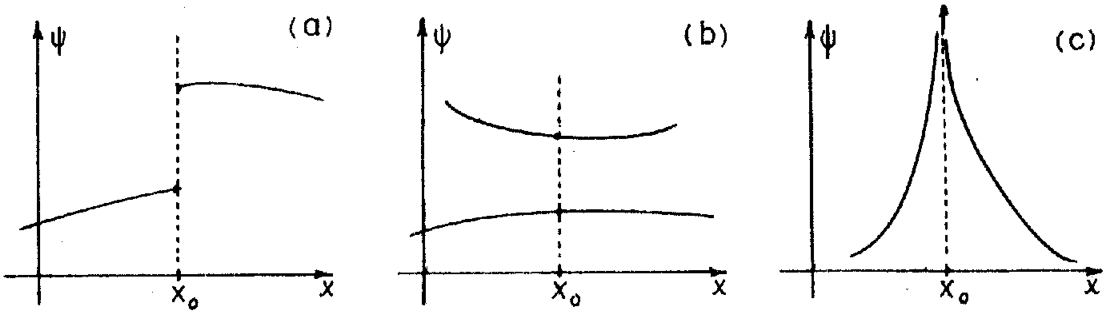
(iv) kvadraticky integrovatelná, tj. musí existovat (konvergovat) normalizační integrál

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

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.

Princip superpozice kvantových stavů se rovněž bere za základní princip kvantové mechaniky. Zformulujeme ho takto:

Jestliže $\psi_1$, $\psi_2$ jsou vlnové funkce příslušející dvěma možným stavům kvantové soustavy, potom soustava může být také ve stavu s vlnovou funkcí

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \tag{25}$$

kde $c_1$, $c_2$ jsou libovolná komplexní čísla.

Opětovným opakování tohoto tvrzení dojdeme k závěru, že vlnová funkce možného stavu soustavy, může být vytvořena z libovolného počtu možných vlnových funkcí:

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_i \psi_i + \dots = \sum_i c_i \psi_i \tag{26}$$

Z hlediska matematického formalismu má přijetí principu superpozice významný důsledek: rovnice , kterým mají vyhovovat vlnové funkce, musí být lineární. Pro lineární rovnici totiž platí: jsou-li $\psi_1$, $\psi_2$ řešení rovnice, potom také libovolná lineární kombinace $(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)$ je řešením této rovnice.

Např. diferenciální rovnice

$$\frac{d}{dx} \psi(x) + a \psi(x) = 0 \quad \text{(a je konstanta)}$$

je lineární, neboť této podmínce vyhovuje, zatímco např. rovnice

$$\left[ \frac{d}{dx} \psi(x) \right]^2 + a \psi(x) = 0, \quad \frac{d}{dx} \psi(x) + a \psi^2(x) = 0$$

jsou nelineární.

## 4.2) Normalizace de Broglieho vlnové funkce

Podle de Broglieho hypotézy je volné částici s hybností $\vec{p}$, přiřazena vlnová funkce (1) - rovinná monochromatická vlna. Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný případ (částice je stále na ose x); po dosazení ze vztahu (2)

$$\psi_p(x;t) = C \exp\left[ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right] \tag{27}$$

Index p u $\psi$ značí, že jde o vlnovou funkci pro částici ve stavu s hybností p; je to speciální případ tzv. kvantového čísla. Obecně kvantovými čísly nazýváme veličiny, kterými rozlišujeme možné stavy (odpovídající vlnové funkce) kvantové soustavy. U volné částice to může být např. právě $\vec{p}$, častěji však se užívá vlnový vektor $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ (v 3-rozměrném případě vektor $\vec{k}$ představuje 3 kvantová čísla - složky $\vec{k}$ ).

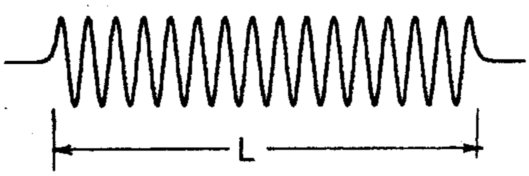
Funkce (27) dává konstantní hustotu pravděpodobnosti

$$\psi_p^*(x;t)\,\psi_p(x;t) = C^*C = |C|^2 \qquad (28)$$

To znamená, že volná částice s přesně známým impulsem $\vec{p}$, není nikde v prostoru lokalizovaná, neboť se stejnou pravděpodobností může být nalezena v okolí kteréhokoliv bodu x. Rovinná vlna je ovšem abstrakce fyzikálně nerealizovatelná. Ostatně i normalizační integrál

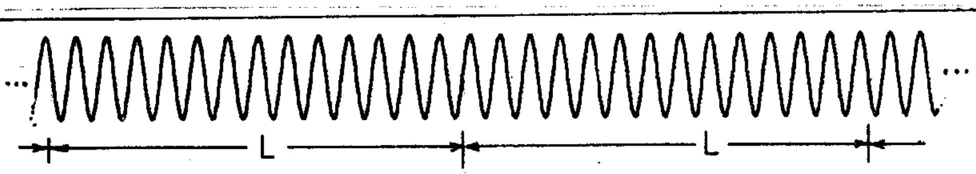
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x;t)|^2 dx$$

diverguje, takže vlna (27) nemůže odpovídat realizovatelnému stavu (viz podmínku (iv) v odst. 3.4).
Fyzikálně reálná je kvazimonochromatická vlna, která v libovolně velké, avšak konečné, části prostoru má průběh (27) a vně tohoto intervalu, tj. pro $|x| \to \infty$, jde k nule (obr.12) (normalizační integrál bude existovat, jestliže pokles k nule je rychlejší než u funkce $1/x$ ).




Obr. 12.
Kvazimonochromatická vlna. Vně intervalu délky L, pro $|x| \to \infty$ , jde $\psi$ k nule, uvnitř L má průběh (27) (nakreslena je Re část (27)).

Abychom zachovali výhody, které přináší práce s monochromatickými vlnami, můžeme postupovat takto: představíme si, že monochromatická vlna ( která se rozprostírá od $-\infty$ do $+\infty$ ) byla vytvořena "naskládáním" reálných vln z obr.12 (vně intervalu L klademe $\psi = 0$) vedle sebe (obr.13). Nebo obráceně: monochromatickou vlnu si představíme rozdělenu na úseky délky L, z nichž každý splývá s kvazimonochromatickou vlnou z obr.12.




Obr. 13. Periodické okrajové podmínky: výslednou monochromatickou vlnu získáme "naskládáním" vln z obr.12 vedle sebe; spojité napojení na hranicích intervalu periodičnosti délky L zaručují periodické okrajové podmínky (29).

Budeme-li potom požadovat, aby ve všech těchto úsecích - oblastech periodicity - byla v každém okamžiku fyzikální situace stejná, stačí se omezit na řešení úlohy pouze v jedné z nich. Právě uvedený požadavek vyjádříme matematicky tak, že požadujeme, aby vlnová funkce splňovala tzv. periodické okrajové podmínky.

V jednorozměrném případě, je-li délka intervalu periodicity L, je můžeme vyjádřit takto

$$\psi(x + L) = \psi(x) \tag{29}$$

(vlnová funkce musí být stejná v každých dvou bodech vzdálených o L). V trojrozměrném prostoru se zpravidla volí za objem periodicity krychle s hranou L a (29) přejde v

$$\psi(x + L,y,z) = \psi(x,y + L,z) = \psi(x,y,z + L) = \psi(x,y,z) \tag{30}$$

Přijmeme-li periodické okrajové podmínky, potom i vlnovou funkci (27) normalizujeme v oblasti periodicity tak, aby platilo

$$\int_0^L \left| C \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]\right|^2 dx = 1 \tag{31}$$

Odtud $C = L^{-1/2}$ a vlnové funkce $\psi_p(x;t)$, normalizované v oblasti periodicity, jsou

$$\psi_p(x;t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] \tag{32}$$

V trojrozměrném případě ( $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ )

$$\psi_{\vec{p}}(x,y,z;t) = C \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)\right] \tag{33}$$

a normalizace v krychli s hranami L vede k výpočtu integrálu

$$\int_0^L\int_0^L\int_0^L \left|C \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)\right]\right|^2 dxdydz =$$

$$= |C|^2 \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz = |C|^2 . L^3 \tag{34}$$

Normalizované vlnové funkce (33) pak jsou ( $\vec{r} = (x,y,z)$ )

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r};t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}.\vec{r} - Et)\right] \tag{35}$$

Zvětšováním oblasti L se můžeme s libovolnou přesností přibližovat ke stavu, kterému odpovídá monochromatická vlna. Provedení limitního přechodu $L \to \infty$ vede k tzv. normalizaci na $\delta$-funkci; zmínka o této možnosti je v dod.D.

## 4.3) Interpretace koeficientů v superpozici stavů

Podle principu superpozice je možný každý stav, jemuž přísluší vlnová funkce, která je superpozicí (lineární kombinací) nějakých možných stavů , jak je to vyjádřeno v (26). Předpokládejme pro určitost, že máme částici ve stavu s vlnovou funkcí $\psi(\vec{r};t)$, která je superpozicí vln (33) pro n různých impulsů $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \ldots, \vec{p}_n$

$$\psi(\vec{r};t) = c_1 \psi_{\vec{p}_1}(\vec{r};t) + c_2 \psi_{\vec{p}_2}(\vec{r};t) + \ldots + c_n \psi_{\vec{p}_n}(\vec{r};t) \qquad (36)$$

Všechny funkce v (36) nechť jsou normalizované v krychli s hranou L, takže platí

$$\iiint_{(L^3)} |\psi(\vec{r};t)|^2 d\tau = 1 \quad ; \quad \iiint_{(L^3)} |\psi_{\vec{p}_i}(\vec{r};t)|^2 d\tau = 1 \quad (i=1,2,\ldots,n) \qquad (37)$$

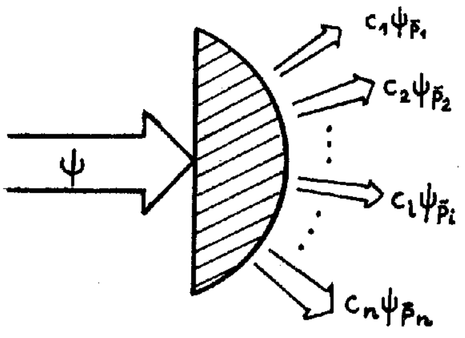
Hustota pravděpodobnosti výskytu částice ve stavu (36) je

$$|\psi(\vec{r};t)|^2 = (c_1^* \psi_{\vec{p}_1}^* + \ldots + c_n^* \psi_{\vec{p}_n}^*)(c_1 \psi_{\vec{p}_1} + \ldots + c_n \psi_{\vec{p}_n}) =$$

$$= |c_1|^2 |\psi_{\vec{p}_1}|^2 + |c_2|^2 |\psi_{\vec{p}_2}|^2 + \ldots + |c_n|^2 |\psi_{\vec{p}_n}|^2 +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^{n} (c_1 c_j^* \psi_{\vec{p}_i} \psi_{\vec{p}_j}^* + c_i^* c_j \psi_{\vec{p}_i}^* \psi_{\vec{p}_j}) \qquad (38)$$

Představme si nyní, že částice ve stavu $\psi$ dopadají na měřící přístroj (fungující podobně jako spektrometr), který dokáže dopadající svazek rozložit na jednotlivé komponenty podle (36) (obr.14).




Obr. 14.
Schematické znázornění zařízení, které rozkládá dopadající svazek $\psi$ na jednotlivé složky.

Výraz na levé straně (38) se vztahuje k situaci před vstupem do zařízení, výraz na pravé straně k situaci, která je v obr.14 vpravo od zařízení. Protože předpokládáme dokonalou separaci, bude každá z $\psi_{\vec{p}_i}$ vpravo, různá od nuly pouze v té části prostoru, kde zbývající jsou rovny nule; potom ovšem jsou součiny $\psi_{\vec{p}_i} \cdot \psi_{\vec{p}_j}^*$ $(i \neq j)$ v (38) rovny nule a zbývá nám jen (za aparaturou)

$$|\psi|^2 = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 . |\psi_{\vec{p}_i}|^2 \qquad (39)$$

kde $|c_i|^2 . |\psi_{\vec{p}_i}|^2$ reprezentuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v i-tém svazku.

Celková pravděpodobnost, že částice bude nalezena někde v i-tém svazku je

$$\int |c_i|^2 . |\psi_{\vec{p}_i}|^2 \, d\tau = |c_i|^2 \qquad (40)$$

a integrací obou stran (39) přes celý normalizační objem dostaneme

$$1 = \sum_i |c_i|^2 \, , \qquad (41)$$

neboť všechny funkce jsou normalizované v objemu $L^3$.

Na uvedené zařízení můžeme v našem konkrétním případě pohlížet jako na experiment, postavený ke změření impulsu částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (36). Provedená úvaha vede k závěru, že můžeme naměřit jen některou z hodnot $\vec{p}_i$ $(i=1,2,\ldots,n)$, přičemž pravděpodobnost, že naměříme hodnotu $\vec{p}_i$ je $|c_i|^2$ (pravděpodobnost, že naměříme kterýkoliv z impulsů je podle (41) rovna 1,tj. jistotě).

Obecně můžeme tedy shrnout:

je-li jednočásticová vlnová funkce $\psi$ vyjádřena jako superpozice možných a experimentálně rozlišitelných stavů $\psi_i$

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \ldots + c_i \psi_i + \ldots \, , \qquad (42)$$

potom pravděpodobnost, že při měření bude částice nalezena ve stavu s vlnovou funkcí $\psi_i$ je rovna $|c_i|^2$ $(i=1,2,\ldots)$ (všechny funkce předpokládáme normalizované).

## 5. Vlnová klubka a relace neurčitosti

### 5.1) Vlnová klubka

Postulovali jsme, že fyzikální stav částice je plně určen odpovídající vlnovou funkcí $\psi(\vec{r};t)$; tato funkce nabývá obecně komplexních hodnot, může mít nejrozmanitější tvar(průběh), musí však vždy splňovat podmínky shrnuté v odst. 3.4. Pravděpodobnost výskytu částice je velká tam, kde amplituda (přesněji: kvadrát absolutní hodnoty amplitudy) je velká. Periodické vlnové funkce (rovinné vlny) , které jsme přiřazovali volným