druhou štěrbinou a dopadly na E, zatímco zbývající byly absorbovány v detektoru u štěrbiny. Tato alternativa je zřejmě ekvivalentní zakrytí jedné ze štěrbin, takže výsledek pokusu již známe: $P_1(x)$ nebo $P_2(x)$. Dáme-li detektor napřed k jedné a potom k druhé štěrbině, bude nakonec v místě E rozložení $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$. Avšak i v provedení s Comptonovým jevem, kdy jsou otevřeny obě štěrbiny a každý z prošlých elektronů u jedné z nich interagoval s fotonem, dá výsledek $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$. Experiment tedy potvrzuje výsledek, který jsme odvodili z předpokladu, že známe trajektorie elektronů. Jinými slovy: experiment, který je uspořádán tak, aby prokázal korpuskulární vlastnosti mikročástic (existenci klasické trajektorie) dá očekávaný výsledek (7).

Odstraníme-li však zařízení, které má rozhodnout kterou štěrbinou elektron prošel, potom dostaneme rozložení $P(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2$, odpovídající rozložení intenzity při difrakci na dvojštěrbině. Uspořádáme-li tedy pokus tak, aby prokázal vlnovou povahu částic (typickým představitelem jsou všechny difrakční experimenty), potom získáme výsledek očekávaný na základě vlnové představy o částicích.

V uvedených závěrech není nic paradoxního, uvědomíme-li si, že jde o dva různé experimenty; vliv měřícího zařízení pro určení, kterou štěrbinou elektron prošel, není zanedbatelný, ale naopak, mění zásadním způsobem funkci P(x). Jak tedy máme nerozporně uvažovat a vyjadřovat se o dějích v mikrosvětě ? O trajektorii částice (o průchodu štěrbinou $F_1$ nebo $F_2$) můžeme uvažovat a mluvit pouze tehdy, jestliže jde o experiment, který je schopen rozlišit (je postaven tak aby rozlišil) průchod štěrbinou $F_1$ a $F_2$. O trajektorii částice (o průchodu štěrbinou) však nesmíme uvažovat při rozboru experimentů, které jsou postaveny tak, že nedovolují rozhodnout, kterou štěrbinou elektron prošel. Jedině tak nebudete docházet k rozporům a chybným závěrům.

## 3. Interpretace vlnové funkce

Vlnové projevy částic i univerzální platnost de Broglieho vztahu $\lambda = h/p$, jsou přesvědčivě experimentálně prokázány. S každou částicí je tedy třeba "spojovat" nějakou vlnu, jejímž matematickým vyjádřením je vlnová funkce

$$\psi(x,y,z;t) \quad (\ \psi(\vec{r},t)\ )\ ,$$

závislá na prostorových souřadnicích x,y,z ( $\vec{r}=(x,y,z)$ ) a čase t . Pro volnou částici je to rovinná vlna, jejíž analytické vyjádření je dáno (1); jak se získá $\psi(\vec{r},t)$ pro částice v silových polích, uvidíme v kap.III.

Před námi však nyní stojí otázka, jak fyzikálně interpretovat vlnovou funkci. Tento problém byl žhavý především v počátcích kvantové mechaniky. Tak např. de Broglie zprvu předpokládal, že jde o vlnu-pilota, která unáší částici, podobně jako vlna na vodě unáší plovoucí těleso. Velice přirozenou se zdála být Schrödingerova interpretace, podle níž kvadrát modulu vlnové funkce - $|\psi(\vec{r},t)|^2$ - měl charakterizovat hustotu hmoty; hmota a náboj nebyly v tomto pojetí zkoncentrovány do bodu, ale "rozmazány" v nějaké části prostoru s hustotou úměrnou $|\psi|^2$ ( samotná vlnová funkce nebyla použitelná, neboť může nabývat kladných i záporných hodnot). Brzy se však ukázalo, že tyto interpretace vedou k rozporům v rozvíjené teoretické stavbě kvantové mechaniky, nebo neodpovídají experimentálním faktům. Tak např. Schrödingerova interpretace vedla k rozštěpení částice při průchodu potenciálovou bariérou (kap.III), což nebylo nikdy pozorováno.

## 3.1) Bornova pravděpodobnostní interpretace

Dnes je takřka všeobecně přijímanou Bornova pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce. Nutno však říci, že neexistuje obecný důkaz nemožnosti nalézt interpretaci jinou, která by stejně jako Bornova, byla konsistentní (nevedla k rozporům) s existující stavbou kvantové mechaniky a experimentálními poznatky. Práce v tomto směru se proto objevují i dnes, rovnocenný partner pravděpodobnostní interpretace však zatím neexistuje (podrobnější informace, včetně rozboru hypotézy o tzv. skrytých parametrech, viz[7],[9] ).

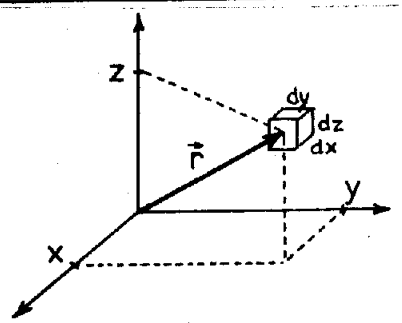
Pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce navozoval již rozbor difrakce na dvojštěrbině; zavedli jsme tam amplitudy pravděpodobnosti (vlnové funkce), jejichž kvadrát modulu určoval pravděpodobnost výskytu částice.

V kvantové mechanice <u>se postuluje, že vlnová funkce $\psi$ plně určuje dynamický stav částice</u>;to znamená, že <u>ve vlnové funkci jsou obsaženy všechny informace</u>, které je možné <u>o částici</u> získat.

Podle Maxe Borna se $\psi$ interpretuje jako <u>amplituda pravděpodobnosti</u> výskytu částice; výraz

$$dP(x,y,z;t) = |\psi(x,y,z;t)|^2 dxdydz \qquad (11)$$

udává <u>pravděpodobnost nalezení částice</u>, v čase t, v infinitesimálním objemu dxdydz, opsaném kolem bodu se souřadnicemi (x,y,z).




Obr. 9
Pravděpodobnost, že v čase t bude částice nalezena v infinitesimálním objemu dxdydz opsaném kolem bodu se souřadnicemi (x,y,z) je $|\psi(x,y,z;t)|^2 dxdydz$ (nebo vektorově: $|\psi(\vec{r};t)|^2 d\tau$ )

Z toho plyne:

Pravděpodobnost, že v čase t bude částice v nějakém konečném objemu V, se získá integrací přes V :

$$\iiint_{(V)} |\psi(x,y,z;t)|^2 \, dxdydz \qquad (12)$$

Pravděpodobnost, že v čase t je částice kdekoliv v prostoru, se získá integrací přes celý prostor:

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,y,z;t)|^2 \, dxdydz \qquad (13)$$

Zopakujme vše ještě pro jednorozměrný prostor (částice se pohybuje pouze ve směru jedné souřadné osy, řekněme po ose x); v tomto případě máme pouze funkci $\psi(x;t)$ a :

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena v infinitesimálním intervalu $\langle x, x+dx\rangle$ je (obr.10a)

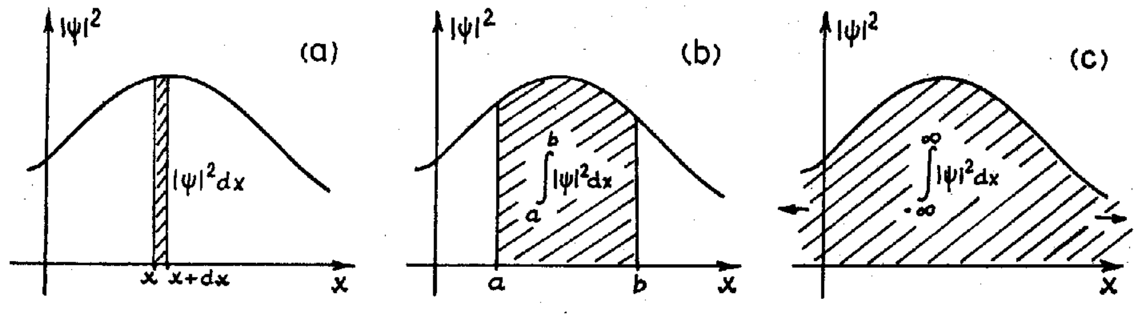
$$dP(x;t) = |\psi(x;t)|^2 dx \qquad (14)$$

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena v konečném intervalu $\langle a,b\rangle$ na ose x je (obr.10b)

$$\int_a^b |\psi(x;t)|^2 dx \qquad (15)$$

Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena na ose x je (obr.10c)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x;t)|^2 dx \qquad (16)$$




Obr. 10. Pravděpodobnost, že částice bude v čase t nalezena: (a) v infinitesimálním okolí bodu x, (b) v intervalu $\langle a,b\rangle$, (c) kdekoliv na ose x ( geometricky je integrál roven (pravděpodobnost úměrná) vyšrafované ploše pod křivkou).

Znovu zdůrazněme, že vlnová funkce je obecně komplexní (nabývá komplexních hodnot), tj.

$$\psi(x,y,z;t) = \psi^{(r)}(x,y,z;t) + i\,\psi^{(i)}(x,y,z;t) \qquad (17)$$

kde $\psi^{(r)}$ je její reálná část ( $\psi^{(r)} = \mathrm{Re}\,\psi$ ) a
$\psi^{(i)}$ je její imaginární část ( $\psi^{(i)} = \mathrm{Im}\,\psi$ ).

Proto stále mluvíme o kvadrátu modulu vlnové funkce

$$|\psi(\vec{r};t)|^2 = \psi^*(\vec{r};t)\,\psi(\vec{r};t) = |\psi^{(r)}(\vec{r};t)|^2 + |\psi^{(i)}(\vec{r};t)|^2 \tag{18}$$

kde $\psi^*(\vec{r};t) = \psi^{(r)}(\vec{r};t) - i\,\psi^{(i)}(\vec{r};t)$ je funkce komplexně sdružená.

Je-li funkce reálná ($\mathrm{Im}\,\psi \equiv 0$), potom pochopitelně $|\psi(\vec{r};t)|^2 = \psi^2(\vec{r};t)$.

Z přijaté interpretace vlnové funkce a její role v integrálech (12),(13) ( resp. (15),(16)) vyplývá název hustota pravděpodobnosti pro výraz

$$|\psi(\vec{r};t)|^2 \tag{19}$$

## 3.2) Normalizace vlnové funkce

V matematice se zavádí pravděpodobnost jako funkce, která nabývá hodnoty z intervalu $\langle 0,\ 1 \rangle$ ; nula znamená, že jev jistě nenastane a jednička znamená, že jev jistě nastane. Protože tuto konvenci přijímáme i pro naše funkce $P(\vec{r};t)$, měl by integrál (13),resp. (16), být roven jedné , neboť vyjadřuje pravděpodobnost (rovnou jistotě), že částice vůbec někde v prostoru je. Může se ovšem stát, že funkce $\psi$ (kterou pro částici získáme např. řešením Schrödingerovy rovnice) tuto podmínku nesplňuje; říkáme, že funkce není normalizovaná. V takovém případě můžeme vždy provést její normalizaci jednoduše tak, že ji vynásobíme takovou normalizační konstantou $C$ , aby platilo

$$N = |C|^2 \iiint |\psi(x,y,z;t)|^2 dxdydz = 1 \tag{20}$$

Normalizační konstantu C určíme z takto získané rovnice.
Splňuje-li funkce $\psi$ normalizační podmínku (20), říkáme, že je normalizovaná. Integrál na levé straně (20) se nazývá normalizační integrál a a definuje normu N vlnové funkce $\psi$ . Je možné ukázat ([11 - 14] ), že přijatá interpretace $\psi$ vede k požadavku nezávislosti normy vlnové funkce na čase.

## 3.3) Vlnová funkce soustavy částic

Dosud jsme mluvili o vlnové funkci pro jednu částici. Vše co o ní bylo řečeno je možné zobecnit na vlnovou funkci kvantové soustavy, která je tvořena více částicemi.

Postuluje se, že

stav kvantové soustavy je plně určen vlnovou funkcí, závislou na všech souřadnicích, nutných pro popis soustavy.

Tak např. pro soustavu dvou částic ( jakou je třeba atom vodíku složený z protonu + elektronu ) je to vlnová funkce

$$\psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2;t) \qquad (\text{nebo: } \psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2;t)\ ) \tag{21}$$

kde $\vec{r}_i = (x_i,y_i,z_i)$ je polohový vektor i-té částice ($i = 1,2$).

Interpretuje se takto:

$$|\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2;t)|^2 d\tau_1\, d\tau_2 \quad (d\tau_i = dx_i dy_i dz_i\ ;\ i=1,2) \tag{22}$$

udává pravděpodobnost, že v čase t je částice 1 v elementu $d\tau_1$ v okolí bodu $\vec{r}_1$ a současně částice 2 v elementu $d\tau_2$ v okolí bodu $\vec{r}_2$.

Tato interpretace vyžaduje určitou modifikaci v případě, že jde o systém stejných částic (např. soubor elektronů v atomu); podrobně se touto otázkou budeme zabývat v kap.VI.

Uveďme si ještě normalizační podmínku (20) pro funkci (21)

$$|C|^2 \iiiint\!\!\iint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2;t)|^2\, d\tau_1 d\tau_2 = 1 \tag{23}$$

Zobecnění vztahů (21)-(23) na soustavu N částic by již nemělo činit potíže.

Z pověděného je zřejmé, že vlnová funkce $\psi$ není nějakou vlnou v 3-rozměrném prostoru. V případě soustavy N částic je to funkce 3N proměnných a představuje tedy vlnu v 3N-rozměrném prostoru. V kap.V zavedeme pro částice ještě spinovou proměnnou $\sigma$ , takže i vlnová funkce jedné částice bude záviset na čtyřech souřadnicích; obecně vždy, když se ukáže potřeba zavést nové souřadnice pro úplnější určení soustavy, projeví se to závislostí $\psi$ na těchto nových souřadnicích.

Upozornění:
Nebudeme-li v dalším textu pro přehlednost vypisovat u vlnových funkcí proměnné ( budeme psát např. jen $\psi$ , $\varphi$ apod.) rozumí se, že závisí na všech souřadnicích nutných k určení stavu kvantové soustavy.

## 3.4) Vlastnosti vlnových funkcí

Z přijaté fyzikální interpretace vyplývají následující požadavky na vlnové funkce; vlnová funkce musí být :

(i) všude spojitá i se všemi svými prvními derivacemi,

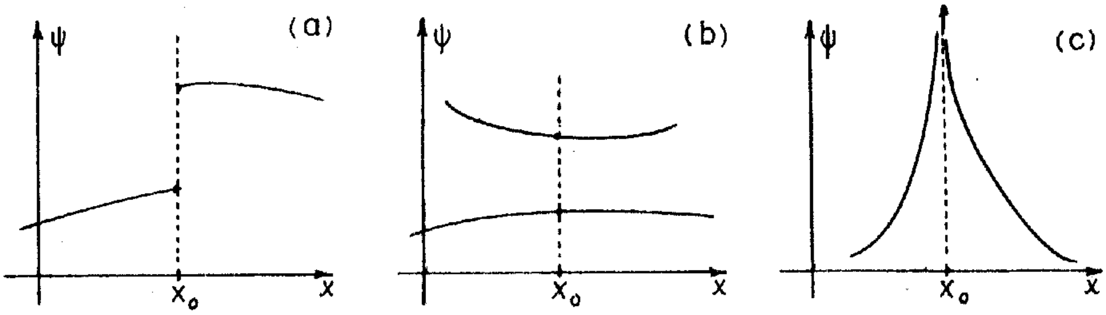
(ii) jednoznačná,

(iii) konečná,

(iv) kvadraticky integrovatelná, tj. musí existovat (konvergovat) normalizační integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d\tau$$

Vyjma požadavek spojitosti prvních derivací, který se ozřejmí v kap.III, jsou důvody pro zbývající požadavky nasnadě: nespojitá funkce (obr.11a) by v bodě nespojitosti dávala nejednoznačnou pravděpodobnost výskytu částice; totéž by (i když z jiného důvodu) dávala funkce mnohoznačná (obr.11b); funkce, která by pro nějaké $x_0$ šla do nekonečna (obr.11c), by dávala v tomto bodě nekonečně velkou hustotu pravděpodobnosti výskytu částice; možnost normalizovat vlnovou funkci, vyplývající z požadavku (iv), je nezbytným předpokladem pro zavedení pravděpodobnostní interpretace.




Obr. 11. Schematické znázornění funkce $\psi(x)$ : (a) nespojité v bodě $x_0$, (b) víceznačné (má více větví; k jednomu x máme více funkčních hodnot), (c) jdoucí pro $x \to x_0$ do $\infty$ (nejčastěji budeme muset vylučovat funkce, které pro $|x| \to \infty$ divergují).

## 4. Princip superpozice

### 4.1) Superpozice kvantových stavů

Základní ideou každé vlnové teorie je: jsou-li $\psi_1$, $\psi_2$ možné vlnové funkce, potom libovolná lineární kombinace

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \tag{24}$$

kde $c_1$, $c_2$ jsou libovolné konstanty, je též možnou vlnovou funkcí.

Toto tvrzení je známo jako princip superpozice. Je to základní hypotéza, potřebná k objasnění interference vlnění, která byla úspěšně aplikována v mnoha oblastech klasické fyziky (elektromagnetické pole, akustika apod) a v odst. 2.3 (vztah (10)) jsme ji užili i pro skládání amplitud pravděpodobnosti.