

Universita J.E.Purkyně v Brně

Fakulta přírodovědecká

ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY

pro chemiky

I. PRINCIPY

J a n C e l ý

Brno 1981

© Jan Celý, Univerzita J. E. Purkyně v Brně

## PŘEDMLUVA

Podnětem k napsání skriptu byly zkušenosti, které jsem v posledních letech získal při přednášení (a zkoušení) základů kvantové teorie ve druhém ročníku odborné chemie. Abych však předešel možným nedorozuměním, chci hned úvodem zdůraznit, že jsem se nesnažil napsat text, který by se přesně, jak rozsahem tak i pořadím probíraných témat, kryl s přednáškou. Proč a k jakému účelu bylo tedy skriptum napsáno?

Pro současného (a tím spíše pro budoucího) chemika se stala znalost kvantové mechaniky, jakožto fundamentální fyzikální teorie mikrosvětla, nutností. Má-li ji však používat uvědoměle, bez neustálých pochyb o oprávněnosti úvah a správnosti výpočtů které provádí, pak se nemůže omezit na naučení několika pouček a vzorečků a na mechanické přejímání výpočetních "receptů", ale musí s pochopením zvládnout základní ideje a metody této teorie. To je skutečnost, na které nemohou, myslím, pranic změnit něčí názory nebo přání.

Běžnou chybou začátečníků je, že se snaží rázem pochopit vše. Studium je však dlouhodobý proces (nekončící zkouškou) a k pochopení látky dochází postupně, podle toho jak rychle přivykáme novým faktům a pojmům. Prvním předpokladem, k úspěšnému završení tohoto procesu, je dostatek vhodné literatury, ke které je možné se opětovně vracet. Dostupná literatura, kterou jsem mohl studentům nabídnout, se mně však nezdála pro ekonomické, a přitom v ničem podstatném neošizené, zvládnutí vytčeného cíle, vhodná. Buď je příliš elementární a nevyužívá vše, co by studenti (alespoň podle osnov) měli již znát, nebo naopak, je určena pro výuku profesionálních fyziků a proto jak rozsahem, tak i pojetím, stěží přijatelná pro řadového chemika. Společným znakem téměř všech knih je, že poměrně rychle přecházejí rozbor základních idejí teorie a jejich vztah k matematickému formalismu a soustřeďují se především na aplikace. Protože navíc zpravidla tyto dvě oblasti jasně neoddělují, činí začátečníkům značné potíže jasně odlišit prvořadé od druhořadého, základní principy od aplikací. To byl také jeden z důvodů, proč jsem se rozhodl rozdělit skriptum do dvou dílů, nazvaných: I. Principy a II. Aplikace.

První tři kapitoly tohoto dílu mají vysloveně úvodní charakter. Na elementární úrovni mají objasnit zvláštnosti a charakteristické rysy mikrosvětla a napomoci tak zvládnutí základního formalismu nerelativistické kvantové mechaniky částic, který je náplní zbývajících tří kapitol. Text jsem se snažil formulovat tak, aby, alespoň v první fázi studia, nevyžadoval příliš odkazů na literaturu. Pokud by se někomu zdálo, že některým, zdánlivě triviálním, pojmům a úvahám věnuji nezvykle mnoho místa, byl to pravděpodobně výsledek působení dojmů, které jsem, paralelně s psaním těchto partií, získával při zkoušení půl stovky studentů. Doufal jsem přitom, že práce, kterou do skriptu vkládám, se mně v budoucnu vrátí v zážitcích příjemnějších.

**OBSAH**

<b>I. POČÁTKY KVANTOVÉ FYZIKY</b>	<b>7</b>
1. Některé "neřešitelné" problémy klasické fyziky	7
1.1) Záření černého tělesa a Planckova konstanta	7
1.2) Fotoefekt a Einsteinovy fotony	10
1.3) Optická čarová spektra a stavba atomů	12
2. Stará kvantová teorie	14
2.1) Bohrovy postuláty	15
2.2) Atom vodíku v Bohrově teorii	15
2.3) Princip korespondence	17
2.4) Úspěchy, potíže a meze použitelnosti staré kvantové teorie	19
<b>II. VLNOVÁ FUNKCE</b>	<b>20</b>
1. Úvodem k nové kvantové teorii	20
2. Částice a vlny	21
2.1) De Broglieho hypotéza	21
2.2) Experimentální potvrzení vlnových projevů elektronu	22
2.3) Částice nebo vlny ?	23
3. Interpretace vlnové funkce	26
3.1) Bornova pravděpodobnostní interpretace	27
3.2) Normalizace vlnové funkce	29
3.3) Vlnová funkce soustavy částic	29
3.4) Vlastnosti vlnových funkcí	30
4. Princip superpozice	31
4.1) Princip superpozice kvantových stavů	31
4.2) Normalizace de Broglieho vlnové funkce	32
4.3) Interpretace koeficientů v superpozici stavů	35
5. Vlnová klubka a relace neurčitosti	36
5.1) Vlnová klubka	36
5.2) Relace neurčitosti pro souřadnici a impuls	39
5.3) Časový vývoj vlnového klubka	44
5.4) Příklady použití relací neurčitosti	46
5.5) Relace neurčitosti pro energii a čas	49

<u>III. SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ MECHANIKA</u>	53
1. Schrödingerova rovnice	53
1.1) Potřeba vlnové rovnice a její vlastnosti	53
1.2) Schrödingerova rovnice	55
1.3) Stacionární Schrödingerova rovnice	57
2. Jednorozměrné pravoúhlé potenciály	59
2.1) Fyzikální smysl pravoúhlých potenciálů	59
2.2) Optická analogie	60
2.3) Potenciálový val. Tok pravděpodobnosti	61
2.4) Potenciálová bariéra. Tunelový jev	69
2.5) Potenciálová jáma. Vázané a volné stavy. Parita	75
2.6) Vlnová klubka v oblasti změny potenciálu	81
<u>IV. ÚVOD DO FORMALISMU KVANTOVÉ MECHANIKY</u>	86
1. Matematický aparát	86
1.1) Prostor vlnových funkcí $\mathcal{F}$	86
1.2) Operátory v $\mathcal{F}$	89
1.3) Hermitovské operátory	92
1.4) Prostor stavových vektorů a Diracova symbolika	95
1.5) Matice v kvantové mechanice	100
2. Základní postuláty kvantové mechaniky	105
3. Několik obecných závěrů z postulátů	111
3.1) Souřadnicová a impulsová reprezentace	111
3.2) Střední hodnota	115
3.3) Současná měřitelnost a úplný soubor kvantových čísel	116
<u>V. SPIN A SOUSTAVY SE DVĚMA STAVY</u>	120
1. Spin elektronu	120
1.1) Experimentální podněty k zavedení spinu	120
1.2) Komutační relace pro operátor momentu hybnosti	123
1.3) Prostor spinových stavových vektorů a Pauliho matice	124
1.4) Spinové vlnové funkce	127
2. Soustavy se dvěma stavy	129
2.1) Obecná úvaha o soustavách se dvěma stavy	129
2.2) Statické hledisko: vliv interakce na stacionární stavy soustavy	130
2.3) Dynamické hledisko: oscilace soustavy mezi dvěma stacionárními stavy	133

2.4) Příklady soustav se dvěma stavy. Kvantová rezonance	135
2.4.1 Molekula $\text{NH}_3$	135
2.4.2 Iont $\text{H}_2^+$	138
2.4.3 Molekula benzenu	140
<u>VI. SOUSTAVY STEJNÝCH ČÁSTIC</u>	142
1. Problém stejných částic	142
1.1) Nerozlišitelnost identických mikročástic	142
1.2) Symetrické a antisymetrické stavy	144
1.3) Jak najít symetrické a antisymetrické vlnové funkce	147
2. Soubory neinteragujících stejných částic. Pauliho princip	149
3. Soustava dvou částic se spinem $\frac{1}{2}$	154
4. Stručně o reprezentaci obsazovacích čísel	158
<u>DODATKY</u>	165
A) Několik potřebných matematických vztahů	165
B) Lineární vektorové prostory	168
C) $\delta$ - funkce	170
D) Fourierova transformace	172
E) Diferenciální operátory z vektorové analýzy	174
LITERATURA	176

## I. POČÁTKY KVANTOVÉ FYZIKY

### 1. Některé "neřešitelné" problémy klasické fyziky

Experimentální kořeny kvantové fyziky sahají hluboko do XIX. století. Studium rentgenových paprsků, radioaktivity, katodových paprsků, optických spekter, tepelného záření, fotoefektu a řady dalších jevů, je možné plným právem považovat za zdroje kvantové teorie. Tato skutečnost se ovšem stávala zřejmou postupně, mnohdy až souběžně s rozvojem vlastní kvantové mechaniky. Ohromné úspěchy kterých dosáhla klasická fyzika - mechanika, elektrodynamika, elektromagnetická teorie světla, termodynamika a statistická fyzika - vedly na přelomu XIX. a XX. století k přesvědčení, že fyzikální obraz světa je téměř dokončen. Existovaly pravda i jevy, které se stále nedařilo objasnit, ale mezi fyziky převládalo přesvědčení, že je jen otázkou času, kdy tyto "obláčky na zářivě modrém nebi fyziky" zmizí. Dnes, při pohledu zpět, vidíme, že právě v nich byl zárodek zcela nového pohledu na svět.

Na cestě k současné kvantové teorii lze vystopovat dvě základní křivolaké linie, které se přibližovaly, vzdalovaly a jak dnes vidíme, někdy i protínaly, až se konečně spojily v jediné teorii - kvantové mechanice. První z nich je spojena především s řešením úloh teorie záření. Kvantovou se stala díky pracím Maxe Plancka (1900) a Alberta Einsteina (1905). Fyzika jí vděčí např. za zavedení pojmů kvantum energie, foton, indukované záření, za vytvoření spojnice mezi intenzitou spektrálních čar a pravděpodobností kvantových přechodů a za vyjasnění korpuskulárně-vlnového charakteru světla. Podél druhé linie se řešily hlavně problémy stavby atomů a optických spekter. Do kvantové oblasti vešla až v roce 1913 pracemi Nielse Bohra. Přinesla s sebou představy o kvantových stavech a přechodech mezi nimi, kvantová čísla, výběrová pravidla atd. V následujících odstavcích se jen krátce zmíníme o některých problémech, jejichž řešení mělo pro budování kvantové teorie klíčový význam.

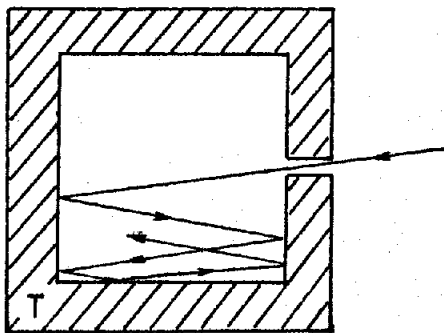
#### 1.1) Záření černého tělesa a Planckova konstanta

Z každodenní zkušenosti víme, že těleso zahřáté nad asi  $700^{\circ}\text{C}$  vyzařuje viditelné světlo (přístroje prokáží emisi elektromagnetického záření i v neviditelných částech spektra a při libovolné teplotě); jeho barva s růstem teploty přechází od temné rudé až k bílé. Pochopit proces emise bylo možné již koncem minulého století, neboť se vědělo, že v látce jsou kladné i záporné elektrické náboje a z Maxwellovy elektrodynamiky vyplývalo, že elektrický náboj, který se pohybuje se zrychlením (tj. jinak než rovnoměrně přímočaře), vyzařuje elektromagnetické vlnění. Elektrické náboje, které v pevné látce vykonávají na úkor tepelné energie kmitavý pohyb, musí proto vyzařovat elektromagnetické vlnění všech možných

vlnových délek a jeho intenzita přitom poroste při zvyšování teploty. Existuje ovšem i proces obrácený: látka absorbuje elektromagnetické vlnění které na ni dopadá; elektrické náboje přitom zvětšují v poli dopadajícího vlnění svoji amplitudu, což se projeví zvýšením teploty tělesa. Hypotetické těleso, které by bylo schopno absorbovat veškeré elektromagnetické vlnění dopadající na jeho povrch, se nazývá černé těleso. Reálná tělesa tuto podmínku nikdy nesplňují.

Na základě pouze termodynamických zákonů (bez ohledu na mechanismus emise a absorpce) dokázal již r.1859 G.R.Kirchhoff, že pro libovolnou vlnovou délku a danou teplotu je poměr energie emitované reálným povrchem k energii, kterou by za týchž podmínek emitoval povrch černého tělesa, roven koeficientu absorpce dané látky. Černé těleso lze tedy považovat za standardní zářič, jehož vyzařovací charakteristika, tj. závislost intenzity emitovaného záření na vlnové délce, je určována pouze jeho teplotou. Určíme-li tedy spektrální závislost záření černého tělesa jako funkci teploty, potom budeme znát i emisní závislosti pro všechna tělesa u nichž je stanovena závislost koeficientu absorpce na vlnové délce a teplotě. To byl také důvod, proč záření černého tělesa bylo koncem XIX. století intenzivně studováno, jak experimentálně tak i teoreticky.

Pro experimentální studie se černé těleso realizuje na základě věty dokázané r. 1860 rovněž Kirchhoffem; podle ní je záření černého tělesa ekvivalentní záření, které vychází malým otvorem z velké dutiny v tělese udržovaném na teplotě  $T$  (obr.1). Že tomu tak je, pochopíme



Obr. 1

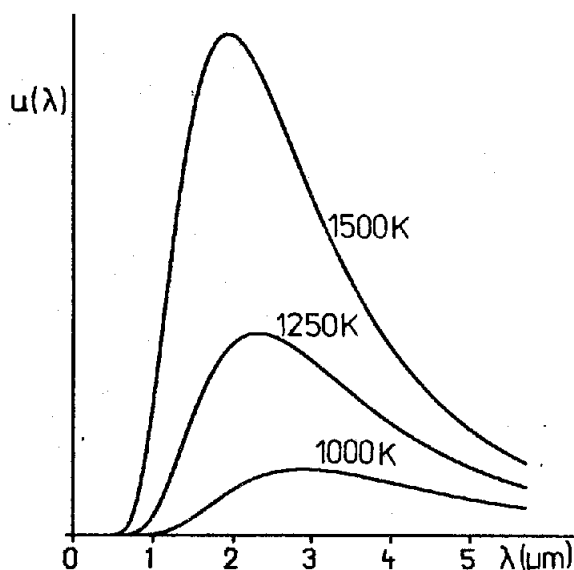
snáze z obráceného procesu. Záření vstupující zvnějšku otvorem do dutiny se po mnoha odrazech uvnitř prakticky zcela pohltí i když stěny dutiny nevykazují stoprocentní absorpci; vnějšmu pozorovateli se pak ploška otvoru bude jevit jako černé těleso a aproximace bude tím lepší, čím menší bude otvor vzhledem k rozměrům dutiny.

Pro závislosti spektrální hustoty zářivé energie  $u(\lambda)$  na vlnové délce (obr.2) je typický: (a) prudký spád k nule v oblasti krátkých vlnových délek, (b) po-

sun polohy maxima  $\lambda_{\max}$  s rostoucí teplotou ke kratším vlnovým délkám (platí tzv. Wienův zákon:  $\lambda_{\max} T = \text{const}$ ).

Klasické řešení, vycházející z Maxwellovy elektrodynamiky a Boltzmannovy statistické termodynamiky, dávalo evidentně nesprávný výsledek:  $u(\lambda)$  směrem ke kratším vlnovým délkám bez omezení rostlo. Proč tomu tak bylo, pochopíme snadno. Řešení Maxwellových rovnic pro elektromagnetické pole v dutině černého tělesa ukáže, že zde mohou existovat stojaté vlny s libovolně krátkou vlnovou délkou. Podle závěrů Boltzmannovy





Obr. 2

Závislost spektrální hustoty zářivé energie v dutině černého tělesa na vlnové délce pro tři různé teploty.

$$\lambda_{\max}(1000 \text{ K}) = 2,90 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\lambda_{\max}(1250 \text{ K}) = 2,32 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\lambda_{\max}(1500 \text{ K}) = 1,93 \text{ } \mu\text{m}$$

statistické termodynamiky se celková energie záření v dutině (která je pochopitelně konečná) musí rovnoměrně rozdělit mezi všechny stojaté vlny (kterých je nekonečně mnoho); máme tedy konečnou energii rozdělit na nekonečný počet stejných dílů. Avšak i když tuto obtíž pomíneme, je zřejmé, že funkce  $u(\lambda)$  by musela růst pro  $\lambda \rightarrow 0$ , neboť i počet možných stojatých vln, připadajících na jednotkový interval vlnových délek, prudce roste pro  $\lambda \rightarrow 0$ .

Všechny pokusy pochopit tento paradoxní výsledek byly neúspěšné, dokud Max Planck v r. 1900 nepřišel s hypotézou, že oscilátor s vlastní frekvencí  $\nu$  může emitovat a absorbovat energii pouze po kvantech

$$E = h\nu \quad (1a)$$

kde  $h$  představuje novou fundamentální přírodní konstantu, které se později začalo říkat Planckova konstanta.

K dosažení shody s experimentálně zjištěnými závislostmi  $u(\lambda)$  musel Planck položit  $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1}$ . Protože se ve fyzice častěji užívá kruhová frekvence  $\omega = 2\pi\nu$ , zapisuje se vztah (1a) dnes obvykle

$$E = \hbar\omega \quad (1b)$$

kde  $\hbar = h / 2\pi$ .

Dnešní hodnota Planckovy konstanty je

$$h = 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{Hz}^{-1} ; \quad \hbar = 1,0545887 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Uvědomme si, že vztah (1) neměl precedent. Jestliže energie oscilátorů (kmitajících nábojů) ve stěnách dutiny se mění podle (1), potom i energie emitované vlny se mění po skocích  $h\nu = hc/\lambda$  ( $c$  je rychlost světla). V klasické fyzice je však energie vlny určována její amplitudou, naprosto nezávislou na vlnové délce. Přijmeme-li však relaci (1), je průběh  $u(\lambda)$  snadno pochopitelný. Minimální energie potřebná k emisi

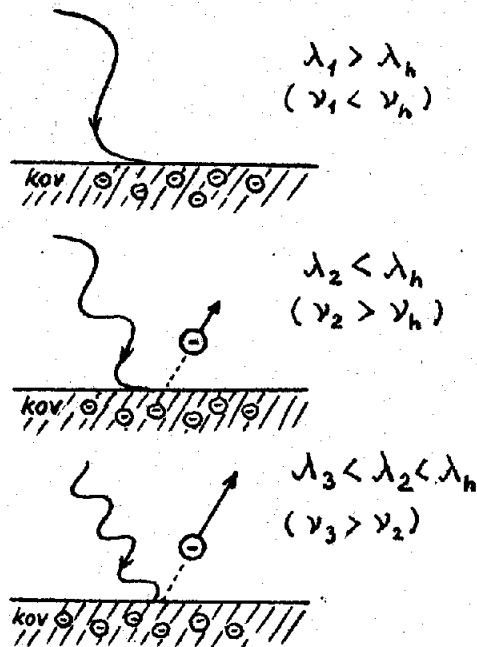
vlny s vlnovou délkou  $\lambda$  je  $hc/\lambda$ ; pro malé vlnové délky bude tato hodnota tak velká, že při dané teplotě  $T$  bude pravděpodobnost emise těchto vln zanedbatelná<sup>\*)</sup>. Dostáváme tak konečný počet skutečně nabuzených vln v dutině černého tělesa, přičemž minimální vlnové délky jsou řádově  $\lambda \approx hc/\kappa T$ .

Úplná Planckova formule pro spektrální hustotu zářivé energie  $u(\lambda)$  v dutině černého tělesa při teplotě  $T$  je

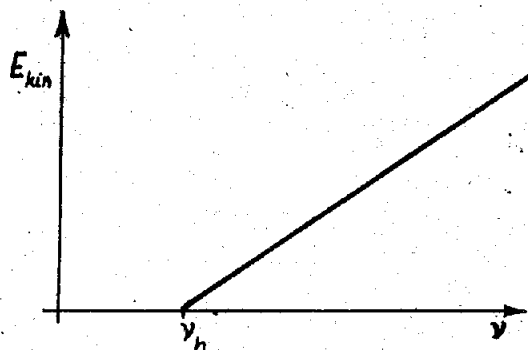
$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda \kappa T}\right) - 1} \quad (2)$$

### 1.2) Fotoefekt a Einsteinovy fotony

Fotoefekt - emise elektronů z kovů při dopadu viditelného nebo ultrafialového záření - byl pozorován již v minulém století. Sám jev nebyl záhadný; že jsou v kovu volně pohyblivé elektrony se předpokládalo (např. při výkladu elektrické vodivosti) a energii potřebnou k překonání vazby, která je držela v objemu kovu, mohla dodat elektromagnetická vlna (elektrické pole světelné vlny působí na elektron silou úměrnou intenzitě pole  $E$ ; intenzita světla  $I \sim E^2$ ). Překvapující a pro tehdejší (klasickou) fyziku nevysvětlitelné byly však pozorované zákonitosti (obrázky 3, 4):



Obr. 3



Obr. 4

Závislost kinetické energie emitovaných elektronů na frekvenci dopadajícího světla. Směrnice přímky je pro všechny emitující materiály stejná, mění se jen  $\nu_h$ .

<sup>\*)</sup> Pravděpodobnost nabuzení oscilátoru do stavu s energií  $E$  při teplotě  $T$  je úměrná Boltzmannovu faktoru  $\exp(-E/\kappa T)$ ; po dosazení z (1) je to  $\exp(-hc/\lambda \kappa T)$ , kde  $\kappa = 1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$  je Boltzmannova konstanta.

- (i) k emisi docházelo jen pro světlo s frekvencí  $\nu > \nu_h$ , přičemž hraniční frekvence  $\nu_h$  byla pro různé kovy obecně různá;  
 (ii) kinetická energie vyletujících elektronů závisela jen na frekvenci světla a to lineárně (obr.4). Růst intenzity světla dané frekvence zvětšoval pouze počet emitovaných elektronů, nikoliv jejich energii.

Z hlediska klasické fyziky mělo zvětšení intenzity světla vést ke zvětšení intenzity elektrického pole vlny a to mělo urychlit elektron na větší rychlost při výstupu z kovu; to však nikdy pozorováno nebylo.

Uvedené zákonitosti jednoduše objasnil r.1905 A.Einstein když předpokládal, že energie monochromatické světelné vlny s frekvencí  $\nu$  se může elektronům v kovu předávat jen po kvantech  $h\nu$ . Jinými slovy: představíme-li si, že dopadající monochromatická světelná vlna reprezentuje tok částic z nichž každá má energii  $h\nu$  a může být zcela pohlcena elektronem, potom elektron při tom získá energii  $h\nu$ . Jestliže k vytržení elektronu z kovu je nutná energie  $A$ , bude kinetická energie vyletujícího elektronu

$$T = h\nu - A \quad (3)$$

Veličina  $A$  se nazývá výstupní práce dané látky; je to materiálová konstanta nezávislá na  $\nu$ . Závislost (3) je na obr.4, přičemž  $\nu_h = A/h$ . Zvětšení (zmenšení) intenzity monochromatické vlny s frekvencí  $\nu$  znamená zvětšení (zmenšení) počtu dopadajících částic - fotonů - s energií  $h\nu$  a tím i zvětšení (zmenšení) počtu emitovaných fotoelektronů.

Objasnění mechanismu fotoefektu bylo dílčím výsledkem práce, v níž A. Einstein ukázal, že Planckovu formuli lze získat, předpokládáme-li, že elektromagnetické vlnění v dutině černého tělesa má korpuskulární charakter. Vyjádříme-li Planckovu formuli (2) pomocí frekvencí  $\nu$ <sup>+</sup>, dostaneme spektrální hustotu zářivé energie  $u(\nu)$  při teplotě  $T$  (tj. energii v jednotkovém objemu dutiny na jednotkový interval  $\nu$ )

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (4)$$

Protože výraz  $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$  udává počet stojatých vln v intervalu  $(\nu, \nu + d\nu)$  (viz např [15]) a  $h\nu$  je energie jednoho fotonu, můžeme výraz

$$\langle n_\nu \rangle_T = \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (5)$$

interpretovat jako střední hodnotu počtu fotonů s energií  $h\nu$ , připadající na jeden oscilátor v rovnovážném stavu při teplotě  $T$  v jednotkovém objemu dutiny černého tělesa.

<sup>+</sup>) Energie připadající na interval  $(\lambda, \lambda + d\lambda)$  je  $u(\lambda)d\lambda$  a na interval  $(\nu, \nu + d\nu)$  je  $u(\nu)d\nu$ . Protože musí platit  $u(\lambda)d\lambda = u(\nu)d\nu$ , je

$$u(\nu) = u(\lambda) \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| = u(\lambda) \frac{c}{\nu^2}$$

Po úspěšném rozvoji optiky v XIX.století, završeném Maxwellovou teorií, se zdálo, že vlnová povaha světla je nepochybná. Einsteinova práce však ukazovala, že k objasnění některých jevů bude nutné přijmout částicovou (korpuskulární) představu i když k výkladu jiných (interference, difrakce, ohyb) bude zase třeba zůstat u představy vlnové. Budoucnost ukázala, že tato dvojakost projevů světla, tzv. korpuskulárně-vlnový dualismus, patří spolu s nespojitou změnou - kvantováním - některých fyzikálních veličin, k základním charakteristikám mikrosvěta.

### 1.3) Optická čarová spektra a stavba atomů

Experimentální studium spekter, započaté v XVII.století Newtonem, vyvrcholilo v letech 1859-60 pracemi G.Kirchhoffa a R.Bunsena. Dva základní zákony sformulované G.Kirchhoffem :

(i) každý prvek má své neměnné čarové spektrum,

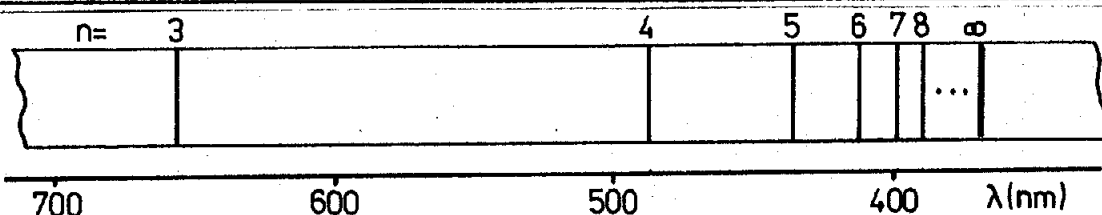
(ii) každý prvek je schopen pohlcovat takové záření jaké může též emitovat ,

byly základem pro rozvoj emisní a absorpční spektrální analýzy, která se brzy poté začala skvěle uplatňovat i při pátrání po nových chemických prvcích.

Mechanismus vzniku čarových a dokonale reprodukovatelných spekter, jednoznačně identifikujících prvky, však byl začátkem století hádankou, jejíž řešení zřejmě bezprostředně souviselo s problémem stavby atomů. První kvantitativní závislosti v teorii spekter byla formule odvozená empiricky r.1885 J.Balmerem pro vlnové délky odpovídající tehdy známým čarům vodíkového spektra (obr.5)

$$\lambda_n = b \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (n = 3, 4, \dots, 11) \quad (6)$$

kde  $b = 3645,6 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ .



Obr. 5 Balmerova serie ve vodíkovém spektru

Přejdeme-li v (6) k vlnočtům  $\sigma = 1/\lambda$ , bude

$$\sigma_n = R_\infty \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, \dots, 11) \quad (7)$$

kde  $R_\infty = 109\,720 \text{ cm}^{-1}$  je dnes známa jako Rydbergova konstanta.

Balmerova formule ve tvaru (7) navozuje myšlenku, že mohou existovat i jiné serie čar, pro něž by platilo

$$\sigma_{mn} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (8)$$

kde  $m, n$  jsou celá čísla .

Skutečně, r. 1908 objevil Lyman v ultrafialové oblasti serii odpovídající  $m = 1$  a  $n = 2, 3, 4, \dots$  a též rok Paschen našel v infračervené oblasti serii s  $m = 3$  a  $n = 4, 5, 6, \dots$ . Vyvození formule (8) se stalo prvním úkolem a základním testem všech budoucích teorií.

Poznatky o struktuře hmoty, nahromaděné do konce XIX. století, vedly r. 1902 lorda Kelvina k následujícímu modelu atomu: podstatná část hmoty atomu spojená s kladným nábojem tvoří malou kouli, v níž jsou umístěny lehké, záporně nabitě, elektrony (jako "hrozinky v buchtě"). Jako celek byl atom elektricky neutrální a v základním stavu byly náboje nepohyblivé.

Kelvinův model téměř patnáct let propracovával J.J. Thomson, takže je znám spíše jako Thomsonův model atomu. Thomson především hledal konfigurace, které by při daném rozložení kladného náboje byly stabilní (protože soustava kladných a záporných nábojů nemůže být držena ve stabilní rovnováze jen elektrostatickými silami, muselo se předpokládat, že kladný náboj je držen pohromadě zatím neznámými neelektrickými silami); velmi stabilní konfigurace měly odpovídat inertním plynům, méně stabilní pak chemicky aktivním prvkům. Jestliže se atom dostal, např. v plameni, do excitovaného stavu, zůstal kladný náboj v klidu, zatímco lehké elektrony začaly kmitat a vyzařovat elektromagnetické vlnění. Aby vlnová délka emitovaného záření byla ve viditelné části spektra, musel lineární rozměr atomu být řádově  $10^{-8}$  cm, což krásně souhlasilo s odhady plynoucími z kinetické teorie plynů. Kvantitativní výpočet spekter se však Thomsonovi nepodařil.

První experimenty přímo zaměřené na vyjasnění struktury atomu byly realizovány v r. 1909 pod vedením Ernesta Rutherforda. Geiger a Marsden ostřelovali tenkou zlatou folii (na tloušťku folie mělo připadat asi 400 atomů)  $\alpha$ -částicemi a měřili jejich odchylky od původního směru po průchodu folií. Protože hmotnost, náboj a rychlost (energie)  $\alpha$ -částic byly známy, bylo možné odhadnout (elementární způsob je např. v [9]) o jaký úhel by se měly odchýlit při interakci s Thomsonovým atomem (vzhledem k velké hmotnosti  $\alpha$ -částic bylo možné uvažovat jen rozptýl kladným nábojem, rovnoměrně rozloženým v kouli s průměrem asi  $10^{-8}$  cm). Očekávané odchylky byly velmi malé, méně než  $1^\circ$ . K všeobecnému překvapení však Geiger s Marsdenem zjistili, že malá část dopadajících  $\alpha$ -částic se odchýlila o velké úhly (desítky stupňů), v ojedinělých případech až o téměř  $180^\circ$ .

Rozborem získaných výsledků dospěl Rutherford v r.1911 k závěru, že k objasnění naměřených úhlových závislostí je třeba, aby celý kladný náboj ( a tedy i podstatná část hmoty ) atomu byl soustředěn v malé části prostoru - jádro atomu - s lineárním rozměrem řádově  $10^{-12}$  cm. Aby rozměr atomu zůstal asi  $10^{-8}$  cm (vyžadoval to mechanismus vzniku spekter, kinetická teorie plynů a další) , musely se v tomto prostoru nacházet elektrony. Jestliže neměly být přitaženy k jádru, musely kolem něho obíhat tak, aby přitažlivá síla kladně nabitého jádra byla kompenzována odstředivou silou. Tak vznikl Rutherfordův planetární model atomu: kolem jádra s nábojem  $+Ze$  ( $Z$  je atomové číslo prvku) obíhá  $Z$  elektronů s nábojem  $-e$ .<sup>+</sup>)

Tento model však nastolil mnoho nových otázek, na něž klasická fyzika nemohla dát odpověď. Základním problémem byla samotná existence takového atomu. Podle Maxwellovy elektrodynamiky musí náboj pohybující se zrychleně (elektrony v Rutherfordově atomu mají dostředivé zrychlení) vyzařovat elektromagnetické vlnění. Elektron obíhající kolem jádra by tedy měl vyzařovat na úkor své energie, což by vedlo k postupnému zmenšování poloměru dráhy (pohyb po spirále) a konečně pádu na jádro; to vše by se mělo odehrát asi za  $10^{-9}$  s a elektron by přitom vyzařoval spojité spektrum. Velikou záhadou byla dále stabilita atomů, projevující se neměnností spekter. Vždyť podle Newtonovy mechaniky byly možné elektronové orbity s libovolnými poloměry ( a tedy i dobami oběhu). Frekvence emitovaného světla je však určována oběžnou frekvencí; proč tedy např. všechny vodíkové atomy mají absolutně stejné spektrum ? Proč není spektrum nijak ovlivňováno srážkami atomů k nimž musí např. v plynu ve výbojové trubici nutně docházet; při srážce dvou atomů by přece mělo dojít ke změně drah elektronů. Nebo: jak vůbec vznikají serie spektrálních čar ? A další otázky a co otázka, to záhada.

## 2. Stará kvantová teorie

Názvem stará kvantová teorie se dnes rozumí kvantová teorie rozpracovávaná zhruba v letech 1913-1924 řadou fyziků (Bohr, Sommerfeld, Wilson a další) na základě, který v r.1913 položil mladý dánský fyzik Niels Bohr. Dále si stručně všimneme jen základních Bohrových idejí. Získáme tak nejen historickou informaci, ale jednoduše a názorně zavedeme takové fundamentální veličiny jako je ionizační energie atomu vodíku, a Bohrův poloměr. Navíc, i když Bohrův model vybudovaný na představě

---

<sup>+</sup>) Pro úplnost nutno dodat, že podobný model (ovšem bez uvedeného experimentálního podkladu) navrhl r.1903 japonský fyzik H.Nagaoka. Pro zjevný rozpor s klasickou elektrodynamikou však nebyl přijímán.

klasických trajektorií je nekompstibilní s novou kvantovou teorií, přece řada intuitivních představ, s nimiž pracuje, je ve shodě se závěry kvantové mechaniky.

## 2.1) Bohrovy postuláty

V r.1913 uveřejnil N. Bohr serii tří prací v nichž se pokusil o spojení Planckovy a Einsteinovy kvantové hypotézy s Rutherfordovým modelem atomu; jeho cílem bylo objasnit především stabilitu atomu a vznik čárových spekter. Uvědomoval si přitom jasně, že nahromaděný experimentální materiál zjevně svědčí proti extrapolaci klasické mechaniky a elektrodynamiky do atomových dimensí, v nichž nikdy předtím nebyly experimentálně ověřovány.

Bohrovy předpoklady a závěry lze shrnout takto:

- (i) Elektron v atomu se může nacházet jen na kruhových orbitách, jejichž poloměr  $R$  vyhovuje podmínce

$$mvR = n \frac{h}{2\pi} \quad (= n\hbar) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (9)$$

kde  $m$  je hmotnost elektronu a  $v$  je jeho rychlost.

Na těchto stacionárních drahách elektron nevyzařuje elektromagnetické vlnění.

- (ii) Atom emituje nebo absorbuje elektromagnetické záření pouze při přechodu elektronu z jednoho stacionárního stavu do druhého. Při přechodu ze stavu s energií  $E_i$  do stavu s energií  $E_f$  se emituje ( je-li  $E_i > E_f$  ) nebo absorbuje (  $E_f > E_i$  ) foton s energií  $h\nu$  (monochromatické vlnění s frekvencí  $\nu$  ), ve shodě s Planckovou hypotézou, takže

$$h\nu = E_i - E_f \quad (10)$$

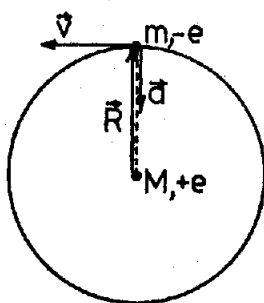
Podmínka (9) vyjadřuje kvantování momentu hybnosti elektronu  $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$ ; kvantování energie elektronu je jejím důsledkem.

## 2.2) Atom vodíku v Bohrově teorii

Atom vodíku je podle Rutherforda a Bohra tvořen jádrem s hmotností  $M$  a nábojem  $+e$ , kolem něhož obíhá elektron s hmotností  $m$  a nábojem  $-e$  (obr.6). Protože  $M \approx 2000m$ , můžeme s dobrou aproximací považovat jádro za nehybné. Velikost dostředivého zrychlení elektronu, který se pohybuje rovnoměrně rychlostí  $v$  po kruhové orbitě s poloměrem  $R$ , je

$$a = v^2 / R \quad (11)$$

Mezi jádrem a elektronem působí podle Coulombova zákona přitažlivá síla velikosti



Obr. 6.

$$F = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R^2} \quad (12)$$

Podle 2. Newtonova zákona  $F=ma$ , takže dvojnásobek kinetické energie  $2T$  je

$$mv^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (13)$$

Protože potenciální energie elektronu na orbitě je

$$V = - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{R}, \quad (14)$$

je celková energie  $E = T + V$  rovna

$$E = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 R} \quad (15)$$

Z (13) a kvantové podmínky (9) (velikost momentu hybnosti  $\vec{L} = m\vec{v} \times \vec{R}$  je  $L=mvR$  neboť  $\vec{v} \perp \vec{R}$ ) dostaneme poloměry stacionárních orbit

$$R_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2 \quad (n=1,2,\dots) \quad (16)$$

Dosazením do (15) získáme celkovou energii v n-tém stacionárním stavu

$$E_n = - \frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{(4 \pi \epsilon_0) R_n} \quad (n=1,2,\dots) \quad (17)$$

Základní stav (s nejnižší energií) atomu vodíku odpovídá kvantovému číslu  $n = 1$ ; poloměr příslušné orbity  $R_1$  je tzv. Bohrův poloměr

$$a_0 = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (18)$$

a energie elektronu na této orbitě je

$$E_1 = - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 a_0} = - 13,606 \text{ eV} \quad (19)$$

Hodnota  $I_1 = -E_1 = 13,606 \text{ eV}$  je známá ionizační energie (ionizační potenciál) pro vodíkový atom, tj. energie potřebná k odtržení elektronu



od jádra (převedení ze stavu s  $n=1$  do stavu s  $n \rightarrow \infty$ ).

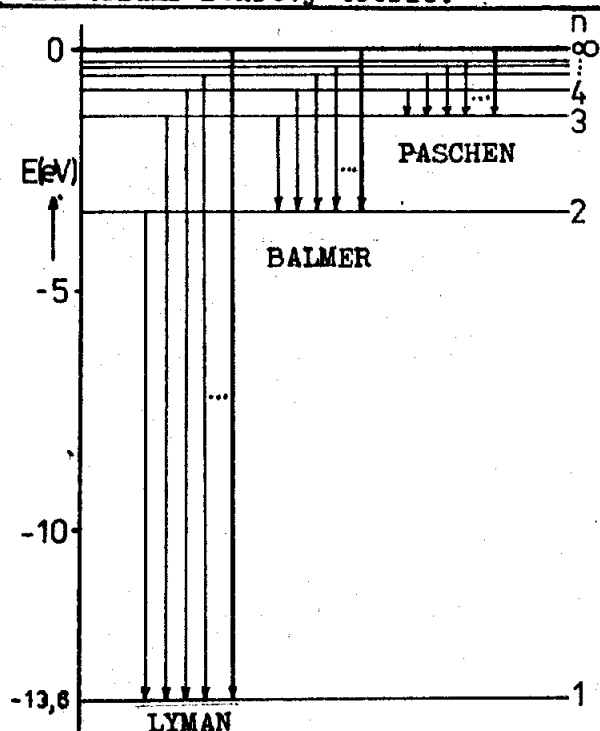
Frekvence  $\omega_{nm}$  světla emitovaného při přechodu elektronu z hladiny  $E_n$  na  $E_m$  ( $n > m$ ) (obr.7) je podle (10)

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (20)$$

Dělením  $2\pi c$  ( $\sigma = \omega / 2\pi c$ ) dostaneme vlnočty  $\sigma_{mn}$  a porovnáním s (8) výraz pro Rydbergovu konstantu

$$R_{\infty} = \frac{m e^4}{4\pi (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3 c} \quad (21)$$

Odvození zobecněného Balmerova vztahu (8) a velice dobrá shoda Rydbergovy konstanty vypočtené podle (21) s hodnotou naměřenou, znamenaly vskutku triumf Bohrově teorie.



Obr. 7

Přechody vedoucí ke spektrálním seriím ve spektru vodíku.

Přechody v opačném směru odpovídají absorpčním čarům.

### 2.3) Princip korespondence

Princip korespondence byl explicitně zformulován N.Bohrem až v roce 1923, i když implicitně je obsažen již v jeho dřívějších pracích. Smyslem tohoto principu bylo vyjasnit, do jaké míry pojmy a výsledky klasické mechaniky mohou být užitečné při tvorbě a interpretaci kvantové teorie.

Klasická mechanika správně objasňuje široké spektrum fyzikálních jevů v makrosvětě a v některých případech i v mikrosvětě (např. pohyb nabitých částic ve statických elektrických a magnetických polích, tepelný pohyb atomů a molekul v plynech atd.); hlavní potíž, s níž se nemohla v oblasti mikrosvěta vypořádat, spočívala v existenci nespojitých (kvantových) změn některých veličin. Můžeme proto požadovat, aby v případech kdy kvantové skoky jsou malé (a to nastane pro velká kvantová čísla jak je vidět např. ze změn  $\Delta E$  pro  $n \rightarrow \infty$  v (17)), se výsledky kvantové a klasické teorie shodovaly (korespondovaly).

Ukažme si aplikaci tohoto principu na výrazu (17) pro energii elektronu v atomu vodíku. Změna velkého kvantového čísla  $n$  o jednotku vede k malé změně  $E$ . Aproximujeme-li tuto změnu diferenciálem, je

$$\Delta E = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^3} \Delta n$$

Frekvence světla emitovaného při přechodech mezi hladinami s vysokými kvantovými čísly tedy je

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 (\hbar n)^3} \Delta n$$

Protože  $\hbar n$  je (viz (9)) moment hybnosti  $m\Omega R^2$ , kde  $\Omega$  je kruhová frekvence ( $\Omega = v/R$ ) elektronu na orbitě, platí

$$\omega = \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^3 \Omega^3 R^6} \Delta n$$

Po dosazení za  $m^3 \Omega^3 R^6$  z (13) obdržíme

$$\omega = \Omega \cdot \Delta n$$

Pro  $\Delta n = 1$  je tedy frekvence emitovaného světla  $\omega$  shodná s klasickým výsledkem, který je roven právě  $\Omega$ . Pro  $\Delta n = 2, 3, \dots$  dostáváme vyšší harmonické této základní frekvence.

Princip korespondence má zásadní význam: jestliže totiž kvantová mechanika aspiruje na úplný popis jevů, potom musí být schopna popsat všechny fyzikální jevy, včetně těch, které byly objasněny již klasickou fyzikou. Klíčové postavení měl tento princip především v počátcích kvantové mechaniky, kdy působil jako průbířský kámen pro navrhované teorie (i když samozřejmě k jednoznačnému výběru správné teorie byl nedostačující).

## 2.4) Úspěchy, potíže a meze použitelnosti staré kvantové teorie

Stará kvantová teorie, ve své konečné podobě, umožnila značný pokrok ve studiu spekter, neboť dávala obecný návod k výpočtu spektrálních termů určité třídy atomových a molekulárních soustav. Výsledky získané pro atom vodíku bylo možné snadno zobecnit na ionty  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$  a atomy alkalických kovů; teorie byla rovněž použitelná na vibrační a rotační spektra molekul a na rentgenovská spektra atomů. Na druhé straně však narážela na značné potíže při řešení problému složitějších atomů; dokonce se ani nepodařilo dosáhnout přesné shody s pozorovaným spektrem atomu He.

Stará kvantová teorie však nebyla úplná. K jejím vážným omezením patřila skutečnost, že pravidla kvantování byla použitelná pouze na periodické pohyby. Tak zůstávala mimo rámec této teorie např. celá problematika srážek (rozptylu) mikročástic; přitom do této kategorie patří i jedny ze základních experimentů: Franckovy-Hertzovy pokusy z r. 1914, potvrzující existenci diskretních energiových hladin v atomu (viz [8]).

Principiální obtíže staré kvantové teorie však spočívaly v její logické struktuře. Empiricky zavedená kvantová pravidla představují jen čistě formální omezení, kladená na řešení klasických pohybových rovnic; bez jakéhokoliv hlubšího zdůvodnění předepisují, že ze všech možných klasických řešení je třeba ponechat jen nepatrnou podmnožinu, má-li být dosaženo shody s experimentem. Přitom je navíc obtížné sladit dohromady pravidla kvantování s používaným pojmem trajektorie. Existence klasické trajektorie částice znamená, že částice má v každém okamžiku přesně určenou polohu a hybnost a tyto veličiny se spojitě mění s časem. Jak ale potom bude vypadat trajektorie elektronu ve Franckových-Hertzových pokusech, když zde elektron mění svoji energii skokem? Nebo naopak: protože existenci diskretních energiových hladin (předávání energie po kvantech) lze považovat za experimentálně prokázanou, bude zřejmě nutné opustit představu klasické trajektorie u mikročástic.

Stará kvantová teorie, tato podivuhodně vymyšlená kombinace klasické mechaniky a ad hoc zavedených kvantových pravidel, tedy nebyla - navzdory ohromným zásluhám, které si v historii fyziky vydobyla - úplnou, logicky bezespornou fyzikální teorií.

## 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.

## 2. Částice a vlny

### 2.1) De Broglieho hypotéza

Na základě rozboru analogií mezi matematickým aparátem analytické mechaniky a vlnové optiky, dospěl v r. 1923, jedenatřicetiletý francouzský fyzik Louis de Broglie k přesvědčení, že korpuskulárně-vlnový dualismus by se neměl týkat jen světla, ale měl by být univerzálním projevem všech mikročástic (tehdy jmenovitě elektronů). Realizace této myšlenky ovšem vyžadovala nalezení vztahu mezi veličinami charakterizujícími částici i její pohybový stav (hmotnost, hybnost, energie) a charakteristikami přidruženého vlnění (především vlnová délka).

De Broglieho úvahy se týkaly pouze vlnných částic, tj. částic na něž nepůsobí vnější síly. Pro ně dospěl k závěru, že s každou částicí s klidovou hmotností  $m$ , hybností  $\vec{p}$  a energií  $E$ , má být spojena monochromatická rovinná vlna

$$\psi(\vec{r}; t) = C \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (1)$$

kde  $C$  je konstanta (amplituda),  $\vec{k}$  je vlnový vektor ( $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ ) a  $\omega$  je frekvence, přičemž platí

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2a)$$

a

$$E = \hbar \omega \quad (2b)$$

Vztahy (2) platí i pro fotony.

Pro vlnovou délku  $\lambda$  (tzv. de Broglieho vlnová délka) dostaneme z (2a)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h \sqrt{1 - (v/c)^2}}{m v} \quad (3)$$

což v nerelativistickém přiblížení (pro částice s klidovou hmotností  $m$  a rychlostí  $v \ll c$ ) dá

$$\lambda = \frac{h}{m v} \quad (4)$$

Pro elektrony s kinetickou energií  $T$  (v eV) je možné, po dosazení za  $m$  a  $h$ , upravit (4) na praktický tvar

$$\lambda = \sqrt{\frac{1,504}{T}} \quad [\text{nm}, \text{eV}] \quad (5)$$

## 2.2) Experimentální potvrzení vlnových projevů elektronu

Když de Broglie formuloval svoji hypotézu, neexistoval žádný experiment, prokazující vlnový charakter částic. Nemožnost pozorovat vlnové projevy částic v makrosvětě, vyplývá z odhadu velikosti  $\lambda$  podle (4): vezměme např. částici, kterou pozorujeme při sledování Brownova pohybu; její průměr může být  $1\mu\text{m}$ , hmotnost  $m \approx 10^{-12}\text{g}$  a střední kinetická energie v rovnovážném stavu při teplotě  $T$  je  $(3/2)\kappa T$  ( $\kappa$  je Boltzmannova konstanta). Potom

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m\kappa T}} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ nm} , \quad (6)$$

tedy veličina asi o 10 řádů menší než průměr částice. Nyní si připomeňme, že geometrická optika, pracující s trajektoriemi světelných paprsků, je použitelná, dokud zakřivení drah je malé ve srovnání s vlnovou délkou světla. Jakmile libovolné překážky (např. okraj stínítka) nebo nehomogeneity prostředí (indexu lomu) vedou ke změně dráhy s poloměrem křivosti srovnatelným s vlnovou délkou, začne se výrazně uplatňovat vlnový charakter světla a zákony geometrické optiky přestanou platit. Obdobnou situaci můžeme čekat i u de Broglieho vln: klasická Newtonova mechanika, pracující s trajektoriemi částic, bude přitom analogií geometrické optiky pro světlo. Vlnová povaha částic se tedy může začít projevovat až v atomových dimenzích. Tak vzorec (6) nám při pokojové teplotě dá pro atom helia  $\lambda \approx 0,09\text{nm}$ , pro neutron  $\lambda \approx 0,18 \text{ nm}$  a pro elektron  $\lambda \approx 7,7 \text{ nm}$ .

K experimentálnímu důkazu vlnové povahy částic bylo nutné s nimi realizovat pokusy, jejichž výsledky dokážeme snadno interpretovat jen na základě vlnové představy; typickým představitelem takových pokusů je difrakce vlnění. Z vlnové optiky víme, že k provedení difrakčního pokusu potřebujeme systém rozptylových center, periodicky rozmístěných v prostoru s krokem srovnatelným s vlnovou délkou použitého vlnění. Pro viditelné světlo, s  $\lambda \approx 500\text{nm}$ , dokážeme takový systém - mřížku - vyrýt např. do skla. Je-li však vlnová délka srovnatelná s rozměry atomů, např. u rentgenového záření, tato možnost mizí a je třeba hledat soustavy rozptylových center - mřížky - vytvořené přírodou na atomové úrovni. Tato skutečnost přivedla v r.1912 Maxe von Laueho k myšlence, použít za difrakční mřížku pro rentgenové záření krystalovou mříž.

Protože záporně nabité elektrony interagují s náboji v atomu, mohou atomy sloužit jako rozptylová centra pro elektrony a krystalová mříž by tudíž měla zastat roli difrakční mřížky i pro elektrony. Difrakce elektronů na krystalové mřížce niklu byla uskutečněna v r.1927 C.J.Davissonem a L.H.Germerem. Elektrony, které používali, měly energii kolem  $100\text{eV}$ , takže jejich de Broglieho vlnová délka byla řádově shodná s mřížkovou konstantou Ni.

Prakticky ve stejné době (1928), provedl G.P.Thomson pokusy s elektrony urychlenými napětím desítky keV (vlnová délka je značně menší než

mřížková konstanta; k přesnému výpočtu  $\lambda$  je již nutné užít vztah (3), které nechal procházet tenkou folií (tloušťka asi 100nm) polykrystalického materiálu; šlo tedy o obdobu Debyeovy-Scherrerovy metody, vypracované r.1916 pro difrakci rentgenového záření.

Uvedené pokusy jednoznačně potvrdily de Broglieho hypotézu pro elektrony. V následujících letech pak byla postupně znovu a znovu potvrzována pro ostatní objekty v mikrosvětě - elementární částice, atomy, ionty, molekuly. Při této příležitosti je vhodné si uvědomit roli historického vývoje v utváření našich názorů na povahu mikročástic. Vlnové vlastnosti fotonu byly objeveny dříve než jeho korpuskulární vlastnosti. U elektronů tomu bylo naopak; všechny pokusy, které s nimi byly konány až do r.1927, neodporovaly představě, že elektron je částice, jejíž pohyb lze popisovat Newtonovými pohybovými rovnicemi. To vedlo k hluboce zakotvené představě o elektronu (a ostatních elementárních částicích též) jakožto jakési kulečnickové kouli extrapolované do velmi malých rozměrů. Obdobně se během XIX.století, podporována řadou sugestivních experimentů, zformovala představa o vlnové povaze světla. Mnoho potíží při studiu fyziky mikrosvěta proto vzniká, především v počátečních fázích, z neschopnosti zbavit se tohoto jednostranného pohledu na mikroobjekty.

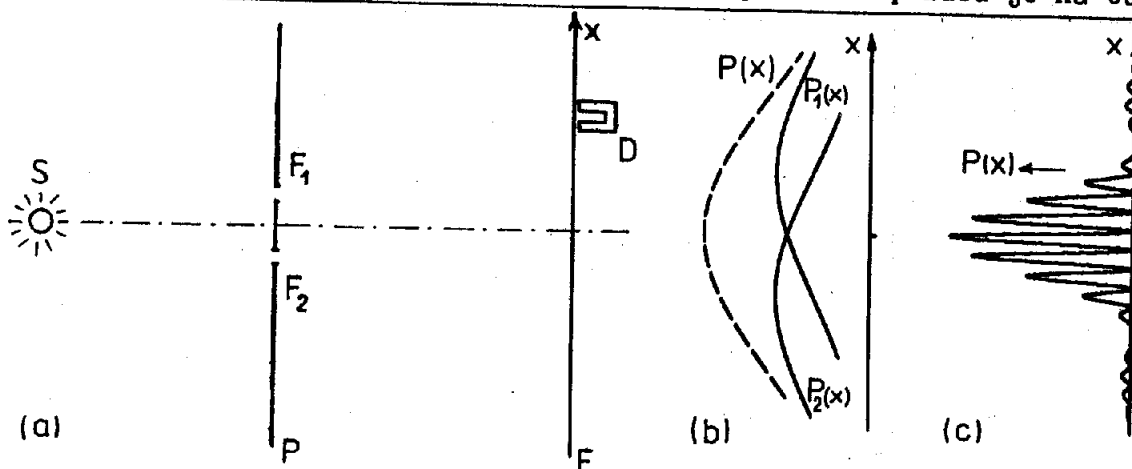
### 2.3) Částice nebo vlny ?

V předcházejícím výkladu jsme používali vžitý obrat "vlna spojená s částicí". Tento historicky podmíněný výraz nelze považovat za vhodný, neboť vytváří dojem, že jde o klasickou částici, která je doprovázena vlnou a tyto dva objekty jsou spolu nějakým způsobem vázány. Ve skutečnosti jde však o jediný objekt, který se v některých situacích (experimentech) chová jako vlna a v jiných jako klasická částice (zmíněná kulečnicková koule extrapolovaná do atomových rozměrů). Otázka: "Je elektron vlna nebo částice?" nemá prostě smysl.

Skutečností je, že mnoho nedorozumění a zdánlivých paradoxů vyplývá z nutnosti popisovat novou realitu, nepřístupnou přímo našemu smyslovému vnímání, pomocí pojmů zavedených při studiu makrosvěta. To vede k používání jakési dvojnásobné řeči, kdy střídavě používáme různé klasické pojmy, které by vedly nutně k rozporům, kdyby byly užity současně (např. vlna a částice). Mluví se o drahách elektronů, o hmotných vlnách a hustotě náboje apod; užívání takových klasických pojmů v oblasti mikrosvěta je však daleká extrapolace a nemělo by proto být překvapením, když se ukáže být neoprávněnou. Situace je však, vyjádřeno slovy N.Bohra, taková, že: "I když jevy překračují libovolně daleko možnost klasického objasnění, všechno jejich zkoumání musí být vedeno pomocí klasických pojmů".

Specifické chování mikročástic lze demonstrovat na klasickém Youngově pokusu s difrakcí na dvou štěrbinách. I když pokus, o němž bude řeč, nebyl v tak jednoduché podobě realizován, představuje podstatu mnoha technicky složitějších (a tím i méně přehledných) pokusů. Pro určitost

Jej budeme "provádět" s elektrony, naprosto stejně by však probíhal se všemi mikročásticemi, včetně fotonů. Schema uspořádání pokusu je na obr.8.



Obr. 8. (a) Schema uspořádání pro difrakci na dvou štěrbinách; rozměry štěrbin  $F_1, F_2$  jsou menší než vlnová délka  $\lambda$ , jejich vzdálenost je srovnatelná s  $\lambda$ . (b) Výsledek pokusu při postupně otevřené štěrbině  $F_1$  (zavřené  $F_2$ ) a  $F_2$  (zavřená  $F_1$ ). (c) výsledek pokusu při obou štěrbinách otevřených.

Ze zdroje S vylétují monoenergetické (všechny se stejnou energií) elektrony a některé z nich dojdou přes překážku P se štěrbinami  $F_1, F_2$  až do místa registrace, kde jsou registrovány detektorem D; v rovině E může být fotografická deska, pohybovat se ve směru Ox Geigerův-Millerův počítač (pro fotony fotonásobič) apod. Cílem experimentu je zjistit, po dopadu velkého počtu elektronů do roviny E, rozložení  $P(x)$  počtu elektronů podél osy x v rovině E.

Uvažme nejdříve, jaký by měl být výsledek pokusu, tj.  $P(x)$ , jestliže by se elektrony chovaly jako klasické částice. V tomto případě by trajektorie elektronu procházela buď štěrbinou  $F_1$  nebo  $F_2$  a místo dopadu na E by zřejmě nezáviselo na tom, zda byla druhá ze štěrbin otevřená nebo zakrytá. Výsledná funkce  $P(x)$  by měla být

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) \quad (7)$$

kde  $P_1(x)$  ( $P_2(x)$ ) značí rozdělení získané při otevřené štěrbině  $F_1$  ( $F_2$ ) a zakryté štěrbině  $F_2$  ( $F_1$ ).

Experiment však ukazuje, že při současném otevření obou štěrbin

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x) \quad , \quad (8)$$

ale získá se funkce  $P(x)$  schematicky znázorněná na obr.8c, což je známé rozdělení intenzity vlnění při difrakci na dvou štěrbinách [5].



Abychom udrželi částicovou představu, mohli bychom hledat vysvětlení (8) ve vzájemném ovlivňování elektronů, prošlých různými štěrbinami. Experiment v němž snížíme emisi elektronů z S natolik, že v prostoru mezi P a E bude průměrně vždy jen jeden elektron, nám však dá (za přiměřeně prodlouženou dobu) opět rozdělení podle obr. 8c. Vznik tohoto rozdělení dokážeme jednoduše vysvětlit jen na základě vlnové představy. Naproti tomu, při všech zmíněných pokusech, bude dostatečně citlivý detektor (s potřebnou rozlišovací schopností) registrovat pulsy oddělené časovými intervaly, svědčící o dopadu diskretních částic; přitom vždy registruje "celou částici", tzn. buď na něj elektron dopadne celý (náboj, hmotnost) nebo se neregistruje nic. Naprosto stejná situace nastane u světla dopadajícího na fotonásobič. Proces registrace tedy dokážeme snadno pochopit na základě korpuskulární představy. K objasnění celého experimentu tedy potřebujeme současně vlnovou i korpuskulární představu o mikročásticích emitovaných zdrojem S.

Vraťme se k interpretaci funkce  $P(x)$ , kterou jsme získali jako výslednici registrace velkého počtu částic v rovině E. Z hlediska jedné částice ji můžeme interpretovat jen jako pravděpodobnost, že tato částice, po emisi z S a průchodu štěrbinami, bude zaregistrována v místě se souřadnicí  $x$ . Obdobně  $P_1(x)$  ( $P_2(x)$ ) udává pravděpodobnost, že částice, po průchodu štěrbinou  $F_1$  ( $F_2$ ), při zakryté štěrbině  $F_2$  ( $F_1$ ), bude zaznamenána v bodě se souřadnicí  $x$ . Z rozboru difrakce vlnění víme, že funkce  $P(x)$ ,  $P_1(x)$ ,  $P_2(x)$  udávají rozložení intenzity vlnění v rovině E; intenzita vlnění je však úměrná kvadrátu absolutní hodnoty amplitudy vlnění (amplituda může být komplexní). To nás vede k zavedení amplitud pravděpodobnosti  $\varphi(x)$ ,  $\varphi_1(x)$ ,  $\varphi_2(x)$  pro něž platí

$$P(x) = |\varphi(x)|^2, \quad P_1(x) = |\varphi_1(x)|^2, \quad P_2(x) = |\varphi_2(x)|^2 \quad (9)$$

Při obou štěrbinách otevřených pak musíme skládat amplitudy (nikoliv intenzity jako v (7)), takže

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) + \varphi_2(x) \quad \text{a} \quad P(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2 \quad (10)$$

Můžeme tedy shrnout: elektrony (částice) jsou registrovány v diskretních, vždy stejných, porcích, podobně jako klasické částice, avšak pravděpodobnost dopadu elektronu (částice) na detektor v daném místě je dána funkcí určující intenzitu vlnění. V tomto smyslu je tedy nutné chápat korpuskulárně-vlnový dualismus.

Vraťme se ještě k experimentu z obr. 8a a modifikujme ho tak, abychom mohli rozhodnout, kterou štěrbinou elektron prošel. Realizovat to můžeme tak, že za stínítko se štěrbinami umístíme zdroj světla a budeme sledovat u které štěrbině dojde k rozptylu světla (fotonu), tj. budeme za štěrbinami sledovat Comptonův jev [6], [8]. Jiná možnost je, dát detektor za jednu ze štěrbin; elektrony které zde nebyly registrovány prošly zřejmě

druhou šterbinou a dopadly na E, zatímco zbývající byly absorbovány v detektoru u šterbiny. Tato alternativa je zřejmě ekvivalentní zakrytí jedné ze šterbin, takže výsledek pokusu již známe:  $P_1(x)$  nebo  $P_2(x)$ . Dáme-li detektor napřed k jedné a potom k druhé šterbině, 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 šterbiny 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 šterbinou elektron prošel, potom dostaneme rozložení  $P(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2$ , odpovídající rozložení intenzity při difrakci na dvojšterbině.

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 měřicího zařízení pro určení, kterou šterbinou elektron prošel, není zanedbatelný, ale naopak, mění zásadním způsobem funkci  $P(x)$ . Jak tedy máme nerozporně uvažovat a vyjedřovat se o dějích v mikrosvětě ? O trajektorii částice (o průchodu šterbinou  $F_1$  nebo  $F_2$ ) můžeme uvažovat a mluvit pouze tehdy, jestliže jde o experiment, který je schopen rozlišit (je postaven tak aby rozlišil) průchod šterbinou  $F_1$  a  $F_2$ . O trajektorii částice (o průchodu šterbinou) však nesmíme uvažovat při rozboru experimentů, které jsou postaveny tak, že nedovolují rozhodnout, kterou šterbinou 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 vlnou částicí 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] ).

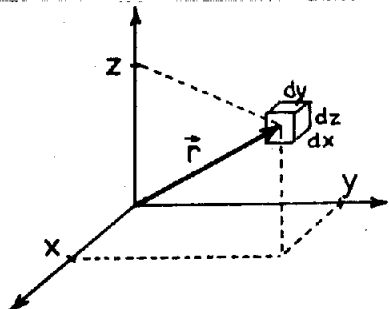
Pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce navozoval již rozbor difrakce na dvojštěrbíně; zavedli jsme tam amplitudy pravděpodobnosti (vlnové funkce), jejichž kvadrát modulu určoval pravděpodobnost výskytu částice.

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

Podle Maxe Borna se  $\psi$  interpretuje jako amplituda pravděpodobnosti výskytu částice; výraz

$$dP(x, y, z; t) = |\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz \quad (11)$$

udává pravděpodobnost nalezení částice, v čase  $t$ , v infinitesimálním objemu  $dx dy dz$ , opsaném kolem bodu se souřadnicemi  $(x, y, z)$ .



Obr. 9

Pravděpodobnost, že v čase  $t$  bude částice nalezena v infinitesimálním objemu  $dx dy dz$  opsaném kolem bodu se souřadnicemi  $(x, y, z)$  je  $|\psi(x, y, z; t)|^2 dx dy dz$  (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  $V$  :

$$\iiint_{(V)} |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz \quad (12)$$

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

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz \quad (13)$$

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)

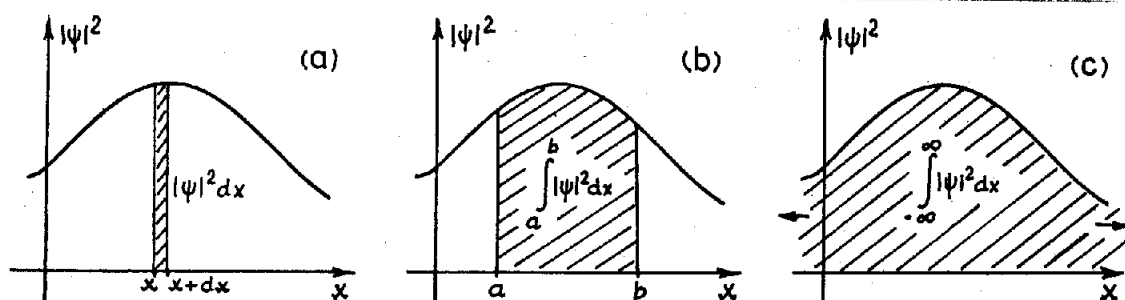
$$dP(x;t) = |\psi(x;t)|^2 dx \quad (14)$$

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

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

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

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



Obr. 10. Pravděpodobnost, že částice bude v čase  $t$  nalezena: (a) v infinitesimálním okolí bodu  $x$ , (b) v intervalu  $\langle a,b \rangle$ , (c) kdekoli 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.

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

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

Proto stále mluvíme o kvadrátu modulu vlnové funkce

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

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

Je-li funkce reálná ( $\text{Im } \psi \equiv 0$ ), 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

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

### 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

$$N = |C|^2 \iiint |\psi(x,y,z;t)|^2 dx dy dz = 1 \quad (20)$$

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 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

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

kde  $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$  je polohový vektor 1-té částice ( $i = 1, 2$ ).

Interpretuje se takto:

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

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)

$$|\psi|^2 \iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 d\tau_1 d\tau_2 = 1 \quad (23)$$

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

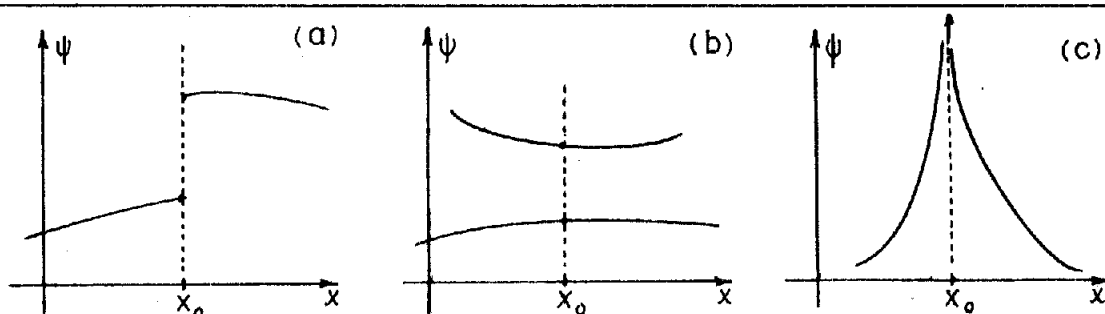
Z přijaté fyzikální interpretace vyplývají následující požadavky na vlnové funkce; vlnová funkce musí být :

- (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  $x \rightarrow x_0$  do  $\infty$  (nejčastěji budeme muset vylučovat funkce, které pro  $|x| \rightarrow \infty$  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

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (24)$$

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

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (25)$$

kde  $c_1, c_2$  jsou libovolná komplexní čísla.

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

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_i \psi_i + \dots = \sum_i c_i \psi_i \quad (26)$$

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

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

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)

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

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

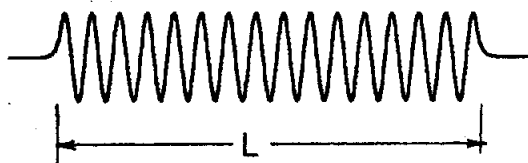
$$\psi_p^*(x;t) \psi_p(x;t) = C^* C = |C|^2 \quad (28)$$

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 kteréhokoli 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).

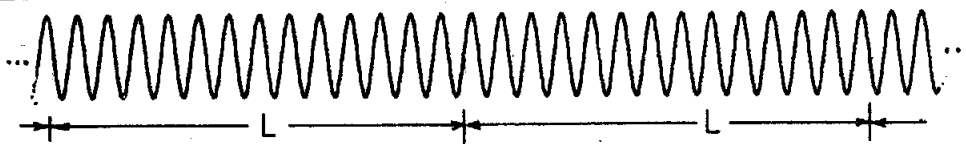
Fyzikálně reálná je kvazimonochromatická vlna, která v libovolně velké, avšak konečné, části prostoru má průběh (27) a vně tohoto intervalu, tj. pro  $|x| \rightarrow \infty$ , jde k nule (obr.12) (normalizační integrál bude existovat, jestliže pokles k nule je rychlejší než u funkce  $1/x$ ).



Obr. 12.

Kvazimonochromatická vlna. Vně intervalu délky  $L$ , pro  $|x| \rightarrow \infty$ , 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 rozdělenou 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; spojitě 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

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (29)$$

(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

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z) \quad (30)$$

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

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

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

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

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

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

a normalizace v krychli s hranami  $L$  vede k výpočtu integrálu

$$\begin{aligned} \int_0^L \int_0^L \int_0^L \left| C \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z - Et) \right] \right|^2 dx dy dz = \\ = |C|^2 \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz = |C|^2 \cdot L^3 \end{aligned} \quad (34)$$

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

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

Zvětšováním oblasti  $L$  se můžeme s libovolnou přesností přibližovat ke stavu, kterému odpovídá monochromatická vlna. Provedení limitního přechodu  $L \rightarrow \infty$  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  $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_n$

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

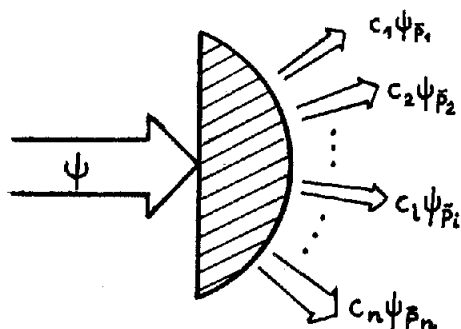
Všechny funkce v (36) nechť jsou normalizované v krychli s hranou  $L$ , takže platí

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

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice ve stavu (36) je

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r};t)|^2 &= (c_1^* \psi_{\vec{p}_1}^* + \dots + c_n^* \psi_{\vec{p}_n}^*) (c_1 \psi_{\vec{p}_1} + \dots + c_n \psi_{\vec{p}_n}) = \\ &= |c_1|^2 |\psi_{\vec{p}_1}|^2 + |c_2|^2 |\psi_{\vec{p}_2}|^2 + \dots + |c_n|^2 |\psi_{\vec{p}_n}|^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^n (c_1 c_j^* \psi_{\vec{p}_1} \psi_{\vec{p}_j}^* + c_1^* c_j \psi_{\vec{p}_1}^* \psi_{\vec{p}_j}) \end{aligned} \quad (38)$$

Představme si nyní, že částice ve stavu  $\psi$  dopadají na měřicí 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)

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

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

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

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

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

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  $\vec{p}_i$  ( $i=1,2,\dots,n$ ), 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  $\psi_i$

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_i \psi_i + \dots, \quad (42)$$

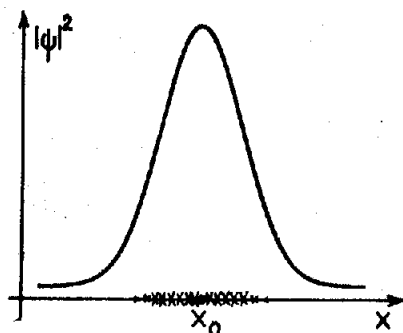
potom pravděpodobnost, že při měření bude částice nalezena ve stavu s vlnovou funkcí  $\psi_i$  je rovna  $|c_i|^2$  ( $i=1,2,\dots$ ) (všechny funkce předpokládáme normalizované).

## 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

částicím s daným impulsem, dávají konstantní hustotu pravděpodobnosti. V mnoha reálných situacích (experimentech) však víme, že částice (byť volná) se s velkou pravděpodobností nachází v nějaké, třeba i velmi malé, části prostoru; měla by jí proto být přiřazena vlnová funkce, jejíž amplituda je výrazně odlišná od nuly jen v této části prostoru (obr. 15).



Obr. 15.

Je-li částice s velkou pravděpodobností lokalizována ve vyšrafované oblasti na ose  $x$ , potom musí být  $|\psi|^2$  velké jen v této oblasti, jak je schematicky znázorněno na obrázku.

Z nauky o vlnění víme (viz např. [5]), že vlnové útvary s velkou amplitudou jen v části prostoru - tzv. vlnová klubka - lze vytvořit vhodnou superpozicí (součtem) monochromatických vln, s různými vlnovými délkami. Protože princip superpozice jsme přijali i do základů kvantové mechaniky, můžeme stejným postupem vytvářet i prostorově lokalizované vlnové funkce.

Dosud jsme předpokládali, že příspěvky do superpozice stavů je možné rozlišit diskretně proměnným indexem (kvantovým číslem). Jestliže se však veličina rozlišující možné stavy (tj. kvantové číslo) může měnit v nějakém intervalu hodnot spojitě (příkladem je impuls  $p$ , který pro volnou částici může nabývat všechny hodnoty z intervalu  $(-\infty, +\infty)$ ), můžeme vzít do superpozice všechny vlnové funkce z tohoto intervalu; sumace, která byla např. ve vztahu (36), pak přejde v integraci.

Volná částice, která se pohybuje jen po ose  $x$ , může tedy být ve stavu, který v daném časovém okamžiku (předpokládejme v  $t=0$ ) lze obecně vyjádřit takto (rov. (36))

$$\psi(x;0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \quad (43)$$

kde  $c(p)$  je koeficient, s nímž do superpozice přichází stav s impulsem  $p$  (s normalizovanou vlnovou funkcí  $(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$ ;  $(2\pi\hbar)^{-1/2}$  je normalizační konstanta při normalizaci na  $\delta$ -funkci (viz dod.D)). Protože  $p$  se mění spojitě, je  $c(p)$  funkce proměnné  $p$ . Zobecníme-li závěr odst. 4.3 na tento případ, potom (předpokládáme, že  $\psi(x;0)$  je normalizovaná pro  $x \in (-\infty, +\infty)$ ) výraz

$$|c(p)|^2 dp \quad (44)$$

udává pravděpodobnost, že u částice ve stavu s vlnovou funkcí (43), bude při měření impulsu naměřena jeho hodnota v intervalu  $(p, p+dp)$ .

Zobecněná podmínka (41) je

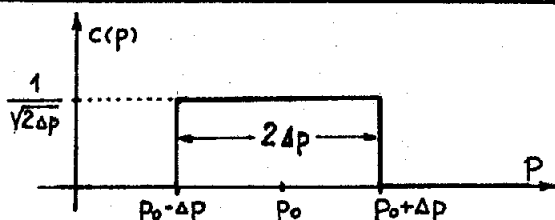
$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp = 1 \quad (45)$$

Funkce  $c(p)$  jednoznačně (pomocí vztahu (43)) určuje vlnovou funkci  $\psi(x;0)$  a tím i stav částice v čase  $t=0$ . Rovněž její interpretace, vyjádřená vztahy (44), (45), je obdobná interpretaci vlnové funkce  $\psi(x)$ . Můžeme proto na ni pohlížet jako na druhou možnou reprezentaci stavu částice; říkáme, že  $c(p)$  je vlnová funkce v impulsové reprezentaci. Student obeznámený s Fourierovou transformací (dod.D), v ní samozřejmě pozná Fourierovu transformaci funkce  $\psi(x)$ .

Vraťme se však k naší původní úloze, vytvořit prostorově lokalizovanou vlnovou funkci  $\psi(x)$ . Zvolme (obr. 16)

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\Delta p}} \quad \text{v intervalu } \langle p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p \rangle \\ &= 0 \quad \text{v } (-\infty, p_0 - \Delta p) \text{ a v } (p_0 + \Delta p, +\infty) \end{aligned} \quad (46)$$

Konstanta  $(2\Delta p)^{-1/2}$  je zvolena tak, aby platilo (45).



Obr. 16.

Funkce  $c(p)$  zadaná vztahem (46).

Vlnovou funkci (43) pak můžeme psát

$$\psi(x;0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar\Delta p}} \int_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp; \quad (47)$$

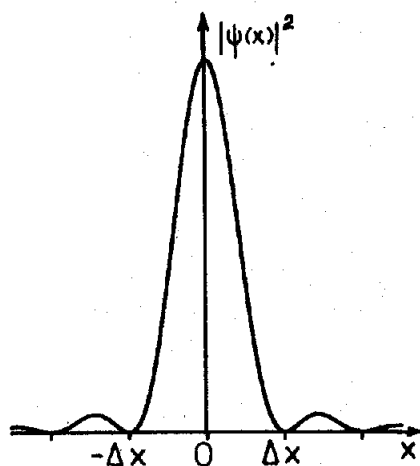
Integrál snadno vypočteme s výsledkem

$$\psi(x;0) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\Delta p}} \cdot \frac{\sin(\Delta p \cdot x/\hbar)}{x} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right) \quad (48)$$

O normalizaci  $\psi(x)$  se přesvědčíme přímým výpočtem (integrál viz dod.A)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x;0)|^2 dx = \frac{\hbar}{\pi\Delta p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\Delta p \cdot x/\hbar)}{x^2} dx = \frac{\hbar}{\pi\Delta p} \frac{\Delta p}{\hbar} \pi = 1$$

Hustota pravděpodobnosti  $|\psi(x)|^2$  je v obr. 17.



Obr. 17.

Hustota pravděpodobnosti výskytu pro volnou částici na ose  $x$ , která je ve stavu s vlnovou funkcí (48); pravděpodobnost výskytu částice je velká v intervalu zhruba  $(-\Delta x, \Delta x)$ , kde  $\Delta x = \pi \hbar / \Delta p$ .

Budeme-li u částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (48) (v čase  $t = 0$ ) určovat polohu, najdeme ji v intervalu šířky asi  $2 \Delta x$  v okolí bodu  $x = 0$ . Cena, kterou jsme za tuto lokalizaci v prostoru  $x$  zaplatili, je částečná ztráta informace o impulsu částice. Budeme-li totiž měřit impuls částice, která je ve stavu s vlnovou funkcí (48), můžeme se stejnou pravděpodobností (rovnou  $|c(p)|^2 = 1/2 \Delta p$ ) naměřit kteroukoliv hodnotu z intervalu  $(p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p)$ . Protože součin  $\Delta x \cdot \Delta p$  je konstantní :

$$\Delta x \cdot \Delta p = \pi \hbar \quad (49)$$

bude každé zmenšení neurčitosti v poloze provázeno zvětšením neurčitosti v impulsu částice a obráceně.

Limitní případy jsou:

- (i)  $\Delta p \rightarrow 0$  ( $c(p)$  má charakter  $\delta$ -funkce),  $\Delta x \rightarrow \infty$  : známe přesně impuls částice, nemáme žádnou informaci o její poloze (vlnová funkce je de Broglieho vlna  $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(p_0 x/\hbar)$ )
- (ii)  $\Delta x \rightarrow 0$  ( $\psi(x)$  má charakter  $\delta$ -funkce),  $\Delta p \rightarrow \infty$  : částice je přesně lokalizována v  $x$ -prostoru, nemáme žádnou informaci o jejím impulsu.

## 5.2) Relace neurčitosti pro souřadnice a impuls

Hodnotu součinu  $\Delta x \cdot \Delta p$  podle (49) jsme dostali pro funkci  $c(p)$  znázorněnou na obr. 16. Protože velikost tohoto součinu závisí na volbě  $c(p)$ , můžeme formulovat úkol, nalézt takovou funkci  $c(p)$ , která by dávala minimální hodnotu součinu  $\Delta x \cdot \Delta p$ . Tím zřejmě také získáme odpověď na otázku, s jakými minimálními neurčitostmi je vůbec možné, naměřit současně souřadnici a impuls. Chceme-li však hledat minimum součinu  $\Delta x \cdot \Delta p$ , musíme nejprve jednoznačně definovat veličiny  $\Delta x, \Delta p$  (obecně totiž nemusí funkce  $|\psi(x)|^2, |c(p)|^2$  protínat osu  $x$ , resp.  $p$ , jako na obrázcích 16, 17).

Nejčastěji se  $\Delta x, \Delta p$  definují jako střední kvadratické odchylky od středních hodnot, tj.

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle 2x \langle x \rangle \rangle + \langle \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\(\Delta p)^2 &= \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2\end{aligned}\quad (50)$$

kde závorka  $\langle \rangle$  značí střední hodnotu. Způsob výpočtu středních hodnot v kvantové mechanice budeme postulovat v kap.IV; veličiny  $\Delta x, \Delta p$ , definované vztahy (50), však mají běžný smysl, známý ze základů statistické teorie zpracování měření.

Úlohu o nalezení minimálního vlnového klubka (nalezení  $c(p)$  pro minimální součin  $\Delta x, \Delta p$ ) řešil r.1925 W.Heisenberg. Ukazuje se, že nejvhodnější klubko získáme s Gaussovou funkcí (dod.A)

$$c(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\Delta p}} \exp \left[ -\frac{(p - p_0)^2}{4 (\Delta p)^2} \right] \quad (51)$$

kde  $p_0 = \langle p \rangle$  a disperse  $\sigma = \sqrt{2} \Delta p$  je zvolena tak, aby disperse pro

$$|c(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta p} \exp \left[ -\frac{(p - p_0)^2}{2 (\Delta p)^2} \right] \quad (52)$$

byla právě  $\Delta p$  (statistické rozložení naměřených impulsů udává podle (44)  $|c(p)|^2$ ). O tom, že tato  $c(p)$  je normalizována podle (45), se přesvědčíme přímým výpočtem (integrál je v dod.A).

Dosazením do (43) dostaneme

$$\begin{aligned}\psi(x;0) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4(\Delta p)^2}} e^{i \frac{p}{\hbar} x} dp = \\&= \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \cdot e^{-\frac{x^2 (\Delta p)^2}{\hbar^2}} \cdot e^{i \frac{p_0}{\hbar} x} \cdot \\&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{4(\Delta p)^2} \left[ p - \left( p_0 + i \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar} x \right) \right]^2 \right\} dp\end{aligned}\quad (53)$$

Integrál v (53) je roven (dod.A)  $2\sqrt{\pi} \Delta p$ , takže

$$\psi(x;0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\Delta x}} e^{-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}} \cdot e^{i \frac{p_0}{\hbar} x} \quad (54)$$



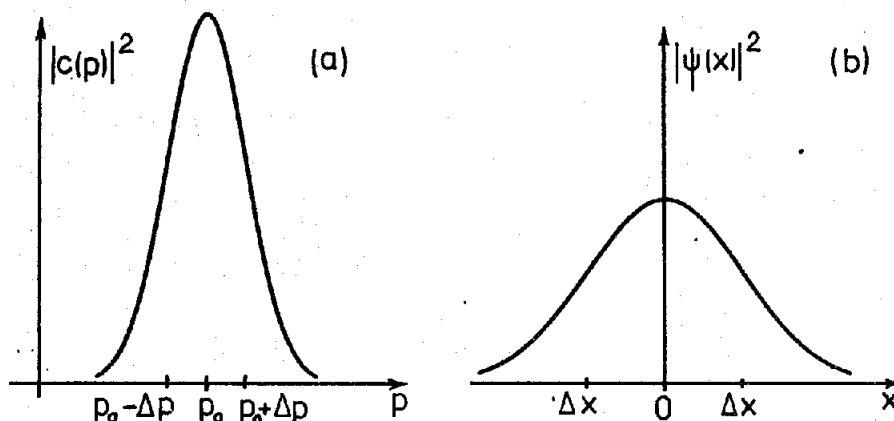
kde

$$\Delta x = \frac{\hbar}{2 \cdot \Delta p} \quad (55)$$

Protože

$$|\psi(x;0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp \left[ -\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right] \quad (56)$$

je disperse naměřených hodnot  $x$  rovna  $\Delta x$ ; pro jednoduchost jsme zvolili  $x_0 = \langle x \rangle = 0$  (lokalizace částice v okolí počátku), záměnou  $x$  na  $(x-x_0)$  však snadno získáme lokalizaci v okolí libovolného bodu  $x_0$ . Křivky  $|c(p)|^2$ ,  $|\psi(x;0)|^2$  jsou v obr.18.



Obr. 18. Hustota pravděpodobnosti výskytu (a) impulsu, (b) souřadnice, pro částici ve stavu s vlnovou funkcí (54); v obou případech jde o normalizované Gaussovy křivky s dispersí (a)  $\Delta p$ , (b)  $\Delta x$ . Disperse představují střední kvadratické odchylky (50).

Dává-li Gaussova funkce  $c(p)$  minimální součin  $\Delta x \cdot \Delta p$  rovný podle (55)  $\hbar/2$ , potom obecně můžeme psát

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (57)$$

kde  $\Delta x, \Delta p$  jsou definovány vztahy (50).

Nerovnost (57) je známá Heisenbergova relace neurčitosti pro souřadnici a impuls v případě, že se částice pohybuje jen po ose  $x$ .

V trojrozměrném případě, kdy poloha částice je určována polohovým vektorem  $\vec{r} = (x, y, z)$  a její impuls je vektor  $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ , platí relace (57) pro každý souřadný směr zvlášť, takže

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (58)$$

Vlnové klubko (43) v trojrozměrném případě bude

$$\psi(\vec{r};0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p}) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dp_x dp_y dp_z \quad (59)$$

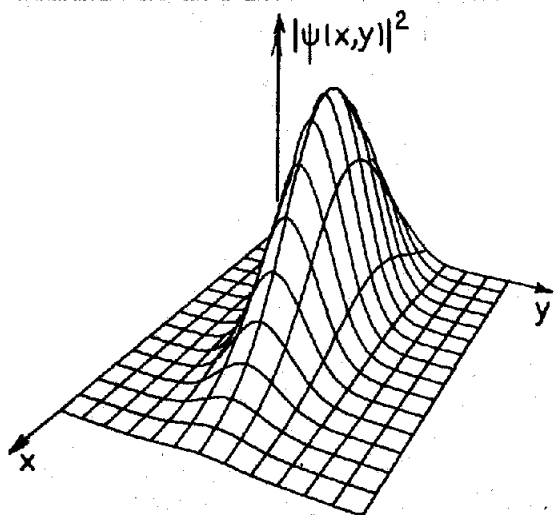
Je-li možné psát funkci  $c(p)$  jako součin

$$c(\vec{p}) = c_1(p_x) \cdot c_2(p_y) \cdot c_3(p_z), \quad (60a)$$

pak, protože

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} = e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_z z}, \quad (60b)$$

je možné integrál (58) napsat jako součin tří, již vyřešených, jednorozměrných případů a závěr (58) je tím zřejmý; zdoluhavějším postupem však může být jeho platnost dokázána pro libovolná trojrozměrná klubka.



Obr. 19.

Dvojměrné gaussové klubko.

Je-li ale možné při vytváření klubek uvažovat každý souřadný směr zvlášť, znamená to, že lokalizace částice v jednom směru (přesné určení některé ze souřadnic, např.  $x$ -ové) nebrání přesnému určení složky impulsu ve zbývajících dvou směrech (tedy např. určení  $p_y, p_z$ ). V terminologii vlnových klubek: můžeme vytvořit trojrozměrné vlnové klubko  $|\psi(x,y,z)|^2$  "úzké" např. ve směru  $x$  a "široké" v  $y$  a  $z$ , jestliže odpovídající funkce (klubko)  $|c(p_x, p_y, p_z)|^2$  bude "široká" ve směru  $x$  a "úzká" ve směrech  $y, z$ .

Heisenbergovy relace neurčitosti (58) se obvykle objasňují takto: o dynamických proměnných (jako jsou souřadnice, impuls a další) má podle úvah z odst. 2 smysl mluvit tehdy, jestliže máme postaven experiment k jejich určení. Analýzou reálných experimentů pro měření v mikrosvětě, dojdeme k závěru, že každé měření ovlivňuje stav měřené mikrosoustavy; toto narušení soustavy je důsledkem interakce měřicího zařízení s měřeným objektem a je principiálně neodstranitelné. Tak např. pokus o přesné

určení souřadnice vede k takové změně stavu ( a tedy odpovídající vlnové funkce, neboť právě ona určuje stav), že v tomto novém stavu bude zcela neurčitý impuls. Jinak řečeno: zařízení, které má přesně určit souřadnici, musí převést soustavu do stavu s vlnovou funkcí  $\psi$  silně lokalizovanou v okolí výskytu částice; víme však, že takovou funkci lze vytvořit jen s velice "širokou" funkcí  $c(p)$ . Opačně, každý pokus o přesné určení impulsu převede soustavu do stavu, v němž je naprostá neurčitost v poloze částice. Chceme-li současně určit polohu i impuls částice, potom se tato dvě měření budou tak ovlivňovat, že neurčitosti (střední kvadratické chyby) obou veličin budou splňovat relace neurčitosti (58).

Smysl relací neurčitosti je však obecnější a hlubší. Pojmy, jako poloha, impuls, trajektorie částice apod., byly zavedeny v Newtonově mechanice na základě zobecněných poznatků z makrosvěta. Jsou to abstrakce, které podle předpokladů klasické mechaniky, mohou být určeny libovolně přesně. Používáme-li je v oblasti mikrosvěta ( v dimenzích o mnoho řádů menších), kde nebyly nikdy předtím experimentálně ověřovány, je to extrapolace, která nemusí být v souladu s realitou; skutečně také všechny existující experimenty potvrzují neoprávněnost této extrapolace. Můžeme tedy na relace neurčitosti pohlížet jako na podmínky určující hranici, za níž již principy ( a tedy i termíny) klasické fyziky nejsou použitelné.

Může jistě vzniknout otázka, proč tedy vůbec v oblasti mikrosvěta používáme pojmy jako poloha (souřadnice) a impuls, jestliže zde vlastně ztrácí svůj smysl. Předně proto, že nemáme jinou možnost, než se vyjadřovat jazykem (pojmy) vybudovaným na základě našeho smyslového vnímání okolního makrosvěta. Za druhé proto, že při kvantově-mechanickém popisu chování částic je možné zavést matematické objekty  $\vec{r}$ ,  $\vec{p}$ , které v mnoha ohledech odpovídají klasickým proměnným souřadnice a impuls, nejsou však s nimi identické. Relace neurčitosti nám pak říkají, že při pokusu interpretovat tyto kvantově-mechanické veličiny jako klasickou souřadnici a impuls, existuje principiální omezení na přesnost určení této "souřadnice" a "impulsu".

Shrňme tedy:

Relace neurčitosti nejsou výsledkem analýzy procesu měření, prováděné v klasických pojmech. Tyto relace odrážejí experimentálně zjištěné vlastnosti přírody. Reálné mikročástice se nechovají jako malé klasické částice; mají jiné vlastnosti a proto, nechceme-li dospět k chybným závěrům, musíme být i při provádění myšlenkových experimentů ostražití a respektovat experimentální fakta. Obtíž spočívá v tom, že naše zkušenosti z makrosvěta nám mohou být při úvahách o mikrosvětě špatným rádcem.

### 5.3) Časový vývoj vlnového klubka

V předcházejícím odstavci jsme vytvořili prostorově lokalizované klubko v čase  $t=0$ ; nyní nás zajímá, jak toto vlnové klubko bude vypadat v nějakém obecném čase  $t$ . Klubko pro libovolný čas  $t$  vytvoříme superpozicí rovinných monochromatických vln (1)

$$\psi(\vec{r}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p}) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right] dp_x dp_y dp_z \quad (61)$$

Pro  $t = 0$  nám (61) dává výraz (59) pro  $\psi(\vec{r}; 0)$ . Energie  $E$  v (61) je, pro volnou částicí s hmotností  $m$ , funkcí impulsu

$$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (62)$$

a frekvence  $\omega(\vec{p}) = E(\vec{p})/\hbar$ .

Protože faktor  $\exp(iEt/\hbar)$  má strukturu (60b), nemění nic na tvrzeních o redukci výrazu (59) na 3 jednorozměrné případy. Budeme proto opět uvažovat jen klubko

$$\psi(x; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (px - E(p)t)\right] dp \quad (63)$$

kde  $E(p) = p^2/2m$  (index  $x$  u  $p_x$  vypouštíme).

Fázová rychlost vlny, příslušející stavu s impulsem  $p$ , je  $(p=\hbar k)$  [5]

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} \quad (64)$$

a závisí tedy na  $p$  (protože  $p = \hbar/\lambda$ , závisí na vlnové délce, což je charakteristické pro disperzní prostředí). Z toho je bez počítání zřejmé, že klubko, které v čase  $t=0$  bylo vytvořeno tak, aby bylo optimální (součin  $\Delta x \cdot \Delta p$  byl minimální), v časech  $t \neq 0$  takové nebude, neboť fázové posuny mezi jednotlivými složkami klubka se vlivem disperse s časem mění; říká se, že se vlnové klubko rozplývá.

Ověřme tuto skutečnost kvantitativně pro gaussové vlnové klubko (53)

$$\psi(x; t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/4} \sqrt{\hbar \Delta p}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4(\Delta p)^2}} e^{\frac{i}{\hbar} (px - \frac{p^2}{2m} t)} dp \quad (65)$$

Stejně jako při výpočtu  $\psi(x; 0)$ , najdeme integrál v (65) úpravou na tvar (A.15); hustota pravděpodobnosti pak je

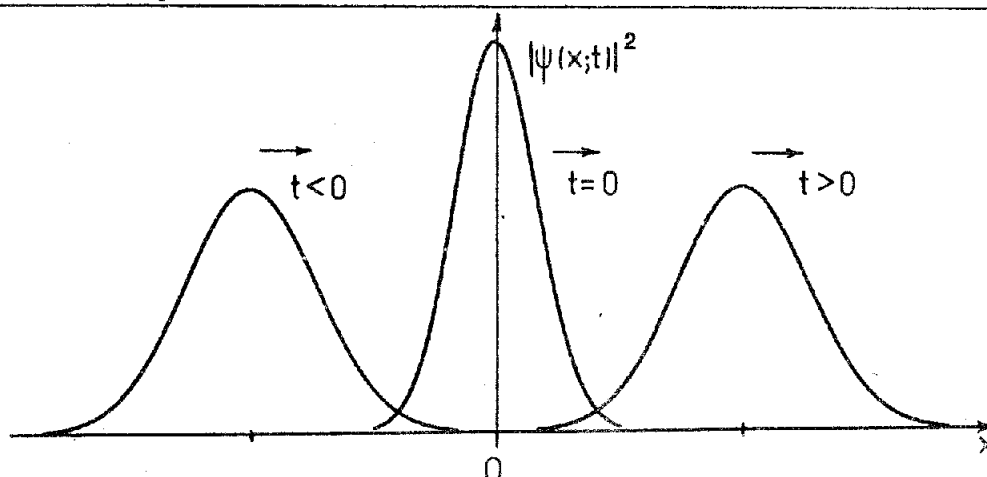
$$|\psi(x;t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x_t} \exp \left\{ - \frac{(x - p_0 t/m)^2}{2(\Delta x_t)^2} \right\} \quad (66a)$$

kde

$$\Delta x_t = \Delta x_0 \sqrt{1 + \left( \frac{\hbar t}{2m(\Delta x_0)^2} \right)^2} = \sqrt{(\Delta x_0)^2 + \left( \frac{\Delta p}{m} t \right)^2} \quad (66b)$$

a  $\Delta x_0 = \hbar / 2\Delta p$  je disperse (55) v čase  $t = 0$ .

Hustota pravděpodobnosti výskytu si tedy zachovává gaussovský tvar, její maximum v čase  $t$  však je v bodě  $x_0 = p_0 t/m$  ( $x_0 = \langle x \rangle$  v (50)) a disperse je  $\Delta x_t$ .



Obr. 20. Gaussovské vlnové klubko, optimální v  $t=0$ , ve třech časových okamžicích při postupu ve směru osy  $x$ . Z výrazu (66) je zřejmá symetrie vzhledem k  $t=0$ : tvar klubka bude stejný v časech  $-t, t$ .

Jestliže se maximum (těžiště klubka) posunulo za čas  $t$  o  $(p_0 t/m)$ , znamená to, že postupuje ve směru  $x$  s konstantní rychlostí

$$v_0 = \frac{p_0}{m}, \quad (67)$$

což je rychlost, s níž by se pohybovala klasická částice s hybností  $p_0 = mv_0$ , ale také tzv. grupová rychlost vlnového klubka ([5])

$$v_g = \left[ \frac{d\omega(k)}{dk} \right]_{k=k_0} = \left[ \frac{dE(p)}{dp} \right]_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}, \quad (68)$$

udávající rychlost s níž postupuje těžiště klubka.

Rychlost rozplývání klubka je dána na čase závislou disperzí  $\Delta x_t$ . S výrazem (66b) lze spojit názornou klasickou představu:

nechť v čase  $t=0$  je v intervalu velikosti  $\Delta x_0$ , v okolí bodu  $x=0$ , skupina klasických částic, jejichž rychlosti leží v intervalu  $\Delta v = \Delta p/m$  okolo hodnoty  $v_0 = p_0/m$ . Disperse v rychlostech vede k tomu, že částice, které se v čase  $t=0$  nacházely v téže bodě, se v okamžiku  $t$  rovnoměrně rozdělí po intervalu  $\Delta v t$ ; to má za následek, že původní koncentrace se nezachovává a rozměry oblasti v níž se soubor částic nachází, se zvětšují podle vztahu (66b).

Rozplývání vlnového klubka nemá vliv na normalizaci (norma nezávisí na čase). Rovněž střední hodnota impulsu  $\langle p \rangle = p_0$  a jeho disperse  $\Delta p$  jsou na čase nezávislé; časovou závislost v (63) můžeme totiž připojit k  $c(p)$  a zavést na čase závislé koeficienty

$$c(p; t) = c(p) e^{-iE(p)t/\hbar} \quad (69)$$

a psát

$$\psi(x; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p; t) e^{ipx/\hbar} \quad (70)$$

Pravděpodobnost, že v čase  $t$  bude naměřen impuls v intervalu  $(p, p+dp)$  je pak dána

$$|c(p; t)|^2 dp \quad (71)$$

Z (69) je však zřejmé, že tento výraz nezávisí na čase, neboť

$$|c(p; t)|^2 = |c(p; 0)|^2 = |c(p)|^2 \quad (72)$$

Tato skutečnost ovšem nevyjadřuje nic jiného, než zachování impulsu u volné částice.

#### 5.4) Příklady použití relací neurčitosti

Na několika příkladech si ukážeme, jak lze relace neurčitosti použít nejen k odhadu některých veličin, ale i k pochopení např. stability atomu.

(a) Odhad neurčitostí pro makrosvět

Mějme prachovou částici (viz též (6)) jejíž průměr je  $1\mu\text{m}$ , hmotnost  $m \approx 10^{-15} \text{ kg}$  a rychlost  $v = 10^{-3} \text{ m/s}$ . Její hybnost je

$$p = mv \approx 10^{-18} \text{ Js/m} \quad (73)$$

Určíme-li její polohu s chybou  $0,01 \mu\text{m}$ , potom neurčitost ve stanovení hybnosti bude (bereme  $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$ )

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-8}} \approx 10^{-26} \text{ J.s / m} \quad (74)$$

Relace neurčitosti tudíž nepředstavují žádné omezení, neboť měření hybnosti je prakticky nemožné s relativní přesností  $10^{-8}$ . Relace neurčitosti

tudíž nepovedou k žádným rozporům s našimi empiricky získanými poznatky o makrosvětě, i když jsou v rozporu s některými závěry klasických teorií, které byly na základě těchto poznatků vybudovány.

(b) Relace neurčitosti v mikrosvětě

Uvažujme elektron v atomu vodíku. Bohrova teorie ho popisovala jako klasickou částici, pohybující se po kruhových orbitách, jejichž poloměry  $R$  vyhovují podmínce (I.9)

$$p R = n \hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (75)$$

Aby však bylo možné použít klasické představy, musely by neurčitosti poloměru  $\Delta R$  a hybnosti  $\Delta p$  být malé ve srovnání s  $R$ , resp.  $p$ , tj. muselo by platit

$$\Delta R \ll R, \quad \Delta p \ll p \quad (76a)$$

neboli

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \ll 1 \quad (76b)$$

Podle relací neurčitosti však musí platit

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{\hbar}{R \cdot p} \quad (77a)$$

Dosadíme-li na pravou stranu za  $R \cdot p$  z (75), dostaneme, že musí platit

$$\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{1}{n} \quad (77b)$$

Porovnáním s (76b) vidíme, že klasické představy by byly použitelné pouze pro  $n \gg 1$ , tj. pro orbity s velkými poloměry. Při této příležitosti je možné připomenout také princip korespondence (odst.I.2.3), který také vyžadoval, aby pro  $n \rightarrow \infty$  výsledky splývaly se závěry klasických teorií.

(c) Velikost a stabilita atomu

Pokračujme v úvaze o vodíkovém atomu, tj. o elektronu s nábojem  $-e$  v poli protonu s nábojem  $+e$ . Potenciální energie elektronu ve vzdálenosti  $r$  od protonu je

$$V(r) = - \frac{q^2}{r} \quad (78a)$$

kde

$$q = e / \sqrt{4\pi\epsilon_0} \quad (78b)$$

Nechť stav elektronu je dán sféricky symetrickou vlnovou funkcí, jejíž amplituda je velká v oblasti s lineárním rozměrem  $r_0$  (tzn., že pravděpodobnost nalézt elektron ve vzdálenosti např.  $3r_0$  od protonu je zanedbatelná). Potenciální energie elektronu v tomto stavu je řádově rovna

$$V_0 \approx - \frac{q^2}{r_0} \quad (79)$$

Musíme ovšem vzít v úvahu i kinetickou energii. Je-li elektron v oblasti

s lineárním rozměrem  $r_0$ , bude neurčitost v jeho hybnosti přinejmenším řádu  $\hbar/r_0$ . Jinými slovy, i když střední hodnota hybnosti  $\langle \vec{p} \rangle$  je rovna nule, kinetická energie  $T$  bude v uvažovaném stavu nenulová a větší nebo rovna

$$T_0 = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \doteq \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \quad (80)$$

Zmenšujeme-li  $r_0$ , klesá  $V_0$  (znaménko -!), avšak roste  $T_0$ . Nejnižší celková energie, kompatibilní s relacemi neurčitosti, bude určena minimem funkce

$$E = T_0 + V_0 = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{q^2}{r_0} \quad (81)$$

Z podmínky  $(\partial E / \partial r_0) = 0$  dostaneme minimum pro

$$r_0 = a_0 = \frac{\hbar^2}{mq^2} \quad (82)$$

Tomu odpovídá energie

$$E_0 = - \frac{mq^4}{2\hbar^2} \quad (83)$$

Skutečnost, že  $r_0$  je právě poloměr 1. Bohrovovy orbity (I.18) a  $E_0$  energie základního stavu (I.19), je nutné považovat za náhodu, neboť jsme prováděli pouze řádový odhad. Poučení, vyplývající z provedeného odhadu, je v tom, že základní stav atomu je výsledkem kompromisu mezi kinetickou a potenciální energií: čím menší je oblast v níž je lokalizován elektron, tím menší je jeho potenciální energie a větší energie kinetická.

Uvědomme si, že tento kompromis, který je důsledkem relací neurčitosti, se diametrálně liší od závěrů klasické mechaniky. Jestliže by se elektron pohyboval po klasické orbitě s poloměrem  $r_0$ , jeho potenciální energie by byla

$$V_{kl} = - \frac{q^2}{r_0}$$

Odpovídající kinetickou energii dostaneme z podmínky rovnosti přitažlivé coulombovské síly a síly odstředivé:

$$\frac{q^2}{r_0^2} = \frac{mv^2}{r_0} \quad \text{což dá} \quad T_{kl} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2} \frac{q^2}{r_0}$$

Celková energie by pak byla

$$E_{kl} = T_{kl} + V_{kl} = - \frac{1}{2} \frac{q^2}{r_0^2}$$

takže minimum bychom dostali pro  $r_0 \rightarrow 0$ .



## (d) Odhad velikosti jaderných sil

Uvažujme nukleon s hmotností  $M \approx 10^{-27}$  kg v jádře, které si představíme jako kouli s poloměrem  $r_0 \approx 10^{-15}$  m. Z relací neurčitosti plyne, že impuls nukleonu je řádově  $p \approx \hbar / r_0$ , takže jeho kinetická energie

$$T \approx \frac{1}{2M} \frac{\hbar^2}{r_0^2} \approx 10^{-11} \text{ J} \approx 30 \text{ MeV}$$

Protože nukleon je v jádře vázán, musí být střední hodnota jeho potenciální energie záporná a v absolutní hodnotě větší než energie kinetická. Provedený odhad je velice hrubý, dává však uspokojivý řádový odhad velikosti jaderných sil.

## (e) Stopy ve Wilsonově mlžné komoře

Na první pohled se může zdát, že relace neurčitosti jsou v rozporu se skutečností, že "dráhy" částic můžeme pozorovat ve Wilsonově mlžné komoře, nebo ve fotografické emulsi. Rozpor je to však jen zdánlivý. Dráhu elektronu v mlžné komoře vyznačují kapičky kapaliny kondenzované na iontech, které elektron na své cestě vytvořil. Rozměr kapiček určuje přesnost stanovení polohy elektronu; protože rozměr kapek je  $\approx 10^{-6}$  m, je neurčitost v poloze elektronu téhož řádu. Neurčitost v odpovídající složce hybnosti (řekněme x-ové)  $\Delta p_x \approx \hbar / \Delta x \approx 10^{-28}$  kg.m/s. Protože hmotnost elektronu je  $\approx 10^{-30}$  kg, bude neurčitost složky rychlosti kolmé ke stopě elektronu  $\Delta v_x = \Delta p_x / m \approx 100 \text{ m/s}$ . Stopy ve Wilsonově komoře však zanechávají jen elektrony s dostatečně velkou kinetickou energií, odpovídající rychlosti  $v \gg 10^7 \text{ m/s}$ . Pak ovšem je  $\Delta v_x \ll v$  a můžeme proto s dobrou aproximací mluvit o dráze elektronu v mlžné komoře.

## 5.5) Relace neurčitosti pro energii a čas

Zatím jsme se zajímali o tvar vlnového klubka (přesněji: o rozložení hustoty pravděpodobnosti) v celém prostoru v daném časovém okamžiku. Je však možná i druhá situace, blízká mnoha reálným experimentům: pozorovatel je v určitém místě prostoru a kolem něho prochází vlna (- částice), kterou pozorovatel registruje jako amplitudu (nebo častěji kvadrát modulu amplitudy)  $f(t)$  nějakého fyzikálního procesu. Např.  $f(t)$  může být amplitudou elektromagnetické vlny; byla-li emitována atomem, bude blízká kvazimonochromatické vlně podle obr.12. Takovou vlnu lze vytvořit superpozicí monochromatických vln s různými frekvencemi [5].

Platí

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (84a)$$

kde

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \quad (84b)$$

Z matematického hlediska jde o známý Fourierův rozklad (Fourierovu analýzu) funkce  $f(t)$  na harmonické složky (dod.D).

Nemusíme se již podrobně těmito klubky zabývat, neboť základní výsledky o něž nám jde, máme již vlastně odvozeny. Stačí si jen uvědomit, že u de Broglieho vln je svázána frekvence s energií částice vztahem (2b) -  $E = \hbar\omega$  - takže vztahy (84) přejdou v

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} g(E) \cdot \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) dE \quad (85a)$$

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot \exp\left(i \frac{E}{\hbar} t\right) dt \quad (85b)$$

Na  $f(t)$  je možné pohlížet jako na funkci  $\psi(x;t)$  vyjádřenou vztahem (63), v němž je  $x$  pevné. Protože z matematického hlediska vystupuje v (63) dvojice  $(p,x)$  v naprosto stejném postavení jako dvojice  $(E,t)$ , dojdeme pro veličiny  $E, t$  ke stejným závěrům, jako pro  $p, x$ . Tak dostaneme, že pro vlnová klubka (85) platí

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar \quad (86)$$

Tato relace (kterou z důvodů jež budou snad zřejmé z následující diskuse neuvádíme ve tvaru (58), ale pouze s  $\gtrsim \hbar$ ) se zpravidla nazývá též Heisenbergova relace neurčitosti. Její interpretace však není tak snadná, jako např. u dvojice souřadnice-impuls. Důvod je v tom, že zatímco souřadnice i impuls jsou dynamické proměnné určující stav soustavy, v relaci (86) má takovéto postavení jen energie  $E$ ; čas  $t$  není dynamická proměnná, ale pouze parametr. Měření času samo o sobě nedává žádnou informaci o fyzikálním systému, pouze údaje o ostatních fyzikálních veličinách obvykle v sobě implicitně obsahují fakt, že jsou stanoveny pro určitý časový okamžik. Jednoduše: částice má hybnost  $\vec{p}$ , souřadnici  $x$ , energii  $E$ , ale nemá čas  $t$ . Jsou ovšem i veličiny, které se zachovávají, jako je třeba celková energie izolované soustavy, jejíž hodnota nezávisí na čase. Několik možných použití relace (86) si uvedeme v následujících příkladech.

(a) Doba průchodu vlnového klubka

Uvažujme volnou částici ve stavu s vlnovou funkcí vyjádřenou vlnovým klubkem, s disperzí  $\Delta x$  a grupovou rychlostí  $v_g$ , která postupuje podél osy  $x$ . Okamžik průchodu klubka daným bodem  $x$  nemůže být určen přesně: neurčitost ve stanovení okamžiku průchodu bude řádu  $\Delta t \approx \Delta x / v_g$ . Vlnovému klubku odpovídá však také neurčitost v impulsu částice  $\Delta p$  a s tím spojená neurčitost v energii částice

$$\Delta E \approx \frac{\partial E}{\partial p} \cdot \Delta p = v_g \cdot \Delta p$$

Potom však

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \Delta x \cdot \Delta p$$

a s využitím relace  $\Delta x \cdot \Delta p \gg \hbar$  dostáváme nerovnost (86), která dává odhad spodní hranice velikosti součinu šířky energiového spektra částice  $\Delta E$  neurčitosti  $\Delta t$  v určení doby průchodu částice nějakým bodem na ose  $x$ .

(b) Přechody mezi stavy s různou energií

Vlnová funkce, která má tvar

$$\psi(\vec{r}; t) = \varphi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (87)$$

kde  $\varphi(\vec{r})$  je funkce závislá jen souřadnicích, přísluší stavu částice s přesně určenou energií  $E$ ; tento stav je stacionární, neboť hustota pravděpodobnosti výskytu částice

$$P(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (88)$$

nezávisí na čase.

Mějme nyní částici ve stavu, který se dá vyjádřit jako superpozice dvou stacionárních stavů s energiemi  $E_1, E_2$ . Vlnová funkce pro takový stav je

$$\psi(\vec{r}; t) = \varphi_1(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) + \varphi_2(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) \quad (89)$$

Hustota pravděpodobnosti výskytu

$$P(\vec{r}; t) = |\varphi_1(\vec{r})|^2 + |\varphi_2(\vec{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[ \varphi_1^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \right] \quad (90)$$

v tomto případě osciluje mezi dvěma krajními hodnotami

$$(|\varphi_1| - |\varphi_2|)^2, \quad (|\varphi_1| + |\varphi_2|)^2$$

s periodou

$$\tau = \frac{\hbar}{|E_1 - E_2|} \quad (91)$$

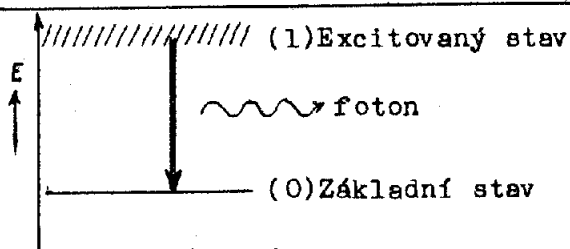
Čas  $\tau$  charakterizuje evoluci fyzikálních vlastností soustavy; výsledky měření, provedených na soustavě ve dvou různých časech  $t_1, t_2$  budou prakticky stejné, jestliže  $\Delta t = |t_1 - t_2|$  bude malé ve srovnání s  $\tau$ .

Jinými slovy: aby se vlastnosti soustavy za čas  $\Delta t$  výrazně změnily, musí pro součin  $\Delta t$  a neurčitost v energii  $\Delta E = |E_1 - E_2|$  platit opět (86). K tomuto závěru je možné dojít i tehdy, když je vlnová funkce superpozicí libovolného počtu stacionárních stavů.

(c) Doba života excitovaných stavů a přirozená šířka energiových hladin

Energie soustavy, která je ve stacionárním stavu, může být určena s libovolnou přesností, neboť doba měření může být libovolná; uvědomme si, že k tomu, abychom bezpečně rozlišili přesně monochromatickou vlnu (příslušející stavu s přesně určenou energií) od kvazimonochromatické, museli bychom provádět měření nekonečně dlouho (od  $t = -\infty$  do  $t = +\infty$ ). Má-li být energie stanovena s neurčitostí  $\Delta E$ , musí měření trvat alespoň  $\Delta t \approx \hbar / \Delta E$ .

Excitované stavy kvantové soustavy mají konečnou dobu života, během níž soustava přejde do základního stavu. Jestliže např. atom přechází z excitovaného stavu 1 do základního stavu 0 (obr. 21), není energie hladiny 1 přesně určena, neboť atom se v tomto stavu nachází jen konečnou dobu. Typická doba života atomových excitovaných stavů je  $\tau \approx 10^{-9}$  s.



Obr. 21.

Neurčitost v energii excitovaného stavu, tzv. přirozená šířka energiové hladiny, je

$$\Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau} \approx 10^{-25} \text{ J} = 6 \cdot 10^{-7} \text{ eV} \quad (92a)$$

Skutečnost, že energie excitovaných stavů není přesně určena, se

zřetelně projevuje např. v emisní i absorpční spektroskopii jako tzv. přirozená šířka spektrálních čar (mechanismů, které mohou vést k rozšíření spektrálních čar je ovšem celá řada a výsledek jejich působení může zcela překrýt přirozenou šířku čáry). Budeme-li fotografovat spektrální čáru spektrometrem s extrémně vysokou rozlišovací schopností, zjistíme, že má konečnou šířku. Frekvence emitovaného nebo absorbovaného světla není přesně nějaké  $\omega_0$ , ale zaznameneáme i frekvence v okolí  $\omega_0$ , přičemž

$$\Delta \omega \approx \Delta E / \hbar \approx 1/\tau \quad (92b)$$

kde  $\Delta E$  je dáno (92a) a  $\tau$  je doba života excitovaného stavu. Věříme-li v zákon zachování energie a existenci fotonu (a zatím nemáme žádný důvod nevěřit), potom z toho nutně musíme vyvodit závěr, že energiové hladiny excitovaných stavů mají konečnou šířku, nepřímou úměrnou době života těchto stavů.

### III. SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ MECHANIKA

#### 1. Schrödingerova rovnice

##### 1.1) Potřeba vlnové rovnice a její vlastnosti

V předcházející kapitole jsme diskutovali interpretaci a vlastnosti vlnové funkce, která (podle přijatého postulátu) určuje stav soustavy. Explicitní (analytické) vyjádření vlnové funkce však zatím známe, podle de Broglieho hypotézy, pouze pro volnou částici. Jak ale najdeme vlnovou funkci určující stav částice, která se nachází v nějakých silových polích? Protože "neznámou" je funkce, mohla by být řešením nějaké diferenciální rovnice. Na základě toho co již známe, měla by tato rovnice vyhovovat následujícím požadavkům:

(a) musí být lineární, aby zůstal v platnosti princip superpozice stavů (viz odst.II.4.1);

(b) musí obsahovat jen 1.derivace vlnové funkce podle času. Tento požadavek je důsledkem obecně přijímaného principu kauzality (příčinnosti). Jestliže jsme totiž postulovali, že stav soustavy je v daném časovém okamžiku  $t_0$  plně určen vlnovou funkcí  $\psi(t_0)$ , potom znalost  $\psi(t_0)$  musí být plně dostačující k jednoznačnému určení všech budoucích stavů soustavy, tj. k určení každé  $\psi(t_1)$  kde  $t_1 > t_0$ .

To je přesná obdoba principu příčinnosti v klasické mechanice; tam byl stav soustavy v daném časovém okamžiku  $t_0$  určen zadáním souřadnic a impulsů všech částic tvořících soustavu a každý budoucí stav (tj. souřadnice, a impulsy částic) mohl být jednoznačně určen řešením Newtonových rovnic, které v sobě zahrnovaly údaje o působících silách.

Předpokládejme, že  $t_1 = t_0 + \Delta t$ , kde  $\Delta t$  je infinitesimální přírůstek času; potom můžeme psát pro vlnovou funkci v čase  $t_0 + \Delta t$  Taylorův rozvoj

$$\psi(t_0 + \Delta t) = \psi(t_0) + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)_{t=t_0} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \right)_{t=t_0} (\Delta t)^2 + \dots (1)$$

Jestliže jediné co známe v čase  $t = t_0$  je  $\psi(t_0)$ , potom k jednoznačnému určení  $\psi(t_0 + \Delta t)$  musí stačit pouze 1.derivace  $(\partial \psi / \partial t)_{t=t_0}$ , kterou musí být možné vyjádřit jen pomocí  $\psi$ , tj. musí být

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = F(\psi) \quad (2)$$

kde  $F(\psi)$  je nějaká funkce  $\psi$  (protože rovnice (2) musí platit pro

pro libovolný čas  $t_0$ , vypustili jsme podmínku  $t=t_0$  ).

Rovnice (2) je diferenciální rovnicí 1. řádu vzhledem k proměnné  $t$ ; k jejímu jednoznačnému řešení stačí počáteční podmínka  $\psi|_{t=t_0} = \psi(t_0)$ .

(c) výsledky musí v limitě přecházet v klasická řešení (viz princip korespondence v I.2.3). Jinak řečeno: rovnice musí vést k téměř zákonitostem pohybu vlnových klubek, jako de Broglieho teorie v aproximaci geometrické optiky. To znamená, že rovnice musí vykazovat formální shodu s některými rovnicemi klasické fyziky.

Na tomto místě je však třeba jasně říci, že rovnice k níž směřujeme - Schrödingerova rovnice - se neodvozuje, ale postuluje. To, co budeme dělat v následujícím odstavci, jsou pouze úvahy, které mají naznačit, proč se rovnice postuluje právě tak a ne jinak (přitom úvahy, které k této rovnici vedly E. Schrödingera, byly mnohem hlubší, založené na analogiích mezi klasickou mechanikou a optikou). Rozhodující je koneckonců ovšem jen experimentální ověřování důsledků plynoucích z teorie vybudované na této rovnici.

Dále je třeba zdůraznit, že teorie založená jen na Schrödingerově rovnici není ekvivalentem současné kvantové mechaniky, jejíž základní postuláty uvedeme v následující kapitole; uvidíme, že je pouze dílčím výsledkem, vyplývajícím z obecného formalismu kvantové teorie. V jejích základech jsou navíc uloženy dva významné omezující předpoklady, na něž nesmíme zapomínat:

- (i) nedochází ke kreaci (vzniku) a anihilaci (zániku) částic s nenulovou klidovou hmotností (kreace a anihilace fotonů je možná);
- (ii) všechny částice s nenulovou klidovou hmotností se pohybují rychlostmi značně menšími než je rychlost světla, takže je možný nerelativistický přístup (problém fotonů se musí řešit zvlášť).

Pro popis jevů v atomech a molekulách je však Schrödingerova teorie dobrou aproximací, neboť zde jde o poměrně slabě vázané struktury, jejichž části se pohybují malými rychlostmi. Tak např. rychlost elektronu v atomu vodíku je řádově  $c/137$  ( $\alpha = 1/137$  je tzv. konstanta jemné struktury [6]), valenční elektrony víceelektronových atomů mají rychlosti téhož řádu a jádra v molekulách rychlosti ještě mnohem menší. Předpoklad (ii) je tedy v těchto soustavách dobře splněn. Protože vazební energie v atomech a molekulách leží hluboko pod hodnotou  $0,5\text{ MeV}$  (= klidová energie elektronu; ke kreaci páru elektron-pozitron je třeba energie alespoň  $1\text{ MeV}$ ), je dobře splněn i první předpoklad.

## 1.2) Schrödingerova rovnice

Pro volnou částici známe explicitní vyjádření vlnové funkce; její nejobecnější tvar je dán formulí (II.61) (v jednorozměrném případě pak (II.63)) :

$$\psi(x, y, z; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(p_x, p_y, p_z) \times \quad (3)$$

$$\times \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z - Et) \right] dp_x dp_y dp_z = \iiint F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}$$

kde celková energie částice  $E$  je rovna energii kinetické a s hybností  $\vec{p}$  je v nerelativistickém přiblížení (viz předpoklad (ii) v odst. 1.1) svázána vztahem

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (4)$$

Najdeme diferenciální rovnici se strukturou (2), které tato funkce vyhovuje. Platí

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z; t) = \iiint E F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \quad (5a)$$

$$- i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z; t) = \iiint p_x F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}$$

a obdobně pro derivace podle  $y$  a  $z$ .

Souhrnně můžeme tři poslední relace (pro  $x, y, z$ ) zapsat

$$- i\hbar \nabla \psi(x, y, z; t) = \iiint \vec{p} F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \quad (5b)$$

(definice operátoru  $\nabla$  je v dod.E).

Provedeme-li 2.derivaci podle souřadnic, potom

$$- \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y, z; t) = \iiint p_x^2 F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}$$

a obdobně pro derivace podle  $y$  a  $z$ .

Souhrnně, pomocí Laplaceova operátoru  $\Delta \equiv \nabla^2$  (viz dod.E)

$$- \hbar^2 \nabla^2 \psi(x, y, z; t) = \iiint p^2 F(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \quad (5c)$$

Podle (4) jsou integrandy v (5a) a (5c) úměrné; totéž lze říci o integrálech, takže můžeme psát

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z; t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z; t) \quad (6)$$

což je Schrödingerova rovnice pro volnou částici.

Tato rovnice splňuje všechny tři výše uvedené požadavky: (a) je lineární, (b) má strukturu (2), (c) ze způsobu odvození (platnost (4) a (II.68) ) vyplývá splnění principu korespondence.

Pro jednorozměrný případ (částice jen na ose  $x$ ), přejde (6) v

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (7)$$

Uvažujme nyní o částici, která se nachází v nějakém potenciálovém poli  $U(x,y,z,t)$ . Na rozdíl od Newtonovy mechaniky, která pracuje s působícími silami, v kvantové mechanice je základní veličinou potenciální energie částice  $V = V(x,y,z,t)$ . Pozor: rozlišujte pojmy potenciál silového pole  $U$  a potenciální energie částice  $V$  v tomto poli. Toto upozornění je zvlášť nutné proto, že v kvantové mechanice bývá zvykem ( a my to dále budeme pro stručnost dělat též) nazývat  $V$  potenciálem.

Celková energie částice  $E$  je součtem energie kinetické  $T$  a potenciální  $V$

$$E = T + V, \quad (8)$$

přičemž  $T$  souvisí s hybností částice  $p$  vztahem

$$T = \frac{p^2}{2m} \quad (9)$$

Nyní si představme, že jsme rovnici (6) formálně získali z (4) a (5) tak, že jsme nahradili

$$E \text{ operátorem } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{působícím na } \psi(x,y,z,t))$$

$$\text{a } T = p^2/2m \text{ operátorem } - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (\text{působícím na } \psi(x,y,z,t))$$

( o operátorech budeme podrobně mluvit v následující kapitole).

Protože potenciální energie  $V$  nezávisí ani na  $E$ , ani na  $\vec{p}$ , můžeme se pokusit (opět čistě formálně) zobecnit tuto proceduru i na rovnici (8). Dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t) \cdot \psi(\vec{r},t) \quad (10)$$

což je skutečně slavná Schrödingerova rovnice pro jednu částici v poli s potenciálem  $V(\vec{r},t)$ . Způsob jak jsme ji získali, však nelze v žádném případě považovat za její odvození. Za její odvození však nelze považovat ani mnohem přesvědčivější fyzikální argumenty, které najdeme v literatuře (např. [6], [13], [14]) uváděné ve prospěch tvaru (10). Skutečností je, že Schrödingerova rovnice se musí koneckonců postulovat a oprávněnost tohoto postulátu stále dokládat experimentálním ověřováním důsledků, které z ní plynou.



### 1.3) Stacionární Schrödingerova rovnice

Existuje velká třída úloh s potenciální energií nezávislou na čase (takže  $V = V(x,y,z)$ ). Přepíšeme rovnici (10) do symbolického tvaru

$$\hat{O}(\vec{r},t) \psi(\vec{r},t) = 0 \quad (11a)$$

kde  $\hat{O}(\vec{r},t)$  je diferenciální operátor

$$\hat{O}(\vec{r},t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,y,z) \right] \quad (11b)$$

Vidíme, že  $\hat{O}$  je součtem dvou operátorů

$$\hat{O}(\vec{r},t) = \hat{O}_1(t) + \hat{O}_2(x,y,z) \quad (12a)$$

z nichž jeden:

$$\hat{O}_1(t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (12b)$$

působí pouze na funkce závislé na  $t$ , a druhý:

$$\hat{O}_2(x,y,z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \quad (12c)$$

pouze na funkce proměnných  $x,y,z$ .

Tato skutečnost nám dovoluje provést v hledané vlnové funkci tzv. separaci proměnných, tzn. hledat řešení rovnice (11) ve tvaru součinu dvou funkcí

$$\psi(\vec{r},t) = f(t) \cdot \varphi(\vec{r}) \quad (13)$$

z nichž jedna ( $f$ ) závisí jen na  $t$  a druhá ( $\varphi$ ) jen na prostorových souřadnicích  $x,y,z$ . Funkce  $f(t)$ ,  $\varphi(\vec{r})$  přitom budou řešením rovnic, které získáme takto: dosadíme předpokládaný tvar (13) do rovnice (11). Protože

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (f(t) \cdot \varphi(\vec{r})) = -\varphi(\vec{r}) \cdot i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \quad a$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \cdot f(t) \varphi(\vec{r}) = f(t) \cdot \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right]$$

platí

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right] \quad (14)$$

Levá strana této rovnice je funkcí pouze proměnné  $t$  a pravá strana funkcí pouze proměnných  $x,y,z$ . Napsaná rovnice přitom vyjadřuje, že obě strany se musí rovnat pro všechny možné hodnoty  $t$  a  $\vec{r} = (x,y,z)$ . To je možné

sřejmě jen tehdy, když levá a pravá strana rovnice jsou rovny téže konstantě. Označíme-li tuto konstantu  $E$ , dá nám právě vyslovené tvrzení (po nepatrné úpravě) hledané diferenciální rovnice

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} = - \frac{i}{\hbar} E f(t) \quad (15)$$

$$\boxed{- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})} \quad (16)$$

První z nich má řešení

$$f(t) = \exp \left( - \frac{i}{\hbar} E t \right) \quad (17)$$

Rovnice (16) pro prostorovou část vlnové funkce -  $\varphi(\vec{r})$  - je tzv. stacionární Schrödingerova rovnice. Její obecné řešení závisí na tvaru potenciální energie  $V(r)$ , partikulární řešení, odpovídající jednoznačně sledované soustavě, pak ještě na okrajových podmínkách.

Úplné řešení Schrödingerovy časové rovnice (10) (resp. (11)), v případě, že potenciální energie nezávisí explicitně na čase, je tudíž

$$\boxed{\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot \exp \left( -i \frac{E}{\hbar} t \right)} \quad (18)$$

kde  $\varphi(\vec{r})$  je řešením stacionární Schrödingerovy rovnice (16) s příslušnými okrajovými podmínkami.

Je-li částice ve stavu s vlnovou funkcí (18), potom hustota pravděpodobnosti výskytu

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (19)$$

nezávisí na čase; mluví se proto o stacionárním stavu.

Jak se pracuje se Schrödingerovou rovnicí si ukážeme v druhé části této kapitoly. Zde jen ještě poznamenejme, že separace proměnných, s níž jsme se právě seznámili, je postup při řešení diferenciálních rovnic vždy výhodný, neboť vede k řešení většího počtu jednodušších rovnic. V kvantové mechanice ho velmi často používáme; k tomu, aby diferenciální operátor měl strukturu se separovanými proměnnými (jako např. v (12a)) je však někdy třeba přejít od běžných kartézských souřadnic  $(x, y, z)$ , k souřadnicím jiným, např. sférickým  $(r, \theta, \varphi)$ . Lze ukázat, že k separaci proměnných dojde v takových souřadnicích, které mají symetrii shodnou se symetrií potenciální energie  $V(\vec{r})$ .

## 2. Jednorozměrné pravouhlé potenciály

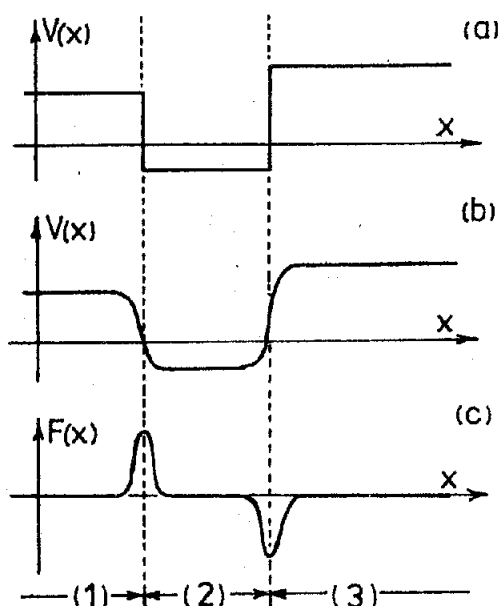
### 2.1) Fyzikální smysl pravouhlých potenciálů

Abychom se blíže seznámili s řešením Schrödingerovy rovnice a interpretací získaných výsledků, rozebereme si podrobně několik jednoduchých jednorozměrných úloh. Částice se v nich nachází stále na přímce, kterou zvolíme za osu  $x$ . Z matematického hlediska mají jednorozměrné úlohy tu přednost, že stacionární Schrödingerova rovnice (16) je pro ně obyčejnou (nikoliv parciální) diferenciální rovnicí; po malé úpravě ji můžeme psát

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (20)$$

Řešení takové rovnice je mnohem prostší, než řešení parciálních diferenciálních rovnic, které dostáváme v 2- a 3-rozměrných úlohách. Jednorozměrné úlohy však jsou zajímavé nejen proto, že nám dovolují poznat základní charakteristické rysy kvantových jevů, které se zachovávají i v mnohem složitějších případech, ale i proto, že mnoho vícerozměrných úloh může být, po vhodné transformaci a separaci proměnných (viz odst. 1.3), redukováno na řešení několika rovnic, podobných rovnici (20).

Průběh potenciálů, které budeme uvažovat, je schematicky znázorněn na obr. 22a : osa  $x$  je rozdělena na několik oblastí, v nichž je potenciál



Obr. 22.

(a) Pravouhlý potenciál aproximující reálný průběh (b).

(c) Schematické znázornění síly

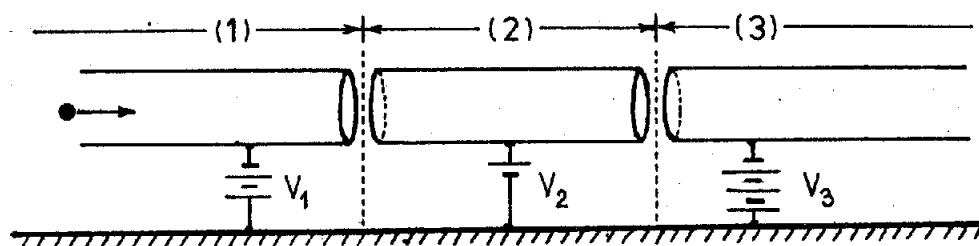
$$F(x) = - \frac{dV(x)}{dx}$$

působící na částici v poli (b).

konstantní a na styku těchto oblastí se mění skokem (nespojité). Pocho-  
pitelně, že taková funkce nepředstavuje reálný průběh potenciálu, který  
musí být spojitý, jako např. na obr. 22b. Jsou-li však rozměry oblastí,

v nichž dochází ke změně potenciálu, velmi malé, ve srovnání s ostatními délkovými rozměry vystupujícími v úloze (konkrétně např. v porovnání s de Broglieho vlnovou délkou), je pravoúhlý potenciál dobrou aproximací. Přestal by jí však být např. v případě částice s velkou energií, již přísluší de Broglieho vlnová délka srovnatelná s rozměry přechodné oblasti.

Chování klasické částice v potenciálním poli podle obr.22 je snadné předpovědět. Jestliže by  $V(x)$  byla např. potenciální energií částice v gravitačním poli na povrchu Země, potom obr.22b představuje přímo profil terénu, v němž se částice pohybuje. Při dané celkové energii  $E$  ( $E=T+V$  se zachovává) budou pro částici nedostupné ty oblasti na ose  $x$ , v nichž je  $V > E$  (kinetická energie  $T=mv^2/2$  musí být vždy  $\geq 0$ ). Tam kde je  $V(x)$  konstantní, nebudou na částici působit žádné síly a bude se proto pohybovat rovnoměrně, s rychlostí  $v=\sqrt{2(E-V)/m}$ . Síla bude na částici působit jen v přechodových oblastech (obr.22c). Jiná možnost realizace průběhu  $V(x)$  pomocí elektrostatických polí je na obr. 23.



Obr. 23. Elektrostatická realizace průběhu potenciální energie podle obr. 22b, pomocí kovových trubíc, které mají konstantní potenciál proti zemi (společnému bodu).

## 2.2) Optická analogie

K získání představy o řešení Schrödingerovy rovnice (20) může být někdy užitečná skutečnost, že formálně analogická rovnice popisuje jev, který můžeme poměrně dobře pozorovat: šíření světla v prostředí s proměnlivým indexem lomu.

V transparentním (tj. neabsorbujícím) prostředí, s prostorově i časově konstantním indexem lomu  $n$ , se může šířit elektromagnetická vlna ve směru osy  $x$ , přičemž její elektrická složka  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  nezávisí na  $y$  a  $z$ . Pro intenzitu elektrického pole tedy platí

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad (21)$$

kde  $\vec{e}$  je jednotkový polarizační vektor kolmý k ose  $x$ ,  $\omega$  je kruhová frekvence a  $E(x)$  vyhovuje rovnici (získá se z Maxwellových rovnic [4])

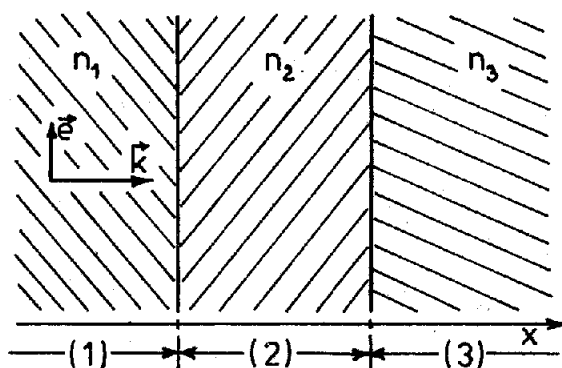
$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + \frac{n^2 \cdot \omega^2}{c^2} E(x) = 0 \quad (22)$$

Rovnice (20), (22) budou z matematického hlediska identické, jestliže položíme (v (20) předpokládáme  $V(x) = \text{const}$  )

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - V] = \frac{n^2 \cdot \omega^2}{c^2} \quad (23)$$

Na řešení obou rovnic jsou navíc kladeny stejné požadavky: v místech nespojitosti  $V(x)$  musí být  $\psi(x)$  ( $\hat{E}(x)$ ) funkce spojitá i s 1. derivací. Pohybu částice, v poli podle obr. 22a, pak odpovídá šíření elektromagnetické vlny v prostředí s nespojitou změnou indexu lomu ve směru šíření vlny (obr. 24). Podle (23) jsou mechanické a optické parametry svázány vztahem

$$n(\omega) = \frac{1}{\hbar \omega} \sqrt{2mc^2 [E - V]} \quad (24)$$



Obr. 24.

Optická analogie: elektromagnetická vlna s vlnovým vektorem  $\vec{k}$  se šíří ve směru osy  $x$  v prostředí, jehož index lomu se mění skokem v rovinách kolmých k ose  $x$ .

Oblasti, v nichž  $E > V$ , odpovídají v optické analogii transparentnímu prostředí, neboť index lomu  $n$  je zde reálný; vlna má pak tvar

$$\hat{E}(x) \approx e^{ikx}.$$

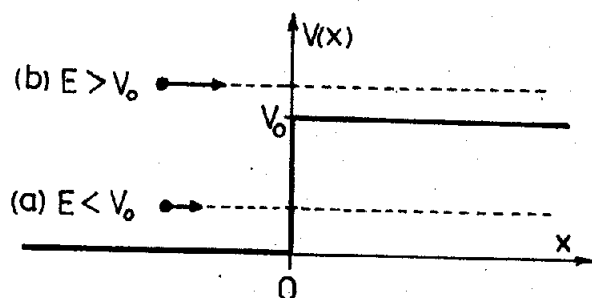
Oblastem, v nichž  $E < V$ , by odpovídalo prostředí s čistě imaginárním indexem lomu. Řešením rovnice (22) přitom je tlumená vlna

$\hat{E}(x) \approx e^{-qx}$  ( $q > 0$ , reálné). Do jisté míry podobná situace nastává při šíření elektromagnetické vlny v kovu (index lomu kovu však má reálnou i imaginární část).

Při využívání optické analogie je nutné mít stále na paměti, že vyplývá pouze z matematické shody rovnic (20), (22). Interpretace řešení, které získáme pro vlnovou funkci  $\psi(x)$ , se však diametrálně liší od interpretace  $\hat{E}(x)$  v klasické optice.

### 2.3) Potenciálový val. Tok pravděpodobnosti

Nechť se podél osy  $x$  mění potenciál podle obr. 25 a částice s celkovou energií  $E$  postupuje zleva doprava.



Obr. 25 .

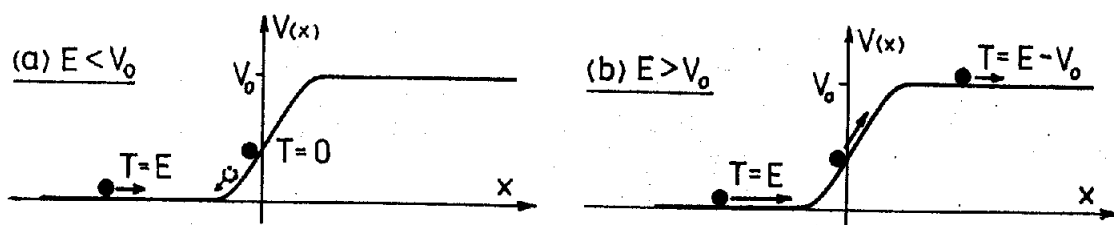
Potenciálový val.

Pro  $x < 0$  je  $V(x) = 0$ , pro  $x > 0$  je  $V(x) = V_0$ .

Uvažujme nejprve, jak by se chovala částice z hlediska klasické mechaniky. Mohou nastat dva případy :

(a)  $E < V_0$  (obr.26a)

Částice vystoupí do místa, kde se celá její energie změní v energii potenciální (tzv. bod obratu), zastaví se ( $T=0$ ) a začne se pohybovat zpět do oblasti  $x < 0$ . Oblast  $x > 0$  je pro ni zcela nedostupná.



Obr. 26. Ke klasickému řešení pohybu částice. Pro větší názornost kreslíme reálný průběh  $V(x)$ , který v limitě přejde ve skok potenciálu podle obr.25. Bod obratu jsme v případě (a) položili do  $x=0$ .

(b)  $E > V_0$  (obr.26b)

Částice vystoupí až do oblasti, kde  $V(x) = V_0$  a postupuje dále původním směrem s rychlostí  $v = \sqrt{2(E - V_0)}/m$ . Potenciálový val nikdy neobrátil směr jejího pohybu.

#### Kvantově-mechanické řešení

Protože potenciální energie  $V(x)$  je nezávislá na čase, stačí řešit stacionární Schrödingerovu rovnici (20) a získat tak prostorovou část  $\varphi(x)$  vlnové funkce (18). Vzhledem k nespojitosti funkce  $V(x)$  v bodě  $x = 0$ , vyhovuje  $\varphi(x)$  rovnici:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x < 0 \quad (25a)$$

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x > 0 \quad (25b)$$

I když potenciální energie  $V(x)$  je v bodě  $x=0$  nespojitá, musí hledaná vlnová funkce  $\varphi(x)$  mít v celém intervalu  $(-\infty, +\infty)$  vlastnosti uvedené v odst. II.3.4; mimo jiné, musí být všady spojitá i s 1.derivací. To znamená, že musíme najít taková řešení rovnic (25), která v bodě  $x=0$

na sebe spojitě navazují i s 1.derivací. Opět rozdělíme řešení na dva případy:

(a) Celková energie částice  $E < V_0$ .

Rovnice (25) jsou obyčejné homogenní (bez pravé strany) diferenciální rovnice 2.řádu s konstantními koeficienty. Jejich řešení hledáme standardním postupem:

(i) předpokládáme řešení ve tvaru

$$\varphi(x) = e^{\alpha x}, \text{ kde } \alpha \text{ je dosud neurčené číslo,}$$

(ii) dosadíme toto předpokládané řešení do (25) a po vydělení  $e^{\alpha x}$  dostaneme tzv. charakteristické rovnice:

$$\alpha^2 + k^2 = 0, \quad \text{kde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (26a)$$

$$\alpha^2 + q^2 = 0, \quad \text{kde } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (26b)$$

které mají řešení

$$\alpha_{1,2} = \pm ik \quad \text{pro } x < 0 \quad (26c)$$

$$\alpha_{1,2} = \pm q \quad \text{pro } x > 0 \quad (26d)$$

Obecná řešení rovnic (25) tudíž jsou

$$\varphi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (27a)$$

$$\varphi(x) = C \cdot e^{qx} + D \cdot e^{-qx} \quad \text{pro } x > 0 \quad (27b)$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \quad (27c)$$

Zatím neurčené konstanty A, B, C, D stanovíme z okrajových podmínek, které nám vyplynou z obecných požadavků kladených na vlnové funkce (odst.II.3.4).

V našem případě použijeme tyto:

(i)  $\varphi(x)$  musí být všady (tj. pro  $x \in (-\infty, +\infty)$  konečná; v řešení (27b) pro  $x > 0$  musí tedy být  $C = 0$ , neboť jinak by pro  $x \rightarrow \infty$  rostla  $\varphi(x)$  nad všechny meze;

(ii) v bodě  $x=0$  musí řešení (27a) spojitě navazovat i s 1.derivací na řešení (27b). Vyjádříme-li tyto podmínky (C již klademe rovno nule), dostaneme rovnice:

$$A + B = D \quad (\text{z rovnosti funkcí v } x = 0) \quad (28a)$$

$$ik(A - B) = -qD \quad (\text{z rovnosti 1.derivací v } x=0) \quad (28b)$$

To jsou 2 rovnice pro 3 neznámé. Určíme z nich poměry

$$\frac{B}{A} = \frac{k - iq}{k + iq} \quad \frac{D}{A} = \frac{2k}{k + iq} \quad (29)$$

Řešení, které splňuje všechny podmínky, tedy je (rovnice (27) vydělíme A a dosadíme z (29) )

$$\varphi(x) = e^{ikx} + \left[ \frac{1 - i\sqrt{V_0/E - 1}}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \right] e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (30a)$$

$$\varphi(x) = \frac{2A}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \cdot e^{-qx} \quad \text{pro } x > 0 \quad (30b)$$

Podívejme se na výsledek z fyzikálního hlediska. Funkce  $\varphi(x)$  pro  $x < 0$  je superpozicí vlny postupující vpravo ( $e^{ikx}$ ) a vlny postupující vlevo ( $\sim e^{-ikx}$ ). V termínech kvantové mechaniky: vlnová funkce (30a) je superpozicí vlnové funkce pro stav s hybností  $p = \hbar k$  (částice postupuje vpravo) a vlnové funkce pro stav s hybností  $p = -\hbar k$  (částice postupuje vlevo)<sup>+</sup>. Z odst. II.4.3 víme, že kvadráty absolutní hodnoty koeficientů u vlnových funkcí v superpozici stavů jsou úměrné (není-li funkce normalizovaná) pravděpodobnosti nalezení částice v příslušném stavu. V našem případě:

pro koeficient u  $e^{ipx/\hbar}$  :  $|1|^2 = 1$

pro koeficient u  $e^{-ipx/\hbar}$  :  $\left| \frac{1 - i\sqrt{V_0/E - 1}}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \right|^2 = 1$

Skutečnost, že pravděpodobnosti jsou stejné, můžeme interpretovat tak, že částice přicházela zleva, na potenciálovém valu se odrazila a se stejně velkým, ale opačně naměřeným, impulsem (celková energie  $E = p^2/2m$  se nezměnila) postupuje v oblasti  $x < 0$  zprava doleva; dochází přitom k úplnému odrazu. Zavedeme-li, analogicky k optice (srov. odst.2.2)

koeficient odrazu

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (31)$$

je v tomto případě (tj. pro  $E < V_0$ )  $R = 1$ .

K získaným výsledkům dodejme ještě na vysvětlenou toto. Používané výroky jako: "vlna postupuje vpravo", "postupuje vlevo" apod. mají vlastně plný smysl pro úplnou vlnovou funkci (18), tj.

$$\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (32)$$

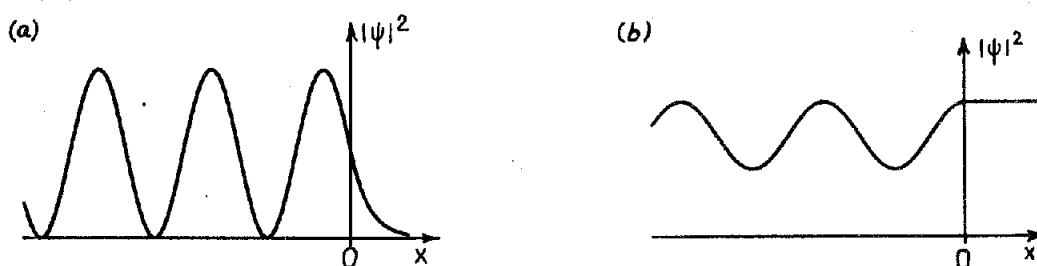
kde  $\varphi(x)$  je funkce (30a).

<sup>+</sup>) Tvzení by bylo zcela přesné jen pro rovinnou vlnu  $e^{ikx}$ , resp.  $e^{-ikx}$ , rozprostírající se od  $-\infty$  do  $+\infty$ . V našem případě je jen přibližné, neboť vlnová funkce má tento tvar pouze v oblasti  $x < 0$ ; takovou vlnu získáme jako superpozici vln s impulsy blízkými uvedeným hodnotám  $p$ .



Rovněž prostorově lokalizovaný elektron, dopadající na potenciálový val a odražející se od něho, by měl být reprezentován lokalizovaným vlnovým klubkem; poněkud podrobněji se k takovému řešení vrátíme v odst. 2.6. Řešení, které zde uvádíme, je sice vzdálenější realitě, ale výsledky, které získáme pomocí jednoduché matematiky, jsou v hlavních rysech shodné; můžeme se na ně dívat jako na řešení pro tak široké vlnové klubko, že je dobře aproximováno vlnovou funkcí (27) (srov. II.4.2).

Podívejme se nyní do oblasti  $x > 0$ , kde je vlnová funkce dána výrazem (30b). Vidíme, že i v této oblasti - z hlediska klasické mechaniky zcela nedostupné - je nenulová pravděpodobnost výskytu částice. Amplituda vlnové funkce ovšem exponenciálně klesá, takže pravděpodobnost nalezení částice, ve větších vzdálenostech od potenciálového valu, bude prakticky nulová, v souladu se závěry klasické mechaniky. Získané závěry pro obě oblasti ilustruje obr.27a.



Obr. 27. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice pro (a)  $E = V_0/2$ , (b)  $E = 2V_0$ . Všimněte si oscilujícího průběhu v oblasti  $x < 0$ , který nemá analogii v klasické mechanice a je výsledkem superpozice dopadající a odražené vlny.

Přirozeně může vzniknout myšlenka, zda výskyt částice v oblasti  $x > 0$  nenarušil zákon zachování energie (z hlediska klasické mechaniky by musela být kinetická energie záporná, aby nebyl narušen zákon zachování energie). Ukážeme, že tomu tak není.

Jestliže realizujeme experiment, který nám prokáže výskyt částice v oblasti  $x > 0$ , potom částice již nebude ve stavu s  $E < V_0$ ; měření polohy částice je nutně doprovázeno neurčitostí v její energii. Interval, v němž je pravděpodobnost výskytu částice výrazně nenulová (pro  $x > 0$ ), má rozměr řádově  $q^{-1}$ . Jestliže tedy najdeme částici vpravo od bodu  $x=0$ , je lokalizována v oblasti  $\Delta x \approx q^{-1}$ . To má však za následek neurčitost hybnosti  $\Delta p \approx \hbar/\Delta x \approx \hbar q$  a tudíž neurčitost v kinetické energii zhruba  $[(\Delta p)^2/2m] > (\hbar^2 q^2/2m) = V_0 - E$ . Konečná energie, která je rovna  $E$  + tato dodatečná kinetická energie (mající původ v lokalizaci částice), je tudíž tak velká, že již nemůžeme tvrdit, že celková energie částice je menší než  $V_0$ . Jinými slovy: víme-li jistě, že částice je vpravo od  $x = 0$ , potom nemůžeme říci, že její energie je menší než  $V_0$ .

Částice nemůže být lokalizována v oblasti  $x > 0$  a současně mít přesně určenou energii  $E < V_0$ .

Nyní uvažme ještě řešení pro limitní případ  $V_0 \rightarrow \infty$ ; i když je to případ fyzikálně nereálný, je výsledek jednoduchý a někdy použitelný jako přijatelná aproximace.

Jestliže při  $E$  pevném  $V_0 \rightarrow \infty$ , potom také  $q \rightarrow \infty$ ; to znamená, že hloubka proniku do oblasti  $x > 0$  jde k nule a z (30b) plyne, že také amplituda prošlé vlny  $\varphi(x) \rightarrow 0$ . Pro limitní případ  $V_0 \rightarrow \infty$  tak dostaneme

$$\varphi(x) = e^{ikx} - e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (33a)$$

$$\varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x > 0 \quad (33b)$$

Přejdeme nyní k druhé alternativě:

(b) celková energie částice  $E > V_0$

Řešení rovnic (25) bude nyní mít jak pro  $x < 0$ , tak i pro  $x > 0$ , oscilující charakter:

$$\varphi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad \text{pro } x < 0 \quad (34a)$$

$$\varphi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad \text{pro } x > 0 \quad (34b)$$

kde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} > 0 \quad (34c)$$

Zde jsou na celé ose přijatelná vždy obě řešení, neboť jsou všady konečná. Která z nich použijeme, záleží na řešení úloze. Existují dvě možnosti:

(i) částice dopadá na potenciálový val zleva; potom v oblasti  $x < 0$  bude existovat jak vlna dopadající ( $A \neq 0$ ), tak i vlna odražená ( $B \neq 0$ ), ale v oblasti  $x > 0$  jen vlna postupující vpravo (nemá se již na čem odrážet), tzn.

$$C \neq 0, \quad D = 0$$

(ii) částice přichází k valu zprava; pro  $x > 0$  bude existovat vlna dopadající ( $D \neq 0$ ) i odražená ( $C \neq 0$ ), zatímco pro  $x < 0$  jen vlna prošlá (postupuje vlevo), takže

$$A = 0, \quad B \neq 0$$

Všimněme si blíže jen případu (i); poměry koeficientů  $B/A$  a  $C/A$  ( $D=0$ ) určíme opět z podmínky spojitosti funkce a její 1. derivace v bodě  $x = 0$ . Obdržíme

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (35)$$

a dosazením do (34) (funkce dělíme  $A \neq 0$ )

$$\varphi(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} \quad (x < 0) \quad (36a)$$

$$\varphi(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \quad (x > 0) \quad (36b)$$

Vidíme, že i v tomto případě ( $E > V_0$ ) dojde k částečnému odrazu na potenciálovém valu. Koeficient odrazu je opět dán výrazem (31)

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_1 - k_2|^2}{|k_1 + k_2|^2} \quad (37)$$

Koeficient propustnosti (analogicky k optické definici) není roven  $|C|^2 / |A|^2$ . Abychom ho určili, musíme zavést nový pojem.

#### Tok pravděpodobnosti

Jestliže se pravděpodobnost výskytu částice v nějakém ohraničeném objemu s časem zmenšuje (zvětšuje), potom pravděpodobnost, že částice bude nalezena vně tohoto objemu, se musí o stejnou hodnotu zvětšit (zmenšit). Zachování pravděpodobnosti výskytu je nutnou podmínkou nerozpornosti pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce. Tuto podmínku lze splnit, definujeme-li vektor hustoty toku pravděpodobnosti  $\vec{j}$  tak, aby spolu s hustotou pravděpodobnosti (II.19) -  $\rho = \psi^* \psi$  - splňoval rovnici (definici "div" viz dod.E)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (38)$$

Tato rovnice je dobře známá jako rovnice kontinuity z hydrodynamiky a elektrodynamiky; v prvním případě vyjadřuje zákon zachování hmoty, v druhém zákon zachování náboje.

Vyjádření vektoru  $\vec{j}$  pomocí vlnové funkce získáme z časové Schrödingerovy rovnice (10). Pro jednoduchost to provedme pro jednorozměrný případ; platí

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi \quad (39a)$$

a rovnice komplexně sdružená

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi^*}{dx^2} + V \psi^* \quad (39b)$$

Vynásobíme-li rovnici (39a) zleva  $\psi^*$  a (39b) zprava  $\psi$ , rovnice odečteme a uvědomíme si, že platí identita

$$\psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \psi \frac{d^2 \psi^*}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right),$$

dostaneme

$$\frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \frac{d}{dx} \left[ \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \right] = 0 \quad (40)$$

V jednorozměrném případě se redukuje ( $\vec{j} = (j_x, j_y, j_z)$ )

$$\text{div } \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \quad \text{pouze na } \frac{dj}{dx}, \text{ takže}$$

dostáváme, porovnáním (38) a (40), pro jednorozměrný případ hustotu toku pravděpodobnosti

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (41)$$

Obdobným způsobem se pro trojrozměrný případ získá vektor hustoty toku pravděpodobnosti

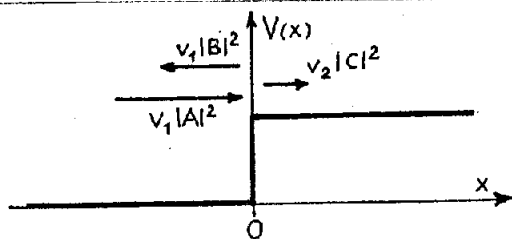
$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \quad (42)$$

Aplikujme nyní získané výsledky na vlnovou funkci (34) v níž  $D=0$ ; dostaneme

$$j_1 = \frac{\hbar k_1}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad \text{pro } x < 0 \quad (43a)$$

$$j_2 = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \quad \text{pro } x > 0 \quad (43b)$$

Výrazy mají jednoduchou fyzikální interpretaci: jestliže podle de Broglieho vztahu chápeme  $\hbar k_1/m = v_1$  jako rychlost částice v oblasti  $x < 0$  a  $\hbar k_2/m = v_2$  jako rychlost pro  $x > 0$ , potom (43a) lze považovat za výsledný tok v oblasti  $x < 0$  a (43b) za tok vpravo od  $x=0$  (obr.28)



Obr.28.

Toky hustoty pravděpodobnosti v místě potenciálového valu ( $x=0$ ) pro vlnovou funkci (34) ( $E > V_0$ ).

Pro stacionární stavy (přísluší jim vlnová funkce (18)) je

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

a rovnice kontinuity (38) se redukuje na

$$\text{div } \vec{j} = 0 \quad (44)$$

(v jednorozměrném případě to je  $(dj/dx) = 0$ ).

Zavedeme koeficient propustnosti (podobně jako v optice)

$$T = \frac{j_1}{j_2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (45)$$

jako poměr prošlého ku dopadajícímu toku pravděpodobnosti. Po dosazení z (35)

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (46)$$

Součet koeficientu odrazivosti (37) a propustnosti (46) musí být roven 1; skutečně

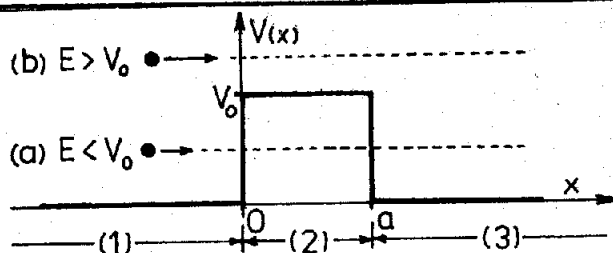
$$R + T = \frac{(k_1 - k_2)^2 + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1 \quad (47)$$

Znovu zdůrazněme, že odraz částice (s  $E > V_0$ ) v místě prudké změny potenciálu (změna na vzdálenosti srovnatelné s de Broglieho vlnovou délkou) je čistě kvantově-mechanický jev, podmíněný vlnovým charakterem mikročástic. V klasické (částicové) mechanice nikdy nenastane (srov. obr. 26b). Lze však ukázat, že při pozvolné změně potenciálu (změna na vzdálenostech velkých ve srovnání s de Broglieho vlnovou délkou částice) je koeficient odrazu zanedbatelný, což je opět v souladu s principem korespondence.

Na závěr odstavce ještě k interpretaci hustoty toku pravděpodobnosti. Formální shoda rovnice (38) s rovnicí kontinuity v hydrodynamice, pochopitelně navozuje myšlenku, chápat  $\vec{j}$  jako hustotu toku částic. Je ovšem nutné vidět, že vektor  $\vec{j}$  není bezprostředně přístupný měření, tak jako např. hustota  $\rho = \psi^* \psi$ . Bylo by např. chybné, interpretovat  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  jako střední hodnotu toku částic v bodě  $\vec{r}$  v čase  $t$ , neboť měření střední hodnoty toku v daném bodě, předpokládá současně přesné určení souřadnice (polohy) a rychlosti (impulsu), což, jak víme z relací neurčitosti, nelze. Přesto je však často možné, především když  $\vec{j}$  závisí na  $\vec{r}$  málo nebo vůbec ne, chápat  $\vec{j}$  jako tok; v těchto případech je totiž možné určit dostatečně přesně rychlost (hybnost), aniž by se narušila představa o toku.

#### 2.4) Potenciálová bariéra. Tunelový jev

Přejdeme nyní k úloze, v níž má potenciál skok ve dvou bodech; uvažovaný průběh je na obr. 29.



Obr. 29.

Pravouhlá potenciálová bariéra výšky  $V_0$  a šířky  $a$ . Dopadající částice zleva má energii: (a)  $E < V_0$  nebo (b)  $E > V_0$ .

Na základě poznatků z předcházejícího odstavce ( a optické analogie v odst.2.2) je možné řešení odhadnout: k částečnému odrazu i průchodu bude docházet jak v  $x=0$ , tak v  $x=a$ . Na rozdíl od klasického řešení (srov.obr. 26), částice s celkovou energií  $E < V_0$  bude mít nenulovou pravděpodobnost, že projde do oblasti na druhé straně bariéry. Skutečnost, že částice s celkovou energií  $E < V_0$ , může proniknout do oblasti ( $x > a$ ), která je pro ni z hlediska klasické mechaniky nedostupná, se nazývá tunelový jev (mluví se též o "tunelování" částice). Využijeme-li výsledků z předcházejícího odstavce, můžeme formální řešení Schrödingerovy rovnice provést již velmi rychle. Stacionární Schrödingerova rovnice pro oblasti (1),(3) je (viz (25))

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x < 0 \text{ a } x > a \quad (48a)$$

a pro oblast bariéry (2) je

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } 0 < x < a \quad (48b)$$

Budeme předpokládat, že částice přichází k bariéře zleva (obr.29); rozlišit musíme opět dva případy:

(a) celková energie  $E < V_0$  (obr.29a)

Obecné řešení Schrödingerovy rovnice (48) je (srov.(27)):

Oblast:

$$(1) \quad \varphi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (x < 0) \quad (49a)$$

$$(2) \quad \varphi_2(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} \quad (0 < x < a) \quad (49b)$$

$$(3) \quad \varphi_3(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \quad (x > a) \quad (49c)$$

kde opět

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \quad (49d)$$

Okrajové podmínky:

(i) Protože řešení (49b) použijeme jen v konečné oblasti  $x \in (0, a)$ , jsou pro tato  $x$  obě exponenty konečné, takže není důvod některou z nich vylučovat (jako jsme to udělali v předch.odst.), tzn., že obecně může být jak  $C \neq 0$ , tak i  $D \neq 0$ .

(ii) pro částici přicházející zleva může být v oblasti (3) pouze prošlá vlna postupující vpravo; proto je třeba položit

$$F = 0 \quad (50a)$$

(iii) výsledná vlnová funkce musí být spojitá i s 1.derivací v bodech  $x = 0$ ,  $x = a$ ; podmínka dá 4 rovnice

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad ; \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (50b)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad ; \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=a} \quad (50c)$$

Dosazením do těchto rovnic z (49) (přičemž již  $F=0$ ) dostaneme 4 rovnice pro 5 neznámých: A, B, C, D, E. Můžeme z nich jednoznačně určit poměry: B/A, C/A, D/A, E/A. Eliminací C/A, D/A dostaneme

$$\frac{B}{A} = \frac{-i(k^2 + q^2) \sinh(qa)}{2kq \cosh(qa) - i(k^2 - q^2) \sinh(qa)} \quad (51)$$

$$\frac{E}{A} = \frac{2kq e^{-ika}}{2kq \cosh(qa) - i(k^2 - q^2) \sinh(qa)} \quad (52)$$

Z (50) je koeficient odrazivosti (R i T je při pevném  $V_0$  funkcí energie):

$$R(E) = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 + q^2)^2 \sinh^2(qa)}{4k^2q^2 \cosh^2(qa) + (k^2 - q^2)^2 \sinh^2(qa)} \quad (53)$$

Koeficient propustnosti bude podle (45) (uvědomme si, že v (45)  $k_2 = k_1 = k$ , neboť  $k$  pro  $x < 0$  je rovno  $k$  pro  $x > a$ ; v optické analogii v odst. 2.2 to odpovídá šíření dopadající a prošlé vlny (pro  $x > a$ ) v prostředí se stejným indexem lomu)

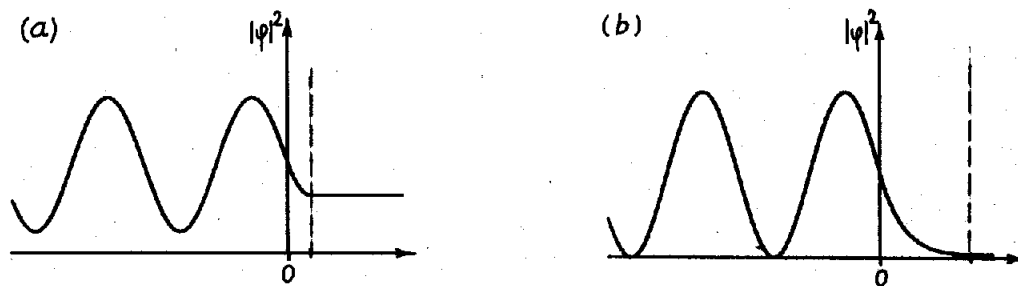
$$\begin{aligned} T(E) &= \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 \cosh^2(qa) + (k^2 - q^2)^2 \sinh^2(qa)} = \\ &= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left[ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (V_0 - E)a \right]} \end{aligned} \quad (54)$$

Vidíme, že skutečně platí  $R + T = 1$ .

Velice častý je případ, kdy  $qa \gg 1$ , tj.  $(V_0 - E) \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$  ;

potom  $\cosh(qa) \approx \sinh(qa) \approx e^{qa}/2$  a koeficient propustnosti (54) je přibližně

$$T(E) = \frac{16k^2q^2 e^{-2qa}}{(k^2 + q^2)^2} = 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp \left[ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right] \quad (55)$$



Obr. 30. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice, přicházející k bariéře zleva, s energií  $E = V_0/2$ ; šířka bariéry: (a)  $a = 1/2q$ , (b)  $a = 2/q$ .

Uvedme si pro ilustraci několik příkladů tunelového jevu.

(i) Průchod elektronu a protonu stejnou bariérou

Nechť elektron s energií  $E = 1\text{eV}$  dopadá na bariéru podle obr.29, přičemž  $V_0 = 2\text{eV}$  a šířka bariéry  $a = 0,1\text{nm}$ . Hodnota  $qa = 5,145$ , takže je ještě dobře možné použít aproximaci (55). Vypočtete-li si explicitně konstanty  $C, D$  v (49b), zjistíte, že z podmínky  $qa \gg 1$  vyplývá  $|C| \ll |D|$  a vlnová funkce (49b) může být přibližně psána

$$\psi_2(x) \approx D e^{-qx} \quad (0 < x < a) \quad (56)$$

Potom veličina

$$\frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (57)$$

je vzdálenost, na níž by se v oblasti bariéry (pro  $E < V_0$ ) zmenšila amplituda vlnové funkce  $e$ -krát. Protože pro náš elektron a bariéru je

$(q^{-1})_{el} = 0,194\text{ nm}$  ( $a = 0,1\text{nm}$ ), bude amplituda (a tedy i koeficient propustnosti  $T$ ) za bariérou poměrně velká. Dosazením číselných hodnot do (54) dostaneme

$$T_{el} = 0,777$$

Z hlediska klasické mechaniky elektron nemohl vůbec bariérou projít, zatímco kvantově-mechanické řešení ukazuje, že zhruba v osmi z deseti případů projde.

Jestliže na tutéž bariéru bude dopadat proton s energií  $1\text{eV}$ , bude pro něj  $(q^{-1})_{prot} = 0,0046\text{ nm}$  a koeficient propustnosti

$$T_{prot} \approx 4 \cdot 10^{-19}$$

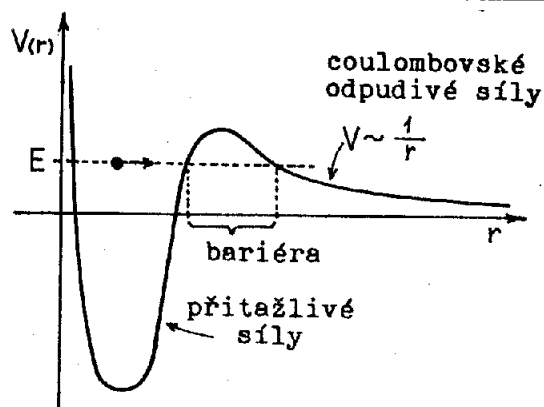
Pro mnohem těžší proton je tedy pravděpodobnost průchodu bariérou zanedbatelná.

(ii)  $\alpha$ -rozpad jádra

Je známo, že některá jádra mohou emitovat  $\alpha$ -částice; tato skutečnost může být kvalitativně objasněna pomocí tunelového jevu. Teorie  $\alpha$ -rozpadu vychází z představy, že  $\alpha$ -částice jsou v jádře drženy ohromnými přitažlivými silami (podobnými těm, které zajišťují vazbu protonů



a neutronů), jejichž dosah je však tak malý, že jejich vliv na  $\alpha$ -částici, která je vně jádra, lze zcela zanedbat. Protože  $\alpha$ -částice a jádro mají kladný náboj, budou se elektrostaticky odpuzovat, jestliže  $\alpha$ -částice bude vně jádra; naopak, v jádře je (ve srovnání se zmíněnými přitažlivými silami) vliv elektrostatického odpuzování zanedbatelný. Schematicky je průběh potenciálu obojích sil znázorněn na obr.31.



Obr. 31.

Schematické znázornění potenciálu, v němž se nachází  $\alpha$ -částice v jádře a vně jádra. Potenciál předpokládáme sféricky symetrický, tj. závislý pouze na vzdálenosti  $r$   $\alpha$ -částice od jádra.  $E$  je energie  $\alpha$ -částice v jádře.

Předpokládejme, že  $\alpha$ -částice se může uvnitř jádra pohybovat více nebo méně volně ve všech směrech; je známo, že rychlost tohoto pohybu je řádově  $10^7$  m/s. Protože těžká radioaktivní jádra (jako např. jádro U) mají poloměr řádově  $10^{-14}$  m, znamená to, že  $\alpha$ -částice "narazí" na bariéru asi  $10^{21}$ -krát za vteřinu; přitom pokaždé je pravděpodobnost, že bariérou projde, rovna koeficientu propustnosti  $T$  (55). Pravděpodobnost, že za 1s vyletí z jádra je tudíž

$$P \approx 10^{21} T \text{ s}^{-1}$$

Střední doba života jádra  $\tau$  je nepřímo úměrná  $P$ , tj.  $\tau = 10^{-21} / T$  s. K výpočtu  $T$  je nutné znát  $(V_0 - E)$  a šířku bariéry  $a$ . Reálná bariéra má ovšem tvar značně odlišný od pravouhlé bariéry na obr.29. Výraz (55) proto můžeme použít jen pro řádový odhad  $T$ . Pro jádro uranu je  $(V_0 - E) \approx 12$  MeV a střední šířka bariéry okolo  $3 \cdot 10^{-14}$  m; hmotnost  $\alpha$ -částice je  $6,4 \cdot 10^{-27}$  kg, takže exponent v (55)

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \approx 90$$

Vzhledem k  $e^{-90}$  můžeme v (55) položit koeficient u exponenty roven 1, takže

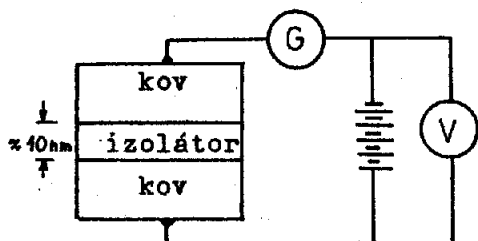
$$\tau = 10^{-21} \cdot e^{90} \approx 10^{18} \text{ s} \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ roků.}$$

Vezmeme-li např. 4g uranu, obsahuje tento vzorek asi  $10^{22}$  jader a počet emitovaných  $\alpha$ -částic za vteřinu bude řádově  $10^4$ , což je již dobře registrovatelný počet.

Je jasné, že koeficient propustnosti  $T$  silně závisí na přesných hodnotách  $(V - E)$ , a, neboť vystupují v exponentu; rovněž průběh potenciálu  $V(r)$  má na  $T$  velký vliv. Není proto překvapující, že experimentálně zjišťované hodnoty  $\tau$ , leží pro různá jádra ve velmi širokém intervalu [6].

(iii) Dva kovy oddělené izolátorem

Pouze informativně se zmíníme o tunelovém jevu v oblasti fyziky pevných látek. Jestliže oddělíme dva kovy tenkou dielektrickou vrstvou ( s tloušťkou řádově 10nm ) a přiložíme na kovové elektrody napětí (obr. 32), můžeme registrovat proud procházející obvodem. Izolátor funguje



Obr. 32.

Průchod vodivostních elektronů od jedné kovové elektrody k druhé, tunelováním přes potenciálovou bariéru, vytvořenou vrstvičkou izolátoru.

jako potenciálová bariéra a to co zaznamená galvanoměr G zařazený do okruhu, je skutečně proud elektronů, které tunelovaly přes izolátor. Ze závislosti procházejícího proudu na přiloženém napětí je možné se mnoho dozvědět o stavech elektronů v kovech.

Zbývá nám nyní všimnout si případu, kdy

(b) celková energie částice dopadající na bariéru je  $E > V_0$  (obr.29b)

V řešení Schrödingerovy rovnice (48) se změní jen vlnová funkce  $\psi_2(x)$  (49b) na

$$\psi_2(x) = C e^{i\kappa x} + D e^{-i\kappa x} \quad (0 < x < a) \quad (58a)$$

kde

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = i q \quad (58b)$$

Okrajové podmínky zůstanou nezměněné, tak jak byly uvedeny za funkcemi (49). Máme-li však již provedeno řešení rovnic (50) pro  $E < V_0$ , je zbytečné ho provádět znovu; využijeme-li relaci (58b) a porovnáme funkce (58a), (49b), vidíme, že stačí ve výsledcích zaměnit  $q$  za  $(-i\kappa)$ .

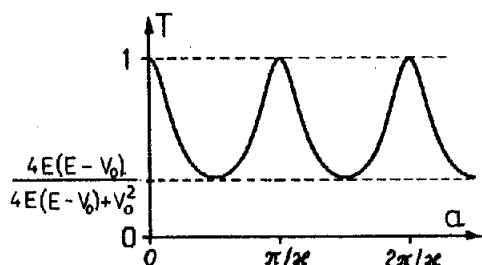
Pro koefficient odrazu tak z (53) dostaneme (viz dod.A)

$$R(E) = \frac{(k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)} \quad (59)$$

a pro koefficient propustnosti z (54)

$$T(E) = \frac{4 k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}(E - V_0)a\right)} \quad (60)$$

Závislost  $T$  na šířce bariéry  $a$  (pro dané  $E$ ) je na obr.33; maximální hodnoty  $T = 1$  nabývá v bodech  $a = n\pi/\kappa$  ( $n=0,1,2,\dots$ ). Analogická situace nastává v optice u Fabryho-Perotova interferometru; rezonance (když  $T = 1$ ) se objevují tehdy, když  $a = n\lambda/2$  ( $\lambda$  je vlnová délka v oblasti  $0 < x < a$ ; zde  $\kappa = 2\pi/\lambda$ ). Sledujeme-li šíření vlnového klubka

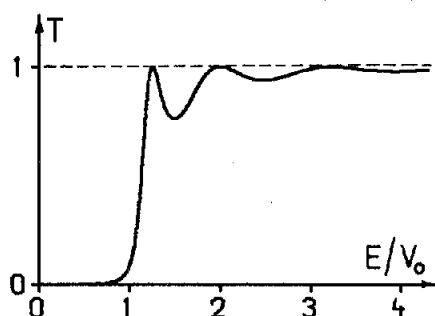


Obr. 33.

Závislost koeficientu propustnosti  $T$  na šířce bariéry  $a$ , při  $E = 1,1 V_0$ .

(způsobem o němž bude zmínka v odst. 2.6) přes bariéru, ukáže se, že při splnění rezonanční podmínky, zůstává klubko poměrně dlouho v oblasti  $0 < x < a$ ; v kvantové mechanice se tento jev nazývá rezonanční rozptyl.

Závěrem si ještě uvedme závislost koeficientu propustnosti  $T$  na poměru  $E/V_0$  (pro pevné  $V_0 a^2$ ) (obr.34).



Obr.34.

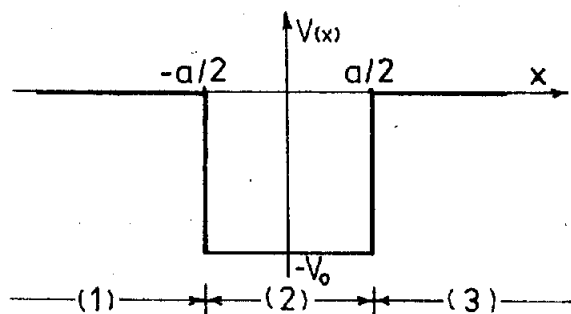
Závislost koeficientu propustnosti  $T$  na  $E/V_0$  pro  $V_0 a^2 = 40 \hbar^2/2m$  a  $0 \leq E \leq 4V_0$ .

## 2.5) Potenciálová jáma. Vázané a volné stavy. Parita

V úlohách, které jsme dosud řešili, mohla celková energie částice  $E$  mít libovolnou hodnotu. Můžeme na ně pohlížet jako na model rozptylu částice v nějakém potenciálovém poli; částici, která do oblasti proměnného potenciálu přichází, můžeme udělit libovolnou energii. Potenciál, který jsme zatím uvažovali, přitom odpovídal odpudivým silám (že tomu tak je, rozvažte např. na potenciální energii elektrostatického působení mezi dvěma náboji).

Nyní si všimneme ještě úlohy, která bude modelovat přitažlivé silové působení. Uvidíme, že v tomto případě se pro  $E < 0$  může objevit nový typ řešení - diskretní (jen pro určitá  $E$ ) vázané stavy v oblasti změněného potenciálu.

Průběh potenciální energie  $V(x)$ , který nyní budeme studovat, je na obr. 35.



Obr. 35.

Pravouhlá potenciálová jáma  
hloubky  $V_0$  ( $V_0 > 0$ ) a šířky  $a$ .

Rozlišit musíme opět 2 případy.

(a) Celková energie částice  $-V_0 < E < 0$

Klasická částice by mohla mít libovolnou hodnotu  $E \in [-V_0, 0]$ . Lokalizovaná by byla přesně v oblasti  $x \in (-a/2, a/2)$ ; pohybovala by se zde volně, pouze na "stěnách" v  $x = \pm a/2$  by se pružně odrážela.

Kvantově-mechanické řešení vychází opět ze stacionární Schrödingrovovy rovnice (20). Pro oblasti (1)-(3) (podle obr.35) bude mít tvar:

$$V(1) \text{ a } (3): \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \rho^2 \psi(x) = 0 \quad (|x| > a/2) \quad (61a)$$

$$V(2): \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (|x| < a/2) \quad (61b)$$

kde pro  $-V_0 < E < 0$  (tj.  $E < 0$ ,  $V_0 > 0$ )

$$\rho = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \quad (62)$$

Obecná řešení v jednotlivých oblastech jsou:

$$(1): \quad \psi_1(x) = A e^{\rho x} + B e^{-\rho x} \quad (x < -a/2) \quad (63a)$$

$$(2): \quad \psi_2(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx} \quad (|x| < a/2) \quad (63b)$$

$$(3): \quad \psi_3(x) = E e^{\rho x} + F e^{-\rho x} \quad (x > a/2) \quad (63c)$$

Konstanty  $A, \dots, F$  určíme opět z hraničních podmínek pro  $x \rightarrow \pm \infty$  a pro  $x = \pm a/2$ . Předně: v oblasti (1) je nepřijatelné řešení  $\sim e^{-\rho x}$ , neboť pro  $x \rightarrow -\infty$  diverguje; musí proto být

$$B = 0;$$

ze stejného důvodu je pro  $x > a/2$  nepřijatelné řešení  $\sim e^{\rho x}$ , takže musíme položit

$$E = 0.$$

Pro zbývající 4 konstanty -  $A, C, D, F$  - nám okrajové podmínky v  $x = \pm a/2$ :

$$\psi_1(-a/2) = \psi_2(-a/2), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=-a/2} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-a/2} \quad (64a)$$

$$\varphi_2(a/2) = \varphi_3(a/2) \quad , \quad \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=a/2} = \left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=a/2} \quad (64b)$$

dají 4 homogenní rovnice. Ty budou mít netriviální řešení (triviálním řešením se rozumí  $A=C=D=F=0$ , které nás nezajímá) pouze pro některé hodnoty energie  $E$  ( pro ty, pro něž bude determinant soustavy roven nule). Jestliže se však (místo bezhlavého vypsání a řešení rovnic (64)) nad problémem trochu zamyslíme, dojdeme k závěru, že místo čtyř rovnic (64), nám stačí řešit pouze soustavu 2 rovnic. Ukážeme si nyní, jak se s výhodou dá při řešení využít symetrie  $V(x)$ .

#### Parita

Ne nadarmo jsme volili polohu jámy v intervalu  $x \in (-a/2, a/2)$ . Protože na celé ose  $x$  ( od  $-\infty$  do  $+\infty$  ) se již žádná jiná změna potenciální energie nepředpokládá, je poloha jámy z fyzikálního hlediska lhostejná. Z matematického hlediska je však přijatá volba výhodná, neboť potenciální energie  $V(x)$  je nyní symetrická vzhledem k  $x = 0$ , tj. platí

$$V(x) = V(-x) \quad (65)$$

I když následující výsledek (67) je možné získat striktně matematicky, omezíme se na jeho získání z hlediska fyzikální interpretace funkce  $\varphi(x)$ . Platí-li (65), potom není žádný důvod k tomu, aby pravděpodobnost výskytu částice v nějakém bodě  $x$  byla jiná než v bodě  $(-x)$  (víme již, že pravděpodobnost výskytu je určována právě potenciálem  $V$ ); musí tedy platit

$$|\varphi(x)|^2 = |\varphi(-x)|^2 \quad (66)$$

a odtud pro samotnou vlnovou funkci

$$\varphi(x) = \pm \varphi(-x) \quad (67)$$

Hledaná funkce  $\varphi(x)$  musí být tedy sudá ( $s +$ ) nebo lichá ( $s -$ ). Budeme říkat, že parita vlnové funkce je  $+1$  (pro  $+$ ) nebo  $-1$  (pro  $-$ ).

Všimněme si nyní z tohoto hlediska funkcí (63) (s tím, že  $B=E=0$ ):  
(i) Výsledná vlnová funkce  $\varphi(x)$  ( po "sešití" v  $x=\pm a/2$ ) má paritu  $+1$ :

Aby tomu tak bylo, musí platit:

$$\begin{aligned} \varphi_1(-x) &= \varphi_3(x) && \text{pro } |x| > a/2 \\ \varphi_2(-x) &= \varphi_2(x) && \text{pro } |x| < a/2 \end{aligned} \quad (68)$$

Po dosazení z (63)

$$\begin{aligned} A e^{-\varphi x} &= F e^{-\varphi x} && \text{pro } |x| > a/2 \\ C e^{-ikx} + D e^{ikx} &= C e^{ikx} + D e^{-ikx} && \text{pro } |x| < a/2 \end{aligned}$$

Odtud plyne, že

$$A = F \quad a \quad C = D \quad (70)$$

(ii) Výsledná vlnová funkce  $\psi(x)$  má paritu -1 :

V rovnicích (68) vynásobíme jednu stranu  $(-1)$  a obdoba rovnic (69) pak je

$$\begin{aligned} A e^{-\rho x} &= -F e^{-\rho x} & (|x| > a/2) \\ C e^{-ikx} + D e^{ikx} &= -C e^{ikx} - D e^{-ikx} & (|x| < a/2) \end{aligned} \quad (71)$$

Odtud

$$A = -F \quad a \quad C = -D \quad (72)$$

Z (63) nyní dostaneme řešení:

(i) s paritou +1

$$\psi_1^{(+)}(x) = A_+ e^{\rho x}$$

$$\psi_2^{(+)}(x) = C_+ \cos(kx)$$

$$\psi_3^{(+)}(x) = A_+ e^{-\rho x}$$

(ii) s paritou -1

$$\psi_1^{(-)}(x) = A_- e^{\rho x}$$

$$\psi_2^{(-)}(x) = C_- \sin(kx) \quad (73)$$

$$\psi_3^{(-)}(x) = -A_- e^{-\rho x}$$

kde  $A_+ = A_- = A$ ,  $C_+ = 2C$ ,  $C_- = 2iC$ .

V obou případech nám zůstávají k určení pouze dvě konstanty:

$A_+, C_+$  nebo  $A_-, C_-$ . Pro jejich výpočet nám stačí buď (64a) nebo (64b); zbývající dvojice rovnic je ekvivalentní použité dvojici.

Z (64a) dostaneme

(i) pro funkce s paritou +1 rovnice

$$A_+ e^{-\rho a/2} - C_+ \cos(ka/2) = 0 \quad (74)$$

$$A_+ \rho e^{-\rho a/2} - C_+ k \sin(ka/2) = 0$$

Aby rovnice měly netriviální řešení, musí být determinant soustavy roven nule :

$$\begin{vmatrix} e^{-\rho a/2} & -\cos(ka/2) \\ \rho e^{-\rho a/2} & -k \sin(ka/2) \end{vmatrix} = 0 \quad (75)$$

Po rozvedení a krácení  $\exp(-\rho a/2)$ , dostaneme rovnici

$$k \operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \rho \quad (76)$$

Jak  $k$ , tak i  $\rho$ , závisí na  $E$ , takže (76) představuje transcendentní rovnici pro určení možných hodnot celkové energie částice v jámě, ve stavech s paritou +1.

Naprosto stejným způsobem dostaneme

(ii) pro funkce s paritou -1

rovnici k určení možných hodnot energie  $E$

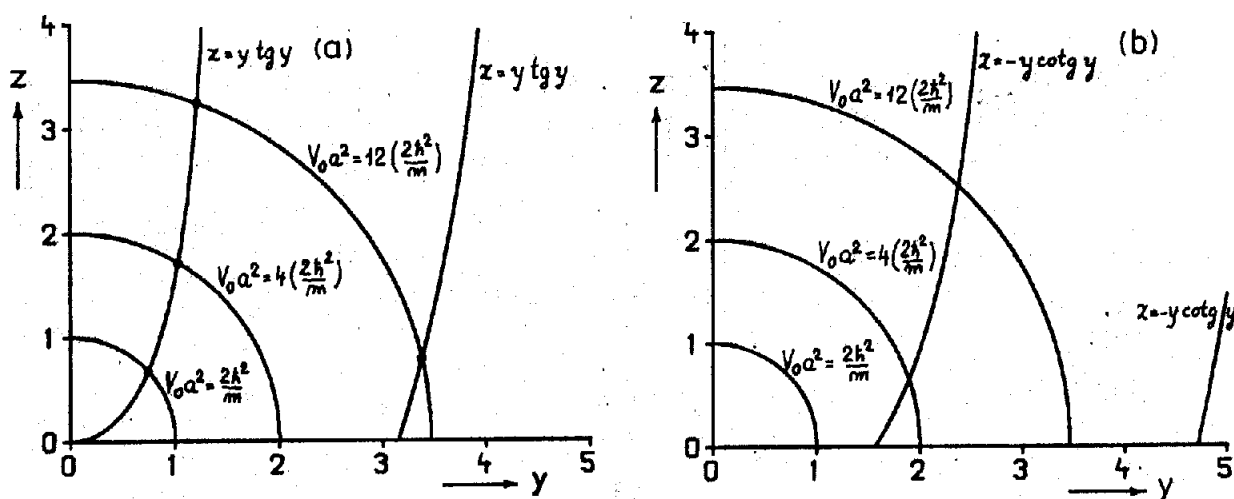
$$k \cotg \frac{ka}{2} = -\rho \quad (77)$$

Došli jsme tedy k závěru, že částice vázaná v oblasti potenciálové jámy může být jen v určitých stacionárních vázaných stavech, jimž přísluší celkové energie, které jsou řešením (76) nebo (77); pro jiné hodnoty celkové energie  $E < 0$ , nelze najít takové řešení Schrödingerovy rovnice, které by v celém intervalu  $x \in (-\infty, +\infty)$  splňovalo podmínky uvedené v odst. II.3,4.

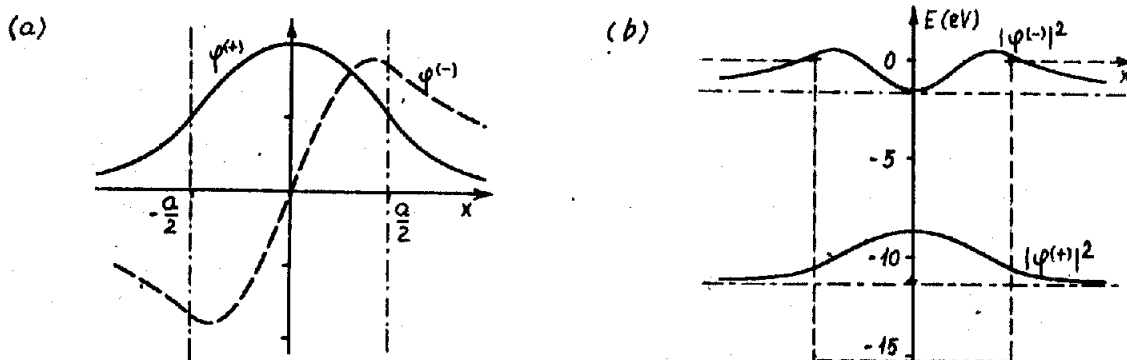
Řešení rovnic (76), (77) je možné provést numericky na počítači nebo, názorněji, graficky např. takto: položíme  $y = ka/2$  a  $z = \rho a/2$ . Potom rovnice (76) má tvar  $y \cdot \operatorname{tg} y = z$ , přičemž

$$y^2 + z^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}.$$

Protože veličiny  $y, z$  mohou nabývat pouze kladných hodnot, budou hodnoty energie určeny průsečíky křivky  $z = y \cdot \operatorname{tg} y$  s částí kružnice s poloměrem  $(ma^2 V_0 / 2\hbar^2)^{1/2}$ , která leží v 1. kvadrantu. Obdobně řešení (77) bude dáno průsečíky křivky  $z = -y \cot y$  s touž částí kružnice. Příklady těchto grafických řešení jsou v obr. 36. Vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti výskytu částice pro dva možné stavy v jámě s  $V_0 a^2 = 8\hbar^2/2m$  jsou v obr. 37.



Obr. 36. Grafické řešení rovnice : (a) (76), (b) (77). Kružnice jsou pro  $V_0 a^2 = 2 \hbar^2/m$ ,  $4(2 \hbar^2/m)$  a  $12(2 \hbar^2/m)$ . Pro nejnižší hodnotu  $V_0 a^2$  existuje jediný stav s paritou +1, pro  $V_0 a^2 = 8 \hbar^2/m$  jeden stav s paritou +1 a jeden s paritou -1 a konečně pro  $V_0 a^2 = 24 \hbar^2/m$  existují již dva stavy s paritou +1 a jeden s paritou -1. Je zřejmé, že při zadané hmotnosti částice  $m$ , závisí počet možných vázaných stavů v jámě na parametrech jámy prostřednictvím součinu  $V_0 a^2$ .



Obr. 37. Dva možné stavy v jámě pro niž  $V_0 a^2 = 8 \hbar^2/m$  (srov. obr. 36):

(a) vlnové funkce  $\psi_1$  pro stav s energií  $E_1$  (paritou +1) a  $\psi_2$  pro stav s energií  $E_2$  (parita -1). Pro elektron v jámě šířky 0,2 nm je  $V_0 = 15,24$  eV,  $E_1 = -11,2$  eV a  $E_2 = -1,56$  eV. (b) hustoty pravděpodobnosti výskytu částice ve stavech  $\psi_1$ ,  $\psi_2$ . Osa  $x$  pro kreslení  $|\psi|^2$  je posunuta do  $V = -E_1$ , resp.  $V = -E_2$ . V (a) i (b) je měřítko pro  $\psi$ , resp.  $|\psi|^2$ , libovolné, poměry amplitud obou funkcí jsou však správné (za předpokladu, že  $\psi_1, \psi_2$  jsou normalizované).

Jednoduché řešení získáme v nekonečně hluboké jámě, tj. pro  $V_0 \rightarrow \infty$ . Je to sice případ fyzikálně nereálný, ale často může (především pro nejnižší stavy v hluboké jámě) posloužit jako dobrá aproximace. Aby bylo možné zřetelně provést limitní přechod, je vhodnější úlohu přeformulovat (posunout hladinu již připisujeme nulovou energii) tak, že

$$V(x) = 0 \quad \text{pro } |x| < a/2 \quad \text{a } V(x) \rightarrow \infty \quad \text{pro } |x| > a/2 \quad (78)$$

Vlnová funkce  $\psi(x)$  pak musí být rovna nule vně jámy (srov. odst. 2.3), tj

$$\psi(x) = 0 \quad \text{pro } |x| \geq a/2 \quad (79a)$$

Uvnitř jámy bude řešením opět (63b) s tím, že nyní

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{a} \quad E > 0 \quad (80)$$

Úvahy o paritě řešení zůstávají v platnosti, takže dostáváme dvě posloupnosti funkcí:

$$\text{s paritou +1 : } \psi(x) = A \cos(kx) \quad (81a)$$

$$\text{s paritou -1 : } \psi(x) = B \sin(kx) \quad (81b)$$

přičemž musí pro obě platit okrajové podmínky

$$\psi(-a/2) = 0, \quad \psi(a/2) = 0 \quad (82)$$

Ty je možné splnit pro sudá řešení (81a) jen pro určité hodnoty  $k$  a to

$$k_n = \frac{\pi}{a} n \quad \text{pro } n = 1, 3, 5, \dots \quad (83a)$$



a pro lichá řešení (81b) jsou to naopak hodnoty

$$k_n = \frac{\pi}{a} n \quad \text{pro } n = 2, 4, 6, \dots \quad (83b)$$

Dostáváme tak posloupnost normalizovaných vlnových funkcí

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(n \frac{\pi}{a} x) & \text{pro } n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n \frac{\pi}{a} x) & \text{pro } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (79b)$$

přičemž částice ve stavu s kvantovým číslem  $n$  (vlnovou funkcí  $\varphi_n(x)$ ) má energii, kterou dostaneme z (80) a (83),

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (79c)$$

Všimněme si, že nejnížší možná energie  $E_1$  je v souladu s relací neurčitosti; protože neurčitost stanovení souřadnice je řádově  $a$ , bude neurčitost v impulsu řádu  $(\hbar/a)$  a minimální kinetická (a zde i celková) energie tedy je řádově  $\hbar^2/ma^2$ .

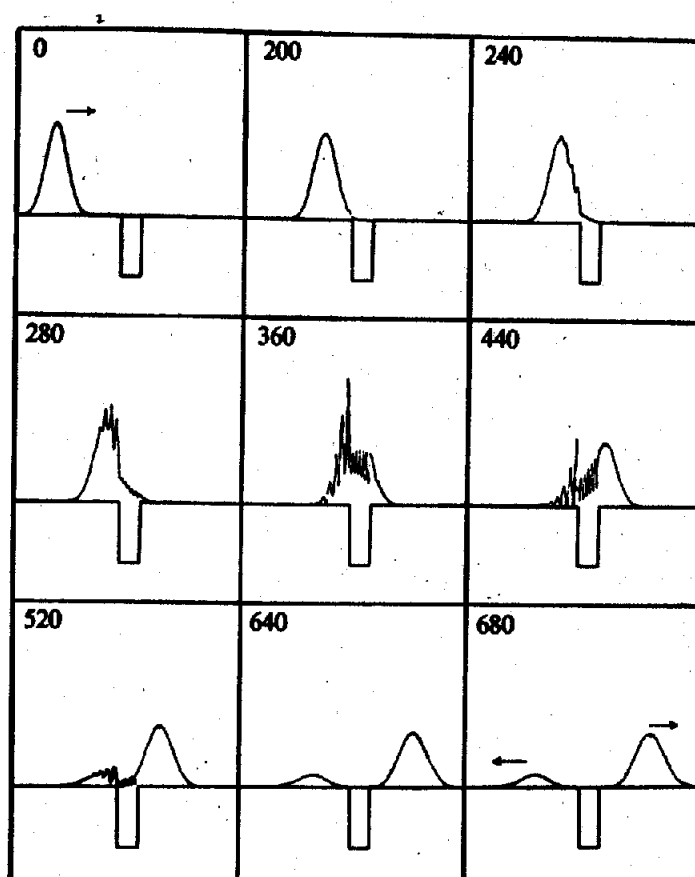
Když jsme takto dořešili případ  $E \in (-V_0, 0)$ , měli bychom přejít k alternativě  $E > 0$ . Tuto úlohu však již máme vyřešenu v odst. 2.4b (situace  $E > V_0$ ). Stačí jen ve výrazu (58b) pro  $\alpha$  zaměnit  $V_0$  za  $(-V_0)$ ; všechny ostatní úvahy o koeficientech  $R$  a  $T$  již zůstanou v platnosti. Částice, která má celkovou energii  $E$  větší než je hloubka jámy ( $E - V_0 > 0$ ), již může mít libovolnou energii  $E$ . Při průchodu oblastí jámy (přitažlivého potenciálu) se bude rozptylovat (určeno  $R$  a  $T$ ), nedojde však k trvalé lokalizaci (zachycení) v oblasti potenciálové jámy, tj. pro  $E > 0$  neexistují vázané stavy.

## 2.6) Vlnové klubko v oblasti změny potenciálu

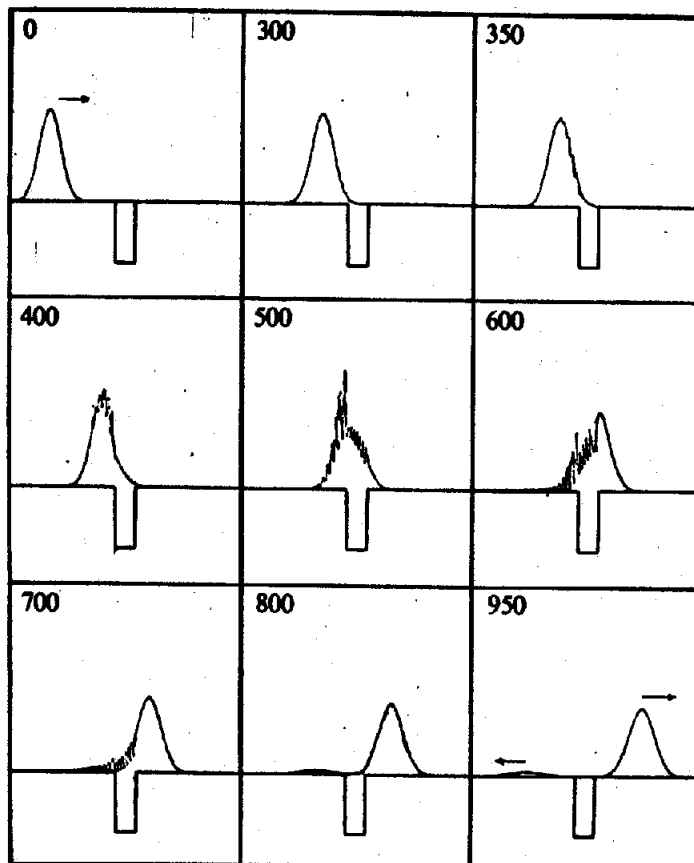
Již jsme se zmínili, že řešení, nalezená v předcházejících odstavcích (vyjma vázaných stavů v jámě), neodpovídají příliš dobře fyzikální realitě. Stacionární řešení, která jsme nacházeli (dopadající, odražené a prošlé vlny) byly periodické funkce "protažené do  $+\infty$  nebo  $-\infty$ ". Tyto funkce nemohly představovat fyzikálně reálný stav už proto, že nejsou kvadraticky integrovatelné (viz odst. II.3.2 a II.3.4). Lineární superpozicí z nich však můžeme vytvořit vlnové klubko (odst. II.5), které již tyto nedostatky nemá. Navíc, protože vlnové klubko je vytvořeno superpozicí zmíněných stacionárních stavů, je poměrně snadné zjistit jeho časový vývoj: stačí vynásobit každý z koeficientů v rozvoji členem  $\exp(-iEt/\hbar)$  (srov. odst. 1.3). Jednoduché je ovšem jen sledování evoluce klubka v oblasti konstantního potenciálu (odst. II.5.3). Chceme-li ho sledovat při průchodu oblastmi v nichž se potenciál mění, je jeho vývoj

dán řešením časové Schrödingerovy rovnice (10). Nalezení řešení v analytickém tvaru, pro libovolný časový okamžik, není možné ani v těch případech, kterými jsme se právě zabývali. Zůstává pak jen možnost numerického řešení Schrödingerovy rovnice na počítači. Nebudeme se touto problematikou zabývat, pouze uvedeme již mnohokrát přetiskované výsledky takových výpočtů z práce: Goldberg A. et al.: Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena, Am.J.Phys. 35(1967)177.

Výchozím stavem je zde gaussovské vlnové klubko (odst.II.5) -  $\psi(x;0)$  - postupující vpravo, směrem k potenciálové bariéře nebo jámě; dílčí obrázky jsou "expozicemi" klubka v různých časových intervalech (čas je uveden vpravo nahoře). Střední hodnota energie (klubko je superpozicí stacionárních stavů s různou energií) částice reprezentované vlnovým klubkem, je uvedena u obrázků. Prudké oscilace v některých obrázcích jsou výsledkem interference dopadající a odražené vlny.



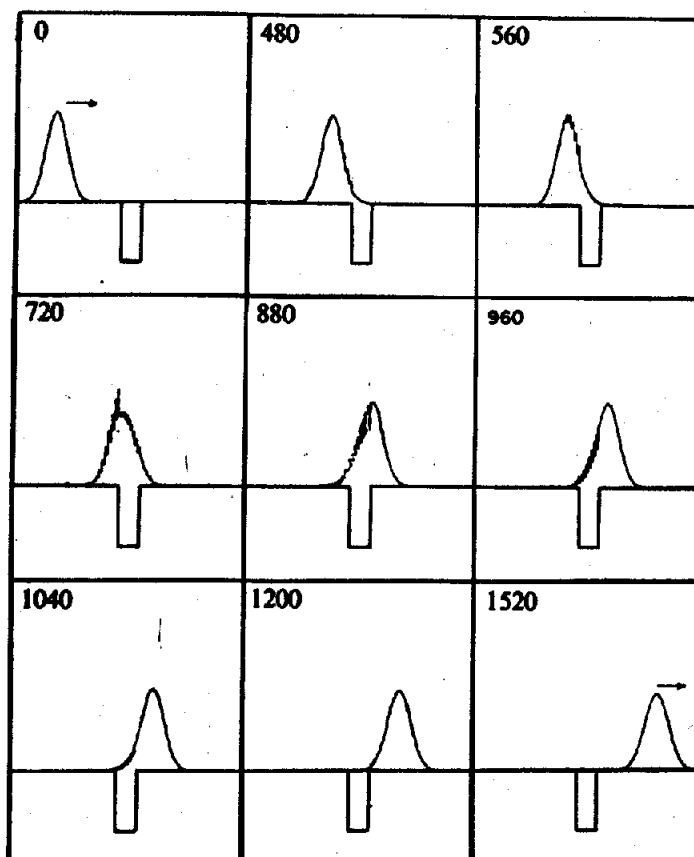
Obr. 38. Rozptyl gaussovského klubka na pravouhlé potenciálové jámě hloubky  $V_0$  ( $V_0 > 0$ ). Střední hodnota energie částice je  $E = V_0/2$ .



Obr. 39.

Totéž jako v obr. 38 , jen  
střední hodnota energie

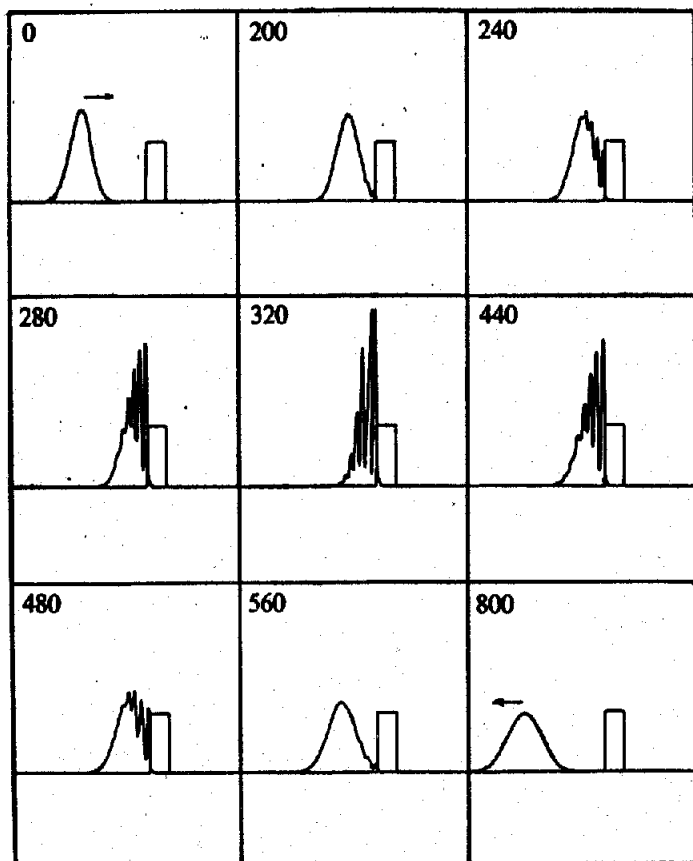
$$E = V_0$$



Obr. 40.

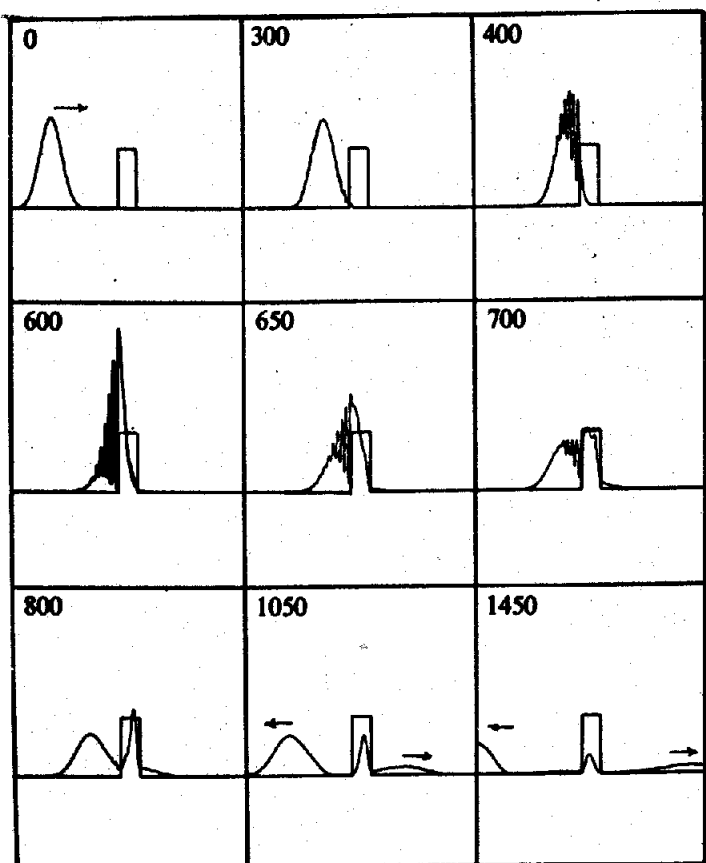
Totéž jako v obr. 38 , jen  
střední hodnota energie

$$E = 2V_0$$



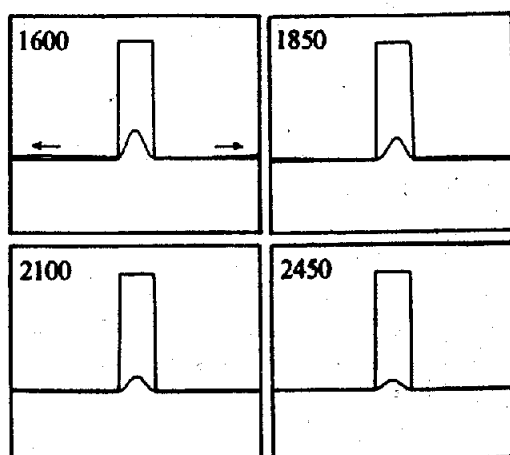
Obr. 41.

Rozptyl gaussovského klubka  
na pravouhlé bariéře výšky  $V_0$ .  
Střední hodnota energie částice je  $E = V_0/2$ .

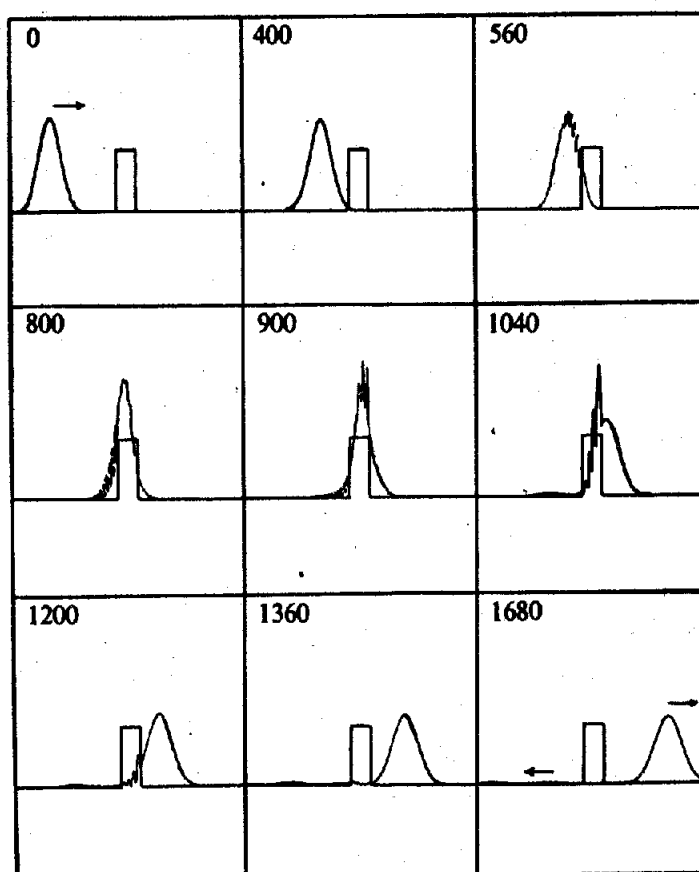


Obr. 42(a).

Totéž co v obr. 41, jen  
střední hodnota energie  
 $E = V_0$ .  
Všimněte si rezonančního  
jevu: část hustoty pravděpodob-  
nosti je dlouho lokalizována  
v oblasti bariéry.



Obr. 42(b). Detail poklesu rezonančního stavu z obr. 42(a).



Obr. 43. Totéž co v obr.41 , jen střední hodnota energie částice je  $E = 2 V_0$  .

## IV. ÚVOD DO FORMALISMU KVANTOVÉ MECHANIKY

V této kapitole zformulujeme základní postuláty současné nerelativistické kvantové teorie částic. Uvidíme, že výsledky získané v předcházejících kapitolách, jsou pouze speciálními případy tohoto obecného formalismu kvantové mechaniky. Protože matematický aparát, který je přitom používán, nemusí být zcela běžný, je první část kapitoly věnována definici nutných základních matematických pojmů a důkazu několika užitečných vět. Podstatná část odst.1 tedy může být chápána jako výkladový slovník pojmů, které budeme v dalším potřebovat. I když by tato část z hlediska matematické korektnosti jistě neobstála před zraky matematického puristy, doufám, že je natolik přesná, aby nedovolovala naprosto scestné výklady.

V druhém odstavci jsou lakonicky (opatřeny jen několika poznámkami a drobnými komentáři) uvedeny základní postuláty současné kvantové mechaniky. Pochopení předcházejících tří kapitol, by se mělo právě zde projevit v tom, že tyto postuláty nebudou pro vás naprosto nečekaným překvapením.

V třetím odstavci jsou pak odvozeny některé obecné důsledky plynoucí z postulátů, užitečné při řešení většiny konkrétních problémů.

Je třeba si jasně uvědomit, že tato kapitola obsahuje (i když ve zjednodušené formě) podstatnou část toho, na čem stojí současná nerelativistická kvantová mechanika částic. Podstatná část toho, co bude uvedeno v následujících kapitolách (především v II.dílu skriptu), je jen aplikací obsahu této kapitoly na řešení konkrétních úloh.

### 1. Matematický aparát

#### 1.1) Prostor vlnových funkcí

Označme  $\mathcal{F}$  množinu všech vlnových funkcí, které odpovídají možným stavům částice s hmotností  $m$ . Jestliže do této množiny zařadíme i funkci, která je pro všechna  $\vec{r}$  a  $t$  rovna nule, potom má  $\mathcal{F}$  následující vlastnosti:

- (a) je-li  $\psi_1 \in \mathcal{F}$  a  $\psi_2 \in \mathcal{F}$ , potom též  $(\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{F}$   
 (b) je-li  $\psi \in \mathcal{F}$  a  $c$  libovolné komplexní číslo, potom také  $c\psi \in \mathcal{F}$  (1)

Podle principu superpozice, který jsme přijali, přísluší funkce

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2,$$

kde  $c_1, c_2$  jsou libovolná komplexní čísla a

$\psi_1, \psi_2$  vlnové funkce možných stavů,

také možnému stavu, takže  $\psi \in \mathcal{F}$ .

Množinu  $\mathcal{F}$  nazveme prostorem vlnových funkcí. I když jsme pro určitost uvažovali funkce pro jednu částici, je zřejmé, že totéž lze opakovat pro množinu funkcí příslušejících možným stavům libovolné kvantové soustavy.

#### Upozornění:

Z právě uvedeného důvodu, nebudeme v následujících úvahách vypisovat explicitně nezávisle proměnné, na nichž funkce závisí; v integrálech z těchto funkcí se bude integrace provádět přes všechny nezávisle proměnné (nikoliv přes čas  $t$ , který ve vlnové funkci vystupuje jako parametr!) a pokud nebudou uvedeny integrační meze, rozumí se integrace přes celý definiční obor proměnných.

Množina  $\mathcal{F}$  má všechny charakteristické vlastnosti abstraktních lineárních vektorových prostorů, známých z úvodního kursu algebry (viz též dod.B). Prostor vlnových funkcí  $\mathcal{F}$  je proto možné považovat za jednu z konkrétních reprezentací nějakého abstraktního lineárního vektorového prostoru, jehož vektory reprezentují možné stavy soustavy. Podrobnější rozbor tohoto přístupu je v odst. 1.4. Do té doby se omezíme jen na reprezentaci těchto vektorů pomocí vlnových funkcí  $\psi$ . Uvidíme však, že to, co budeme dále o prostoru  $\mathcal{F}$  a funkcích (vektorech)  $\psi \in \mathcal{F}$  říkat, má analogii např. i v běžném trojrozměrném reálném vektorovém prostoru (množině všech vektorů v reálném 3-rozměrném prostoru). Vektorový prostor, který potřebujeme pro reprezentaci stavů kvantové soustavy, je jeho zobecněním: musí být případně i nekonečné dimenze a souřadnice jeho vektorů v nějaké bázi (souřadné soustavě) mohou být komplexními čísly. Zavedme si nyní některé základní pojmy.

#### Lineárně nezávislé funkce

Funkce  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \in \mathcal{F}$  se nazývají lineárně nezávislé, jestliže rovnici

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_n \psi_n = 0 \quad (2)$$

lze splnit jen s  $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ .

Jestliže v prostoru  $\mathcal{F}$  lze nalézt  $n$  lineárně nezávislých funkcí, nikoli však  $(n+1)$  lineárně nezávislých funkcí, potom říkáme, že prostor  $\mathcal{F}$  je  $n$ -rozměrný. Je-li možné v  $\mathcal{F}$  najít libovolný počet lineárně nezávislých funkcí, potom  $\mathcal{F}$  je prostor nekonečné dimenze.

#### Skalární součin

Skalární součin dvou funkcí  $\varphi \in \mathcal{F}$ ,  $\psi \in \mathcal{F}$  je komplexní číslo, které budeme (podle Diraca) značit  $\langle \varphi | \psi \rangle$  a definovat takto:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^* \psi \, d\tau \quad (3)$$

(integruje se přes celý definiční obor nezávisle proměnných).

Pro takto definovaný skalární součin platí:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* \quad (4a)$$

$$\langle \varphi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle = c_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle \quad (4b)$$

$$\langle c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 | \psi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \psi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \psi \rangle \quad (4c)$$

$$\langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0 - \text{reálné číslo, rovné nule jen pro } \varphi \equiv 0 \quad (4d)$$

Výraz  $\langle \varphi | \varphi \rangle$  je nám již známá norma (II.20).

Jestliže pro dvě nenulové funkce  $\varphi \in \mathcal{F}$ ,  $\psi \in \mathcal{F}$  je

$$\langle \varphi | \psi \rangle = 0, \quad (5)$$

říkáme, že funkce jsou ortogonální.

V n-rozměrném prostoru  $\mathcal{F}$  můžeme vždycky vybrat n lineárně nezávislých funkcí (vektorů)

$$u_1 \in \mathcal{F}, u_2 \in \mathcal{F}, \dots, u_n \in \mathcal{F}$$

pro něž platí

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (6)$$

Tento soubor  $\{u_i\}$  můžeme použít jako ortonormální bázi v prostoru  $\mathcal{F}$  a libovolnou funkci  $\psi \in \mathcal{F}$  pak psát (rozložit v bázi  $\{u_i\}$ )

$$\psi = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \dots + c_n u_n \quad (7)$$

kde  $c_i$  ( $i=1,2,\dots,n$ ) jsou komplexní čísla, která budeme nazývat souřadnicemi funkce (vektoru)  $\psi$  v bázi  $\{u_i\}$ .

Abychom pro danou funkci  $\psi$  a bázi  $\{u_i\}$  určili souřadnice  $c_i$ , vynásobme (7) zleva  $u_i$  a integrujme přes celou definiční oblast proměnných; jinými slovy: udělejme skalární součin levé i pravé strany (7) s funkcí  $u_i$ :

$$\langle u_i | \psi \rangle = c_1 \underbrace{\langle u_i | u_1 \rangle}_{=0} + \dots + c_i \underbrace{\langle u_i | u_i \rangle}_{=1} + \dots + c_n \underbrace{\langle u_i | u_n \rangle}_{=0}$$

Protože platí (6), zůstává na pravé straně nenulový jen člen s  $\langle u_i | u_i \rangle = 1$  a

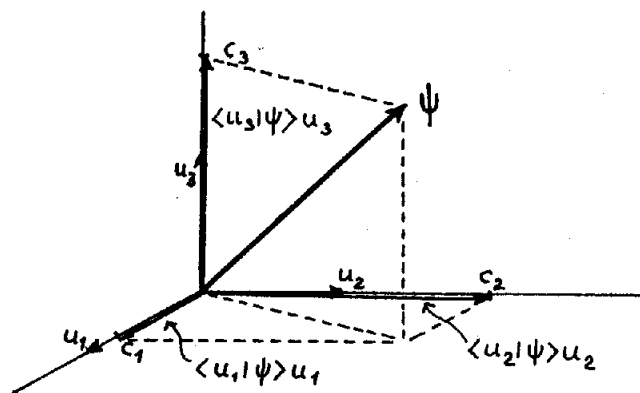
$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle = \int u_i^* \psi \, d\tau \quad (8)$$

V dané bázi  $\{u_i\}$  určuje soubor souřadnic  $c_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) jednoznačně funkci  $\psi$ . Stav soustavy může být tedy určen buď zadáním  $\psi$ , nebo množinou souřadnic, které můžeme zapsat jako sloupcový vektor

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (9)$$

Jestliže si znázorníme situaci v 3-rozměrném reálném vektorovém prostoru, představují souřadnice  $c_i$  ortogonální projekce na souřadné osy určené vektory  $u_i$  (obr.44).





Obr. 44.

## 1.2) Operátory v $\mathcal{F}$

Funkce  $\psi \in \mathcal{F}$  může být podrobena mnoha matematickým operacím, které ji převádějí v obecně jinou funkci, řekněme  $\varphi$ , z prostoru  $\mathcal{F}$ . Např.  $\psi$  může být násobena konstantou, násobena  $x$ , může být derivována, integrována apod.

Operátorem rozumíme předpis, který jedné funkci  $\psi \in \mathcal{F}$  přiřazuje obecně jinou funkci  $\varphi \in \mathcal{F}$ ; tento předpis dokážeme zpravidla vyjádřit nějakým matematickým symbolem, který budeme obecně značit  $\mathcal{O}$  a psát

$$\varphi = \mathcal{O} \psi \quad (10)$$

Poznámka:

V textu budeme operátory značit buď velkým psacím písmenem nebo znakem ^ nad písmenem; např.  $\mathcal{O}$  nebo  $\hat{\mathcal{O}}$ ,  $\mathcal{A}$  nebo  $\hat{\mathcal{A}}$ , ale také třeba  $\hat{a}$  atd.

Pro naše účely budou použitelné pouze lineární operátory, tj. operátory, které na lineární kombinaci funkcí působí tak, že platí

$$\mathcal{O}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \mathcal{O} \psi_1 + c_2 \mathcal{O} \psi_2 \quad (11)$$

( $c_1, c_2$  jsou komplexní čísla,  $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F}$ ).

Uvedme si příklady lineárních operátorů, které působí v prostoru funkcí jedné proměnné:

$$\begin{aligned} \mathcal{O} &\equiv 2 ; & \varphi(x) &= 2 \psi(x) \\ \mathcal{O} &\equiv x ; & \varphi(x) &= x \psi(x) \\ \mathcal{O} &\equiv \frac{d}{dx} ; & \varphi(x) &= \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} \end{aligned}$$

nebo v prostoru funkcí  $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$

$$\begin{aligned} \mathcal{O} &\equiv 2 ; & \varphi(x, y, z) &= 2 \psi(x, y, z) \\ \mathcal{O} &\equiv x ; & \varphi(x, y, z) &= x \psi(x, y, z) \\ \mathcal{O} &\equiv \frac{\partial}{\partial x} ; & \varphi(x, y, z) &= \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} \quad (x\text{-ová složka symbolického operátoru } \nabla ; \text{dod.E}) \\ \mathcal{O} &\equiv \nabla^2 \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} ; & \varphi(x, y, z) &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \\ & & & (\text{Laplaceův operátor}) \end{aligned}$$

Za příklad nelineárního operátoru nám může posloužit třeba  $\sigma \equiv \sqrt{\quad}$   
 $(\sqrt{c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2} \neq c_1 \sqrt{\psi_1} + c_2 \sqrt{\psi_2})$ .

Požadavek, aby operátory s nimiž budeme dále pracovat, byly lineární, je opět důsledkem přijetí principu superpozice.

Součinem dvou operátorů -  $\sigma_1 \sigma_2$  - rozumíme operátor  $\sigma$ , jehož působení na  $\psi \in \mathcal{F}$  dá funkci  $\varphi \in \mathcal{F}$ , kterou obdržíme tak, že na  $\psi$  necháme působit  $\sigma_2$  a na takto získanou funkci pak ještě  $\sigma_1$  (operátory působí v pořadí zprava doleva):

$$\sigma = \sigma_1 \sigma_2 \quad \text{jestliže} \quad \sigma \psi = \varphi, \quad \text{přičemž} \quad \varphi = \sigma_1(\sigma_2 \psi)$$

Součin operátorů není obecně komutativní, tzn., že obecně

$$\sigma_1 \sigma_2 \neq \sigma_2 \sigma_1$$

Výraz

$$[\sigma_1, \sigma_2] = \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_2 \sigma_1 \quad (12)$$

je tzv. komutátor operátorů  $\sigma_1, \sigma_2$  ( $[\sigma_1, \sigma_2]$  je operátor !)

Uveďme si příklad. Nechť  $\sigma_1 \equiv x$ ,  $\sigma_2 \equiv \frac{d}{dx}$  a  $\psi(x)$  je libovolná funkce z prostoru  $\mathcal{F}$ .

$$\sigma_1 \sigma_2 \psi(x) = x \left( \frac{d}{dx} \psi(x) \right) = x \frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\sigma_2 \sigma_1 \psi(x) = \frac{d}{dx} (x \psi(x)) = \psi(x) + x \frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$[\sigma_1, \sigma_2] \psi(x) = x \frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x) - x \frac{d\psi(x)}{dx} = -\psi(x)$$

Protože  $\psi(x)$  byla libovolná funkce z  $\mathcal{F}$ , můžeme psát

$$\left[ x, \frac{d}{dx} \right] = -1 \quad (13)$$

( $-1$  je operátor, který jen mění znaménko funkce, tj. násobí ji  $-1$ ).

#### Vlastní funkce a vlastní hodnoty operátoru

Působí-li nějaký operátor  $\sigma$  na funkci  $\psi \in \mathcal{F}$ , získáme obecně jinou funkci  $\varphi = \sigma \psi$  z prostoru  $\mathcal{F}$ . Ke každému operátoru  $\sigma$  však v  $\mathcal{F}$  existuje podmnožina funkcí, pro něž se působení  $\sigma$  redukuje jen na násobení konstantou, takže platí

$$\sigma \psi = \lambda \psi \quad (14)$$

Takové funkce nazýváme vlastními funkcemi operátoru  $\sigma$ ; odpovídající konstanty  $\lambda$ , které přísluší k vlastním funkcím, se nazývají vlastní hodnoty operátoru  $\sigma$ .

Tak např.  $\psi(x) = e^{kx}$  je vlastní funkcí operátoru  $\mathcal{O} = \frac{d}{dx}$  ( nebo  $\frac{\partial}{\partial x}$  )  
 již přísluší vlastní hodnota  $k$ , neboť

$$\frac{d}{dx} ( e^{kx} ) = k e^{kx} \quad (15)$$

Jiný příklad:  $\sin(kx)$  nebo  $\cos(kx)$  a  $(-k^2)$  jsou vlastními funkcemi  
 a hodnotami operátoru  $(d^2/dx^2)$  nebo  $(\partial^2/\partial x^2)$ .

K danému operátoru  $\mathcal{O}$  může příslušet obecně nekonečný počet vlastních funkcí a hodnot ( je-li  $\mathcal{F}$  prostor nekonečné dimenze). Označme  
lineárně nezávislé vlastní funkce operátoru  $\mathcal{O}$

$$u_1, u_2, \dots, u_n, \dots \quad (16a)$$

a jim odpovídající vlastní hodnoty

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots \quad (16b)$$

Lineární nezávislost vlastních funkcí zdůrazňujeme proto, abychom zabránili nejednoznačnosti; každá funkce  $cu_n$  ( $c$  je libovolná konstanta) je totiž také vlastní funkcí  $\mathcal{O}$ , již přísluší vlastní hodnota  $\lambda_n$ . Vynásobíme-li totiž obě strany (14) konstantou  $c$ , dostaneme

$$\mathcal{O}(cu_n) = \lambda_n(cu_n) \quad .$$

Může se však stát, že více lineárně nezávislým vlastním funkcím přísluší táž vlastní hodnota; potom říkáme, že vlastní hodnota je degenerovaná ( nebo, že stav je degenerovaný ). Abychom tuto skutečnost zachytili, vezmeme za základ indexy, které rozlišují vlastní hodnoty. Vlastní funkce, příslušející k dané vlastní hodnotě, pak rozlišíme dalším indexem; místo (16) budeme tedy psát

$$\underbrace{u_1^{(1)}, \dots, u_1^{(g_1)}}_{\lambda_1}, \underbrace{u_2^{(1)}, \dots, u_2^{(g_2)}}_{\lambda_2}, \dots, \underbrace{u_n^{(1)}, \dots, u_n^{(g_n)}}_{\lambda_n}, \dots \quad (17)$$

a říkat, že vlastní hodnota  $\lambda_n$  je  $g_n$ -násobně degenerovaná. Jestliže  $g_n = 1$ , vlastní hodnota  $\lambda_n$  je nedegenerovaná.

Množina vlastních hodnot  $\lambda_1, \dots, \lambda_n, \dots$  daného operátoru  $\mathcal{O}$  se nazývá spektrum operátoru  $\mathcal{O}$ . Dosud jsme mlčky předpokládali, že vlastní hodnoty a funkce se dají rozlišit diskretně se měnícím indexem; v takovém případě budeme mluvit o diskretním spektru. Běžný je však i případ, kdy se "index mění spojitě", tzn, že je to spojitě se měnící proměnná; označíme-li ji  $k$ , nahradí se v předcházejících výrazech  $u_n$  funkcí  $u(k)$  a  $\lambda_n$  funkcí  $\lambda(k)$ . V takovémto případě se mluví o spojitém spektru (příkladem mohou být funkce (15)). Je možné, aby jediný operátor měl v určitém intervalu indexů spektrum diskretní, a v jiném, spektrum spojitě.

### 1.3) Hermitovské operátory

Protože v kvantové mechanice užíváme operátory k reprezentaci měřitelných fyzikálních veličin a postulujeme, že výsledkem měření mohou být jen jejich vlastní hodnoty, musíme se zřejmě omezit jen na lineární operátory (působící v  $\mathcal{F}$ ), jejichž vlastní hodnoty jsou reálné. Výsledkem jednoho měření je totiž vždy reálné číslo (změření komplexní veličiny vyžaduje dvě měření (např. amplitudy + fáze), z nichž získáme reálnou a imaginární část).

Tuto vlastnost mají tzv. hermitovské operátory. Operátor  $\hat{O}$  se nazývá hermitovský, jestliže platí

$$\int (\hat{O}\psi)^* \psi d\tau = \int \psi^* (\hat{O}\psi) d\tau \quad (18a)$$

pro všechna  $\psi \in \mathcal{F}$ .

V Diracově symbolice tuto podmínku zapíšeme (viz(3))

$$\langle \hat{O}\psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}\psi \rangle \quad (18b)$$

Zapsané výrazy představují skalární součin dvou funkcí -  $\psi^*$ ,  $\varphi = \hat{O}\psi$  (resp.  $\varphi^*$ ,  $\psi$ ) pro něž platí  $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$ ; jestliže podle (18)

$$\langle \hat{O}\psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}\psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{O}\psi \rangle \quad (19)$$

znamená to, že s hermitovským operátorem  $\hat{O}$  je integrál (18a) (skalární součin) roven reálnému číslu.

Relace (18) musí platit i pro vlastní funkce  $\hat{O}$ . Protože

$$\hat{O}u_n^{(i)} = \lambda_n u_n^{(i)} \quad \text{a} \quad \hat{O}^{*(i)*} u_n^{(i)*} = \lambda_n^* u_n^{(i)*} \quad (20)$$

dostaneme po dosazení do (18) (kde  $\psi$  nahradíme  $u_n^{(i)}$ )

$$\lambda_n^* \int u_n^{(i)*} u_n^{(i)} d\tau = \lambda_n \int u_n^{(i)*} u_n^{(i)} d\tau$$

takže  $\lambda_n^* = \lambda_n$  a vlastní hodnoty  $\lambda_n$  jsou tedy reálné.

Pro hermitovský operátor  $\hat{O}$ , působící v  $\mathcal{F}$ , platí užitečná věta: jsou-li  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  dvě libovolné funkce z  $\mathcal{F}$ , potom

$$\int (\hat{O}\psi_1)^* \psi_2 d\tau = \int \psi_1^* \hat{O}\psi_2 d\tau \quad (21a)$$

resp.

$$\langle \hat{O}\psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{O}\psi_2 \rangle \quad (21b)$$

Tvrzení (21) se často používá pro definici hermitovského operátoru, místo vztahu (18). Důkaz provedeme takto:  $\psi = \psi_1 + c\psi_2$  ( $c$  je komplexní číslo) patří též do  $\mathcal{F}$  a

$$\begin{aligned} \int \psi^* \hat{O}\psi d\tau &= \int (\psi_1^* + c^* \psi_2^*) \hat{O}(\psi_1 + c\psi_2) d\tau = \\ &= \int \psi_1^* \hat{O}\psi_1 d\tau + |c|^2 \int \psi_2^* \hat{O}\psi_2 d\tau + c \int \psi_1^* \hat{O}\psi_2 d\tau + c^* \int \psi_2^* \hat{O}\psi_1 d\tau \end{aligned}$$

musí být pro libovolné  $c$  reálným číslem; protože první dva sčítance jsou reálná čísla, plyne z toho, že integrál ve 3.sčítanci musí být roven komplexně sdruženému integrálu ve 4.sčítanci, tj. musí platit (21). Vzhledem k platnosti (21), je možné většinou ponechat otevřenu otázku, na kterou funkci ve skalárním součinu působí hermitovský operátor  $\hat{O}$ ; proto se tento skalární součin píše v symetrickém tvaru

$$\langle \hat{O} \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{O} \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{O} | \psi_2 \rangle \quad (22)$$

Protože pro skalární součin platí  $\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$ , musí být

$$\langle \psi_2 | \hat{O} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{O} | \psi_2 \rangle^* \quad (23)$$

Pro vlastní funkce a hodnoty hermitovského operátoru platí několik vět, které jsou užitečné nejen v obecných úvahách, ale i při řešení konkrétních úloh v kvantové mechanice.

Věta o ortogonalitě vlastních funkcí:

jestliže  $u_n^{(i)}$ ,  $u_m^{(j)}$  jsou vlastní funkce hermitovského operátoru  $\hat{O}$ , které přísluší dvěma různým vlastním hodnotám  $\lambda_n, \lambda_m$  ( $n \neq m$ ), potom

$$\int u_n^{(i)*} u_m^{(j)} d\tau = \langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = 0 \quad (24)$$

(  $n \neq m$ ,  $i=1,2,\dots,g_n$ ,  $j=1,2,\dots,g_m$  )

čili: funkce  $u_n^{(i)}$ ,  $u_m^{(j)}$  jsou ortogonální (viz (5)).

Důkaz provedeme snadno. Podle (23)

$$\langle u_n^{(i)} | \hat{O} | u_m^{(j)} \rangle = \langle u_m^{(j)} | \hat{O} | u_n^{(i)} \rangle^*$$

a užitím rovnic (20)

$$\lambda_m \langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = \lambda_n^* \langle u_m^{(j)} | u_n^{(i)} \rangle^* = \lambda_n^* \langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle$$

Vlastní hodnoty jsou však reálné ( $\lambda_n^* = \lambda_n$ ) a proto

$$(\lambda_m - \lambda_n) \langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = 0$$

lze splnit ( pro  $\lambda_n \neq \lambda_m$  ) jen tak, že  $\langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = 0$ .

Vlastní funkce hermitovského operátoru, které přísluší různým vlastním hodnotám, jsou tedy ortogonální. Můžeme něco podobného tvrdit i o souboru funkcí  $u_n^{(i)}$  ( $i = 1, \dots, g_n$ ), které patří ke  $g_n$ -násobně degenerované vlastní hodnotě  $\lambda_n$ ? Víme již, že také každá lineární kombinace

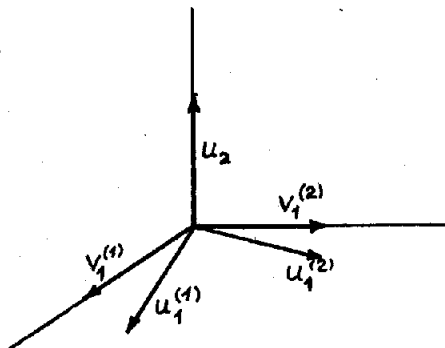
$$v_n = c_1 u_n^{(1)} + c_2 u_n^{(2)} + \dots + c_{g_n} u_n^{(g_n)} \quad (25)$$

je vlastní funkcí  $\hat{O}$ , příslušející k vlastní hodnotě  $\lambda_n$ . Nic nám proto nebrání, vytvořit z  $g_n$  lineárně nezávislých funkcí  $\{u_n\}$  stejný počet nových, lineárně nezávislých, funkcí  $\{v_n\}$  (to znamená napsat  $g_n$  rovnic typu (25) a určit  $c_1, \dots, c_{g_n}$ ) tak, aby platilo

$$\langle v_n^{(i)} | v_m^{(j)} \rangle = \int v_n^{(i)*} \sigma v_m^{(j)} d\tau = 0,$$

jestliže  $i \neq j$  ( $i, j = 1, \dots, g_n$ ).

Této proceduře se říká ortogonalizační proces; k jeho realizaci existuje několik efektivních algoritmů (neřeší se přímo zmíněná soustava rovnic), z nichž nejznámější je Schmidtův ortogonalizační postup [1], [2], [3]. Ortogonalizační postup má názorný geometrický smysl, jak je znázorněno v obr. 45.



Obr. 45.

Nechť funkcím  $u_1^{(1)}$ ,  $u_1^{(2)}$  přísluší též vlastní hodnota  $\lambda_1$ . Obecně

$\langle u_1^{(1)} | u_1^{(2)} \rangle \neq 0$ . Každá lineární kombinace těchto vektorů (tj. všechny vektory v rovině určené  $u_1^{(1)}$ ,  $u_1^{(2)}$ ) je vlastním vektorem s vlastní hodnotou  $\lambda_1$ . Můžeme tedy z nich vždy vybrat dva, např.  $v_1^{(1)}$ ,  $v_1^{(2)}$ , pro něž platí  $\langle v_1^{(1)} | v_1^{(2)} \rangle = 0$ .

Souhrnem:

V obecných úvahách můžeme vždy předpokládat, že pro soubor vlastních funkcí hermitovského operátoru platí

$$\langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij} \quad (26)$$

pro všechna  $n, m, i, j$ , tzn. že vlastní funkce jsou vzájemně ortonormální. V konkrétních výpočtech je automaticky splněna jen ortogonalita plynoucí z výše uvedené věty; normalizaci všech vlastních funkcí a ortogonalitu degenerovaných stavů musíme vždy kontrolovat a podle potřeby provést.

Věta o úplnosti souboru vlastních funkcí hermitovského operátoru

Nejprve uveďme definici: soubor funkcí z prostoru  $\mathcal{F}$  se nazývá úplný, je-li možné ho použít jako bázi v  $\mathcal{F}$  (viz (7)).

Pro kvantovou mechaniku má základní význam věta:

Soubor vlastních funkcí hermitovského operátoru, který působí v  $\mathcal{F}$ , je úplný.<sup>†)</sup>

Protože důkaz této věty není nijak jednoduchý, nebudeme ho provádět a odvodíme si jen velice užitečnou relaci, tzv. podmínku úplnosti souboru vlastních funkcí.

Pro určitost předpokládejme, že prostor  $\mathcal{F}$  je tvořen vlnovými funkcemi závislými jen na  $\vec{r} = (x, y, z)$ ; dále lze vždy předpokládat, že vlastní funkce  $u_n^{(i)}(\vec{r})$  operátoru působícího v  $\mathcal{F}$ , splňují relaci (26). V bázi  $\{u_n^{(i)}(\vec{r})\}$  můžeme pak libovolnou  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$  psát jako superpozici

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^{(i)} u_n^{(i)}(\vec{r}) \quad (27)$$

a týmž postupem, který vedl k (8), vyjádřit

$$c_n^{(i)} = \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle = \int u_n^{(i)*}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\tau' \quad (28)$$

Dosazením (28) do (27) a záměnou sumací a integrace, dostaneme

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \left( \int u_n^{(i)*}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\tau' \right) u_n^{(i)}(\vec{r}) = \\ &= \int \left( \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} u_n^{(i)*}(\vec{r}') u_n^{(i)}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}') d\tau' = \\ &= \int F(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}') d\tau' \end{aligned} \quad (29)$$

Má-li (29) platit pro libovolnou  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ , musí mít funkce  $F(\vec{r}, \vec{r}')$  poněkud zvláštní průběh: musí být rovna nule všady kromě  $\vec{r} = \vec{r}'$ . Takovou funkci zavedl Dirac a nazval ji  $\delta$ -funkce; podrobnosti o ní jsou v dod.C. Porovnáním (29) s definičním vztahem pro  $\delta$ -funkci dostaneme, že

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} u_n^{(i)*}(\vec{r}') u_n^{(i)}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad , \quad (30)$$

což je právě hledaná podmínka úplnosti souboru funkcí  $\{ u_n^{(i)} \}$ .

#### 1.4) Prostor stavových vektorů a Diracova symbolika

Diracovu symboliku jsme v odst.1.1 již použili pro zkrácený zápis skalárního součinu a v odst.1.3 jsme ji rozšířili na zápis maticových prvků hermitovských operátorů. Smysl této symboliky je však hlubší a souvisí s obecnějším pojetím formalismu kvantové mechaniky. Pokusíme se zde naznačit alespoň základní myšlenky.

Viděli jsme, že v prostoru vlnových funkcí  $\mathcal{F}$  (pro danou kvantovou soustavu) můžeme vždy vybrat ortonormální bázi a v ní rozložit libovolnou funkci  $\psi \in \mathcal{F}$  podle (7). Koeficienty  $c_i$ , tj. souřadnice  $\psi$  ve zvolené bázi, jednoznačně určují  $\psi$  a tedy i příslušný stav soustavy. Soubor souřadnic  $c_1, c_2, \dots, c_i, \dots$  je možné chápat jako souřadnice nějakého vektoru (9). Protože  $c_i$  mohou být komplexní a může jich být nekonečně mnoho, byly by to, v nejobecnějším případě, souřadnice vektoru z nějakého komplexního lineárního vektorového prostoru nekonečné dimenze (dod.B). Ostatně i samotnou vlnovou funkci můžeme  chápat jako soubor složek vektoru v nějaké bázi; index rozlišující souřadnice se zde (na rozdíl od  $i$  u  $c_i$ ) mění spojitě a je reprezentován nezávisle proměnnými

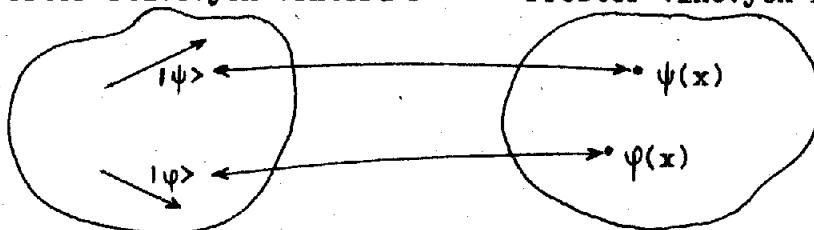
na nichž funkce závisí. Např. pro funkci  $\psi(x)$  máme místo indexu  $i$ , spojitě se měnící  $x$  a analogicky k (9) bychom mohli psát

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi(x) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \downarrow \begin{matrix} x \\ \text{index} \end{matrix} \quad (31)$$

Uvědomíme-li si tyto skutečnosti, nemusí nás již překvapit, že v obecném formalismu kvantové mechaniky se postulují:

|| stav kvantové soustavy je reprezentován vektorem z nějakého abstraktního lineárního vektorového prostoru  $\mathcal{E}$ .

Svémi vlastnostmi ( k nimž patří např. komplexní souřadnice vektorů a obecně nekonečná dimenze) odpovídá  $\mathcal{E}$  prostoru, který se v matematice nazývá Hilbertův prostor. Každá fyzikální soustava má svůj prostor  $\mathcal{E}$  (stejně jako měla  $\mathcal{F}$ ), tvořený všemi vektory, které reprezentují možné stavy soustavy. Je pak jen věci volby báze v tomto prostoru, jakými souřadnicemi se vektory z  $\mathcal{E}$  budou vyjadřovat. K nejběžnějším patří tzv. souřadnicová reprezentace, kdy vektory z  $\mathcal{E}$  se reprezentují odpovídajícími vlnovými funkcemi z  $\mathcal{F}$ . Mohli bychom také říci, že jde o zobrazení vektorového prostoru  $\mathcal{E}$  na prostor vlnových funkcí  $\mathcal{F}$  (obr.46).

Prostor stavových vektorů  $\mathcal{E}$ Prostor vlnových funkcí  $\mathcal{F}$ 

Obr.46

(Zvědavějšímu čtenáři prozradíme, že báze v níž se  $|\psi\rangle$  z  $\mathcal{E}$  zobrazí soubohem souřadnic(funkcí)  $\psi(x)$  (31), je tvořena Diracovými  $\delta$ -funkcemi; podrobnosti viz např. v [13].)

Přejdeme nyní k Diracově symbolice. Pro obecný vektor z prostoru  $\mathcal{E}$  zavedl Dirac označení

$$| \rangle \quad (32)$$

a nazval ho ket-vektor.

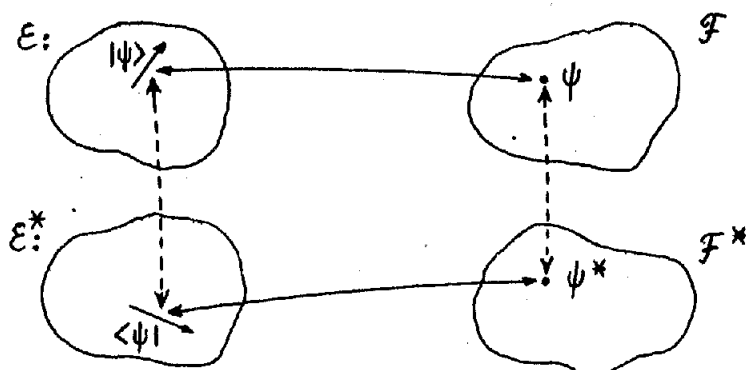
Chceme-li rozlišit jednotlivé vektory z  $\mathcal{E}$ , musíme je nějak označit a toto označení pak zapíšeme mezi  $|$  a  $>$ . Např místo  $\vec{c}$  bychom mohli psát  $|c\rangle$ , místo  $\vec{\psi}$  v (31)  $|\psi\rangle$ , místo  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$ , ... třeba jen  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ , ...

( $\psi$  je zde vlastně zbytečné) a místo  $|u_n^{(1)}\rangle$  jen  $|n,1\rangle$  apod. Je snad už jasné, že např  $|\psi\rangle$  je označení pro jeden z vektorů  $\mathcal{E}$  a  $\psi$  zde nezávisí samozřejmě na žádných proměnných.

Prostor  $\mathcal{F}$  je tvořen vlnovými funkcemi  $\psi$ . K vyjádření skalárního součinu jsme však potřebovali i funkce komplexně sdružené -  $\psi^*$ . Množina



všech funkcí  $\psi^*$  vytváří opět prostor, který označíme  $\mathcal{F}^*$ . Prostor  $\mathcal{F}^*$  je jednoznačně určen prostorem  $\mathcal{F}$  (ke každé  $\psi$  z  $\mathcal{F}$  máme  $\psi^*$  v  $\mathcal{F}^*$ ). Podobně jako  $\mathcal{F}$  je reprezentací vektorového prostoru  $\mathcal{E}$ , je také  $\mathcal{F}^*$  reprezentací nějakého lineárního vektorového prostoru  $\mathcal{E}^*$ ;  $\mathcal{E}^*$  je tzv. duální prostor k  $\mathcal{E}$  a je prostorem  $\mathcal{E}$  jednoznačně určen. Vzájemné vztahy prostorů  $\mathcal{F}$ ,  $\mathcal{F}^*$ ,  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{E}^*$  jsou schematicky znázorněny v obr. 47.



Obr. 47.

O vektoru  $\langle \psi |$  z  $\mathcal{E}^*$  se říká, že je hermitovsky sdružený s  $|\psi\rangle$  z  $\mathcal{E}$ .

Nebudeme zde uvádět přesnou definici duálního prostoru  $\mathcal{E}^*$  (viz např. [13]), ale omezíme se pouze na některé prakticky využívané závěry. Předně uveďme opět Diracovo značení vektorů z  $\mathcal{E}^*$ : obecný vektor z  $\mathcal{E}^*$  se značí symbolem

$$\langle \quad | \quad \quad \quad (33)$$

a nazývá se podle Diraca bra-vektor. Konkrétní bra-vektory se opět rozlišují symboly zapsanými mezi  $\langle$  a  $|$ . Původ "záhadných" názvů bra- a ket-vektor je prostý; anglicky je závorka: bracket

$$\langle \quad | \quad \quad \rangle$$

Známe-li souřadnice ket-vektoru v nějaké bázi, potom souřadnice odpovídajícího bra-vektoru jsou veličiny komplexně sdružené a bra-vektor zapisujeme jako jednořádkovou matici; např. k  $|c\rangle$  (9) a  $|\psi\rangle$  (31) máme bra-vektory

$$\langle c | = ( \underset{1}{c_1^*}, \underset{2}{c_2^*}, \dots, \underset{i}{c_i^*}, \dots ) \quad \text{index} \quad (34a)$$

$$\langle \psi | = ( \dots \underset{x}{\psi^*(x)} \dots ) \quad \text{index} \quad (34b)$$

Skalární součin vektoru  $\langle b | = (b_1^*, \dots, b_i^*, \dots)$  s vektorem  $|c\rangle$  pak dostaneme ve shodě s definicí, podle běžných pravidel maticového násobení

$$\langle b | c \rangle = (b_1^*, b_2^*, \dots, b_i^*, \dots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_j b_j^* c_j \quad (35a)$$

V případě "spojitě proměnného indexu" dostáváme výraz (3) (sumace přejde v integraci přes všechny nezávisle proměnné); pro jednu nezávisle proměnnou  $x$ :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \left( \dots \underbrace{\psi^*(x)}_x \dots \right) \left( \begin{array}{c} \vdots \\ \psi(x) \\ \vdots \end{array} \right) \Big|_x = \int \psi^*(x) \psi(x) dx \quad (35b)$$

Podobně i ostatní definice a tvrzení, uvedené v prostorech  $\mathcal{F}$ ,  $\mathcal{F}^*$  je možné chápat jako konkrétní reprezentaci (zobrazení) veličin a operací v prostorech  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{E}^*$ .

Uvedeme je již jen heslovitě.

Operátor  $\sigma$ , působící v  $\mathcal{E}$ , přiřazuje každému ket-vektoru  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  nějaký  $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$  (srov.(10))

$$|\varphi\rangle = \sigma |\psi\rangle \quad (36)$$

přičemž analogicky k (11)

$$\sigma(c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) = c_1 \sigma |\psi_1\rangle + c_2 \sigma |\psi_2\rangle \quad (37)$$

#### Vlastní vektory a vlastní hodnoty

$|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  je vlastním vektorem operátoru  $\sigma$ , jestliže (viz(14))

$$\sigma |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad (38)$$

přičemž  $\lambda$  je vlastní hodnota příslušející k  $|\psi\rangle$ .

Vlastní vektory, které odpovídají funkcím (16), bychom mohli psát:

$|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle, \dots$ ; nemůže-li dojít k záměně s jinými, stejně indexovanými, ket-vektory, může být dostačující zápis:  $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ . Odpovídající vlastní hodnoty opět budou  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$ . V případě degenerovaných stavů přepíšeme (17), takto:

$$\underbrace{|u_1^{(1)}\rangle, \dots, |u_1^{(g_1)}\rangle}_{\lambda_1}, \underbrace{|u_2^{(1)}\rangle, \dots, |u_2^{(g_2)}\rangle}_{\lambda_2}, \dots, \underbrace{|u_n^{(1)}\rangle, \dots, |u_n^{(g_n)}\rangle}_{\lambda_n}, \dots \quad (39)$$

a když nemůže dojít k záměně (písmeno "u" již nic nerozlišuje), bude dostačující zápis

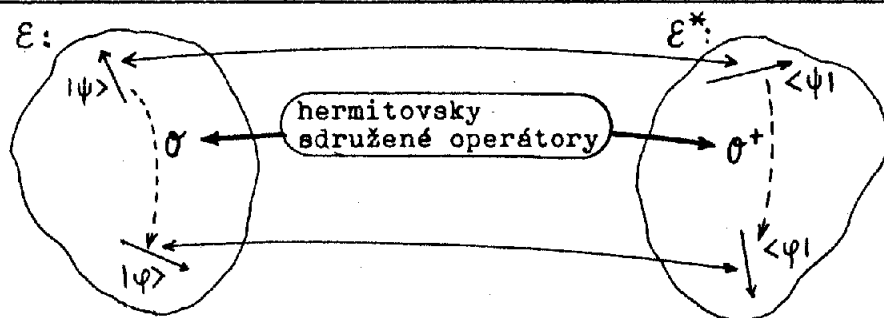
$$\underbrace{|1,1\rangle, \dots, |1,g_1\rangle}_{\lambda_1}, \underbrace{|2,1\rangle, \dots, |2,g_2\rangle}_{\lambda_2}, \dots, \underbrace{|n,1\rangle, \dots, |n,g_n\rangle}_{\lambda_n}, \dots$$

#### Operátory hermitovsky sdružené a hermitovské

Ket-vektorům  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$  odpovídají v duálním prostoru  $\mathcal{E}^*$  bra-vektory  $\langle\psi|, \langle\varphi|$ . Operátor, který v  $\mathcal{E}^*$  prostoru převádí  $\langle\psi|$  ve  $\langle\varphi|$  označíme  $\sigma^+$ , nazveme ho operátor hermitovsky sdružený s operátorem  $\sigma$  a analogií rovnice (36) v prostoru  $\mathcal{E}^*$  bude

$$\langle\varphi| = \langle\psi| \sigma^+ \quad (40)$$

Podle běžné konvence se operátory působící na bra-vektory zapisují vpravo od bra-vektorů a je-li jich více (součin operátorů), působí v pořadí zleva doprava. Vztah  $\sigma$  a  $\sigma^+$  je znázorněn na obr.48.



Obr. 48.

Uvědomme si, že ze způsobu zavedení  $\sigma^+$  vyplývá

$$\langle \sigma \psi | = \langle \psi | = \langle \psi | \sigma^+ \quad (41)$$

jestliže  $\sigma \psi$  je označení pro vektor získaný působením  $\sigma$  na  $\psi$  (což je vektor označený  $\psi$ ).

Skalární součiny vystupující v definici hermitovského operátoru (18) nyní můžeme psát

$$\langle \sigma \psi | \psi \rangle = (\langle \psi | \sigma^+) | \psi \rangle \quad (42a)$$

$$\langle \psi | \sigma \psi \rangle = \langle \psi | (\sigma | \psi \rangle) \quad (42b)$$

Jestliže

$$\sigma^+ = \sigma \quad (43a)$$

tzn., že operátor  $\sigma$  je roven operátoru, který je s ním hermitovsky sdružen, potom v (42) je lhostejné, zda  $\sigma$  působí vpravo nebo vlevo, kulaté závorky jsou zbytečné a můžeme psát (viz (18)+(19))

$$\langle \sigma \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \sigma \psi \rangle = \langle \psi | \sigma | \psi \rangle \quad (43b)$$

Operátor, který splňuje podmínku (43), se nazývá hermitovský operátor (srov.(18)). Pro hermitovský operátor také platí (23), tj. pro libovolné  $\langle \psi_1 |, \langle \psi_2 | \in E^*$  a s nimi sdružené  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in E$

$$\langle \psi_1 | \sigma | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \sigma | \psi_1 \rangle^* \quad (44)$$

Ortonormální báze v  $E$  a podmínka úplnosti

Nechť  $\{|u_n^{(i)}\rangle\}$  (nebo  $\{|n,i\rangle\}$ ) jsou vlastní vektory hermitovského operátoru  $\sigma$ , takže (o značení viz (39))

$$\sigma |u_n^{(i)}\rangle = \lambda_n |u_n^{(i)}\rangle \quad (\sigma |n,i\rangle = \lambda_n |n,i\rangle) \quad (45)$$

Soubor vlastních vektorů je úplný, tzn., že vektory mohou být použity jako báze v  $E$  (srov. obr.44); vybrány mohou být vždy tak, aby platilo (viz (26))

$$\langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{nm} \quad (\langle n,i | m,j \rangle = \delta_{ij} \delta_{nm}) \quad (46)$$

takže tvoří ortonormální bázi v  $\mathcal{E}$ .

Libovolný ket-vektor  $|\psi\rangle$  pak lze psát (srov.(27))

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^{(i)} |u_n^{(i)}\rangle \quad \langle\psi| = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_{n,i} \langle n,i| \quad (47)$$

kde

$$c_n^{(i)} = \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle \quad (c_{n,i} = \langle n,i | \psi \rangle) \quad (48)$$

Dosaďme (48) do (47) a upravme takto ( $c_n^{(i)}$  je číslo !)

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle |u_n^{(i)}\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle = \\ &= \left( \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle \langle u_n^{(i)}| \right) |\psi\rangle = \mathcal{P} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (49)$$

Výraz v kulatých závorkách (označený  $\mathcal{P}$ ) je operátor, jehož působením na  $|\psi\rangle$  máme dostat opět  $|\psi\rangle$  pro libovolný ket-vektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ . Aby to bylo možné, musí být zřejmě  $\mathcal{P} \equiv \mathbb{1}$  (jednotkový operátor). Dostáváme tak ekvivalent podmínky úplnosti (30).

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle \langle u_n^{(i)}| = \mathbb{1} \quad \left( \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |n,i\rangle \langle n,i| = \mathbb{1} \right) \quad (50)$$

Toto vyjádření jednotkového operátoru se často s výhodou používá při úpravách výrazů, které se při výpočtech v kvantové mechanice objevují.

### 1.5) Matice v kvantové mechanice

Reprezentaci ket-vektoru sloupcovou maticí a bra-vektoru řádkovou maticí jsme již uvedli; tyto matice jsou tvořeny souřadnicemi vektoru v nějaké ortonormální bázi. Co ještě potřebujeme, je vyjádření operátoru v takové formě, abychom jeho působením na tyto matice dostávali vektory v témže maticovém tvaru.

Mějme ortonormální bázi tvořenou vlastními vektory nějakého hermitovského operátoru  $\hat{O}$ . Pro jednoduchost a přehlednost indexování, předpokládejme, že všechny stavy jsou nede degenerované (v (45)-(50) odpadá index  $i$ ;  $g_n = 1$  pro všechna  $n$ ), takže ve zkráceném zápisu

$$\hat{O} |n\rangle = \lambda_n |n\rangle \quad (51)$$

Je-li  $\hat{A}$  libovolný hermitovský operátor (působící v témže prostoru jako operátor  $\hat{O}$ ), potom bude zřejmě jednoznačně určen, budeme-li znát všechny veličiny (obecně komplexní čísla)

$$A_{mn} = \langle m | \mathcal{A} | n \rangle \quad (52)$$

Tato čísla uspořádáme do tvaru čtvercové matice (může být i nekonečná)

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad (53a)$$

Protože  $\mathcal{A}$  je hermitovský operátor, platí podle (44)

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad (i, j=1, 2, \dots) \quad (53b)$$

Matice, jejíž prvky vyhovují vztahu (53b), se nazývá hermitovská.  
Matice (53a) je maticovou reprezentací operátoru  $\mathcal{A}$  v bázi vlastních vektorů operátoru  $\mathcal{O}$ . Nechť v této bázi mají ket-vektory  $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$  vyjádření

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (54)$$

kde  $b_n = \langle n | \varphi \rangle$  a  $c_n = \langle n | \psi \rangle$  ( $n=1, 2, \dots$ ).

Nechť dále platí (působení  $\mathcal{A}$  na  $|\psi\rangle$  dá  $|\varphi\rangle$ )

$$|\varphi\rangle = \mathcal{A} |\psi\rangle \quad (55)$$

Udělejme skalární součin levé i pravé strany s bra-vektorem  $\langle m |$ , který v  $\mathcal{E}^*$  odpovídá vlastnímu vektoru  $|m\rangle \in \mathcal{E}$ ; dostaneme

$$\langle m | \varphi \rangle = \langle m | \mathcal{A} | \psi \rangle \quad (56)$$

Na pravé straně se nic nezmění, necháme-li před  $\mathcal{A}$  působit na  $|\psi\rangle$  ještě jednotkový operátor ( $\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ ). Dosadíme-li ho ve tvaru (50), bude platit (je to příklad zmíněného využití při úpravách výrazů):

$$\langle m | \varphi \rangle = \langle m | \mathcal{A} \cdot \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle m | \mathcal{A} \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) | \psi \rangle = \sum_n \langle m | \mathcal{A} | n \rangle \langle n | \psi \rangle \quad (57a)$$

což v označení (52), (54) je

$$b_m = \sum_n A_{mn} c_n \quad (57b)$$

Dostáváme tedy sloupcovou matici, odpovídající  $|\varphi\rangle$ , skutečně běžným maticovým násobením matic reprezentujících  $\mathcal{A}$  a  $|\psi\rangle$ .

A jak získáme matici reprezentující součin operátorů? Nechť hermitovské operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  jsou reprezentovány v uvedené bázi maticemi s prvky

$$A_{ij} = \langle i | \mathcal{A} | j \rangle \quad ; \quad B_{mn} = \langle m | \mathcal{B} | n \rangle \quad (57)$$

Postupným působením  $\mathcal{B}$  a  $\mathcal{A}$  na  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  nechť dostaneme  $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$  (maticová reprezentace  $|\psi\rangle$  a  $|\varphi\rangle$  je (54) )

$$|\varphi\rangle = \mathcal{A} \mathcal{B} |\psi\rangle \quad (58a)$$

Stejně jako v (56), udělejme skalární součin s  $\langle k | \in \mathcal{E}^*$ :

$$\langle k | \varphi \rangle = \langle k | \mathcal{A} \mathcal{B} | \psi \rangle \quad (59)$$

Nyní vsuneme do výrazu na pravé straně dva jednotkové operátory (50), takže

$$\begin{aligned} \langle k | \varphi \rangle &= \langle k | \mathcal{A} \cdot \mathbb{1} \cdot \mathcal{B} \cdot \mathbb{1} | \psi \rangle = \\ &= \langle k | \mathcal{A} \left( \sum_j |j\rangle \langle j| \right) \mathcal{B} \left( \sum_m |m\rangle \langle m| \right) | \psi \rangle = \\ &= \sum_j \sum_m \langle k | \mathcal{A} | j \rangle \langle j | \mathcal{B} | m \rangle \langle m | \psi \rangle \end{aligned} \quad (60a)$$

nebo

$$b_k = \sum_j \sum_m A_{kj} B_{jm} c_m \quad (60b)$$

Označíme-li

$$\mathcal{C} = \mathcal{A} \mathcal{B} \quad ( \text{ s prvky } C_{km} = \langle k | \mathcal{C} | m \rangle ) \quad (61)$$

potom

$$|\varphi\rangle = \mathcal{C} |\psi\rangle \quad (58b)$$

podle (57)

$$b_k = \sum_m C_{km} c_m \quad (62)$$

a porovnáním s (60)

$$C_{km} = \sum_j A_{kj} B_{jm} \quad (63)$$

Prvky matice reprezentující součin operátorů tedy opět získáme podle standardního pravidla pro součin dvou matic.

Problém vlastních vektorů a vlastních hodnot v maticovém tvaru

Mějme operátor  $\mathcal{A}$  vyjádřený maticí (53) a hledejme jeho vlastní vektory a vlastní hodnoty. Hledané vlastní vektory  $|\varphi\rangle$  rozložíme v bázi použité pro  $\mathcal{A}$  a zapíšeme ve tvaru (54). Rovnice pro vlastní hodnoty a vlastní vektory je

$$\mathcal{A} |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle \quad (64)$$

a dává, po dosazení  $\mathcal{A}$  a  $|\varphi\rangle$  v maticovém tvaru, soustavu algebraických lineárních rovnic

$$\sum_j A_{ij} b_j = \lambda b_i \quad (i, j = 1, 2, \dots) \quad (65a)$$

pro souřadnice hledaných vlastních vektorů  $|\varphi\rangle$ . Převedeme-li v (65a) členy  $\lambda b$  na levou stranu, má soustava rovnic tvar

$$\begin{array}{rcl}
 (A_{11} - \lambda)b_1 + A_{12}b_2 + \dots + A_{1n}b_n + \dots & = & 0 \\
 A_{21}b_1 + (A_{22} - \lambda)b_2 + \dots + A_{2n}b_n + \dots & = & 0 \\
 \vdots & & \vdots \\
 A_{n1}b_1 + A_{n2}b_2 + \dots + (A_{nn} - \lambda)b_n + \dots & = & 0
 \end{array} \quad (65b)$$

nebo v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix} (A_{11} - \lambda) & A_{12} & \dots & A_{1n} & \dots \\ & A_{21} & (A_{22} - \lambda) & \dots & A_{2n} & \dots \\ & \vdots & \vdots & & \vdots & \\ & A_{n1} & A_{n2} & \dots & (A_{nn} - \lambda) & \dots \\ & \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix} = 0 \quad (65c)$$

To je soustava homogenních (bez pravé strany) algebraických rovnic, která má netriviální řešení (tj. řešení odlišné od  $b_1=b_2=\dots=b_n=\dots=0$ )

pouze tehdy, když determinant soustavy je roven nule (což pak znamená, že některé rovnice jsou navzájem závislé a tedy vlastně nadbytečné). Obecně může být rovnic nekonečně mnoho (závisí to na dimenzi prostoru, tj. počtu vektorů báze), což jsme také vyjádřili v zápise (65).

Je-li rovnic  $n$ , potom podmínka pro existenci netriviálního řešení je

$$\text{Det}(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (66a)$$

Rozvedeme-li determinant způsobem známým z algebry (dod. A) a uspořádáme členy podle mocnin  $\lambda$ , dostaneme rovnici  $n$ -tého řádu pro

$$\lambda^n + k_1 \lambda^{n-1} + \dots + k_{n-1} \lambda + k_n = 0 \quad (66b)$$

kde koeficienty  $k_1, \dots, k_n$  jsou výrazy obsahující maticové prvky  $A_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ ).

Rovnice (66) má podle základní věty algebry právě  $n$  kořenů - vlastních hodnot matice  $A$  (operátoru  $\mathcal{A}$ ):

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \quad (67a)$$

Postupným dosazováním těchto vlastních hodnot do soustavy rovnic (65) a řešením získaných rovnic, obdržíme ke každé vlastní hodnotě odpovídající vlastní vektor:

$$k \quad \lambda_i \text{ bude patřit } |\varphi_i\rangle = \begin{pmatrix} b_1^{(i)} \\ b_2^{(i)} \\ \vdots \\ b_n^{(i)} \end{pmatrix} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (67b)$$

Pro nekonečný počet rovnic ( $n \rightarrow \infty$ ) je snad již zobecnění (alespoň formálně) zřejmé.

V maticové reprezentaci operátorů a vektorů se tedy základní úloha kvantové mechaniky - hledání vlastních hodnot (spektra) a vlastních vektorů nějakého hermitovského operátoru - převádí na algebraické úlohy.

Za upozornění ještě stojí, že každý operátor je ve vlastní reprezentaci (tzn, že k maticovému vyjádření (53) použijeme bázi z vlastních vektorů tohoto operátoru) diagonální.

Skutečně: jestliže platí (srov.(51)-(53))

$$A |n\rangle = \lambda_n |n\rangle \quad (68a)$$

a vlastní vektory jsou vybrány tak, aby platilo

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn} \quad (m, n = 1, 2, \dots) \quad (68b)$$

potom

$$A_{ij} = \langle i | \underbrace{A}_{=\lambda_j |j\rangle} |j\rangle = \lambda_j \langle i | j \rangle = \lambda_j \delta_{ij} \quad (69a)$$

takže matice A má tvar

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n & \ddots \end{pmatrix} \quad (69b)$$

Ve vlastní reprezentaci je tedy operátor vyjádřen diagonální maticí, jejíž diagonální prvky jsou rovny jeho vlastním hodnotám. Proto se o hledání vlastních hodnot matice (operátoru) často také mluví jako o diagonalizaci matice (tj o převedení matice nějakou transformací na diagonální tvar (69b)).

Ponechávám již na čtenáři aby, jako velmi hodnotné cvičení, zopakoval celý tento odstavec pro případ, že některé vlastní hodnoty operátoru jsou degenerované.



## 2. Základní postuláty kvantové mechaniky

V tomto odstavci uvedeme výčet základních postulátů kvantové mechaniky, doplněný jen několika vysvětlujícími poznámkami. Některé z postulátů byly již uvedeny (i když třeba jen implicitně a kvalitativně) a diskutovány v kap. II, III. Aplikacím zde uvedených postulátů na některé základní úlohy z oblasti mikrosvětla, je pak věnován téměř celý zbytek textu (především pak připravovaný II.díl skriptu).

Formulací postulátů uvedeme pomocí pojmů zavedených v předchozím odst. 1.4 (prostor stavových vektorů  $\mathcal{E}$ , stavové ket-vektory, atd). Student, kterému tato obecná, na konkrétní reprezentaci kvantové mechaniky nezávislá, terminologie činí ještě potíže, může si při prvním čtení místo termínů: stavový vektor (ket-vektor) a prostor  $\mathcal{E}$ , dosazovat (snad) důvěrněji známé pojmy: vlnová funkce a prostor vlnových funkcí  $\mathcal{F}$ ; symbolika by přitom neměla činit potíže, neboť jsme Diracův způsob zápisu skalárního součinu a maticových prvků zavedli i pro vlnové funkce.

### Postulát o určení stavu kvantové soustavy

#### 1. postulát

V daném čase  $t_0$  je stav fyzikální soustavy určen stavovým vektorem  $|\psi(t_0)\rangle$  z prostoru  $\mathcal{E}$ .

Poznámky:

(a) Protože prostor stavových vektorů dané soustavy je lineárním vektorovým prostorem, je v 1. postulátu implicitně obsažen i princip superpozice.

(b) Kolineární (rovnoběžné) ket-vektory z  $\mathcal{E}$ , tj vektory  $|\psi_1(t_0)\rangle$ ,  $|\psi_2(t_0)\rangle$  pro něž platí  $|\psi_2(t_0)\rangle = c |\psi_1(t_0)\rangle$  ( $c$  je konstanta), reprezentují též stav soustavy. Aby byl výběr jednoznačný (až na fázi), vybíráme normalizované ket-vektory, pro něž  $\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$ .

### Postulát o reprezentaci měřitelných veličin

#### 2. postulát

Každá měřitelná fyzikální veličina  $A$  je reprezentována hermitovským operátorem  $\hat{A}$ , který působí v prostoru  $\mathcal{E}$ .

### Dva postuláty o měření fyzikálních veličin

#### 3. postulát

Jediným možným výsledkem měření veličiny  $A$ , je některá z vlastních hodnot operátoru  $\hat{A}$ , který tuto veličinu reprezentuje.

Poznámky:

(a) Protože výsledkem měření může být jen reálné číslo, museli jsme se omezit na třídu lineárních operátorů, jejichž vlastní hodnoty jsou reálné; tuto vlastnost mají právě hermitovské operátory.

(b) Rovnice pro vlastní vektory a hodnoty (srov.(14),(38)) je

$$\mathcal{A}|u\rangle = a|u\rangle \quad (70)$$

Jejím řešením získáme vlastní vektory a hodnoty (srov.(39))

$$\underbrace{|u_1^{(1)}\rangle, \dots, |u_1^{(g_1)}\rangle}_{a_1}, \underbrace{|u_2^{(1)}\rangle, \dots, |u_2^{(g_2)}\rangle}_{a_2}, \dots, \underbrace{|u_n^{(1)}\rangle, \dots, |u_n^{(g_n)}\rangle}_{a_n}, \dots \quad (71)$$

kde  $g_n$  ( $n=1,2,\dots$ ) značí stupeň degenerace  $n$ -tého stavu (vlastní hodnoty).

Vlastní hodnoty a funkce vyhovují rovnici

$$\mathcal{A}|u_n^{(i)}\rangle = a_n|u_n^{(i)}\rangle \quad (72)$$

( $n=1,2,\dots$  ;  $i=1,2,\dots,g_n$ ).

#### 4. postulát

Je-li na soustavě, která je ve stavu určeném normalizovaným stavovým vektorem  $|\psi\rangle$ , měřena veličina  $A$ , potom pravděpodobnost, že výsledkem měření bude vlastní hodnota  $a_n$  operátoru  $\mathcal{A}$ , je

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^{(i)} | \psi \rangle|^2, \quad (73)$$

kde  $g_n$  je stupeň degenerace hodnoty  $a_n$  a  $|u_n^{(1)}\rangle, \dots, |u_n^{(g_n)}\rangle$  je soubor ortonormálních vlastních vektorů operátoru  $\mathcal{A}$ , které přísluší vlastní hodnotě  $a_n$ .

Poznámky:

(a) Soubor vlastních vektorů operátoru  $\mathcal{A}$  (71) můžeme použít jako bázi v níž rozložíme  $|\psi\rangle$ :

$$|\psi\rangle = c_1^{(1)}|u_1^{(1)}\rangle + \dots + c_1^{(g_1)}|u_1^{(g_1)}\rangle + \dots + c_n^{(1)}|u_n^{(1)}\rangle + \dots + c_n^{(g_n)}|u_n^{(g_n)}\rangle + \dots \quad (74)$$

Je-li báze ortonormální, tj platí

$$\langle u_n^{(i)} | u_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij},$$

potom

$$c_n^{(i)} = \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle \quad (75)$$

Výraz (73) je tedy součtem kvadrátů modulů koeficientů u vlastních vektorů, které přísluší  $g_n$ -násobně degenerované vlastní hodnotě  $a_n$ .

Postulát vlastně vyjadřuje náš závěr o významu koeficientů v rozvoji, k němuž jsme došli v odst. II.4.3.

$|c_n^{(i)}|^2$  udává pravděpodobnost, že soustava je ve stavu  $|u_n^{(i)}\rangle$  ( $i = 1, 2, \dots, g_n$ ). Protože ale měříme veličinu  $A$  a pro všechny stavy  $|u_n^{(1)}\rangle, \dots, |u_n^{(g_n)}\rangle$  naměříme hodnotu  $a_n$ , je výsledná pravděpodobnost naměření  $a_n$  rovna součtu

$$P(a_n) = |c_n^{(1)}|^2 + \dots + |c_n^{(g_n)}|^2 \quad (76)$$

(b) Pro spojitě spektrum (nedegenerované) je pravděpodobnost, že bude naměřena hodnota v intervalu  $a(k), a(k+dk)$  rovna

$$dP(a(k)) = |\langle v(k) | \psi \rangle|^2 dk \quad (77)$$

kde  $|v(k)\rangle$  je vlastní vektor  $\mathcal{A}$ , vyhovující rovnici

$$\mathcal{A}|v(k)\rangle = a(k)|v(k)\rangle \quad (78)$$

Zde se  $k$  mění spojitě a podmínka ortonormality vlastních vektorů je

$$\langle v(k') | v(k) \rangle = \delta(k - k') \quad (79)$$

kde  $\delta(k - k')$  je  $\delta$ -funkce (dod.C).

#### Postulát o redukci vlnového klubka

Předpokládejme, že chceme v daném čase změřit veličinu  $A$ . Jestliže známe stavový vektor  $|\psi\rangle$ , který reprezentuje stav soustavy těsně před měřením, potom pravděpodobnost naměření hodnot  $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$  je dána 4. postulátem. Provedeme-li však měření, potom výsledkem měření je již jen jediná z těchto hodnot. Bezprostředně po měření již nemá smysl říkat "pravděpodobnost, že naměříme...", neboť už naměřenou hodnotu známe. Máme tedy doplňující informaci a je proto pochopitelné, že po měření musí být soustava ve stavu odlišném od  $|\psi\rangle$ . V jakém stavu bude, říká:

#### 5. postulát

Jestliže měření veličiny  $A$  na soustavě ve stavu  $|\psi\rangle$  dá výsledek  $a_n$ , potom stav soustavy bezprostředně po měření je

$$\frac{\mathcal{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \mathcal{P}_n | \psi \rangle}} \quad (80)$$

kde

$$\mathcal{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle \langle u_n^{(i)}| \quad (81)$$

je projekční operátor na podprostor  $\mathcal{E}_n$  v  $\mathcal{E}$ , spojený s vlastní hodnotou  $a_n$ .

Poznámky:

(a) V postulátu nám vystupuje nový pojem, který je v kvantové mechanice běžný: projekční operátor. Jeho působení si můžeme opět znázornit v trojrozměrném prostoru. Vraťme se např. k obr.44 a uvažme, jak působí operátor

$$\mathcal{P}_1 = |u_1\rangle\langle u_1|$$

na vektor  $|\psi\rangle$ ; platí

$$\mathcal{P}_1|\psi\rangle = |u_1\rangle\langle u_1|\psi\rangle = \langle u_1|\psi\rangle|u_1\rangle = c_1|u_1\rangle,$$

což je skutečně vektor, který dostaneme ortogonální projekcí  $|\psi\rangle$  na osu určenou vektorem  $|u_1\rangle$ .

Projekční operátor má charakteristickou vlastnost: aplikujeme-li ho dvakrát, dostaneme

$$\mathcal{P}_1\mathcal{P}_1|\psi\rangle = \mathcal{P}_1^2|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle\langle u_1|u_1\rangle = c_1|u_1\rangle$$

takže

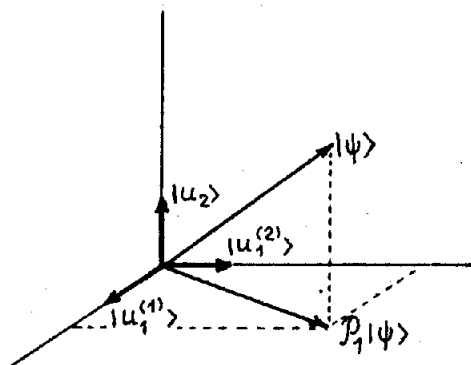
$$\mathcal{P}_1^2 = \mathcal{P}_1 \quad (82)$$

Tento výsledek, který platí pro libovolný projekční operátor, je z geometrického hlediska snadno pochopitelný; druhé působení projekčního operátoru už "dělá jen projekci vektoru  $\mathcal{P}_1|\psi\rangle$  na sebe sama", takže nemůže již nic změnit.

Obdobně operátor (viz obr.45)

$$\mathcal{P}_1 = |v_1^{(1)}\rangle\langle v_1^{(1)}| + |v_1^{(2)}\rangle\langle v_1^{(2)}|$$

provádí projekci libovolného vektoru  $|\psi\rangle$  do roviny (podprostoru) určené vektory  $|v_1^{(1)}\rangle$ ,  $|v_1^{(2)}\rangle$  (pro vektory  $|u_1^{(1)}\rangle$ ,  $|u_1^{(2)}\rangle$  příslušející téže vlastní hodnotě  $a_1$  je situace v obr. 49).



Obr. 49.

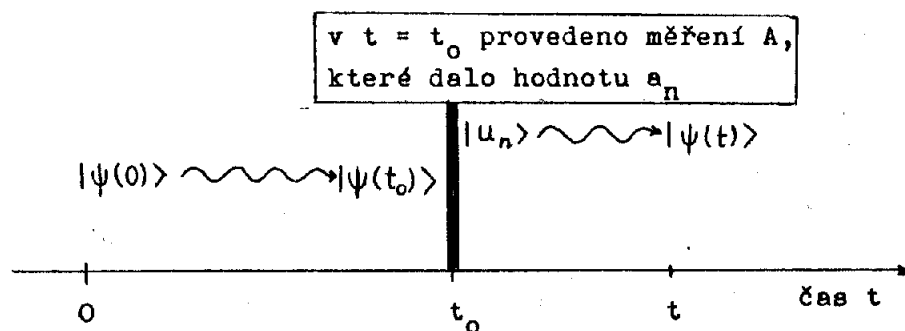
Projekce  $|\psi\rangle$  do podprostoru  $\mathcal{E}_1$ , který je tvořen všemi vektory v rovině určené  $|u_1^{(1)}\rangle$ ,  $|u_1^{(2)}\rangle$ . Platí

$$\mathcal{A}|u_1^{(i)}\rangle = a_1|u_1^{(i)}\rangle \quad (i=1,2)$$

$$\mathcal{A}|u_2\rangle = a_2|u_2\rangle$$

$$\text{a } \mathcal{P}_1 = \sum_{i=1}^2 |u_1^{(i)}\rangle\langle u_1^{(i)}|$$

(b) Stav soustavy je tedy bezprostředně po měření  $A$ , které dalo výsledek  $a_n$ , určen vektorem, který je projekcí  $|\psi\rangle$  do podprostoru tvořeného všemi vektory, jimž přísluší vlastní hodnota  $a_n$ . Schematicky je to znázorněno na obr. 50.



Obr. 50. Jestliže měření A v  $t=t_0$  dalo hodnotu  $a_n$ , potom stav soustavy  $|\psi(t_0)\rangle$  se skokem změnil na  $|u_n\rangle$  a tento nový stav se s časem dále vyvíjí (jak určuje následující postulát).

#### Postulát o časovém vývoji stavu soustavy

V kap. III jsme již postulovali Schrödingerovu rovnici. Nyní ji v obecnějším tvaru uvádíme jako

##### 6. postulát

Časový vývoj stavového vektoru  $|\psi(t)\rangle$  je určen Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (83)$$

kde  $\mathcal{H}(t)$  je operátor, který reprezentuje celkovou energii soustavy.

Poznámka.

Operátor  $\mathcal{H}(t)$  se nazývá Hamiltonův operátor, nebo kratěji, hamiltonián.

Postulát, který poskytuje návod ke konstrukci kvantověmechanických operátorů aneb

#### Kvantové podmínky

Soustava částic je v klasické mechanice charakterizována kartézskými souřadnicemi  $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$  a jim odpovídajícími impulsy  $P_1, P_2, \dots, P_n$ . Ostatní měřitelné veličiny se pak dají vyjádřit pomocí těchto souřadnic a impulsů. Tak např. pro jednu částici s hmotností  $m$  je kinetická energie

$$T = \frac{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2}{2m} = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \quad (84)$$

kde  $P_1 = p_x$ ,  $P_2 = p_y$ ,  $P_3 = p_z$  a  $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$

nebo moment hybnosti

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (85a)$$

kde  $\vec{r} = (x, y, z)$  ( $Q_1 = x, Q_2 = y, Q_3 = z$ ) je polohový vektor částice a  $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$  je opět její impuls (srov. (84)).

Kartézské složky  $\vec{L}$  jsou

$$L_x = y p_z - z p_y ; L_y = z p_x - x p_z ; L_z = x p_y - y p_x \quad (85b)$$

Kinetická energie souboru  $r$  částic je

$$T = \sum_{i=1}^r \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} = \sum_{i=1}^r \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m_i} \quad (86)$$

kde  $\vec{p}_i = (p_{ix}, p_{iy}, p_{iz})$  je impuls a  $m_i$  hmotnost  $i$ -té částice.

Potenciální energie této soustavy nechť je funkcí pouze prostorových souřadnic, takže

$$V = V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_r, y_r, z_r; t) \quad (87)$$

kde  $t$  je čas. Pro stacionární stavy nezávisí  $V$  explicitně na  $t$ .

Proměnná  $t$  vystupuje ve vztazích jako parametr, nikoli jako dynamická proměnná a nenahrazuje se proto operátorem !

Celková energie (Hamiltonova funkce) je

$$\begin{aligned} H(x_1, \dots, z_r, p_{1x}, \dots, p_{rz}; t) &= \\ &= \sum_{i=1}^r \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + V(x_1, \dots, z_r; t) \end{aligned} \quad (88)$$

Ve vztazích (86)-(88) je logické přiřadit

$$x_1 = Q_1, y_1 = Q_2, z_1 = Q_3, \dots, x_r = Q_{3r-2}, y_r = Q_{3r-1}, z_r = Q_{3r}$$

$$p_{1x} = P_1, p_{1y} = P_2, p_{1z} = P_3, \dots, p_{rx} = P_{3r-2}, p_{ry} = P_{3r-1}, p_{rz} = P_{3r}.$$

Nyní je snad jasné, co se rozumí výrokem, že každá veličina  $A$  je funkcí  $Q_1, \dots, Q_n$  a  $P_1, \dots, P_n$ , tj

$$A = A(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n) \quad (89)$$

### 7. postulát

Operátor  $\hat{A}$ , reprezentující klasicky definovanou veličinu

$$A = A(Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n),$$

se získá tak, že za zobecněné souřadnice a impulsy  $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$

se do výrazu pro  $A$  dosadí operátory  $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$ , které

splňují komutační relace

$$[Q_i, Q_j] = 0, [P_i, P_j] = 0, [Q_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (90)$$

$$(i, j = 1, 2, \dots, n)$$

Poznámky:

(a) Komutační relace (90) v 7.postulátu, odrážejí nám již známou skutečnost, že některé veličiny nelze současně změřit (tím se rozumí změřit jednu a nezměnit tímto měřením druhou). Nebo jinak: komutační relace (90) jsou jinou formou vyjádření Heisenbergových relací neurčitosti. Veličiny zobrazené komutujícími operátory lze současně změřit. K této otázce se ještě vrátíme v odst.3.3.

(b) V první části 7.postulátu se předpokládá, že operátory pro souřadnice a impulsy, tj  $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$ , známe. K jejich nalezení nám mohou posloužit opět komutační relace (90); jak, uvidíme v odst.3.1.

(c) Postulát pochopitelně dává jen návod, jak získat operátory zobrazující veličiny definované v klasické mechanice. Jsou však i veličiny, které nemají klasickou analogii. Potom je třeba definovat přímo odpovídající operátor tak, aby výsledky získané s jeho pomocí byly v souladu s experimentem. Na příkladu spinu to uvidíme v následující kapitole.

(d) Symetrizace výrazů

Někdy se může stát, že klasický definiční vztah pro A obsahuje členy, které by vedly k nejednoznačnému určení operátoru. Důvod je v tom, že zatímco klasické souřadnice a impulsy komutují, odpovídající operátory komutovat nemusí. Tak se např. v klasickém výrazu může vyskytovat součin  $Q_i P_i (= P_i Q_i)$ . Podle (90) ovšem odpovídající operátory nekomutují, tj

$$Q_i P_i \neq P_i Q_i$$

Co tedy dosadit za klasický výraz  $Q_i P_i$  ? Postup je takový, že místo  $Q_i P_i$  napíšeme symetrický výraz

$$\frac{1}{2} ( Q_i P_i + P_i Q_i )$$

a v něm teprve provedeme náhradu za operátory. V klasickém výrazu pro A se provedením symetrizace nic nezměnilo a kvantové operátory jsou již určeny jednoznačně.

### 3. Některé závěry plynoucí z postulátů

#### 3.1) Souřadnicová a impulsová reprezentace

V poznámce (b) k 7.postulátu jsme se již zmínili, že postulované komutační relace (90) nám mohou pomoci při stanovení základních operátorů pro souřadnice  $Q_1, \dots, Q_n$  a impulsy  $P_1, \dots, P_n$ . Jedna z možností je, zvolit za operátory souřadnic  $Q_1, \dots, Q_n$  přímo souřadnice  $Q_1, \dots, Q_n$  a operátory  $P_1, \dots, P_n$  určit pak tak, aby byly splněny komutační relace (90). Využijeme-li výsledek (13), je zřejmě možné zobrazit operátory souřadnic a impulsů takto:

Klasická veličina	Operátor	
$Q_i$	$Q_i$	$(i=1,2,\dots,n) \quad (91)$
$P_i$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_i}$	

Ostatní operátory pak již hledáme podle návodu, který dává 7. postulát. Volba operátorů (91) vede k tzv souřadnicové reprezentaci kvantové mechaniky. Protože diferenciální operátory mohou působit jen na funkce proměnných  $Q_1, \dots, Q_n$ , budou v této reprezentaci stavové vektory reprezentovány vlnovými funkcemi

$$\psi = \psi(Q_1, \dots, Q_n; t) \quad (92)$$

Jestliže volbu obrátíme, tj za operátory impulsů  $P_1, \dots, P_n$  zvolíme přímo  $P_1, \dots, P_n$ , potom z komutačních relací dostaneme obdobu výrazů (91)

Klasická veličina	Operátor	
$P_i$	$P_i$	$(i=1,2,\dots,n) \quad (93)$
$Q_i$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial P_i}$	

Volba (93) nás přivede k tzv impulsové reprezentaci. Stavové vektory  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  v ní budou reprezentovány funkcemi

$$\psi = \psi(P_1, \dots, P_n; t) \quad (94)$$

### Souřadnicová reprezentace

je (především při řešení konkrétních úloh) nejčastěji používanou reprezentací aparátu kvantové mechaniky. Všimneme si jí proto blíže; uvidíme, že nás dovede i ke Schrödingerově rovnici, s níž umíme pracovat již z kap.III.

Pro soustavu tvořenou jednou částicí s polohovým vektorem  $\vec{r} = (x, y, z)$  a impulsem  $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$  (srov.(84)) bude

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z \quad (95a)$$

takže operátor polohového vektoru

$$\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad \text{bude} \quad \vec{r} = (x, y, z) \quad (95b)$$

Složky vektoru impulsu  $\vec{p}$  budou podle (91) reprezentovány operátory

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (96a)$$

a operátor impulsu (vektoru) tudíž bude

$$\hat{\vec{p}} = \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (96b)$$



Vzpomeneme-li si na diferenciální operátor  $\nabla$  (nabla) (dod.E) , můžeme operátor impulsu (96b) zapsat

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla \quad (96c)$$

Nyní již snadno podle 7.postulátu získáme další operátory v souřadnicové reprezentaci. Tak např

(i) operátor kinetické energie pro jednu částici dostaneme tak, že v (84) nahradíme  $p_x, p_y, p_z$  operátory (96):

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2m} |\hat{\vec{p}}|^2 = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{1}{2m} (-i\hbar)^2 \nabla \cdot \nabla = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (97)$$

kde  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  je tzv Laplaceův operátor (dod.E).

Pro částici pohybující se jen po přímce (zvolíme ji za osu x;rov. kap.III)

$$\mathcal{T} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (98)$$

(ii) operátor potenciální energie (87) pro jednu částici bude přímo funkce  $V(x,y,z)$ , tj

$$\mathcal{U} = V(x,y,z) \quad (99)$$

(iii) operátor celkové energie - hamiltonián - pak je

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{U} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,y,z;t) \quad (100)$$

Pro jednorozměrný, stacionární případ se redukuje na

$$\mathcal{H} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (101)$$

Stavové vektory  $|\psi(t)\rangle$  jsou reprezentovány vlnovou funkcí

$$\psi = \psi(x,y,z;t) \quad (102)$$

Časový vývoj stavu soustavy je podle 6.postulátu určen řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H} \psi \quad (103a)$$

nebo v rozepsaném tvaru, po dosazení za  $\mathcal{H}$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,y,z;t) \right] \psi \quad (103b)$$

Vidíme, že skutečně získáváme Schrödingerovu rovnici ( na níž byla zbudována Schrödingerova vlnová mechanika; srov. kap. III) pouze jako dílčí výsledek z obecného formalismu kvantové teorie.

Pro úplnost si ještě uveďme hamiltonián pro částici v elektromagnetickém poli. Zde se situace poněkud komplikuje tím, že magnetické pole není potenciální (nelze ho popsat jen skalárním potenciálem  $U$ ), takže potenciální energie částice nejde zapsat v jednoduchém tvaru (87).

V klasické elektrodynamice se dokazuje, že klasická Hamiltonova funkce pro částici s nábojem  $q$  v elektromagnetickém poli je

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + qU(\vec{r}, t) \quad (104)$$

kde  $U(\vec{r}, t)$  je skalární potenciál elektrického pole,

$\vec{A}(\vec{r}, t)$  je tzv. vektorový potenciál magnetického pole a

$$\vec{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt} + q\vec{A}(\vec{r}, t) = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{r}, t) \quad (105)$$

je zobecněný impuls (kanonicky sdružený s  $\vec{r}$ ).

Při přechodu ke kvantověmechanickému operátoru musíme nahradit tento zobecněný impuls  $\vec{p}$  operátorem impulsu  $\vec{P}$ , nikoliv mechanický impuls

$\vec{p} = m d\vec{r}/dt = m\vec{v}$  ! Skutečnost, že dvojice  $Q_i, P_i$  jsou kanonicky sdružené měla být, přesně vzato, uvedena v 7. postulátu, neboť právě těchto dvojic se týkají komutační relace (90).

Kvantověmechanický hamiltonián  $\mathcal{H}$  získáme z (104)

$$\mathcal{H}(\vec{R}, \vec{P}) = \frac{1}{2m} [\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t)]^2 + V(\vec{R}, t) \quad (105)$$

kde  $V(\vec{R}, t) = q U(\vec{R}, t)$ ,

$\vec{R}$  je operátor polohového vektoru a

$\vec{P}$  je operátor zobecněného impulsu (105).

Pro operátory  $\vec{R} = (X, Y, Z)$ ,  $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$  platí komutační relace (90)

$$[X, P_x] = i\hbar, \quad [Y, P_y] = i\hbar, \quad [Z, P_z] = i\hbar, \quad (106)$$

všechny zbývající komutátory jsou rovny nule. V souřadnicové reprezentaci přejde (105) v

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [-i\hbar \nabla - q\vec{A}(\vec{r}, t)]^2 + V(\vec{r}, t) \quad (107)$$

a Schrödingerova rovnice je

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (108)$$

Na pravé straně této rovnice znamená  $(-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 \psi$  toto:

$$(-i\hbar\nabla - q\vec{A})(-i\hbar\nabla - q\vec{A})\psi(\vec{r},t) = \\ = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + iq\hbar \left[ A_x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (A_x \psi) \right] + q^2 A_x^2 \psi +$$

+ [další dva výrazy, které se získají z tohoto záměnou  $x$  za  $y$  a za  $z$ ].  
Musíme totiž brát v úvahu, že složky operátoru  $\nabla$  a operátoru  $\vec{A}(\vec{r},t)$  obecně nekomutují.

### 3.2) Střední hodnota

Závěry, které vyplývají z úvodních postulátů, mají pravděpodobnostní charakter. Abychom je ověřili, musíme provést velký počet měření, při naprosto identických podmínkách. Jinak řečeno, měli bychom měřit tutéž veličinu na velkém počtu soustav, které jsou v téže kvantovém stavu (přísluší jim stejný ket-vektor  $|\psi\rangle$ ).

Uvažujme tedy scubor tvořený  $N$  identickými soustavami, přičemž všechny jsou v nějakém normalizovaném kvantovém stavu  $|\psi\rangle$ . Představme si dále, že v téže časovém okamžiku, provedeme na všech těchto soustavách měření nějaké veličiny  $A$  (např. celkové energie). Podle 3. postulátu může být výsledkem každého z  $N$  provedených měření pouze některá z vlastních hodnot  $a_1, a_2, \dots$  operátoru  $\hat{A}$ , který zobrazuje měřenou veličinu  $A$ . Nechť jsme

$N_1$  -krát naměřili hodnotu  $a_1$

$N_2$  -krát " "  $a_2$

$\vdots$   $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$

$N_i$  -krát " "  $a_i$

$\vdots$   $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$

přičemž musí být

$$N_1 + N_2 + \dots + N_i + \dots = N \quad (= \text{celkový počet})$$

Aritmetický střed  $\bar{A}$  z výsledků měření vypočteme běžným způsobem

$$\bar{A} = \frac{N_1 a_1 + N_2 a_2 + \dots + N_i a_i + \dots}{N} = \\ = \frac{N_1}{N} a_1 + \frac{N_2}{N} a_2 + \dots + \frac{N_i}{N} a_i + \dots \quad (110)$$

Pro velký počet měření ( $N \rightarrow \infty$ ) se poměr  $N_n/N$  ( $n=1,2,\dots$ ) blíží pravděpodobnosti naměření hodnoty  $a_n$ , tj.

$$P(a_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} \quad (111)$$

Podle 4. postulátu je však tato pravděpodobnost rovna výrazu (73)

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \psi | u_n^{(i)} \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle$$

takže pro  $N \rightarrow \infty$  můžeme střední hodnotu  $\langle A \rangle$  z měřené veličiny  $A$ , zapsat takto

$$\langle A \rangle = \sum_n P(a_n) a_n = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle a_n \quad (112)$$

Protože ( $a_n$  je reálné číslo)

$$\langle \psi | u_n^{(i)} \rangle a_n = \langle \psi | a_n | u_n^{(i)} \rangle \quad \text{a podle (72)}$$

$$A | u_n^{(i)} \rangle = a_n | u_n^{(i)} \rangle \quad (i=1,2,\dots,g_n),$$

můžeme (112) přepsat

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | A | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | A \left( \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \right) | \psi \rangle \end{aligned}$$

Výraz v závorkách je roven jednotkovému operátoru (viz podmínky úplnosti (50)), takže konečně dostáváme pro střední hodnotu z velkého počtu měření veličiny  $A$  výraz

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (113a)$$

Pro nenormalizovaný stav  $|\psi\rangle$  je třeba (113a) ještě dělit normou, takže

$$\boxed{\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}} \quad (113b)$$

Poznamenejme, že se někdy formule (113), pro střední hodnotu  $\langle A \rangle$ , postuluje místo námi uvedeného 4. postulátu. Fyzikální interpretace koeficientů rozvoje podle úplného souboru stavových vektorů (která byla obsahem 4. postulátu) se pak naopak získá jako důsledek, který z tohoto postulátu vyplyne.

### 3.3) Současná měřitelnost a úplný soubor kvantových čísel

Položme si nyní otázku, která se nikdy neobjevila v klasické mechanice, ale podle toho co již víme, má zřejmě zásadní význam v kvantové mechanice: za jakých podmínek je možné současně stanovit přesné numerické hodnoty dvou různých měřitelných veličin? Vyjádřeno z hlediska realizace experimentu: měření 1. veličiny, řekněme  $A$ , převede podle

5. postulátu soustavu do určitého stavu, v němž má  $A$  hodnotu, řekněme,  $a_i$  (jedna z vlastních hodnot  $\mathcal{A}$ ). Jestliže nyní provedeme na soustavě měření druhé veličiny  $B$ , bude soustava ve stavu, v němž má  $B$  naměřenou hodnotu, kterou označíme  $b_j$  (jedna z vlastních hodnot  $\mathcal{B}$ ). Otázka nyní zní: když budeme nyní na soustavě měřit znovu veličinu  $A$ , dostaneme opět hodnotu  $a_i$ ? Jestliže ano, budeme říkat, že veličiny  $A, B$  jsou současně měřitelné.

Podívejme se nyní na tento problém z hlediska matematického formalismu kvantové mechaniky. Nechť operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  (zobrazující veličiny  $A, B$ ) mají ve stavu, který vedl k naměřením hodnot  $a_i, b_j$  společný vlastní stavový vektor  $|a_i, b_j\rangle$ , takže platí

$$\mathcal{A}|a_i, b_j\rangle = a_i|a_i, b_j\rangle, \quad \mathcal{B}|a_i, b_j\rangle = b_j|a_i, b_j\rangle \quad (114)$$

Rozlišování vlastních vektorů pomocí odpovídajících vlastních hodnot, které jsme zde použili, je v kvantové mechanice běžné. Zpravidla se ovšem nevypisují celé vlastní hodnoty, ale opět jen nějaké veličiny - kvantová čísla - které je rozlišují. Tak místo  $|a_i, b_j\rangle$  by se mohlo psát  $|i, j\rangle$  s tím, že kvantové číslo na 1. pozici (zde "i") přísluší vlastní hodnotě  $\mathcal{A}$  a číslo na 2. pozici (zde "j") pak vlastní hodnotě  $\mathcal{B}$ .

Fyzikální smysl rovnic (114) je následující: jestliže se soustava v daném časovém okamžiku nachází ve stavu  $|a_i, b_j\rangle$ , potom měření veličin  $A, B$  dá určitě hodnoty  $a_i, b_j$ . Nutnou podmínkou pro současnou platnost obou rovnic (114) je

$$(\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A})|a_i, b_j\rangle = [\mathcal{A}, \mathcal{B}]|a_i, b_j\rangle = 0 \quad (115)$$

což znamená, že  $|a_i, b_j\rangle$  je vlastním vektorem operátoru  $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]$  a přísluší mu vlastní hodnota 0.

Z druhé strany, rovnice (115) je automaticky splněna, jestliže operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  komutují. V tomto případě platí důležitá věta:

Jestliže dva operátory komutují, potom lze pro ně najít společný úplný soubor ortonormálních vlastních vektorů.

Platí i věta obrácená:

Mají-li dva operátory společný úplný soubor vlastních vektorů, potom komutují.

Obě věty lze poměrně snadno dokázat, jestliže všechny vlastní hodnoty obou operátorů jsou nedegenerované; v opačném případě je rozbor a důkaz komplikovanější. Nebudeme důkazy provádět (viz např. [11], [13]), ale všimneme si fyzikálních důsledků, které z vět plynou.

Mějme operátor  $\mathcal{A}$ , zobrazující nějakou veličinu, kterou je možné na dané soustavě změřit. Víme již, že množina jeho vlastních vektorů tvoří úplný soubor, který můžeme použít za bázi v prostoru stavových vektorů  $\mathcal{E}$ . Obecně však výběr vlastních vektorů není jednoznačný;

vzpomeňme si, že výběr ortonormálních vektorů v podprostoru  $\mathcal{E}_n$ , spojeném s degenerovanou vlastní hodnotou  $a_n$  (obr.45), nebyl jednoznačně určen.

Mějme nyní druhou měřitelnou veličinu  $B$ , zobrazenou operátorem  $\mathcal{B}$ , který komutuje s  $\mathcal{A}$ . Může se nyní stát, že společný soubor vlastních vektorů (jehož existence plyne z výše uvedené věty) už bude jediný. Ne každý vlastní vektor  $|a_n\rangle$  z těch, které patřily k degenerované vlastní hodnotě  $a_n$ , musí být též vlastním vektorem  $\mathcal{B}$ . Z uvedené věty však plyne, že v podprostoru  $\mathcal{E}_n$  lze vždy vybrat takové ortonormální vektory, které budou též vlastními vektory  $\mathcal{B}$ . Sestrojujeme-li tedy společný systém ortonormálních vlastních vektorů pro komutující operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  - rozlišujeme je nyní dvěma vlastními hodnotami:  $a_i, b_j$  - může přiřazení operátoru  $\mathcal{B}$  omezit možnosti výběru těchto vektorů v podprostorech, které příslušely k degenerovaným vlastním hodnotám operátoru  $\mathcal{A}$ .

Jestliže je soubor vlastních vektorů dvou komutujících operátorů  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  již určen jednoznačně, potom říkáme, že operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  tvoří úplný soubor komutujících operátorů.

Jestliže  $\mathcal{A}, \mathcal{B}$  ještě nemají jednoznačně určený společný úplný soubor ortonormálních vlastních vektorů, musíme přibrat další operátor  $\mathcal{C}$ , který komutuje s  $\mathcal{A}$  i  $\mathcal{B}$  a znovu konstruovat společný soubor vlastních vektorů  $|a_i, b_j, c_k\rangle$  pro trojici  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ . Tuto proceduru (přibírání dalších komutujících operátorů) budeme opakovat tak dlouho, až společný soubor vlastních vektorů bude určen jednoznačně.

Obecně se říká, že

hermitovské operátory  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots, \mathcal{L}$  tvoří úplný soubor komutujících operátorů, jestliže mají společný soubor ortonormálních vlastních vektorů a tento soubor je jediný.

Měřitelné veličiny reprezentované úplným souborem komutujících operátorů tvoří úplný soubor současně měřitelných veličin.

Provedeme-li současně změření těchto veličin, potom stav soustavy bude jednoznačně určen stavovým vektorem  $|a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle$ , kde  $a_i, b_j, c_k, \dots, l_m$  jsou naměřené vlastní hodnoty operátorů  $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots, \mathcal{L}$  (tj naměřené hodnoty veličin  $A, B, C, \dots, L$ ). Pro tento vektor platí

$$\begin{aligned} \mathcal{A} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= a_i |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ \mathcal{B} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= b_j |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ \mathcal{C} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= c_k |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \\ &\vdots \\ \mathcal{L} |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle &= l_m |a_i, b_j, c_k, \dots, l_m\rangle \end{aligned} \quad (115)$$

Protože v tomto případě existuje jediný stavový vektor, který má tuto vlastnost, je stav soustavy plně určen kvantovými čísly  $a_i, b_j, c_k, \dots, l_m$ ; říká se, že kvantová čísla tvoří úplný soubor kvantových čísel. Tak např. při řešení problému elektronu v atomu vodíku uvidíme, že existují 4 veličiny, které lze u elektronu současně naměřit: celková energie  $E$ , velikost momentu hybnosti  $|\vec{L}|$ , průmět tohoto momentu hybnosti do nějaké osy (zpravidla se bere osa  $Oz$ )  $L_z$  a průmět spinu (vlastního momentu hybnosti) do zvolené osy  $S_z$ . Odpovídající operátory  $\mathcal{H}$  (hamiltonián),  $|\mathcal{L}|$ ,  $\mathcal{L}_z$ ,  $\mathcal{S}_z$  skutečně komutují a jejich vlastní hodnoty -  $E_n, l, m_l, m_s$  - plně určují stavové vektory  $|n, l, m_l, m_s\rangle$  pro elektron v atomu vodíku (všimněte si, že místo  $E_n$  používáme při rozlišování vektorů jen "hlavní" kvantové číslo  $n$ , které ovšem jednoznačně určuje  $E_n$ ).

Problém určení úplného souboru současně měřitelných veličin pro danou kvantovou soustavu, má principiální význam: určuje totiž maximální informaci, kterou o nějaké fyzikální soustavě v mikrosvětě můžeme získat.

## V. SPIN A SOUSTAVY SE DVĚMA STAVY

Hlavním cílem této kapitoly je ukázka použití obecného formalismu kvantové mechaniky z předcházející kapitoly, na jednoduchý případ: soustavu se dvěma stavy. V odst.1 tento záměr současně využijeme k doplnění zavedeného formalismu o základní veličinu v oblasti mikrosvěta - spin. Problematika spinu mikročástic ovšem prolíná většinou aplikací kvantové mechaniky na konkrétní soustavy, takže se s ní budeme seznamovat postupně. Spin elektronu, zavedený v odst.1, není jediným možným příkladem soustavy se dvěma stavy. V určité aproximaci se takové soustavy vyskytují často; s několika jednoduchými příklady se seznámíme v odst.2. Důvod ke studiu těchto soustav netkví jen v jednoduchém matematickém aparátu k jejich řešení, ale má i hluboký fyzikální smysl: objeví se v nich typicky kvantověmechanické chování studovaných soustav, které může být verifikováno experimentálně. Velice pěkný a podrobný rozbor této problematiky můžete nalézt ve Feynmanových přednáškách [7] .

1. Spin elektronu1.1) Experimentální podněty k zavedení spinu

V našich dosavadních úvahách vystupovaly mikročástice vlastně jen jako hmotné body bez vnitřní struktury. Tato skutečnost se odrážela např. v předpokladu, že stav částice lze plně popsat vlnovou funkcí  $\psi$ , která závisí pouze na prostorových souřadnicích částice  $x, y, z$ . Řada experimentálních faktů však vedla postupně k závěru, že tento popis je neúplný. Všimněme si stručně některých z nich.

Sternovy-Gerlachovy experimenty

Na částici, která má vlastní magnetický moment  $\vec{M}$  (např. paramagnetický atom), působí podle klasické fyziky v nehomogenním magnetickém poli s magnetickou indukcí  $\vec{B}$  ( $=\vec{B}(x, y, z)$ ) síla

$$\vec{F} = \nabla(\vec{M} \cdot \vec{B}) \quad (1)$$

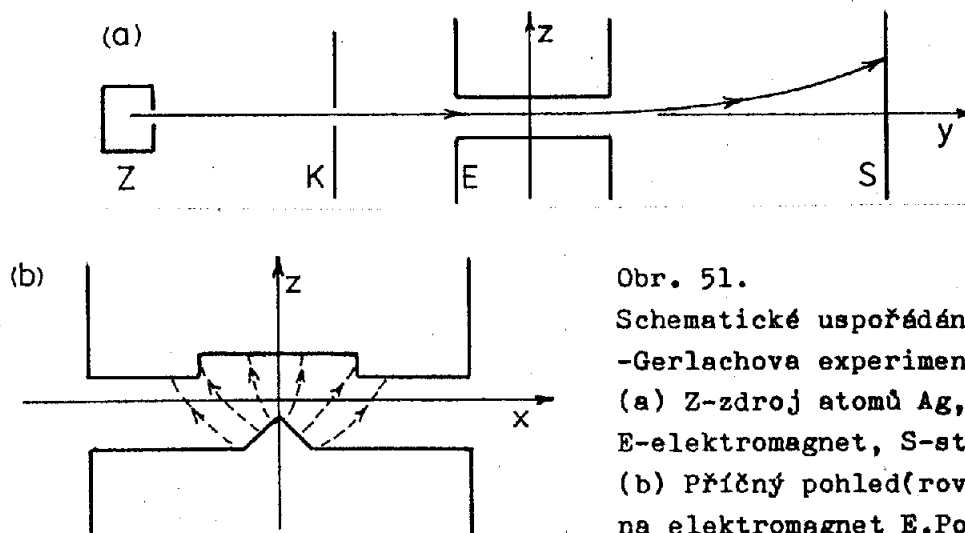
Jestliže necháme procházet svazek takových částic prostorem, v němž se směr  $\vec{B}$  mění jen málo, ale velikost  $\vec{B}$  je silně závislá na poloze (obr.51), potom můžeme přibližně psát

$$\vec{F} = M_z \nabla B_z \quad (2)$$

kde  $M_z$  je projekce magnetického momentu  $\vec{M}$  do směru  $\vec{B}$  (který jsme položili do osy  $Oz$ ). Z odchylky stopy na stínítku S (obr.51) pak můžeme stanovit složku  $\vec{M}$  ve směru  $\vec{B}$  (tj.  $M_z$ ), neboť síla (2) je paralelní  $Oz$  a úměrná  $M_z$ .

Výsledek takovýchto pokusů, které začátkem dvacátých let realizovali Stern a Gerlach s atomy stříbra, byl překvapující. Protože podle klasické mechaniky může nabývat  $M_z$  libovolných hodnot (moment  $\vec{M}$  může být





Obr. 51.

Schematické uspořádání Sternova-Gerlachova experimentu.

(a) Z-zdroj atomů Ag, K-kolimátor, E-elektromagnet, S-stínítko

(b) Příčný pohled (rovina xOz) na elektromagnet E. Pole B vyznačeno čárkovaně.

v prostoru libovolně orientován), měla by se na stínítku objevit spojitě rozmazaná stopa; její okraje by odpovídaly limitním případům: paralelní ( $\uparrow\uparrow$ ) a antiparalelní ( $\uparrow\downarrow$ ) orientaci  $\vec{M}$  a  $\vec{B}$ .

Experiment však ukázal izolované, ekvidistantně vzdálené, stopy. To bylo jasným důkazem kvantové povahy magnetického momentu. Protože to vypadalo jakoby vektor  $\vec{M}$  mohl mít v prostoru jen některé orientace (vzhledem k  $\vec{B}$ ), stalo se běžným mluvit o prostorovém kvantování.

Od dob Ampérových víme, že magnetický moment  $\vec{M}$  je nerozlučně spojen s mechanickým momentem hybnosti nabitě částice  $\vec{L}$ . Klasická nabitá částice, která se pohybuje po orbitě (např. v Bohrově modelu atomu) tak, že její moment hybnosti je  $\vec{L}$ , představuje vlastně smyčku protékanou proudem. Podle Ampérovy hypotézy je tato smyčka ekvivalentní magnetu s momentem  $\vec{M}$ , úměrným  $\vec{L}$  :

$$\vec{M} = \gamma \vec{L} \quad (3)$$

Konstanta úměrnosti  $\gamma$  se nazývá gyromagnetický poměr a podle klasické elektrodynamiky je

$$\gamma = \frac{q}{2m} \quad (4)$$

kde  $q$  je náboj částice a  $m$  je její hmotnost.

V Bohrově modelu atomu vodíku má elektron na nejnižší orbitě ( $n=1$  ve vztahu (I.9)) moment hybnosti  $|\vec{L}| = \hbar$ , takže odpovídající magnetický moment je podle (3)

$$\mu_B = - \frac{e \hbar}{2m_e} \quad (5)$$

(náboj elektronu je  $(-e)$ , jeho hmotnost  $m_e$ ; poznamenejme, že často se Bohrov magneton definuje se znaménkem +).

Veličina  $\mu_B$  se nazývá Bohrův magneton; v soustavě SI

$$\mu_B = -9,2741 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1} \text{ (joule/tesla)}$$

Ze vztahu (3) je zřejmé, že kvantování  $\vec{M}$  je vlastně důsledkem kvantování momentu hybnosti  $\vec{L}$ . Z řešení problému vlastních hodnot operátoru  $\mathcal{L}^2$  a  $\mathcal{L}_z$  (přiřazených  $|\vec{L}|^2$  a  $L_z$  z (IV.85)) vyplne, že vlastní hodnoty  $\mathcal{L}^2$  jsou

$$l(l+1)\hbar^2 \quad (l=0,1,2,\dots) \quad (6)$$

a vlastní hodnoty  $\mathcal{L}_z$  pro dané  $l$  jsou

$$m_l \hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (7)$$

To znamená, že ve Sternově-Gerlachově pokusu bychom měli na stínítku najít vždy lichý počet ekvidistantně vzdálených stop, neboť  $M_z$  v (2) by podle (7) mohlo, pro dané  $l$  (tj. pro danou velikost momentu hybnosti), nabývat hodnot

$$M_z = \gamma m_l \hbar = m_l \mu_B \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (8)$$

Ve Sternově-Gerlachově experimentu s atomy Ag (roku 1924) však byly zaznamenány dvě stopy. Kvantitativní vyhodnocení přitom dalo projekce

$$M_z = \pm \mu_B \quad (9)$$

Význam těchto výsledků nebyl ihned pochopen. Pokusy o vysvětlení byly komplikovány tím, že atomy Ag obsahují mnoho elektronů. Zřejmě správný (protože ve svých důsledcích bezesporný) výklad podali Goudsmit a Uhlenbeck r.1925. Podle jejich hypotézy musíme vzít na vědomí, že elektron má vlastní magnetický moment  $\vec{M}_s$ , jehož projekce do zvoleného směru (směr  $\vec{B}$ ) mohou nabývat pouze dvou hodnot:  $\pm \mu_B$ . Rovněž postulovali, že elektron má vlastní (vnitřní) moment hybnosti  $\vec{S}$  - spin - jehož projekce na zvolenou osu jsou  $\pm \hbar/2$ . Vztah mezi spinovým magnetickým momentem  $\vec{M}_s$  a spinem  $\vec{S}$  pak může být, analogicky k (3), psán

$$\vec{M}_s = g_s \gamma \vec{S} \quad (10)$$

kde

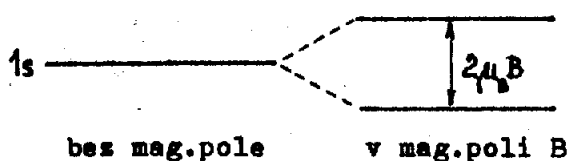
$$g_s = 2 \quad (11)$$

je tzv. Landého faktor (faktor spektroskopického rozštěpení). Pro úplnost uveďme, že hodnota (11) je přibližná; s korekcemi, které vyplývají z relativistické kvantové elektrodynamiky, je  $g_s = 2,002319$ .

Bez podrobnějšího rozboru jen uveďme, že byla i další experimentální fakta, k jejichž objasnění hypotéza o existenci spinu a spinového magnetického momentu úspěšně přispěla. Z nich uveďme jmenovitě jen

#### Zeemanův jev

spočívající ve štěpení spektrálních čar v magnetickém poli. Toto štěpení je z hlediska kvantové mechaniky důsledkem rozštěpení energiových hladin. Z řešení příslušné Schrödingerovy rovnice opět vyplne, že např. v atomu vodíku by se každá hladina měla rozštěpit na lichý počet -  $(2l+1)$  - podhladin. Nejnižší hladina  $1s$  ( $l=0$ ) by tudíž měla zůstat nerozštěpena. Experiment však opět ukázal, že hladina  $1s$  ve vodíku se v magnetickém poli štěpí na dvě hladiny (obr.52). Přitom vzdálenost těchto hladin



Obr. 52

Štěpení základní hladiny 1s  
v atomu vodíku v magnetickém  
poli B.

je  $2\mu_B$ , což je dvojnásobek hodnoty, která odpovídá vazbě  $\vec{M}$  s  $\vec{L}$  podle (3) a (4), ale souhlasí s (10).

## 1.2) Komutační relace pro operátor momentu hybnosti

K nalezení kvantověmechanického operátoru pro spin nemůžeme použít 7. postulát, neboť pro spin nemáme odpovídající klasický definiční vztah. Je proto nutné potřebné operátory definovat přímo a to tak, aby všechny důsledky z těchto definic plynoucí, byly v souladu s experimentem. Protože spin je (vlastní) moment hybnosti, je přirozené požadovat, aby operátory, které budou reprezentovat jeho složky a velikost, splňovaly stejné komutační relace, jako operátory reprezentující orbitální moment hybnosti  $\vec{L}$ . Podle (IV.85)

$$\vec{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad (12a)$$

kde  $\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  a  $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$

a jednotlivé složky operátoru  $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$  jsou

$$\begin{aligned} L_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ L_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ L_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned} \quad (12b)$$

Pro operátory složek  $\hat{\vec{r}}$  a  $\hat{\vec{p}}$  platí postulované komutační relace (IV.90)

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \quad (13)$$

a všechny ostatní komutátory ze složek  $\hat{\vec{r}}$  a  $\hat{\vec{p}}$  jsou rovny nule.

Vypočteme nyní komutátor  $[L_x, L_y]$ ; s využitím (13):

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{z}\hat{p}_z(\hat{p}_y\hat{x} - \hat{p}_x\hat{y}) - \hat{p}_z\hat{z}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = [\hat{z}, \hat{p}_z](\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

Stejně spočteme  $[L_y, L_z]$  a  $[L_z, L_x]$ , takže souhrnně dostaneme

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (14a)$$

což můžeme symbolicky zapsat (vektorový součin operátorů)

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L} \quad (14b)$$

Podle závěrů odstavce IV.3.3 plyne z (14), že změříme-li jednu ze složek - např.  $L_z$  - nelze již přesně určit zbyvající dvě. Je však možné současně s jednou složkou změřit přesně ještě alespoň velikost  $\vec{L}$ ? Abychom na otázku odpověděli, musíme vypočítat komutátor  $[\mathcal{L}^2, L_z]$ ; pro jednoduchost je zvykem počítat s kvadrátem  $L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L}$ , jemuž přísluší operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\mathcal{L}^2 = \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2 \quad (15)$$

Platí

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}^2, L_z] &= [\mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2, L_z] = [\mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2, L_z] = \\ &= L_x [L_x, L_z] + [L_x, L_z] L_x + L_y [L_y, L_z] + [L_y, L_z] L_y = \\ &= L_x (-i\hbar L_y) + (-i\hbar L_y) L_x + L_y (i\hbar L_x) + (i\hbar L_x) L_y = 0 \end{aligned}$$

takže

$$[\mathcal{L}^2, L_z] = 0 \quad (16)$$

Odpověď na otázku je tedy kladná:  $L_z$  a  $|\vec{L}|$  lze současně přesně změřit.

Komutační relace (14), (16) nyní budeme považovat za definiční vztahy pro operátor momentu hybnosti obecně (tzn nejen pro orbitální moment hybnosti, ale také např. pro spin).

### 1.3) Prostor spinových stavových vektorů a Pauliho matice

Zvolme za směr, do nějž budeme promítat spin, osu  $Oz$ . Hledaný operátor spinu  $\vec{\mathcal{J}}$  nechť má složky  $\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z$ , tj  $\vec{\mathcal{J}} = (\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z)$ .

Operátor  $\mathcal{J}_z$  musí mít vlastní hodnoty rovny experimentálně zjištěným hodnotám  $\pm \hbar/2$ . Označíme-li vlastní vektor k hodnotě  $+\hbar/2$  jako  $|\frac{1}{2}\rangle$

a k hodnotě  $-\hbar/2$  jako  $|\frac{-1}{2}\rangle$ , musí platit

$$\mathcal{J}_z |\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2} |\frac{1}{2}\rangle ; \quad \mathcal{J}_z |\frac{-1}{2}\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\frac{-1}{2}\rangle \quad (17)$$

Poznámka: vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  se často značí stručněji  $|+\rangle, |-\rangle$  nebo  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ .

Předpokládáme-li, že obě vlastní hodnoty jsou nedegenerované a vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  normalizované, potom

$$\langle \frac{1}{2} | \frac{1}{2} \rangle = \langle -\frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 1, \quad \langle \frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 0 \quad (18)$$

Vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  můžeme použít za bázi dvourozměrného prostoru  $E_s$ , který obsahuje všechny vektory

$$|\psi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (19)$$

Aby byl i  $|\psi\rangle$  normalizovaný, musí být

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (20)$$

Skutečnost, že vektory  $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ ,  $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$  tvoří bázi, je vyjádřena podmínkou úplnosti (IV.50)

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \right| + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -\frac{1}{2} \right| = \mathbb{1} \quad (21)$$

V bázi tvořené vektory  $\left| \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$  musí být operátor  $\mathcal{J}_z$  vyjádřen diagonální maticí (viz (IV.69))

$$\mathcal{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

s normovanými vlastními vektory

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Obecný stav (19) je pak vyjádřen vektorem

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (24)$$

s normalizační podmínkou (20), neboť (viz (IV.35))

$$\langle \psi | \psi \rangle = (\alpha^* \quad \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \quad (25)$$

U elektronu ve stavu (spinovém)  $|\psi\rangle$ , je pravděpodobnost naměření  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  rovna  $|\alpha|^2$ , zatímco pro  $S_z = -\frac{\hbar}{2}$  je to  $|\beta|^2$ .

Operátory pro  $\mathcal{J}_x$ ,  $\mathcal{J}_y$  určíme tak, aby byly splněny komutační relace (14)

$$[\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y] = i\hbar \mathcal{J}_z, \quad [\mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z] = i\hbar \mathcal{J}_x, \quad [\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_x] = i\hbar \mathcal{J}_y \quad (26)$$

Přímým výpočtem si můžete ověřit, že v bázi (23) vyhovují těmto relacím hermitovské matice (spolu s  $\mathcal{J}_z$  podle (22))

$$\mathcal{J}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

Operátor  $\mathcal{J}^2$  pak je:

$$\mathcal{J}^2 = \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 + \mathcal{J}_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

Protože jde o jednotkovou matici násobenou číslem, je splnění komutační relace (16), tj

$$[\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_z] = 0, \quad (29)$$

evidentní.

Operátory  $\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_z$  musí mít proto společný soubor vlastních vektorů; jsou to opět vektory (23), neboť

$$\mathcal{J}^2 \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2} \right\rangle; \quad \mathcal{J}^2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (30)$$

Vlastní hodnota  $\mathcal{J}^2$  je tedy v obou případech  $3\hbar^2/4$ . Můžeme ji zapsat analogicky k (6)

$$s(s+1)\hbar^2 \quad \text{kde } s = \frac{1}{2} \quad (31a)$$

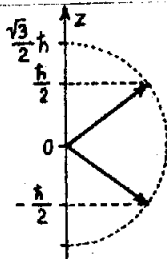
takže

$$\mathcal{J}^2 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = s(s+1)\hbar^2 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (31b)$$

K tomuto kvantovému číslu  $s = \frac{1}{2}$ , které určuje velikost spinu (obdobu kvantového čísla  $l$ , které určuje velikost orbitálního momentu hybnosti), pak přísluší spinové kvantové číslo

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (32)$$

určující průmět spinu do zvolené osy (zde  $Oz$ ); číslo  $m_s$  je obdobou  $m_l$  v (7). K danému  $l$  z (6) jsme měli  $(2l+1)$  možných průmětů (hodnot  $m_l$ ) orbitálního momentu hybnosti do zvolené osy; k danému  $s$ , které nabývá jen hodnoty  $s = \frac{1}{2}$ , máme obdobně  $2s+1 = 2$  možných průmětů spinu do zvolené osy (obr.53). Z toho všeho je zřejmé, že se nám skutečně podařilo



Obr. 53.

Znázornění celkové velikosti spinu  $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$   
a dvou možných průmětů  $\pm \frac{\hbar}{2}$  do osy  $Oz$ .

zkonstruovat spinové operátory tak, že po formální stránce splňují tytéž relace jako orbitální moment hybnosti a z druhé strany, dávají výsledky ve shodě s experimentem.

#### Pauliho matice.

V kvantové mechanice se často pracuje s bezrozměrným operátorem  $\hat{\sigma}$ , který se definuje vztahem

$$\vec{\mathcal{J}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad (33)$$

Matice, které reprezentují tři složky  $\hat{\sigma}$  v bázi tvořené vektory  $|\frac{1}{2}\rangle$ ,  $|\frac{1}{2}\rangle$ , se nazývají Pauliho matice. Porovnáním (33) s (22) a (27) zřejmě

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

Charakteristická rovnice pro všechny tři tyto matice je

$$\lambda^2 - 1 = 0, \quad (35)$$

takže vlastní hodnoty operátorů  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$ ,  $\hat{\sigma}_z$  jsou

$$\lambda = \pm 1 \quad (36)$$

Skutečnost, že vlastní hodnoty všech tří operátorů -  $\mathcal{J}_x$ ,  $\mathcal{J}_y$ ,  $\mathcal{J}_z$  - jsou  $\pm \frac{\hbar}{2}$  odráží to, že žádná z os není preferovaná; experimentálně naměřené hodnoty průmětů  $\vec{J}$  ve Sternově-Gerlachově pokusu, nemohou záviset na tom, jak si orientujeme souřadnou soustavu vzhledem k aparatuře.

#### 1.4) Spinové vlnové funkce

V tomto odstavci zavedeme pro spin a s ním spojené vlnové funkce značení, které se běžně užívá především ve spojení se souřadnicovou reprezentací.

K dynamickým proměnným  $x, y, z$ , určujícím polohu elektronu, přidáme čtvrtou proměnnou: spinovou proměnnou (souřadnici)  $\sigma$ . Definujeme ji tak, že (srov.(10), resp.(32)) :

$$\begin{aligned} \sigma = +1 \quad \text{pro stav s} \quad M_s &= -\frac{e\hbar}{2m_e} \quad (m_s = \frac{1}{2}) \\ \sigma = -1 \quad \text{pro stav s} \quad M_s &= \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (m_s = -\frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (37)$$

(poznámka: někdy se setkáte též s definicí  $\sigma = \pm 1/2$ ).

Vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci pak je

$$\psi(x, y, z, \sigma) \quad (38)$$

Na její interpretaci to nic nemění; tak

$$|\psi(x, y, z, +1)|^2 dx dy dz \quad (39a)$$

udává pravděpodobnost, že v objemu  $dx dy dz$ , opsaném bodu  $(x, y, z)$ , bude nalezen elektron se spinem orientovaným "nahoru" (tj. ve stavu  $|\uparrow\rangle$  nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$ , resp. s  $M_s = +\mu_B$ ); podobně se interpretuje

$$|\psi(x, y, z, -1)|^2 dx dy dz \quad (39b)$$

Výraz

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\psi(x, y, z, \sigma)|^2 dx dy dz \quad (39c)$$

pak udává pravděpodobnost, že částice s libovolným spinem bude nalezena v elementu objemu  $dx dy dz$  v okolí bodu  $(x, y, z)$ .

Do normalizační podmínky (II.20) musíme nyní ovšem kromě integrace přes  $x, y, z$  přidat i sumaci přes  $\sigma$ , takže norma je

$$N = \int |\psi(x, y, z, +1)|^2 dx dy dz + \int |\psi(x, y, z, -1)|^2 dx dy dz \quad (40)$$

Funkce  $\psi(x, y, z, \sigma)$  je normalizována, je-li  $N = 1$ .

Mezi všemi vlnovými funkcemi  $\psi(x, y, z, \sigma)$  má důležité postavení třída funkcí se separovanými prostorovými a spinovou proměnnou:

$$\psi(x, y, z, \sigma) = \varphi(x, y, z) \chi(\sigma) \quad (41)$$

Takováto separace proměnných je možná tehdy, když orientace spinu nezávisí na poloze částice v  $(x, y, z)$ -prostoru; jinými slovy: je možná tehdy, když lze zanedbat tzv. spin-orbitální interakci, takže hamiltonián soustavy má strukturu

$$\mathcal{H}(x, y, z, \sigma) = \mathcal{H}_1(x, y, z) + \mathcal{H}_2(\sigma) \quad (42)$$

Spinové vlnové funkce  $\chi(\sigma)$  jsou vlastními funkcemi operátoru  $\mathcal{J}_z$ , takže vyhovují rovnici

$$\mathcal{J}_z \chi_{m_s}(\sigma) = m_s \hbar \chi_{m_s}(\sigma) \quad (m_s = \pm \frac{1}{2}) \quad (43)$$

Definujeme-li je takto

$$\begin{aligned} \chi_{\frac{1}{2}}(1) &= 1, & \chi_{\frac{1}{2}}(-1) &= 0 \\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1) &= 0, & \chi_{-\frac{1}{2}}(-1) &= 1 \end{aligned} \quad (44)$$

jsou vzájemně ortonormální, tj. platí

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \chi_{m_s}^*(\sigma) \chi_{m'_s}(\sigma) = \delta_{m_s, m'_s} \quad (45)$$

V literatuře často najdete též definované dvě spinové vlnové funkce  $\alpha(\sigma)$ ,  $\beta(\sigma)$ :

$$\begin{aligned} \chi(\sigma) &= \alpha(\sigma) \text{ jestliže } \chi(+1)=1, \chi(-1)=0 \\ \chi(\sigma) &= \beta(\sigma) \quad \quad \quad \chi(+1)=0, \chi(-1)=1 \end{aligned} \quad (46a)$$

nebo

$$\alpha(1) = 1, \alpha(-1) = 0, \beta(1) = 0, \beta(-1) = 1 \quad (46b)$$

Funkce  $\alpha$  odpovídá  $m_s = \frac{1}{2}$  (spin "nahoru" nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$  nebo  $|\uparrow\rangle$ ) a  $\beta$  pak  $m_s = -\frac{1}{2}$  (spin "dolů" nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$  nebo  $|\downarrow\rangle$ ).

Závěrem odstavce ještě uvedme, že častá je též reprezentace funkce (41) sloupcovým vektorem



$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x,y,z) \\ \psi_{\downarrow}(x,y,z) \end{pmatrix}, \quad (47)$$

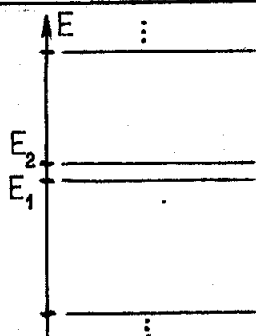
která je kombinací souřadnicové reprezentace s maticovým aparátem rozvínutým v odst. 1.3. Dostaneme ji, jestliže položíme

$$|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \chi_{\frac{1}{2}}^{(-1)} \end{pmatrix} \quad |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \chi_{-\frac{1}{2}}^{(-1)} \end{pmatrix} \quad (48)$$

## 2. Soustavy se dvěma stavy

### 2.1) Obecná úvaha o soustavách se dvěma stavy

Ve fyzice mikrosvěta existuje (vedle spinu 1/2) celá řada situací, které alespoň aproximativně mohou být traktovány jako problém kvantové soustavy se dvěma stavy. Mějme např. soustavu, v jejímž energiovém spektru jsou dvě hladiny blízko sebe a přitom jsou velice vzdálené od všech ostatních energiových hladin soustavy (obr.54)



Obr. 54.

Schematické znázornění energiového spektra, které dovoluje v 1. aproximaci traktovat soustavu jako soustavu se dvěma možnými stavy  $E_1, E_2$  (hladiny  $E_1, E_2$  jsou značně vzdálené od ostatních hladin v porovnání s hodnotou  $(E_2 - E_1)$ ).

Předpokládejme dále, že chceme vypočítat vliv vnějšího pole (nebo vnitřní interakce, která byla předtím zanedbaná) na tyto dva stavy. Je-li tato porucha dostatečně slabá, lze ukázat (viz kapitolu o poruchovém počtu v II. dílu nebo [11 - 13]), že výsledný vliv na zmíněné dvě blízké hladiny je možné v 1. aproximaci vypočítat tak, že ignorujeme existenci ostatních energiových hladin soustavy; všechny výpočty lze pak provést v dvourozměrném podprostoru  $\mathcal{E}_2$  celého prostoru stavových vektorů  $\mathcal{E}$ .

Pro další úvahy si zavedeme toto značení: uvažujme soustavu, jejíž stavy lze reprezentovat stavovými vektory z dvoudimenzionálního prostoru  $\mathcal{E}_2$ . Za bázi v něm vybereme vlastní vektory  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  hamiltoniánu soustavy  $\mathcal{H}_0$ ; odpovídající vlastní hodnoty energie označíme  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ , takže platí

$$\mathcal{H}_0 |\varphi_1\rangle = \varepsilon_1 |\varphi_1\rangle, \quad \mathcal{H}_0 |\varphi_2\rangle = \varepsilon_2 |\varphi_2\rangle \quad (49)$$

Báze nechť je ortonormální, takže

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (i, j=1, 2) \quad (50)$$

Předpokládejme nyní, že na soustavu navíc působí nějaké vnější (poruchové) pole, nebo, že chceme započíst vliv nějaké vnitřní interakce v systému, kterou jsme zatím zanedbávali. V obou případech bude mít hamiltonián tvar

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W} \quad (51)$$

Vlastní vektory  $\mathcal{H}$  označíme  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  a odpovídající vlastní hodnoty  $E_1, E_2$ . Platí tedy

$$\mathcal{H}|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle, \quad \mathcal{H}|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle \quad (52)$$

V bázi z vektorů  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  je operátor  $\mathcal{W}$  reprezentován maticí (odst. IV.1.5)

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad (53)$$

kde  $W_{ij} = \langle \varphi_i | \mathcal{W} | \varphi_j \rangle$ .

Matice je hermitovská, takže  $W_{11}, W_{22}$  jsou reálná čísla a

$$W_{12} = W_{21}^* \quad (54)$$

Přidání interakčního členu  $\mathcal{W}$  k hamiltoniánu  $\mathcal{H}_0$  má tyto důsledky:

- (i)  $E_1, E_2$  již nejsou možné hodnoty energie soustavy. Měření celkové energie musí dát  $E_1$  nebo  $E_2$  (vlastní hodnoty  $\mathcal{H}$ ), které se obecně liší od  $E_1, E_2$  (vlastní hodnoty  $\mathcal{H}_0$ ).
- (ii)  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  již nejsou stacionární stavy. Protože  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  již obecně nejsou vlastními stavy  $\mathcal{H}$ , nebudou to již stacionární stavy soustavy. Jestliže je např. soustava v čase  $t=0$  ve stavu  $|\varphi_1\rangle$ , existuje nenulová pravděpodobnost  $P_{12}(t)$ , že v čase  $t>0$  bude nalezena ve stavu  $|\varphi_2\rangle$ . Porucha  $\mathcal{W}$  tedy indukuje přechody mezi neporušenými stavy  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ .

Rozbor bodu (i) je v následujícím odstavci 2.2 a bodu (ii) v odst. 2.3.

## 2.2) Statické hledisko: vliv interakce na stacionární stavy soustavy

Hledané vlastní vektory  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  a odpovídající vlastní hodnoty  $E_1, E_2$  operátoru  $\mathcal{H}$  jsou řešením rovnice

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (55)$$

Řešení provedeme v bázi tvořené vektory  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ . V ní rozložíme  $|\psi\rangle$  takto:

$$|\psi\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle \quad (56a)$$

kde (srov. (IV.8))

$$c_1 = \langle \varphi_1 | \psi \rangle, \quad c_2 = \langle \varphi_2 | \psi \rangle \quad (56b)$$

jsou projekce  $|\psi\rangle$  na vektory báze  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ .

Rozvoj (56) dosadíme do (55) s tím, že  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W}$ . Dostaneme

$$(\mathcal{H}_0 |\varphi_1\rangle + \mathcal{W} |\varphi_1\rangle - E |\varphi_1\rangle) c_1 + (\mathcal{H}_0 |\varphi_2\rangle + \mathcal{W} |\varphi_2\rangle - E |\varphi_2\rangle) c_2 = 0$$

Nyní tuto rovnici vynásobíme zleva (uděláme skalární součin) jednou  $\langle \varphi_1 |$  a podruhé  $\langle \varphi_2 |$ ; získáme dvě rovnice, k jejichž úpravě použijeme (49), (50) a (53) (např. platí  $\langle \varphi_1 | \mathcal{H}_0 | \varphi_1 \rangle = \varepsilon_1$ ,  $\langle \varphi_1 | \mathcal{W} | \varphi_1 \rangle = w_{11}$ ,

$$\langle \varphi_1 | E | \varphi_1 \rangle = E \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = E \text{ apod.}):$$

$$(\varepsilon_1 + w_{11} - E) c_1 + w_{12} c_2 = 0 \quad (57a)$$

$$w_{21} c_1 + (\varepsilon_2 + w_{22} - E) c_2 = 0$$

nebo v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 + w_{11} - E & w_{12} \\ w_{21} & \varepsilon_2 + w_{22} - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (57b)$$

Matice soustavy bez veličiny  $E$ , je maticovou reprezentací  $\mathcal{H}$  v bázi  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ , celý výraz (57b) je maticovou reprezentací rovnice (55) v téže bázi. Soustava rovnic (57) pro hledané koeficienty  $c_1, c_2$  v (56), je homogenní (bez pravé strany); netriviální řešení (tj jiné než  $c_1 = c_2 = 0$ ) má pouze tehdy, když determinant soustavy je roven nule, tj když platí

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 + w_{11} - E & w_{12} \\ w_{21} & \varepsilon_2 + w_{22} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (58)$$

Rozvineme-li determinant (58), dostaneme kvadratickou rovnici v  $E$ . Její kořeny  $E_1, E_2$  jsou právě hledané vlastní hodnoty  $\mathcal{H}$ . Jednoduchý výpočet nám dá

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + w_{11} + \varepsilon_2 + w_{22}) + \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_1 + w_{11} - \varepsilon_2 - w_{22})^2 + 4|w_{12}|^2} \\ E_2 &= \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + w_{11} + \varepsilon_2 + w_{22}) - \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_1 + w_{11} - \varepsilon_2 - w_{22})^2 + 4|w_{12}|^2} \end{aligned} \quad (59)$$

Odpovídající vektory  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  získáme tak, že do jedné z rovnic (57) (druhá je vždy lineárně závislá a tudíž nadbytečná) dosadíme za  $E$  výraz pro  $E_1$ , resp.  $E_2$ , a vypočteme z ní poměr  $c_1/c_2$ . K určení hodnot  $c_1, c_2$ , každé zvlášť, pak ještě použijeme normalizační podmínku  $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$  ( $i=1,2$ ), což je ekvivalentní podmínce

$$|c_1^{(j)}|^2 + |c_2^{(j)}|^2 = 1 \quad (j=1,2; \text{indexy u E}) \quad (60)$$

Pozorný výpočet tak dá

$$|\psi_1\rangle = \cos(\theta/2) e^{-i\alpha/2} |\varphi_1\rangle + \sin(\theta/2) e^{i\alpha/2} |\varphi_2\rangle \quad (61a)$$

$$|\psi_2\rangle = -\sin(\theta/2) e^{-i\alpha/2} |\varphi_1\rangle + \cos(\theta/2) e^{i\alpha/2} |\varphi_2\rangle$$

kde úhly  $\alpha$ ,  $\theta$  jsou zavedeny vztahy

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{2|W_{12}|}{\varepsilon_1 + W_{11} - \varepsilon_2 - W_{22}} \quad (0 \leq \theta < \pi) \quad (61b)$$

$$W_{21} = |W_{21}| e^{i\alpha} ; \quad W_{12} = W_{21}^* = |W_{12}| e^{-i\alpha}$$

Diskuse získaného řešení.

Porucha  $\mathcal{W}$  vede k zajímavým důsledkům jen tehdy, když  $W_{12} = W_{21} \neq 0$ . Jestliže by bylo  $W_{12} = 0$ , potom by vlastní stavy  $\mathcal{H}$  byly shodné se stavy  $\mathcal{H}_0$  (viz (61)) a vlastní hodnoty  $\mathcal{H}$  by byly prostě  $E_1 = \varepsilon_1 + W_{11}$ ,

$E_2 = \varepsilon_2 + W_{22}$ . Předpokládáme proto, že  $W_{12} \neq 0$  a pro jednoduchost též  $W_{11} = W_{22} = 0$  (kdyby tomu tak nebylo, mohli bychom označit

$\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 + W_{11}$ ,  $\tilde{\varepsilon}_2 = \varepsilon_2 + W_{22}$ ). Označme ještě

$$\varepsilon_m = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2), \quad \Delta = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \quad (62)$$

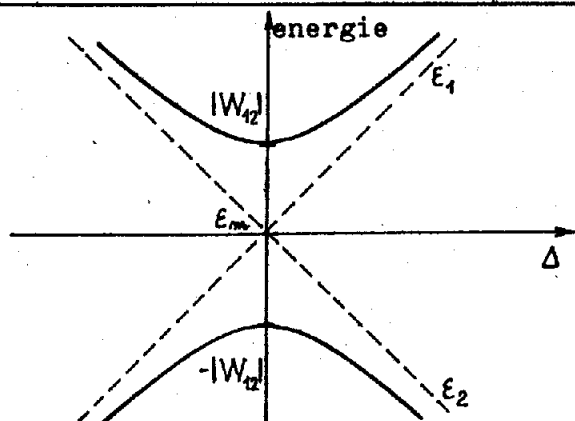
Potom z (59)

$$E_1 = \varepsilon_m + \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}, \quad E_2 = \varepsilon_m - \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} \quad (63)$$

Závislost  $E_1, E_2$  na  $\varepsilon_m$  je prostá: změna  $\varepsilon_m$  vede jen k posunu obou hodnot

$E_1, E_2$  podél osy energie (to je ekvivalentní posunu nuly na této ose).

Z (61) je vidět, že  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  na  $\varepsilon_m$  nezávisí. Závislost  $E_1, E_2$  na parametru  $\Delta$  je na obr 55. Je z ní vidět, že vlivem interakčního členu  $\mathcal{W}$



Obr. 55.

Závislost  $E_1, E_2$  na  $\Delta = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ .

Pro  $\mathcal{W} \rightarrow 0$  ( $|W_{12}| \rightarrow 0$ ) přechází

hyperboly  $E_1, E_2$  v asymptoty  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ .

s  $|W_{12}| \neq 0$ , dochází ke vzdalování původních hladin. Jestliže neporušený stav byl degenerovaný, tj  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_m$  ( $\Delta = 0$ ), dojde k sejmutí degenerace vlivem  $\mathcal{W}$ , přičemž vzdálenost nových hladin je  $2|W_{12}|$ .

### 2.3) Dynamické hledisko: oscilace soustavy mezi dvěma stacionárními stavy

Stavový vektor  $|\psi\rangle$  z předcházejícího odstavce, je obecně závislý na čase; v (56) se to projeví závislostí  $c_1$  a  $c_2$  na  $t$ :

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) |\psi_1\rangle + c_2(t) |\psi_2\rangle \quad (64)$$

Protože  $|c_i|^2$  ( $i=1,2$ ) udává pravděpodobnost, že soustava bude nalezena ve stavu  $|\psi_i\rangle$ , bude se tato pravděpodobnost měnit s časem, přičemž ovšem stále musí platit normalizační podmínka (60); soustava tedy bude přecházet mezi stavy  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$ . Časový vývoj stavu soustavy, tj vývoj  $|\psi(t)\rangle$ , je dán Schrödingerovou rovnicí (6. postulát)

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{W}) |\psi(t)\rangle \quad (65)$$

Dosadíme-li do ní z (64) a opakujeme proceduru, která nás přivedla k rovnicím (57), dostaneme dvě diferenciální rovnice pro funkce  $c_1(t)$ ,  $c_2(t)$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) &= (\varepsilon_1 + W_{11}) c_1(t) + W_{12} c_2(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) &= W_{21} c_1(t) + (\varepsilon_2 + W_{22}) c_2(t) \end{aligned} \quad (66)$$

Je-li  $|W_{12}| \neq 0$ , jde o soustavu dvou (vzájemně svázaných) homogenních diferenciálních rovnic s konstantními koeficienty; jejich řešení proto hledáme v obvyklém exponenciálním tvaru

$$c_1(t) = a_1 e^{-iEt/\hbar}, \quad c_2(t) = a_2 e^{-iEt/\hbar} \quad (67)$$

kde energie  $E$  musí být určena tak, aby funkce vyhovovaly rovnicím (66). Dosazením (67) do (66) a dělením obou rovnic exponentou, dostaneme soustavu dvou homogenních algebraických rovnic pro  $a_1, a_2$ :

$$\begin{aligned} (\varepsilon_1 + W_{11} - E) a_1 + W_{12} a_2 &= 0 \\ W_{21} a_1 + (\varepsilon_2 + W_{22} - E) a_2 &= 0 \end{aligned} \quad (68)$$

To je opět soustava rovnic (57), z níž dostaneme pro vlastní hodnoty  $\mathcal{H}$  veličiny  $E_1, E_2$  vyjádřené (59) a odpovídající stacionární stavové vektory (61). Stavový vektor v  $t = 0$  můžeme nyní rozložit v bázi  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$ :

$$|\psi(0)\rangle = b_1 |\psi_1\rangle + b_2 |\psi_2\rangle \quad (69)$$

kde  $b_1, b_2$  jsou konstanty, které se určí z počátečních podmínek. Potom (srov. (III.18))

$$|\psi(t)\rangle = b_1 \exp(-i \frac{E_1}{\hbar} t) |\psi_1\rangle + b_2 \exp(-i \frac{E_2}{\hbar} t) |\psi_2\rangle \quad (70)$$

(koeficienty  $a_1, a_2$  z (67) určíme porovnáním projekcí  $|\psi(t)\rangle$  na bázi  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ , tj.  $\langle\varphi_1|\psi(t)\rangle, \langle\varphi_2|\psi(t)\rangle$ , vypočtených z (70) a (64) po dosazení z (67)).

Ukážeme nyní, že soustava se stavovým vektorem  $|\psi(t)\rangle$  osciluje mezi stavy  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ . Nechť v čase  $t=0$  je soustava ve stavu  $|\varphi_1\rangle$ , takže (po dosazení  $|\varphi_1\rangle$  vypočtené z (61))

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = e^{i\alpha/2} [\cos(\theta/2) |\psi_1\rangle - \sin(\theta/2) |\psi_2\rangle] \quad (71)$$

Porovnáním s (70) pak je

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha/2} [\cos(\theta/2) e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle - \sin(\theta/2) e^{-iE_2 t/\hbar} |\psi_2\rangle] \quad (72)$$

Amplituda pravděpodobnosti, že v čase  $t$  bude soustava ve stavu  $|\varphi_2\rangle$  je

$$\begin{aligned} \langle\varphi_2|\psi(t)\rangle &= e^{i\alpha/2} [\cos(\theta/2) e^{-iE_1 t/\hbar} \langle\varphi_2|\psi_1\rangle - \sin(\theta/2) e^{-iE_2 t/\hbar} \langle\varphi_2|\psi_2\rangle] = \\ &= e^{i\alpha} \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) [e^{-iE_1 t/\hbar} - e^{-iE_2 t/\hbar}] \end{aligned} \quad (73)$$

Pravděpodobnost, že v čase  $t$  bude soustava ve stavu  $|\varphi_2\rangle$  pak je

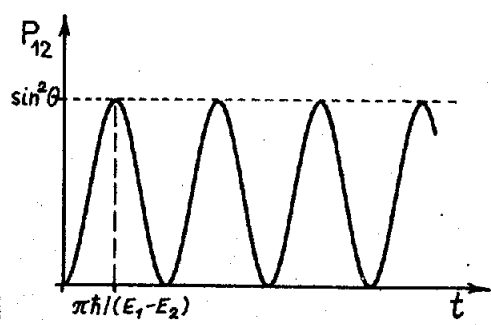
$$P_{12}(t) = |\langle\varphi_2|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2 \theta \sin^2 \left( \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t \right) \quad (74)$$

Po dosazení z (59) a (61b) (klademe opět  $W_{11}=W_{22}=0$ )

$$P_{12}(t) = \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \sin^2 \left[ \sqrt{4|W_{12}|^2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \frac{t}{2\hbar} \right] \quad (75)$$

Výraz (75) pro  $P_{12}(t)$  se někdy nazývá Rabiho formule.

Z (75) je vidět, že  $P_{12}(t)$  osciluje s frekvencí  $\omega = (E_1 - E_2)/\hbar$  (obr.56). Frekvence  $\omega$  i maximální hodnota  $P_{12}$  ( $= \sin^2 \theta$ ), závisí na  $|W_{12}|$ . Největší vliv má interakce v případě  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_m$ , kdy  $\omega = 2|W_{12}|/\hbar$  a  $\sin^2 \theta$  dosahuje maximální hodnoty rovné 1.



Obr. 56.

Pravděpodobnost  $P_{12}(t)$  nalezení soustavy v čase  $t$  ve stavu  $|\psi_2\rangle$ , jestliže v  $t=0$  byla soustava v  $|\psi_1\rangle$ .

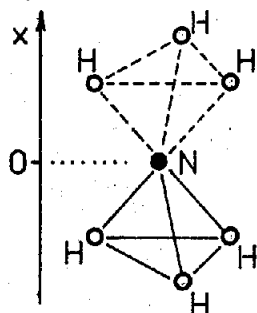
Jsou-li neporušené hladiny stejné ( $\epsilon_1 = \epsilon_2$ ), potom  $P_{12}(t)$  se mění mezi 0 a 1.

V časech  $t = (2k+1)\pi\hbar/2|W_{12}|$  je soustava (která v  $t=0$  byla v  $|\psi_1\rangle$ ) ve stavu  $|\psi_2\rangle$ . Když  $(\epsilon_1 - \epsilon_2)$  roste, zvětšuje se i frekvence  $\omega$ , zatímco  $\sin^2\theta$  klesá. Při slabé vazbě ( $\epsilon_1 - \epsilon_2 \gg |W_{12}|$ ) se rozdíl  $E_1 - E_2$  málo liší od  $\epsilon_1 - \epsilon_2$  a  $\sin^2\theta$  je velmi malý. Stav  $|\psi_1\rangle$  je potom velmi blízký  $|\psi_1\rangle$  a soustava, která v  $t=0$  byla v  $|\psi_1\rangle$ , se s časem vyvíjí valice pomalu (při  $|W_{12}| = 0$  zůstává trvale ve stacionárním stavu  $|\psi_1\rangle$ ).

## 2.4) Příklady soustav se dvěma stavy. Kvantová rezonance

### 2.4.1 Molekula $\text{NH}_3$

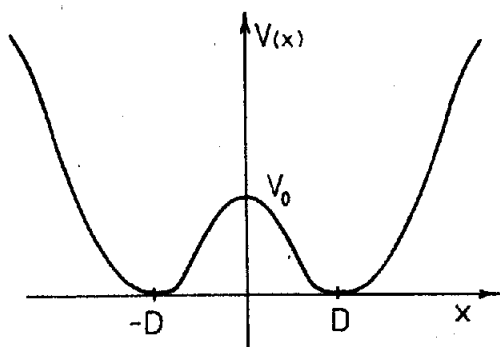
V molekule  $\text{NH}_3$  tvoří 3 atomy H základnu pyramidu, v jejímž vrcholu je atom N (obr.57). Taková molekula, stejně jako každá jiná, má nekonečně mnoho možných stavů; může rotovat kolem libovolné osy, pohybovat se v libovolném směru, atomy mohou kmitat atd. Striktně vzato tedy nejde o soustavu se dvěma možnými stavy. Přesto má dobrý smysl rozbor následujícího jednoduchého modelu, v němž jsou všechny stavy, až na dva, zafixovány.



Obr. 57.

Schematické znázornění molekuly  $\text{NH}_3$ ;  $x$  je vzdálenost roviny určené trojicí atomů H od atomu N, který pokládáme za pevný v bodě  $x=0$ .

Budeme předpokládat, že 3 atomy H tvoří tuhý rovnostranný trojúhelník, jehož osa stále prochází atomem N, který budeme považovat za nepohyblivý. Potenciální energie molekuly je pak pouze funkcí vzdálenosti roviny, určené atomy H, od atomu N. Musí mít zřejmě dvě minima, která odpovídají dvěma geometricky shodným rovnovážným konfiguracím v obr.57; schematicky je znázorněna v obr. 58. Tím se úloha zredukovala na jednorozměrnou,



Obr. 58.

Schematické znázornění závislosti potenciální energie molekuly  $\text{NH}_3$  na vzdálenosti roviny tvořené atomy H od atomu N. Funkce je symetrická vzhledem k  $x=0$ , rovnovážné konfigurace s minimální energií odpovídají  $x = \pm D$ .

v níž se fiktivní částice s redukovanou hmotností  $\mu = 3m_H m_N / (3m_H + m_N)$  pohybuje v poli s  $V(x)$  podle obr.58. Řešení by bylo možné provést tak, jak jsme to dělali v kap.III. Nám však nyní jde o pohled z hlediska soustav se dvěma stavy.

Stav, v němž je rovina vodíků v  $x=+D$ , označíme  $|\varphi_1\rangle$  a stav s polohou  $x=-D$ , jako  $|\varphi_2\rangle$ . Kdyby bariéra mezi oběma byla nekonečně vysoká ( $V_0 \rightarrow \infty$  v obr.58), potom by nebyl možný přechod z jednoho stavu do druhého (zmíněná fiktivní částice by byla lokalizována buď v okolí  $x=+D$ , tj ve stavu  $|\varphi_1\rangle$ , nebo v okolí  $x=-D$ , tj ve stavu  $|\varphi_2\rangle$ ); vzhledem k symetrii problému by energie  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ , příslušející  $|\varphi_1\rangle$ , resp.  $|\varphi_2\rangle$ , byly rovny, tj  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_m$ , a hamiltonián by měl v bázi  $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$  tvar

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_m & 0 \\ 0 & \epsilon_m \end{pmatrix} \quad (76)$$

Při konečné výšce bariéry  $V_0$  však může molekula přecházet z jednoho stavu do druhého (tunelový jev) a obecný stav je superpozicí (56) obou bázevých stavů

$$|\psi\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle \quad (77)$$

V hamiltoniánu  $\mathcal{H}$ , jestliže bude i nadále vyjádřen v bázi  $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ , jsou nediagonální prvky nenulové; označíme-li  $w_{12} = w_{21}^* = -A$  ( $A > 0$ )

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_m & -A \\ -A & \epsilon_m \end{pmatrix} \quad (78)$$

Jeho vlastní hodnoty  $E_1, E_2$  jsou dány (63):

$$E_1 = \epsilon_m + A, \quad E_2 = \epsilon_m - A \quad (79)$$

Z první rovnice (57) je ( $w_{11} = w_{22} = 0$ )

$$\frac{c_1}{c_2} = \frac{A}{\epsilon_m - E} \quad (80)$$



Odtud

$$\text{pro } E = E_1 \quad \text{je} \quad c_1 = -c_2 \quad (81a)$$

$$\text{pro } E = E_2 \quad \text{je} \quad c_1 = c_2 \quad (81b)$$

Z normalizační podmínky (60) dále plyne

$$|c_1| = |c_2| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (81c)$$

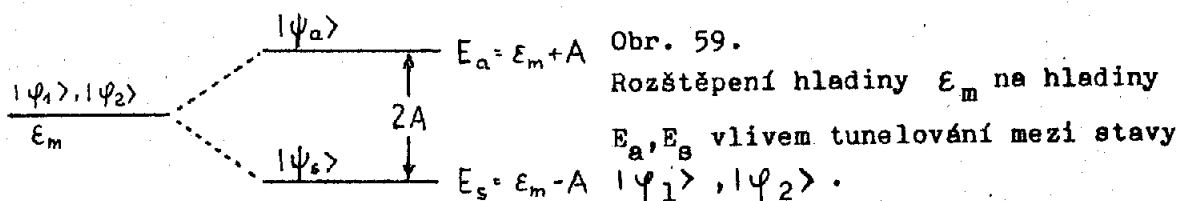
Vzhledem k (81) zavedeme přehlednější značení: index a (antisymetrický;  $c_1 = -c_2$ ) místo 1 a index s (symetrický;  $c_1 = c_2$ ) místo 2, pro rozlišení stavů a energií operátoru  $\mathcal{H}$ . Normalizované vlastní vektory operátoru  $\mathcal{H}$  pak jsou

$$|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle) \quad \text{pro } E_a = \varepsilon_m + A \quad (82a)$$

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) \quad \text{pro } E_s = \varepsilon_m - A \quad (82b)$$

Tento výsledek samozřejmě získáme i z obecného řešení (61), kde  $\theta = \pi/2$ , neboť  $\tan \theta \rightarrow \infty$ . Zpravidla se však při řešení konkrétní úlohy provádí výpočet přímo, tak jak jsme to dělali my.

Rozštěpení dvojnásobně degenerované hladiny  $\varepsilon_m$  (sejmutí degenerace; obr. 59) je podmíněno možností přechodů mezi stavy  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ , tedy čistě kvantověmechanickým jevem - tunelováním.



Molekula  $\text{NH}_3$  přechází mezi inverzními stavy  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  s frekvencí

$$\omega = \frac{E_a - E_s}{\hbar} = \frac{2A}{\hbar} \quad (83)$$

Jestliže v  $t=0$  byla ve stavu  $|\varphi_1\rangle$  :

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_s\rangle + |\psi_a\rangle)$$

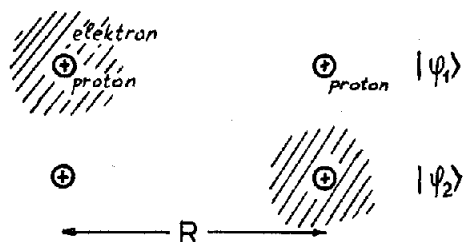
( $|\varphi_1\rangle$  vypočteme ze dvou rovnic, které získáme dosazením (81) do (77))  
potom v čase  $t > 0$  bude ve stavu

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} \left[ e^{iAt/\hbar} |\psi_s\rangle + e^{-iAt/\hbar} |\psi_a\rangle \right] = \\ &= e^{-i\varepsilon_1 t/\hbar} \left[ \cos(At/\hbar) |\varphi_1\rangle + i \sin(At/\hbar) |\varphi_2\rangle \right] \end{aligned} \quad (84)$$

Významným poznatkem je skutečnost, že vlivem přechodů mezi stavy  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$ , došlo ke stabilizaci molekuly  $\text{NH}_3$ : ve stavu  $|\psi_g\rangle$  je totiž její energie  $E_g < \varepsilon_m$ . Z druhé strany je však třeba vidět, že představa o přechodech mezi stavy  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$  je důsledkem volby báze, v níž se problém řešil. Kdybychom za bázi vzali např. vlastní vektory  $\mathcal{H}$ , tj.  $|\psi_g\rangle$ ,  $|\psi_a\rangle$ , hamiltonián (78) by v této bázi byl diagonální, s vlastními hodnotami  $E_1, E_2$  na diagonále. Problém by byl rozřešen, aniž bychom o nějakých stavech  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$ , a přechodech mezi nimi, vůbec uvažovali. Základní stav molekuly  $\text{NH}_3$  by byl  $|\psi_g\rangle$  a jeho energie  $E_g$ .

#### 2.4.2 Iont $\text{H}_2^+$

Ionizovaná molekula vodíku -  $\text{H}_2^+$  - je tvořena dvěma protony a jedním elektronem, který se nachází někde v jejich okolí. Předpokládáme, že protony jsou ve vzdálenosti  $R$  a jsou nepohyblivé. Jaké budou možné stavy této soustavy, jestliže  $R$  je velké? Jistě si můžeme dobře představit, že elektron zůstane u jednoho z protonů, s nímž vytvoří atom  $\text{H}$ , zatímco druhý proton zůstane bez elektronu (obr.60). Elektron v atomu  $\text{H}$  může být v nekonečně mnoha excitovaných stavech; tato problematika nás však nyní nezajímá.

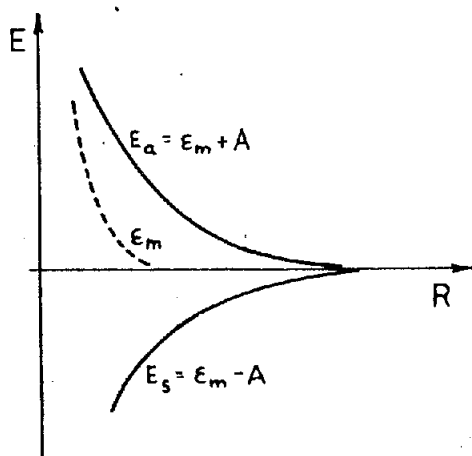


Obr. 60.

Dva možné stavy soustavy: dva nepohyblivé protony ve velké vzdálenosti  $R$  + jeden elektron. Stavům  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  přísluší též energie  $\varepsilon_m$ .

Budeme předpokládat, že elektron je v základním stavu ( $1s$ ) a též jeho spin má jen jednu orientaci (např.  $|\uparrow\rangle$ ). K odtržení elektronu (ionizaci) od atomu  $\text{H}$  je třeba energie  $13,6\text{eV}$ . Je-li  $R$  velké, je to též energie k přenesení elektronu do středu spojnice obou protonů. Z klasického hlediska je proto přechod elektronu od jednoho protonu ke druhému nemožný. Z kvantověmechanického hlediska však vždy existuje nenulová (byť třeba nepatrná) pravděpodobnost, že k takovému přechodu dojde.

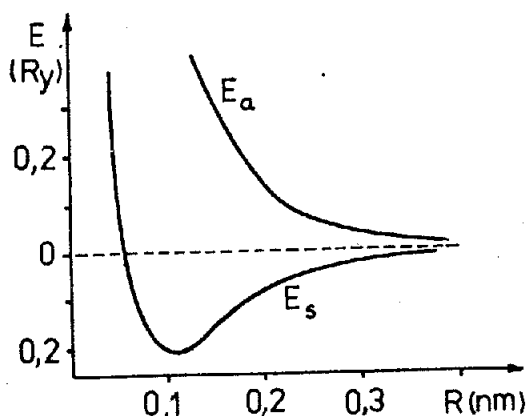
Vezmeme-li za bázi k řešení problému  $\text{H}_2^+$  stavové vektory  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  (obr.60), bude v ní mít hamiltonián  $\mathcal{H}_0$  (který odpovídá soustavě atom  $\text{H}$  + proton bez vzájemné interakce, tj.  $R \rightarrow \infty$ ) tvar (76) a hamiltonián  $\mathcal{H}$  (se započtenou interakcí) tvar (78). Přitom maticový prvek  $W_{12} = -A$  ( $A > 0$ ;  $W_{12} = \langle \psi_1 | \mathcal{H} | \psi_2 \rangle$ ) závisí na  $R$ . Při sblížování protonů pravděpodobnost přechodu elektronu (a tedy i  $A$ ) roste a vzdálenost hladin  $E_g, E_a$ , které přísluší k vlastním stavům  $|\psi_g\rangle$ ,  $|\psi_a\rangle$  (viz(82)) operátoru  $\mathcal{H}$ , se zvětšuje.



Obr. 61.

Schematické znázornění závislosti energie dvou stacionárních stavů elektronu v  $H_2^+$  na vzdálenosti protonů  $R$ . Čárkovaná křivka: schematické znázornění  $\epsilon_m$  se započtenou elektrostatickou interakcí protonů. U křivek  $E_a$ ,  $E_s$  se předpokládalo  $\epsilon_m$  nezávislé na  $R$ .

Ve stavu  $|\psi_a\rangle$  energie  $E_a$  s klesajícím  $R$  roste, takže kvantověmechanické efekty vedou k odpudivé síle. Ve stavu  $|\psi_s\rangle$  naopak dávají přitažlivé působení a objasňují tak vznik vazby v  $H_2^+$ . Tyto přitažlivé síly však neporostou pro  $R \rightarrow 0$  tak, jak by na první pohled plynulo z křivky  $E_s$  v obr.61. Nevzali jsme totiž zatím v úvahu elektrostatické odpuzování mezi protony. Pokud jsou protony daleko od sebe (obr.60), je interakce zanedbatelná, neboť na sebe působí proton odstíněný záporným nábojem (tj elektricky neutrální atom H) s kladně nabitým protonem. Při malých vzdálenostech, když druhý proton je již v oblasti elektronového obalu atomu H, se však začne tato odpudivá interakce výrazně projevovat a přispívat do celkové energie soustavy. Formálně se to projeví závislostí  $\epsilon_m$  na  $R$ , tak jak je to schematicky znázorněno v obr.61; jinými slovy: pro malá  $R$  nemůžeme již zanedbávat prvky  $W_{11}, W_{22}$  (vzhledem k symetrii problému je  $W_{11} = W_{22}$ ). Přidáme-li energii  $A$  k tomuto  $\epsilon_m$ , dostaneme křivky z obr.62. Vidíme, že energie ve stavu  $|\psi_s\rangle$  má minimum pro nějaké  $R = R_0$ , což bude rovnovážná vzdálenost protonů v molekulárním iontu  $H_2^+$ . Energie je při této vzdálenosti protonů menší než energie izolovaného atomu H + protonu, takže dochází k vazbě vlivem elektronu.



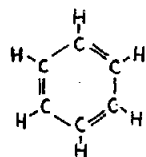
Obr. 62.

Energiové hladiny elektronu v iontu  $H_2^+$  jako funkce vzdálenosti mezi protony  $R$ . Energie je v jednotkách Ry (rydberg).  $1 \text{ Ry} = 13,6 \text{ eV}$  (ionizační energie pro stav  $1s$  ve vodíku).

V souvislosti s touto vazbou se často mluví o "kvantověmechanické rezonanci" (termín je zřejmě převzat z klasické analogie: dva vázané oscilátory si vzájemně předávají energii). Ovšem, jak už jsme řekli u molekuly  $\text{NH}_3$ , tato "rezonance" je jen důsledkem našeho výběru báze (z tohoto hlediska vlastně nepřiliš vhodného), v níž jsme problém řešili. Budeme-li přímo diagonalizovat matici  $\mathcal{H}$  (tj. hledat vlastní vektory a hodnoty  $\mathcal{H}$ ), potom si existenci nějaké "rezonance" nemusíme ani uvědomit. Obrazně řečeno: elektronu v  $\text{H}_2^+$  (a stejně i v kterékoliv jiné situaci) je zcela lhostejné, jak hledáme jeho možné energie a stavy; prostě v nich existuje. Je třeba také říci, že náš, do značné míry kvalitativní, rozbor iontu  $\text{H}_2^+$ , jakožto soustavy se dvěma stavy, přestává mít vlastně smysl pro vzdálenosti  $R$  blízké se  $R_0$ . Pro tato  $R$  bychom již nedostávali touto metodou dobré hodnoty vazební energie, neboť energie "dvou stavů"  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$  již nejsou rovny  $\epsilon_m$ ; s preciznějším kvantověmechanickým řešením se seznámíme později v II.dílu skriptu.

### 2.4.3 Molekula benzenu

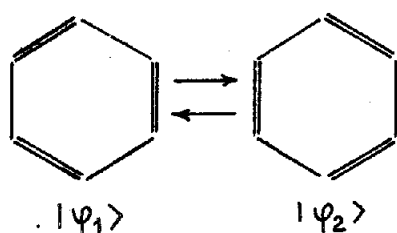
Molekulu benzenu chemici zpravidla znázorňují formulí



v níž každá spojovací čárka představuje dvojici elektronů s opačnými spiny. Každý atom H přispívá k vazbě jedním elektronem a každý uhlík čtyřmi; celkem je to 30 elektronů (zbývající elektrony v atomech C jsou tak silně vázány k jádrům, že se na vazbě prakticky nepodílí). Protože z jiných sloučenin je možné zjistit energii jednoduché a dvojné vazby (např. z vazební energie etylénu energii dvojné vazby), můžeme spočítat i energii vazeb v molekule benzenu, znázorněné výše uvedeným vzorcem. Skutečná vazební energie je však mnohem větší: benzenové jádro



je těžko rozrušitelné. Pochopit to můžeme stejným způsobem jako v předcházejících příkladech, jestliže na molekulu benzenu budeme pohlížet (aproximativně) jako na soustavu se dvěma stavy. Můžeme si totiž představit, že dvojné vazby jsou rozloženy dvěma možnými způsoby podle obr. 63. Vezmeme-li tyto konfigurace za базовé stavy  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$ , bude, vzhledem k symetrii, příslušet oběma též energie  $\epsilon_m$ .



Obr. 63.

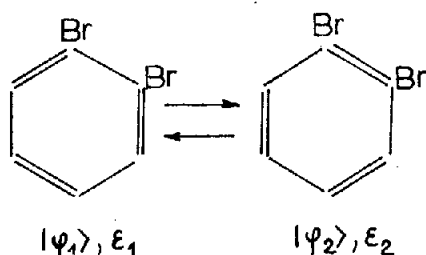
Dva базовé stavy pro molekulu benzenu. Vzhledem k symetrii, přísluší oběma též energie  $\epsilon_m$ .

Další výklad by byl již jen pouhým opakováním toho, co bylo řečeno v předcházejících odstavcích. Základní stav molekuly benzenu (82b)

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle ) \quad (85)$$

je superpozicí (hybridem) vybraných báзовých vektorů; energie v tomto stavu je  $E_s = \epsilon_m - A$ ; o energii  $A$ , která má zásluhu na stabilitě benzenového jádra, se v chemii mluví jako o rezonanční energii. Znovu však musíme zdůraznit: skutečným základním stavem molekuly benzenu není ani  $|\varphi_1\rangle$ , ani  $|\varphi_2\rangle$ , ale stav  $|\psi_s\rangle$  s energií  $E_s$  ( $|\psi_s\rangle$  je vlastním vektorem hamiltoniánu  $\mathcal{H}$ ). To, že ho vyjadřujeme jako superpozici stavů  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$  podle (85), je jen otázka výběru báze v našem (přibližném) prostoru stavových vektorů  $\mathcal{E}_2$  pro kvantovou soustavu: molekulu benzenu. Bázi bychom v tomto prostoru  $\mathcal{E}_2$  mohli samozřejmě vybrat nekonečně mnoho; zvolená má výhodu v tom, že vzhledem k vžitě chemické symbolice a historicky vzniklé představě o stavbě molekul, je názorná. V základním stavu molekuly benzenu  $|\psi_s\rangle$  však nemá smysl mluvit o lokalizovaných dvojných nebo jednoduchých vazbách. Vazební elektrony jsou v benzenu delokalizovány podél celého jádra (pravděpodobnost nalézt konfiguraci  $|\varphi_1\rangle$  je stejná jako nalézt  $|\varphi_2\rangle$ : je rovna  $|1/\sqrt{2}|^2 = 1/2$ ).

V dosavadních příkladech byla energie obou výchozích báзовých stavů stejná. Jako příklad soustav, v nichž tomu tak není si uveďme molekulu orto-dibrombenzenu, která vznikne z benzenu nahrazením dvou atomů vodíku na sousedních uhlících atomy Br; jestliže za bázi vezmeme dva stavy podle obr. 64, musíme počítat s tím, že odpovídající energie těchto konfigurací budou mírně odlišné -  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ; obecné řešení je v odst. 2.2.



Obr. 64.

Dva báзовé stavy pro molekulu orto-dibrombenzenu. Protože v  $|\varphi_2\rangle$  jsou atomy vázány na uhlíky spojené dvojnou vazbou, bude tato konfigurace mít jinou energii než ve stavu  $|\varphi_1\rangle$ .

Základní stav  $|\psi_2\rangle$  (61) s energií  $E_2$  (59) bude vyjádřen opět lineární kombinací  $|\varphi_1\rangle$ ,  $|\varphi_2\rangle$  (56), ovšem koeficienty  $c_1, c_2$  (které vypočítáme z (57)) již nebudou v absolutní hodnotě stejné:  $|c_1|^2 \neq |c_2|^2$ .

Pravděpodobnost, že v stacionárním stavu  $|\psi_2\rangle$  najdeme molekulu v konfiguraci odpovídající stavu  $|\varphi_1\rangle$  bude jiná než pro stav  $|\varphi_2\rangle$ .

K určení skutečných hodnot  $c_1$ ,  $c_2$  jsou ovšem potřeba další informace o molekule.

## VI. SOUSTAVY STEJNÝCH ČÁSTIC

V kap. IV jsme uvedli základní postuláty nerelativistické kvantové mechaniky částic a v kap. V jsme je doplnili postulováním spinu částic. Nyní ukážeme, že ani potom ještě není soubor postulátů dostačující, jestliže bychom ho aplikovali na úlohy spojené se soustavami stejných částic; dostávali bychom totiž nejednoznačné předpovědi o chování studované soustavy. Na rozdíl od předcházející kapitoly, provedeme podstatnou část výkladu v obvyklé souřadnicové reprezentaci a až v závěru se stručně zmíníme o reprezentaci obsazovacích čísel, která je pro tuto oblast kvantové mechaniky mnohem vhodnější.

### 1. Problém stejných částic

#### 1.1) Nerozlišitelnost identických mikročástic

Dvě částice jsou identické, jestliže všechny jejich vnitřní charakteristiky (hmotnost, náboj, spin atd) jsou přesně stejné a žádný experiment nemůže tyto částice rozlišit. Tak např. všechny elektrony ve vesmíru jsou identické, stejně jako třeba všechny protony nebo vodíkové atomy. Na rozdíl od klasické mechaniky, má nerozlišitelnost identických mikročástic fundamentální důsledky v chování souborů z těchto částic a tedy i v aparátu kvantové mechaniky.

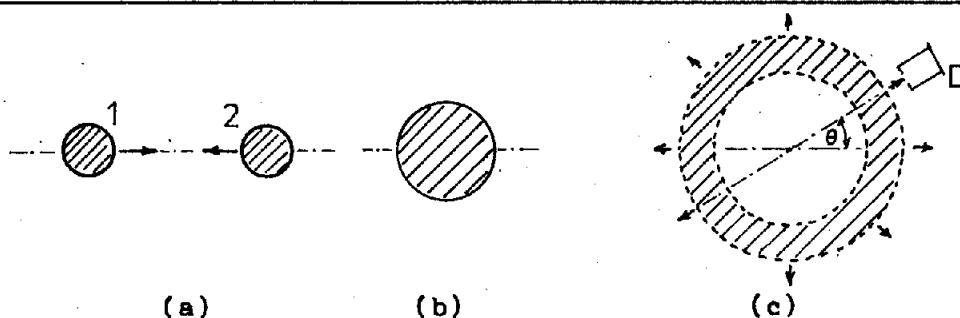
V klasické mechanice se předpokládá ( i když víceméně implicitně), že sledované částice lze vždy rozlišovat, aniž by to nějak měnilo dynamický stav soustavy těchto částic. Tak např. kulečnickové koule lze rozlišit barvou nebo napsanými čísly a přitom nic nezměnit na jejich pohybu. A i když tento "primitivní" způsob rozlišení není možný (např u hmotných bodů, což je základní abstrakce s níž klasická mechanika pracuje), vždy zde zbývá možnost rozlišovat částice podle jejich trajektorie. Každá částice má totiž svou spojitou a z Newtonových rovnic jednoznačně určenou trajektorii ( spojité křivka v matematickém slova smyslu); podle toho, že v daném časovém okamžiku se nachází částice v určitém bodě některé trajektorie, můžeme vždy rozhodnout o kterou částici jde.

V kvantové mechanice však i tato poslední a principiální možnost mizí. Příčiny by měly vyplynout ze závěrů v kap.II. Doplníme si je ještě následující úvahou o rozptylu dvou mikročástic.

Z hlediska klasické mechaniky je stav (souřadnice + impuls) každé z částic v čase  $t=0$  určen počátečními podmínkami. Částice se pohybují po přesně určených trajektoriích, v nějakém bodě prostoru se srazí (interagují) a pohybují se dále po jednoznačně určených drahách. Z počátečních podmínek a zadaného silového působení mezi částicemi, se dá z Newtonových

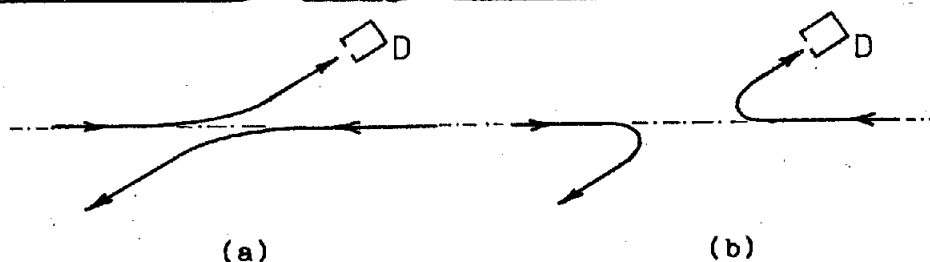
rovníc určit trajektorie každé z částic a podle toho na které trajektorii se částice nachází, je možné v každém okamžiku určit o kterou z nich jde.

Zcela jinak probíhá srážka dvou mikročástic. Předpokládejme, že před srážkou jsme měli částice reprezentované dvěma zcela separovanými vlnovými klubky, která se pohybovala ( v souřadné soustavě spojené s těžištěm částic) proti sobě. Pro určitost říkejme, že zleva přichází částice 1 a zprava částice 2 (obr.65a). Během srážky dojde k překrytí klubek (obr.65b).



Obr. 65. Srážka dvou identických mikročástic v souřadné soustavě spojené s těžištěm. Před srážkou (a) jsou částice zcela separované. Během srážky (b) dojde k překrytí vlnových klubek. Po srážce (c) je pravděpodobnost nalezení částice nenulová v kulové vrstvě, jejíž poloměr se s časem zvětšuje. Protože částice jsou identické, nemůžeme rozhodnout, kterou z nich registroval detektor D.

Po srážce (obr.65c) je nenulová pravděpodobnost nalézt částici v kulové vrstvě, jejíž poloměr se s časem zvětšuje. Jestliže detektor D, umístěný ve směru určeném úhlem  $\theta$  (vzhledem k počátečním rychlostem částic) registruje částici, znamená to, že druhá z částic se musí (vzhledem k zachování impulsu) pohybovat v opačném směru. Není však možné rozhodnout, zda detektor registroval částici původně označenou 1 nebo 2. Není tedy možné rozhodnout, která ze dvou alternativ na obr. 66 se realizovala.



Obr. 66. Schematické znázornění dvou možných "drah" při srážce dvou identických částic (obr.65); není principiálně možné rozhodnout, která z nich se realizovala.

Jestliže bychom nyní aplikovali postuláty z kap.IV, dostali bychom se do obtíží; k určení pravděpodobnosti výsledku měření je totiž nutné znát stavový vektor, který odpovídá výsledku měření. Zde však máme dva podle obr.66; ket-vektory pro obr.66a a 66b jsou různé (a dokonce ortogonální).

Přesto jim z hlediska měření odpovídá jediný fyzikální stav, neboť nelze postavit takový experiment, který by je ještě navíc rozlišil. Máme tedy pravděpodobnost výsledku počítat užitím obr.66a,66b nebo obou? Jestliže se vezmou oba stavy, mají se sečítat pravděpodobnosti nebo amplitudy pravděpodobnosti (a s jakým znaménkem?) ?

Jako další příklad si ještě uveďme soustavu tvořenou dvěma vodíkovými atomy. Jsou-li atomy tak vzdálené, že se vlnové funkce nepřekrývají, potom je každý z elektronů prakticky lokalizován u svého jádra. S přibližováním atomů roste oblast překrytí vlnových funkcí, tj. oblast, v níž je možné nalézt oba elektrony. Jestliže výsledkem experimentu je zjištění, že v této oblasti je elektron, neexistuje už způsob dovolující rozhodnout, který z obou elektronů to je.

Uvedené příklady ukazují, že identita kvantových částic má mnohem hlubší podstatu než u klasických částic; na rozdíl od klasicky pojímaných částic jsou identické mikročástice nejen ve všem všudy stejné, ale i nerozlišitelné. Tato skutečnost musí být zabudována do aparátu kvantové mechaniky a důsledkem toho musí být i úplné odstranění výše zmíněných nejednoznačností v předvídání výsledků měření.

## 1.2) Symetrické a antisymetrické stavy

Mějme soustavu tvořenou dvěma částicemi, např. dva elektrony v elektronovém obalu atomu He. Vlnová funkce této soustavy bude záviset na polohových vektorech obou elektronů  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  (spinovou proměnnou zatím pro jednoduchost nebudeme uvažovat) tj.  $\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$ . Kdyby částice byly rozlišitelné, potom by výraz (viz odst. II.3.3)

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \quad (1)$$

udával pravděpodobnost, že v čase  $t$  najdeme 1.částici v infinitesimálním objemu  $dx_1 dy_1 dz_1$  opsaném kolem bodu  $\vec{r}_1$  a současně 2.částici v objemu  $dx_2 dy_2 dz_2$  opsaném kolem bodu  $\vec{r}_2$ . Jsou-li částice nerozlišitelné, můžeme pouze tvrdit, že výraz (1) udává pravděpodobnost, že v čase  $t$  najdeme jednu z částic (nevíme která to je) v objemu  $dx_1 dy_1 dz_1$  v okolí  $\vec{r}_1$  a současně druhou z nich v okolí  $dx_2 dy_2 dz_2$  bodu  $\vec{r}_2$ . Matematicky vyjádřeno to znamená, že výraz pro hustotu pravděpodobnosti  $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2$  se nesmí změnit (musí být invariantní) při záměně souřadnic, tj. musí být

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1; t)|^2 \quad (2)$$

Pro samotnou vlnovou funkci to znamená, že

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \pm \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1; t) \quad (3)$$

Důkaz provedeme současně se zobecněním na soustavu  $N$  nerozlišitelných mikročástic se spinem.



Mějme soustavu  $N$  stejných částic. Vlnová funkce takové soustavy má tvar

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \quad (4)$$

kde  $\xi_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) značí prostorovou souřadnici (polohový vektor)  $\vec{r}_i$  + spinovou proměnnou  $\sigma_i$   $i$ -té částice.

Zaměníme-li v soustavě  $i$ -tou a  $k$ -tou částici, potom vzhledem k nerozlišitelnosti částic se nemůže změnit stav soustavy. Záměna částic se v (4) projeví vzájemnou výměnou souřadnic  $\xi_i, \xi_k$ ; jestliže se stav nezměnil, musí, vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce, platit

$$|\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t)|^2 = |\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t)|^2 \quad (5)$$

Samotná vlnová funkce se tedy mohla změnit jen o nepodstatný fázový faktor s modulem 1, tj.

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t) = e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \quad (6)$$

kde  $\alpha$  je nějaké reálné číslo.

Provedeme-li znovu záměnu  $i$ -té a  $k$ -té částice, vrátíme se do výchozího stavu. Musí tedy platit

$$\begin{aligned} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) &= e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t) = \\ &= e^{i2\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \end{aligned} \quad (7)$$

Odtud však plyne, že musí být  $\exp(i2\alpha) = 1$  a tedy

$$e^{i\alpha} = \pm 1 \quad (8)$$

Vlnová funkce soustavy identických částic tudíž musí při záměně souřadnic libovolných dvou částic buď

(a) zůstat nezměněna - potom se říká, že je symetrická nebo

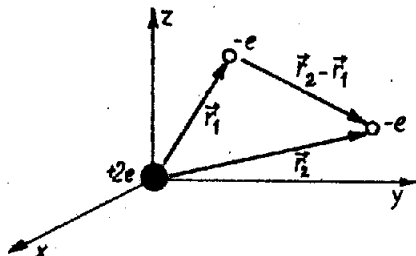
(b) změnit jen znaménko - potom se říká, že je antisymetrická.

Jedině funkce, které mají tuto vlastnost, mohou reprezentovat reálný (možný) stav soustavy částic; v přírodě se realizují jen stavy se symetrickými nebo antisymetrickými vlnovými funkcemi.

Experiment ukazuje, že soustavám tvořeným elektrony, protony, neutrony je nutné vždy přiřazovat funkci antisymetrickou. Naproti tomu např. soustavě  $\alpha$ -částic je třeba vždy přiřazovat funkci symetrickou.

Zatímco vlnová funkce soustavy stejných částic může při transpozici dvou libovolných souřadnic změnit znaménko (je-li antisymetrická), hamiltonián soustavy stejných částic musí být zřejmě vždy invariantní (nesmí se měnit) k záměně libovolné dvojice souřadnic; hamiltonián totiž reprezentuje celkovou energii soustavy a ta se nemůže změnit, jestliže se v ní zamění dvě identické částice.

Pro ilustraci si napíšeme třeba hamiltonián již zmíněného souboru dvou elektronů v poli heliového jádra s nábojem  $+2e$  (jádro předpokládáme nepohyblivé v počátku souřadnic; obr.67)



Obr. 67.

Dva elektrony s nábojem  $-e$  v poli heliového jádra s nábojem  $+2e$  (předpokládá se nepohyblivé jádro v počátku souřadnic);

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) \quad (i=1,2).$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_2} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (9)$$

$$\text{kde} \quad -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_i} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right)$$

je operátor kinetické energie  $i$ -tého ( $i=1,2$ ) elektronu,

$$-\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i|} \quad \text{je operátor potenciální energie } i\text{-tého elektronu}$$

v poli jádra ( v soustavě SI) a

$$+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad \text{je operátor potenciální energie vzájemné}$$

(elektron-elektronové) interakce elektronů.

Existenci spinu jsme v (9) zatím nevzali v úvahu. Záměna souřadnic  $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$  změni v (9) jen pořadí sčítanců.

Z invariance hamiltoniánu souboru stejných částic, vzhledem k transpozici libovolných dvou souřadnic, vyplývá významný důsledek: symetrie vlnových funkcí se nemůže s časem, ani vlivem vnějších polí, změnit.

Jinými slovy: přísluší-li souboru částic funkce symetrická (antisymetrická), potom zůstává stále symetrickou (antisymetrickou), bez ohledu na to, do jakých polí se soustava dostává. Důkaz tohoto tvrzení najdete např. v [11 - 13].

Získané závěry shrneme do postulátu, který pro soubory stejných částic doplní postuláty z kap. IV.

Stavový vektor souboru stejných částic musí být, v závislosti na druhu částic, buď symetrický nebo antisymetrický, vzhledem k transpozici souřadnic libovolné dvojice částic souboru.

Antisymetrické vlnové funkce přísluší soustavám částic s polovinovým spinem ( $\hbar/2, 3\hbar/2, 5\hbar/2, \dots$ ) a symetrické vlnové funkce částicím s celočíselným spinem ( $0, \hbar, 2\hbar, \dots$ ).

Zdánlivě jemný rozdíl (symetrie nebo antisymetrie) ve vlastnostech vlnových funkcí souborů stejných částic, má dalekosáhlé důsledky v chování souborů stejných částic. Projeví se to markantně např. ve statistice, již se tyto soubory řídí; odtud také pochází název bosony pro částice se symetrickou vlnovou funkcí (řídí se Boseho-Einsteinovou statistikou) a název fermiony pro částice s antisymetrickou vlnovou funkcí (řídí se Fermiho-Diracovou statistikou).

Zřejmě všechny částice, které se vyskytují v přírodě, musí být buď bosony nebo fermiony; jiná možnost není. Známe-li zařazení do těchto skupin u tzv. elementárních částic (kromě fotonu se spinem 0 jsou všechny ostatní běžné částice fermiony se spinem  $\hbar/2$ ), potom zařazení složených částic (např. zmíněná heliová jádra =  $\alpha$ -částice) je určováno výsledným spinovým momentem.

Závěrem znovu zdůrazněme: požadavek symetrie nebo antisymetrie vlnových funkcí je vyjádřením principu nerozlišitelnosti stejných částic.

### 1.3) Jak najít symetrické a antisymetrické vlnové funkce

Vlnová funkce, kterou najdeme řešením Schrödingerovy rovnice, nemusí být ani symetrická, ani antisymetrická (přesto však je řešením Schrödingerovy rovnice). Co dělat v takovém případě? Ukažme nejdříve postup na vlnové funkci pro dvě částice (např. řešení Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem (9)). Pro jednoduchost zápisu nahradíme  $\xi_1 \rightarrow 1, \xi_2 \rightarrow 2$ , takže vlnovou funkci  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  budeme stručně psát  $\psi(1,2)$ .

Je-li  $\psi(1,2)$  řešením Schrödingerovy rovnice, potom jím je také funkce  $\psi(2,1)$  (tj. funkce  $\psi(\xi_2, \xi_1)$  získaná záměnou  $\xi_1, \xi_2$ ), neboť, jak jsme ukázali, hamiltonián je invariantní k záměně souřadnic, tj.

$$\mathcal{H}(1,2) = \mathcal{H}(2,1).$$

Platí tedy (pro jednoduchost uvažujeme jen stacionární Schrödingerovu rovnici)

$$\mathcal{H} \psi(1,2) = E \psi(1,2), \quad \mathcal{H} \psi(2,1) = E \psi(2,1) \quad (10)$$

V tomto místě je třeba zdůraznit toto: jestliže  $\psi(1,2)$  není lineárně závislá s  $\psi(2,1)$  a přitom  $\psi(1,2), \psi(2,1)$  nejsou symetrické ani antisymetrické, potom (10) nevyjadřuje degeneraci hladiny s energií  $E$ ! Podle přijatého postulátu totiž  $\psi(1,2)$  a  $\psi(2,1)$  nerepresentují reálné (možné) stavy souboru. To dělají jen funkce symetrické nebo antisymetrické, které z nich získáme.

Jsou-li  $\psi(1,2), \psi(2,1)$  řešením Schrödingerovy rovnice pro tutéž vlastní hodnotu  $E$ , potom také každá jejich lineární kombinace

$$\Psi(1,2) = c_1 \psi(1,2) + c_2 \psi(2,1) \quad (11)$$

je řešením Schrödingerovy rovnice s vlastní hodnotou E. Koeficienty  $c_1, c_2$  tedy můžeme vybrat tak, aby výsledná funkce  $\Psi(1,2)$  již byla symetrická nebo antisymetrická.

Funkci symetrickou -  $\Psi^{(s)}(1,2)$  - dostaneme pro  $c_1 = c_2 = 1$ ,

funkci antisymetrickou -  $\Psi^{(a)}(1,2)$  - dostaneme pro  $c_1 = -c_2 = 1$ :

$$\Psi^{(s)}(1,2) = \psi(1,2) + \psi(2,1) \quad (12a)$$

$$\Psi^{(a)}(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1) \quad (12b)$$

Nyní již platí  $\Psi^{(s)}(1,2) = \Psi^{(s)}(2,1)$  a  $\Psi^{(a)}(1,2) = -\Psi^{(a)}(2,1)$ .

Tento postup můžeme snadno zobecnit i na funkce (4).

Nechť  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  je řešením stacionární Schrödingerovy rovnice s energií E

$$\mathcal{H}(\xi_1, \dots, \xi_N) \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = E \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \quad (13)$$

Není-li  $\psi$  ani symetrická ani antisymetrická, získáme z ní

symetrickou funkci  $\Psi^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$  takto: v  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  prove-

deme všechny možné transpozice dvojic souřadnic, čímž dostaneme  $N!$  funkcí

$$\psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (14)$$

kde  $(P1, P2, \dots, PN)$  označuje nějakou permutaci z čísel  $(1, 2, \dots, N)$ .

Např. pro 3 částice by to bylo  $3! = 6$  funkcí (zápis  $\xi_i = i$  ( $i=1, 2, 3$ )):

$$\psi(1, 2, 3), \psi(2, 1, 3), \psi(3, 2, 1), \psi(2, 3, 1), \psi(1, 3, 2), \psi(3, 1, 2).$$

Symetrickou vlnovou funkcí dostaneme sečtením všech  $N!$  funkcí (14), tj

$$\Psi^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_P \psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (15)$$

kde  $(P1, P2, \dots, PN)$  je jedna z  $N!$  možných permutací čísel  $(1, 2, \dots)$  a součet se provádí přes všechny možné permutace P.

Abychom získali z funkcí (14) funkci antisymetrickou

$\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ , rozdělíme soubor funkcí (14) na dvě poloviny po

$N!/2$  členech. Do jedné skupiny zařadíme funkce pro něž je  $(P1, P2, \dots, PN)$

sudou permutací a do druhé ty, pro něž je  $(P1, P2, \dots, PN)$  lichou permutací.

Připomeňme si ze základů algebry, že permutace  $(P1, P2, \dots, PN)$  se nazývá

sudá(lichá), jestliže se ze základního uspořádání  $(1, 2, \dots, N)$  získá

sudým(lichým) počtem transpozic dvojic čísel. Tak např. z  $(1, 2, 3, 4)$

se permutace  $(2, 3, 1, 4)$  získá sudým počtem transpozic a permutace  $(2, 4, 1, 3)$

lichým počtem transpozic. V algebře se dokazuje, že zařazení do jedné

z těchto skupin je určeno jednoznačně.

Vezmeme-li nyní do lineární kombinace jednu skupinu ( $N!/2$  funkcí) se znaménkem (+) (s koeficientem +1) a druhou se znaménkem (-) (s koeficientem -1) bude získaná funkce

$$\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_P (-1)^T \psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (16)$$

(kde  $T$  udává počet transpozic) antisymetrická. Zaměníme-li totiž v  $\Psi^{(a)}$  dvě souřadnice, projeví se to na pravé straně (16) přidáním jedné transpozice do všech sčítanců; ty které byly původně získány sudým počtem transpozic, budou nyní odpovídat lichému počtu transpozic a opačně. Výsledkem je jen změna znaménka u  $\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ .

## 2. Soubory neinteragujících stejných částic. Pauliho princip

Přesné kvantověmechanické řešení problému mnoha částic naráží na nepřekonatelné matematické obtíže. Proto je nutné se téměř vždy obracet k přibližnému řešení (později poznáte, že např. podstatná část učebnic kvantové chemie je věnována rozvíjení přibližných metod pro řešení Schrödingerovy rovnice pro atomy a molekuly). Nejběžnější aproximací, jejíž vznik spadá až do počátků kvantové mechaniky, je tzv. jednočásticová aproximace, v níž se problém  $N$  částic nahrazuje  $N$  jednočásticovými problémy. K tomu je třeba převést hamiltonián na tvar

$$\mathcal{H}(\xi_1, \dots, \xi_N) = h_1(\xi_1) + h_2(\xi_2) + \dots + h_N(\xi_N) = \sum_{i=1}^N h_i(\xi_i) \quad (17)$$

kde  $h_i(\xi_i)$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) je operátor působící pouze na proměnnou  $\xi_i \equiv (x_i, y_i, z_i, \sigma_i)$ .

Tím, jak se taková transformace (aproximativně) provede, se budeme zabývat v II.dílu, v souvislosti s Hartreeho a Hartreeho-Fokovou aproximací. Nejprostší, ale také nejhrubší, způsob jak dosáhnout toho, aby hamiltonián soustavy částic měl strukturu (17), je zanedbat vzájemnou interakci částic; tak např. v (9) to znamená zanedbat elektron-elektronovou interakci (poslední člen v (9)).

Předpokládejme tedy, že hamiltonián soustavy má tvar (17). V Schrödingerově rovnici

$$\mathcal{H} \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = E \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \quad (18)$$

je pak možné separovat proměnné (setkali jsme se s tím již např. v odst. III.1.3), tj hledat vlnovou funkci  $\Psi$  ve tvaru součinu

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi^{(1)}(\xi_1) \psi^{(2)}(\xi_2) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) \quad (19)$$

kde  $\psi^{(i)}(\xi_i)$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) je funkce závislá jen na souřadnicích  $i$ -té částice.

Dosažením do Schrödingerovy rovnice (18), dostaneme

$$\sum_{i=1}^N \psi^{(1)}(\xi_1) \dots \psi^{(i-1)}(\xi_{i-1}) \psi^{(i+1)}(\xi_{i+1}) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) =$$

$$= E \psi^{(1)}(\xi_1) \dots \psi^{(i)}(\xi_i) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) \quad (20)$$

Po vydělení obou stran součinem funkcí (19) máme

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{\psi^{(i)}(\xi_i)} h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) = E \quad (21)$$

Pravou stranou rovnice (21) je konstanta. Levá strana je součtem členů, z nichž každý závisí pouze na jedné z proměnných  $\xi_1, \dots, \xi_N$ . Aby platila rovnost (21) pro všechny možné hodnoty proměnných  $\xi_1, \dots, \xi_N$ , musí platit

$$h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) = \varepsilon^{(i)} \psi^{(i)}(\xi_i) \quad (22a)$$

$$\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \dots + \varepsilon^{(N)} = E \quad (22b)$$

Získané výsledky mají jednoduchý fyzikální smysl. Rovnice (22a) je stacionární Schrödingerova rovnice pro  $i$ -tou částici; výraz (22b) vyjadřuje triviální fakt, že celková energie  $E$  souboru nezávislých částic je rovna součtu energií jednotlivých částic souboru.

Jde-li o soubor  $N$  nerozlišitelných částic, potom rovnice (22a) bude pro všechny částice stejná, takže můžeme vypustit index ( $i$ ) a psát

$$h(\xi) \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi) \quad (23)$$

Její řešení je množina

$$\text{vlastních funkcí: } \psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots, \psi_k(\xi), \dots \quad (24)$$

a

$$\text{vlastních hodnot: } \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k, \dots$$

V souboru  $N$  stejných neinteragujících částic bude každá z částic v některém ze stavů (24); nechť

1. částice	je ve stavu	$\psi_{k_1}(\xi)$	s energií	$\varepsilon_{k_1}$	
2. částice	- " -	$\psi_{k_2}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_2}$	
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	
$i$ -tá částice	- " -	$\psi_{k_i}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_i}$	
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	
$N$ -tá částice	- " -	$\psi_{k_N}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_N}$	(25)

kde  $k_i$  je soubor kvantových čísel určujících stav  $i$ -té částice ( $i=1,\dots,N$ ).

Stav celé soustavy je potom určen souborem kvantových čísel  
 $k_1, k_2, \dots, k_N$ .

Vlnová funkce (19) pro takový stav je

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) \dots \psi_{k_N}(\xi_N) \quad (26a)$$

a celková energie souboru částic v tomto stavu je

$$E_{k_1, k_2, \dots, k_N} = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} + \dots + \epsilon_{k_N} \quad (26b)$$

Funkce (26a) je vlastní funkcí hamiltoniánu  $\mathcal{H}$ , není však obecně (pro libovolné hodnoty  $k_1, \dots, k_N$ ) ani symetrická, ani antisymetrická. Funkce, které by tuto vlastnost měly a příslušely tedy stavům, které se v přírodě realizují, z ní můžeme získat postupem uvedeným v odst. 1.3.

Podle (15) bude funkce symetrická

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \psi_{k_1}(\xi_{P1}) \psi_{k_2}(\xi_{P2}) \dots \psi_{k_N}(\xi_N) \quad (27a)$$

Stejně dobře ovšem můžeme dělat permutace v souboru kvantových čísel  $(k_1, \dots, k_N)$ , takže také

$$\Psi_{k_1, \dots, k_N}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \psi_{Pk_1}(\xi_1) \psi_{Pk_2}(\xi_2) \dots \psi_{Pk_N}(\xi_N) \quad (27b)$$

kde  $\sum_P$  značí opět součet přes všech  $N!$  permutací z čísel  $(1, 2, \dots, N)$  v (7a) nebo z čísel  $(k_1, k_2, \dots, k_N)$  v (27b). Koeficient  $1/\sqrt{N!}$  normuje funkci  $\Psi$ , jestliže všechny jednočásticové funkce (24) byly normalizované.

Funkce antisymetrická se získá obdobně podle (16). Vzpomeneme-li si ale na definici determinantu (viz. dod. A), zjistíme, že funkci (16), v níž by na pravé straně vystupovaly součiny (26a), můžeme s výhodou zapsat takto

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \psi_{k_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_1) \\ \psi_{k_1}(\xi_2) & \psi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{k_1}(\xi_N) & \psi_{k_2}(\xi_N) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (28)$$

Rozvedením tohoto tzv. Slaterova determinantu získáme výsledek identický s formulí (16).

Ze zápisu  $\Psi^{(a)}$  ve tvaru determinantu bezprostředně vyplývá známý Pauliho princip, který W. Pauli odvodil, na základě analýzy experimentálních dat, ještě před vznikem kvantové mechaniky; jeho běžná formulace je:

v soustavě stejných fermionů nemohou být dvě nebo více částic v témže kvantovém stavu.

Stav částice je zadán úplným souborem kvantových čísel (odst. IV.3.3); např. stav elektronu v atomu vodíku je určen čísly  $(n, l, m_l, m_s)$ , stav nelokalizované volné částice (s přesně zadaným impulsem) je určen složkami impulsu a spinem  $(p_x, p_y, p_z, m_s)$  apod. V našem obecném značení představují úplné soubory kvantových čísel čísla  $k_1, k_2, \dots, k_N$ . Jestliže by byly dvě (nebo více) částic v témže kvantovém stavu, potom by příslušné sloupce v determinantu byly stejné (např. pro  $k_1 = k_2$  by to byly dva první sloupce) a jak je známo z algebry, determinant se dvěma nebo více sloupci (řádky) stejnými je roven nule. Je-li  $\Psi^{(a)} \equiv 0$ , je i pravděpodobnost realizace (rovná  $|\Psi^{(a)}|^2$ ) takového stavu nulová, což je právě tvrzení Pauliho principu.

Z toho, že i determinant se dvěma nebo více shodnými řádky je roven nule, vyplývá druhá, sice méně častá, ale pro aplikace užitečná, formulace Pauliho principu :

v soustavě stejných fermionů nemohou mít dvě nebo více částic všechny souřadnice shodné.

Zde je pochopitelně opět míněn úplný soubor souřadnic, tj. včetně spinové proměnné.

Pro soubory stejných bosonů žádná omezení, podobná Pauliho principu, neexistují. Symetrická vlnová funkce (27) dává nenulovou pravděpodobnost realizace stavů s libovolnými počty částic v jednotlivých jednočásticových stavech (24).

Výrazný rozdíl mezi bosony a fermiony se projeví již v základním stavu souboru. Předpokládejme, že vlastní hodnoty jednočásticového hamiltoniánu (viz (24)) jsou uspořádány tak, že platí

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_i < \dots \quad (29a)$$

Potom základním stavem (stavem s nejnižší energií) souboru  $N$  bosonů bude stav, v němž  $k_1 = k_2 = \dots = k_N = 1$ , tj. stav s vlnovou funkcí

$$\Psi_{1,1,\dots,1}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_1(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \dots \psi_1(\xi_N) \quad (30a)$$

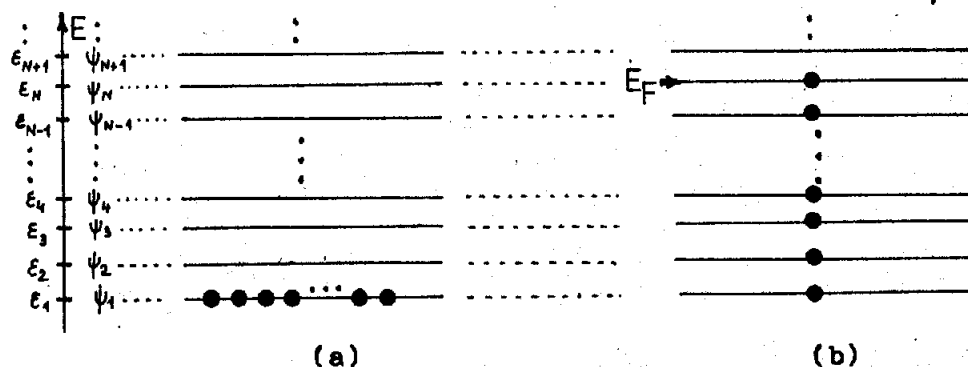
a energií

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_1 = N \varepsilon_1 \quad (30b)$$

Všechny bosony jsou v jednočásticovém stavu  $\psi_1(\xi)$  s energií  $\varepsilon_1$  (obr. 68).

Diametrálně odlišný je základní stav souboru  $N$  fermionů. Zde již není možné aby všechny fermiony byly ve stavu  $\psi_1(\xi)$ ; v souladu s Pauliho principem se rozmístí na  $N$  nejnižších hladin  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$ .





Obr. 68. Obsazení jednočásticových hladin (a) bosony, (b) fermiony v základním stavu. Fermiony (b) obsadí všechny hladiny pod Fermiho hladinou s energií  $E_F$ .

Celková energie souboru fermionů v základním stavu potom je

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots + \epsilon_N \quad (31a)$$

a odpovídající normalizovaná (předpokládáme normalizaci jednočásticových funkcí (24)) vlnová funkce je

$$\Psi_{1,2,\dots,N}^{(a)}(\xi_1,\dots,\xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_2(\xi_1) & \dots & \psi_N(\xi_1) \\ \psi_1(\xi_2) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(\xi_N) & \psi_2(\xi_N) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (31b)$$

Energie, která přísluší nejvyšší obsazené hladině v základním stavu, (v našem případě  $\epsilon_N$ ), se nazývá Fermiho energie.

Častý případ je, že hladiny  $\epsilon_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) jsou degenerované; místo (29a) bychom pak měli uspořádání

$$\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \epsilon_3 \leq \dots \leq \epsilon_i \leq \dots$$

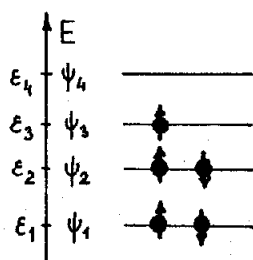
Logičtější potom ovšem je označení, které jsme užívali již v kap. IV:

$$\epsilon_1^{(g_1)} < \epsilon_2^{(g_2)} < \dots < \epsilon_i^{(g_i)} < \dots \quad (29b)$$

kde  $g_i$  značí stupeň degenerace hladiny s energií  $\epsilon_i$ . Na hladině  $\epsilon_i^{(g_i)}$  se pak může v souladu s Pauliho principem umístit  $g_i$  fermionů.

Nejběžnější je případ degenerace vzhledem ke spinu, který nastane když energie soustavy elektronů nezávisí na orientaci spinu. Potom na každou hladinu  $\epsilon_i$  mohou být umístěny 2 elektrony s opačně orientovanými spiny (obr.69).

Z povědění je zřejmé, že Pauliho princip hraje významnou roli ve všech oblastech fyziky, v nichž se vyskytují soubory mnoha elektronů



Obr. 69.

Rozmístění pěti elektronů na energiové hladiny dvojnásobně degenerované vzhledem ke spinu ( energie částice nezávisí na orientaci spinu ).

(atomy, molekuly, pevné látky apod) nebo soubory mnoha protonů a neutronů (např. jaderná fyzika). Nejběžnější ( a také nejstarší) je zajisté aplikace Pauliho principu na objasnění výstavby elektronového obalu atomů. Musíme si uvědomit, že existující pestrá škála vlastností atomů (projevující se markantně např. tím, že dva atomy lišící se pouze o jeden elektron, mají diametrálně odlišné chemické vlastnosti) je výsledkem rozmístění elektronů na energiové hladiny podle obr. 68b, 69. Atomy, které by v základním stavu měly všechny elektrony na nejnižší hladině (obr. 68a), by se musely lišit svými vlastnostmi (zvláště při blízkých atomových číslech) nepatrně.

### 3. Soustava dvou stejných částic se spinem 1/2

Vzhledem k mnoha aplikacím je vhodné si podrobněji všimnout vlnové funkce soustavy, která je tvořena dvěma stejnými částicemi (fermiony) se spinem 1/2, např. dvěma elektrony nebo protony.

Úplná vlnová funkce takové soustavy

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) \quad (32)$$

závisí na prostorových ( $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ ,  $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ ) a spinových ( $\sigma_1, \sigma_2$ ) souřadnicích obou částic.

Za předpokladu, že soustava není ve vnějším magnetickém poli a interakce mezi oběma částicemi nezávisí na orientaci jejich spinů (viz např. interakční člen v (9)), nezávisí hamiltonián na spinových proměnných, takže

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \mathcal{H}_s(\sigma_1, \sigma_2) \quad (33)$$

kde operátor  $\mathcal{H}_s(\sigma_1, \sigma_2) = 0$ .

Hamiltonián s touto strukturou vždy umožňuje separovat ve vlnové funkci  $\vec{r}$ - a  $\sigma$ - proměnné, tzn psát

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot X(\sigma_1, \sigma_2) \quad (34)$$

Prostorová část vlnové funkce -  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  - se určí řešením Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem  $\mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  (příkladem je třeba (9))

$$\mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (35)$$

Spinová část vlnové funkce -  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  - je pro  $\mathcal{H}_s \equiv 0$  do značné míry libovolná. Ukazuje se však, že i když hamiltonián soustavy nezávisí na spinových proměnných, vede princip nerozlišitelnosti k závislosti celkové energie soustavy na výsledném spinu.

Schrödingerova rovnice (35) dá energiové spektrum, přičemž každé z energiových hladin přísluší nějaká symetrická nebo antisymetrická vlnová funkce  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ . Pro soubor fermionů musí být však výsledná vlnová funkce (34)  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  antisymetrická k záměně  $\xi_1, \xi_2$ .

To můžeme dosáhnout jedině tak, že k symetrické vlnové funkci  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  dodáme antisymetrickou spinovou funkci  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  a obráceně.

Ukážeme, že symetrické vlnové funkci

$$X^{(s)}(\sigma_1, \sigma_2) = X^{(s)}(\sigma_2, \sigma_1) \quad (36a)$$

přísluší výsledný spin 1 a antisymetrické

$$X^{(a)}(\sigma_1, \sigma_2) = -X^{(a)}(\sigma_2, \sigma_1) \quad (36b)$$

výsledný spin 0. Jestliže tedy symetrické a antisymetrické prostorové vlnové funkci

$$\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi^{(s)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (37a)$$

$$\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\varphi^{(a)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (37b)$$

přísluší stavy s různou energií, bude tomu tak i u výsledných vlnových funkcí

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \begin{cases} \varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) X^{(s)}(\sigma_1, \sigma_2) & (38a) \\ \varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) X^{(a)}(\sigma_1, \sigma_2) & (38b) \end{cases}$$

Přitom ve stavu (38a) je výsledný spin roven 1 a ve stavu (38b) roven 0; jinými slovy: energie soustavy záleží na výsledném spinu.

Všimněme si nyní konstrukce spinové vlnové funkce  $X(\sigma_1, \sigma_2)$ ; mimo jiné tím dokážeme i tvrzení o výsledném spinu soustavy pro funkce (36). Celkovou vlnovou funkci  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  můžeme vyjádřit jako lineární kombinaci ze všech možných součinů spinových funkcí  $\chi_{s_1}(\sigma_1)$ ,  $\chi_{s_2}(\sigma_2)$ , zavedených v odst.V.1.4; jestliže pro lepší přehlednost nahradíme

$\sigma_1 \rightarrow 1, \sigma_2 \rightarrow 2$  a kvantová čísla  $m_s = 1/2 \rightarrow \uparrow$ ,  $m_s = -1/2 \rightarrow \downarrow$ , je to součet čtyř součinů

$$X(1,2) = c_1 \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)} + c_2 \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} + c_3 \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} + c_4 \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \quad (39)$$

kde  $c_1, c_2, c_3, c_4$  jsou libovolná komplexní čísla.

Rozklad (39) je možný proto, že čtyři vypsané součiny tvoří bázi (můžete si ověřit, že tvoří úplný systém funkcí) ve 4-rozměrném prostoru stavových vektorů soustavy dvou spinů.

Spin je vektorová veličina (moment hybnosti). Výsledný spin soustavy částic získáme proto vektorovým součtem spinů jednotlivých částic. Označíme-li spinové operátory dvou částic (jde o operátory zavedené v odst. V.1.3)  $\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2$ , bude operátor výsledného spinu soustavy

$$\vec{\mathcal{P}} = \vec{\mathcal{P}}_1 + \vec{\mathcal{P}}_2 \quad (40a)$$

se složkami

$$\mathcal{P}_x = \mathcal{P}_{1x} + \mathcal{P}_{2x}, \quad \mathcal{P}_y = \mathcal{P}_{1y} + \mathcal{P}_{2y}, \quad \mathcal{P}_z = \mathcal{P}_{1z} + \mathcal{P}_{2z} \quad (40b)$$

Přímým výpočtem si můžeme ověřit, že i pro  $\vec{\mathcal{P}}$  platí komutační relace (V.26), např.

$$\begin{aligned} [\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y] &= [\mathcal{P}_{1x} + \mathcal{P}_{2x}, \mathcal{P}_{1y} + \mathcal{P}_{2y}] = [\mathcal{P}_{1x}, \mathcal{P}_{1y}] + [\mathcal{P}_{2x}, \mathcal{P}_{2y}] = \\ &= i\hbar \mathcal{P}_{1z} + i\hbar \mathcal{P}_{2z} = i\hbar \mathcal{P}_z \end{aligned} \quad (41)$$

Protože operátory  $\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2$  komutují (spiny u obou částic lze současně změřit), tj.

$$\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 = \vec{\mathcal{P}}_2 \vec{\mathcal{P}}_1 \quad ([\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2] = 0) \quad (42a)$$

nebo pro složky

$$\mathcal{P}_{1i} \mathcal{P}_{2j} = \mathcal{P}_{2j} \mathcal{P}_{1i} \quad ([\mathcal{P}_{1i}, \mathcal{P}_{2j}] = 0) \quad (i, j=x, y, z), \quad (42b)$$

je operátor kvadrátu velikosti výsledného spinu

$$\vec{\mathcal{P}}^2 = (\vec{\mathcal{P}}_1 + \vec{\mathcal{P}}_2)^2 = \vec{\mathcal{P}}_1^2 + \vec{\mathcal{P}}_2^2 + 2 \vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 \quad (43a)$$

kde skalární součin  $\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2$  je ve složkách

$$\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 = \mathcal{P}_{1x} \mathcal{P}_{2x} + \mathcal{P}_{1y} \mathcal{P}_{2y} + \mathcal{P}_{1z} \mathcal{P}_{2z} \quad (43b)$$

Přímým výpočtem můžeme ověřit, že spolu vzájemně komutují čtveřice operátorů

$$\vec{\mathcal{P}}_1^2, \vec{\mathcal{P}}_2^2, \mathcal{P}_{1z}, \mathcal{P}_{2z} \quad (44)$$

a

$$\vec{\mathcal{P}}_1^2, \vec{\mathcal{P}}_2^2, \vec{\mathcal{P}}^2, \mathcal{P}_z \quad (45)$$

Čtyři funkce

$$\chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)}, \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)}, \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \quad (46)$$

které jsme použili jako bázi v rozkladu (39), jsou právě společným souborem vlastních funkcí čtyř operátorů (44).

Pro naše účely je však výhodnější přejít k souboru vlastních funkcí čtveřice (45), neboť právě zde se vyskytuje celkový spin. Tento soubor

se bude ovšem lišit od (46), neboť  $\vec{J}^2$  nekomutuje s  $J_{1z}, J_{2z}$ .

Označíme-li stavové vektory, které tvoří tuto novou bázi, jako  $|S, M_S\rangle$ , bude platit

$$\vec{J}_1^2 |S, M_S\rangle = \vec{J}_2^2 |S, M_S\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, M_S\rangle \quad (47a)$$

$$\vec{J}^2 |S, M_S\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, M_S\rangle \quad (47b)$$

$$J_z |S, M_S\rangle = M_S \hbar |S, M_S\rangle \quad (47c)$$

Kvantová čísla  $S, M_S$  odpovídají  $s, m_s$  z odst. V.1.3 a V.1.4; tam jsme ovšem stavové vektory psali zkráceně  $|m_s\rangle$  (tj.  $|1/2\rangle$  a  $|-1/2\rangle$ ) místo  $|s, m_s\rangle$ , neboť kvantové číslo  $s$  nabývalo jen hodnoty  $\frac{1}{2}$ . Rovnice (47a) je vlastně (V.30), rovnice (47b) odpovídá (V.31b) a (47c) rovnici (V.43). Protože  $\vec{J}$  je moment hybnosti, musí být  $S$  kladné (a jak lze ukázat, rovně celočíselnému násobku  $1/2$ ) a  $M_S$  se bude opět po jednotce měnit od  $-S$  do  $S$  (celkem  $2S+1$  hodnot). Naším cílem nyní je najít:

(a) jakých hodnot mohou nabývat kvantová čísla  $S, M_S$ ,

(b) vyjádřit stavové vektory  $|S, M_S\rangle$  pomocí funkcí (46).

V podstatě jde o to, vybrat koeficienty  $c_1, c_2, c_3, c_4$  v (39) tak, aby rovnice (47) byly automaticky splněny.

Řešit postavený úkol znamená diagonalisovat matice reprezentující operátory  $J_z, \vec{J}^2$  v bázi (46). Ponecháme tuto proceduru čtenáři za cvičení a zde uvedeme jen výsledky; že splňují uvedené požadavky lze ověřit pouhým dosazením do rovnic (47).

Vlastní hodnoty operátoru  $\vec{J}^2$  jsou  $0, 2 \hbar^2$ , což odpovídá

$$S = 0 \quad \text{a} \quad S = 1 \quad (48a)$$

a pro

$$\begin{aligned} S = 0 \quad \text{je} \quad M_S &= 0 \\ S = 1 \quad \text{je} \quad M_S &= -1, 0, 1 \end{aligned} \quad (48b)$$

Odpovídající normalizované vlastní vektory  $|S, M_S\rangle$  jsou

$$\left. \begin{aligned} |1, 1\rangle &= \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) \\ |1, 0\rangle &= 2^{-1/2} [\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2)] \\ |1, -1\rangle &= \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) \end{aligned} \right\} \quad (49a)$$

$$|0, 0\rangle = 2^{-1/2} [\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2)] \quad (49b)$$

Tři funkce (49a) jsou symetrické k záměně  $1 \leftrightarrow 2$  ( $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ ), zatímco funkce (49b) je antisymetrická. Soubor tří stavových vektorů  $|1, M_S\rangle$

( $M_S = 0, \pm 1$ ) tvoří triplet; vektor  $|0, 0\rangle$  se nazývá singlet.

Nyní již můžeme také vytvořit úplné vlnové funkce souboru dvou elektronů (38). Kombinací  $\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  s tripletem (49a) dostaneme

3 vlnové funkce a kombinací  $\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  se singletem (49b) jednu funkci  $\psi(\xi_1, \xi_2)$ . Pro nezávislé elektrony (když v (9) např. zanedbáme poslední, interakční, člen) se dá vyjádřit  $\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  i  $\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  pomocí jednočásticových funkcí typu (24), takže

k tripletovému stavu ( $S=1$ ) bude příslušet antisymetrická funkce

$$\begin{aligned} \varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= 2^{-1/2} [\varphi_m(\vec{r}_1) \varphi_n(\vec{r}_2) - \varphi_n(\vec{r}_1) \varphi_m(\vec{r}_2)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_m(\vec{r}_1) & \varphi_n(\vec{r}_1) \\ \varphi_m(\vec{r}_2) & \varphi_n(\vec{r}_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (50a)$$

a k singletu ( $S=0$ ) symetrická funkce

$$\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2^{-1/2} [\varphi_m(\vec{r}_1) \varphi_n(\vec{r}_2) + \varphi_n(\vec{r}_1) \varphi_m(\vec{r}_2)] \quad (50b)$$

kde  $m, n$  jsou soubory kvantových čísel, rozlišující jednočásticové stavy.

#### 4. Stručně o reprezentaci obsazovacích čísel

V předcházejících odstavcích jsme, při formulaci problému mnoha stejných částic, používali běžnou souřadnicovou reprezentaci. Nyní by nám však již mělo být jasné, že pro tuto problematiku to není reprezentace nejvhodnější. Při psaní operátorů zobrazujících měřitelné veličiny (např. hamiltoniánu) i vlnových funkcí (tj. stavových vektorů) se zde vlastně stále vychází z předpokladu, že částice jsou rozlišitelné. Projevuje se to tím, že "... poloha částice i je určena polohovým vektorem  $\vec{r}_i$  a její spin proměnnou  $\sigma_i$  ..." apod. Důsledkem tohoto rozlišování pak je, že musíme konstruovat symetrické a antisymetrické vlnové funkce, má-li se naplnit požadavek principu nerozlišitelnosti.

Pracujeme-li v aproximaci nezávislých částic (odst. 2), je vlastně jedinou informací, kterou nám symetrická nebo antisymetrická funkce dávají, počet částic v jednotlivých jednočásticových stavech (24). Potom je však přirozenější vyloučit z vlnových funkcí soustavy zbytečný balast, jakým jsou proměnné  $\xi_1, \dots, \xi_N$  a rozlišovat stavové vektory (stavy soustavy) pouze obsazovacími čísly  $n_1, n_2, \dots, n_i, \dots$  jednotlivých jednočásticových stavů. Stavový vektor soustavy  $N$  nerozlišitelných částic se v této tzv. reprezentaci obsazovacích čísel zapisuje takto

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (51)$$

kde podle (24)

$$\begin{array}{rcl}
 n_1 & \text{je počet částic ve stavu s vlnovou funkcí} & \psi_1(\xi) \\
 n_2 & \text{ } & \psi_2(\xi) \\
 \vdots & & \vdots \\
 n_i & \text{ } & \psi_i(\xi) \\
 \vdots & & \vdots
 \end{array} \quad (52a)$$

přičemž

$$n_1 + n_2 + \dots + n_i + \dots = N \quad (52b)$$

V souborech bosonů může každé z obsazovacích čísel  $n_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) nabývat libovolných hodnot, v souborech fermionů pak jen hodnot 0,1.

Na tomto místě je třeba poznamenat, že s reprezentací obsazovacích čísel se často setkáme též pod názvem druhé kvantování. Název je logický v kvantové teorii pole, kde byl tento formalismus prvně zaveden a v plné šíři uplatněn.

Chceme-li pracovat beze zbytku se stavovými vektory (51), místo s vlnovými funkcemi závislými na souřadnicích, musíme především vyjádřit všechny operátory tak, aby působily (tzn definovat jejich působení) na stavové vektory (51). K tomu účelu je výhodné definovat dva jednoduché operátory, pomocí nichž se pak již vyjádří všechny další. Protože definice těchto operátorů se poněkud liší pro bosony a fermiony, provedeme to pro každou skupinu zvlášť.

#### Bosony

Definujeme operátory  $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) vztahy:

$$\hat{a}_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \quad (53a)$$

$$\hat{a}_i^+ | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots \rangle \quad (53b)$$

(nevypsaná obsazovací čísla se nemění).

Vidíme, že působením operátoru  $\hat{a}_i$  na stavový vektor dostáváme stavový vektor pro soubor částic, v němž je o jednu částici v  $i$ -tém stavu méně. Proto se  $\hat{a}_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) nazývá anihilační operátor. Operátor  $\hat{a}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) působí opačně; protože dává stavový vektor stavu, v němž je v  $i$ -tém stavu o jednu částici více, nazývá se kreační operátor. Číselné koeficienty  $\sqrt{n_i}, \sqrt{n_i+1}$  v (53), zajišťují normalizaci funkcí získaných působením operátorů  $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ . Je zřejmé, že postupným působením kreačních a anihilačních operátorů lze z libovolného stavového vektoru získat jakýkoliv jiný stavový vektor. Protože každý operátor dělá v podstatě jen to, že každému z vektorů prostoru stavových vektorů přiřazuje nějaký vektor z téhož prostoru, je zřejmé, že musí být možné vyjádřit libovolný operátor uspořádanou skupinou anihilačních a kreačních operátorů.

Uveďme si příklad: máme stav soustavy se stavovým vektorem

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle$$

a chceme pomocí operátorů (53) dostat stavový vektor soustavy, v níž je o jednu částici v  $i$ -tém stavu méně a o jednu částici v  $j$ -tém stavu více (můžeme to také interpretovat tak, že jedna částice přešla z  $i$ -tého do  $j$ -tého stavu). Hledaná funkce je

$$\hat{a}_j^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_i(n_i+1)} |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots\rangle \quad (54)$$

### Fermiony

I zde definujeme anihilační  $\hat{c}_i$  a kreační  $\hat{c}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) operátory.

Na rozdíl od bosonů však musí být definovány tak, aby odrážely specifické vlastnosti souborů fermionů; především jde o antisymetrii stavových vektorů při transpozici dvou fermionů, resp. Pauliho princip, který se projevuje v tom, že obsazovací čísla mohou nabývat pouze hodnot 0,1. Je možné přímým výpočtem ověřit, že všem požadavkům vyhovují definice:

$$\hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots\rangle \quad (55a)$$

$$\hat{c}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1-n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i+1, \dots\rangle \quad (55b)$$

$$\text{kde } \sum_1 = n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1} \quad (55c)$$

Uveďme si příklad: nechť na stavový vektor  $|1,1,0,0,\dots\rangle$  působí operátor reprezentovaný součinem (pro přehlednost nepíšeme nad  $c$  " $\wedge$ ")

$$\begin{aligned} & c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ c_1 \\ & c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ c_1 |1,1,0,0,\dots\rangle = (-1)^0 c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ |0,1,0,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 |0,1,1,0,\dots\rangle = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 c_2^+ c_3 c_1^+ |0,0,1,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 c_2^+ c_3 |1,0,1,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 (-1)^1 c_2^+ |1,0,0,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 (-1)^1 (-1)^1 |1,1,0,0,\dots\rangle = -|1,1,0,0,\dots\rangle \end{aligned}$$

Rozvážíte-li postupné působení operátorů, dojdete k závěru, že v konečném výsledku došlo k výměně částic ve stavech 1,2 a stavový vektor skutečně přitom změnil znaménko.

Operátory  $\hat{a}_i$ ,  $\hat{a}_i^+$ , resp.  $\hat{c}_i$ ,  $\hat{c}_i^+$ , nejsou hermitovské (lze dokázat, že jsou hermitovsky sdružené, takže  $\hat{a}_i^+ = (\hat{a}_i)^\dagger$  nebo  $\hat{c}_i^+ = (\hat{c}_i)^\dagger$ ) a nereprezentují proto žádnou měřitelnou fyzikální veličinu.



Hermitovský je však operátor

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \text{ nebo } \hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i \quad (i=1,2,\dots) \quad (56)$$

který se nazývá operátor počtu částic v i-tém stavu. Necháme-li ho působit na  $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ , dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} \hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_i} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \end{aligned} \quad (57)$$

Stejný výsledek dostaneme pro fermiony, takže obecně

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (58)$$

kde  $n_i$  před stavovým vektorem na pravé straně je číslo, které udává počet částic ve stavu  $\psi_i$ . Rovnice (58) je rovnicí (IV.38) pro vlastní vektory a vlastní hodnoty operátoru počtu částic v i-tém stavu; vektory  $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$  jsou jeho vlastními vektory a obsazovací čísla  $n_i$  jsou jeho vlastními hodnotami.

Operátor celkového počtu částic pak je

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (59)$$

(sumace se provádí přes všechny jednočásticové stavy, kterých může být obecně nekonečně mnoho!).

Pro práci s kreačními a anihilačními operátory mají prvořadý význam komutační relace pro tyto operátory. Získat je lze přímo z definičních vztahů (53), (55); tak vedle (57) platí, při obráceném pořadí operátorů,

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (n_i + 1) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (60)$$

Odtud a z (57) je vidět, že operátor  $(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i)$  působí stejně jako jednotkový operátor. Jinak řečeno: platí komutační relace

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \mathbb{1}.$$

Analogickým postupem je možné získat i komutátory pro ostatní kombinace kreačních a anihilačních operátorů.

Souhrnně: pro bosonové operátory platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] &= 0 \quad \text{pro } i \neq j, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = \mathbb{1} \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0, \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \quad \text{pro všechna } i, j \end{aligned} \quad (61)$$

Pro fermionové operátory  $\hat{c}_i, \hat{c}_j^+$  ( $i, j=1,2,\dots$ ) platí obdobné antikomutační relace

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^+\} &= \hat{c}_i \hat{c}_j^+ + \hat{c}_j^+ \hat{c}_i = 0 \quad \text{pro } i \neq j, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_i^+\} = \mathbb{1} \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} &= 0, \quad \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\} = 0 \quad \text{pro všechna } i, j \end{aligned} \quad (62)$$

Poznámka: antikomutátorem dvou operátorů  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  se nazývá výraz  $(\mathcal{A}\mathcal{B} + \mathcal{B}\mathcal{A})$ ; značí se obvykle  $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$  nebo  $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_+$ .

Zde je vhodné zdůraznit, že definiční vztahy pro kreační a anihilační operátory, spolu s komutačními, resp. antikomutačními, relacemi, zahrnují v sobě všechny požadavky, které jsme na vlnové funkce (stavové vektory) souborů stejných částic měli. Jestliže je ve výpočtech (podle potřeby) užijeme, nemusíme se již starat o symetrii, resp. antisymetrii, vlnových funkcí (stavových vektorů).

#### Vakuový stav

Již jsme řekli, že pomocí kreačních a anihilačních operátorů můžeme z libovolného stavového vektoru získat jakýkoliv jiný. Zvláštní postavení mezi stavovými vektory má stavový vektor tzv. vakuového stavu

$$|0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (63)$$

v němž všechna obsazovací čísla jsou rovna nule (stav bez částic). Ket-vektor pro libovolný stav z něho získáme působením příslušných kreačních operátorů. Např.

$$|1, 1, 1, 0, 0, \dots\rangle = a_1^+ a_2^+ a_3^+ |0, 0, \dots\rangle$$

#### Základní stav souboru fermionů

Při práci se soubory fermionů je výhodnější vycházet ze stavového vektoru základního stavu, v němž jsou obsazeny všechny hladiny až po Fermiho energii (odst. 2, obr. 68b, 69). Jsou-li stavy číslovány v pořadí rostoucí energie (viz (29)), potom stavový vektor základního stavu souboru N fermionů je

$$|z\rangle \equiv |l_1, l_2, l_3, \dots, l_N, 0, 0, \dots\rangle \quad (64)$$

Ket-vektor  $|z\rangle$  získáme z vakuového stavu  $|0\rangle$  takto

$$|z\rangle = c_1^+ c_2^+ \dots c_N^+ |0\rangle \quad (65)$$

#### Operátory v reprezentaci obsazovacích čísel

Nyní nám již zbývá ukázat, jak se v reprezentaci obsazovacích čísel (tj. pomocí kreačních a anihilačních operátorů) vyjádří libovolný operátor. K tomu se využije věta, která tvrdí: jestliže všechny maticové prvky dvou operátorů, vypočtené pomocí stavových vektorů ve dvou různých reprezentacích, jsou stejné, potom operátory jsou ekvivalentní (o maticovém vyjádření operátorů viz odst. IV.1.5).

V našem případě to znamená požadavek, aby všechny maticové prvky nějakého operátoru v souřadnicové reprezentaci, vytvořené užitím funkcí (27) nebo (28), byly shodné s maticovými prvky získanými "obložením" hledaného operátoru bra- a ket-vektory (51). Realizace tohoto úkolu není zvlášť obtížná, je však zdlouhavá a proto uvedeme jen výsledky ([12]).

Uvažujme nejprve operátory, které jsou v souřadnicové reprezentaci součtem jednočásticových operátorů, tj operátory typu

$$\sigma_1(\{f_1, \dots, f_N\}) = \sigma_1(\{f_1\}) + \sigma_1(\{f_2\}) + \dots + \sigma_1(\{f_N\}) \quad (66)$$

Příkladem mohou být :

(i) operátor kinetické energie souboru N stejných částic

$$\mathcal{T} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_{\vec{r}_i}^2 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right)$$

(ii) operátor potenciální energie souboru N elektronů v poli jádra s nábojem  $+Ze$ , pevně umístěným v počátku souřadnic

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i|}$$

( v obou případech nevystupují explicitně spinové souřadnice ).

Operátory (66) mají v reprezentaci obsazovacích čísel tvar

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \sum_{i,j} \langle i | \sigma_1 | j \rangle \hat{c}_i^+ \hat{c}_j \\ \text{nebo} \\ \sigma_1 &= \sum_{i,j} \langle i | \sigma_1 | j \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \end{aligned} \quad (67a)$$

kde maticový prvek

$$\langle i | \sigma_1 | j \rangle = \sum_{\sigma} \int d\tau \psi_i^*(\vec{r}, \sigma) \sigma_1(\vec{r}, \sigma) \psi_j(\vec{r}, \sigma) \quad (67b)$$

se počítá s jednočásticovými vlnovými funkcemi (24). Principiálně je možné k výpočtu použít libovolný úplný soubor jednočásticových funkcí. Protože ale kreační a anihilační operátory pak provádějí kreaci nebo anihilaci v těchto stavech, budeme používat pochopitelně takové soubory funkcí, které mají k řešení úloze nejbližší.

Druhým běžným typem operátorů jsou dvoučásticové operátory, které v souřadnicové reprezentaci mají strukturu

$$\sigma_2(\{f_1, \dots, f_N\}) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \sigma_2(\{f_i, f_j\}) \quad (68)$$

( součet členů z nichž každý závisí na dvojici souřadnic ).

Typickým představitelem takových operátorů je operátor potenciální energie vzájemné elektrostatické interakce v souboru nabitých stejných částic.

Pro soubor  $N$  elektronů (pro 2 elektrony je to poslední člen v (9)) je operátor elektron-elektronové interakce v souřadnicové reprezentaci

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

(faktor  $1/2$  je zde proto, že v sumaci se bere každá interakce 2x, tj.  $i$ -tý s  $j$ -tým a  $j$ -tý s  $i$ -tým; interakce elektronu sama se sebou je vyloučena požadavkem  $i \neq j$ ).

Dvoučásticové operátory (68) mají v reprezentaci obsazovacích čísel tvar

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{k,l} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_l \hat{a}_k \\ \text{resp.} \quad \sigma_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{k,l} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \hat{c}_k \end{aligned} \quad (69a)$$

kde maticový element

$$\begin{aligned} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle &= \\ &= \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \int d\tau \int d\tau' \psi_i^*(\vec{r}, \sigma) \psi_j^*(\vec{r}', \sigma') \sigma_2(\vec{r}, \sigma, \vec{r}', \sigma') \psi_k(\vec{r}, \sigma) \psi_l(\vec{r}', \sigma') \end{aligned}$$

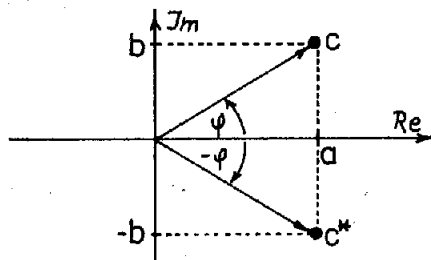
je opět vytvořen s jednočásticovými vlnovými funkcemi (24); o jejich výběru platí to, co bylo již řečeno u jednočásticových operátorů. Je samozřejmé, že když je transformovaný operátor součtem několika členů (např. (9)), musíme pro převod všech členů užít též soubor jednočásticových funkcí (24).

Nyní jsme již ve stadiu, kdy máme v podstatě zavedeno vše, co pro řešení úloh v reprezentaci obsazovacích čísel je třeba. Výhodnost a názornost této reprezentace vynikne až při řešení konkrétních úloh; to však již není předmětem tohoto dílu skript. Jistě je však účelné říci ještě toto: reprezentace obsazovacích čísel bývá zpravidla zařazována až do "vyšších" partií kvantové mechaniky, což pak vyvolává u studentů dojem zvláštní obtížnosti. Hledají pak záhady tam, kde žádné nejsou a domnívají se, že věc nepochopili proto, že se jim zdá příliš jednoduchá. Proto bych chtěl explicitně uvést, že tato partie kvantové mechaniky není o nic obtížnější než jiné její části; naopak, podle mého názoru je reprezentace obsazovacích čísel pro soubory částic mnohem jednodušší, průhlednější a názornější při interpretaci výsledků, než standardní souřadnicová reprezentace. To byl také důvod k zařazení alespoň krátkého odstavce na toto téma do tohoto úvodního skriptu.

**DODATKY**

A) Několik potřebných matematických vztahů

A1) Komplexní čísla



Obr. 70.

Zobrazení komplexního čísla  $c = a + ib$  v Gaussově rovině.  $c^* = a - ib$  je číslo komplexně sdružené.

Běžné značení:  $\text{Re } c = a$  ,  $\text{Im } c = b$

$\psi = \text{Arg } c$

Absolutní hodnota (modul) :  $|c| = \sqrt{a^2 + b^2}$  (A1)

Čtverec modulu:  $|c|^2 = c^*c = a^2 + b^2$  (A2)

$$\text{tg } \psi = \frac{b}{a} = \frac{\text{Im } c}{\text{Re } c} \quad (\text{A3})$$

Exponenciální tvar:  $c = |c| e^{i\psi}$  ,  $c^* = |c| e^{-i\psi}$  (A4)

Moivreův vzorec:  $e^{\pm i\psi} = \cos \psi \pm i \sin \psi$  (A5)

a odtud (n je celé)

$$(\cos \psi \pm i \sin \psi)^n = \cos(n\psi) \pm i \sin(n\psi) \quad (\text{A6})$$

Trigonometrické a hyperbolické funkce:

$$\sin \psi = (e^{i\psi} - e^{-i\psi}) / 2i \quad (\text{A7})$$

$$\cos \psi = (e^{i\psi} + e^{-i\psi}) / 2 \quad (\text{A8})$$

$$\sinh \psi = (e^{\psi} - e^{-\psi}) / 2 \quad (\text{A9})$$

$$\cosh \psi = (e^{\psi} + e^{-\psi}) / 2 \quad (\text{A10})$$

$$\sinh(i\psi) = i \sin \psi \quad , \quad \cosh(i\psi) = \cos \psi \quad (\text{A11})$$

A2) Neurčité integrály

$$\int \sin^2(ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4a} \sin(2ax) \quad (\text{A12})$$

$$\int \cos^2(ax) dx = \frac{x}{2} + \frac{1}{4a} \sin(2ax) \quad (\text{A13})$$

A3) Určité integrály

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(ax)}{x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(ax)}{x^2} dx = \pi |a| \quad (A14)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2(x+b)^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \quad \left( -\frac{\pi}{4} < \text{Arg } a < \frac{\pi}{4}, b \text{ libovolné} \right) \quad (A15)$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-a^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^2} \quad (a > 0) \quad (A16)$$

$$\int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt = \Gamma(x) \quad (A17)$$

kde  $\Gamma(x)$  je funkce gama. Integrál konverguje pro  $x > 0$ .

Platí:

$$\Gamma(x+1) = x \Gamma(x)$$

$$\Gamma(x) \Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)} \quad (0 < x < 1)$$

$$\Gamma(x) \Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2x-1}} \Gamma(2x)$$

$$\Gamma(1) = \Gamma(2) = 1$$

Obecně pro  $x=n$  ( $n$  je přirozené číslo) :  $\Gamma(n) = (n-1)!$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}; \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

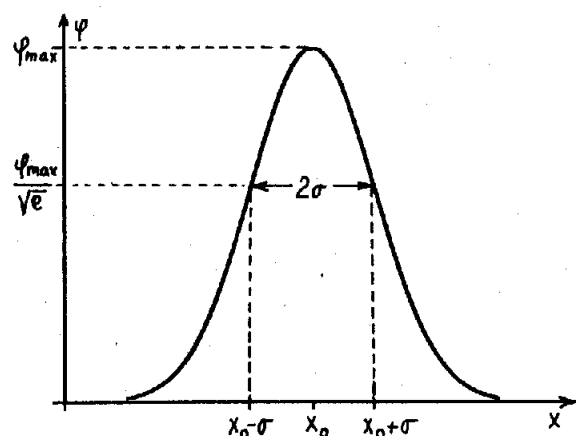
$$\int_0^{\pi/2} \sin^{r-1} x \cos^{s-1} x dx = \frac{1}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right) \Gamma\left(\frac{s}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{r+s}{2}\right)} \quad (r > 0, s > 0)$$

$$\int_0^{\pi/2} \sin^{r-1} x dx = \int_0^{\pi/2} \cos^{r-1} x dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{r}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{r+1}{2}\right)} \quad (r > 0)$$

A4) Gaussova rozdělovací funkce

Normovaná Gaussova rozdělovací funkce (v počtu pravděpodobnosti se zpravidla mluví o normovaném normálním rozdělení) je

$$\varphi(x; x_0, \sigma) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (A18)$$



Obr. 71.

Gaussova funkce se střední hodnotou  $x_0$  a dispersí  $\sigma^2$ .

kde  $\sigma^2$  je disperse (rozptyl), která charakterizuje šířku křivky ( pro  $\psi = \psi_{\max} e^{-1/2}$  je šířka rovna  $2\sigma$  ).

Koeficient  $(\sigma\sqrt{2\pi})^{-1}$  v (A18) zajišťuje normalizaci, tj platnost

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} dx = 1$$

#### A5) Determinanty

Determinant ke čtvercové matici A řádu  $n \times n$  se definuje takto

$$\begin{aligned} \text{Det } A &= |A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \\ &= \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_n\}} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} a_{1i_1} a_{2i_2} \dots a_{ni_n} \end{aligned} \quad (\text{A19})$$

kde  $\epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n}$  je +1 tvoří-li  $(i_1, i_2, \dots, i_n)$  sudou permutací

čísel  $(1, 2, \dots, n)$  a -1 pro lichou permutací.

Sudá (lichá) permutace čísel  $(1, 2, \dots, n)$  se dostane z tohoto výchozího uspořádání sudým (lichým) počtem transpozic dvojic čísel této množiny. Ve vzorci (A19) se sečítá přes všechny permutace, kterých je  $n!$ . Všimněte si, že každý součin v sumě obsahuje jeden a jen jeden prvek z každého řádku a sloupce.

B) Lineární vektorové prostory

V matematice se často setkáváme s objekty, pro které jsou definovány operace sečítání a násobení čísly.

Příklady:

- (a) v geometrii jsou takovými objekty vektory v 3-rozměrném prostoru,
- (b) v analýze se definují operace sečítání funkcí a jejich násobení čísly,
- (c) v algebře se setkáváme s uspořádanými soustavami  $n$  čísel - maticemi - pro něž se definuje sečítání a násobení konstantou.

V uvedených příkladech se operace sečítání a násobení čísly provádějí na zcela odlišných matematických objektech. Na všechny takové příklady se však lze dívat z jediného jednotícího hlediska, kterým je pojem lineárního vektorového prostoru.

Definice lineárního vektorového prostoru

Množinu  $R$  prvků  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, \dots$  nazýváme lineárním vektorovým prostorem, jestliže má tyto vlastnosti:

- (a) na množině  $R$  je definováno sečítání, které je

$$\text{komutativní : } \vec{x} + \vec{y} = \vec{y} + \vec{x} \quad (B1)$$

$$\text{a asociativní : } (\vec{x} + \vec{y}) + \vec{z} = \vec{x} + (\vec{y} + \vec{z})$$

- (b) na množině  $R$  je definováno násobení konstantou (skalárem), které je

$$\text{distributivní : } a(\vec{x} + \vec{y}) = a\vec{x} + a\vec{y}$$

$$\text{asociativní : } a(b\vec{x}) = (ab)\vec{x} \quad (B2)$$

$$(a+b)\vec{x} = a\vec{x} + b\vec{x}$$

kde  $a, b$  jsou obecně komplexní konstanty.

Kromě toho se předpokládá, že v množině  $R$

- (i) existuje nulový prvek (vektor)  $\vec{0}$  takový, že

$$\vec{x} + \vec{0} = \vec{x} \quad \text{pro všechna } \vec{x} \in R, \quad (B3)$$

- (ii) násobení libovolného  $\vec{x} \in R$  skalárem 1 nemění vektor  $\vec{x}$

$$1\vec{x} = \vec{x} \quad (B4)$$

- (iii) ke každému  $\vec{x} \in R$  existuje v  $R$  takový vektor  $(-\vec{x})$ , že

$$\vec{x} + (-\vec{x}) = \vec{0} \quad (B5)$$

V definici se neříká jak se definují operace sečítání vektorů a násobení skalárem. Potřebné je pouze, aby byly splněny uvedené požadavky. Proto kdykoliv se setkáme s operacemi, které těmto podmínkám vyhovují, máme právo je považovat za operace sečítání vektorů a násobení skalárem a samotnou množinu prvků, na níž jsou tyto operace definovány, za lineární vektorový prostor.

Definice lineárně nezávislých vektorů

Vektory  $\vec{x}, \vec{y}, \dots, \vec{z}$  se nazývají lineárně nezávislé, jestliže rovnici

$$a\vec{x} + b\vec{y} + \dots + c\vec{z} = \vec{0} \quad (B6)$$

lze splnit jen s čísly  $a = b = \dots = c = 0$ .



### Definice dimenze lineárního vektorového prostoru

Jestliže v nějakém lineárním vektorovém prostoru lze najít  $n$  lineárně nezávislých vektorů, ale ani jeden soubor  $(n+1)$  nezávislých vektorů, potom říkáme, že prostor má dimenzi  $n$  (nebo: je to  $n$ -rozměrný prostor).

Lze-li v prostoru nalézt libovolný počet lineárně nezávislých vektorů, říkáme, že je to prostor nekonečné dimenze.

### Definice báze v prostoru a definice souřadnic vektoru

Nechť  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n$  je soubor  $n$  lineárně nezávislých vektorů v  $n$ -rozměrném lineárním vektorovém prostoru  $R_n$ . Potom, je-li  $\vec{x}$  libovolný vektor z  $R_n$ , je možné psát

$$\vec{x} = x_1 \vec{e}_1 + x_2 \vec{e}_2 + \dots + x_n \vec{e}_n = \sum_{i=1}^n x_i \vec{e}_i \quad (B7)$$

kde  $x_1, x_2, \dots, x_n$  jsou obecně komplexní čísla, která podle (B6) nejsou všechna současně rovna nule.

Říkáme, že vektory  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n$  tvoří bázi (souřadnou soustavu) v  $R_n$  a  $x_1, x_2, \dots, x_n$  jsou souřadnicemi vektoru  $\vec{x}$  v této bázi.

Bázi lze vždy vybrat i v prostoru nekonečné dimenze.

### Definice skalárního součinu

Metrika se do lineárního vektorového prostoru zavede definicí skalárního součinu dvou vektorů. V lineárním vektorovém prostoru  $R$  je definován skalární součin, jestliže každé uspořádané dvojici vektorů  $\vec{x}, \vec{y} \in R$  je přiřazeno číslo (obecně komplexní), které označíme  $(\vec{x}, \vec{y})$  (nebo  $\langle x|y \rangle$  podle Diraca), vyhovující těmto požadavkům:

$$\begin{aligned} (\vec{x}, \vec{y}) &= (\vec{y}, \vec{x})^* \\ (\vec{x}, (a\vec{y} + b\vec{z})) &= a(\vec{x}, \vec{y}) + b(\vec{x}, \vec{z}) \\ (\vec{x}, \vec{x}) &\geq 0 \quad (\text{reálné}) \quad \text{přičemž} \\ z \quad (\vec{x}, \vec{x}) &= 0 \quad \text{plyne, že } \vec{x} = \vec{0} \end{aligned} \quad (B8)$$

Z prvních dvou požadavků dále plyne, že

$$((a\vec{x} + b\vec{y}), \vec{z}) = a^*(\vec{x}, \vec{z}) + b^*(\vec{y}, \vec{z})$$

Dva vektory  $\vec{x}, \vec{y} \in R$  jsou ortogonální, jestliže

$$(\vec{x}, \vec{y}) = 0.$$

Veličina  $|\vec{x}|^2 = (\vec{x}, \vec{x})$  se nazývá norma vektoru  $\vec{x}$ ;  $|\vec{x}| = (\vec{x}, \vec{x})^{1/2}$  je délka vektoru  $\vec{x}$ .

Doporučuji čtenáři, aby si vše co bylo v tomto odstavci řečeno, nejprve přenesl a promyslel v 3-rozměrném reálném vektorovém prostoru (čísla  $a, b, \dots$  i souřadnice vektoru jsou reálná čísla) a potom si představil zobecnění na  $n$ -rozměrný (i pro  $n \rightarrow \infty$ ) komplexní prostor.

C)  $\delta$ -funkce

Diracova  $\delta$ -funkce  $\delta(x)$  se definuje vztahem

$$\int_{-a}^b \delta(x) dx = 1 \quad \text{pro libovolná } a, b > 0 \quad (C1)$$

Odtud je vidět, že  $\delta(x)=0$  pro  $x \neq 0$  a v  $x=0$  není definována. Nejde tedy o funkci v běžném slova smyslu, ale spíše o symbol, který má smysl jen v integrandu ( $\delta$ -funkce patří mezi tzv. zobecněné funkce nebo také distribuce; viz [18]).  $\delta$ -funkci lze vyjádřit jako limitu posloupnosti funkcí; např pro  $\varepsilon \rightarrow 0+$  ( $\varepsilon$  se blíží k nule ze strany kladných hodnot) to jsou posloupnosti

$$\frac{1}{2\varepsilon} e^{-|x|/\varepsilon} \quad (C2)$$

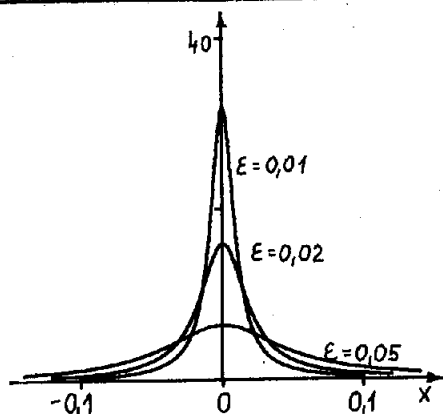
$$\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (C3)$$

$$\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\varepsilon^2} \quad (C4)$$

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{x} \quad (C5)$$

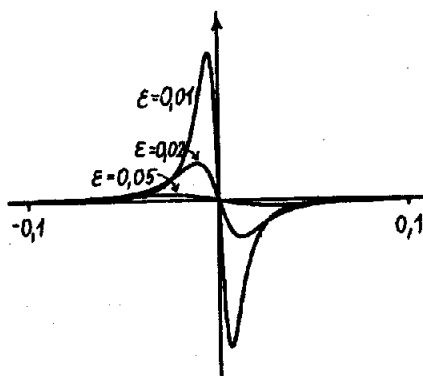
$$\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left( \frac{1}{x - i\varepsilon} \right) \quad (\text{což je } (C3)) \quad (C6)$$

Velice užitečná integrální reprezentace  $\delta$ -funkce je v dod.D.



Obr. 72.

Funkce (C3) pro tři různé hodnoty parametru  $\varepsilon$ .  $\delta$ -funkci lze reprezentovat limitou pro  $\varepsilon \rightarrow 0+$ .



Obr. 73

Derivace funkcí (C3) pro tři různé hodnoty  $\varepsilon$ . Derivaci  $\delta$ -funkce  $\delta'(x)$  reprezentuje limita pro  $\varepsilon \rightarrow 0+$ .

Z charakteru  $\delta$ -funkce je zřejmé, že platí

$$\int f(x) \delta(x-x_0) dx = f(x_0), \quad (C7)$$

jestliže integrační obor obsahuje bod  $x_0$  a  $f(x)$  je libovolná funkce spojitá v  $x_0$ . Vztah (C7) se může též použít pro definici  $\delta$ -funkce.

Pro  $\delta$ -funkci platí vztahy (plný smysl mají opět až za  $\int$ )

$$x \delta(x) = 0 \quad (C8)$$

$$\delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x) \quad (C9)$$

$$\delta(ax) = a^{-1} \delta(x) \quad \text{pro } a > 0 \quad (C10)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = (2a)^{-1} [\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad \text{pro } a > 0 \quad (C11)$$

$\delta$ -funkce v 3-rozměrném prostoru se definuje obdobně (C1):

$$\iiint \delta(\vec{r}) d^3\vec{r} = 1 \quad (C12)$$

jestliže integrační obor obsahuje bod  $\vec{r} = 0$ .

Vztah (C7) se zobecní na

$$\iiint d^3\vec{r} \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) f(\vec{r}) = f(\vec{r}_0) \quad (C13)$$

$\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$  může být rozepsána v součin tří jednorozměrných  $\delta$ -funkcí ( $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ )

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(z-z_0) \quad (C14)$$

nebo ve sférických souřadnicích  $(r, \theta, \varphi)$

$$\begin{aligned} \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r-r_0) \delta(\theta-\theta_0) \delta(\varphi-\varphi_0) = \\ &= \frac{1}{r^2} \delta(r-r_0) \delta(\cos \theta - \cos \theta_0) \delta(\varphi-\varphi_0) \end{aligned} \quad (C15)$$

Derivace  $\delta$ -funkce -  $\delta'(x)$

Derivací  $\delta$ -funkce lze považovat za limitu (pro  $\varepsilon \rightarrow 0+$ ) derivací funkcí posloupností (C2) - (C6).

Platí

$$\delta'(-x) = - \delta'(x) \quad (C16)$$

$$x \delta'(x) = - \delta(x) \quad (C17)$$

D) Fourierova transformace

Nechť  $f(x)$  je funkce periodická s periodou  $L$ , tj.  $f(x+L) = f(x)$ . Takovou funkci je možné psát ve tvaru komplexní Fourierovy řady

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n e^{i2\pi nx/L} \quad (D1)$$

Koeficienty  $a_n$  jsou dány vztahem

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) e^{-i2\pi nx/L}, \quad (D2)$$

kde  $x_0$  je libovolné reálné číslo (nejčastěji se klade  $x_0=0$  nebo  $x_0=-L/2$ ).

Uvažme nyní případ  $L \rightarrow \infty$ . Suma potom přejde v integrál takto:

$$2\pi n/L = k \quad \text{a} \quad La_n = g(k)$$

Protože  $n$  roste v sumě po jednotce, platí ( $F_n = F(k)$ )

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n = \int_{-\infty}^{+\infty} F_n dn = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) dk$$

Dostáváme tedy

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (D3a)$$

$$g(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (D3b)$$

Funkce  $g(k)$  se nazývá Fourierova transformace funkce  $f(x)$  a opačně. Koeficient  $1/2\pi$  v (D3a) se často "rozděluje" symetricky mezi  $f(x)$  a  $g(k)$ , takže

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk ; \quad g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (D4)$$

Kombinací výrazů pro  $f(x)$  a  $g(k)$  obdržíme

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') e^{-ikx'} dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' f(x') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')k} dk \quad (D5)$$

Aby tato rovnost platila pro libovolnou funkci  $f(x)$ , musí zřejmě být (srov.(C7))

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')k} dk = \delta(x-x') \quad (D6)$$

Tím jsme získali velice užitečnou integrální reprezentaci  $\delta$ -funkce.

Tuto reprezentaci lze např. využít při důkazu Parsevalova teoremu, podle kterého

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk \quad (D7)$$

kde  $|f(x)|^2 = f^*(x)f(x)$  a  $|g(k)|^2 = g^*(k)g(k)$ . Důkaz (pokud ho nesvedete sami) najdete třeba v [1]. Parsevalův teorém je velice užitečný ke stanovení fyzikální reprezentace Fourierova obrazu  $g(k)$ , jestliže známe fyzikální smysl  $f(x)$ .

Fourierovu transformaci (D4) lze snadno rozšířit do 3-rozměrného prostoru na funkce  $f(\vec{r})$ :

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint d^3\vec{k} \ g(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (D8a)$$

$$g(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint d^3\vec{r} \ f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (D8b)$$

Trojrozměrná  $\delta$ -funkce (C14) pak má integrální reprezentaci

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint d^3\vec{k} \ e^{i(\vec{r}-\vec{r}_0)\vec{k}} \quad (D9)$$

$\delta$ -funkce se využívá při normalizaci rovinných vln (de Broglieho vln). Integrál

$$\begin{aligned} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} d^3\vec{r} \quad \text{je součinem tří jednorozměrných integrálů} \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k_x - k'_x)x} dx = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L e^{i(k_x - k'_x)x} dx = \\ = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2 \sin(L(k_x - k'_x))}{k_x - k'_x} = 2\pi \delta(k_x - k'_x) \end{aligned} \quad (D10)$$

a podobně pro  $y, z$  ( v posledním kroku v (D10) jsme použili (C4)).

Je tedy

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} d^3\vec{r} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (D11)$$

Provedeme-li takto normalizaci de Broglieho rovinných vln (místo v oblasti periodicity), přejde (II.35) v

$$\boxed{\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar}} \quad (D12)$$

E) Diferenciální operátory z vektorové analýzyGradient skalárního pole

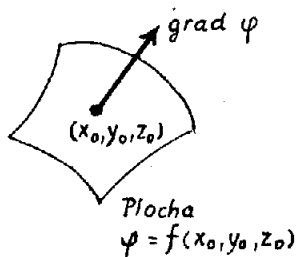
Funkcí  $\varphi = f(x, y, z)$  je dáno v oblasti, na níž je funkce definována, tzv. skalární pole. Plochy  $\varphi = \text{konst}$  jsou tzv. hladiny tohoto pole. Příkladem takové funkce je třeba potenciál elektrostatického pole a v něm ekvipotenciální plochy pro  $\varphi = \text{konst}$ .

Vektor

$$\text{grad } \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \vec{k} \quad (\text{E1})$$

kde  $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$  jsou jednotkové vektory ve směru os tvořících kartézskou souřadnou soustavu, se nazývá gradient daného skalárního pole.

Gradient funkce  $\varphi$  v nějakém bodě  $(x_0, y_0, z_0)$  je vektor kolmý k hladině jdoucí bodem  $(x_0, y_0, z_0)$  (obr. 74).



Obr. 74.

Gradient se píše symbolicky takto

$$\text{grad } \varphi = \nabla \varphi = \left( \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \varphi$$

kde

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (\text{E2})$$

je tzv. operátor nabla.

Divergence a rotace vektorového pole

Je-li v každém bodě nějaké oblasti zadán vektor, potom je v této oblasti definováno vektorové pole. Příkladem mohou být vektory udávající intenzitu  $\vec{E}$  elektrostatického pole, nebo množina vektorů  $\text{grad } \varphi$  ve skalárním poli.

Mějme vektorové pole

$$\vec{a}(x, y, z) = a_x(x, y, z) \vec{i} + a_y(x, y, z) \vec{j} + a_z(x, y, z) \vec{k} \quad (\text{E3})$$

Vektor  $\vec{a}$  a tedy i jeho souřadnice  $a_x, a_y, a_z$  v kartézské souřadné soustavě určené jednotkovými vektory  $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ , jsou funkcemi polohy, tj. bodu  $(x, y, z)$ .

Divergencí vektoru  $\vec{a}$  se nazývá skalár

$$\text{div } \vec{a} = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z} \quad (\text{E4})$$

Protože na  $\text{div } \vec{a}$  je možné pohlížet též jako na skalární součin vektoru (operátoru)  $\nabla$  s vektorem  $\vec{a}$ , značí se divergence a též  $\nabla \vec{a}$ .

Fyzikální význam: uvažujme stacionární proudění kapaliny charakterizované v každém bodě vektorem rychlosti  $\vec{v}(x, y, z)$ . Divergence  $\nabla \vec{v}$  znamená

objemové množství kapaliny, které vyteče z jednotkového objemu za jednotku času. Pro nestlačitelnou kapalinu je  $\text{div } \vec{v} = 0$  (není-li v uvedeném objemu zřídlo); tzn, že kolik do objemu přiteklo, tolik muselo také vytéci.

Rotací vektoru  $\vec{a}$  se nazývá vektor

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{a} &= \\ &= \left( \frac{\partial a_z}{\partial y} - \frac{\partial a_y}{\partial z} \right) \vec{i} + \left( \frac{\partial a_x}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial x} \right) \vec{j} + \left( \frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y} \right) \vec{k} = \\ &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ a_x & a_y & a_z \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E5})$$

Místo  $\text{rot } \vec{a}$  se často píše (především v západní literatuře)  $\text{curl } \vec{a}$ . Protože  $\text{rot } \vec{a}$  lze formálně dostat jako vektorový součin vektoru (operátoru)  $\nabla$  a vektoru  $\vec{a}$ , značí se též  $\nabla \times \vec{a}$ .

Fyzikální význam. Je-li  $\vec{v}$  rychlost kapaliny, vyznačuje  $\text{rot } \vec{v}$  svým směrem směr osy, kolem které se kapalina v malém okolí uvažovaného bodu otáčí jako celek a  $|\text{rot } \vec{v}|$  je dvojnásobkem rotační rychlosti (v obloukové míře).

Pole v němž všude platí  $\text{rot } \vec{a} = 0$  se nazývá nevírové. Nevírové je např. pole, které dostaneme tak, že ve skalárním poli  $\varphi(x,y,z)$  přiřadíme každému bodu vektor  $\text{grad } \varphi$ . Přímým výpočtem ověříte, že

$$\text{rot grad } \varphi = 0 \text{ (nulový vektor)} \quad (\text{E6})$$

Podrobnou diskusi fyzikálního významu operátorů  $\text{grad}$ ,  $\text{div}$  a  $\text{rot}$  najdete v učebnici [4].

Laplaceův operátor  $\Delta$  se získá skalárním násobením operátoru  $\nabla$  (nabla) sebou samým

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{E7})$$

Ještě několik vzorců pro operátory  $\Delta$ ,  $\nabla$  ( $f, g$  jsou skalární pole,  $\vec{a}, \vec{b}$  vektorová pole):

$$\begin{aligned} \nabla(fg) &= \text{grad}(fg) = f \text{ grad } g + g \text{ grad } f \\ \nabla(f\vec{a}) &= \text{div}(f\vec{a}) = f \text{ div } \vec{a} + \vec{a} \text{ grad } f \\ \nabla(\vec{a} \times \vec{b}) &= \text{div}(\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{b} \cdot \text{rot } \vec{a} - \vec{a} \cdot \text{rot } \vec{b} \\ \nabla(\nabla \vec{a}) &= \text{grad div } \vec{a} = \text{rot rot } \vec{a} + \Delta \vec{a} \\ \nabla(\nabla \times \vec{a}) &= \text{div rot } \vec{a} = 0 \end{aligned} \quad (\text{E8})$$

# LITERATURA

- [1] J.Mathews, R.L.Walker: Mathematical Methods of Physics;(ruský překlad: Atomizdat, Moskva 1972)
- [2] K.Rektorys et al.: Přehled užité matematiky, SNTL, Praha 1968
- [3] G.Goertzel, N.Tralli: Některé matematické metody fyziky, SNTL, Praha 1970 ( překlad z angličtiny )
- [4] E.M.Purcell: Electricity and Magnetism, Berkeley Physics Course 2; (ruský překlad: Nauka, Moskva 1971)
- [5] F.S.Grawford,Jr: Waves, Berkeley Physics Course 3 (ruský překlad: Nauka, Moskva 1974)
- [6] E.H.Wichmann: Quantum Physics, Berkeley Physics Course 4 (ruský překlad: Nauka, Moskva 1974)
- [7] R.P.Feynman, R.B.Leighton, M.Sands: The Feynman Lectures on Physics (ruský překlad: Mir, Moskva 1967,sv.3,8,9; slovenský překlad se připravuje)
- [8] A. Beiser: Úvod do moderní fyziky, Academia, Praha 1978 (překlad z angličtiny; existuje i ruský překlad)
- [9] L.N.Cooper: An Introduction to the Meaning and Structure of Physics, vol.2 (ruský překlad: Fyzika dlja vseh,tom 2, Mir,Moskva 1974)
- [10] P.T.Matthews: Základy kvantové mechaniky, SNTL, Praha 1976 (překlad z angličtiny)
- [11] A.S. Davydov: Kvantová mechanika, SPN, Praha 1978 (překlad z ruštiny)
- [12] L.D.Landau, E.M.Lifšic: Kvantovaja mechanika,Teoretičeskaja fizika tom 3, Nauka, Moskva 1974
- [13] A. Messiah: Mécanique quantique, t.I,II (ruský překlad: Nauka, Moskva 1979)
- [14] D.Bohm: Quantum Theory (ruský překlad: GIFML, Moskva 1961)
- [15] Ch. Kittel: Thermal Physics (ruský překlad: Statističeskaja termodinamika, Nauka, Moskva 1977)
- [16] Pišút J., Gomolčák L.: Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa, Bratislava 1975
- [17] E.Fermi: Notes on Quantum Mechanics (ruský překlad: Kvantovaja mechanika, Mir, Moskva 1968)
- [18] L.Schwartz: Matematické metody ve fyzice, SNTL, Praha 1972 (překlad z francouzštiny)

Poznámka: některé tituly, např. [2], [4]-[8], existují i v novějších vydáních.