mnohem přehlednější zkratku $\langle \varphi | \psi \rangle$. V Dirakově notaci označuje tato zkratka současně *skalární součin* stavových vektorů $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$.

Protože v symbolu $\langle \varphi | \psi \rangle$ používáme pro vektor φ levou polovinu hranaté závorky, nazýváme jej *bra-vektorem*.

Ket-vektory a
bra-vektory



Shrnutí kapitoly

Částici popisujeme vlnovou funkcí, jejíž parametry jsou dány de Broglieho vztahy. Stavům s přesně danou energií, tzv. *stacionárním stavům*, odpovídá monochromatická de Broglieho vlna.

Princip superpozice je základním principem kvantové mechaniky. Tvrdí, že systém se může nacházet ve stavu popsaném lineární kombinací vlnových funkcí odpovídajících *de Broglieho monochromatickým vlnám* (stacionárních vlnových funkcí).

Vlnovou funkci chápeme obvykle jakou funkci $\psi(\vec{r}, t)$ souřadnic, hovoříme proto o tzv. *x-reprezentaci*. Je ale možné přejít k vlnové funkci $\psi(\vec{p}, t)$, jejímž argumentem jsou složky hybností. Taková vlnová funkce popisuje stav systému stejně dobře jako funkce původní, jedná se o vyjádření v tzv. *p-reprezentaci*.

Fyzikální interpretaci vlnové funkce v x -reprezentaci udává *první Bornův postulát*. Druhá mocnina modulu této (obecně komplexní) funkce $\psi(\vec{r}, t)$ udává hustotu pravděpodobnosti výskytu systému v čase t ve stavu popsaném polohovým vektorem \vec{r} .

Druhý Bornův postulát udává obdobnou fyzikální interpretaci vlnové funkce $\psi(\vec{p}, t)$ v p -reprezentaci pro hybnosti.

Důsledkem prvního a druhého Bornova postulátu je *statistický charakter veličin* v kvantové mechanice. Ze známé vlnové funkce lze určit *střední hodnotu* a *kvadratickou fluktuaci* souřadnic, hybností i jiných dynamických veličin systému.

Proslulé *Heisenbergovy relace neurčitosti* pro polohu a hybnost tvrdí, že polohu a hybnost částice nelze měřit *současně* absolutně přesně. Čím přesněji určíme nějakou složku hybnosti částice, tím větší je fluktuace odpovídající souřadnice a naopak.

Anglický fyzik Dirac formuloval *obecnější pojetí kvantové mechaniky*, kdy prostor všech možných stavů systému je reprezentován abstraktním *separabilním Hilbertovým vektorovým prostorem*. Takový prostor tvoří např. všechny fyzikálně přijatelné vlnové funkce v dané reprezentaci. Jednotlivým stavům systému odpovídají nekolineární vektory z tohoto prostoru.

Dirac dále zavedl tzv. *bra-ketovou symboliku* (z angl. bracket = závorka), kdy výraz $\langle \varphi | \psi \rangle$ představuje skalární součin vektorů (stavů) $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$.

Otázky k procvičení a opakování

- 1) Napište konkrétní tvar monochromatických vlnových funkcí, splňujících de Broglieho vztahy. Jaké vlnové funkce nazýváme stacionárními?
- 2) Jaký stav reprezentují rovinné monochromatické de Broglieho vlny? Je tento stav fyzikálně realizovatelný? Proč?
- 3) Formulujte princip superpozice.
- 4) Co rozumíme x - a p -reprezentací v kvantové mechanice? Jaký je vztah mezi těmito reprezentacemi v jednorozměrném případě?
- 5) Formulujte první a druhý Bornův postulát. Vysvětlete jejich význam pro interpretaci vlnové funkce.
- 6) Jak lze ze známé vlnové funkce vypočítat střední hodnoty a střední kvadratické fluktuace dynamických veličin?
- 7) Formulujte slovně i matematickým vzorcem známé Heisenbergovy relace.
- 8) Jak zobecnil Dirac popis stavu kvantově mechanického systému? Jakou symboliku zavedl?



Korespondenční úkol č. 4

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na jednu z otázek kapitoly 4.1.



4.2. STACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE



Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- formulovat matematický tvar stacionární Schrödingerovy rovnice;
- objasnit fyzikální význam stacionární Schrödingerovy rovnice a jejích řešení;
- definovat energetické spektrum systému a vysvětlit jeho vztah k řešení stacionární Schrödingerovy rovnice;
- charakterizovat jednotlivé druhy energetických spekter;
- vysvětlit pojem degenerovaná energetická hladina a stupeň degenerace.



Pojmy k zapamatování:

Stacionární (bezčasová) Schrödingerovy rovnice, stacionární vlnová funkce, energetické spektrum, diskrétní spektrum, spojitě spektrum, smíšené spektrum, degenerovaná energetická hladina, stupeň degenerace.

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

2 hodiny

Stavy bodové částice s přesně zadanou energií reprezentujeme v poli časově nezávislého potenciálu *monochromatickými de Broglieho vlnami*. Ty popisujeme tzv. *stacionárními vlnovými funkcemi*

Stacionární
vlnová funkce.

$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\{-i\omega t\} = \Psi(\vec{r}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} Et\right\},$$

v nichž je separována závislost na prostorových proměnných od závislosti časové. Zatímco časová závislost je pro monochromatické de Broglieho vlny explicitně daná, prostorová část vlnové funkce $\Psi(\vec{r})$ se mění podle charakteru konkrétního potenciálu $V(\vec{r})$, pod jehož vlivem se částice nachází. V této kapitole si ukážeme, jak potenciál tvar prostorové části stacionární vlnové funkce ovlivňuje prostřednictvím tzv. *stacionární (bezčasové) Schrödingerovy rovnice*



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

Sestavení stacionární Schrödingerovy rovnice

Je jistě rozumné předpokládat, že de Broglieho vlny, stejně jako kterékoliv jiné vlnění, s nímž se ve fyzice setkáváme, splňují univerzální *vlnovou rovnici*

$$\Delta \psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0,$$

kde Δ je [Laplaceův operátor](#) a v_f fázová rychlost de Broglieho vln. Po dosazení stacionární vlnové funkce do této rovnice (a po snadných úpravách) získáme rovnici pro její prostorovou část

$$\Delta\Psi(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{v_f^2}\Psi(\vec{r}) = 0.$$

Tu můžeme dále upravit, uvědomíme-li si, že $\omega/v_f = k$, kde k je velikost vlnového vektoru de Broglieho vlny, a že podle [de Broglieho vztahů](#) zobecněných na případ částice v poli vnějšího potenciálu můžeme dále psát $k = p/\hbar$. Výše uvedená rovnice tedy nabývá tvaru

$$\Delta\Psi(\vec{r}) - \frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(\vec{r}) = 0.$$

V poli časově nezávislého potenciálu $V(\vec{r})$ se však zachovává celková energie částice E ,

$$\frac{p^2}{2M} + V(\vec{r}) = E = \text{konst.},$$

a pro kvadrát hybnosti částice můžeme tedy psát $p^2 = 2M[E - V(\vec{r})]$. Po dosazení tohoto výrazu do rovnice pro prostorovou část stacionární vlnové funkce získáme tak nakonec po jednoduchých úpravách proslulou **stacionární (bezčasovou) Schrödingerovu rovnici**

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



Energetické spektrum

Stacionární Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnicí druhého řádu. Musíme ji proto doplnit, jak víme z matematiky, *okrajovými podmínkami*. Teprve pak bude její řešení určeno víceméně jednoznačně.

Okrajové podmínky.

Společně se stacionární Schrödingerovou rovnicí vybírají okrajové podmínky ze všech klasicky přípustných energií systému jen některé, které jsou přípustné i v rámci kvantového popisu. To znamená, že reálný parametr E může nabývat ve výše uvedené rovnici pro konkrétní potenciál $V(\vec{r})$ jen některých vybraných hodnot. O množině těchto přípustných hodnot energie hovoříme zpravidla jako o *energetickém spektru* studovaného systému.

Energetické spektrum.

Jednorozměrná stacionární Schrödingerova rovnice

Provedeme-li výše uvedené úvahy pro *jednorozměrné stacionární vlnové funkce*, získáme postupem obdobným tomu, jaký jsme užili v obecném trojrozměrném případě, speciální tvar stacionární Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x),$$



který obvykle nazýváme *jednorozměrnou stacionární Schrödingerovou rovnicí*.

Sestavení stacionární Schrödingerovy rovnice.

Jednorozměrná Schrödingerova rovnice je velmi důležitá zejména z didaktických důvodů. Jedná se totiž o obyčejnou diferenciální rovnici, kterou je možno zpravidla řešit mnohem jednoduššími matematickými prostředky než odpovídající rovnici obecnou. Navíc pro mnohé trojrozměrné systémy umíme obecnou, trojrozměrnou stacionární Schrödingerovu rovnici převést na jednu či více rovnic jednorozměrných. O konkrétní postupech k tomu užívaných více v části věnované [jednoduchým kvantově-mechanickým systémům](#).

4.2.1. ENERGETICKÉ SPEKTRUM

Množinu všech energií přípustných v rámci kvantověmechanického popisu studovaného systému, tzv. *vlastních energií (energetických hladin)*, nazýváme *energetickým spektrem* systému.

Ze všech klasicky přípustných energií jsou vybírány *okrajovými podmínkami* pro [stacionární Schrödingerovu rovnici](#).

Diskrétní a spojitě energetické spektrum



Energie, pro něž jsou odpovídající stacionární vlnové funkce kvadraticky integrovatelné, nazveme *energiemi diskrétními*, nebo též *diskrétními energetickými hladinami*.

Kvadraticky integrovatelné vlnové funkce reprezentují realizovatelný stav studované částice, diskrétní energetické hladiny tedy odpovídají ostrým hodnotám energie, kterých může studovaný systém nabývat.

Diskrétních energií může být pro každý systém nejvýše spočetně mnoho a jsou navzájem odděleny konečnými intervaly energií zakázaných. Můžeme je tedy očíslovat pomocí celých čísel, která obvykle nazýváme *hlavními kvantovými čísly*. Množina všech diskrétních energií tvoří tzv. *diskrétní část energetického spektra* systému. V této části energetického spektra se může energie systému měnit jen skokem, je tedy kvantována. Stav s nejnižší energií se obvykle nazývá *základním stavem*, ostatní *stavy excitovanými*.

Všimněte si, že oproti [staré kvantové teorii](#) není kvantování energie v rámci kvantové mechaniky nezávislým postulátem, ale pouhým důsledkem [stacionární Schrödingerovy rovnice](#) a jí odpovídajících *okrajových podmínek* (které vyplývají z [prvního Bornova postulátu](#)).

Hlavní kvantová čísla.



Množinu energií odpovídajících vlnovým funkcím, které sice nejsou kvadraticky integrovatelné, a nerepresentují tedy žádný fyzikálně realizovatelný stav systému, ale nedivergují v nekonečno, nazveme *spojitou částí energetického spektra*.

Energie ze spojitě části spektra nemohou být studovaným systémem ostře nabývány. Vždy však můžeme zkonstruovat integrální lineární kombinace stacionárních vlnových funkcí odpovídajících jen málo odlišným energiím ze spojitě části energetického spektra. A takové lineární kombinace již realizovatelný stav systému reprezentovat mohou. Částice sice nebude mít v podobném stavu ostře definovanou energii, její kvantově-mechanické fluktuace však mohou být velmi malé a zaniknout popř. v experimentálních chybách. Nebudou proto měřitelné a energii systém můžeme s jistou mírou nepřesnosti považovat za (v rámci experimentálních chyb) „přesně“ danou.

O energetickém spektru, jehož spojitá část je prázdná, hovoříme jako o spektru *čistě diskrétním*. Naopak spektrum bez diskrétních energetických hladin nazveme spektrem *čistě spojitým*.



Příkladem systémů s čistě diskrétním spektrem mohou být *částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky*, *lineární harmonický oscilátor* a *tuhý rotátor*. Čistě spojitě spektrum má například *volná částice* a smíšené *energetické spektrum* nacházíme kupříkladu u *částice v potenciálové jámě konečné hloubky*.

Ortogonalita stacionárních vlnových funkcí

Prostorové části stacionárních vlnových funkcí Ψ_n a Ψ_m odpovídajících různým diskrétním energiím E_n a E_m ($E_n \neq E_m$) splňují následující relaci (ověřte pro *jednoduché kvantověmechanické systémy*)

$$\int_{\mathbf{R}^3} \Psi_n^*(\vec{r})\Psi_m(\vec{r})d^3\vec{r} = \int_{\mathbf{R}^3} \Psi_m^*(\vec{r})\Psi_n(\vec{r})d^3\vec{r} = 0.$$

Tu můžeme pomocí *bra-ketové symboliky* přepsat do formálně jednoduššího tvaru

$$\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0.$$

Protože však symbol $\langle | \rangle$ označuje současně i *skalární součin* na *stavovém prostoru* systému, interpretujeme výše uvedené formule jako vyjádření *ortogonalit stacionárních vlnových funkcí*. Snadno se totiž přesvědčíme, že v libovolném čase stejné relace splňují i stacionární vlnové funkce samotné, nejen jejich prostorové části.

Ortogonalita stacionárních vlnových funkcí

V případě systému s čistě diskrétním spektrem, jehož stacionární vlnové funkce jsou normovány k jedničce, můžeme proto pro libovolnou dvojici vlnových funkcí psát

$$\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \delta_{nm},$$

Kroneckerův symbol.

kde δ je *Kroneckerův symbol*.

Degenerace energetických hladin

Z homogenity *stacionární Schrödingerovy rovnice* i připojených *okrajových podmínek* vyplývá, že splňuje-li prostorová část stacionární vlnové funkce pro vybranou hodnotu energie z diskrétní či spojitě části energetického spektra stacionární Schrödingerovu rovnici a současně i odpovídající okrajovou podmínku, splňuje obé i její libovolný násobek.

Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice není tedy pro zadanou hodnotu energie určeno bezesbytku jednoznačně. Vždy totiž existuje volnost ve volbě multiplikatívního faktoru.

Jedná-li se o jedinou nejednoznačnost, nazveme odpovídající energii *nedegenerovanou*. Často též hovoříme o *nedegenerované energetické hladině*. Pokud ale naopak závisí pro danou energii řešení stacionární Schrödingerovy rovnice i na dalších volně nastavitelných konstantách, hovoříme o *energii degenerované* nebo též o *degenerované energetické hladině*.



Stupeň degenerace je dán dimenzí odpovídajícího podprostoru.

Poněkud přesnější popis degenerace energetické hladiny můžeme podat, uvědomíme-li si, že množina všech řešení stacionární Schrödingerovy rovnice tvoří pro vybranou energii z diskrétní či spojité části energetického spektra lineární vektorový podprostor. Je-li dimenze tohoto podprostoru rovna jedné, jedná se zřejmě o hladinu nedegenerovanou. Je-li naopak větší než jedna, je příslušná energetická hladina degenerovaná.

Příkladem systémů s nedegenerovanými energetickými hladinami mohou být částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky a lineární harmonický oscilátor. Naopak degenerované energetické hladiny má například volná částice. Tuhý rotátor má některé hladiny degenerované a jiné nikoliv.



Shrnutí kapitoly

Stacionární nebo také bezčasová Schrödingerova rovnice je základní kvantově-mechanickou rovnicí pro prostorovou část vlnové funkce, popisující stav systému s přesně danou energií E . Součástí stacionární Schrödingerovy rovnice je výraz pro potenciální energii systému $V(\vec{r})$.

Množina hodnot energií E , pro které je stacionární Schrödingerova rovnice řešitelná, tvoří *energetické spektrum* daného systému. Energetické spektrum může mít diskrétní i spojitou část. Podle toho, zda obsahuje pouze diskrétní část, pouze spojitou část nebo obě tyto části hovoříme o *čistě diskrétním spektru*, *čistě spojitým spektru* nebo *smíšeném spektru*.

Pro danou hodnotu energie E ze spektra energií může existovat (odhlédneme-li od vždy přítomné nejednoznačnosti v multiplikativním faktoru) jediné řešení Schrödingerovy rovnice (jediný stav s danou energií), nebo více lineárně nezávislých řešení (více různých stavů se stejnou energií). V prvním případě hovoříme o *nedegenerované energetické hladině*, ve druhém případě o *degenerované energetické hladině*, přičemž počet různých stavů se stejnou energií udává *stupeň degenerace* této energetické hladiny.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Formulujte z paměti stacionární Schrödingerovu rovnici. Uveďte význam jednotlivých symbolů.
- 2) Jakými pomocnými úvahami lze sestavit stacionární Schrödingerovu rovnici?
- 3) Jaký je fyzikální význam stacionární Schrödingerovy rovnice? Jak nazýváme vlnové funkce, které jsou jejím řešením?
- 4) Objasněte pojem energetické spektrum systému.
- 5) Uveďte, jaké druhy energetických spekter rozlišujeme a jak se od sebe liší. Uveďte příklady systémů s jednotlivými druhy spekter.
- 6) Vysvětlete, co znamená tzv. ortogonalita stacionárních vlnových funkcí.
- 7) Definujte pojem degenerovaná energetická hladina a stupeň degenerace?



Korespondenční úkol č. 5

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na jednu z otázek kapitoly 4.2.

4.3. NESTACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- formulovat matematický tvar nestacionární Schrödingerovy rovnice;
- objasnit fyzikální význam nestacionární Schrödingerovy rovnice;
- uvést podstatu metody řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice;
- vysvětlit pojem kvantový determinismus.



Pojmy k zapamatování:

Nestacionární (časová) Schrödingerova rovnice, rovnice kontinuity, hustota toku pravděpodobnosti, kvantový determinismus.



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

2 hodiny

Časový vývoj reprezentujeme v kvantové mechanice závislostí [vlnové funkce](#) na čase. Abychom dokázali v konkrétních případech tuto závislost určit, potřebujeme znát odpovídající evoluční rovnici. Rovnici, která by v rámci vlnového popisu částic nahradila pohybové rovnice klasické mechaniky.

Vlnění popisujeme, ať již se s ním setkáváme v nejrůznějších oblastech fyziky, obvykle vlnovou rovnicí. Pro potřeby kvantové mechaniky ji však musíme poněkud upravit, neboť vlnová rovnice samotná připouští jako svá řešení i v rámci kvantové mechaniky odmítnuté tvary stacionárních vlnových funkcí

$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Pohybová rovnice kvantové mechaniky musí brát v úvahu nejen [vlnový popis částic](#), ale i speciální tvar vlnových funkcí reprezentujících monochromatické de Broglieho vlny

$$\psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Je jí proslulá *nestacionární (časová) Schrödingerova rovnice*

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



Sestavení nestacionární Schrödingerovy rovnice

Podle [principu superpozice](#) můžeme libovolnou vlnovou funkci popisující fyzikálně realizovatelný stav systému zapsat jako lineární kombinaci stacionárních vlnových funkcí. Pro jednoduchost se omezme na jednočásticový systém s *čistě diskrétním a nedegenerovaným spektrem*. Pak můžeme psát

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n A_n \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right),$$

kde indexem n číslujeme jednotlivé diskretní energie E_n , symbolem Ψ_n označujeme prostorovou část stacionární vlnové funkce odpovídající energii E_n a A_n jsou komplexní konstanty. V pohybové rovnici se zřejmě budou vyskytovat derivace vlnové funkce podle času. Pro první z nich můžeme psát

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n A_n E_n \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right).$$

Prostorové části stacionárních funkcí však splňují [stacionární Schrödingerovu rovnici](#)

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi_n(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) = E_n \Psi_n(\vec{r}),$$

z níž můžeme do výrazu pro $\partial \psi / \partial t$ dosadit:

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n A_n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi_n(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) \right\} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right),$$

a získaný výraz ještě dále upravit do tvaru

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \left[\sum_n A_n \Psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \right] + V \left[\sum_n A_n \Psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \right] \right\}.$$

S použitím $\psi(\vec{r}, t) = \sum_n A_n \Psi_n(\vec{r}) \exp\left[-(i/\hbar) E_n t\right]$ a po formálních úpravách obdržíme takto nakonec *nestacionární (časovou) Schrödingerovu rovnici*



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

Na tomto místě je však nezbytné čtenáře upozornit, že výše nastíněný postup není odvozením nestacionární Schrödingerovy rovnice! Měl jen podat přijatelné argumenty k ní vedoucí a poukazující na její úzkou souvislost s principem superpozice a rovnicí stacionární. V rámci kvantové mechaniky je nestacionární Schrödingerova rovnice jedním ze základních postulátů.

Zajímavým důsledkem nestacionární Schrödingerovy rovnice je [rovnice kontinuity](#) pro hustotu pravděpodobnosti $|\psi|^2$.

Nestacionární Schrödingerova rovnice jako matematický problém

Nestacionární Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnicí prvního řádu v časové proměnné a druhého řádu v proměnných prostorových. Přítomnost parciálních derivací podle prostorových proměnných vyžaduje podobně jako v případě [stacionární Schrödingerovy rovnice](#) doplnění *okrajové podmínky*. Tou je pro vlnové funkce reprezentující fyzikálně realizovatelné stavy částice požadavek jejich kvadratické integrovatelnosti, $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} < +\infty$, který musí být

splněn v libovolném čase t .

Protože nestacionární Schrödingerova rovnice obsahuje navíc i derivaci časovou, musíme k podmínce okrajové přidat ještě *podmínku počáteční*. Ta vzhledem k tomu, že příslušná časová derivace je prvního řádu, nabývá tvaru

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \psi_0(\vec{r}),$$

kde t_0 je zvolený čas, který považujeme za počáteční, a $\psi_0(\vec{r})$ zadaná kvadraticky integrovatelná funkce reprezentující stav systému v tomto čase.

Nalezení řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice pro zadanou počáteční podmínku je v obecném případě velmi obtížný problém. Ten se ovšem významně zjednoduší, známe-li úplný systém řešení odpovídající rovnice stacionární. Z podrobného výpočtu kromě jiného vyplývá, že počáteční podmínka určuje vývoj vlnové funkce v budoucích časech jednoznačně.

Nestacionární Schrödingerova rovnice takto činí kvantovou mechaniku deterministickou. Vzhledem k [pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce](#) však hovoříme, kvůli odlišení od determinismu klasické mechaniky, o [determinismu kvantovém](#).

Kvantový
determinismus.

Jednorozměrná nestacionární Schrödingerova rovnice

V jednorozměrném případě lze způsobem obdobným tomu, který jsme nastínili výše, dospět k následujícímu tvaru nestacionární Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x, t)}{dx^2} + V(x) \psi(x, t).$$



4.3.1. ROVNICE KONTINUITY PRO HUSTOTU PRAVDĚPODOBNOSTI

Rovnice kontinuity

Pod *rovnici kontinuity* pro veličinu X, která je spojitě rozložená v prostoru s [prostorovou hustotou](#) $\rho(\vec{r}, t)$ a jejíž přemísťování v prostoru je popsáno [hustotou toku](#) $\vec{j}(\vec{r}, t)$, můžeme zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0,$$



kde div je operátor [divergence](#).

S rovnicí kontinuity se můžeme setkat v různých oborech fyziky, vždy je však její interpretace stejná - jedná se o *zákon zachování veličiny X*. Integrovaním obou stran rovnice kontinuity přes vybranou oblast prostoru V totiž získáme

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3\vec{r} = - \int_V \text{div} \vec{j} d^3\vec{r}$$

a po použití [Gaussovy-Ostrogradského věty](#), známé z vektorové analýzy, dále též

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3\vec{r} = - \oint_{\partial V} \vec{j} \cdot d\vec{S},$$

Gaussova –
Ostrogradského
věta

kde jsme symbolem ∂V označili hranici oblasti V. Vzhledem k obvykle volené orientaci elementu plochy $d\vec{S}$ ve směru vnější normály k hranici ∂V můžeme získaný integrální vztah popsat velmi názorně slovy:

Zákon zachování.

Časová změna množství veličiny X obsažené v oblasti V je rovna tomu, co do této oblasti přiteče nebo z ní odeče hraniční plochou.

To je ovšem formulace, kterou můžeme bezpochyby nazvat *zákonem zachování veličiny X* .

Rovnice kontinuity pro hustotu pravděpodobnosti

Ukažme si nyní, že rovnici kontinuity lze formulovat i pro hustotou pravděpodobnosti výskytu částice v zadaném bodě prostoru - $|\psi(\vec{r}, t)|^2$.

Vzhledem ke struktuře obecné rovnice kontinuity budeme potřebovat časovou derivaci

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

kde ψ^* označuje komplexně sdruženou funkci k vlnové funkci ψ . Z [nestacionární Schrödingerovy rovnice](#) ovšem plyne

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM} \Delta \psi + \frac{V}{i\hbar} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2iM} \Delta \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi^*,$$

což po dosazení a úpravách dává následující výraz pro časovou derivaci hustoty pravděpodobnosti $|\psi(\vec{r}, t)|^2$

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*).$$

Získaný vztah je dále možno upravit pomocí identity známé z vektorové analýzy, $f \Delta g = \text{div}(f \nabla g) - \nabla f \cdot \nabla g$, v níž jsme symbolem ∇ označili vektorový operátor [gradient](#), a obdržet tak *rovnici kontinuity* v obvyklém tvaru



$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \text{div} \left\{ \frac{\hbar}{2iM} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} = 0.$$

Jednorozměrná rovnice kontinuity pro hustotu pravděpodobnosti

Obdobným způsobem můžeme z [jednorozměrné nestacionární Schrödingerovy rovnice](#) získat odpovídající *jednorozměrnou rovnici kontinuity*

$$\frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\hbar}{2iM} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \right\} = 0.$$

Hustota toku pravděpodobnosti

Porovnáním s obecným tvarem rovnice kontinuity vidíme, že výraz



$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2iM} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*),$$

resp. v jednorozměrném případě výraz

$$j = \frac{\hbar}{2iM} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right),$$

musíme interpretovat jako *hustotu toku pravděpodobnosti*. Uvedené výrazy tedy popisují, jak se zmíněná pravděpodobnost přelévá během časového vývoje, určovaného nestacionární Schrödingerovou rovnicí, prostorem.

Za povšimnutí stojí fakt, že hustota toku pravděpodobnosti je reálná veličina, tj. že platí $\vec{j} = \vec{j}^*$, resp. v jednorozměrném případě $j = j^*$.



4.3.2. OBECNÉ ŘEŠENÍ NESTACIONÁRNÍ SCHRÖDINGEROVY ROVNICE

Čistě diskrétní spektrum

Podle principu superpozice můžeme vlnovou funkci popisující fyzikálně realizovatelný stav systému psát ve tvaru lineární kombinace vlnových funkcí stacionárních. V případě systému s čistě diskrétním spektrem proto platí

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,s} A_{n,s} \Psi_{n,s}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right),$$

kde vektorovým indexem $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_K)$ zohledňujeme možnou degeneraci jednotlivých energetických hladin systému. V případě nedegenerovaného spektra by se tento sčítací index ve výše uvedené sumě nevyskytoval.

Vzhledem k tomu, že princip superpozice byl vůdčí ideou při formulování nestacionární Schrödingerovy rovnice, musí jí nutně výše uvedená suma vyhovovat, což můžeme snadno ověřit prostým dosazením.

Lineární kombinace stacionárních vlnových funkcí proto zadává obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice systému s čistě diskrétním spektrem.



K jednoznačnému určení tohoto řešení musíme však najít zatím neznámé koeficienty $A_{n,s}$. Učiníme tak pomocí počáteční podmínky $\psi(\vec{r}, t_0) = \psi_0(\vec{r})$, v níž je $\psi_0(\vec{r})$ zadaná komplexní funkce. Musí tedy platit

$$\psi_0(\vec{r}) = \sum_{n,s} A_{n,s} \Psi_{n,s}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t_0\right).$$

K osamostatnění konstant $A_{n,s}$ využijeme ortogonality prostorových částí stacionárních vlnových funkcí, o nichž navíc budeme předpokládat, že jsou normalizovány k jedničce. S využitím bra-ketové symboliky můžeme proto psát $\langle \Psi_{m,q} | \Psi_{n,s} \rangle = \delta_{mn} \delta_{qs}$, kde δ_{qs} je zobecněné Kroneckerovo delta.

Zobecněné
Kroneckerovo delta.

Po vynásobení obou stran počáteční podmínky, kterou pomocí bra-ketové symboliky zapisujeme ve tvaru $|\psi_0\rangle = \sum_{n,s} A_{n,s} |\Psi_{n,s}\rangle \exp(-i/\hbar E_n t_0)$, zleva bra-vektorem $\langle \Psi_{m,q} |$ a s využitím ortogonality stacionárních vlnových funkcí získáme

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{m,q} | \psi_0 \rangle &= \sum_{n,s} A_{n,s} \langle \Psi_{m,q} | \Psi_{n,s} \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t_0\right) = \sum_{n,s} A_{n,s} \delta_{mn} \delta_{qs} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t_0\right) = \\ &= A_{m,q} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t_0\right)\end{aligned}$$

a dále též

$$A_{m,q} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_m t_0\right) \langle \Psi_{m,q} | \psi_0 \rangle \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_m t_0\right) \int_{\square^3} \Psi_{m,q}^*(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) d^3\vec{r}.$$



Pro zadanou počáteční podmínku $\psi_0(\vec{r})$ jsou tedy koeficienty $A_{m,q}$, a proto i vlnová funkce $\psi(\vec{r}, t)$, určeny jednoznačně.

Musíme však mít na paměti, že různé počáteční vlnové funkce, které se navzájem liší pouze nenulovým multiplikatívním faktorem, popisují počáteční stav systému stejně dobře. Podobná nejednoznačnost se pochopitelně přenáší i na obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice. Vybereme-li si však jednu ze všech možných ekvivalentních počátečních podmínek, bude již toto řešení určeno jednoznačně.

Snadným výpočtem dále zjistíme, že v každém čase platí

$$\int_{\square^3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \int_{\square^3} |\psi_0(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \sum_{n,s} |A_{n,s}|^2.$$



Normalizace vlnové funkce, která splňuje nestacionární Schrödingerovu rovnici, se tedy s časem nemění.

Čistě spojité spektrum

Pro systém s čistě spojitém spektrem je možno podle principu superpozice psát obecnou kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{\mathcal{S}} \sum_s A_{E,s} \Psi_{E,s}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) dE,$$

kde integrujeme přes množinu všech spojitéch energií a vektorovým indexem s zohledňujeme možnou degeneraci jednotlivých energetických hladin.

I právě uvedená integrální lineární kombinace splňuje nestacionární Schrödingerovu rovnici, a zadává tedy její obecné řešení.

Neznámé koeficienty $A_{E,s}$ získáme pomocí počáteční podmínky

$$\psi_0(\vec{r}) = \int_{\mathcal{S}} \sum_s A_{E,s} \Psi_{E,s}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et_0\right) dE,$$

z níž lze vhodným postupem, přesahujícím však rámec tohoto textu, získat při vhodné „normalizaci“ $\Psi_{E,s}$

$$A_{E,s} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et_0\right) \int_{\square^3} \Psi_{E,s}^*(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) d^3\vec{r}.$$

4.3.3. KVANTOVÝ DETERMINISMUS

Je kvantová mechanika teorií deterministickou? Zdá se, že nikoliv. Zatímco klasická mechanika hovoří přesnou řečí čísel reprezentujících hodnoty různých měřitelných veličin, mechanika kvantová dává jen „nepřesné“, pravděpodobnostní předpovědi. Podívejme se na tento problém podrobněji.

Klasický determinismus

Stav soustavy hmotných bodů zadáváme v klasické mechanice jejich souřadnicemi a rychlostmi a jejich časový vývoj popisujeme např. Newtonovými pohybovými rovnicemi. Zadáme-li stav soustavy hmotných bodů ve zvoleném počátečním čase, tj. zadáme-li v tomto čase polohy a rychlosti všech částic, můžeme, alespoň teoreticky, pomocí Newtonových pohybových rovnic určit jednoznačně též stav soustavy (polohy a rychlosti částic) v libovolném čase budoucím.

Uvedený fakt, často zobecnovaný na celou klasickou fyziku, se obvykle nazývá *klasickým determinismem*. Jeho zhuštěnou a velmi efektní formou je Laplaceův výrok, že bude-li mít k dispozici počáteční polohy a rychlosti všech částic ve vesmíru, bude schopen předpovědět jednoznačně jeho budoucnost.

Klasický determinismus a jeho meze.

Meze klasického determinismu

Ve skutečnosti naráží ovšem klasický determinismus, a to i v rámci samotné klasické mechaniky, na nepřekonatelné meze. Především přesná předpověď budoucnosti vyžaduje přesné zadání počátečního stavu. To je ovšem, jako každá jiná experimentální procedura, zatíženo experimentálními chybami. Ačkoliv klasická fyzika věří, že je možno tyto chyby neomezeně minimalizovat, moderní *teorie dynamických systémů* ukazuje, že někdy i zanedbatelně malé chyby mohou vést k nepředvídatelnému chování systému v budoucnosti.

Druhé omezení spočívá v matematické náročnosti řešení klasických pohybových rovnic. I dnešní výkonné superpočítače umožňují, s přijatelnými výpočetními náklady, numerickou integraci klasických pohybových rovnic soustav, které obsahují maximálně několik tisíc částic, a to ještě navíc pouze pro reálné časové úseky v rozmezí 10^{-10} – 10^{-8} s. Klasická předpověď může být proto v důsledku technických komplikací i pro velmi malé makroskopické systémy (kapka vody) prakticky nedosažitelná.

Zobecněný determinismus

Pojmu *determinismus* však můžeme dát i poněkud volnější obsah. Pod deterministickou můžeme rozumět, v zobecněném slova smyslu, i takovou teorii, která pro zadaný počáteční stav systému umožňuje určit jednoznačně jeho stav v libovolném čase budoucím. Přitom však blíže nespecifikujeme míru informace o systému, která je v zadání stavu obsažena. *Deterministická teorie* musí potom splňovat následující dvě podmínky:

Deterministická teorie.

- v rámci této teorie je definována procedura, jejíž pomocí můžeme jednoznačně definovat stav studovaného systému,
- je formulována pohybová rovnice, která umožňuje k zadanému počátečnímu stavu určit jednoznačně stavy budoucí.

Kvantový determinismus

Ve výše uvedeném zobecněném smyslu je kvantová mechanika teorií deterministickou. V jejím rámci umíme popsat stav studovaného systému pomocí vlnové funkce i zformulovat pohybovou rovnici, nestacionární Schrödingerovu rovnici, jejíž řešení je pro zadanou počáteční podmínku určeno jednoznačně.

Kvantová
mechanika je
deterministická.

Míra informace obsažené ve vlnové funkci pochopitelně neobstojí ve srovnání s mírou informace klasické. Polohy i rychlosti částic nemůžeme měřit neomezeně přesně. V důsledku Heisenbergových relací neurčitosti platí, že čím přesněji změříme polohy jednotlivých částic, tím méně přesně můžeme změřit jejich rychlosti a naopak.

Informace vyžadovaná klasickou mechanikou je v rámci mechaniky kvantové poskytována pouze v pravděpodobnostní, statistické formě, což může vést k představě kvantové mechaniky jako teorie indeterministické. Vzhledem k výše řečenému je však takový pohled poněkud nespravedlivý. V rámci klasických požadavků, které jsou však i klasickou fyzikou nesplnitelné, jistě kvantová mechanika indeterministická je. V zobecněném slova smyslu se však jedná o dokonalou deterministickou teorii.



Shrnutí kapitoly

Nestacionární nebo také *časová Schrödingerova rovnice* je základní rovnicí kvantové mechaniky. Popisuje časový vývoj kvantového systému.

Z nestacionární Schrödingerovy rovnice lze odvodit *rovnici kontinuity* pro hustotu pravděpodobnosti $|\psi(\vec{r}, t)|^2$. V této rovnici figuruje veličina

$\vec{j} = \frac{\hbar}{2iM} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$, zvaná *hustota toku pravděpodobnosti*, která ukazuje, jak se přelévá prostorem pravděpodobnost výskytu částice v jednotlivých bodech.

Pro zadanou počáteční a okrajovou podmínku je nestacionární Schrödingerova rovnice jednoznačně řešitelná. Mluvíme o tzv. kvantovém determinismu.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Formulujte nestacionární Schrödingerovu rovnici. Jaký je její význam?
- 2) Jakými úvahami lze tuto rovnici sestavit (nikoliv odvodit!)?
- 3) Vysvětlete podrobně, co vyjadřuje obecná rovnice kontinuity? Jaký má tvar?
- 4) Jak lze z nestacionární Schrödingerovy rovnice odvodit rovnici kontinuity? Pro jakou veličinu?
- 5) Co je to kvantový determinismus? Co má společného a čím se liší od klasického determinismu?
- 6) Jak souvisí problém determinismu kvantové mechaniky s nestacionární Schrödingerovu rovnicí?



Korespondenční úkol č. 6

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na jednu z otázek kapitoly 4.3.

4.4. KORESPONDENCE MEZI KLASICKOU A KVANTOVOU MECHANIKOU

Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- objasnit vztah mezi kvantovou a klasickou mechanikou;
- odvodit druhý Newtonův pohybový zákon z nestacionární Schrödingerovy rovnice pro jednu částici.



Pojmy k zapamatování:

kvaziklasické přiblížení, střední hodnota veličiny, nestacionární Schrödingerova rovnice, 2. Newtonův pohybový zákon.



Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

1 hodina

Existuje vztah mezi klasickým a kvantovým popisem?

Klasická a kvantová mechanika jsou na první pohled naprosto odlišné teorie, a to jak svou matematickou strukturou, tak i fyzikálními představami.

Tak např. stav jednočásticového systému popisujeme v rámci klasické mechaniky uspořádanou šesticí reálných čísel (poloha a hybnost) a pohybové rovnice jsou obvykle psány jako obyčejné diferenciální rovnice (Newtonovy pohybové rovnice).

V mechanice kvantové popisuje stav částice, pokud odhlédneme od časové závislosti, komplexní funkce tří reálných proměnných (*vlňová funkce*) a časový vývoj se řídí parciální diferenciální rovnicí (známou *nestacionární Schrödingerovou rovnicí*).

Na druhé straně však tušíme, že mezi oběma teoriemi musí existovat úzký vztah. Naše zkušenosti s vývojem fyziky totiž naznačují, že nová, přesnější teorie zpravidla zahrnuje i teorii starší jako své více či méně přesné přiblížení. Jistě tomu tak bude i s kvantovou a klasickou mechanikou. Zatímco pro určité systémy (např. atomy) musíme použít, chceme-li obdržet kvantitativně spolehlivou předpověď, model kvantový, bude pro jiné (např. sluneční soustava) přijatelný jak model kvantový, tak i klasický. A tehdy musí oba modely poskytovat velmi blízká experimentálně verifikovatelná data.

V tzv. *kvaziklasickém přiblížení* lze ukázat, že klasická mechanika je přiblížením kvantové mechaniky nultého řádu v mocninách Planckovy konstanty. Přesněji, že jedna z pohybových rovnic klasické mechaniky, tzv. rovnice Hamiltonova-Jacobiho, je nultým přiblížením nestacionární Schrödingerovy rovnice. V této kapitole se soustředíme na jinou formu hledané souvislosti: na to, jak z nestacionární Schrödingerovy rovnice vyplývají pohybové rovnice Newtonovy. Pro jednoduchost se omezíme na jednočásticový systém.

Kvaziklasické přiblížení.

2. Newtonův zákon

Údaje měřené
v klasické fyzice
odpovídají
kvantově-
mechanickým
středním hodnotám.

V kvantové mechanice nemohou souřadnice polohy a hybnosti bodové částice nabývat ostře definovaných hodnot. To, co obvykle v rámci klasického popisu jako polohu či hybnost částice označujeme, jsou ve skutečnosti střední hodnoty těchto veličin.

Tak například pod polohou částice v čase t ve stavu popsaném normalizovanou vlnovou funkcí ψ rozumíme

$$\bar{\vec{r}}(t) = \int_{\square^3} \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}.$$

Vzhledem k časové závislosti vlnové funkce závisí na čase i odpovídající střední hodnota. V rámci klasické interpretace to znamená, že se částice pohybuje prostorem, přičemž okamžitá (střední) rychlost tohoto pohybu je zřejmě dána první časovou derivací (střední) polohy, $\bar{\vec{v}}(t) \equiv d\bar{\vec{r}}(t)/dt$, což po dosazení dává

Střední hodnota
rychlosti.

$$\bar{\vec{v}}(t) = \frac{d}{dt} \int_{\square^3} \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \int_{\square^3} \vec{r} \frac{\partial |\psi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} d^3\vec{r} = \int_{\square^3} \vec{r} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) d^3\vec{r},$$

kde hvězdičkou označujeme komplexní sdružení.

Časová závislost vlnové funkce ψ však reprezentuje kvantově-mechanický vývoj systému, samotná vlnová funkce musí tedy splňovat nestacionární Schrödingerovu rovnici. Do výrazu pro rychlost proto můžeme za časové derivace ψ a ψ^* z této rovnice dosadit

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2iM} \Delta \psi + \frac{V}{i\hbar} \psi \quad \text{a} \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2iM} \Delta \psi^* - \frac{V}{i\hbar} \psi^*$$

a získat tak po úpravách vztah

$$\bar{\vec{v}} \equiv \frac{d\bar{\vec{r}}}{dt} = \frac{\hbar}{iM} \int_{\square^3} \psi^* \nabla \psi d^3\vec{r} = -\frac{i\hbar}{M} \int_{\square^3} \psi^* \nabla \psi d^3\vec{r},$$

v němž symbolem ∇ označujeme vektorový operátor *gradient*.

K formulaci druhého Newtonova zákona však potřebujeme znát zrychlení částice. Získaný vztah proto musíme derivovat ještě jednou

Střední hodnota
zrychlení.

$$\bar{\vec{a}} \equiv \frac{d\bar{\vec{v}}}{dt} = -\frac{i\hbar}{M} \frac{d}{dt} \int_{\square^3} \psi^* \nabla \psi d^3\vec{r} = -\frac{i\hbar}{M} \int_{\square^3} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla \psi + \psi^* \nabla \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d^3\vec{r}.$$

Po opětovém dosazení z nestacionární Schrödingerovy rovnice a po úpravách obdobných těm, které jsme provedli výše, získáme



$$M \bar{\vec{a}} = \int_{\square^3} \psi^* [-\nabla V(\vec{r})] \psi d^3\vec{r}.$$

Výraz na pravé straně poslední rovnosti můžeme i bez velké představivosti interpretovat jako střední hodnotu záporně vzatého gradientu potenciálu, v němž se studovaná částice pohybuje, nebo též jako *střední hodnotu působící síly*. Získaný vztah můžeme proto číst takto:

Součin hmotnosti částice a jejího středního zrychlení je roven střední hodnotě působící síly.



To ovšem velmi připomíná tvrzení, které je obsahem 2. Newtonova zákona - jednoho ze základních postulátů klasické mechaniky. Nyní jsme jej však obdrželi jako důsledek pohybové rovnice mechaniky kvantové, jako důsledek nestacionární Schrödingerovy rovnice.

Ještě zřetelnější souvislost s klasickým popisem vidíme, bude-li mít částice v zadaném stavu ostře lokalizovanou polohu. Tehdy odpovídající vlnovou funkci reprezentujeme *vlnovým balíkem*, pochopitelně normovaným k jedničce. Integrand na pravé straně poslední získané rovnosti je v tomto případě nenulový pouze na malém okolí střední hodnoty polohy $\bar{\vec{r}}$ a při výpočtu příslušného integrálu můžeme použít větu o střední hodnotě

Vlnový balík.

$$\int_{\Omega^3} \psi^* (-\nabla V(\vec{r})) \psi d^3\vec{r} \approx (-\nabla V(\bar{\vec{r}})) \int_{\Omega^3} \psi^* \psi d^3\vec{r}.$$

Kvantovou verzi 2. Newtonova zákona můžeme proto s ohledem na normování vlnové funkce ψ přepsat pro silně lokalizovaný vlnový balík do tvaru

$$M \bar{\vec{a}} \approx -\nabla V(\bar{\vec{r}}),$$

což je až na zanedbatelné nepřesnosti, které se objevily v důsledku aplikace věty o střední hodnotě, 2. Newtonův zákon ve své klasické podobě.

Shrnutí kapitoly

Kvantová teorie není popřením klasické fyziky, nýbrž jejím rozšířením. Pro běžné makroskopické systémy (např. kapku vody nebo planety) dávají oba přístupy v podstatě stejné výsledky. Kvantování energie a dalších veličin je u makroobjektů tak jemné, že je nelze vůbec pozorovat.

V klasické fyzice měříme *střední hodnoty* hybností, souřadnic a ostatních veličin. Pro jednu částici se dá z nestacionární kvantové teorie odvodit klasický *Newtonův druhý pohybový zákon* (pro střední hodnoty zrychlení a působící síly). Obdobné odvození lze provést i pro obecnější systémy.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Jaký je vztah mezi klasickou a kvantovou teorií? Je kvantová teorie popřením klasické fyziky?
- 2) Vysvětlete rozpor mezi možností současného měření polohy a hybnosti částice v klasické fyzice a nemožností téhož v kvantové mechanice.
- 3) Odvoďte druhý Newtonův zákon z nestacionární Schrödingerovy rovnice pro jednu částici.



Korespondenční úkol č. 7

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na otázku č. 2 kapitoly 4.4.



4.5. JEDNODUCHÉ KVANTOVĚ-MECHANICKÉ SYSTÉMY



Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- provést kvantově-mechanický rozbor problému volné částice;
- provést kvantově-mechanický rozbor problému částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě nekonečné hloubky;
- provést kvantově-mechanický rozbor problému částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě konečné hloubky;
- provést kvantově-mechanický rozbor lineárního harmonického oscilátoru;
- provést kvantově-mechanický rozbor tuhého rotátoru rovinného a prostorového;
- provést kvantově-mechanický rozbor průchodu částice jednorozměrnou obecnou a pravoúhlou potenciálovou bariérou.



Pojmy k zapamatování:

potenciální energie, stacionární stav, energetické spektrum, časový vývoj, volná částice, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma nekonečné hloubky, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky, lineární harmonický oscilátor, tuhý rotátor rovinný, tuhý rotátor prostorový, jednorozměrná potenciálová bariéra, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová bariéra.

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

3 hodiny

Matematická struktura kvantové teorie je velmi komplikovaná. Proto je možno rozřešit v analyticky uzavřeném tvaru jen některé nejjednodušší problémy. Pro naprostou většinu alespoň částečně realistických modelů je zapotřebí použít *přibližných metod* nebo řešení provést numericky.

Mezi nejvýznamnější modelové systémy, pro něž je možno řešit [stacionární](#) a [nestacionární Schrödingerovu rovnici](#) jednoduchými matematickými prostředky, patří

- [volná částice](#),
- [jedorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma nekonečné hloubky](#),
- [jedorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky](#),
- [lineární harmonický oscilátor](#),
- [tuhý rotátor](#),
- [jedorozměrná potenciálová bariéra](#),
- [jedorozměrná pravoúhlá potenciálová bariéra](#).

Jednoduché
kvantově-
mechanické
modelové systémy.

4.5.1. VOLNÁ ČÁSTICE

Potenciál

Volnou částicí rozumíme částici, na kterou nepůsobí žádné síly. Ve Schrödingerově rovnici můžeme proto považovat potenciál vnějších sil za nulový, tj. $V = 0$.



Stacionární stavy

Stacionární Schrödingerovu rovnici pro volnou částici o hmotnosti M

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi = E\psi$$



řešíme pomocí separace proměnných. Z podrobného řešení vyplývá, že stacionární vlnové funkce můžeme pro volnou částici psát ve tvaru

$$\psi = A \exp\left[i(k_x x + k_y y + k_z z)\right],$$



kde A je (obecně komplexní) konstanta a vektor $\vec{k} = [k_x, k_y, k_z]$ splňuje podmínku

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}.$$

Nemají-li vlnové funkce divergovat v nekonečno, jsou přípustné pouze nezáporné energie, $E \geq 0$. Výše uvedené vlnové funkce nejsou však kvadraticky integrovatelné a neodpovídají tedy žádnému fyzikálně realizovatelnému stavu.

Diskrétní část energetického spektra volné částice je proto prázdná a nezáporné energie patří k části spojité.



Až na základní ($E = 0$) je každá z energetických hladin degenerovaná, neboť konkrétní volbě energie odpovídá nespočetně mnoho vlnových funkcí zadaných vektory \vec{k} , které splňují podmínku $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 2ME/\hbar^2$.

Výše uvedené stacionární vlnové funkce odpovídají prostorovým částem de Broglieho rovinných monochromatických vln. Vektor \vec{k} je tedy vlnovým vektorem a podle de Broglieho vztahů souvisí s hybností studované částice prostřednictvím vztahu $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Získané stacionární vlnové funkce odpovídají (nerealizovatelným) stavům volné částice s přesně definovanou hybností.

Časový vývoj

Z řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice pro systémy s čistě spojitém spektrem pro volnou částici vyplývá, že časový vývoj vlnové funkce φ , kterou je možno v počátečním čase t_0 psát ve tvaru

$$\varphi(\vec{r}, t_0) = \int_{\square^3} \Phi(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3\vec{k},$$

je dán vztahem

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int_{\square^3} \Phi(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] d^3\vec{k},$$

kde

De Broglieho úhlová
frekvence.

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2M}$$

je de Broglieho úhlová frekvence přiřazená volné částici s ostře definovanou energií E .

Je-li funkce Φ nenulová pouze na malém okolí pevně zvoleného vlnového vektoru \vec{k}_0 , popisuje výše uvedený integrál šíření tzv. *vlnového balíku* prostorem.

4.5.2. JEDNOROZMĚRNÁ PRAVOÚHLÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA NEKONEČNÉ HLOUBKY

Potenciál

Jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma nekonečné hloubky odpovídá modelovému potenciálu

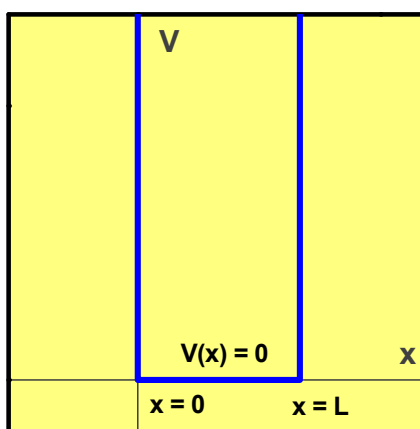


$$V(x) = 0, \quad x \in (0, L),$$

$$V(x) = +\infty, \quad x \notin (0, L).$$

Částice pohybující se v poli tohoto potenciálu bude zřejmě „uvězněná“ na úsečce $(0, L)$. Volba nulové hladiny potenciálu i umístění jámy na ose x jsou pochopitelně ponechány na naší libovůli a fyzikálně relevantní výsledky na nich nezávisí. Typický průběh pravoúhlého potenciálu nekonečné hloubky je znázorněn na obrázku.

Průběh potenciálu
jednorozměrné
pravoúhlé



V poli tohoto potenciálu budeme studovat stacionární stavy a pohyb jediné částice, jejíž hmotnost označme M .

Stacionární stavy

Z podrobného řešení [stacionární Schrödingerovy rovnice](#) je plyne, že

[energetické spektrum](#) částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky je *čistě diskrétní* a *nedegenerované*. Příпустné hodnoty celkové energie jsou dány vztahem

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2M} n^2,$$

kde n je přirozené číslo.

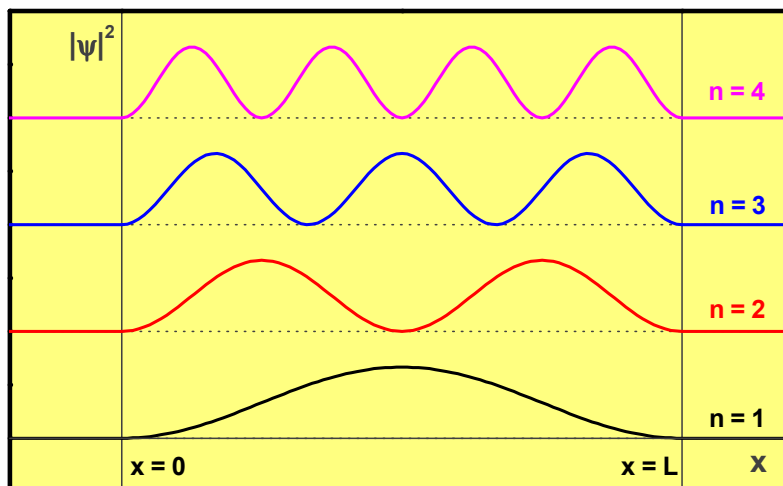


Těmto energiím odpovídají až na multiplikativní konstantu jednoznačně určené vlastní vlnové funkce

$$\psi_n(x) = B \sin\left(\sqrt{\frac{2ME_n}{\hbar^2}} \frac{x}{L}\right) \quad \text{pro } x \in (0, L),$$

$$\psi_n(x) = 0 \quad \text{pro } x \notin (0, L).$$

Průběh kvadrátů jejich modulů $|\psi_n(x)|^2$ znázorňuje pro různé volby kvantového čísla n připojený obrázek.



Průběh hustoty pravděpodobnosti výskytu částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě nekonečné hloubky pro vybrané stacionární stavy.

Časový vývoj

Z podrobného řešení [nestacionární Schrödingerovy rovnice](#) pro systémy s čistě diskrétním spektrem pro částici v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě vyplývá, že časový vývoj vlnové funkce φ , kterou je možno v počátečním čase t_0 psát ve tvaru

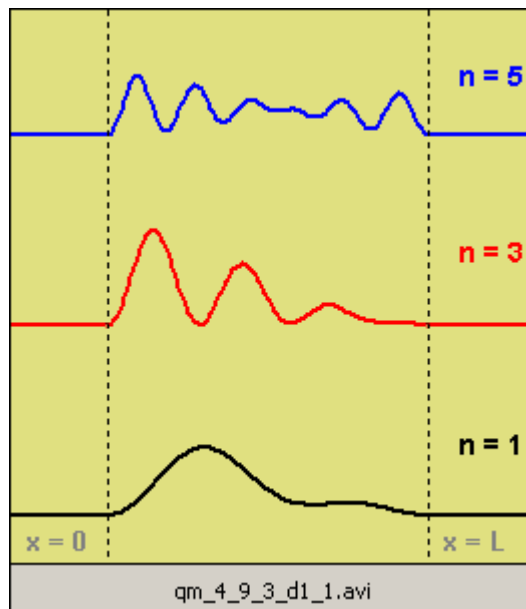
$$\varphi(x, t_0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \psi_n(x),$$

je dán formulí

$$\varphi(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right] \psi_n(x),$$

kde E_n a ψ_n jsou výše uvedené vlastní energie a odpovídající vlastní vlnové funkce.

Časový vývoj
hustoty
pravděpodobnosti
výskytu částice
v jednorozměrné
pravoúhlé
potenciálové jámě
nekonečné hloubky
pro vybrané
stacionární stavy.



4.5.3. PRAVOÚHLÁ POTENCIÁLOVÁ JÁMA KONEČNÉ HLOUBKY

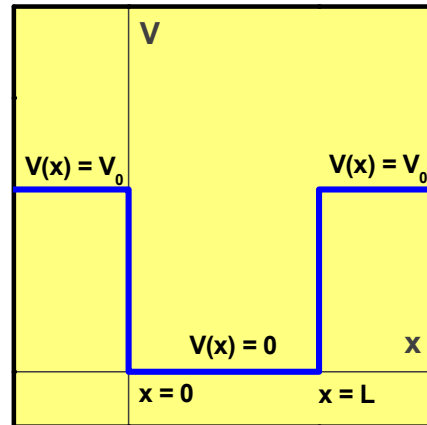
Potenciál

Jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky odpovídá modelovému potenciálu



$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & x \in (0, L), \\ V(x) &= V_0, & x \notin (0, L), \end{aligned}$$

kde V_0 je kladná konstanta. Volba nulové hladiny potenciálu i umístění jámy na ose x jsou pochopitelně ponechány na naší libovůli a fyzikálně relevantní výsledky na nich nezávisí. Typický průběh pravoúhlého potenciálu konečné hloubky je znázorněn na obrázku.



Průběh potenciálu
jednorozměrné
pravoúhlé
potenciálové jámy
konečné hloubky.

V poli tohoto potenciálu budeme studovat stacionární stavy a pohyb jediné částice, jejíž hmotnost označme M .

Stacionární stavy

Z podrobného řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro studovaný systém plyne, že

energetické spektrum částice v jednorozměrné potenciálové jámě konečné hloubky sestává z *diskrétní* a *spojité* části.



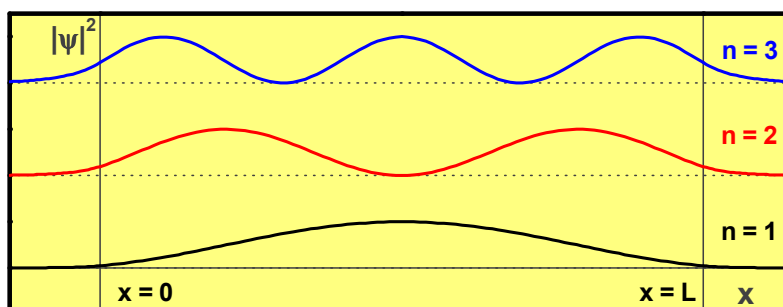
Diskrétní energetické hladiny jsou *nedegenerované* a na intervalu $(0, V_0)$ jsou určeny rovnicemi

$$\left[\operatorname{tg}(ka) - \frac{\kappa}{k} \right] = 0, \quad \left[\operatorname{tg}(ka) + \frac{k}{\kappa} \right] = 0,$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2M(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}.$$

Tyto rovnice nejsou analyticky řešitelné, můžeme je však řešit numericky nebo graficky. Průběhy kvadrátů modulů vybraných stacionárních vlnových funkcí znázorňuje obrázek.



Průběh hustoty
pravděpodobnosti
výskytu částice
v jednorozměrné
pravoúhlé
potenciálové jámě
konečné hloubky
pro vybrané
stacionární stavy.



Spojité část energetického spektra studovaného systému odpovídá intervalu energií $(V_0, +\infty)$. Každá energie patřící ke spojité části energetického spektra je dvakrát *degenerovaná*.

Pro libovolnou energii $E > V_0$ můžeme totiž vždy najít dvě nezávislá řešení stacionární Schrödingerovy rovnice ψ_E^+ a ψ_E^- , která sice nejsou kvadraticky integrovatelná, nedivergují však v nekonečno. Tato řešení odpovídají, zhruba řečeno, částici nalétávající na jámu zleva, resp. zprava.

Časový vývoj

Známe-li stacionární stavy systému, můžeme *nestacionární Schrödingerovu rovnici* řešit *standardním způsobem*.

V následujícím se omezíme na vlnové funkce, které je možno získat jako lineární kombinaci stacionárních vlnových funkcí příslušejících diskretním energetickým hladinám. Tyto vlnové funkce reprezentují *vázané stavy částice* a jejich časový vývoj je zadán formulí

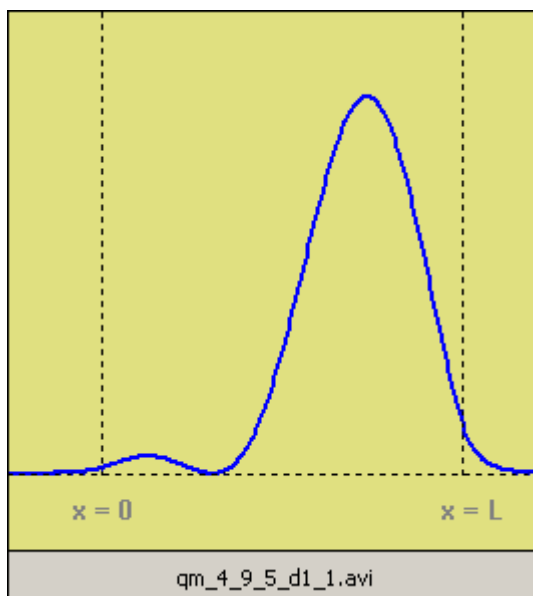
$$\varphi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right],$$

kde E_n a ψ_n jsou příslušné diskretní energie a jim odpovídající stacionární vlnové funkce a koeficienty c_n jsou jednoznačně určeny z počáteční podmínky

$$\varphi(x, t_0) = \sum_n c_n \psi_n(x).$$

Jako ilustraci výše uvedené formule uvádíme animaci časového vývoje kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce $\varphi(x, t)$, která je v počátečním čase t_0 dána superpozicí základního a prvního excitovaného stavu částice v potenciálové jámě konečné hloubky.

Časový vývoj
hustoty
pravděpodobnosti
výskytu částice
v jednorozměrné
pravoúhlé
potenciálové jámě
konečné hloubky
pro vybraný stav (viz
text).



Časový vývoj vlnových funkcí, které konstruujeme v nějakém počátečním čase t_0 jako integrální lineární kombinaci vlnových funkcí příslušejících ke spojitým energetickým hladinám

$$\varphi(x, t_0) = \int_{V_0}^{+\infty} (a_E \psi_E^+ + b_E \psi_E^-) dE,$$

je dán formulí

$$\varphi(x, t) = \int_{V_0}^{+\infty} (a_E \psi_E^+ + b_E \psi_E^-) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0)\right] dE.$$

4.5.4. LINEÁRNÍ HARMONICKÝ OSCILÁTOR

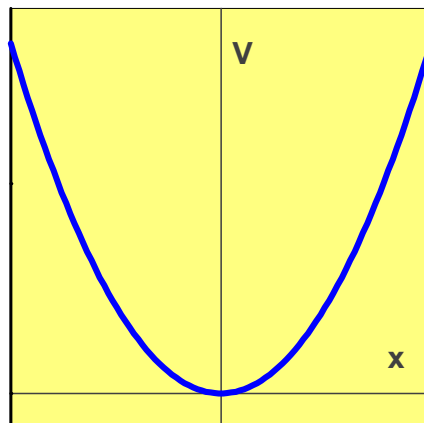
Potenciál

Lineární harmonický oscilátor je modelový systém zahrnující částici vázanou na přímku, která se nachází v poli sil popsaných potenciálem

$$V(x) = \frac{1}{2} \gamma x^2,$$



kde γ je kladná konstanta. Typický průběh potenciálu V znázorňuje obrázek.



Průběh potenciálu lineárního harmonického oscilátoru.

Tento model je ve fyzice mimořádně významný a užitečný, protože malé kmity naprosté většiny reálných systémů kolem jejich rovnovážných poloh je možno s dostatečnou přesností popsat právě pomocí kvadratického potenciálu.

V poli tohoto potenciálu budeme studovat stacionární stavy a pohyb jediné částice, jejíž hmotnost označme M .

Stacionární stavy

Z podrobného řešení [stacionární Schrödingerovy rovnice](#) pro studovaný systém vyplývá, že

[energetické spektrum](#) lineárního harmonického oscilátoru je čistě *diskrétní* a *nedegenerované*. Příпустné hodnoty celkové energie jsou dány vztahem

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega,$$


kde $\omega = \sqrt{\gamma/M}$ je, podobně jako v klasickém případě, úhlová frekvence oscilátoru a kvantové číslo n nabývá nezáporných celočíselných hodnot.

Těmto energiím odpovídají až na multiplikační konstantu jednoznačně určené vlastní vlnové funkce, které je možno po normalizaci k jedničce psát ve tvaru

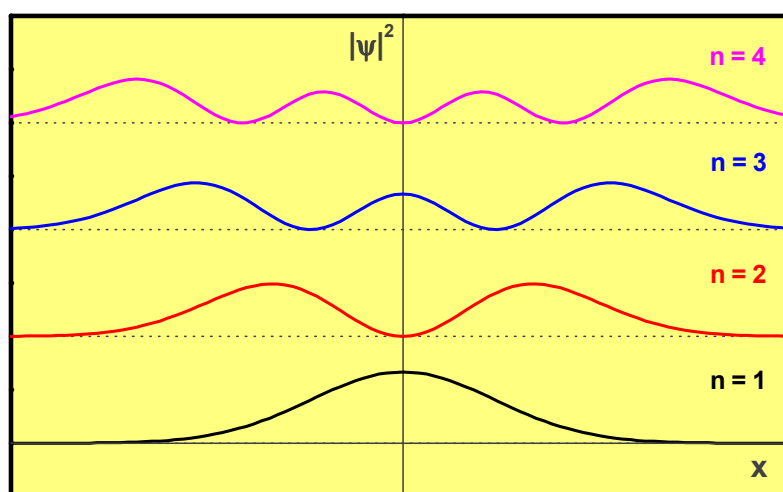


$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{M\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

Hermiteovy
polynomy.

Symbolem $H_n(z)$ označujeme *Hermiteův polynom* n -tého stupně. Průběh kvadrátů modulů vlnových funkcí $|\psi_n(x)|^2$ znázorňuje pro vybrané volby kvantového čísla n následující obrázek.

Průběh hustoty
pravděpodobnosti
výskytu částice u
lineárního
harmonického
oscilátoru pro
vybrané stacionární
stavy.



Časový vývoj

Z podrobného řešení *nestacionární Schrödingerovy rovnice* pro systémy s čistě diskrétním spektrem pro lineární harmonický oscilátor vyplývá, že časový vývoj vlnové funkce φ , pro kterou je možno v počátečním čase t_0 psát

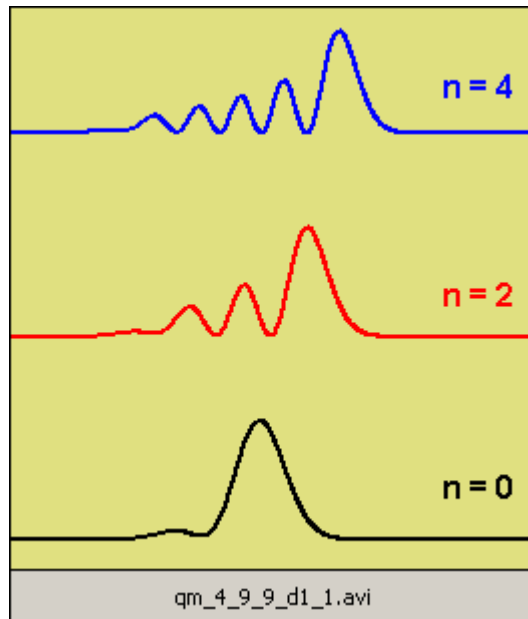
$$\varphi(x, t_0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \psi_n(x),$$

je dán formulí

$$\varphi(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right] \psi_n(x),$$

kde E_n a ψ_n jsou výše uvedené vlastní energie a odpovídající vlastní vlnové funkce lineárního harmonického oscilátoru.

Jako ilustraci uvedené formule znázorňuje připojená animace časový vývoj $|\varphi(x, t)|^2$ pro vlnové funkce, které jsou v počátečním čase t_0 dány superpozicí dvou sousedních stacionárních stavů, $\varphi(x, t_0) = \psi_n(x) + \psi_{n+1}(x)$.



Časový vývoj hustoty pravděpodobnosti výskytu částice u lineárního harmonického oscilátoru pro vybrané stavy (viz text).

4.5.5. TUHÝ ROTÁTOR

Pod *tuhým rotátorem* rozumíme hmotný bod o hmotnosti M pohybující se v neměnné vzdálenosti kolem počátku souřadnicové soustavy.



Nahradíme-li hmotnost M redukovanou hmotností, můžeme tento model použít v nezměněné formě i při popisu rotace soustavy dvou hmotných bodů kolem společného těžiště, během níž se jejich vzájemná vzdálenost nemění. Model tuhého rotátoru se dá snadno rozšířit i na obecnou tuhou soustavu lineárně uspořádaných hmotných bodů.

V rámci klasické mechaniky je pohyb tuhého rotátoru rovinný. Přestože v mechanice kvantové podobné omezení neplatí, řešíme a porovnáváme níže pro názornost oba případy – *rovinný* i obecný, *prostorový tuhý rotátor*.

Rovinný tuhý rotátor - stacionární stavy

Rovinu pohybu rotátoru můžeme bez újmy na obecnosti ztotožnit se souřadnicovou rovinou (x,y) . Vzhledem k symetrii problému je výhodné v této rovině přejít do *polárních souřadnic*, kdy *Laplaceův operátor* nabývá tvaru

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Laplaceův operátor v polárních souřadnicích.

Protože je vzdálenost studovaného hmotného bodu od počátku souřadnicové soustavy konstantní, nebude na ní vlnová funkce Ψ systému záviset, $\Psi = \Psi(\varphi)$. Derivace podle r můžeme tedy ve výše uvedeném výrazu pro *Laplaceův operátor* zanedbat. *Stacionární Schrödingerova rovnice* nabývá takto tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} = E\Psi.$$

Z jejího podrobného řešení vyplývá, že

energetické spektrum rovinného rotátoru je *čistě diskrétní*:





$$E_l = \frac{\hbar^2 l^2}{2Mr^2}.$$

Kvantové číslo l nabývá nezáporných celočíselných hodnot.

Odpovídající vlastní vlnové funkce je možno pro $l \neq 0$ psát jako lineární kombinace dvou nezávislých řešení výše uvedené Schrödingerovy rovnice $\Psi_l^+(\varphi) = \exp(il\varphi)$ a $\Psi_l^-(\varphi) = \exp(-il\varphi)$. Pro $l = 0$ degenerují tato dvě řešení v jediné $\Psi_0(\varphi) = \text{konst.}$



Spektrum rovinného tuhého rotátoru je tedy navíc, s výjimkou základní hladiny, *degenerované*

Rovinný tuhý rotátor - časový vývoj

Z podrobného řešení *nestacionární Schrödingerovy rovnice* pro systémy s čistě diskretním spektrem pro rovinný tuhý rotátor vyplývá, že časový vývoj vlnové funkce Φ , kterou je možno v počátečním čase t_0 psát ve tvaru

$$\Phi(\varphi, t_0) = A_0 + \sum_{l=1}^{+\infty} [A_l \Psi_l^+(\varphi) + B_l \Psi_l^-(\varphi)],$$

je dán formulí

$$\Phi(\varphi, t) = A_0 + \sum_{l=1}^{+\infty} [A_l \Psi_l^+(\varphi) + B_l \Psi_l^-(\varphi)] \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_l (t - t_0)\right],$$

kde E_l a Ψ_l jsou výše uvedené vlastní energie a odpovídající vlastní funkce.

Prostorový tuhý rotátor - stacionární stavy

V případě prostorového rotátoru je výhodné využít jeho sférické symetrie a přejít do *sférických souřadnic*, v nichž *Laplaceův operátor* nabývá

Laplaceův operátor
ve sférických
souřadnicích.

$$\text{tvaru } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot g(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Všimněme si, že úhlová část Laplaceova operátoru připomíná *operátor kvadrátu momentu hybnosti* vyjádřený ve sférických souřadnicích

Operátor kvadrátu
momentu hybnosti.

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

Vlnová funkce systému opět nezávisí na vzdálenosti od počátku, která je podle definice tuhého rotátoru neměnná a hraje tedy roli konstantního parametru, $\Psi = \Psi(\theta, \varphi)$, a *Stacionární Schrödingerova rovnice* nabývá proto tvaru



$$\frac{1}{2Mr^2} \hat{L}^2 \Psi = E\Psi \text{ neboli } \hat{L}^2 \Psi = 2Mr^2 E\Psi.$$

Stacionární vlnové funkce prostorového tuhého rotátoru odpovídají *vlastním funkcím operátoru kvadrátu momentu hybnosti*, které jsou obvykle



reprezentovány *funkcemi kulovými*, $\Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$, kde l je nezáporné celé číslo a $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Odpovídající vlastní energie získáme z výrazu pro *vlastní hodnoty kvadrátu momentu hybnosti*

$$2Mr^2 E_l = l(l+1)\hbar^2.$$

Spektrum prostorového tuhého rotátoru je tedy *čistě diskrétní* a kromě základní energetické hladiny *degenerované*. Každé vlastní energii E_l odpovídá totiž celkem $2l+1$ nezávislých vlnových funkcí.

Prostorový tuhý rotátor - časový vývoj

Z *podrobného řešení* nestacionární Schrödingerovy rovnice pro systémy s čistě diskrétním spektrem vyplývá pro tuhý rotátor, že časový vývoj vlnové funkce Φ , kterou je možno v počátečním čase t_0 psát ve tvaru

$$\Phi(\theta, \varphi, t_0) = \sum_{l=1}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

je dán formulí

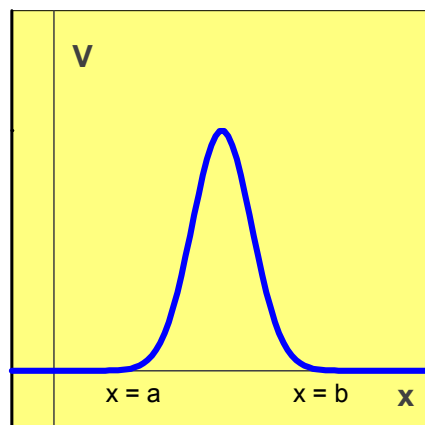
$$\Phi(\theta, \varphi, t) = \sum_{l=1}^{+\infty} \left\{ \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \right\} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_l (t - t_0) \right],$$

kde E_l a Ψ_{lm} jsou výše uvedené vlastní energie a odpovídající vlastní vlnové funkce.

4.5.6. JEDNOROZMĚRNÁ POTENCIÁLOVÁ BARIÉRA

Potenciál

Typický potenciál zadávající *jednorozměrnou bariéru* je znázorněn na obrázku.



Typický průběh potenciálu jednorozměrné potenciálové bariéry.

Má tyto charakteristické rysy:

je nenulový jen na omezené oblasti osy x (zde interval (a, b)), vně této oblasti je nulový, na zadané oblasti je kladný a má na ní právě jedno lokální maximum a žádné lokální minimum.

Řešená úloha

Budeme studovat částici pohybující se v poli potenciálu reprezentujícího jednorozměrnou potenciálovou bariéru. Ve zvoleném počátečním čase umístíme částici vlevo od bariéry do (libovolného) bodu, v němž je potenciál nulový, a udělíme jí nenulovou rychlost orientovanou směrem k bariéře. Zajímáme se zejména o to, zda částici nalezneme v dostatečně vzdálené budoucnosti, kdy se již opět pohybuje mimo dosah potenciálu, vlevo či vpravo od bariéry.

Klasický popis

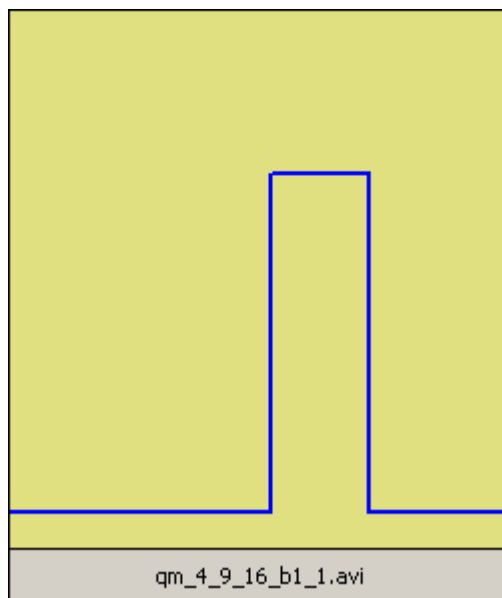
Řešení výše uvedené úlohy můžeme v rámci klasické mechaniky najít poměrně snadno například pomocí zákona zachování energie

Zákon zachování energie.

$$\frac{1}{2}Mv^2 + V(x) = \frac{1}{2}Mv_0^2,$$

kde M je hmotnost částice, x a v její poloha a rychlost a v_0 rychlost počáteční. Charakter pohybu částice pochopitelně závisí na její počáteční rychlosti v_0 , a tedy i celkové energii $E = 1/2Mv_0^2$. Typické situace ilustruje pro dvě rozdílné počáteční podmínky $E < V_0$ a $E > V_0$ (V_0 je výška potenciálové bariéry) pro jednoduchou pravoúhlou bariéru připojená animace:

Simulace průletu částice potenciálovou bariérou – klasický popis.



Z této animace i z výše uvedené rovnice jsou zřejmé následující závěry:



částice s energií E menší než V_0 se od bariéry vždy odrazí,
částice s energií větší než V_0 bariérou vždy prochází.

Kvantový popis

V rámci kvantové mechaniky není chování částice tak jednoznačné jako v případě klasickém.

Bez ohledu na svou energii může částice s jistou pravděpodobností bariérou projít a s jinou pravděpodobností se od ní odrazí. Speciálně může dojít k průchodu bariérou i v případě, kdy klasická fyzika předpovídá odraz (*tunelový jev*), a



naopak částice se může od bariéry odrazit i v případě, kdy klasický popis připouští pouze průchod.

Pravděpodobnosti průchodu bariérou a odrazu od ní jsou přímo měřitelné veličiny. Jsou definovány takto: Označme N celkový počet částic o energii E , které byly proti bariéře vyslány. Dále necht' N_R označuje počet částic, které se od bariéry odrazily, a N_T počet částic bariérou prošlých. Předpokládáme ovšem, že během interakce s bariérou žádné částice nezanikají ani nové nevznikají, tj. $N = N_R + N_T$. *Pravděpodobnost průchodu částice bariérou* P_R a *pravděpodobnost jejího odrazu od bariéry* P_T pak definujeme

$$\text{vztahy } P_R = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N_R}{N} \text{ a } P_T = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N_T}{N}.$$

Vzhledem k zachování počtu částic platí $P_R + P_T = 1$.

Pravděpodobnost průchodu částice bariérou či odrazu od ní je tedy nutno chápat statisticky jako veličinu měřenou na základě velkého množství identických pokusů provedených s identickými částicemi.

Pravděpodobnost průchodu částice bariérou.



V některých z těchto pokusů částice bariérou procházejí, v jiných se od ní odrážejí. Vždy ale nastává jen jedna z obou možností! Pokud například v konkrétním pokusu najdeme částici za bariérou, nemohla se tatáž částice současně od bariéry odrazit a nemůžeme ji tedy najít před bariérou. A naopak, nalezneme-li částici v konkrétním pokusu před bariérou, nemohla tatáž částice bariérou projít. Viz též připojená animace.

Pravděpodobnosti P_R a P_T závisejí na energii částice E i na parametrech charakterizujících potenciálovou bariéru. Konkrétní závislosti je možno získat pro zadaný potenciál řešením odpovídající *stacionární Schrödingerovy rovnice*. Jako ilustraci tohoto postupu uvádíme příklad *pravoúhlé potenciálové bariéry*. **JEDNOROZMĚRNÁ PRAVOÚHLÁ POTENCIÁLOVÁ BARIÉRA**

Potenciál

Jednorozměrná pravoúhlá potenciálová bariéra odpovídá modelovému potenciálu

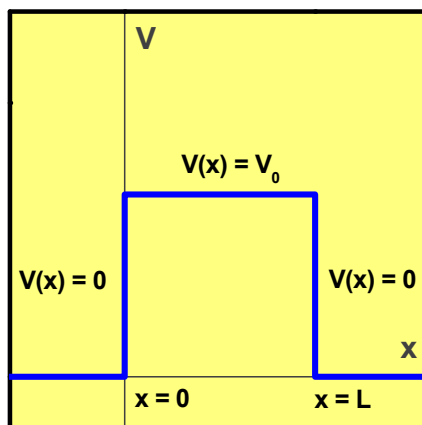
$$V(x) = V_0, \quad x \in (0, L),$$

$$V(x) = 0, \quad x \notin (0, L),$$



kde V_0 je kladná konstanta. Typický průběh pravoúhlé potenciálové bariéry je znázorněn na obrázku.

Průběh potenciálu
jednorozměrné
pravoúhlé bariéry.



Řešená úloha

Hustota toku částic.

Pro částici s danou energií E hledáme pravděpodobnosti průniku výše zadanou bariérou a odrazu od ní. Jak je popsáno [na jiném místě](#), měření těchto pravděpodobností můžeme uspořádat následujícím způsobem: Bariéru ozařujeme zleva ustáleným proudem částic, jemuž odpovídající [hustotu toku](#)^{*} označíme symbolem j . Některé z částic, které dopadnou na bariéru, se od ní odrazí, jiné bariérou projdou. Odraženým částicím odpovídá jistá stacionární hustota toku, kterou označíme j_R . Částicím prošlým bariérou pak přiřadíme hustotu toku j_T . Z orientace směru pohybu dopadajících, odražených a prošlých částic plyne: $j > 0$, $j_R < 0$ a $j_T > 0$.

Pravděpodobnosti odrazu a průchodu bariérou pak můžeme určit ze vztahů

Pravděpodobnost
odrazu a průchodu
částice bariérou.

$$P_R = \left| \frac{j_R}{j} \right| = -\frac{j_R}{j} \quad \text{a} \quad P_T = \left| \frac{j_T}{j} \right| = \frac{j_T}{j}.$$

Podle *definice* počítáme totiž například pravděpodobnost odrazu P_R jako $\lim_{N \rightarrow +\infty} N_R/N$. Vzhledem ke stacionárnímu uspořádání dopadne na bariéru za čas t celkem $N = |j|t$ částic a za stejný čas se od bariéry odrazí $N_R = |j_R|t$ částic. Limitní přechod $N \rightarrow +\infty$ odpovídá zřejmě přechodu $t \rightarrow +\infty$. Proto můžeme psát

$$P_R = \lim_{t \rightarrow +\infty} \left| \frac{j_R t}{j t} \right| = \lim_{t \rightarrow +\infty} \left| \frac{j_R}{j} \right| = \left| \frac{j_R}{j} \right|.$$

Podobné úvahy můžeme provést, a získat tak odpovídající vztah, i pro pravděpodobnost průchodu P_T .

Výše popsany experiment má stacionární uspořádání a navíc požadujeme, aby částice dopadající na bariéru měly zadanou energii. Hlubší analýza, která však zcela překračuje rámec našeho výkladu, ukazuje, že [hustoty toků](#)

Průchod
potenciálu
bariérou
jako sta

* Pod hustotou toku částic v zadaném bodě rozumíme počet částic, které projdou detektorem umístěným v tomto bodě za jednotku času. Toto číslo navíc opatříme znaménkem. Pokud se částice pohybují v kladném směru, přiřadíme toku kladné znaménko a naopak.

pravděpodobnosti odpovídající stacionárním vlnovým funkcím je možno ztotožnit s výše zavedenými hustotami toků částic. Přímou se proto nabízí možnost hledat pravděpodobnosti P_R a P_T pomocí stacionární Schrödingerovy rovnice.

Odraz od pravoúhlé potenciálové bariéry - řešení pomocí stacionární Schrödingerovy rovnice

Jako ilustraci toho, jak se stacionární Schrödingerova rovnice používá při nalezení pravděpodobností průchodu a odrazu částic od pravoúhlé potenciálové bariéry, si uveďme výsledky plynoucí pro částice, jejichž energie E je menší než výška bariéry V_0 .

Z podrobného řešení pro částici o hmotnosti M nacházející se v poli výše uvedeného potenciálu vyplývá, že stacionární vlnové funkce nabývají pro zadanou energii $E < V_0$ tvaru

$$\psi(x) = A_I \exp(ikx) + B_I \exp(-ikx) \quad \text{pro } x \in (-\infty, 0),$$

$$\psi(x) = A_{II} \exp(\kappa x) + B_{II} \exp(-\kappa x) \quad \text{pro } x \in (0, L),$$

$$\psi(x) = A_{III} \exp(ikx) + B_{III} \exp(-ikx) \quad \text{pro } x \in (0, +\infty),$$

Stacionární vlnové funkce pro jednorozměrnou potenciálovou bariéru.

kde $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ a $\kappa = \sqrt{2M(V_0 - E)/\hbar^2}$.

Vlnovým funkcím tohoto tvaru odpovídají hustoty toků pravděpodobnosti

$$j_I = \frac{\hbar k}{M} (|A_I|^2 - |B_I|^2) \quad \text{pro } x \in (-\infty, 0),$$

$$j_{III} = \frac{\hbar k}{M} (|A_{III}|^2 - |B_{III}|^2) \quad \text{pro } x \in (0, +\infty).$$

Vlevo od bariéry je hustota toku dána součtem příspěvků odpovídajících dopadajícím a odraženým částicím:

$$j = (\hbar k/M) |A_I|^2 \quad \text{a} \quad j_R = -(\hbar k/M) |B_I|^2.$$

Vpravo od bariéry se mohou podle zadání nacházet pouze částice prošlé. Jim zřejmě odpovídá tok $j_T = (\hbar k/M) |A_{III}|^2$. V této oblasti se naopak nemohou nacházet žádné částice pohybující se v opačném směru. Proto musíme položit

$$B_{III} = 0.$$

Pro pravděpodobnosti průchodu částice pravoúhlou bariérou a odrazu od ní takto získáme

$$P_R \equiv \left| \frac{j_R}{j} \right| = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 \quad \text{a} \quad P_T \equiv \left| \frac{j_T}{j} \right| = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2.$$

Konstanty A_I , B_I a A_{III} nejsou ovšem navzájem nezávislé. Z podrobné analýzy vyplývá, že např. konstanty B_I a A_{III} jsou násobky konstanty A_I , kde příslušné multiplikační faktory závisejí pouze na energii E a parametrech zadávajících

potenciálovou bariéru. Konečné formule pro pravděpodobnosti odrazu a průchodu částice studovanou bariérou můžeme psát ve tvaru

$$P_R = 1 - 16 \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \frac{1}{\Delta^2} \quad \text{a} \quad P_T = 16 \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \frac{1}{\Delta^2},$$

kde

$$\Delta = \det \begin{pmatrix} 1 - i \frac{\kappa}{k} & 1 + i \frac{\kappa}{k} \\ \left[1 + i \frac{\kappa}{k} \right] \exp(\kappa L) & \left[1 - i \frac{\kappa}{k} \right] \exp(-\kappa L) \end{pmatrix}.$$

Explicitní vyjádření pravděpodobnosti odrazu a průchodu částice jednorozměrnou pravoúhlou bariérou.

Σ

Shrnutí kapitoly

Řešení nestacionární i stacionární Schrödingerovy rovnice je obecně obtížným úkolem. Pro některé tzv. jednoduché kvantové systémy přesto lze nalézt řešení relativně snadno, někdy dokonce v analytickém tvaru. Navíc jsou tyto systémy důležitými modelovými systémy a základní rysy jejich řešení lze použít i pro složitější systémy.

Mezi jednoduché kvantové systémy patří: *volná částice, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma nekonečné hloubky, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky, lineární harmonický oscilátor, tuhý rotátor rovinný i prostorový a jednorozměrná obecná a pravoúhlá potenciálová bariéra.*

U každého z uvedených systémů nás zajímá především: průběh potenciální energie $V(\vec{r})$, tvar stacionárních vlnových funkcí a energetické spektrum (řešení stacionární Schrödingerovy rovnice) a časový vývoj (řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice).

Otázky k procvičení a opakování

- 1) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému volné částice.
- 2) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě nekonečné hloubky.
- 3) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě konečné hloubky.
- 4) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému částice lineárního harmonického oscilátoru.
- 5) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému tuhého rotátoru rovinného a prostorového.
- 6) Zrekapitulujte základní poznatky z kvantově-mechanického rozboru problému průchodu částice jednorozměrnou obecnou a pravoúhlou potenciálovou bariérou.

Zaměřte se zejména na průběh potenciální energie, tvar stacionárních vlnových funkcí, energetické spektrum a časový vývoj uvedených systémů.

**Korespondenční úkol č. 8**

Vypočítejte pravděpodobnost průchodu elektronu o energii $E < V_0$ pravoúhlou potenciálovou bariérou výšky V_0 . Hodnoty E a V_0 volte libovolně, nejlépe několik elektronvoltů.



4.6. MODERNÍ FORMULACE KVANTOVÉ MECHANIKY



Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- objasnit podstatu Dirakovy moderní formulace kvantové mechaniky;
- formulovat Dirakovy kvantovací podmínky a princip korespondence;
- uvést explicitní tvar operátorů základních dynamických veličin;
- formulovat přesně pomocí operátorové symboliky relace neurčitosti a pojem nekompatibility dvou veličin.



Pojmy k zapamatování:

dynamická proměnná, samosdružený operátor, bra-ketová symbolika, Dirakovy kvantovací podmínky, Poissonovy závorky, komutátor, princip korespondence, Hamiltonův operátor, relace neurčitosti, kompatibilní a nekompatibilní veličiny, Robertsonův vztah.

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

2 hodiny

Dynamické proměnné



Pod *dynamickými proměnnými* (pozorovatelnými) rozumíme veličiny charakterizující stav studovaného systému (poloha, hybnost, energie atd.) V kvantové mechanice je reprezentujeme *samosdruženými operátory*.

Proč samosdružené operátory - inspirující příklad

Podle *prvního Bornova postulátu* počítáme *střední hodnotu k-té souřadnice polohy* bodové částice, $k = 1, 2$ a 3 , ve stavu popsaném *vlnovou funkcí* ψ podle vztahu

$$\bar{x}_k = \int_{\square^3} x_k |\psi|^2 d^3\vec{r} = \int_{\square^3} \psi^* x_k \psi d^3\vec{r}.$$

Pomocí *bra-ketové symboliky* je možno tento vztah dále přepsat do formálně jednoduššího tvaru

$$\bar{x}_k = \langle \psi | \hat{X}_k \psi \rangle,$$

v němž jsme zavedli *operátor* \hat{X}_k , který působí na vlnovou funkci tak, že násobí její funkční hodnoty nezávislou proměnnou x_k , $\hat{X}_k |\psi\rangle \equiv |\hat{X}_k \psi\rangle = x_k |\psi\rangle$. Tento operátor je definován na *stavovém prostoru* studovaného systému (množině všech kvadraticky integrovatelných funkcí), který je, jak je uvedeno na *jiném místě*, *prostorem Hilbertovým*.

Operátor \hat{X}_k je tedy operátorem na Hilbertově prostoru stavů studovaného systému. Snadno ověříme, že se jedná o operátor lineární, který má navíc některé speciální vlastnosti. Platí totiž

$$\langle \varphi | \hat{X}_k \psi \rangle \equiv \int_{\square^3} \varphi^* (x_k \psi) d^3 \vec{r} = \int_{\square^3} (x_k \varphi^*) \psi d^3 \vec{r} \equiv \langle \hat{X}_k \varphi | \psi \rangle$$

\hat{X}_k je tedy operátorem symetrickým a podrobnější analýza, která však přesahuje rámec našeho výkladu, vede dokonce k závěru, že se jedná dokonce o operátor samosdružený.



Podobnou úvahu, jakou jsme právě provedli pro polohu studované částice, můžeme provést i pro její hybnost. Na jiném místě je ukázáno, že střední hodnotu k -té složky hybnosti částice ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ můžeme určit ze vztahu

$$\bar{p}_k \equiv M v_k = \int_{\square^3} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \right) d^3 \vec{r},$$

což je možno přepsat pomocí bra-ketové symboliky do tvaru

$$\bar{p}_k = \langle \psi | \hat{P}_k \psi \rangle,$$

Polohu a hybnost lze reprezentovat samosdruženými operátory.

kde jsme zavedli operátor $\hat{P}_k \equiv -i\hbar \partial / \partial x_k$. Tento operátor je rovněž lineární a samosdružený.



Podrobnější analýza však opět přesahuje rámec této práce, ačkoliv ověření samotné symetrie není nikterak komplikované (pro jednoduchost je provádíme jen v jednorozměrném případě):

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{P} \psi \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{d\psi}{dx} dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\varphi^*}{dx} \psi - \varphi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx = \\ &= -i\hbar [\varphi^* \psi]_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \frac{d\varphi^*}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \left(-i\hbar \frac{d\varphi^*}{dx} \right)^* dx = \langle \hat{P} \varphi | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Zde vzhledem ke kvadratické integrovatelnosti vlnových funkcí φ a ψ pokládáme $[\varphi^* \psi]_{-\infty}^{+\infty} = 0$.

Reprezentace dynamických proměnných operátory

Anglický fyzik P. Dirac, zcela jistě inspirován závěry podobnými těm, k nimž jsme dospěli ve výše uvedeném příkladu, navrhl,

aby dynamické proměnné byly v rámci kvantové teorie reprezentovány samosdruženými operátory působícími na stavovém prostoru studovaného systému.



Na samosdruženost těchto operátorů ukazují zřetelně výše nastíněné úvahy, sama má však ještě další, hlubší význam. Dirac totiž předpokládal,



že vlastní hodnoty operátorů odpovídajících dynamickým proměnným reprezentují přípustné, měřitelné hodnoty těchto dynamických proměnných, jichž může systém nabývat.

Samosdružené operátory mají reálné vlastní hodnoty.

Ty jsou ovšem vždy reálné, a proto ze zřejmých důvodů požadujeme, aby takové byly i zmíněné vlastní hodnoty. A právě samosdružené operátory nabývají pouze reálných vlastních hodnot.

Metodu, jak konkrétním dynamickým proměnným přiřadit kvantově-mechanické operátory, shrnul Dirac do svých proslulých kvantovacích podmínek. Jejich pomocí je pak možno zkonstruovat víceméně přijatelným způsobem operátory všech významných dynamických veličin - např. polohy a hybnosti, energie či momentu hybnosti. V rámci operátorové verze kvantové mechaniky je možno zobecnit výpočet středních hodnot a středních fluktuací dynamických proměnných v zadaném stavu, jakož i formulaci obecných relací neurčitosti.

Dirakovo uvedení Hilbertových prostorů a operátorů na nich do formalismu kvantové teorie bylo vůbec na přelomu dvacátých a třicátých let 20. století mocným impulzem pro její další rozvoj. A to jak v rozvíjení teorie samotné, tak i v konkrétních aplikacích.

Poznámka

S Dirakovým operátorovým formalismem je možno seznámit se v jeho vynikající původní učebnici či v monografii Formánkové. Zde jsme se museli nutně omezit jen na vybraná základní fakta a závěry. Pro úplnost je však nutno uvést, že Dirakem navržené postupy nejsou matematicky zcela korektní. Zejména reprezentace vlastních hodnot a vlastních vektorů operátorů se spojitým spektrem přináší s sebou nemalé potíže. Proto se brzy po publikování Dirakových idejí objevilo jejich matematicky přesné zpracování. V konkrétních výpočtech však fyzikové téměř bezvýtku používají byť ne zcela korektní, formálně však podstatně jednodušší Dirakův formalismus. Získané výsledky jsou vždy v dokonalém souladu s experimentem.

Dirakův formalismus není matematicky zcela korektní, výhodou je jeho jednoduchost.

4.6.1. DIRAKOVY KVANTOVACÍ PODMÍNKY

Podle anglického fyzika Diraka přiřazujeme v rámci kvantové mechaniky dynamickým proměnným samosdružené operátory působící na stavovém prostoru systému. Předpis, jak to udělat, udávají následující dva postuláty.

Nechť C je dynamická proměnná definovaná prostřednictvím jiných dynamických proměnných A a B vztahem

$$C = \{A, B\}_p,$$

kde $\{A, B\}_p$ jsou tzv. Poissonovy závorky známé z klasické mechaniky. Nechť jsou dále dynamickým proměnným A a B přiřazeny samosdružené operátory \hat{A} a \hat{B} . Pak proměnné C odpovídá operátor \hat{C} definovaný vztahem

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{C},$$

kde $[\hat{A}, \hat{B}]$ označuje tzv. komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B} .

Dirakovy kvantovací podmínky.

Proč se na pravé straně rovnosti $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \hat{C}$ vyskytuje multiplikativní faktor $i\hbar$?

Z definice [Poissonových závorek](#) a z rozměrové analýzy plyne především, že rozměr proměnné C je dán podílem součinu rozměrů veličin A a B a součinu rozměrů hybnosti a souřadnice. Ten je ovšem J.s (Joule krát sekunda) a na pravé straně operátorové relace musí tedy nutně stát multiplikativní konstanta stejného rozměru – tedy J.s. Ukázalo se, že takovou vhodnou konstantou je „škrtnutá“ [konstanta Planckova](#). Vzhledem k samosdruženosti operátorů \hat{A} , \hat{B} i \hat{C} musí být tato konstanta navíc ryze imaginární.

Poissonovy závorky.

Princip korespondence

Samotné Dirakovy kvantovací podmínky k jednoznačnému přiřazení operátorů jednotlivým dynamickým proměnným nestačí. Proto se k nim zpravidla připojuje další postulát - *princip korespondence*.

Nechť je dynamická proměnná C funkcí dynamických proměnných A_1, \dots, A_K , $C = f(A_1, \dots, A_K)$. Pak jí v rámci kvantové teorie přiřadíme operátor $\hat{C} = f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_K)$, kde $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_K$ jsou operátory přiřazené dynamickým proměnným A_1, \dots, A_K .

Princip korespondence.

Výše uvedená funkce f obvykle reprezentuje algebraický výraz v proměnných A_1, \dots, A_K . K jeho převedení do operátorové formy užíváme definic [algebraických operací](#) pro operátory. Ty můžeme pomocí McLaurinova rozvoje využít i k nalezení obecnějších [operátorových funkcí](#).

Potíže při použití principu korespondence může působit fakt, že násobení operátorů není obecně komutativní. Pak totiž velmi záleží na pořadí činitelů v operátorových součinech. Jejich uspořádání musí být tedy v konkrétních případech vhodně zvoleno (tak, aby teorie byla vnitřně bezesporná a její výsledky souhlasily s experimentem) a lze na ně pohlížet jako na dodatečný postulát.

Operátory dynamických proměnných jsou funkcemi operátorů souřadnic a hybností.

Každou dynamickou proměnnou je možno vyjádřit jako funkci zobecněných souřadnic a hybností studovaného systému. Proto operátory přiřazené dynamickým proměnným můžeme vždy psát jako funkce operátorů přiřazených [souřadnicím a hybnostem](#). Dirakových kvantovacích podmínek proto musíme nejdříve využít právě k nalezení těchto, v jistém smyslu základních, operátorů. Jejich pomocí a s využitím principu korespondence pak již relativně snadno nalezneme operátory všech dalších dynamických proměnných. Mezi jinými i těch, které hrají v rámci klasické i kvantové mechaniky velmi významnou roli - [energie](#) a [momentu hybnosti](#).

4.6.2. POLOHA A HYBNOST

Na základě úvah souvisejících s výpočty středních hodnot se přiřazují souřadnicím polohy x_k a hybnosti p_k bodové částice [samosdružené operátory](#)

$$\hat{X}_k = x_k,$$

$$\hat{P}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k},$$



nebo přesněji

$$\hat{X}_k |\varphi\rangle \equiv x_k \varphi(\vec{r}),$$

$$\hat{P}_k |\varphi\rangle \equiv -i\hbar \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x_k},$$

kde φ je *vlnová funkce*, jejíž nyní nepodstatnou časovou závislost zanedbáváme. Na levých stranách definičních rovností tuto vlnovou funkci zapisujeme pomocí *bra-ketové symboliky*.

Ukažme si, že takto definované operátory splňují *Dirakovy kvantovací podmínky*.

Poloha

Pro *Poissonovy závorky* $\{x_k, x_m\}_P$ můžeme podle definice psát

$$\{x_k, x_m\}_P \equiv \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial x_k}{\partial x_j} \frac{\partial x_m}{\partial p_j} - \frac{\partial x_k}{\partial p_j} \frac{\partial x_m}{\partial x_j} \right) = \sum_{j=1}^3 (\delta_{kj} 0 - 0 \delta_{mj}) = 0,$$

kde δ_{ij} je *Kroneckerovo delta*. Podle Dirakových kvantovacích podmínek musí být tedy nulový i *komutátor* $[\hat{X}_k, \hat{X}_m]$. Přesněji, pro libovolnou vlnovou funkci φ z definičního oboru součinu obou operátorů musí platit

$$[\hat{X}_k, \hat{X}_m] |\varphi\rangle \equiv \hat{X}_k \hat{X}_m |\varphi\rangle - \hat{X}_m \hat{X}_k |\varphi\rangle = |0\rangle,$$

kde $|0\rangle$ označuje vlnovou funkci nulovou na celém prostoru. Je tomu skutečně tak?

Na základě definic operátorů přiřazených jednotlivým souřadnicím polohy snadno ověříme, že platí

$$\hat{X}_k \hat{X}_m |\varphi\rangle - \hat{X}_m \hat{X}_k |\varphi\rangle \equiv x_k x_m \varphi(\vec{r}) - x_m x_k \varphi(\vec{r}) = 0,$$

neboť násobení reálnými čísly je komutativní. Odpovídající komutátor je proto nulový a definice operátorů přiřazených jednotlivým souřadnicím polohy částice je kompatibilní s Dirakovými kvantovacími podmínkami.

Hybnost

I pro složky hybnosti jsou *Poissonovy závorky* $\{p_k, p_m\}_P$ nulové, a tedy takovými musí být i odpovídající *komutátory*. Pro libovolnou vlnovou funkci φ z definičního oboru součinu operátorů \hat{P}_k a \hat{P}_m musí proto platit

$$[\hat{P}_k, \hat{P}_m] |\varphi\rangle \equiv \hat{P}_k \hat{P}_m |\varphi\rangle - \hat{P}_m \hat{P}_k |\varphi\rangle = |0\rangle,$$

kde symbol $|0\rangle$ označuje, stejně jako výše, nulovou vlnovou funkci. Ověřme platnost této rovnosti.

Na základě definice operátorů složek hybnosti můžeme psát

Dirakovy kvantovací podmínky pro operátory souřadnic.

Dirakovy kvantovací podmínky pro operátory složek hybnosti

$$\hat{P}_k \hat{P}_m |\varphi\rangle - \hat{P}_m \hat{P}_k |\varphi\rangle \equiv -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \varphi}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_k \partial x_m} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_m \partial x_k} \right).$$

Poslední uvedený výraz je však, vzhledem k záměnnosti pořadí parciálních derivací pro dostatečně derivovatelné funkce, nutně nulový. Nulovost komutátoru je tedy ověřena i pro operátory složek hybnosti.

Poloha a hybnost

Abychom dokončili ověření Dirakových kvantovacích podmínek pro operátory složek polohy a hybnosti bodové částice, musíme se ještě věnovat jejich vzájemným komutacím. Pro odpovídající *Poissonovy závorky* snadno získáme

$$\{p_k, x_m\}_P \equiv \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial p_k}{\partial x_j} \frac{\partial x_m}{\partial p_j} - \frac{\partial p_k}{\partial p_j} \frac{\partial x_m}{\partial x_j} \right) = \sum_{j=1}^3 (0 - \delta_{kj} \delta_{mj}) = -\delta_{km},$$

kde δ_{km} opět označuje *Kroneckerovo delta*. *Komutátor* $[\hat{P}_k, \hat{X}_m]$ musí tedy podle Dirakových podmínek splňovat

$$[\hat{P}_k, \hat{X}_m] = -i\hbar \delta_{km}.$$

Dirakovy kvantovací podmínky pro polohu a hybnost.

Pro libovolnou vlnovou funkci z definičního oboru součinu operátorů \hat{P}_k a \hat{X}_m musí tedy platit $\hat{P}_k \hat{X}_m |\varphi\rangle - \hat{X}_m \hat{P}_k |\varphi\rangle = -i\hbar \delta_{km} |\varphi\rangle$.

Na základě definic uvedených operátorů však můžeme psát

$$\begin{aligned} \hat{P}_k \hat{X}_m |\varphi\rangle &\equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} (x_m \varphi) = -i\hbar \delta_{km} \varphi - i\hbar x_m \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}, \\ \hat{X}_m \hat{P}_k |\varphi\rangle &\equiv -i\hbar x_m \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}, \end{aligned}$$

a tedy též

$$\hat{P}_k \hat{X}_m |\varphi\rangle - \hat{X}_m \hat{P}_k |\varphi\rangle = -i\hbar \delta_{km} \varphi \equiv -i\hbar \delta_{km} |\varphi\rangle.$$

Dirakovy kvantovací podmínky jsou proto ověřeny i pro vzájemné komutace operátorů souřadnic polohy a složek hybnosti.

4.6.3. ENERGIE

Hamiltonův operátor

Samosdružený operátor, který v rámci kvantové teorie přiřazujeme celkové energii bodové částice, nalezneme pomocí *principu korespondence*.



Celkovou energii částice o hmotnosti M , která se pohybuje ve vnějším poli potenciálu V , reprezentujeme v klasické mechanice tzv. *Hamiltonovou funkcí*

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(\vec{r}).$$

Odpovídající kvantověmechanický operátor, který se často nazývá *operátorem Hamiltonovým*, stručněji *hamiltoniánem*, získáme podle principu korespondence dosazením operátorů polohy a hybnosti do výše uvedeného vztahu. Tedy

Hamiltonův operátor jako funkce operátorů hybnosti a polohy.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + V(\hat{\mathbf{X}}),$$

kde jsme zavedli vektorové operátory $\hat{\mathbf{P}} \equiv [\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3]$ a $\hat{\mathbf{X}} \equiv [\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3]$. (Hranaté závorky nyní označují složkový zápis vektoru, nikoliv komutátor!)

Druhou mocninu operátoru hybnosti a funkci $V(\hat{\mathbf{X}})$ počítáme obvyklým způsobem. Pro libovolnou vlnovou funkci φ z definičního oboru hamiltoniánu tedy můžeme pomocí definic operátorů hybnosti a polohy psát (v níže uvedeném vztahu užíváme částečně bra-ketovou symboliku)

$$\hat{H}|\varphi\rangle = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}|\varphi\rangle + V(\hat{\mathbf{X}})|\varphi\rangle = -\frac{1}{2M} \sum_{k=1}^3 \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \left(-i\hbar \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x_k} \right) \right] + V(\vec{r})\varphi(\vec{r})$$

a po úpravách

$$\hat{H}|\varphi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi(\vec{r})}{\partial x_k^2} + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}),$$

kde symbol Δ označuje Laplaceův operátor. Stručněji tedy

Hamiltonův operátor po úpravě.

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

Vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru, stacionární Schrödingerova rovnice

Podle Dirakovy interpretace reprezentují vlastní hodnoty samosdružených operátorů v kvantové mechanice měřitelné hodnoty odpovídajících dynamických proměnných. Vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru zadávají proto realizovatelné hodnoty celkové energie a odpovídající vlastní vektory (vlnové funkce) stavy, v nichž jsou tyto přípustné hodnoty energie nabývány. Rovnici pro vlastní hodnoty hamiltoniánu jednočásticového systému můžeme psát v kompaktním tvaru

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

a po rozvinutí symbolu \hat{H} též

Stacionární Schrödingerova rovnice.

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

To je ovšem proslulá stacionární Schrödingerova rovnice.

Rovnice pro vlastní hodnoty hamiltoniánu je tedy totožná se stacionární Schrödingerovou rovnicí studovaného systému a odpovídající vlastní vlnové funkce odpovídají vlnovým funkcím stacionárním.



Nestacionární Schrödingerova rovnice

Dále též vidíme, že nestacionární Schrödingerovu rovnici můžeme psát pomocí Hamiltonova operátoru v kompaktním tvaru

$$\hat{H}|\varphi\rangle = i\hbar \frac{\partial|\varphi\rangle}{\partial t}.$$



4.6.4. MOMENT HYBNOSTI

Operátory složek momentu hybnosti

Samosdružené operátory, které v rámci kvantové teorie přiřazujeme složkám momentu hybnosti, nalezneme pomocí principu korespondence.



V klasické fyzice je moment hybnosti bodové částice definován jako vektorový součin jejího polohového vektoru a hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p},$$

což přepsáno do složek dává s použitím Levi-Civitova symbolu

Levi-Civitův symbol.

$$L_j = \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} x_k p_l.$$

Pro odpovídající kvantověmechanické operátory proto můžeme psát

$$\hat{L}_j = \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \hat{X}_k \hat{P}_l \equiv -i\hbar \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}.$$



Moment hybnosti hraje velmi významnou roli pro částice nacházející se v poli centrálních sil popsaných sféricky symetrickým potenciálem $V(r)$. V klasické fyzice je totiž v takovém případě integrálem pohybu a zachovává se během časového vývoje. Protože je obvykle výhodné popisovat systémy se sférickou symetrií pomocí sférických souřadnic, uveďme pro úplnost i odpovídající vyjádření operátorů složek momentu hybnosti:

$$\hat{L}_1 = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cotg\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\hat{L}_2 = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cotg\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\hat{L}_3 = i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Operátor momentu hybnosti ve

Operátor kvadrátu momentu hybnosti

Velmi významnou roli hraje v kvantové mechanice *kvadrát velikosti momentu hybnosti*, jemuž na základě principu korespondence přiřazujeme operátor

$$\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2.$$

Operátor kvadrátu momentu hybnosti ve sférických souřadnicích.

Ve sférických souřadnicích můžeme pro něj psát

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

Komutace operátorů přiřazených momentu hybnosti

Operátory \hat{L}_1 , \hat{L}_2 a \hat{L}_3 navzájem nekomutují. Dá se ukázat, že platí

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l,$$

kde hranatými závorkami označujeme komutátor vepsaných operátorů a ε_{jkl} je Levi-Civitův symbol. Podle kapitoly věnované obecným relacím neurčitosti není proto možno změřit všechny tři složky momentu hybnosti neomezeně přesně.



Vektor momentu hybnosti není tedy v rámci kvantové mechaniky měřitelnou veličinou a jeho složky nejsou kompatibilní pozorovatelné.

Na druhé straně je však možno dokázat, že operátor kvadrátu momentu hybnosti \hat{L}^2 komutuje s každou z jeho složek, $[\hat{L}_k, \hat{L}^2] = 0$.



V rámci kvantové teorie jsou tedy kvadrát momentu hybnosti a libovolná z jeho složek, obvykle se volí složka třetí, současně měřitelné. Navíc hodnoty L^2 a L_k jsou maximální možnou informací, kterou můžeme o momentu hybnosti částice v rámci kvantové mechaniky podat.

Vlastní hodnoty a vlastní funkce operátoru kvadrátu momentu hybnosti

Vlastní hodnoty operátoru \hat{L}^2 odpovídají podle Dirakovy teorie měřitelným (přípustným) hodnotám kvadrátu momentu hybnosti. Získáme je pomocí charakteristické rovnice

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = L^2 |\psi\rangle.$$

Řešení této rovnice je poměrně obtížné a vyžaduje netriviální matematické znalosti. Zde uveďme jen, že je ve sférických souřadnicích reprezentováno kulovými funkcemi $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ splňujícími

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

kde l je celé nezáporné číslo a m nabývá pro zadané l hodnot $-l, -l+1, \dots, l-1, l$. V atomové fyzice se první z těchto čísel obvykle nazývá vedlejším kvantovým číslem a druhé kvantovým číslem magnetickým. Navíc je možno ukázat, že platí

$$\hat{L}_3 Y_{lm} \equiv -i\hbar \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \varphi} = m\hbar Y_{lm}.$$

Kulové funkce jsou tedy společnými vlastními funkcemi operátorů \hat{L}^2 a \hat{L}_3 .

Vlastními funkcemi operátoru kvadrátu momentu hybnosti jsou kulové funkce.

Vedlejší magnetické kvantové

4.6.5. STŘEDNÍ HODNOTY A STŘEDNÍ KVADRATICKÉ FLUKTUACE

Střední hodnota

Střední hodnotu veličiny A , kterou v kvantové mechanice reprezentuje samosdružený operátor \hat{A} , můžeme ve stavu zadaném normalizovanou vlnovou funkcí ψ , $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$, počítat pomocí vzorce (v němž částečně používáme bra-ketovou symboliku)

$$\bar{a} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* (\hat{A} \psi) d^3\vec{r}.$$



Výraz použitý pro výpočet střední hodnoty obecné veličiny A je inspirován vztahy, který je možno v rámci kvantové mechaniky získat pro střední hodnotu polohy a hybnosti částice (viz úvodní příklad zde).

Střední kvadratická fluktuace

Střední kvadratická fluktuace veličiny A odpovídá podle definice střední hodnotě kvadrátu její okamžité fluktuace $(A - \bar{a})^2$, což přepsáno do operátorového tvaru dává

$$\Delta a^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \bar{a}\hat{1})^2 | \psi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \left[(\hat{A} - \bar{a}\hat{1})^2 \psi \right] d^3\vec{r},$$

kde $\hat{1}$ je operátor identity, tj. pro každou vlnovou funkci $|\psi\rangle$ splňuje relaci $\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Získaný výraz můžeme dále převést umocněním výrazu v závorce v integrálu na levé straně do obvykle používaného tvaru

$$\Delta a^2 = \overline{a^2} - \bar{a}^2,$$



v němž jsme zavedli $\overline{a^2} \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{A}^2 \psi d^3\vec{r}$ ($\equiv \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$).

4.6.6. RELACE NEURČITOSTI

Na jiném místě ukazujeme, že střední kvadratické fluktuace hybnosti a polohy částice nejsou nezávislé veličiny. Nyní si ukážeme, že k obdobným závěrům můžeme dospět i pro další dvojice veličin, k čemuž s velkým užitkem využijeme Dirakovy operátorové reprezentace dynamických proměnných. Důsledně též budeme používat bra-ketovou symboliku.

Relace neurčitosti

Nechť \hat{A} a \hat{B} jsou samosdružené operátory, které v rámci kvantové mechaniky přiřazujeme dynamickým proměnným A a B , a $[\hat{A}, \hat{B}]$ necht' je jejich komutátor. Pak platí tzv. Robertsonův vztah

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|,$$

kde Δa a Δb jsou střední kvadratické fluktuační veličin A a B a $|\psi\rangle$ je normalizovaná vlnová funkce popisující zadaný stav studované částice.

Výše uvedená formule je zcela jistě vhodným vyjádřením *relace neurčitosti* pro veličiny A a B .

Kompatibilní a nekompatibilní veličiny

Výše uvedený komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B} může být buď nulový, nebo nenulový.

Je-li nulový, tj. platí-li $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, říkáme, že operátory \hat{A} a \hat{B} *komutují*. V tomto případě přechází relace neurčitosti pro A a B na triviální tvar

$$\Delta a \Delta b \geq 0,$$

který je ovšem vzhledem k definici středních kvadratických fluktuačních vždy splněn. Získaný výsledek můžeme proto interpretovat slovy, že měření veličin A a B se v zadaném stavu nijak neovlivňují a obě veličiny je možno v rámci kvantového popisu současně měřit neomezeně přesně. Takové veličiny nazýváme *kompatibilními*.

Kompatibilní
veličiny

Je-li naopak uvedený komutátor nenulový, je součin odpovídajících středních kvadratických fluktuačních vždy větší či roven zadanému nezápornému (zpravidla kladnému) číslu a zmenšení chyby měření jedné veličiny znamená proto růst chyby veličiny druhé. Obě veličiny proto nelze současně měřit neomezeně přesně. Takové veličiny nazýváme obvykle *nekompatibilními*.

Nekompatibilní
veličiny

Poloha a hybnost

Pro komutátory operátorů přiřazených odpovídajícím složkám polohy a hybnosti bodové částice, jak odvodíme na *jiném místě*, platí

$$[\hat{P}_k, \hat{X}_k] = -i\hbar, \quad k = 1, 2, 3.$$

Dosazením do *Robertsonova vztahu* dostáváme tak vzhledem k normalizaci vlnové funkce $|\psi\rangle$

$$\Delta x_k \Delta p_k \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | (-i\hbar) | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2}.$$

Pro $j \neq k$ jsou komutátory $[\hat{P}_j, \hat{X}_k]$ nulové. Nulové jsou i komutátory $[\hat{X}_j, \hat{X}_k]$ a $[\hat{P}_j, \hat{P}_k]$, tentokrát dokonce pro libovolné hodnoty indexů j a k . Pomocí Robertsonova vztahu proto můžeme psát

$$\Delta x_j \Delta p_k \geq 0 \quad (\text{pro } j \neq k), \quad \Delta x_j \Delta x_k \geq 0 \quad \text{a} \quad \Delta p_j \Delta p_k \geq 0 \quad (\text{pro } j \text{ a } k \text{ libovolné}).$$

To je ale obvyklý tvar Heisenbergových relací neurčitosti pro polohu a hybnost.

Shrnutí kapitoly



V kvantové mechanice reprezentujeme veličiny popisující stav systému (dynamické veličiny) samosdruženými lineárními operátory na příslušném Hilbertově prostoru všech stavů. Vlastní hodnoty těchto operátorů jsou vždy reálné a představují všechny možné hodnoty dané veličiny, kterých může systém nabývat a které jediné můžeme naměřit.

Způsob, jakým dané fyzikální veličině přiřadit operátor, řeší tzv. *Dirakovy kvantovací podmínky a princip korespondence*. Základními veličinami, jejichž operátory bychom měli znát, jsou poloha, hybnost, energie (*Hamiltonův operátor*) a moment hybnosti.

Operátorový přístup spolu s *bra-ketovou symbolikou* umožňuje zpřehlednit výpočty střední hodnoty a střední kvadratické fluktuace dynamických veličin.

Navíc lze zobecnit relace neurčitosti následovně: veličiny, jejichž hodnoty nelze měřit současně absolutně přesně (*nekompatibilní veličiny*), jsou právě ty veličiny, jejichž operátory spolu nekomutují. Kvantitativně tuto skutečnost popisuje *Robertsonův vztah*.

Otázky k procvičení a opakování

- 1) Zopakujte si, jak je definován vektorový prostor a co je to lineární operátor.
- 2) Proč jsou k reprezentaci dynamických proměnných použity samosdružené operátory? Na jakém prostoru pracujeme?
- 3) Jaký význam mají vlastní hodnoty operátoru přiřazeného dané veličině? Jak se pomocí tohoto operátoru vypočte střední hodnota a střední kvadratická fluktuace této veličiny?
- 4) Definujte Diracovy kvantovací podmínky a princip korespondence. K čemu slouží?
- 5) Uveďte konkrétní tvar operátorů polohy, hybnosti, energie a momentu hybnosti. Který z těchto operátorů se nazývá Hamiltonův?
- 6) Co je to komutátor a jakou roli hraje při určení kompatibility dynamických veličin? Uveďte matematický vztah (jak se nazývá?).



Korespondenční úkol č. 9

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na otázku č. 3, č. 4, č. 5 nebo č. 6 kapitoly 4.6.



4.7. SYSTÉMY VÍCE ČÁSTIC



Po prostudování této kapitoly budete schopni:

- formulovat pojem spinu částice a uvést jeho základní vlastnosti;
- objasnit, jak se započtení spinových efektů projeví v popisu částice pomocí vlnové funkce;
- definovat fermiony a bosony;
- formulovat tzv. princip nerozlišitelnosti totožných částic a vysvětlit, k jakým důsledkům tento princip vede v popisu systémů více totožných částic;
- definovat Slaterův determinant a uvést jeho význam;
- formulovat Pauliho vylučovací princip a odvodit jej z obecnějších předpokladů.



Pojmy k zapamatování:

spin, moment hybnosti, vícesložková vlnová funkce, Pauliho matice, fermion, boson, totožné částice, princip nerozlišitelnosti, permutace, symetrická a antisymetrická vlnová funkce, Slaterův determinant, Pauliho vylučovací princip.

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

2 hodiny

4.7.1. SPIN

Spin je dynamická proměnná, která nemá v klasické fyzice odpovídající protějšek. Nutnost jeho zavedení do kvantového popisu částic vyplynula ze slavného *experimentu Sternova-Gerlachova*.



Spin je interpretován jako vlastní moment hybnosti částice a jemu v rámci kvantové teorie přiřazené operátory mají podobné vlastnosti jako operátory odpovídající orbitálnímu momentu hybnosti.

To znamená, že operátory přiřazené jednotlivým složkám spinového vektoru nekomutují a samotné složky nejsou kompatibilními veličinami. Současně proto můžeme s neomezenou přesností určit například pouze velikost spinu a hodnotu jedné jeho vybrané složky, zpravidla třetí, z-tové.



Velikost spinu $|\vec{s}|$ je kvantována stejně jako velikost orbitálního momentu hybnosti. Její přípustné hodnoty jsou proto dány vztahem

$$|\vec{s}|^2 = s(s+1)\hbar^2,$$

v němž s je tzv. *spinové kvantové číslo*. Pro danou částici je toto číslo charakteristickou konstantou podobně jako například její hmotnost či náboj.

V odborných textech bývá často spinové kvantové číslo se spinem částice zaměňováno. Pak hovoříme stručně o částici se spinem s .

Také *třetí složka spinu* s_z je kvantována podobně jako třetí složka orbitálního momentu hybnosti:

$$s_z = m_s \hbar,$$

kde m_s je tzv. *magnetické spinové kvantové číslo*. To může pro částici se spinem s nabývat celkem $(2s+1)$ hodnot: $-s, -s+1, \dots, s-1, s$.



I magnetické spinové kvantové číslo bývá často zaměňováno s třetí složkou spinu s_z .

Vícesložkové vlnové funkce

Zatímco velikost spinu je pro libovolnou částici vždy konstantní a charakteristická, jeho třetí, z-tová složka může nabývat všech výše uvedených hodnot.

Aby byl stav částice určen jednoznačně, musíme kromě její polohy (nebo hybnosti) zadat i okamžitou hodnotu třetí složky jejího spinu. V rámci kvantově-mechanického popisu se to projevuje tím, že *vlnová funkce* bude záviset i na spinové proměnné s_z .



Tak např. v *x-reprezentaci* musíme psát, bereme-li v úvahu spin částice, $\psi = \psi(\vec{r}, m_s, t)$. V matematickém formalismu kvantové teorie je však obvyklejší popis pomocí tzv. *vícesložkových (multikomponentních) vlnových funkcí (spinorů)*

$$\Psi(\vec{r}, t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_{-s}(\vec{r}, t) \\ \dots \\ \psi_s(\vec{r}, t) \end{pmatrix},$$

Multikomponentní vlnová funkce nebo-li spinor.

kde $\psi_\xi(\vec{r}, t) \equiv \psi(\vec{r}, m_s = \xi, t)$.

Multikomponentní vlnová funkce je reprezentována sloupcovým vektorem, jehož jednotlivé složky odpovídají vlnové funkci studované částice se zadanou z-tovou komponentou spinu. Takový sloupcový vektor má pro částici se spinem s celkem $(2s+1)$ řádků. Tak např. pro částici se spinem $1/2$ (např. elektrony) musíme použít dvoukomponentní vlnovou funkci.

Je-li vícesložková vlnová funkce normovaná k jedničce, $\sum_{\xi=-s_z}^{s_z} \int_{\square^3} |\psi_\xi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$,

udává výraz $\int_{\Omega} |\psi_\xi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ pravděpodobnost, že částici nalezneme v oblasti prostoru Ω a její třetí složka spinu bude mít hodnotu ξ . Pravděpodobnost nalezení částice v oblasti Ω , bez ohledu na z-tovou komponentu jejího spinu, je pak dána



jako $\sum_{\xi=-s_z}^{s_z} \int_{\Omega} |\psi_\xi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ a konečně výraz $\int_{\square^3} |\psi_\xi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ udává pravděpodobnost, že třetí komponenta spinu částice nabývá v zadaném stavu hodnoty ξ .

Operátor spinu

Při použití vícesložkových vlnových funkcí odpovídají spinovým stavům částice se spinem s vektory z $(2s+1)$ -rozměrného *Hilbertova prostoru*.

Reprezentace
operátorů maticemi.

Operátory, které jednotlivým komponentám spinu v rámci kvantové mechaniky přiřadíme, budou proto *samosdruženými operátory* na tomto prostoru a můžeme je reprezentovat *hermitovskými maticemi* o $(2s+1)$ řádcích a sloupcích.

Tak např. pro částice se spinem $1/2$ vystačíme s maticemi 2×2 , pro částice se spinem 1 potřebujeme matice 3×3 atd.

Operátory přiřazené jednotlivým složkám spinu částice splňují obdobné komutační relace, s jakými se setkáváme u *orbitálního momentu hybnosti*,

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l.$$

Pro elektrony (a další částice se spinem $1/2$) lze operátor spinu psát jako

$$\hat{\mathbf{s}} = 1/2 \hbar \vec{\sigma},$$

Pauliho matice.

kde $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ a $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ jsou tzv. *Pauliho matice*.

Vzhledem k tomu, že spin nemá klasický protějšek, není možné jej chápat jako důsledek vlastní rotace studované částice kolem nějaké prostorové osy. Spin je prostě jen další veličinou charakterizující tuto částici, podobně jako např. její hmotnost či náboj.

4.7.2. NEROZLIŠITELNÉ ČÁSTICE

Princip nerozlišitelnosti



V rámci kvantověmechanického popisu jsou totožné částice nerozlišitelné.

Totožné částice je nutno v kvantové mechanice chápat poněkud odlišně od toho, nač jsme zvyklí v mechanice klasické. V rámci klasického popisu totiž vždy předpokládáme, že i částice, jejichž všechny fyzikální vlastnosti jsou shodné, je možno alespoň v principu navzájem odlišit. Např. tak, že každé z nich přidělíme pozorovatele, který bude mít za úkol sledovat její trajektorii. Takovému pozorovateli můžeme přidělit identifikační číslo a to můžeme pak použít i k odlišení „jeho“ částice od ostatních. Zajímáme-li se v budoucnosti o některou ze studovaných částic, např. částici K , stačí se obrátit na pozorovatele K a ten nám na ni podle potřeby ukáže.

Trajektorie částice
je klasický pojem,
který nemá
kvantový protějšek.

V kvantovém světě ovšem nic takového možné není! Především částice už nejsou lokalizovány v prostoru, jejich vlnové funkce se mohou nejrůznějším způsobem překrývat a klasické trajektorie neexistují. Proto je nemůže žádný pozorovatel „uhlídat“. Navíc se v případě mikroskopických částic jejich sledování pozorovatelem neobejde bez podstatného ovlivnění jejich pohybu. Tak kupř. pozorovat částici znamená, že ji musíme osvětlit světlem a následně registrovat odražené (rozptýlené) fotony. Srážka fotonu s mikroskopickou částicí však může velmi významně ovlivnit její další vývoj.

Vlnové funkce

Jakákoliv vlnová funkce soustavy N nerozlišitelných částic musí nutně zohlednit fakt, že libovolnou permutací (záměnou) těchto částic není možno změnit stav studovaného systému. Chceme-li proto při popisu nerozlišitelných částic využít formalismu, který jsme zavedli pro částice rozlišitelné, je nezbytně nutné požadovat, abychom permutací dvojic polohových a spinových proměnných jednotlivých částic, \vec{r}_K, ξ_K , získali vlnovou funkci, která popisuje stejný kvantověmechanický stav jako funkce původní. Dvě vlnové funkce popisují ale, vzhledem ke své statistické interpretaci, stejný stav systému, je-li jedna (komplexním) násobkem druhé.

Permutace nerozlišitelných částic.

Permutace argumentů mnohočásticové vlnové funkce se může tedy v případě nerozlišitelných částic projevit nanejvýš odlišností v komplexním multiplikačním faktoru. Pracujeme-li s normovanými vlnovými funkcemi, má tento faktor navíc jednotkovou velikost.



Speciálním případem permutace je *výměna* (*transpozice*) dvou částic, např. částice K a L . Té můžeme přiřadit operátor \hat{P}_{KL} splňující

$$\hat{P}_{KL} \psi(\dots, \vec{r}_K, \xi_K, \dots, \vec{r}_L, \xi_L, \dots) \equiv \psi(\dots, \vec{r}_L, \xi_L, \dots, \vec{r}_K, \xi_K, \dots).$$

Má-li vlnová funkce ψ správně popisovat systém nerozlišitelných částic, musí podle výše řečeného splňovat pro libovolnou dvojici indexů K a L vztah (α je komplexní číslo)

$$\hat{P}_{KL} \psi = \alpha \psi.$$

Vzhledem k nerozlišitelnosti studovaných částic musí být navíc toto číslo stejné pro všechny možné dvojice indexů K a L . Je velmi snadné určit jeho hodnotu. Dvojnásobná aplikace téhož operátoru transpozice vede totiž k původní vlnové funkci

$$\psi = \hat{P}_{KL} \hat{P}_{KL} \psi = \hat{P}_{KL} \alpha \psi = \alpha^2 \psi.$$

Odtud již vidíme, že $\alpha^2 = 1$ a samotný multiplikační faktor tedy nabývá hodnot ± 1 .

Vhodnými kandidáty na vlnové funkce systému N nerozlišitelných částic jsou proto jen ty funkce, které se při výměně libovolné dvojice částic nemění nebo nanejvýš změni své znaménko. První z uvedených funkcí se nazývají *vlnovými funkcemi symetrickými* a druhé *vlnovými funkcemi antisymetrickými*. Při provedení libovolné permutace částic se symetrické vlnové funkce nezmění a antisymetrické změni své znaménko podle znaménka provedené permutace.



Je možno dokázat následující tvrzení, podrobnější analýza však překračuje rámec této encyklopedie a je ji možno najít ve specializované literatuře.

Charakter vlnové funkce libovolného systému obsahujícího nerozlišitelné částice se nemění ani v důsledku samovolného časového vývoje, ani v důsledku vnějších zásahů do něj.



Systémy nerozlišitelných částic se takto přirozeně dělí na dvě velké skupiny

- ty, které popisujeme symetrickými vlnovými funkcemi,

- ty, které popisujeme vlnovými funkcemi antisymetrickými.

Bosony a fermiony.

Z [kvantové teorie pole](#) vyplývá, že první typ částic nese celočíselný spin a typ druhý má spin poločíselný. Částice s celočíselným spinem se obvykle nazývají *bosony*, neboť ve velkých (makroskopických) systémech vyhovují tzv. Boseho-Einsteinově statistice. Částice nesoucí spin poločíselný se ze stejného důvodu nazývají *fermiony*. V makroskopické limitě totiž vyhovují tzv. Fermiho-Dirakovu rozdělení.

Vyjádření vícečásticových vlnových funkcí pomocí funkcí jednočásticových

Vlnové funkce vícečásticových systémů často vyjadřujeme pomocí vlnových funkcí jednočásticových. Možné je to například pro *soustavy neinteragujících částic*, s přibližnou platností ale i pro částice interagující.

Vlnová funkce jako součin jednočásticových vlnových funkcí.

Označme $\varphi_k(\vec{r}_k, \xi_k)$ normované jednočásticové vlnové funkce. Pak zřejmě jejich součin $\varphi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) \equiv \varphi_1(\vec{r}_1, \xi_1) \dots \varphi_N(\vec{r}_N, \xi_N)$ můžeme chápat jako jednu z možných vlnových funkcí studovaného N -částicového systému. V případě rozlišitelných částic bezzbytku, v případě částic nerozlišitelných je třeba zajistit správné chování této funkce vzhledem k permutaci částic.

Tak např. pro *bosony* musíme použít vlnovou funkci symetrickou,



$$\psi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \varphi_1(\vec{r}_{P(1)}, \xi_{P(1)}) \dots \varphi_N(\vec{r}_{P(N)}, \xi_{P(N)}).$$

Suma naznačená v uvedeném výrazu probíhá přes všechny různé permutace částic a faktor $1/\sqrt{N!}$ je do něj zahrnut v zájmu zachování normalizace vícečásticové vlnové funkce.

Pro *fermiony* musíme naopak použít vlnovou funkci antisymetrickou



$$\psi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) \varphi_1(\vec{r}_{P(1)}, \xi_{P(1)}) \dots \varphi_N(\vec{r}_{P(N)}, \xi_{P(N)}),$$

kde suma probíhá opět přes všechny různé permutace částic a $\text{sign}(P)$ označuje [znaménko](#) konkrétní permutace P .

Pauliho vylučovací princip.

Významným důsledkem získaného tvaru antisymetrické vlnové funkce fermionů je [Pauliho vylučovací princip](#).

Vícečásticové vlnové funkce konstruované jako antisymetrizovaný součin vlnových funkcí jednočásticových hrají významnou roli při popisu elektronů v elektronových obalech atomů a molekul. V atomové fyzice se obvykle vyjadřují pomocí [Slaterových determinantů](#).

4.7.3. SLATEROVY DETERMINANTY

Antisymetrickou vlnovou funkcí soustavy N nerozlišitelných *fermionů* vyjadřujeme často jako antisymetrizovaný součin vlnových funkcí jednočásticových

$$\psi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) \varphi_1(\vec{r}_{P(1)}, \xi_{P(1)}) \dots \varphi_N(\vec{r}_{P(N)}, \xi_{P(N)}),$$

kde suma na pravé straně probíhá všechny možné *permutace* N -prvkové množiny indexů a $\text{sign}(P)$ označuje *znaménko* konkrétní permutace P .

Nápadná je jistě podobnost užívaného výrazu s definiční formulí pro determinant čtvercové matice $N \times N$: $\det \mathbf{A} \equiv \sum_P \text{sign}(P) a_{1P(1)} \dots a_{NP(N)}$. Porovnáme-li obě

uvedené formule, vidíme, že vlnovou funkcí ψ můžeme psát ve tvaru determinantu

$$\psi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1, \xi_1) & \varphi_1(\vec{r}_2, \xi_2) & \dots & \varphi_1(\vec{r}_N, \xi_N) \\ \varphi_2(\vec{r}_1, \xi_1) & \varphi_2(\vec{r}_2, \xi_2) & \dots & \varphi_2(\vec{r}_N, \xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(\vec{r}_1, \xi_1) & \varphi_N(\vec{r}_2, \xi_2) & \dots & \varphi_N(\vec{r}_N, \xi_N) \end{pmatrix},$$

který je obvykle nazýván *determinantem Slaterovým*.

4.7.4. PAULIHO VYLUČOVACÍ PRINCIP

Dva fermiony se nemohou nacházet ve stejném jednočásticovém stavu.

Důvod je jednoduchý. Popisujeme-li totiž soustavu *fermionů* pomocí antisymetrizovaného součinu jednočásticových vlnových funkcí (*Slaterova determinantu*)

$$\psi(\vec{r}_1, \xi_1, \dots, \vec{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) \varphi_1(\vec{r}_{P(1)}, \xi_{P(1)}) \dots \varphi_N(\vec{r}_{P(N)}, \xi_{P(N)}),$$

kde P označuje *permutace* N -prvkové množiny indexů $\{1, \dots, N\}$ a $\text{sign}(P)$ jejich *znaménko*, a pokud by byly některé z uvedených jednočásticových funkcí stejné, např. $\varphi_j = \varphi_k$, byla by nutně pravá strana nulová. Velmi zřetelně to vyplyne, zapíšeme-li vícečásticovou vlnovou funkci pomocí Slaterova determinantu. V případě rovnosti jednočásticových vlnových funkcí φ_j a φ_k by totiž měl tento determinant dva stejné řádky, a jak je známo z algebry, je takový determinant nulový.

Nulová vlnová funkce ovšem znamená, že odpovídající stav není možno ve skutečnosti realizovat.

Vlnová funkce pro systém nerozlišitelných fermionů jako součin jednočásticových vlnových funkcí.





Shrnutí kapitoly

Některé částice se vyznačují vlastním momentem hybnosti – spinem. Operátor spinu má podobné vlastnosti jako operátor momentu hybnosti. Vlnová funkce částice s nenulovým spinem musí zohlednit různé spinové stavy této částice. To je možné buď přidáním z-tové komponenty spinu jako další nezávislé proměnné do vlnové funkce nebo zavedením tzv. vícesložkové vlnové funkce.

Částice s celočíselným spinem nazýváme bosony, částice s poločíselným spinem fermiony. Pro částice se spinovým číslem $\frac{1}{2}$ (např. elektrony) lze operátor spinu reprezentovat tzv. Pauliho maticemi.

Pro částice stejného druhu (totožné částice) platí v kvantové mechanice tzv. princip nerozlišitelnosti. Záměnou (permutací) dvou totožných částic se kvantový stav systému nemůže změnit. Vlnová funkce při uvedené permutaci zůstává stejná (symetrická vlnová funkce) nebo změní znaménko na opačné (antisymetrická vlnová funkce). První možnost nastává u bosonů, druhá u fermionů.

Slaterův determinant je nejjednodušší antisymetrická vlnová funkce pro systém n totožných fermionů. Jedná se o antisymetrizovaný součin n jednočásticových vlnových funkcí.

Důsledkem antisymetrie vlnové funkce pro systém totožných fermionů je tzv. Pauliho vylučovací princip.



Otázky k procvičení a opakování

- 1) Vysvětlete pojem spinu částice. Jaké má vlastnosti? Které klasické veličině je nejpodobnější?
- 2) Jak je třeba modifikovat vlnovou funkci, aby správně popisovala částici se spinem? K čemu slouží Pauliho matice?
- 3) Formulujte princip nerozlišitelnosti totožných částic. Jak se tento princip projevuje ve tvarech vlnových funkcí popisujících vícečásticové systémy?
- 4) Proč musí být vlnové funkce, popisující systém dvou či více totožných částic, symetrické nebo antisymetrické vůči záměně (permutaci) libovolných dvou částic?
- 5) Co jsou to bosony a jak jsou definovány fermiony? Jakou symetrií se vyznačují vlnové funkce systémů totožných bosonů, resp. fermionů?
- 6) Definujte matematicky přesně Slaterův determinant.
- 7) Jak zní Pauliho vylučovací princip? Vysvětlete, z čeho a jak jej lze odvodit.



Korespondenční úkol č. 10

Odpovězte písemně a pokud možno vlastními slovy na vybranou otázku z kapitoly 4.7.

5. KVANTOVÁ TEORIE POLE

Kvantová teorie pole je univerzální teorií popisující chování elementárních částic a jejich vzájemné interakce. Částice i nositelé fyzikálních interakcí jsou v rámci této teorie považovány za excitace jim přiřazených kvantových polí. Jednotlivé částice jakožto excitace kvantového pole se mohou navzájem přeměňovat, vznikat i zanikat.



V rámci kvantové teorie pole jsou s vysokou přesností popsány *základní fyzikální interakce*. Speciálními případy jsou *kvantová elektrodynamika* – kvantová teorie elektromagnetických interakcí - a *kvantová chromodynamika* – teorie silných interakcí. Ve spojení s *teorií kalibračních polí* poskytla kvantová teorie pole prostředek k formulování sjednocené teorie všech interakcí. Byla vytvořena a experimentálně potvrzena kvantová *teorie elektroslabých interakcí* sjednocující popis elektromagnetických jevů a jevů, za něž je zodpovědná *slabá interakce*. V současné době je rozpracovávána obecnější teorie sjednocující popis elektromagnetických, slabých i *silných interakcí*. Konečným cílem je pak vytvoření jednotné teorie, která by kromě výše uvedených zahrnovala i *interakci gravitační*.

Kvantová elektrodynamika a chromodynamika.

Slabé a silné interakce.

Vážným problémem kvantové teorie pole je, že ve vyšších řádech poruchových výpočtů diverguje a poskytuje jen nekonečné výsledky. Naštěstí existuje procedura, jak tato nekonečna z teorie odstranit. Ta pak poskytuje data, která jsou v dokonalém souladu s experimentem. Odstraňování nekonečných veličin z kvantově-polních výpočtů je známo jako *teorie renormalizace*.

Renormalizace.

6. MATEMATICKÉ DODATKY

6.1. METODA SEPARACE PROMĚNNÝCH

Metoda separace proměnných je metodou řešení parciálních diferenciálních rovnic, které jsou v rámci této metody převáděny na matematicky snadněji řešitelnou soustavu obyčejných diferenciálních rovnic. Bližší poučení o ní je možno najít např. v příručce Rektorysově.

Řešme parciální diferenciální rovnici

$$\hat{D}f(x_1, \dots, x_n) = 0,$$

kde \hat{D} je nějaký diferenciální operátor obsahující parciální derivace podle nezávislých proměnných x_1, \dots, x_n . Ve fyzikálních aplikacích bývá obvykle $n = 2$ nebo $n = 3$ a nezávislé proměnné odpovídají souřadnicím (ne vždy nutně kartézským) bodové částice. Řešená parciální diferenciální rovnice je pak zpravidla stacionární Schrödingerovou rovnicí a $\hat{D} = \hat{H} - E$, kde \hat{H} je Hamiltonův operátor a E energie studovaného systému.

Řešení výše uvedené rovnice hledáme ve tvaru

$$f(x_1, \dots, x_n) = f_1(x_1)f_2(x_2)\dots f_n(x_n),$$

tedy jako součin n nových funkcí, z nichž každá je funkcí jen jediné reálné proměnné.

Očekáváme, že po dosazení speciálního tvaru funkce f do původní rovnice získáme novou rovnici

$$\hat{D}_1 f_1(x_1) + \hat{D}_2 f_2(x_2) + \dots + \hat{D}_n f_n(x_n) = \alpha,$$

kde diferenciální operátory \hat{D}_k ($k = 1, \dots, n$) již obsahují pouze obyčejné derivace podle proměnné x_k a α je nějaká konstanta. Pokud se nám podaří dosáhnout tohoto speciálního tvaru, říkáme, že řešená parciální diferenciální rovnice je v proměnných x_1, \dots, x_n *separovatelná*.

Nově získanou rovnici je ovšem možno převést na ekvivalentní soustavu n obyčejných diferenciálních rovnic

$$\hat{D}_1 f_1(x_1) = \alpha_1,$$

$$\hat{D}_2 f_2(x_2) = \alpha_2,$$

...

$$\hat{D}_n f_n(x_n) = \alpha_n,$$

v nichž nově zavedené konstanty splňují

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n = \alpha.$$

To proto, že pokud např. přiřadíme nezávislým proměnným x_2, \dots, x_n pevné hodnoty a měníme pouze proměnnou x_1 , vidíme ze separované rovnice, kterou můžeme dočasně přepsat do tvaru

$$\hat{D}_1 f_1(x_1) = \alpha - \hat{D}_2 f_2(x_2) - \dots - \hat{D}_n f_n(x_n),$$

že výraz $\hat{D}_1 f_1(x_1)$ zůstává i při změnách x_1 konstantní. Konstantní je totiž pravá strana uvedené rovnice. Pak ale musí existovat taková konstanta α_1 , že

$$\hat{D}_1 f_1(x_1) = \alpha_1.$$

Analogickou úvahu můžeme provést i pro ostatní nezávislé proměnné.

Má-li být ovšem splněna původní rovnice, nemohou být konstanty $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ libovolné. Musí splňovat výše uvedenou vazebnou podmínku $\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n = \alpha$.

Při použití metody separace proměnných se během řešení zadané rovnice omezujeme jen na vybrané funkce speciálního tvaru. Není to na újmu obecnosti řešení? Není. Je možno například ukázat, že libovolné fyzikálně přijatelné řešení Schrödingerovy rovnice lze napsat jako lineární kombinaci takto získaných speciálních řešení.

6.2. FOURIEROVA TRANSFORMACE

Níže podáváme jen stručný výklad základních pojmů a vět. Podrobnosti může čtenář nalézt např. v příručce Rektorysově.

Definice

Nechť $f : \square^n \rightarrow \square$ je v absolutní hodnotě integrovatelná funkce,

$$\int_{\square^n} |f(x_1, \dots, x_n)| dx_1 \dots dx_n < +\infty.$$

Potom funkci $\hat{f} : \square^n \rightarrow \square$, která je definována předpisem

$$\hat{f}(k_1, \dots, k_n) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\square^n} f(x_1, \dots, x_n) \exp\left(i \sum_{m=1}^n x_m k_m\right) dx_1 \dots dx_n,$$

nazýváme *Fourierovou transformací funkce f*. A funkci $\check{f} : \square^n \rightarrow \square$,

$$\check{f}(k_1, \dots, k_n) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\square^n} f(x_1, \dots, x_n) \exp\left(-i \sum_{m=1}^n x_m k_m\right) dx_1 \dots dx_n,$$

nazýváme *inverzní Fourierovou transformací funkce f*.

Poznámka

Fourierova transformace přiřazuje každé v absolutní hodnotě integrovatelné funkci f novou funkci \hat{f} . Označíme-li množinu všech v absolutní hodnotě integrovatelných funkcí na \square^n symbolem $L_1(\square^n)$, můžeme říci, že zmíněný předpis definuje zobrazení $G : L_1(\square^n) \rightarrow H$, kde H je množina všech funkcí, které

můžeme získat Fourierovou transformací nějaké funkce z $L_1(\square^n)$. Pak ovšem můžeme ve zkratce psát $\widehat{f} = G(f)$. Funkce \widehat{f} však nemusí být obecně z $L_1(\square^n)$. Obdobně definuje předpis pro inverzní Fourierovu transformaci zobrazení $G_{-1}: L_1(\square^n) \rightarrow H_{-1}$, jehož pomocí můžeme psát $\check{f} = G_{-1}(f)$. Ani funkce \check{f} nemusí být obecně z $L_1(\square^n)$. Všimněte si, že obě zobrazení G i G_{-1} jsou lineární.

Věta (o Fourierově transformaci)

Budiž f spojitá funkce z $L_1(\square^n)$ taková, že její Fourierův obraz \widehat{f} je rovněž z $L_1(\square^n)$. Pak platí $G(G_{-1}(f)) = G_{-1}(G(f)) = f$.

Poznámka

V kvantové teorii nepracujeme zpravidla s funkcemi v absolutní hodnotě integrovatelnými na \square^n , tedy z $L_1(\square^n)$, ale s funkcemi, jejichž absolutní hodnota je kvadraticky integrovatelná na \square^n . Obecně však taková funkce nemusí do $L_1(\square^n)$ patřit. Proto použití věty o Fourierově transformaci na kvadraticky integrovatelné funkce vyžaduje jistou obezřetnost.

6.3. PRAVDĚPODOBNOST

V přírodních i technických vědách se velmi často setkáváme se situací, kdy výsledek experimentu, pozorování či měření není jednoznačný. I když zmíněný experiment opakujeme tak, že všechny kontrolovatelné počáteční podmínky jsou ve všech opakováních stejné, mohou se získané výsledky navzájem lišit. Maximální informaci, kterou můžeme o jednotlivých výsledcích získat, je míra očekávání, že ten či onen výsledek v konkrétním opakování nastane.

Níže podáváme zjednodušený výklad pojmů a postupů, které dovolují tuto míru očekávání kvantifikovat. Bližší poučení o problému je možno nalézt například v příručce Rektorysově.

Statistický experiment

Experiment s několika možnými výstupy, které nedokážeme jednoznačně předpovědět, nazveme *experimentem statistickým*.

Statistický experiment provádíme opakovaně se stejným systémem, všechny kontrolovatelné počáteční podmínky experimentu jsou v jednotlivých opakováních stejné. O jednotlivých opakováních experimentu budeme hovořit jako o *pokusech*. O konkrétní sérii pokusů budeme hovořit jako o *realizaci statistického experimentu*.

Relativní četnost, pravděpodobnost

Označme N celkový počet pokusů, které jsme v rámci realizace daného statistického experimentu provedli, a N_k počet pokusů vedoucích ke k -tému výsledku. Pak poměr N_k/N nazveme *relativní četností k -tého výsledku*.

Je jasné, že se relativní četnosti daného výsledku mohou pro různé realizace experimentu lišit, zejména v závislosti na různých počtech pokusů N . Proto definujeme veličinu, která již na počtu pokusů nezávisí - *pravděpodobnost k-tého výsledku*

$$P_k \equiv \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N_k}{N}.$$

V uvedené definici pravděpodobnosti mlčky předpokládáme, má-li být korektní, že limita na levé straně rovnosti existuje. Pokud tomu tak je pro každý možný výsledek, nazveme příslušný experiment *statisticky regulárním*. V opačném případě hovoříme o *statisticky neregulárním* experimentu.

Pravděpodobnost jednotlivých výsledků přibližujeme v konkrétní realizaci statisticky regulárního experimentu s dostatečně vysokým počtem provedených pokusů prostřednictvím relativních četností - $P_k \approx N_k/N$. Věříme, stejně jako v případě jakéhokoliv jiného měření, že dostatečný počet opakování zajistí pouze minimální odchylku relativních četností od limitních pravděpodobností.

Rozdělení pravděpodobnosti, náhodné veličiny

Předpokládejme, že daný statistický experiment má konečný počet, řekněme n , možných výsledků. Uspořádanou n -tici pravděpodobností jednotlivých výsledků statisticky regulárního experimentu $[P_1, \dots, P_n]$ nazveme *rozdělením pravděpodobnosti*.

Vzhledem k definici pravděpodobnosti zřejmě platí

$$\sum_{k=1}^n P_k = 1.$$

Říkáme proto, že rozdělení $[P_1, \dots, P_n]$ je *normováno k jedničce*. Často však bývá výhodné pracovat s pravděpodobnostmi nenormovanými, které se od normovaných liší kladným multiplikatívním faktorem.

Provádíme-li v rámci daného experimentu měření nějaké veličiny X , může tato v závislosti na výsledku konkrétního pokusu nabývat obecně různých hodnot x_1, \dots, x_n . O veličině X proto hovoříme jako o *veličině náhodné*, neboť s různými pravděpodobnostmi nabývá náhodně různých hodnot.

Střední hodnota, střední kvadratická fluktuace

Pro náhodnou veličinu definujeme její *střední hodnotu*

$$\bar{x} \equiv \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{K=1}^N x_K,$$

kde N je celkový počet pokusů provedených v konkrétní realizaci daného experimentu a x_K hodnota veličiny X naměřená v K -tém pokusu.

V konkrétním měření ovšem střední hodnotu \bar{x} přibližujeme, za předpokladu velkého počtu opakování, vztahem

$$\bar{x} \approx \frac{1}{N} \sum_{K=1}^N x_K.$$

Střední hodnotu veličiny X je však možno získat i jiným způsobem. Stačí si uvědomit, že v celkovém počtu N pokusů se vyskytne první výsledek N_1 krát, druhý N_2 krát atd. Proto můžeme sumu $\sum_{K=1}^N x_K$ přepsat do tvaru $\sum_{k=1}^n N_k x_k$ a pro střední hodnotu psát

$$\bar{x} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^n N_k x_k = \sum_{k=1}^n \left(\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{N_k}{N} \right) x_k = \sum_{k=1}^n P_k x_k.$$

Střední hodnota veličiny X zadává průměrný výsledek, jehož měřením dosáhneme. Konkrétní výsledky získané v konkrétních pokusech (opakováních experimentu) se od této střední hodnoty obecně liší. Míru odlišnosti popisujeme tzv. *střední kvadratickou fluktací*

$$\Delta x \equiv \sqrt{\lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{K=1}^N (x_K - \bar{x})^2},$$

kterou můžeme, podobně jako střední hodnotu \bar{x} , počítat pomocí alternativní formule

$$\Delta x = \sqrt{\sum_{k=1}^n P_k (x_k - \bar{x})^2}.$$

Tento vzorec je možno dále po *snadných úpravách* převést do formálně jednoduššího, a proto často používaného tvaru

$$\Delta x \equiv \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2},$$

kde $\overline{x^2} \equiv \sum_{k=1}^n P_k x_k^2$. Střední kvadratická fluktace je vhodnou veličinou pro *odhad chyby* měření veličiny X .

6.4. HILBERTŮV PROSTOR

Hilbertův prostor je *úplný* lineární vektorový prostor se *skalárním součinem*.

Níže podáváme stručný výklad některých použitých pojmů. Bližší poučení lze nalézt např. v učebnici Formánkové.

Lineární vektorový prostor

(Komplexní) *lineární vektorový prostor (LVP)* je libovolná množina V , na které jsou definovány operace *sčítání* a *násobení (komplexním) číslem* splňující níže uvedené axiomy. Prvky LVP nazýváme *vektory* a v souladu s konvencí přijatou v kvantové teorii je budeme označovat symboly $|a\rangle, |b\rangle$ ap.

$$\begin{aligned} &\text{Axiomy LVP} \\ &|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) &= (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle, \\
\exists |o\rangle \in V \quad \forall |a\rangle \in V : |a\rangle + |o\rangle &= |o\rangle + |a\rangle = |a\rangle, \\
\alpha(|a\rangle + |b\rangle) &= \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle, \\
(\alpha + \beta)|a\rangle &= \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle, \\
\alpha(\beta|a\rangle) &= (\alpha\beta)|a\rangle, \\
1|a\rangle &= |a\rangle \quad (\Leftrightarrow 0|a\rangle = |o\rangle).
\end{aligned}$$

Vektor $|o\rangle$ se obvykle nazývá *nulovým vektorem*. Násobek vektoru číslem, $\alpha|a\rangle$, budeme někdy označovat alternativním symbolem $|\alpha a\rangle$. Podobně i pro součet $|a\rangle + |b\rangle$ užijeme občas ekvivalentní zápis $|a + b\rangle$.

Podle výše řečeného tedy existuje zobrazení $V \times V \rightarrow V$, které každé dvojici vektorů $|a\rangle$ a $|b\rangle$ z V přiřazuje jejich *součet* $|a\rangle + |b\rangle$, a zobrazení $\mathbb{C} \times V \rightarrow V$, které komplexnímu číslu α a vektoru $|a\rangle$ přiřazuje *násobek* $\alpha|a\rangle$. Tyto operace musí splňovat výše uvedenou soustavu axiomů platných pro všechny vektory z V a všechna komplexní čísla.

Skalární součin

Pod *skalárním součinem* na LVP V rozumíme zobrazení $V \times V \rightarrow \mathbb{C}$, které libovolné dvojici vektorů z V přiřazuje (komplexní) číslo a splňuje níže uvedenou soustavu axiomů. Skalární součin vektorů $|a\rangle$ a $|b\rangle$ budeme označovat v souladu se zvyklostmi zažitými v kvantové teorii symbolem $\langle a|b\rangle$.

Axiomy skalárního součinu

$$\begin{aligned}
\langle a|b\rangle &= \langle b|a\rangle^*, \\
\langle a|\beta b\rangle &= \beta \langle a|b\rangle, \\
\langle a|b + c\rangle &= \langle a|b\rangle + \langle a|c\rangle, \\
\langle a|a\rangle &\geq 0; \quad \langle a|a\rangle = 0 \Leftrightarrow |a\rangle = |o\rangle.
\end{aligned}$$

Hvězdičkou označujeme v prvním axiomu komplexní sdružení.

Pomocí skalárního součinu definujeme dále na V tzv. *Eukleidovskou normu* vektoru

$$\| |a\rangle \| = \sqrt{\langle a|a\rangle}.$$

Úplnost LVP se skalárním součinem

Z matematické analýzy víme, že každá posloupnost $\{\alpha_n\}$ reálných (či komplexních) čísel splňující tzv. *Cauchyovu podmínku*

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n_0 \in \mathbb{N} : m, n > n_0 \Rightarrow |\alpha_m - \alpha_n| < \varepsilon$$

má limitu, je konvergentní. Na obecném LVP se skalárním součinem však posloupnost vektorů $\{|a_n\rangle\}$ splňujících Cauchyovu podmínku

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n_0 \in \mathbb{N} : m, n > n_0 \Rightarrow \|\lvert a_m \rangle - \lvert a_n \rangle\| < \varepsilon$$

konvergentní nutně být nemusí. Její eventuální limita může např. ležet mimo množinu V .

LVP se skalárním součinem, jehož každá posloupnost vektorů splňujících Cauchyovu podmínku je konvergentní, a má tedy limitu z tohoto prostoru, nazveme *úplným*.

Separabilita

Hilbertovy prostory, které hrají významnou roli v kvantové teorii, jsou separabilní. Osvětleme proto stručně i tento pojem.

Obecná definice separability Hilbertova prostoru je komplikovaná a zcela překračuje rámec této encyklopedie. Pro naše účely postačí, budeme-li pod

separabilním Hilbertovým prostorem rozumět takový Hilbertův prostor V , na němž existuje *nejvýše spočetná množina* vektorů $\lvert e_n \rangle$ taková, že libovolný vektor $\lvert a \rangle$ můžeme psát jako lineární kombinaci $\lvert a \rangle = \sum_n \alpha_n \lvert e_n \rangle$.

V případě nekonečněrozměrných prostorů přechází suma na levé straně na nekonečnou řadu

$$\lvert a \rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} \alpha_n \lvert e_n \rangle,$$

jejíž konvergenci vyšetřujeme pomocí výše zavedené *Eukleidovské normy*.

6.5. OPERÁTORY NA HILBERTOVĚ PROSTORU

Teorie lineárních operátorů na *Hilbertových prostorech* tvoří velmi obtížnou matematickou disciplínu. Proto níže uvádíme pouze některé základní pojmy. Bližší poučení je možno nalézt ve specializované literatuře nebo též v monografii Formánkové.

Lineární operátory

Operátorem \hat{A} na Hilbertově prostoru V nazveme zobrazení z tohoto prostoru do sebe sama, $\hat{A} : V \rightarrow V$.

Množinu všech vektorů $z \in V$, pro které je toto zobrazení definováno, nazveme *definičním oborem* operátoru \hat{A} . Vektor přiřazený tímto zobrazením vektoru $\lvert a \rangle$ budeme označovat symbolem $\lvert \hat{A}a \rangle$ nebo též $\hat{A}\lvert a \rangle$.

Splňuje-li navíc toto zobrazení pro libovolnou dvojici vektorů $\lvert a \rangle$ a $\lvert b \rangle$ a libovolné komplexní číslo α relace

$$\hat{A}(|a\rangle + |b\rangle) = \hat{A}|a\rangle + \hat{A}|b\rangle,$$

$$\hat{A}(\alpha|a\rangle) = \alpha\hat{A}|a\rangle,$$

nazveme operátor \hat{A} *lineárním*.

U lineárních operátorů navíc vyžadujeme, aby jejich definiční obor byl lineárním podprostorem prostoru V . Musí být tedy uzavřený vzhledem ke sčítání vektorů a násobení vektorů komplexním číslem.

Neomezené operátory

Skalární součin $\langle a|b\rangle$ zadává na Hilbertově prostoru normu vektoru:

$$\| |a\rangle \| = \sqrt{\langle a|a\rangle}.$$

Operátor, pro nějž existuje taková kladná konstanta K , že pro každý vektor $|a\rangle$ z definičního oboru platí

$$\| \hat{A}|a\rangle \| \leq K \| |a\rangle \|,$$

nazveme operátorem *omezeným*. Operátor, který není omezený, nazveme operátorem *neomezeným*.

Neomezené operátory nejsou zpravidla definovány na celém prostoru V . Vždy proto musíme dbát na jejich definiční obor. Jednou z velkých matematických komplikací kvantové teorie je, že operátory přiřazené *dynamickým proměnným* jsou až na řídké výjimky neomezené. Omezené operátory je naopak možno vždy definovat tak, aby jejich definiční obor splýval s V .

Husté podmnožiny Hilbertova prostoru

Má-li operátor \hat{A} , jehož definiční obor nesplývá s celým Hilbertovým prostorem V , pokrývat V dostatečně účinně, musí jeho definiční obor vytvářet na tomto prostoru dostatečně hustou síť. Požadujeme proto, aby definiční obor operátoru \hat{A} byl *hustou podmnožinou* Hilbertova prostoru V .

Pod *hustou podmnožinou* přitom rozumíme takovou množinu $M \subset V$, že pro libovolný vektor $|a\rangle \in V$ a libovolné kladné číslo ε existuje vektor $|c\rangle \in M$ takový, že jeho vzdálenost od $|a\rangle$ je menší než zvolené ε , tj. $\| |a\rangle - |c\rangle \| < \varepsilon$.

Sdružený operátor

Nechť \hat{A} a \hat{A}^* jsou lineární operátory definované na V . Nechť navíc pro libovolnou dvojici vektorů $|a\rangle$ a $|b\rangle$ z nějaké husté podmnožiny V platí

$$\langle b | \hat{A}a \rangle = \langle \hat{A}^* b | a \rangle.$$

Pak operátor \hat{A}^* nazveme *sdruženým operátorem* k operátoru \hat{A} .

Samosdružené operátory

Je-li operátor roven svému sdruženému, $\hat{A} = \hat{A}^*$, nazveme jej *samosdruženým*.

Pozor však! Rovnost $\hat{A} = \hat{A}^*$ neznamená pouze, že je na nějaké husté podmnožině V splněn vztah $\langle b | \hat{A}a \rangle = \langle \hat{A}b | a \rangle$. Navíc si musí být navzájem rovny i definiční obory operátorů \hat{A} a \hat{A}^* .

Operátor splňující pouze podmínku $\langle b | \hat{A}a \rangle = \langle \hat{A}b | a \rangle$ se nazývá *operátorem symetrickým*.

V základních kursech kvantové teorie se obvykle nebere zřetel na definiční obory operátorů, a proto jsou často symetrické a samosdružené operátory zaměňovány. To ovšem není zcela korektní, neboť pro neomezené operátory samosdruženost sice implikuje symetrii, opak ale obecně neplatí.

Protože vzhledem k symetrii samosdruženého operátoru není významné, zda stojí u prvního či druhého činitele skalárního součinu, píšeme obvykle skalární součin pro samosdružený operátor \hat{A} ve tvaru $\langle b | \hat{A} | a \rangle$,

$$\langle b | \hat{A} | a \rangle \equiv \langle b | \hat{A}a \rangle = \langle \hat{A}b | a \rangle.$$

6.6. VLASTNÍ HODNOTY A VLASTNÍ VEKTORY SAMOSDRUŽENÝCH OPERÁTORŮ

Část teorie *lineárních operátorů* na *Hilbertových prostorech* zabývající se jejich vlastními vektory a vlastními hodnotami se obvykle nazývá *spektrální analýza* operátorů. I pro speciální případ *samosdružených operátorů* se jedná o velice komplikovanou matematickou teorii, z níž si můžeme nastínit pouze základní pojmy a fakta. Bližší poučení je možno nalézt ve specializované literatuře.

Vlastní hodnoty a vlastní vektory

Nechť \hat{A} je lineární operátor na Hilbertově prostoru V . Nenulový vektor $|a\rangle$ z tohoto prostoru nazveme *vlastním vektorem* operátoru \hat{A} odpovídajícím *vlastní hodnotě* (*vlastnímu číslu*) α , je-li splněna podmínka $\hat{A}|a\rangle = \alpha|a\rangle$.

Množinu všech vlastních hodnot nazýváme pak obvykle též *spektrém vlastních hodnot* operátoru \hat{A} .

Vlastními vektory operátorů reprezentujících v kvantové mechanice *dynamické proměnné* studovaného systému jsou speciální *vlnové funkce*. Obvykle je nazýváme *funkcemi vlastními*.

Lineární kombinace dvou vlastních vektorů, které odpovídají téže vlastní hodnotě operátoru \hat{A} , je zřejmě rovněž vlastním vektorem odpovídajícím stejné vlastní hodnotě.

Proto množina všech vlastních vektorů odpovídajících téže vlastní hodnotě, k níž přidáme nulový vektor, tvoří na V lineární podprostor.

Vlastní hodnoty a vlastní vektory samosdružených operátorů

Vlastní hodnoty samosdružených operátorů jsou reálné.

Pro (nenulový) vlastní vektor $|a\rangle$ samosdruženého operátoru \hat{A} a odpovídající vlastní hodnotu α totiž platí

$$\langle a|\hat{A}a\rangle = \langle a|\alpha a\rangle = \alpha \langle a|a\rangle \text{ a } \langle \hat{A}a|a\rangle = \langle \alpha a|a\rangle = \alpha^* \langle a|a\rangle.$$

Vzhledem k samosdruženosti operátoru \hat{A} platí ale též $\langle a|\hat{A}a\rangle = \langle \hat{A}a|a\rangle$, a tedy i $\alpha = \alpha^*$.

Vlastní vektory samosdruženého operátoru, které odpovídají různým vlastním hodnotám, jsou navzájem ortogonální.

Jsou-li totiž $|a\rangle$ a $|b\rangle$ vlastní vektory příslušné k různým vlastním hodnotám α a β , můžeme psát

$$\begin{aligned} \langle b|\hat{A}a\rangle &= \langle b|\alpha a\rangle = \alpha \langle b|a\rangle, \\ \langle \hat{A}b|a\rangle &= \langle \beta b|a\rangle = \beta^* \langle b|a\rangle = \beta \langle b|a\rangle. \end{aligned}$$

Dále však platí

$$\langle b|\hat{A}a\rangle = \langle \hat{A}b|a\rangle,$$

a proto též

$$\alpha \langle b|a\rangle = \beta \langle b|a\rangle.$$

Vlastní hodnoty α a β jsou ale podle předpokladu různé, proto musí nutně platit

$$\langle b|a\rangle = 0.$$

6.7. ALGEBRAICKÉ OPERACE S OPERÁTORY NA HILBERTOVÝCH PROSTORECH

Sčítání operátorů

Nechť \hat{A} a \hat{B} jsou dva *operátory* na *Hilbertově prostoru* V s definičními obory D_A a D_B . *Součtem* těchto operátorů, který budeme označovat symbolem $\hat{A} + \hat{B}$, rozumíme operátor s definičním oborem $D_{\hat{A}+\hat{B}} = D_A \cap D_B$ splňující pro každý vektor $|a\rangle \in V$ $(\hat{A} + \hat{B})|a\rangle \equiv \hat{A}|a\rangle + \hat{B}|a\rangle$.

Všimněme si rozdílu v interpretaci symbolu „+“ na levé a pravé straně uvedené definiční rovnosti. Zatímco výraz $\hat{A} + \hat{B}$ označuje sčítání na množině operátorů definovaných na Hilbertově prostoru V , tedy operaci nově zaváděnou, $\hat{A}|a\rangle + \hat{B}|a\rangle$ je „obyčejný“ *součet vektorů* z tohoto prostoru.

Matematickou indukci je možno operátorové sčítání rozšířit na libovolný konečný počet sčítanců. Vzhledem k axiomům lineárního vektorového prostoru snadno vidíme, že sčítání operátorů je *komutativní* i *asociativní*.

Násobení operátoru číslem

Nechť \hat{A} je operátor na Hilbertově prostoru V a α obecně komplexní číslo. Pak α -násobkem tohoto operátoru, který budeme označovat symbolem $\alpha\hat{A}$, rozumíme operátor splňující pro každý vektor $|a\rangle \in D_A$ (definiční obor operátoru $\alpha\hat{A}$ je tedy totožný s definičním oborem operátoru \hat{A}) $(\alpha\hat{A})|a\rangle \equiv \alpha(\hat{A}|a\rangle)$.

Podobně jako výše sčítání je nyní i násobení na levé a pravé straně definiční rovnosti poněkud odlišné. Zatímco na levé straně násobíme číslem operátor \hat{A} působící na Hilbertově prostoru V , na straně pravé vektor z tohoto prostoru.

Násobení operátorů

Nechť \hat{A} a \hat{B} jsou dva operátory na Hilbertově prostoru V s definičními obory D_A a D_B . *Součinem* těchto operátorů, který budeme označovat symbolem $\hat{A}\hat{B}$, rozumíme operátor splňující pro každý vektor $|a\rangle \in V$, pro něž jsou požadované operace definovány,
 $(\hat{A}\hat{B})|a\rangle \equiv \hat{A}(\hat{B}|a\rangle)$.

Působení součinu dvou operátorů není tedy ničím jiným než výsledkem postupné aplikace jednotlivých operátorů, a to v pořadí, v jakém jsou v součinu zapsány. Definiční obor operátoru $\hat{A}\hat{B}$ je proto zřejmě dán následujícím předpisem:
 $D_{AB} = \{|a\rangle \in D_B : \hat{B}|a\rangle \in D_A\}$.

Operátory na Hilbertově prostoru V jsou podle definice zobrazení tohoto prostoru do sebe sama. Násobení operátorů pak ovšem odpovídá skládání těchto zobrazení.

Matematickou indukci je možno operátorové násobení rozšířit na libovolný konečný počet činitelů tak, že bude *asociativní*. Násobení operátorů však *není komutativní*, obecně záleží na pořadí činitelů v operátorovém součinu. Je ovšem *distributivní* vůči operátorovému sčítání.

Komutátor a antikomutátor operátorů

Komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B} , zpravidla označovaný symbolem $[\hat{A}, \hat{B}]$, je operátor definovaný předpisem
 $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

V kvantové teorii bývá často užitečný i analogicky definovaný *antikomutátor* dvou operátorů:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Umocňování operátorů

Pomocí násobení operátorů můžeme přímočaře definovat jejich obecnou *mocninu s kladným exponentem*

$$\hat{A}^n \equiv \underbrace{\hat{A} \dots \hat{A}}_{n\text{-krát}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

a pro operátory, k nimž existuje *operátor inverzní* \hat{A}^{-1} , též *mocninu s exponentem záporným*

$$\hat{A}^{-n} \equiv \underbrace{(\hat{A}^{-1}) \dots (\hat{A}^{-1})}_{n\text{-krát}}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Obě definice můžeme ještě dále doplnit velmi přijatelným vztahem

$$\hat{A}^0 \equiv \hat{1},$$

kde $\hat{1}$ je *operátor identity*, tj. $\hat{1}|a\rangle = |a\rangle$ pro každé $|a\rangle \in V$.

Funkce operátoru

Nechť $f(x)$ je analytická funkce, kterou je možno na okolí $x = 0$ rozvést do

McLaurinovy řady $f(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} \xi_k x^k$, kde $\xi_k = f^{(k)}(0)/k!$, a necht' \hat{A} je *operátor*

na *Hilbertově prostoru* V . Pak pod *funkcí operátoru* $f(\hat{A})$ rozumíme

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{k=0}^{+\infty} \xi_k \hat{A}^k.$$

Částečné součty uvedené řady je možno bez větších potíží vyčíslit pomocí výše uvedených definic sčítání a umocňování operátorů a násobení operátoru číslem. Konvergenci samotné řady je pak nutno vyšetřovat *bodově* pro různé vektory z V .

Tj. musíme vyšetřovat konvergenci řad typu $\sum_{k=0}^{+\infty} (\xi_k \hat{A}^k |a\rangle)$, kde $|a\rangle \in V$.

Analogickým způsobem můžeme definovat i funkce více operátorů. Musíme však dávat velký pozor na to, že násobení operátorů není obecně komutativní!

6.8. PERMUTACE

Pod *permutací* P N -prvkové množiny $M = \{m_1, \dots, m_N\}$ rozumíme její vzájemně jednoznačné zobrazení na sebe sama, $P: M \rightarrow M$.

Chápeme-li tuto množinu jako uspořádanou N -tici prvků, znamená permutace změnu jejich pořadí.

Celkový počet permutací, které můžeme pro zadanou N -prvkovou množinu zkonstruovat, je dán, bereme-li v úvahu i triviální permutaci, při níž se pořadí prvků nemění, faktoriálem počtu jejich prvků, $N! \equiv 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot N$.

Speciálním typem permutace je výměna dvou zvolených prvků. Tuto permutaci obvykle nazýváme *transpozicí*.

Je možno ukázat, že libovolnou permutaci můžeme získat následnou aplikací jistého počtu transpozic. Pochopitelně existuje více (nekonečně mnoho) způsobů, jak zadanou permutaci získat. Proto není počet potřebných transpozic určen jednoznačně. Pro zadanou permutaci P je však jednoznačně určeno, zda tento počet bude dán lichým či sudým číslem. Podle toho přiřazujeme permutaci určité *znaménko*, které označujeme obvykle symbolem $\text{sign}(P)$. Je-li počet transpozic nutných ke konstrukci permutace P lichý, přiřadíme jí znaménko $\text{sign}(P) = -1$ a hovoříme o ní jako o *permutaci liché*, je-li naopak sudý, pokládáme $\text{sign}(P) = +1$ a permutaci nazveme *sudou*.

VYSVĚTLIVKY

Kvantování

Pod *kvantováním* rozumíme fakt, že některé fyzikální veličiny (kupř. energie nebo moment hybnosti) mohou nabývat jen některých klasicky přípustných hodnot, které jsou od sebe zřetelně odděleny intervaly hodnot zakázaných.

Rychlost světla

$$c = 2,997924580 \cdot 10^8 \text{ m / s}$$

Boltzmannova konstanta

$$k_B = 1,380662 \cdot 10^{-23} \text{ J / K}$$

Elementární elektrický náboj

$$e = 1,6021892 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Permitivita vakua

$$\epsilon_0 = 8,854187818 \cdot 10^{-12} \text{ F / m}$$

Polární souřadnice

Polární souřadnice v rovině (r, φ) ($0 \leq r < +\infty$, $0 \leq \varphi < 2\pi$) souvisejí s kartézskými souřadnicemi (x, y) prostřednictvím transformačních vztahů $x = r \cos \varphi$ a $y = r \sin \varphi$.

Potenciálové pole

Vektorové pole $\vec{F}(\vec{r})$ nazveme *potenciálovým*, pokud existuje skalární funkce $V(\vec{r})$ splňující $\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r})$, kde ∇ je vektorový operátor. Funkci $V(\vec{r})$ pak obvykle nazýváme *potenciálem* pole $\vec{F}(\vec{r})$.

Gradient

$$\text{grad } f \equiv \nabla f \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right).$$

Laplaceův operátor

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Kroneckerovo delta

$$\delta_{ij} \equiv 1 \quad \text{pro } i = j$$

$$\delta_{ij} \equiv 0 \quad \text{pro } i \neq j$$

Hustota veličiny

Hustotu ρ veličiny X spojitě rozložené v prostoru definujeme v zadaném bodě \vec{r} vztahem $\rho(\vec{r}) \equiv \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta X}{\Delta V}$, kde ΔV je objemový element obsahující bod \vec{r} a ΔX množství veličiny X v tomto objemu obsažené.

Hustota toku veličiny

Pod *hustotou toku* veličiny X rozumíme takové vektorové pole \vec{j} , jehož plošný integrál 2. druhu $\iint_{\Sigma} \vec{j} \cdot d\vec{S}$ udává množství této veličiny, které proteče za jednotku času orientovanou plochou Σ .

Divergence

$$\operatorname{div} \vec{A} \equiv \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}.$$

Gaussova-Ostrogradského věta

Pro spojitě a spojitě diferencovatelné vektorové pole $\vec{A}(\vec{r})$ a prostorovou oblast V s dostatečně hladkou hranicí ∂V můžeme psát $\int_V \operatorname{div} \vec{A} d^3\vec{r} = \iint_{\partial V} \vec{A} \cdot d\vec{S}$, kde element plochy $d\vec{S}$ má orientaci vektoru vnější normály k ploše ∂V .

Zobecněné Kroneckerovo delta

$$\delta_{qs} \equiv 1 \quad \text{pro } \mathbf{q} = \mathbf{s} \quad (q_1 = s_1, q_2 = s_2, \dots, q_K = s_K)$$

$$\delta_{qs} \equiv 0 \quad \text{pro } \mathbf{q} \neq \mathbf{s} \quad (q_I \neq s_I \text{ alespoň pro jedno } I, 1 \leq I \leq K)$$

Dynamické systémy

Teorie dynamických systémů se zabývá teoretickým studiem modelů, jejichž časový vývoj je popsán nelineárními evolučními rovnicemi. Soustřeďuje se především na závislost vývoje těchto modelů na neurčitosti počátečních podmínek a přechod od deterministického chování k chaosu.

Modifikovaná Gaussova-Ostrogradského věta

Pro spojitou a spojitě diferencovatelnou skalární funkci $f(\vec{r})$ a prostorovou oblast V s dostatečně hladkou hranicí ∂V můžeme psát $\int_V \nabla f \cdot d^3\vec{r} = \iiint_{\partial V} f \cdot d\vec{S}$, kde element plochy $d\vec{S}$ má orientaci vektoru vnější normály k ploše ∂V

Poissonovy závorky

$\{A, B\} \equiv \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right)$, kde q_j a p_j jsou zobecněné souřadnice a hybnosti systému.

Levi-Civitův symbol

$\epsilon_{ijk} \equiv \text{sign}[(j-i)(k-i)(k-j)]$, kde symbol sign označuje znaménko výrazu v hranatých závorkách: $\text{sign}[x] = 1$ pro $x > 0$, $\text{sign}[x] = -1$ pro $x < 0$ a $\text{sign}[x] = 0$ pro $x = 0$.

Sférické souřadnice

Sférické souřadnice v prostoru (r, θ, φ) ($0 \leq r < +\infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$) souvisejí s kartézskými souřadnicemi (x, y, z) prostřednictvím vztahů $x = r \cos \varphi \sin \theta$, $y = r \sin \varphi \sin \theta$ a $z = r \cos \theta$.

Kulové funkce

$Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)$, kde P_l^m ($l = 0, 1, 2, \dots$ a $m = -l, -l+1, \dots, l-1$), l) jsou přidružené Legendrovy funkce $P_l^m(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$ a konstantní multiplikativní faktor zajišťuje vhodnou normalizaci.

Rotace

$$[\text{rot } \vec{A}]_x \equiv \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z},$$

$$[\text{rot } \vec{A}]_y \equiv \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x},$$

$$[\text{rot } \vec{A}]_z \equiv \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$$

Hermitovská matice

Hermitovská matice je čtvercová matice, jejíž prvky A_{ij} splňují relace $A_{ji} = A_{ij}^*$, kde hvězdičkou označujeme komplexní sdružení. V případě reálných matic je hermitovská matice *maticí symetrickou*, $A_{ji} = A_{ij}$.

Hermiteovy polynomy

$$H_n(x) \equiv (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2).$$

Protonové číslo

Protonové číslo udává počet protonů v atomovém jádře a po vynásobení elementárním elektrickým nábojem i celkový elektrický náboj jádra.

Základní fyzikální interakce

Mezi základní (fundamentální) fyzikální interakce zahrnujeme interakci *gravitační, elektromagnetickou, slabou a silnou*. Kvantová teorie pole popisuje velmi dobře poslední tři interakce, kvantování gravitačního pole není dosud uspokojivě vyřešeno.

Elektroslabé interakce

Teorie elektroslabých interakcí (GSW model) sjednocuje popis elektromagnetických a slabých interakcí do jediné univerzální teorie. V 60. letech 20. století byla formulována A. Salamem, S. Glashowem a S. Weinbergem.

Kalibrační pole

V rámci *teorie kalibračních polí* jsou existence i vlastnosti základních fyzikálních interakcí (elektromagnetické, slabé a silné) důsledkem fundamentálních symetrií vesmíru.

Slabá interakce

Slabá interakce je např. zodpovědná za beta rozpad některých atomových jader, tedy za emisi elektronů či pozitronů z nich. Má extrémně malý dosah.

Silná interakce

Silně interagují (elementární) částice nazývané *hadrony*. Mezi ně řadíme například, kromě mnoha jiných, i neutrony a protony. Silná interakce drží pohromadě atomová jádra, která by se bez ní velmi rychle rozpadla v důsledku elektrických odpuzivých sil působících mezi kladně nabitými protony. Její dosah je dán zhruba rozměrem atomových jader ($\approx 10^{-15}$ m).

Gravitační interakce

Gravitační interakce je ze všech elementárních interakcí (s výjimkou interakce slabé) nejslabší. V mikroskopických a makroskopických měřících je zcela zanedbatelná, má však nekonečný dosah a je univerzální, působí mezi všemi tělesy ve vesmíru. Její význam prudce vzrůstá v tzv. megasvětě (tj. v oblasti velkých vzdáleností a zejména velkých hmotností). Pro slabá gravitační pole je úspěšně popsána Newtonovým gravitačním zákonem, v případě silných polí je zapotřebí k popisu gravitačního působení použít Einsteinovu obecnou teorii relativity.

Per partes

$$\int_a^b \left(\frac{df}{dx}(x)g(x) \right) dx = [f(x)g(x)]_a^b - \int_a^b \left(f(x) \frac{dg}{dx}(x) \right) dx, \quad \text{kde } [f(x)g(x)]_a^b \equiv f(b)g(b) - f(a)g(a)$$

Nejvýše spočetná množina

Pod *nejvýše spočetnou množinou* rozumíme množinu, která je buď konečná, nebo nekonečná a spočetná (tedy ekvivalentní množině přirozených čísel).

Inverzní operátor

Nechť $\hat{A}: V \rightarrow V$ je prostý operátor na Hilbertově prostoru V s definičním oborem D_A a oborem hodnot H_A . Pod *inverzním operátorem* k \hat{A} pak rozumíme operátor $\hat{A}^{-1}: V \rightarrow V$ s definičním oborem H_A splňující $\hat{A}^{-1}\hat{A}|a\rangle = |a\rangle$ pro každé $|a\rangle \in D_A$ a $\hat{A}\hat{A}^{-1}|b\rangle = |b\rangle$ pro každé $|b\rangle \in H_A$.

Bodová konvergence

Řekneme, že posloupnost operátorů \hat{A}_n *konverguje bodově* na Hilbertově prostoru V k operátoru \hat{A} právě, když pro každý vektor $|a\rangle$ z průniku definičních oborů operátorů \hat{A}_n konverguje posloupnost vektorů $\hat{A}_n|a\rangle$ k vektoru $\hat{A}|a\rangle$ (podle normy zadané skalárním součinem na prostoru V).

LITERATURA

- [1] FORMÁNEK, J. *Úvod do kvantové teorie*. 1. vyd. Praha: Academia, 1983. 903 s.
- [2] BEISER, A. *Úvod do moderní fyziky*. 1. vyd. Praha: Academia, 1978. 628 s.
- [3] POLÁK, R. a ZAHRADNÍK, R. *Kvantová chemie*, 1. vyd. Praha/Bratislava: SNTL/Alfa, 1985. 466 s. ISBN 04-621-85.
- [4] HAJKO, V., aj. *Fyzika v experimentoch*. 1. vyd. Bratislava: Veda, 1988. 415 s.
- [5] KVASNICA, J. *Teorie elektromagnetického pole*. 1. vyd. Praha: Academia, 1985. 450 s.
- [6] FORMÁNEK, J. *Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole I, 2*. 1. vyd. Praha: Karolinum, 2000. 932s. ISBN 80-246-0063-3.
- [7] BROŽ, J., ROSKOVEC, V. a VALOUCH, M. *Fyzikální a matematické tabulky*. 1. vyd. Praha: SNTL, 1980. 305 s.
- [8] REKTORYS, K., aj. *Přehled užití matematiky*. 4. vyd. Praha: SNTL, 1981. 1139 s.