

II. VLNOVÁ FUNKCE

1. Úvodem k nové kvantové teorii

Základy nové kvantové teorie, tj. dnešní kvantové mechaniky, byly položeny v období 1923-1927. V r.1925, takřka současně, byly uveřejněny dvě její formulace: Heisenbergova maticová mechanika a Schrödingerova vlnová mechanika.

Heisenbergova maticová mechanika (rozpracovaná především Bornem a Jordanem) operuje pouze s experimentálně zjistitelnými veličinami, jako jsou frekvence a intenzita záření emitovaného atomy; nevyskytují se v ní proto např. takové pojmy, jako je elektronová orbita. Protože měřitelným veličinám přiřazuje určité matice, je jejím matematickým aparátem maticový počet.

E.Schrödinger vyšel při formulaci své vlnové mechaniky z hypotézy L. de Broglieho, podle níž je korpuskulárně-vlnový dualismus fundamentálním rysem mikrosvěta. Výchozí ideou zde tedy byla vlna "spojená" s částicí; k ní adekvátním matematickým aparátem jsou parciální diferenciální rovnice.

Na první pohled se zdálo, že jde o dvě naprosto odlišné teorie. Již roku 1926 však Schrödinger dokázal, že jsou to jen dvě různé formulace (reprezentace) jediné teorie. Rozpracování zcela obecného formalismu této teorie bylo provedeno brzy poté P.A.M.Diracem. Tak vznikla nerekativistická kvantová mechanika mikročástic; po doplnění kvantovou teorií elektromagnetického pole (Dirac 1927, Jordan a Pauli 1928), představovala jedinou, logicky uzavřenou teorii, která umožňovala řešit, v nerekativistickém přiblížení, všechny problémy týkající se soustav mikročástic a jejich interakce s elektromagnetickým polem.

Obecný formalismus, vycházející z axiomatického základu, představuje bezesporu nejelegantnější a logicky nejuspokojivější způsob výkladu kvantové mechaniky. Pro naprosté začátečníky je v něm však skryto nebezpečí, že za abstraktním matematickým aparátem se začne vytrácet fyzikální podstata studovaných jevů. Odložíme proto úvod k tomuto přístupu až do kap.IV a do té doby se přidržíme historického Schrödingerova vlnového formalismu: v kap.II zavedeme základní pojmy a v kap.III je budeme aplikovat na řešení několika jednoduchých jednorozměrných úloh. Ostatně, Schrödingerova vlnová rovnice (Schrödingerova reprezentace kvantové mechaniky) je stále výchozím bodem pro řešení většiny konkrétních (jmenovitě chemických) kvantověmechanických úloh.