[4] C. K. Hong, Z. Y. Ou, and L. Mandel, *Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference*, Phys. Rev. Lett. **59**, 2044-2046 (1987).

[5] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, Phys. Rev. **47**, 777-780 (1935).

Ústav teoretické fyziky a astrofyziky
Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

Základy kvantové mechaniky

Tomáš Tyc

Brno 2006

Tento text je určen jako pomůcka pro porozumění přednáškám z předmětu Základy kvantové mechaniky a nemá ani nemůže nahradit učebnici kvantové mechaniky. Je k dispozici v elektronické podobě na adrese www.physics.muni.cz/~tomtyc/kvantovka.pdf (nebo .ps)

- **Příklad – dvojice provázaných částic se spinem 1/2**
  - vezměme singletový stav dvou částic

$$|\psi\rangle = |\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)})$$

  - provedeme měření spinu ve směru dané osy na první částici; možný výsledek je $\pm\hbar/2$ odpovídající $|+\rangle, |-\rangle$ (obě možnosti se stejnou pravděpodobností 1/2)
  - nový stav po měření je dán projekcí původního stavu na naměřený stav, tedy v případě naměření $\hbar/2$:

$$|\psi'\rangle = (|+\rangle^{(1)}\langle +|^{(1)})|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle^{(1)}\langle +|^{(1)})(|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)}$$

  v případě naměření $-\hbar/2$ pak

$$|\psi'\rangle = (|-\rangle^{(1)}\langle -|^{(1)})|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle^{(1)}\langle -|^{(1)})(|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}$$

  - v případě naměření $\hbar/2$ na první částici je tedy jisté, že druhá má průmět spinu rovný $-\hbar/2$ a naopak
  - tedy jde o jisté „ovlivňování na dálku", dokonce libovolnými rychlostni
  - lze ale ukázat, že toto ovlivnění nelze použít ke komunikaci nadsvětelnou rychlostí
  - souvislost s **no-cloning** theorem – kvantový stav nelze kopírovat – nemohu sestrojit přístroj, který by dokázal kopírovat kvantový stav

$$T : |\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle$$

- Měřicí přístroj je klasický objekt, který se příliš neřídí zákony kvantové mechaniky – především pro něj neplatí princip superpozice a jeho ukazatel se nemůže nacházet v superpozici dvou naměřených hodnot (proto také nikdy nenaměříme superpozici, ale jen jednu hodnotu fyzikální veličiny, a na superpozici usuzujeme pouze nepřímo – viz oddíl 3.1)
- Problém měření v kvantové fyzice není dosud uspokojivě vyřešen, hranice mezi klasickými a kvantovými objekty je nejasná, snad to dokonce souvisí s naším vědomím
- Problém provázání systému s tělesy v okolí – tzv. **dekoherence** – žádný kvantový systém není uzavřený a okolí na něm stále provádí jakási „měření", čímž se systém určitým způsobem stává klasickým
- To je pravděpodobně důvod pro klasické chování velkých (makroskopických) objektů

Reference

[1] L. D. Landau, E. F. Lifšic, Kurz teoretické fyziky – Kvantová mechanika

[2] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands, Feynmanovy přednášky z fyziky

[3] M. Dušek, Koncepční otázky kvantové teorie, Univerzita Palackého Olomouc 2002.

– Tedy koeficienty c_{ik} jsou

$$c_{11} = a, \quad c_{12} = b, \quad c_{21} = c, \quad c_{22} = d$$

– pak matice hustoty systému 1 je dána jako

$$\rho_{11} = \sum_{j=1}^{2} c_{1j} c_{1j}^* = |a|^2 + |b|^2, \quad \rho_{12} = \sum_{j=1}^{2} c_{1j} c_{2j}^* = ac^* + bd^*$$

$$\rho_{21} = \sum_{j=1}^{2} c_{2j} c_{1j}^* = ca^* + db^*, \quad \rho_{22} = \sum_{j=1}^{2} c_{2j} c_{2j}^* = |c|^2 + |d|^2$$

– matice hustoty 1. částice tedy bude

$$\rho^{(1)} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ ca^* + db^* & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix}$$

– podobě matice hustoty 2. částice bude

$$\rho^{(2)} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |c|^2 & ab^* + cd^* \\ ba^* + dc^* & |b|^2 + |d|^2 \end{pmatrix}$$

12 Měření v kvantové mechanice a kolaps stavu

- V klasické fyzice lze vliv měření na měřený objekt snižovat limitně k nule, takže jej lze většinou zcela zanedbat
- V kvantové fyzice je tomu jinak: měření má vždy významný vliv na systém, na němž se měření provádí
- Měřením se nedozvíme celou informaci o stavu, ve kterém se systém nachází, ale jen její malou část
- Uvažujme měření veličiny A, která má soubor vlastních stavů $|\alpha_i\rangle$ a vlastních hodnot a_i, přičemž jsou tyto hodnoty nedegenerované
- Pro systém ve stavu $|\psi\rangle$ je pravděpodobnost naměření hodnoty a_i rovna $|\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$
- Aktuální naměřená hodnota veličiny A se rozhoduje zcela náhodně
- To, jakou hodnotu veličiny A naměří přístroj, je tedy možné předpovědět pouze pravděpodobnostně
- Vlivem měření dojde k přechodu systému do vlastního stavu $|\alpha_i\rangle$ operátoru A – tzv. **kolaps** (neboli **redukce**) stavu
- Další měření již proto nemá smysl, protože vlivem prvního měření systém přešel do stavu, který se liší od původního, a proto nám nedá žádnou novou informaci
- Velice významný důsledek pro provázané stavy: kolaps se díky provázání projeví na celém stavu, takže v určitém smyslu měření na jednom podsystému ovlivní stav druhého

Obsah

1 Úvod

1.1 Co je kvantová mechanika?

- Kvantová mechanika (QM) se zabývá studiem mikroskopických objektů jako elektrony, neutrony, atomy, molekuly, fotony atd.
- Fyzikální zákony, které platí pro tyto objekty, se značně liší od těch, kterými se řídí běžná tělesa kolem nás
- Tyto zákony jsou tak zvláštní, že se s nimi nemohl ztotožnit ani Einstein a Feynman měl za to, že QM nerozumí skoro nikdo na světě
- Kvantová mechanika dokáže chování mikroskopických objektů velice dobře popsat a patří k nejúspěšnějším fyzikálním teoriím – její předpovědi jsou s obrovskou přesností potvrzeny experimenty
- Klasická mechanika se dá získat z kvantové limitním přechodem k velkým objektům (nebo přechodem $\hbar \to 0$) podobně, jako nerelativistická mechanika je limitou relativistické pro malé rychlosti; přechod ale není triviální
- V čem spočívá zmíněné podivné chování mikroskopických objektů? Projevuje se mnoha způsoby:
  - **princip superpozice** – kvantový objekt může být ve více různých stavech „zaráz“ – např. může mít současně několik hodnot energie, souřadnice atd.
  - **diskrétní spektrum** – některé veličiny (např. energie atomu, moment hybnosti elektronu) nemohou nabývat libovolných hodnot, ale jen hodnot z nějaké diskrétní množiny; odtud název „kvantová“ mechanika
  - **výsledky měření** dané veličiny ve známém stavu nelze s jistotou předpovědět, lze jen určit pravděpodobnosti, s jakými dostaneme jednotlivé výsledky měření (viz příklad se spinem elektronu);
  - **vliv měření na pozorovaný objekt** nelze eliminovat, měření vede k tzv. redukci (kolapsu) stavu měřeného objektu – ze superpozice se vybere jen jedna možnost, a to zcela náhodně; mechanismus tohoto kolapsu není dosud uspokojivě vysvětlen
  - **tunelový jev** – částice mohou pronikat i do míst, kam by se podle klasické mechaniky nemohly dostat (např. tam, kde by měly zápornou kinetickou energii); naopak částice se může odrazit od překážky, kterou by měla bez problémů přeběhnout
  - **dualismus vlna-částice** – kvantové objekty se v některých situacích mohou chovat jako vlny, v jiných jako tělíska
  - **princip nerozlišitelnosti** – stejné částice (např. dva elektrony) nemůžeme od sebe ani v principu odlišit – nelze je „očíslovat“
  - **kvantová provázanost (entanglement)** – nejpodivuhodnější a nejzáhadnější vlastnost kvantových systémů

1.2 Význam kvantové mechaniky

- QM výrazně a neustále ovlivňuje naš život, aniž si to uvědomujeme
- Enormní pokrok v technice a elektronice za posledních 50 let – možný jen díky znalosti QM

- Operátor hustoty poskytuje nejobecnější popis jakéhokoli systému při ignorování ostatních systémů
- Pokud je systém ve stavu popsaném operátorem hustoty $\hat\rho$, pak pravděpodobnost jeho nalezení ve stavu $|\phi\rangle$ je rovna $\langle\phi|\hat\rho|\phi\rangle$
- Pro stav $|u_i\rangle$ je tato pravděpodobnost $\langle u_i|\hat\rho|u_i\rangle = \rho_{ii}$, což dává diagonálním elementů matice hustoty význam pravděpodobností nalezení podsystému 1 ve stavech $|u_i\rangle$
- Předpokládejme, že stav $|\psi\rangle$ je součinem nějakého stavu podsystému 1 a nějakého stavu podsystému 2:
$$|\psi\rangle = |\xi\rangle^{(1)}|\eta\rangle^{(2)}, \text{ kde } \quad |\xi\rangle^{(1)} = \sum_i \xi_i |u_i\rangle^{(1)}, \quad |\eta\rangle^{(2)} = \sum_i \eta_i |v_i\rangle^{(2)}$$
- Pak platí $c_{ij} = \xi_i\eta_j$ a
$$\rho^{(1)}_{ik} = \sum_j \xi_i\eta_j\xi_k^*\eta_j^* = \xi_i\xi_k^*\sum_j |\eta_j|^2 = \xi_i\xi_k^*$$
  kvůli normování stavu $|\eta\rangle$.
- Operátor hustoty bude v takovémto případě
$$\hat\rho^{(1)} = \sum_{ik} \xi_i\xi_k^*|u_i\rangle\langle u_k| = |\xi\rangle^{(1)}\langle\xi|^{(1)},$$
  je tedy dán projekčním operátorem projektujícím na stav $|\xi\rangle^{(1)}$
- Pravděpodobnost nalezení částice ve stavu $|\phi\rangle$ je pak $\langle\phi|\hat\rho|\phi\rangle = \langle\phi|\xi\rangle\langle\xi|\phi\rangle = |\langle\phi|\xi\rangle|^2$, což víme, že musí platit
- Lze ukázat, že každý operátor hustoty lze vyjádřit jako
$$\hat\rho = \sum_i p_i|\xi_i\rangle\langle\xi_i|,$$
  kde p_i je pravděpodobnost nalezení částice ve stavu $|\xi_i\rangle$ a platí $\sum_i p_i = 1$
- V praxi nelze kvantový systém udržet izolovaný od okolí, bude tedy vždy s okolím interagovat; často ale nemůžeme zahrnout do popisu celé okolí, takže musíme popsat jen náš systém, a to lze obecně jen pomocí matice hustoty
- Časový vývoj operátoru hustoty systému, který neintereaguje s jinými kvantovými objekty, je dán obdobou Schrödingerovy rovnice
$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat\rho}{\mathrm{d}t} = [\hat H, \hat\rho]$$
- Časový vývoj $\hat\rho$ systému, který intereaguje s jinými kvantovými objekty, je dán rovnicí zvanou **master equation**
- **Příklad – dvojice částic se spinem 1/2**
  - Mám dvoučásticový stav
$$|\psi\rangle = a|+\rangle|+\rangle+b|+\rangle|-\rangle+c|-\rangle|+\rangle+d|-\rangle|-\rangle = a|+\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}+b|+\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)}+c|-\rangle^{(1)}|+\rangle^{(2)}+d|-\rangle^{(1)}|-\rangle^{(2)},$$
    kde $|a|^2+|b|^2+|c|^2+|d|^2 = 1$ (normovací podmínka)

11 Matice hustoty

- Uvažujme kvantový systém složený ze dvou podsystémů, které budeme rozlišovat indexy $^{(1)}$ a $^{(2)}$. Je-li báze Hilbertova prostoru prvního podsystému $\{|u_i\rangle^{(1)}\}$ a druhého $\{|v_i\rangle^{(2)}\}$, je báze Hilbertova prostoru celého systému $\{|u_i\rangle^{(1)}|v_j\rangle^{(2)}\}$ a obecný stav systému v této bázi lze vyjádřit jako

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij}|u_i\rangle^{(1)}|v_j\rangle^{(2)} \tag{45}$$

- Zkoumejme střední hodnotu nějakého operátoru $\hat{O}^{(1)}$, který působí jen na první podsystém (tedy odpovídající fyzikální veličina je veličinou vztahující se k prvnímu podsystému). Dosazením rovnice (45) do vztahu pro střední hodnotu dostaneme

$$\langle\hat{O}^{(1)}\rangle = \langle\psi|\hat{O}^{(1)}|\psi\rangle = \sum_{ijkl} c_{ij}c^*_{kl}\langle v_l|^{(2)}\langle u_k|^{(1)}\hat{O}^{(1)}|u_i\rangle^{(1)}|v_j\rangle^{(2)}$$

což díky ortonormalitě stavů $|v_j\rangle$ můžeme přepsat jako

$$\langle\psi|\hat{O}^{(1)}|\psi\rangle = \sum_{ijk} c_{ij}c^*_{kj}\langle u_k|^{(1)}\hat{O}^{(1)}|u_i\rangle^{(1)} = \sum_{ik}\rho^{(1)}_{ik}O^{(1)}_{ki},$$

kde

$$\rho^{(1)}_{ik} = \sum_j c_{ij}c^*_{kj}, \quad O^{(1)}_{ki} = \langle u_k|^{(1)}\hat{O}^{(1)}|u_i\rangle^{(1)}$$

- Elementy $\rho^{(1)}_{ik}$ tvoří tzv. **matici hustoty** podsystému 1
- Platí tedy $\langle\hat{O}^{(1)}\rangle = \mathrm{Tr}\,(\rho^{(1)}O^{(1)})$, kde Tr značí stopu matice (součet jejích diagonálních elementů)
- Kdybychom ztratili přístup k podsystému 2 (např. by to byla částice, která se někde absorbovala), pak matice hustoty je veškerá informace, která nám o systému zbyla. V takovém případě navíc už nelze popsat stav podsystému 1 vektorem z Hilbertova prostoru, ale úplný popis podává právě matice hustoty; říkáme, že systém je ve **smíšeném stavu**
- Matici hustoty lze definovat samozřejmě i tehdy, když ani žádný systém 2 není; Je-li stav systému popsán stavovým vektorem $|\varphi\rangle = \sum c_i|u_i\rangle$, pak jeho matice hustoty je $\hat{\rho}_{ik} = c^*_i c_k$. V takovém případě je systém v tzv. **čistém stavu**
- Matice hustoty má několik důležitých vlastností:
1) Hermitovost: $\rho_{ki} = \sum_j c_{kj}c^*_{ij} = \sum_j c^*_{ij}c_{kj} = \rho^*_{ik}$
2) Jednotkovou stopu: $\sum_i \rho_{ii} = \sum_{ij} c_{ij}c^*_{ij} = \sum_{ij}|c_{ij}|^2 = 1$ kvůli normování stavu $|\psi\rangle$.
- Lze definovat tzv. operátor hustoty $\hat{\rho}$ takto:

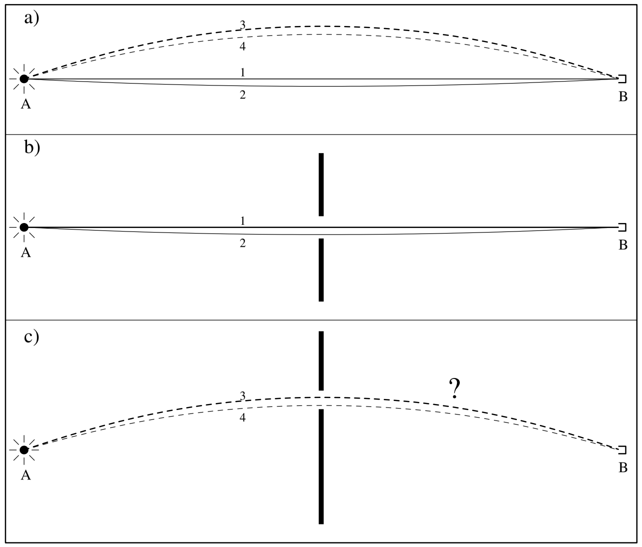
$$\hat{\rho} = \sum_{ik}\rho_{ik}|u_i\rangle\langle u_k|$$

- Elementy ρ_{ik} jsou vlastně maticové elementy operátoru hustoty: $\rho_{ik} = \langle u_i|\hat{\rho}|u_k\rangle$
- Operátor hustoty již nezávisí na zvolené bázi $|u_i\rangle$

- Tranzistor (počítače, internet, mobily, mikroelektronika) a laser pracují na čistě kvantových principech
- Pevné a ultratvrdé materiály, různé plasty a speciální materiály – možno konstruovat díky znalostem o struktuře látek, opět QM
- Hlubší pohled odhalí, že QM je vlasně nezbytná pro fungování světa
- Chemická vazba – bez QM by se např. molekula H_2 s jistou pravděpodobností po čase samovolně rozpadla (viz chaotické chování problému tří těles), díky zákonům kvantové mechaniky drží pevně
- I samy atomy by byly nestabilní, ve velmi krátké době by se zhroutily – elektrony by vyzářily svoji energii ve formě rentgenového a gama záření a po velmi krátké době by spadly na jádro
- Bez Pauliho vylučovacího principu by nebyla taková chemická rozmanitost prvků
- Svět by bez QM musel být vystavěn úplně jinak, než je; nevíme ovšem jak, aby vůbec mohl fungovat

2 Ilustrace QM na příkladu geometrické a vlnové optiky

2.1 Souvislost vlnové a geometrické optiky



- Po které trajektorii půjde světlo na obrázku? (v homogenním prostředí)
- Zjevně po 1, je přímá, po ostatních nepůjde
- V situaci b) bude do B dopadat přibližně tolik světla jako v situaci a). Ovšem v situaci c) nebude do B dopadat téměř žádné světlo

- Pokud ale štěrbinu zúžíme natolik, aby fáze pro trajektorie 3,4 byly podobné, pak najednou začne do detektoru opět světlo dopadat – jde vlastně o difrakci na štěrbině
- Šíření po přímkách funguje jen v geometrické optice, když si jsou zdroj a cíl vzdáleny mnohem víc než λ
- Vlnová optika – Huygensův–Fresnelův princip – světlo se šíří po nejrůznějších trajektoriích, každé z nich přísluší určitá fáze $\varphi = \frac{2\pi l}{\lambda}$ vlny, všechny vlny interferují
- Intenzita výsledné vlny je čtvercem velikosti výsledné amplitudy
- Geometrická optika – limita z vlnové optiky pro $\lambda \ll d$, kde d je charakteristický rozměr dané situace
- V interferujících vlnách se projeví jen ty, které mají tzv. stacionární fázi $\Rightarrow$ Fermatův princip nejmenšího (stacionárního) času
- Fáze pro dráhy 1 a 2 se liší málo, proto vlny jdoucí po těchto (a dalších jim blízkých) drahách zinterferují konstruktivně.
- Fáze pro dráhy 3 a 4 se liší hodně, proto vlny jdoucí po těchto (a dalších jim blízkých) drahách zinterferují destruktivně.
- Pokud ale bude štěrbina velmi úzká, budou fáze podobné a světlo začne dopadat
- To dokazuje, že světlo se šíří po libovolných trajektoriích; čistě po přímkách se šíří jen za určitých okolností

2.2 Souvislost kvantové a klasické mechaniky

- V podobném vztahu jako geometrická a vlnová optika jsou klasická a kvantová mechanika
- Klasická mechanika: částice se pohybuje z místa A do místa B po trajektorii, pro kterou je akce stacionární (Hamiltonův princip nejmenší akce)
- Kvantová mechanika: částice se pohybuje z místa A do místa B po nejrůznějších trajektoriích, každé přísluší fáze
$$\varphi = \frac{S}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\int_{t_A}^{t_B} L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)\,\mathrm{d}t,$$
$\hbar$ je tzv. Planckova konstanta, $\hbar = 1{,}054 \times 10^{-34}$Js, tzv. kvantum účinku (akce)
- Tedy kvantová mechanika říká prapodivnou věc: hodím-li kámen, letí ve skutečnosti po nejrůznějších drahách, ale všechny kromě té, kterou vidím, zinterferují destruktivně
- Je-li typická akce v dané situaci velká ve srovnání s $\hbar$ (tak je tomu vždy je pro kámen, který hodíme), zinterferují konstruktivně jen trajektorie z okolí té, pro kterou je akce stacionární; nám se pak zdá, že kámen letěl jen po této dráze s nejmenší akcí, a dostáváme tak Hamiltonův princip nejmenší akce
- V běžných situacích kolem nás jsou typické akce v řádech tisícin až tisíců Js, tedy o 30 – 40 řádů větší než je Planckova konstanta, a svět se tedy chová „klasicky“

10 Provázanost (entanglement)

- Ryze kvantový jev, nemá v klasické fyzice obdoby
- Zásadní pro kvantovou informaci a komunikaci
- Uvažujme kvantový systém složený ze dvou podsystémů 1 a 2 – například atom vodíku složený z protonu a elektronu, nebo dvě prostorově oddělené částice
- Předpokládejme, že podsystém 1 je v čistém stavu $|\psi_1\rangle$ a podsystém 2 je v čistém stavu $|\psi_2\rangle$
- Stav celého systému je tedy
$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{44}$$
- V tomto případě je stav celého systému tenzorovým součinem stavů obou podsystémů. Říkáme, že stav je **separabilní**, tedy není provázaný (entanglovaný)
- Jestliže stav celého systému nelze vyjádřit ve tvaru součinu (44), pak je stav **provázaný (entanglovaný)**
- Příklad: tzv. Bellovy stavy dvojice částic se spinem 1/2
$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle|z-\rangle + |z-\rangle|z+\rangle), \quad |\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle|z-\rangle - |z-\rangle|z+\rangle)$$
$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle|z+\rangle + |z-\rangle|z-\rangle), \quad |\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle|z+\rangle - |z-\rangle|z-\rangle),$$
kde $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$ jsou stavy spinové polarizace ve směru a proti změru osy z. Tyto stavy mají maximální možné provázání
- Provázané stavy vykazují silnou kvantovou korelaci. Například pokud je systém ve stavu $|\Psi^-\rangle$ a měření spinu první částice dá výsledek 0 (spin směru osy z), pak výsledek měření spinu druhé částice bude 1 a naopak; není to ovšem tak, že by od počátku bylo jisté, jaký spin má která částice. To se rozhodne až v okamžiku měření spinu první částice a tím a dojde i ke kolapsu stavu druhé částice. V určitém smyslu to tedy vypadá, jakoby na sebe částice působily na dálku – měření na jedné silně ovlivní stav druhé, která se mezitím vzdálila třeba o světelný rok
- Ukazuje se však, že toto působení na dálku nelze využít např. ke komunikaci nadsvětelnými rychlostmi, protože jiné zákony kvantové mechaniky nám to překazí
- Nepochopitelnost a zvláštnost kvantové provázanosti a její zdánlivě paradoxní důsledky podnítila A. Einsteina se spolupracovníky k silné kritice kvantové mechaniky [5], která se ovšem ukázala neoprávněnou
- Kvantová provázanost je klíčovým zdrojem pro tzv. kvantové počítání a kvantovou informatiku (quantum computing and information)
- Provázání mohou vykazovat i různé stupně volnosti téhož systému. Například po dopadu kruhově polarizovaného fotonu na nikol (dvojlomný krystal islandského vápence) je foton v superpozici dvou stavů: (1) letí s vertikální polarizací jedním směrem a (2) letí s horizontální polarizací druhým směrem. Jde tedy o provázání polarizačního a polohového stupně volnosti. Podobně je tomu u Stern-Gerlachova experimentu[11].

[11] podrobně je Stern-Gerlachův experiment rozebrán v [2]

- stavový vektor elektronu musí popisovat jak prostorovou, tak spinovou část stavu elektronů
- celkový stav musí být antisymetrický
- toho lze docílit různě: např. udělat spinovou část symetrickou a prostorovou antisymetrickou nebo naopak
- existují tři nezávislé symetrické spinové stavy dvou částic se spinem 1/2:

$$|\Psi_1\rangle = |+\rangle|+\rangle, \quad |\Psi_2\rangle = |-\rangle|-\rangle, \quad |\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle)$$

a jeden antisymetrický:

$$|\Psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle)$$

- trojici symetrických stavů se říká **triplet** a trojici antisymetrických stavů se říká **singlet**.
- ve stavech $|\Psi_{1-3}\rangle$ je celkový spin roven 1, ve stavu $|\Psi_4\rangle$ je roven nule

9.2 Bosony

- Na rozdíl od fermionů mohou být bosony ve stejném stavu a dokonce se dá říci, že k tomu tíhnou
- Zajímavý experiment prokazující tuto vlastnost – viz [4]
- Nerozlišitelnost fotonů byla mnohokrát experimentálně ověřena
- Čím více už je fotonů v nějakém stavu, tím je větší pravděpodobnost, že se k nim přidá další – to je např. princip tzv. **stimulované emise** v laseru
- V laseru – v jednom stavu jsou miliardy, bilióny či ještě mnohem více fotonů
- **Bose-Einsteinova kondenzace** – nastává např. v extrémně zchlazeném oblaku atomů s celočíselným spinem, kdy všechny atomy přejdou do téhož kvantového stavu a vykazují makroskopicky pozorovatelné kvantové chování
- Úplně symetrický bosonový stav vytvoříme podobně jako u fermionů, ale znaménka u všech členů v sumě budou plus:

$$\psi(x_1, \ldots, x_k) = \sum_{(r_1,\ldots,r_k)} \psi_{r_1}(x_1)\psi_{r_2}(x_2)\cdots\psi_{r_k}(x_k), \tag{42}$$

kde $(r_1, \ldots, r_k)$ značí permutaci indexů $1, 2, \ldots, k$ a suma probíhá přes všech $k!$ možných permutací. Např. pro $k = 2$ máme

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{(r_1,r_2)} \psi_{r_1}(x_1)\psi_{r_2}(x_2) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2) \tag{43}$$

- Ve světě atomů je ale situace jiná – zde jsou typické akce srovnatelné s $\hbar$, proto se zde svět chová rozmazaně, kvantově
- Největší objekty, pro které se dosud podařilo vlnové chování přímo pozorovat, jsou halogenfullereny $C_{60}F_{48}$ a některé organické molekuly

3 Popis kvantového systému

3.1 Amplitudy pravděpodobnosti

- V kvantové mechanice každé události u (např. nalezení částice na nějakém místě či tomu, že systém má danou energii) přísluší tzv. **amplituda pravděpodobnosti** $A(u)$
- Pravděpodobnost události u je dána druhou mocninou absolutní hodnoty amplitudy:

$$\boxed{P(u) = |A(u)|^2}$$

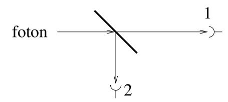
- Může-li událost u nastat více způsoby $u_1, u_2, \ldots, u_n$, které v daném uspořádání nedokážeme rozlišit, pak platí

$$A(u) = A(u_1) + \cdots + A(u_n)$$

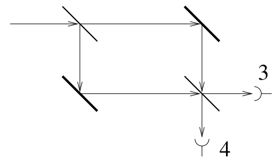
- Např. pro $n = 2$ tedy

$$P(u) = |A(u)|^2 = P(u_1) + P(u_2) + 2\Re\{A(u_1)A^*(u_2)\} \neq P(u_1) + P(u_2)$$

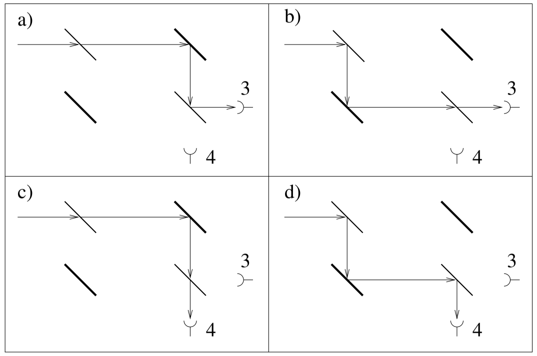
- *Příklad – foton na tzv. děliči svazků*
  - uvažujme foton, který dopadl na postříbřené sklíčko, které právě polovinu světla propouští a polovinu odráží:



  - Dá se ukázat, že amplituda toho, že foton se odrazí (a tedy jej zaregistruje detektor 2), je $i/\sqrt{2}$, a amplituda toho, že projde (a tedy jej zaregistruje detektor 1), je $1/\sqrt{2}$. Proto pravděpodobnost průchodu i odrazu je jedna polovina: $|i/\sqrt{2}|^2 = |1/\sqrt{2}|^2 = 1/2$
  - Dalo by se nějak poznat, jestli je foton po dopadu na sklo skutečně v superpozici toho, že se odrazil a toho, že prošel? Ano! Odstraníme detektory 1 a 2, doplníme dvě obyčejná zrcadla a jedno další polopropustné zrcadlo (tím vlastně experiment doplníme na tzv. Mach-Zehnderův interferometr) a budeme zkoumat, jestli foton dopadne do detektoru 3 nebo 4.



- Pokud je ihned po dopadu fotonu rozhodnuto, jestli se foton odrazí nebo projde, pak je pravděpodobnost dopadu do obou detektorů 3 a 4 stejná a rovná 1/2. Pokud totiž na prvním děliči foton projde, má poloviční pravděpodobnost toho, že dopadne do detektoru 3, a poloviční praděpodobnost, že dopadne do detektoru 4. Pokud se na prvním děliči odrazí, dopadne to stejně, takže výsledkem je stejná šance dopadu do obou detektorů
- Jestliže ale tento experiment provedeme, zjistíme, že foton pokaždé dopadne na detektor 3 a nikdy na 4. Jak se to dá vysvětlit?
- Zjevně není pravda, že hned po dopadu je foton *buď pouze* odražen, *nebo pouze* prošlý. Ve skutečnosti je *v superpozici* obou možností, je tedy jaksi *zároveň* prošlý i odražený
- Pro pochopení toho, co se děje, použijeme kvantovou mechaniku, konkrétně vlastnosti amplitud pravděpodobnosti
- Aby foton dopadl do detektoru 3, má dvě možnosti, jak se interferometrem pohybovat – na obrázku jsou označeny a) a b), podobně pro detektor 4 jsou to možnosti c) a d)



- Jaké jsou amplitudy pravděpodobnosti jednotlivých možností? U možnosti a) foton na prvním děliči projde (amplituda $1/\sqrt{2}$) a na druhém se odrazí (amplituda $\mathrm{i}/\sqrt{2}$), takže celková amplituda je $A_a = \mathrm{i}/2$. U možnosti b) se foton nejprve odrazí a pak projde a celková amplituda je opět $A_b = \mathrm{i}/2$. U možnosti c) foton dvakrát projde, amplituda $A_c = 1/2$, a u možnosti d) se foton dvakrát odrazí, amplituda $A_d = -1/2$
- Teď se podívejme na amplitudy zaregistrování fotonu v detektorech 3 a 4. Pokud má foton dopadnout do detektoru 3, má možnosti a) a b), takže celková amplituda je $A(\text{dopad do 3}) = A_a + A_b = \mathrm{i}$ a pravděpodobnost pak je $P(\text{dopad do 3}) = |A(\text{dopad do 3})|^2 = 1$. Pokud má foton dopadnout do detektoru 4, má možnosti c) a d), takže celková amplituda je $A(\text{dopad do 4}) = A_c + A_d = 0$ a pravděpodobnost pak je $P(\text{dopad do 4}) = |A(\text{dopad do 4})|^2 = 0$.
- Dostali jsme výsledek, který je ve shodě s experimentem: foton *vždy* dopadne do detektoru 3 a *nikdy* do detektoru 4. Vidíme, že jednoduché úvahy s amplitudami pravděpodobnosti nám daly správný výsledek, který nelze získat pomocí klasické fyziky

- *Jiný příklad amplitudy pravděpodobnosti – vlnová funkce*
  - vlnová funkce $\psi(\vec{r})$ – amplituda nalezení částice v daném místě prostoru, čtverec její asolutní hodnoty je hustotou pravděpodobnosti nalezení částice v tomto bodě

- Proto zavádíme tzv. **obsazovací čísla** – pro každý možný stav systému řekneme, kolik je v tomto stavu částic
- Pro náš příklad: $|3_{\psi_1} 2_{\psi_2}\rangle$, pokud máme již možné stavy (módy) definovány a očíslovány, pak jej můžeme značit $|3_{\psi_1} 2_{\psi_2}\rangle \equiv |3\,2\,0\,0\,\ldots\rangle$, obecně $|m_{\psi_1} n_{\psi_2} o_{\psi_3} p_{\psi_4}\ldots\rangle \equiv |m\,n\,o\,p\,\ldots\rangle$
- Obsazovací čísla pro fermionový stav mohou být jen z množiny $\{0,1\}$, pro bosonový stav pak z množiny $\mathbb{N}_0 = \{0,1,2,3,\ldots\}$,

9.1 Fermiony

- Představme si, že máme k fermionů ve stavech $\psi_1(x),\ldots,\psi_k(x)$. Jak jsme viděli, musí být celková vlnová funkce úplně antisymetrická. Nejlépe ji vytvoříme pomocí determinantu

$$\psi(x_1,\ldots,x_k) = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \ldots & \psi_k(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \ldots & \psi_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(x_k) & \psi_2(x_k) & \ldots & \psi_k(x_k) \end{vmatrix} \tag{40}$$

– tzv. **Slaterův determinant** (nenormovaný)

- Právě determinant má totiž tu vlastnost, že při záměně dvou řádků (což je vzhledem ke tvaru rovnice (40) totéž co záměna dvou souřadnic x_i a x_j) změní znaménko.
- Např. pro $k = 2$ máme

$$\psi(x_1,x_2) = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) \end{vmatrix} = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_2(x_1)\psi_1(x_2) \tag{41}$$

- Jak je vidět, nemá smysl stav, ve kterém jsou dva nebo více fermionů ve stejném stavu. Pak by totiž dva sloupce determinantu byly totožné a determinant by tudíž byl nulový.
- Podobně amplituda nalezení dvou fermionů ve stejném místě je nulová, protože pak jsou stejné zase dva řádky
- To je obsahem **Pauliho vylučovacího principu** – dva fermiony nikdy nemohou být ve stejném stavu
- Neplést si prosím Pauliho princip s elektrostatickým odpuzováním elektronů – nemá to s tím nic společného!
- Pauliho vylučovací princip má za následek periodickou strukturu Mendělejevovy tabulky prvků: elektrony, pokud by mohly, by v atomu všechny obsadily nejnižší hladinu a všechny atomy by si byly docela podobné. Kvůli Pauliho principu to však nemohou a proto musí obsazovat stále vyšší hladiny. To je důvodem k chemické rozmanitosti přírody a v posledku i možnosti existence života
- Základní stav skupiny neinteragujících fermionů – jeden fermion je v jednočásticovém základním stavu, další v prvním excitovaném atd.
- **Fermiho energie** – až po ni jsou při nulové teplotě vyplněny stavy
- *Příklad – stav dvojice elektronů včetně započtení spinu*

- Kvantové částice stejného druhu tedy nelze v pravém smyslu od sebe odlišit. Říkáme proto, že jsou **nerozlišitelné**
- Rozptylový experiment – dva elektrony letí proti sobě, odchýlí se a jdou detegovány (na obrázku – elektrony vyletují z bodů 1 a 2 a detektory jsou v bodech a, b)
- Použijeme obecné pravidlo – amplituda detekce elektronů je součtem amplitud obou možností (ale z jistých důvodů jednu možnost musíme vzít se záporným znaménkem):

$$A(1,2 \to a,b) = A(1 \to a, 2 \to b) - A(1 \to b, 2 \to a)$$

- Pokud budou detektory a, b velmi blízko u sebe, bude platit $A(1 \to a, 2 \to b) = A(1 \to b, 2 \to a)$, proto $A(1,2 \to a,b) = 0$ a pravděpodobnost takové detekce $= 0$; dva elektrony tedy nemůžeme detegovat ve stejném místě. Pro rozlišitelné částice bychom ovšem dostali nenulovou pravděpodobnost
- Jestliže máme stav s vlnovou funkcí $\psi(x_1, \ldots, x_n)$ nějakých n stejných částic (např. elektronů) a vyměníme dvě částice i, j (pro $\psi(x_1, \ldots, x_n)$ to odpovídá záměně $x_i \leftrightarrow x_j$), měli bychom dostat fyzikálně stejný stav. Ovšem jak známo, fyzikálně stejné stavy se mohou lišit fází:

$$\psi(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots, x_n) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n) \tag{36}$$

- Provedeme-li znovu stejnou záměnu, dostaneme ještě jednou stejný fázový faktor a vrátíme se k původnímu stavu:

$$\psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\psi(x_1, \ldots, x_j \ldots, x_i \ldots, x_i) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}\psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n) \tag{37}$$

- Vidíme, že $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi} = 1$, proto musí platit $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = \pm 1$
- Ukazuje se, že pro jeden druh částic nastává vždy stále stejná možnost
- Částice s $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = 1$ se nazývají Boseho částice (zkráceně bosony; příkladem je foton, atom vodíku, π mezon) a částice s $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = -1$ pak Fermiho částice (zkráceně fermiony; příklady – elektrony, nukleony, neutrino)
- Z kvantové teorie pole plyne, že částice se poločíselným spinem jsou fermiony a částice s celočíselným spinem jsou bosony
- Vidíme tedy, že pro každý stav n bosonů platí

$$\psi(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots, x_n) = \psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n), \tag{38}$$

tedy vlnová funkce je úplně symetrická vzhledem k záměně dvou částic

- Naopak pro každý stav n fermionů platí

$$\psi(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots, x_n) = -\psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n), \tag{39}$$

tedy vlnová funkce je úplně antisymetrická vzhledem k záměně dvou částic

- Máme-li nyní například pět bosonů a tři z nich jsou ve stavu ψ_1 a dva ve stavu ψ_2, nemá smysl říkat, které z nich jsou ve stavu ψ_1 a které ve stavu ψ_2. Důležitý je jen počet částic v daném stavu

  – pravděpodobnost nalezení částice v malém objemu $\mathrm{d}V$ kolem bodu s průvodičem $\vec{r}$ je pak

$$\mathrm{d}P = |\psi(\vec{r})|^2 \,\mathrm{d}V$$

  – Podmínka normování – částice musí někde být:

$$\int_{\text{prostor}} \mathrm{d}P = \int_{\text{prostor}} |\psi(\vec{r})|^2 \,\mathrm{d}V = 1,$$

  v jedné dimenzi (například částice ve vhodné struktuře v polovodiči)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = 1$$

3.2 Kvantové stavy a operátory

- Kvantový systém – určitý objekt nebo soubor objektů, které popisujeme pomocí kvantové teorie. Například elektron v atomu nebo ve volném prostoru, atom, molekula, foton, elektromagnetické pole v optickém vlákně, spin elektronu (vnitřní moment hybnosti)
- Každý možný stav kvantového systému je popsán vektorem $\boldsymbol{u}$ z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$
- Jde o komplexní vektorový prostor se skalárním součinem $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$, který má tyto vlastnosti:

$$(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})^*$$
$$(a\boldsymbol{u}, b\boldsymbol{v}) = a^* b(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}), \quad a, b \in \mathbb{C}$$

Kromě toho je H.P. úplný (tj. obsahuje limity všech Cauchyovských posloupností)

- Příklad 1 – Hilbertův prostor pro tzv. **dvojhladinový systém**, např. spin elektronu nebo polarizaci fotonu, je prostor dvojic komplexních čísel $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$
- H.P. pro částici na přímce – prostor vlnových funkcí $\psi(x)$
- Vektory z Hilbertova prostoru značíme často $|u\rangle$, skalární součin značíme $\langle u|v\rangle$ (tzv. Diracova symbolika)
- Hilbertův prostor může mít konečný či nekonečný počet dimenzí. Příklad – H.P. dvojhladinového systému má dimenzi 2, H.P. částice na přímce – nekonečný počet dimenzí
- Dimenze H.P. je dána počtem různých fyzikálně rozlišitelných kvantových stavů
- **Báze** H.P. – soubor lineárně nezávislých vektorů $|e_k\rangle$, pomocí nichž lze vyjádřit libovolný vektor $|u\rangle \in \mathcal{H}$
- Pro konečnou či spočetnou dimenzi je výhodné je reprezentovat vektory v bázi:

$$|u\rangle = \sum_k u_k |e_k\rangle$$

- Je-li báze $\{|e_k\rangle\}$ ortonormální, tj. $\langle e_i|e_k\rangle = \delta_{ik}$, pak lze skalární součin jednoduše vyjádřit pomocí složek vektorů:
$$\langle u|v\rangle = \sum_{ik} u_i^* v_k \langle e_i|e_k\rangle = \sum_{ik} u_i^* v_k \delta_{ik} = \sum_i u_i^* v_i$$
(využili jsme vlastnost skalárního součinu vzhledem k násobení prvního a druhého činitele komplexním číslem)

- Každý vektor $|u\rangle$ je jednoznačně určen souborem čísel $u_i = \langle e_i|u\rangle$

- Vektory $|u\rangle, |v\rangle$ tedy můžeme reprezentovat pomocí matic obsahujících jejich složky:
$$|u\rangle : \quad \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \qquad |v\rangle : \quad \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

- Skalární součin se pak dá zapsat jako
$$\langle u|v\rangle = (u_1^*, u_2^*, \ldots, u_n^*) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

- Můžeme si tedy představit, že $\langle u|$ je objekt sám o sobě, kterému v maticové reprezentaci odpovídá řádkový vektor se složkami komplexně sdruženými ke složkám vektoru $|u\rangle$. Skalární součin je pak dán prostým násobením matic

- Matici $(B^*)^{\mathrm{T}}$, kterou získáme z matice B transpozicí společně s komplexním sdružením, nazýváme maticí adjungovanou (hermitovsky sdruženou) s maticí B a značíme $B^\dagger$

- Tedy $|u\rangle^\dagger = \langle u|$

- Pro vyjadřování pravděpodobností je třeba, aby byl stav **normován**, tj. aby vektor stavu měl jednotkovou délku: $\langle u|u\rangle = 1$, v našem příkladu $|u_1|^2 + |u_2|^2 + \cdots + |u_n|^2 = 1$

- Skalární součin má přímý fyzikální význam:

  Je-li systém ve stavu $|\psi\rangle$, pak amplituda pravděpodobnosti nalezení systému ve stavu $|\varphi\rangle$ je rovna $\langle\varphi|\psi\rangle$ a pravděpodobnost je rovna $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2$

- To znamená, že pokud provádíme na systému ve stavu $|\psi\rangle$ měření, které umožní rozhodnout, zda je systém ve stavu $|\varphi\rangle$, bude výsledkem měření odpověď „ano“ s pravděpodobností $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2$

- Náš příklad s fotonem – označme stav fotonu po dopadu na dělič svazků jako $|\psi\rangle$, dále stav fotonu, který projde, jako $|p\rangle$, a stav fotonu, který se odrazí, jako $|o\rangle$. Viděli jsme, že foton je po dopadu v superpozici obou možností, tedy $|\psi\rangle = (|p\rangle + |o\rangle)/\sqrt{2}$ a platí $\langle o|\psi\rangle = \langle p|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}$

- *Příklad:* nechť je systém ve stavu $|u\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{1/3} \\ (1+\mathrm{i})/\sqrt{3} \end{pmatrix}$. Jaká je amplituda pravděpodobnosti a pravděpodobnost, že jej najdeme ve stavu $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, resp. $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$?

– Představme si, že bychom neuměli najít základní stav analyticky a že bychom se z nějakého důvodu domnívali, že základní stav by mohl mít tvar
$$\psi_a(x) = \sqrt{a}\,\mathrm{e}^{-a|x|}$$
(lze se přesvědčit, že tato vlnová funkce je správně normovaná)

– Hledáme nyní takové a, pro které $\psi_a(x)$ nejpřesněji aproximuje vlnovou funkci skutečného základního stavu

– Spočítáme tedy $E(a) = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$:
$$E(a) = \int_{\mathbb{R}} \psi_a^*(x)\hat{H}\psi_a(x)\,\mathrm{d}x = \frac{a^2\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{4a^2}$$

– Derivováním $E(a)$ podle a pak dostaneme podmínku pro a:
$$\frac{\mathrm{d}E(a)}{\mathrm{d}a} = \frac{a\hbar^2}{m} - \frac{m\omega^2}{2a^3} = 0 \quad\Rightarrow\quad a_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\sqrt{2}\,\hbar}}$$

– Po dosazení a_0 do energie dostaneme
$$E(a_0) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}\,E_0,$$
tedy energie nám vyšla docela blízká přesné energii základního stavu

– Jak lze spočítat, neurčitost x je pak
$$\Delta x_{\text{var.}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}\,m\omega}} = \sqrt[4]{2}\,\Delta x_{\text{skut.}},$$
kde $(\Delta x)_{\text{skut.}} = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ je neurčitost ve *skutečném* základním stavu; tedy neurčitost polohy nám vyšla jen nepatrně větší než je skutečná neurčitost v základním stavu

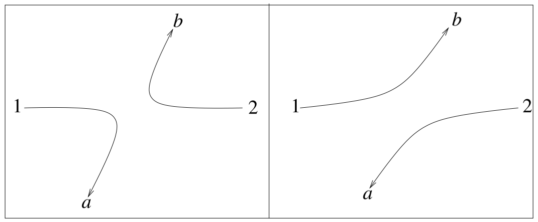
– Výsledek tedy není vůbec tak špatný, a to jsme měli jen jeden paramter a; s více parametry by to mohlo být ještě lepší

9 Identické částice

- Zajímavá otázka: lze od sebe odlišit dvě částice stejného druhu, např. elektrony?

- Ještě zajímavější odpověď: nelze, a to ani v principu

- Elektrony jsou natolik stejné, že pokud jsme měli v čase $t = 0$ dva elektrony (označíme je 1 a 2) a v čase $t = T$ máme dva elektrony (a a b) – například při pružné srážce dvou elektronů, viz obr. – nemůžeme s jistotou říci, že původní elektron 1 je teď a a 2 je teď b nebo naopak. Ve skutečnosti nastanou obě možnosti jakoby „naráz“ – v nám známé kvantové superpozici



– vypočítejme střední hodnotu hybnosti v tomto stavu:

$$\langle p\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,\langle\psi(\Delta t)|\frac{\hat a-\hat a^\dagger}{\mathrm{i}}|\psi(\Delta t)\rangle = \lambda$$

– Jaký je přírůstek hybnosti oproti původnímu (základnímu) stavu? Je známo, že v základním stavu (a dokonce v každém stacionárním stavu) harmonického oscilátoru je střední hodnota hybnosti nulová, takže přírůstek je roven λ, tj. impulzu síly, která na systém působila. Dostali jsme tedy zajímavý výsledek: síla působící na systém vyvolala změnu střední hodnoty hybnosti stejnou, jako by vyvolala u klasického systému.

8.2 Variační metoda

- Používá se pro nalezení základního stavu (popř. prvního excitovaného stavu) systému, u něhož tento stav neumíme nalézt analyticky ani pomocí poruchové teorie
- Nesmírně důležitá v chemii při výpočtech konfigurací molekul; dává základní stavy, od nichž se odvíjí chemické vlastnosti dané látky
- Metoda je založena na nerovnosti

$$\boxed{\langle\psi|\hat H|\psi\rangle \geq E_0,}$$

kde E_0 je energie základního stavu a $|\psi\rangle$ je libovolný normovaný stav. Tuto nerovnost není těžké dokázat, jestliže rozložíme $|\psi\rangle$ do vlastních stavů $|u_n\rangle$ Hamiltoniánu: $|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle$. Pak

$$\langle\psi|\hat H|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle u_m|\hat H|u_n\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0. \qquad (35)$$

Zde jsme využili toho, že stav $|\psi\rangle$ je normován, tedy že $\sum_n |c_n|^2 = 1$, a toho, že $E_n \geq E_0$, neboť E_0 je nejnižší možná energie systému.

- Minimalizací $\langle\psi|\hat H|\psi\rangle$ přes všechny normované stavy tedy lze nalézt základní stav ψ_0, pro který $\langle\psi_0|\hat H|\psi_0\rangle = E_0$
- Prakticky to provádíme tak, že nehledáme ψ_0 v celém Hilbertově prostoru stavů systému, ale jen v nějaké jeho podmnožině – například předpokládáme určitý tvar ψ_0, v němž ponecháme jeden nebo několik volných parametrů
- Čím více partametrů, tím přesnější aproximaci základního stavu dostaneme. Výpočetní výkon moderních počítačů umožňuje mít mnoho parametrů, proto jsou nalezené vlnové funkce téměř úplně přesné
- Variační metodou lze hledat i první a další excitované stavy (pokud již známe základní), ale čím vyšší stav, tím je hledání obtížnější
- *Příklad – hledání přibližného základního stavu harmonického oscilátoru*
  – Máme harmonický oscilátor s hamiltoniánem

$$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat x^2,$$

Odpověď: amplitudy jsou $(1,0)\begin{pmatrix}\sqrt{1/3}\\(1+\mathrm{i})/\sqrt{3}\end{pmatrix} = \sqrt{1/3}$, resp. $(0,1)\begin{pmatrix}\sqrt{1/3}\\(1+\mathrm{i})/\sqrt{3}\end{pmatrix} = (1+\mathrm{i})/\sqrt{3}$. Pravděpodobnosti jsou čtverce abs. hodnot amplitud, tedy 1/3 a 2/3.

- Každé fyzikální veličině A (energii, poloze, hybnosti, momentu hybnosti atd.) přísluší **lineární zobrazení (operátor)** $\hat A$ na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$.
- Operátor je lineární, což znamená, že pro každé dva vektory $|u\rangle$, $|v\rangle$ a komplexní číslo c platí

$$\hat A(|u\rangle + |v\rangle) = \hat A|u\rangle + \hat A|v\rangle, \qquad \hat A(c|u\rangle) = c\hat A|u\rangle$$

- Výsledek působení operátoru $\hat A$ na bázový stav $|e_k\rangle$ lze vyjádřit opět pomocí bázových stavů:

$$\hat A|e_k\rangle = \sum_i A_{ik}|e_i\rangle$$

- Působení operátoru $\hat A$ na stav $|u\rangle$ je pak

$$\hat A|u\rangle = \hat A\sum_k u_k|e_k\rangle = \sum_k u_k\hat A|e_k\rangle = \sum_{ik} u_k A_{ik}|e_i\rangle = \sum_{ik} A_{ik}u_k|e_i\rangle$$

tj. zatímco vektor $|u\rangle$ je reprezentován maticí se složkami u_i, je vektor $\hat A|u\rangle$ reprezentován maticí se složkami $\sum_k A_{ik}u_k$; matici reprezentující vektor $\hat A|u\rangle$ tedy dostaneme z matice reprezentující vektor $|u\rangle$ násobením maticí A_{ik}, která reprezentuje operátor $\hat A$

- Klíčový je význam **vlastní hodnoty** operátoru:
  veličina A může nabývat jen těch hodnot, které jsou vlastními hodnotami operátoru $\hat A$
- Ve vlastním stavu $|\alpha\rangle$ s vlastní hodnotou a (tedy $\hat A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$) má veličina A přesnou hodnotu a.
- Existují i veličiny, které mají spojité spektrum vlastních hodnot (např. souřadnice). Tyto veličiny mohou nabývat libovolné hodnoty (popř. libovolné hodnoty z nějakého intervalu)
- Pravděpodobnost naměření hodnoty a_i je dána

$$P(a_i) = |(\alpha_i,\psi)|^2 = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2,$$

ovšem vektor α_i musí být normovaný: $\langle\alpha_i|\alpha_i\rangle = 1$

- Jestliže vektory α_i, α_j přísluší různým vlastním hodnotám $a_i \neq a_j$, pak jsou tyto vektory ortogonální, tj. $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = 0$.

Proč? Protože pokud je systém ve stavu α_i a veličina A má tedy danou hodnotu a_i, nemůže mít A současně hodnotu jinou, tedy a_j. Proto dle předchozího bodu $|\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle|^2 = 0$

- Kromě toho musejí být vlastní hodnoty reálné. Tyto dvě vlastnosti splňují tzv. Hermitovské operátory. Hermitovský operátor je takový, pro nějž platí

$$\langle u|\hat Av\rangle = \langle\hat Au|v\rangle$$

- Jakou maticí reprezentujeme stav $\langle \hat{A}u|$? Zjevně maticí $\langle u|A^\dagger$
- Proto je hermitovský operátor v maticové reprezentaci dán tzv. samosdruženou maticí, pro kterou platí $A = A^\dagger = (A^*)^\mathrm{T}$ a pro složky tedy $A_{ik} = A^*_{ki}$
- Veličina A musí mít v každém stavu nějakou hodnotu. Tj. nemohu mít stav, v němž bych při měření veličiny A dostal odpověď, že hodnota neexistuje. Proto je možno každý stav systému rozložit do vlastních stavů veličiny A, tedy tyto stavy tvoří bázi $\{|\alpha_i\rangle\}$ Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$
- Vektory báze navíc mohu normovat, aby $(\alpha_i, \alpha_j) = \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$. Pak mohu snadno nalézt koeficienty vektoru $|u\rangle$ v bázi $\{|\alpha_i\rangle\}$:

$$\langle\alpha_j|u\rangle = \sum_i c_i\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \sum_i c_i\delta_{ij} = c_j,$$

proto

$$|u\rangle = \sum_i\langle\alpha_i|u\rangle\,|\alpha_i\rangle = \sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|u\rangle \tag{1}$$

- Na sumu $\sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ lze pohlížet jako na jednotkový operátor (identitu) – rovnice (1) je vlastně rozklad jednotkového operátoru do projekčních operátorů na jednotlivé vlastní stavy operátoru $\hat{A}$
- Máme-li rozklad (1) pro dané u, je působení operátoru $\hat{A}$ na stav u snadno zjistitelné:

$$\hat{A}|u\rangle = \sum_i \hat{A}|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|u\rangle = \sum_i a_i|\alpha_i\rangle\,\langle\alpha_i|u\rangle$$

a na sumu $\sum_i a_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = \sum_i |\alpha_i\rangle\, a_i\,\langle\alpha_i|$ lze pohlížet jako na vyjádření operátoru $\hat{A}$; jde o tzv. **spektrální reprezentaci** operátoru $\hat{A}$

- Po vynásobení rovnice $\langle u|$ zleva dostaneme

$$\langle u|\hat{A}|u\rangle = \sum_i a_i\langle u|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|u\rangle = \sum_i a_i|\langle\alpha_i|u\rangle|^2$$

- Veličina $|\langle\alpha_i|u\rangle|^2$ udává pravděpodobnost $P(a_i)$ nalezení systému ve stavu α_i. Proto $\langle u|\hat{A}|u\rangle$ vyjadřuje **střední hodnotu** veličiny A ve stavu u:

$$\boxed{\langle A\rangle = \sum_i a_i P(a_i) = \sum_i a_i|\langle\alpha_i|u\rangle|^2 = \langle u|\hat{A}|u\rangle}$$

- Střední hodnota operátoru má přímý fyzikální význam: budeme-li opakovaně měřit veličinu A ve stavu $|u\rangle$, budeme dostávat různé (náhodné) hodnoty; hodnotu a_i naměříme s pravděpodobností $|\langle\alpha_i|u\rangle|^2$, proto bude průměr naměřených hodnot konvergovat ke střední hodnotě $\langle u|A|u\rangle$
- Uvedené poznatky si ilustrujme na příkladu operátoru $\hat{A}$ na Hilbertově prostoru dimenze 2 reprezentovaného komplexní maticí 2×2:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

  - Rovnice (31) vyjadřuje tzv. **Fermiho zlaté pravidlo** pro pravděpodobnost přechodu pod vlivem periodické poruchy
  - Spočítáme nyní pravděpodobnost, že systém za čas t přejde *někam* do okolí hladiny $E_m + \hbar\omega$, ale nezajímá nás, kam přesně
  - K tomu budeme integrovat pravděpodobnost $P_\nu(t)$ přes ν v intervalu obsahujícím takové ν_0, aby $E_{\nu_0} = E_k + \hbar\omega$. Za index ν nyní bereme přímo energii E_ν:

$$P(t) = \int P_\nu(t) = \frac{2\pi|F_{\nu k}|^2\,t}{\hbar}\,\delta(E_\nu - E_k - \hbar\omega)\,\mathrm{d}\nu = \frac{2\pi|F_{E_k+\hbar\omega,E_k}|^2\,t}{\hbar} \tag{32}$$

  Zde jsme kvůli jasnosti zavedli označení $F_{E_k+\hbar\omega,E_k}$ pro maticový element operátoru $\hat{F}$ mezi stavy s energiemi $E_k + \hbar\omega$ a E_k (původní označení bylo $F_{\nu k}$).
  - Rovnice (32) nám říká, že se pravděpodobnost přechodu s časem neustále lineárně zvyšuje. Po určitém čase t by tedy měla jistě převýšit jedničku, což je ovšem nesmysl. Jak to tedy je?
  - *Skutečná* pravděpodobnost přechodu jistě nikdy nebude větší než jedna. Problém s formulí (32) je v tom, že jde jen o první aproximaci teorie poruch a nejedná se tedy o přesnou celkovou pravděpodobnost. Ve skutečnosti je rovnice (32) dobrou aproximací tehdy, jestliže jí vyjádřená celková pravděpodobnost je mnohem menší než 1. Jakmile se $P(t)$ začne blížit k jedné, musíme vzít další členy teorie poruch, které nám pravděpodobnost zase „srazí".

- *Příklad – porucha ve formě předaného impulzu síly pro harmonický oscilátor*
  - uvažujme harmonický oscilátor s hamiltoniánem (8) a poruchu ve formě potenciálu $-\lambda\hat{x}/\Delta t$, která začne působit v okamžiku $t = 0$ a přestane v okamžiku $t = \Delta t$, přičemž $\Delta t \ll 1/\omega$
  - protože je poruchová potenciální energie úměrná souřadnici, jde o homogenní silové pole, tedy vlastně o konstantní sílu $F = \lambda/\Delta t$; tato síla na částici působí po dobu Δt, takže bychom intuitivně mohli očekávat, že jí předá hybnost $F\Delta t = \lambda$
  - předpokládejme, že je systém v čase $t = 0$ v základním stavu $|0\rangle$; pak dosazením do rovnice (25) dostaneme koeficient $c_m^{(1)}(t)$ v okamžiku ukončení působení síly jako

$$c_m^{(1)}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{\Delta t} G_{m0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_0)t'/\hbar}\,\mathrm{d}t' = \frac{\mathrm{i}\lambda}{\hbar\Delta t}\,\langle m|\hat{x}|0\rangle\int_0^{\Delta t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega m t'}\,\mathrm{d}t'$$

  - Protože čas Δt je mnohem kratší než $1/\omega$, je exponent po celou integrační dobu s dobrou přesností roven jedné a proto

$$c_m^{(1)}(\Delta t) = \frac{\mathrm{i}\lambda}{\hbar}\langle m|\hat{x}|0\rangle = \frac{\mathrm{i}\lambda}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle m|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|0\rangle = \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\langle m|1\rangle = \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\delta_{1m}, \tag{33}$$

  kde jsme využili vyjádření operátoru souřadnice pomocí kreačního a anihilačního operátoru $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$.
  - V okamžiku Δt tedy bude stav systému přibližně

$$|\psi(\Delta t)\rangle = |0\rangle + \sum_m c_m^{(1)}(\Delta t)|m\rangle = |0\rangle + \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,|1\rangle \tag{34}$$

- poruchu budeme předpokládat ve tvaru $\hat{G} = \hat{F}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \hat{F}^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$, kde $\hat{F}$ je na čase nezávislý operátor. Potřebujeme oba členy, aby byl výsledný operátor $\hat{G}$ hermitovský
- Integrál (25) lze snadno spočítat:

$$\begin{aligned} c_m^{(1)}(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} F_{mk} \int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}-\omega)t'}\,\mathrm{d}t' - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} F_{km}^* \int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}+\omega)t'}\,\mathrm{d}t' \\ &= \frac{F_{mk}\left[1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}-\omega)t}\right]}{\hbar(\omega_{mk}-\omega)} + \frac{F_{km}^*\left[1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}+\omega)t}\right]}{\hbar(\omega_{mk}+\omega)} \end{aligned} \tag{26}$$

- Koeficient osciluje s frekvencí odpovídající „rozladění“ – Rabiho oscilace
- Tento výraz pro $c_m^{(1)}(t)$ lze samozřejmě použít, jen je-li $\omega_{mk} \pm \omega \neq 0$, tedy $E_m - E_k \neq \pm\hbar\omega$; pro $E_m - E_k = \pm\hbar\omega$ ale lze výrazy dodefinovat jejich limitami

$$\begin{aligned} \lim_{\omega\to\omega_{mk}} \frac{F_{mk}\left[1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}-\omega)t}\right]}{\hbar(\omega_{mk}-\omega)} &= -\frac{\mathrm{i}F_{mk}}{\hbar}\,t \\ \lim_{\omega\to-\omega_{mk}} \frac{F_{km}^*\left[1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}+\omega)t}\right]}{\hbar(\omega_{mk}+\omega)} &= -\frac{\mathrm{i}F_{km}^*}{\hbar}\,t \end{aligned} \tag{27}$$

- Pravděpodobnost přechodu na hladinu m, kde $m \neq k$, spočteme snadno jako $P_m(t) = |c_m(t)|^2 = |c_m^{(1)}(t)|^2$
- Uvažujme nyní situaci, kdy energiová hladina E_k, na které byl systém původně, leží v diskrétním spektru, zatímco energie $E_k + \hbar\omega$ leží již ve spojitém spektru
- Budeme nyní hladiny ve spojitém spektru indexovat spojitou proměnnou ν na rozdíl od diskrétního indexu m
- Navíc ve výrazu (26) pro c_m zanedbáme druhý člen proti prvnímu, protože $E_\nu - E_k + \hbar\omega$ je velké proti $E_\nu - E_k - \hbar\omega$. Tak pro pravděpodobnost přechodu $P_\nu(t)$ dostaneme

$$P_\nu(t) = |c_\nu^{(1)}(t)|^2 = |F_{\nu k}|^2 \frac{|1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{\nu k}-\omega)t}|^2}{\hbar^2(\omega_{\nu k}-\omega)^2} = 4|F_{\nu k}|^2 \frac{\sin^2\frac{(\omega_{\nu k}-\omega)t}{2}}{\hbar^2(\omega_{\nu k}-\omega)^2} \tag{28}$$

- Zkoumejme nyní tento výraz pro velká t. Jak se lze přesvědčit, platí

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha), \tag{29}$$

- Pomocí rovnice (29) můžeme pro velká t přepsat vztah (28) jako

$$P_\nu(t) = \frac{\pi|F_{\nu k}|^2\,t}{\hbar^2}\,\delta\left(\frac{\omega_{\nu k}-\omega}{2}\right). \tag{30}$$

S využitím vlastnosti δ-funkce $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ a toho, že $\hbar\omega_{\nu k} = E_\nu - E_k$, dostaneme

$$P_\nu(t) = \frac{2\pi|F_{\nu k}|^2\,t}{\hbar}\,\delta(E_\nu - E_k - \hbar\omega) \tag{31}$$

- Pro dlouhé časy je tedy pravděpodobnost přechodu nenulová pouze do stavu, který leží energeticky přesně o $\hbar\omega$ výše než energie, kterou měl systém původně. Tato skutečnost je známa spíše obráceně – při přechodu mezi dvěma energiovými hladinami lišícími se o energii ΔE září systém na frekvenci $\omega = \Delta E/\hbar$

- Vlastní hodnoty operátoru $\hat{A}$:

$$\begin{vmatrix} 0-\lambda & 1 \\ 1 & 0-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad\Rightarrow\quad \lambda_{1,2} \pm 1$$

- Vlastní vektory operátoru $\hat{A}$ jsou $|\alpha_1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a $|\alpha_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$, protože

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = -1\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

z čehož plyne, že ve stavu $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ je hodnota veličiny A rovna 1, ve stavu $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ pak -1. Jiných hodnot nemůže veličina nabývat

- Vlastní vektory operátoru $\hat{A}$, tj. $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$, tvoří bázi Hilbertova prostoru $\mathbb{C}^2$
- Rozklad jednotky pomocí vlastních vektorů:

$$\begin{aligned} \hat{1} = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}) + \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}(1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}) \\ &= \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- Střední hodnota operátoru $\hat{A}$ v obecném stavu $\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$:

$$\langle u|\hat{A}|u\rangle = (u_1^*, u_2^*)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = u_1^* u_2 + u_2^* u_1$$

- Součinem operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ rozumíme takový operátor $\hat{C} \equiv \hat{A}\hat{B}$, že platí $\hat{C}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$ pro všechna $|\psi\rangle$
- Jsou-li operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ reprezentovány maticemi, pak operátor $\hat{A}\hat{B}$ je reprezentován součinem obou matic
- Pro dvojici operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ definujeme jejich **komutátor** jako $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$; pokud je $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, tj. $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, říkáme, že operátory **komutují**; obecné operátory nekomutují podobně jako matice

3.3 Spin 1/2 a Pauliho spinové matice

- Spin je vnitřní moment hybnosti částice, která nemá analogii v klasické mechanice. Někdy si jej představujeme jako rotaci částice kolem její osy, ale tato představa může být zavádějící
- Budeme se nyní zabývat částicí se spinem 1/2, např. elektronem; Hilbertův prostor takového spinu má dimenzi 2 a operátory na něm lze tedy reprezentovat maticemi 2×2
- Zvolíme si souřadnicovou soustavu x, y, z libovolným, ale pevným způsobem. Po danou osu o lze definovat veličinu S_o, „průmět spinu do osy o“

- Ukazuje se, že ať je osa o vybrána jakkoli, může průmět S_o nabývat jen dvou možných hodnot, a to $\pm\hbar/2$; tedy odpovídající operátor $\hat{S}_o$ má tyto dvě vlastní hodnoty
- Zvolme za osu o osu z a jako bázi Hilbertova protoru vezměme vlastní stavy operátoru $\hat{S}_z$. V této bázi lze vyjádřit operátory průměty spinu do tří souřadnicových os:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Matice v rovnici (2) (tedy matice bez počátečního $\hbar/2$) jsou tzv. **Pauliho spinové matice** a značí se $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

- Vlastní stavy operátoru $\hat{S}_z$ jsou $|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ a $|z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, protože bázi, ve které vše počítáme, jsme zvolili právě jako bázi vlastních stavů $\hat{S}_z$; tyto stavy někdy značíme prostě $|+\rangle, |-\rangle$ nebo $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$
- Operátor $\hat{A}$ z předchozího příkladu je právě $\hat{\sigma}_x$, takže hned vidíme, že operátor průmětu spinu do osy x má vlastní stavy $|x+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a $|x-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a vlastní hodnoty $\pm\hbar/2$
- Podobně vlastní stavy operátoru $\hat{S}_y$ jsou $|y+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a $|y-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -\mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ a vlastní hodnoty jsou opět $\pm\hbar/2$

4 Časový vývoj a Schrödingerova rovnice

- Dosud jsme se nezabývali časovým vývojem kvantového systému, ale jen jeho stavem v daném okamžiku
- Pro popis časového vývoje kvantového systému slouží tzv. Schrödingerova rovnice, fundamentální rovnice QM
- Schrödingerova rovnice má podobný význam jako Hamiltonovy rovnice v klasické mechanice, dá se říci, že je jejich přímou analogií
- Ve stavovém vektoru kvantového systému je ukryta veškerá informace o systému, proto stav systému v dané chvíli určuje i všechny pozdější stavy
- Při znalosti počátečního stavu systému a schopnosti vyřešit Schrödingerovu rovnici můžeme v principu předpovědět budoucnost systému na libovolně dlouho dopředu. V tomto smyslu je kvantová mechanika deterministická.
- Musí platit

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = O(\psi),$$

kde O je nějaký předpis, který přiřazuje stavu ψ nějaký jiný stav $O(\psi)$ z téhož Hilbertova prostoru

- Ukazuje se, že tento předpis je lineární a $O(\psi)$ je tedy akcí nějakého lineárního operátoru $\hat{O}$ na ψ, $O(\psi) = \hat{O}\psi$

- Rozložme vlnovou funkci $\psi(t)$ v bázi těchto stavů $\psi_n(t)$:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(t)$$

- Ze Schrödingerovy rovnice $\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}(t) = \hat{H}\psi(t)$ dostaneme

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n \psi_n \frac{\mathrm{d}c_n}{\mathrm{d}t} = \lambda\sum_n c_n\hat{G}(t)\psi_n \tag{22}$$

- Skalárním vynásobením se stavem $\psi_m(t)$ pak

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} = \lambda\sum_n \langle\psi_m(t)|\hat{G}(t)|\psi_n(t)\rangle\, c_n = \lambda\sum_n G_{mn}(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_n)t/\hbar}\, c_n, \tag{23}$$

kde $G_{mn}(t) = \langle\psi_m(0)|\hat{G}(t)|\psi_n(0)\rangle$ je maticový element poruchy $\hat{G}(t)$

- Předpokládejme, že se systém původně (v čase $t = 0$) nacházel ve stavu ψ_k. Jaký bude jeho přibližný časový vývoj?
- Napišme $c_n(t) = \delta_{nk} + \lambda c_n^{(1)}(t)$, přičemž $c_n^{(1)}(0) = 0$ (neboť v čase $t = 0$ je systém ve stavu ψ_k) Dosazením do (23) a porovnáním členů s první mocninou λ dostáváme

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}c_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = G_{mk}(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_k)t/\hbar} \tag{24}$$

– toto je důležitý výsledek: je vidět, že systém bude přecházet ze stavu ψ_k do stavu ψ_m tím rychleji, čím větší je maticový element $\langle\psi_m(t)|\hat{G}(t)|\psi_k(t)\rangle$; pokud bude tento element nulový, nebude systém v prvním přiblížení přecházet vůbec[10]

- Tuto rovnici můžeme integrovat:

$$c_m^{(1)}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t G_{mk}(t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_k)t'/\hbar}\,\mathrm{d}t' \tag{25}$$

Integrál jsme vzali jako určitý s dolní mezí rovnou nule, čímž automaticky započítáváme počáteční podmínku $c_m^{(1)}(0) = 0$

- Kdy bude tento koeficient významně růst s časem (a tedy systém přecházet na m-tou hladinu)? Jen tehdy, když maticový element $G_{mk}(t)$ se bude měnit s frekvencí blízkou $\omega_{mk} = (E_m - E_k)/\hbar$; jinak vlivem rychle oscilujícího členu $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_m-E_n)t'/\hbar}$ bude integrál stále malý
- Z toho je vidět, že aby systém s rozumnou pravděpodobností přešel z nějaké hladiny na jinou hladinu vzdálenou o ΔE, musí být porucha periodická s frekvencí blízkou $\Delta E/\hbar$ (viz následující příklad)
- *Příklad – harmonická porucha*
  - Typická situace – atom v poli monochromatického elektromagnetického záření (např. z laseru)

[10]může ovšem přecházet ve druhém přiblížení, což odpovídá přechodu přes některý třetí stav, tedy přechodu $\psi_k \to \psi_l \to \psi_m$

- Tato rovnice nám dá d hodnot $E_m^{(1)}$, což jsou opravy prvního řádu k neporušené energii E_m
- Tyto opravy jsou obecně různé, takže původně degenerovaná hladina se rozštěpí na několik (maximálně d) hladin – říkáme, že porucha **snímá** degeneraci
- Nalezením kombinací $(\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \dots, \alpha^{(d)})$ dostaneme „správné“ stavy neporušeného hamiltoniánu, které se poruchou v první aproximaci již nemíchají
- Pro ty zvídavější – šlo vlastně o diagonalizaci poruchy $\hat{G}$ v podprostoru vlastních stavů $\hat{H}_0$ s energií E_m
- Praktická aplikace – např. atom vodíku v homogenním elektrickém nebo magnetickém poli už nemá hladiny tolikrát degenerované jako měl bez pole, dochází k jejich rozštěpení a tedy i k rozštěpení spektrálních čar ve světle vysílaném atomem
- Pro aplikaci poruchové teorie na atom vodíku ale ani není třeba dávat atom do vnějšího pole; ve skutečnosti hamiltonián pro atom vodíku, který jsme použili v rovnici (13), není zcela přesný. Pro jeho zpřesnění by bylo třeba zahrnout tzv. relativistickou korekci kinetické energie T, protože přesný vztah je
$$T = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots$$
a člen $-p^4/8m^3c^2$ lze chápat jako poruchu. Výsledkem prvního řádu poruchové teorie pak je
$$E_{n,l}^{(1)} = -\frac{E_n^2}{2mc^2}\left(\frac{4n}{l+1/2} - 3\right)$$
– vidíme, že energie již závisí na l a tedy sejmula se degenerace. Podobně by bylo třeba zahrnout tzv. spin-orbitální interakci a také hyperjemnou strukturu vlivem interakce spinu jádra se spinem elektronu, což by dalo další štěpení hladin
- Rozštěpení hladin atomu v elektrickém poli – tzv. Starkův jev, v magnetickém poli – Zeemanův jev

8.1.3 Nestacionární (na čase závislá) poruchová teorie

- Zajímá nás nyní situace, kdy hamiltonián závisí explicitně na čase (jako např. v případě elektronu v proměnném elektromagnetickém poli)
- Nezajímáme se tolik o stacionární stavy (protože ty vlastně ani neexistují, neboť se hamiltonián mění), ale spíše o to, jak se daný stav bude měnit s časem
- Hamiltonián systému:
$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{G}(t),$$
kde $\hat{H}_0$ je časově neměnný neporušený hamiltonián a $\hat{G}(t)$ je porucha obecně závislá na čase.
- K rozkladu obecné vlnové funkce $\psi(t)$ budeme používat stacionární stavy neporušeného hamiltoniánu $\hat{H}_0$ včetně jejich časové závislosti:
$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n, \quad \psi_n(t) = \psi_n e^{-iE_nt/\hbar}, \quad n = 1, 2, \dots$$
Opět předpokládeme, že energiové hladiny nejsou degenerované

- Operátor $\hat{O}$ napíšeme ve tvaru $\hat{O} = \hat{H}/i\hbar$, takže
$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$$
což je slavná **Schrödingerova rovnice**
- $\hat{H}$ je tzv. **Hamiltonův operátor**
- Z klasické limity kvantové mechaniky plyne, že fyzikální veličina odpovídající Hamiltonovu operátoru je Hamiltonova funkce H, $\hat{H}$ je tedy vlastně operátorem zobecněné energie.
- Schrödingerova rovnice je podobně fundamentální (a v jistém smyslu analogická) jako Hamiltonovy rovnice v klasické mechanice
- *Příklady:*
  - *Částice o hmotnosti m v potenciálovém poli $V(\boldsymbol{r})$* – klasická Hamiltonova funkce je
  $$H = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}),$$
  a Hamiltonův operátor je
  $$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}})$$
  - *Spin elektronu v magnetickém poli*
  Se spinem elektronu je spojen magnetický dipólový moment, přes nějž spin interaguje s magnetickým polem. Je-li velikost dipólového momentu μ, pak Hamiltonův operátor lze vyjádřit pomocí Pauliho spinových matic
  $$\hat{H} = \mu\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{B} = \mu(\hat{\sigma}_xB_x + \hat{\sigma}_yB_y + \hat{\sigma}_zB_z) = \mu\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}$$
- Významné jsou vlastní stavy hamiltoniánu – tzv. stacionární stavy:
$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i$$
Pro ně má Schrödingerova rovnice jednoduchý tvar i řešení
$$i\hbar\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = E_i\psi_i, \qquad \psi_i(t) = \psi_i(0)\exp\left(-\frac{iE_i}{\hbar}t\right),$$
takže časový vývoj spočívá pouze ve změně fáze stavu
- Rovnice pro vlastní stavy Hamiltoniánu, tedy
$$\hat{H}\psi = E\psi$$
se nazývá **stacionární Schrödingerova rovnice**

- Je-li systém ve stacionárním stavu $|\psi_i\rangle$, nemění se s časem pravděpodobnosti nalezení systému v daném stavu

$$|\langle\varphi|\psi_i(t)\rangle|^2 = |\langle\varphi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_it/\hbar}\psi_i(0)\rangle|^2 = |\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_it/\hbar}\langle\varphi|\psi_i(0)\rangle|^2 = |\langle\varphi|\psi_i(0)\rangle|^2,$$

ani střední hodnoty fyzikálních veličin:

$$\langle A(t)\rangle = \langle\psi_i(t)|\hat{A}|\psi_i(t)\rangle = \langle\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_it/\hbar}\psi_i(0)|\hat{A}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_it/\hbar}\psi_i(0)\rangle = \langle\psi_i(0)|\hat{A}|\psi_i(0)\rangle = \langle A(0)\rangle$$

- To je také důvod, proč se těmto stavům říká stacionární – skoro nic se v nich nemění (až na fázi stavu)
- *Příklad časového vývoje – spin elektronu v magnetickém poli se směrem osy y:*
  – Uvažujme pole ve směru y, tedy $\boldsymbol{B} = (0, B, 0)$. Pak hamiltonián je

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\mu B \\ \mathrm{i}\mu B & 0 \end{pmatrix}$$

  Tento hamiltonián je násobkem Pauliho matice σ_y, má tedy i stejné vlastní stavy $|y+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ (vlastní hodnota μB) a $|y-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -\mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ (vlastní hodnota $-\mu B$).

  – Časový vývoj těchto stavů je dle předchozího $|y+(t)\rangle = |y+\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu Bt/\hbar}$ a $|y-(t)\rangle = |y-\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu Bt/\hbar}$.

  – Časový vývoj obecného stavu $\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ lze pak získat jeho rozložením v bázi $|y+\rangle, |y-\rangle$, vývojem bázových stavů a jejich opětovným složením:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 - \mathrm{i}u_2)\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu Bt/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 + \mathrm{i}u_2)\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -\mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu Bt/\hbar} \\ &= \begin{pmatrix} u_1\cos(\mu Bt/\hbar) - u_2\sin(\mu Bt/\hbar) \\ u_1\sin(\mu Bt/\hbar) + u_2\cos(\mu Bt/\hbar) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\omega t & -\sin\omega t \\ \sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

  – Je vidět, že stav v čase t lze získat ze stavu v čase 0 aplikací operátoru reprezentovaného maticí $\begin{pmatrix} \cos\omega t & -\sin\omega t \\ \sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}$ [1]

5 Souřadnicová reprezentace

- Zatím jsme uvažovali veličinu (např. spin), která může nabývat diskrétních hodnot. Mnoho fyzikálních veličin však nabývá hodnot ze spojité množiny – např. souřadnice

[1] Toto platí obecně: pro každý systém a dvojici časů t_1, t_2 existuje unitární operátor $\hat{U}(t_2, t_1)$ takový, že platí $|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$; $\hat{U}$ se nazývá **evoluční operátor** a lze jej vyjádřit jako

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_2 - t_1)\right) = \sum_i \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_i(t_2 - t_1)\right)|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

  – Při výpočtu se ukáže, že $c_{mk}^{(1)}$ je nenulové jen tehdy, když m i k jsou obě lichá čísla. V tomto případě (při $b \ll a$) pak

$$c_{mk}^{(1)} = \frac{2V}{E_m - E_k}\frac{b}{a}(-1)^{\frac{m-k}{2}}$$

  – Je vidět, že s rostoucím $|m - k|$ bude velikost $c_{mk}^{(1)}$ klesat kvůli rostoucímu výrazu $E_m - E_k$ ve jmenovateli

8.1.2 Stacionární poruchová teorie – degenerovaný případ

- Důležitý je případ, že některé energiové hladiny neporušeného hamiltoniánu jsou degenerované (jako např. v atomu vodíku – o energii rozhoduje jen kvantové číslo n, nikoli l či m).
- Porucha mění energii těchto degenerovaných hladin a může se stát, že tato změna bude různá pro různé stavy v rámci jedné degenerované hladiny
- Je zřejmé, že výše vysvětlený postup nemůžeme přímo použít, protože např. v rovnici (20) by nám vyšly ve jmenovateli některých členů nuly právě kvůli degenerovaným vlastním hodnotám energie
- Výběr bázových stavů s danou energií není jednoznačný, lze vybrat různé lineární kombinace
- Je třeba nalézt takové bázové stavy, které se pod vlivem poruchy nezačnou „míchat“.
- Index i nám bude rozlišovat jednotlivé stavy s toutéž energií:

$$\hat{H}_0\psi_n^{(i)} = E_n\psi_n^{(i)}$$

  – například u atomu vodíku by i rozlišovalo hladiny s různými l, m
- Rozložme neznámou vlastní funkci ψ'_m hamiltoniánu $\hat{H}$ v bázi těchto $\psi_n^{(i)}$:

$$\psi'_m = \sum_i \alpha_i\psi_m^{(i)} + \lambda\sum_n c_{mn}^{(1)}\sum_i \beta_i\psi_n^{(i)} + \ldots$$

- Přibyly nám neznámé koeficienty α_i, β_i atd., což je odrazem skutečnosti, že zatím nevíme, které by měly být ty „pravé“ stavy
- Dosazením do rovnice (19) a skalárním násobením s $\psi_m^{(j)}$ dostaneme

$$\sum_i \alpha_i\langle\psi_m^{(j)}|\lambda\hat{G}|\psi_m^{(i)}\rangle = \lambda E_m^{(1)}\alpha_j$$

- Za předpokladu, že bychom znali $E_m^{(1)}$, je to soustava homogenních lineárních rovnic pro α_i, která má vždy nulové řešení. Nás ale zajímá řešení nenulové, které existuje, právě když jsou rovnice závislé, tj. odpovídající determinant je roven nule (zcela analogická situace jako při hledání vlastních frekvencí soustavy spřažených oscilátorů)
- Označíme-li $g_{ji} = \langle\psi_m^{(j)}|\hat{G}|\psi_m^{(i)}\rangle$, vede tato podmínka na vynulování determinantu

$$\begin{vmatrix} g_{11} - E_m^{(1)} & g_{12} & \ldots & g_{1d} \\ g_{21} & g_{22} - E_m^{(1)} & \ldots & g_{2d} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_{d1} & g_{d2} & \ldots & g_{dd} - E_m^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \qquad (21)$$

  kde d je dimenze podprostoru vlastních stavů $\hat{H}_0$ s energií E_m

- Nyní rovnici vynásobíme zleva skalárně stavem ψ_k, kde $k \neq m$. To dá

$$\sum_n c_{mn}^{(1)}(E_n - E_m)\delta_{kn} = -\langle\psi_k|\hat{G}|\psi_m\rangle \quad \Rightarrow \quad c_{mk}^{(1)} = \frac{\langle\psi_k|\hat{G}|\psi_m\rangle}{E_m - E_k} \tag{20}$$

- Poruchová teorie bude fungovat dobře, jestliže $|c_{mk}|$ je pro $k \neq m$ malé proti jedničce, tj. jestliže $|\langle\psi_k|\lambda\hat{G}|\psi_m\rangle| \ll |E_m - E_k|$
- V první aproximaci teorie poruch tedy platí

$$\psi_m' = \psi_m + \sum_{n\neq m} \frac{\langle\psi_n|\hat{\lambda}G|\psi_m\rangle}{E_m - E_n}\,\psi_n, \qquad E_m' = E_m + \langle\psi_m|\lambda\hat{G}|\psi_m\rangle$$

- Další řád dostaneme tak, že porovnáme členy s λ^2
- Čím vyšší řád, tím jemnější opravy dostáváme
- *Příklad: Částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě*
  - Neporušená situace – jáma se rozprostírá od 0 do a, tedy uvnitř intervalu $\langle 0, a\rangle$ je potenciál roven nule, vně intervalu pak $+\infty$
    Porucha – na intervalu $\langle \frac{a-b}{2}, \frac{a+b}{2}\rangle$ přidáme slabý potenciál V
  - Neporušené vlastní funkce hamiltoniánu a odpovídající energie jsou

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \qquad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,n^2 \qquad (n = 1, 2, \dots)$$

  - První oprava k energii bude $E_n^{(1)} = \langle\psi_n|G|\psi_n\rangle$:

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n|G|\psi_n\rangle = \frac{2V}{a}\int_{\frac{a-b}{2}}^{\frac{a+b}{2}} |\psi_n(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{Vb}{a} - \frac{V}{n\pi}\cos n\pi \sin\frac{n\pi b}{a}$$

  - Pro malý poměr $\frac{nb}{a}$ bude $\sin\frac{n\pi b}{a} \approx \frac{n\pi b}{a}$, zároveň $\cos n\pi = (-1)^n$, takže pro malá b bude

$$E_n^{(1)} = 2V\,\frac{b}{a} \quad (n \text{ liché})$$
$$E_n^{(1)} = 0 \quad (n \text{ sudé})$$

  - Pro malá b tedy posun energie tedy nenastane pro sudé hladiny, kterým odpovídají vlnové funkce s nulovou hodnotou v bodě $x = \frac{a}{2}$. Nemůžeme se divit, že se tyto hladiny vlivem poruchy neposunou – ve stavech se sudým n si částice ani „nevšimne“, že se objevil přídavný (poruchový) potenciál, protože se v místě objevení poruchy ($x = \frac{a}{2}$) nevyskytuje. U lichých n se ale částice v místě objevení poruchy ($x = \frac{a}{2}$) vyskytuje s velkou pravděpodobností, proto porucha její stav (a energii) ovlivní silně.
  - Koeficienty $c_{mk}^{(1)}$:

$$c_{mk}^{(1)} = \frac{2V}{a(E_m - E_k)}\int_{\frac{a-b}{2}}^{\frac{a+b}{2}} \psi_k^*(x)\psi_m(x)\,\mathrm{d}x$$

- Uvažujme částici vázanou na přímku, tj. mající jeden stupeň volnosti – např. elektron ve speciální heterostruktuře v polovodiči, kdy se může pohybovat jen jedním směrem
- Definujeme **operátor souřadnice** $\hat{x}$ a jemu příslušné vlastní stavy $|x\rangle$ takové, že $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$. Například $|3\,\mathrm{mm}\rangle$ je stav, ve kterém má souřadnice přesnou hodnotu 3 mm, tedy $\hat{x}|3\,\mathrm{mm}\rangle = (3\,\mathrm{mm})\cdot|3\,\mathrm{mm}\rangle$
- Operátor $\hat{x}$ je hermitovský a má spojité reálné spektrum
- Jaký bude skalární součin $\langle x|y\rangle$? Určitě 0 pro $x \neq y$ (z nám již známého důvodu – jestliže má částice hodnotu souřadnice s jistotou např. 3 mm, pak nemůže mít současně 4 mm), ale čemu bude rovno $\langle x|y\rangle$ pro $x = y$?
- Je to věc normování. Především chceme, aby se s bází $\{|x\rangle, x \in \mathbb{R}\}$ dobře pracovalo. V diskrétním případě jsme měli

$$|\alpha_i\rangle = \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \sum_j |\alpha_j\rangle\delta_{ij} = |\alpha_i\rangle,$$

  protože $\sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|$ je jednotkový operátor
- Ve spojitém případě je třeba nahradit sumaci integrací, tedy analogie předchozí rovnice bude

$$|x\rangle = \int_{\mathbb{R}} |y\rangle\langle y|x\rangle\,\mathrm{d}y = \int_{\mathbb{R}} |y\rangle f(x,y)\,\mathrm{d}y$$

- Jaká funkce $f(x,y)$ splňuje, že $\int_{\mathbb{R}} g(y)f(x,y)\,\mathrm{d}y = g(x)$? Tzv. Diracova δ-funkce $\delta(x-y)$
- Není to funkce v pravém slova smyslu, ale tzv. distribuce (zobecněná funkce) s vlastnostmi

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x-a)f(x)\,\mathrm{d}x = f(a)$$
$$\delta(x) = 0 \quad \forall x \neq 0$$

  Tedy je nenulová jen v bodě $x = 0$, kde je nekonečná, a to nekonečno je právě tak velké, aby plocha „pod funkcí“ byla jednotková
- Máme tedy $\langle y|x\rangle = \langle x|y\rangle = \delta(y-x)$
- Rozklad jednotky je pak

$$\hat{1} = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle\langle x|\,\mathrm{d}x$$

- Pro každý stav $|\psi\rangle$ pak platí

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |x\rangle\langle x|\psi\rangle\,\mathrm{d}x$$

- Stav systému jsme tedy vyjádřili v bázi stavů $|x\rangle$ podobně, jako jsme to udělali u konečněrozměrného systému (rovnice (1)), koeficienty rozkladu jsou $\langle x|\psi\rangle$. Zde je však sloupeček nekonečně dlouhý, takže jde vlastně o komplexní funkci reálné proměnné x: $\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x)$
- $\psi(x)$ se nazývá **vlnová funkce** částice, popř. souřadnicová reprezentace stavu $|\psi\rangle$; charakterizuje úplně stav systému[2], podobně jako $|\psi\rangle$

[2] vlnová funkce ovšem nepopisuje spinovou část stavu částice, protože ta není svázána s prostorovým pohybem částice

- Vlnová funkce má přímý fyzikální význam: je to *amplituda pravděpodobnosti nalezení částice* v bodě x
- Proto je $|\psi(x)|^2$ *hustota pravděpodobnosti nalezení částice* v bodě x [3]
- *Podmínka normování* vlnové funkce:

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1$$

- Jaká je souřadnicová reprezentace samotného vlastního stavu souřadnice, např. $|y\rangle$? Je to δ-funkce: $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$
- Jaký je účinek operátoru $\hat{x}$ na vlnovou funkci, tj. jaká je vlnová fce stavu $\hat{x}|\psi\rangle$?

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \langle \hat{x}x|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x)$$

Zde jsme působili operátorem $\hat{x}$ doleva na $\langle x|$ a protože je hermitovský, dalo to $x\langle x|$. Účinek operátoru $\hat{x}$ na vlnovou funkci je tedy násobení souřadnicí

- Jak vyjádříme **skalární součin** dvou stavů pomocí jejich vlnových funkcí? Vložíme mezi ně jednotkový operátor, což dá

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}} |x\rangle\langle x| \, \mathrm{d}x\right)}_{\hat{1}}|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}} \langle\varphi|x\rangle\langle x|\psi\rangle \, \mathrm{d}x \\ = \int_{\mathbb{R}} \langle x|\varphi\rangle^*\langle x|\psi\rangle \, \mathrm{d}x &= \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)^*\psi(x) \, \mathrm{d}x\end{aligned}$$

- **Střední hodnotu souřadnice** x ve stavu ψ vypočteme vložením dvou jednotkových operátorů:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}^2} \langle\psi|x\rangle\langle x|\hat{x}|y\rangle\langle y|\psi\rangle \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y = \int_{\mathbb{R}^2} \langle\psi|x\rangle y\delta(x-y)\langle y|\psi\rangle \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \\ &= \int_{\mathbb{R}} x|\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x,\end{aligned}$$

jde vlastně o vážený průměr souřadnice x vážený pravděpodobností $|\psi(x)|^2$

- Ve třech dimenzích – vše analogické, ale integrály jsou $\mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z$ a integrační obor je $\mathbb{R}^3$
- **Tok pravděpodobnosti**
  - Časovou derivaci hustoty pravděpodobnosti $\rho = \psi^*(x)\psi(x)$ v daném místě vypočteme pomocí Schrödingerovy rovnice:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \psi^*(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*(x)}{\partial t}\psi(x) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*\psi'' - (\psi^*)''\psi\right]$$

  - Rovnice kontinuity: úbytek pravděpodobnosti $-\partial\rho/\partial t$ je dán divergencí $\partial j/\partial x$ nějakého vektorového pole j, které udává „proudění“ pravděpodobnosti:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad \Longrightarrow \quad j = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[(\psi^*)'\psi - \psi^*\psi'\right]$$

[3] to znamená, že pravděpodobnost nalezení částice v intervalu $\langle x, x+\Delta x)$, je rovna $|\psi(x)|^2\Delta x$ pro malé Δx.

- Abychom nějak využili toho, že porucha je malá (malé λ), budeme c_{mn} i E'_m hledat ve tvaru řady, jejíž jednotlivé členy odpovídají jednotlivým řádům v malosti poruchy:

$$c_{mn} = c_{mn}^{(0)} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \ldots, \qquad E'_m = E_m^{(0)} + \lambda E_m^{(1)} + \lambda^2 E_m^{(2)} + \ldots$$

(čárku u členů řady pro E už nepíšeme)

- Zatím jsme nic nepředpokládali o stavu ψ'_m. Budeme tedy předpokládat, že při vymizení poruchy ($\lambda = 0$) by stav ψ'_m splýval se stavem ψ_m, tedy že ψ'_m je porušený stav ψ_m. To dává podmínku $c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$, kde δ_{mn} je Kroneckerovo delta rovné nule pro $m \neq n$ a rovné jedné pro $m = n$. Navíc jistě bude $E_m^{(0)} = E_m$.
- Spočítejme levou stranu rovnice (19):

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi'_m &= (\hat{H}_0 + \lambda\hat{G})\sum_n(\delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \ldots)\psi_n \\ &= \sum_n \delta_{mn}E_n\psi_n + \lambda\sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_n\psi_n + \delta_{mn}\hat{G}\psi_n\right) + \lambda^2\cdots + \ldots\end{aligned}$$

(uspořádali jsme členy podle mocnin λ)

- A dále počítáme pravou stranu rovnice (19):

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi'_m &= E'_m\psi'_m = (E_m^{(0)} + \lambda E_m^{(1)} + \lambda^2 E_m^{(2)} + \ldots)\sum_n(\delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \ldots)\psi_n \\ &= \sum_n \delta_{mn}E_m^{(0)}\psi_n + \lambda\sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_m^{(0)} + \delta_{mn}E_m^{(1)}\right)\psi_n + \lambda^2\cdots + \ldots\end{aligned}$$

- Porovnáním členů u stejné mocniny λ v obou rovnicích nyní zjistíme něco o $c_{mn}^{(k)}$ a $E_m^{(k)}$.
- Nultý řád nám řekne jen to, co už víme:

$$\sum_n \delta_{mn}E_n\psi_n = \sum_n \delta_{mn}E_m^{(0)}\psi_n \quad \Rightarrow \quad E_m^{(0)} = E_m$$

- První řád je zajímavější:

$$\sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_n\psi_n + \delta_{mn}\hat{G}\psi_n\right) = \sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_m^{(0)} + \delta_{mn}E_m^{(1)}\right)\psi_n$$

- Odtud dostaneme

$$\sum_n c_{mn}^{(1)}(E_n - E_m)\psi_n = (E_m^{(1)} - \hat{G})\psi_m$$

- Abychom se zbavili stavů ψ_n a dostali rovnice jen pro $c_{mn}^{(1)}$ a $E_m^{(1)}$, vynásobíme rovnici zleva skalárně stavem ψ_m. S využitím ortonormality stavů ψ_n to dá $0 = E_m^{(1)} - \langle\psi_m|\hat{G}|\psi_m\rangle$, tj.

$$\boxed{E_m^{(1)} = \langle\psi_m|\hat{G}|\psi_m\rangle,}$$

a tedy oprava prvního řádu k energii m-tého stavu je rovna střední hodnotě poruchy v tomto stavu

8 Přibližné metody

8.1 Poruchová teorie

- Ne vždy dokážeme přesně vyřešit Schrödingerovu rovnici, ať už stacionární či nestacionární
- Byla by ale škoda, kdyby to znamenalo, že o kvantovém systému nic nedokážeme říci
- Někdy dokážeme Schrödingerovu rovnici řešit pro podobnou, ale trochu jednodušší situaci
- Příklad: umíme pěkně analyzovat atom vodíku bez vnějšího elektromagnetického pole. Jak se situace změní, když jej dáme do homogenního elektrického pole?
- Přidané pole bude jistě slabé proti Coulombovskému poli jádra (pole protonu ve vzdálenosti Bohrova poloměru má velikost asi 6×10^{11} V/m). Proto řešení Schrödingerovy rovnice bude asi docela podobné řešení bez pole
- Přidané pole můžeme nazvat „poruchou“, nový Hamiltonův operátor pak „porušeným“ oproti původnímu, „neporušenému“
- Hledáme rozvoj řešení Schrödingerovy rovnice s porušeným hamiltoniánem pomocí řešení s neporušeným, přičemž rozvíjíme do prvního, druhého atd. řádu podle velikosti poruchy
- Někdy nás zajímá, jak se posunou energiové hladiny (vlastní hodnoty hamiltoniánu). Tím se zabývá stacionární poruchová teorie
- Jindy chceme vědět, zda přidané pole či interakce nezpůsobí třeba přechod systému do jiného stavu, než v jakém se původně nacházel. Tím se zabývá nestacionární poruchová teorie

8.1.1 Stacionární poruchová teorie

- Hamiltonián systému:
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{G},$$
kde $\hat{H}_0$ je neporušený hamiltonián a $\hat{G}$ je porucha. Malost poruchy vyjádříme malým parametrem λ
- Předpokládejme, že známe vlastní stavy (funkce) hamiltoniánu $\hat{H}_0$:
$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n, \quad n = 1, 2, \ldots$$
které tvoří bázi Hilbertova prostoru. Navíc předpokládeme, že energiové hladiny nejsou degenerované, tedy že $E_n \neq E_m$ pro $m \neq n$
- Rozložme zatím neznámou vlastní funkci ψ'_m hamiltoniánu $\hat{H}$ v bázi těchto ψ_n:
$$\psi'_m = \sum_n c_{mn}\psi_n$$
- Protože ψ'_m je vlastní stav $\hat{H}$, platí
$$\hat{H}\psi'_m = E'_m\psi'_m \tag{19}$$

- j – tok pravděpodobnosti, ve třech dimenzích
$$\boldsymbol{j} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right]$$
- Pro stavy $|\boldsymbol{p}\rangle$ s danou hybností $\boldsymbol{p}$ platí
$$\boldsymbol{j} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}\rho = \boldsymbol{v}\rho,$$
kde $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/m$ je rychlost částice

5.1 Operátor hybnosti

- Z klasické mechaniky víme, že s posunutím v prostoru úzce souvisí hybnost (je generátorem posunutí)
- Ukazuje se, že i v kvantové mechanice je tomu podobně
- Zkusme najít operátor, odpovídající posunutí vlnové funkce o malou (infinitezimální) vzdálenost a. Tedy takový, který dává $\hat{D}_a\psi(x) = \psi(x-a)$. Pro malé a platí rozvoj
$$\psi(x-a) \approx \psi(x) - \frac{\partial\psi}{\partial x}a = \left(\hat{1} - a\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi,$$
tedy $D_a \approx \hat{1} - a\,\partial/\partial x$. [4]
- Tento operátor zachovává skalární součin, protože
$$\langle\hat{D}_a\psi|\hat{D}_a\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x-a)\varphi(x-a)\,\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(y)\varphi(y)\,\mathrm{d}y = \langle\psi|\varphi\rangle$$
- Operátory zachovávající skalární součin se nazývají **unitární**, v kvantové mechanice velice významná třída operátorů
- Unitární operátory zachovávají skalární součiny a proto i amplitudy a pravděpodobnosti – souvisejí tedy s vratnými procesy v kvantových systémech (rotace, posunutí, časový vývoj apod.)
- Sdružený operátor k $\hat{D}_a$ značíme $\hat{D}_a^\dagger$, proto
$$\langle\hat{D}_a\psi|\hat{D}_a\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{D}_a^\dagger\hat{D}_a\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$$
- Proto $\hat{D}_a^\dagger\hat{D}_a = \hat{1}$ a současně i $\hat{D}_a\hat{D}_a^\dagger = \hat{1}$ a tedy $\hat{D}_a^{-1} = \hat{D}_a^\dagger$ – vlastnost každého unitárního operátoru
- V maticové reprezentaci je unitární operátor reprezentován unitární maticí

[4] Operátor posunutí o větší (nikoli infinitezimální) vzdálenost a lze formálně napsat jako $\hat{D}(a) = \mathrm{e}^{-a\frac{\partial}{\partial x}}$, protože
$$\mathrm{e}^{-a\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi(x) = \psi(x-a), \tag{3}$$
což je vlastně Taylorův rozvoj funkce $\psi(x-a)$ kolem bodu x.

- Jak působí operátor $\hat{D}_a^\dagger$ na $\psi(x)$? Posunuje je na druhou stranu:

$$\langle \hat{D}_a \psi|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x-a)\varphi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(y)\varphi(y+a)\,\mathrm{d}y = \langle \psi|\hat{D}_a^\dagger \varphi\rangle$$

- Akce operátoru na vlastní stav polohy je

$$D_a|x\rangle = |x+a\rangle$$

– to plyne jednak z definice $|x\rangle$ a toho, jak $\hat{D}$ působí, nebo k tomu lze dojít i jinak:

$$\langle \hat{D}_a x|\psi\rangle = \langle x|\hat{D}_a^\dagger \psi\rangle = \psi(x+a) = \langle x+a|\psi\rangle$$

- Operátor $\partial/\partial x$ je přímo úměrný **operátoru hybnosti**, můžeme napsat $\hat{p} = k\,\partial/\partial x$, kde k je dosud neznámý faktor
- Tento faktor musí být ryze imaginární (viz cvičení) z důvodu hermitovosti $\hat{p}$ a jak lze zjistit limitním přechodem ke klasické mechanice, je roven $-\mathrm{i}\hbar$
- Operátor hybnosti má tedy tvar

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial x} \tag{4}$$

- V obecném případě trojrozměrného pohybu, kdy vlnová funkce $\psi(x,y,z)$ je funkcí všech prostorových souřadnic, je

$$\boxed{\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial z},\quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla}$$

- Jednotlivé složky hybnosti spolu komutují, protože parciální derivace podle různých souřadnic jsou záměnné
- Komutátor souřadnice a jí příslušné hybnosti je roven $\mathrm{i}\hbar$, tj.

$$[x,\hat{p}_x] = [y,\hat{p}_y] = [z,\hat{p}_z] = \mathrm{i}\hbar, \text{ ale } \quad [x,\hat{p}_y] = 0 \tag{5}$$

Vlastní stavy hybnosti:

$$-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial \psi_p}{\partial x} = p\psi_p \quad \Rightarrow \quad \psi_p(x) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right),$$

ve třech dimenzích

$$\boxed{\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z\right)\right] = \exp\left[\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{pr}}{\hbar}\right]}$$

- Vlastní funkce hybnosti má tedy tvar komplexní rovinné vlny
- Vlnová délka vlny – nejmenší vzdálenost, po které se ψ opakuje, tedy $p\lambda/\hbar = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \lambda = 2\pi\hbar/p$
- Čím větší hybnost, tím menší vlnová délka. Např. pro kámen 1 kg, 1 m/s je $\lambda = 6\times10^{-34}$ m, pro elektron o rychlosti 1 m/s už ale asi 0,6 mm. Proto se kvantové vlastnosti kamene v milimetrovém měřítku neprojeví, ale elektronu ano

- Vlastní hodnoty energie jsou pak

$$E_{nl} = -\left[\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2}\right]\frac{1}{n^2} \tag{18}$$

- Konstanta v hranaté závorce – 1 Rydberg (R), $R = 13{,}6$ eV, je to ionizační energie atomu vodíku v základním stavu
- Energie závisí jen na n, ale nikoli na l, natožpak na m. Energiové hladiny v atomu vodíku jsou tedy silně **degenerované**
- Degenerace energie vzhledem k l není samozřejmá a souvisí s tvarem Coulombovského potenciálu $V = -\alpha/r$; pro jiný potenciál by energie závisela i na l. Něco podobného nastává i v klasické mechanice – jen pro potenciál $V = -\alpha/r$ dostaneme pohyb po uzavřených trajektoriích (elipsách); pro jiný potenciál by se trajektorie neuzavřely
- Stacionární stavy, které jsme hledali, mají tedy celkovou vlnovou funkci

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

- **Spin** – Jestliže ještě uvážíme, že elektron má spin 1/2, bude vázaný stav elektronu v atomu vodíku určen čtyřmi kvantovými čísly n (hlavní), l (vedlejší), m (magnetické), s (spinové), jejichž rozsahy jsou $n = 1,2,3,\ldots$; $l = 0,1,\ldots,n-1$; $m = -l,-l+1,\ldots,l-1,l$; $s = \pm1/2$, a energie závisí pouze na n podle vztahu (18)
- Shrneme-li všechny možné kombinace kvantových čísel n,l,m,s elektronu v atomu vodíku, dostaneme tuto tabulku

n	l	m	s
1	0	0	$\pm1/2$
2	0	0	$\pm1/2$
	1	$-1,0,1$	$\pm1/2$
	0	0	$\pm1/2$
3	1	$-1,0,1$	$\pm1/2$
	2	$-2,-1,0,1,2$	$\pm1/2$
	0	0	$\pm1/2$
4	1	$-1,0,1$	$\pm1/2$
	2	$-2,-1,0,1,2$	$\pm1/2$
	3	$-3,-2,-1,0,1,2,3$	$\pm1/2$
		$\ldots$	

- Při značení stavů elektronů v atomu se vedlejší kvantové číslo nahrazuje písmenem podle klíče $0\to s, 1\to p, 2\to d, 3\to f$ atd., takže např. stav $3p$ značí stav s $n=3$ a $l=1$.

- Pro lepší představu, jak asi budou vypadat řešení této rovnice, nahradíme funkci $R(r)$ novou funkcí $v(r)$ pomocí substituce $R = \frac{v}{r}$ a přepíšeme rovnici (17) takto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right] v = Ev,$$

- Tato rovnice se dá chápat jako rovnice pro pohyb částice v jedné dimenzi v efektivním potenciálu

$$V_{\mathrm{ef}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

což je stejný potenciál, jako se dostane při řešení pohybu klasické částice v Coulombovském poli jádra (jen místo L^2 v klasickém případě máme nyní $\hbar^2 l(l+1)$, což je ovšem skoro totéž, protože $\hbar^2 l(l+1)$ je vlastní hodnota právě operátoru $\hat{L}^2$)

- Vrátíme se nyní k rovnici (17) a zavedeme substituce

$$r = \frac{\hbar^2}{m}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\rho, \qquad E = -\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2}\varepsilon, \qquad R = \frac{u}{\rho}$$

- Rovnici tak převedeme na

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \epsilon\right) u = 0$$

- Úvahami o asymptotickém chování funkce $u(\rho)$ při $\rho \to 0$ a $\rho \to \infty$ dostaneme

$$u(\rho) = \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\sqrt{\epsilon}\rho} f(\rho),$$

kde $f(\rho)$ hledáme ve tvaru mocninné řady $f(\rho) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i$

- Dalšími úvahami dojdeme k tomu, že u mocninná řada pro $f(\rho)$ musí být konečná
- Nakonec zpětným přechodem k R dostaneme

$$R_{nl}(\rho) = \frac{1}{\rho}\rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\sqrt{\epsilon}\rho} f(\rho),$$

kde $f(\rho)$ je polynom stupně $n-l-1$, kde $n \in \mathbb{N}, n > l$ (tzv. přidružený Laguerrův polynom)

- n se nazývá **hlavní kvantové číslo**
- Hodnota hlavního kvantového čísla n pro dané l může být $l+1, l+2, \ldots$
- Tedy pro dané n existuje n možných hodnot l: $0, 1, 2, \ldots, n-1$
- Prvních několik radiálních funkcí R_{nl}:

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-r/a_0},$$

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}, \qquad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0},$$

kde $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2 = 0{,}53 \times 10^{-10}$ m je tzv. Bohrův poloměr atomu (přirozená jednotka délky v atomu vodíku)

- Vztah $\lambda = 2\pi\hbar/p$ platí i pro kvanta světla (fotony), lze si z něj snadno vypočítat hybnost fotonu, známe-li jeho vlnovou délku: pro zelenožluté světlo ($\lambda = 500$ nm) je $p \approx 10^{-27}$ kgm/s
- Obecně každá částice s hybností p je spojena s určitou vlnou s vlnovou délkou $2\pi\hbar/p$ – tzv. deBroglieho vlna
- Vlastní stavy hybnosti nelze normovat na jedničku (souvisí to se spojitým spektrem hybnosti podobně jako u souřadnice), proto budeme chtít, aby $(\psi_p, \psi_{p'}) = \delta(p - p')$. Odtud dostaneme normovanou vlnovou funkci

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right)$$

- Pravděpodobnost nalezení částice je stejná všude: $|\psi_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} =$ konst. – částice s danou hybností má zcela neurčitou polohu
- Chceme-li znát přesněji polohu, musíme zmenšit oblast, kde se vlna nachází, ale k tomu potřebujeme jiné vlnové délky a tedy i hybnosti
- Superpozicí mnoha vln s různými hybnostmi lze vytvořit tzv. **vlnové klubko** – prostorově ohraničenou vlnu, která odpovídá víceméně lokalizované částici
- Informaci o tom, jak vypadají možné hybnosti částice, nám dává tzv. impulzová reprezentace kvantového stavu
- Impulzová reprezentace stavu $|\psi\rangle$, kterou označíme $a_\psi(p)$, je amplitudou toho, že částice ve stavu $|\psi\rangle$ má hybnost p; je to tedy vlastně součin $\langle p|\psi\rangle$
- Pro přechod od souřadnicové k impulzové reprezentaci využijeme toho, že známe $\langle x|p\rangle$, a vložení jednotkového operátoru:

$$a_\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle\,\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} \langle x|p\rangle^* \psi(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} a_\psi(p)\,\mathrm{d}p$$

- Tedy vlnová funkce v souřadnicové a impulzové reprezentaci jsou vzájemně spojeny Fourierovou transformací; jde o podobné spojení jako má difrakční mřížka s difrakčním obrazcem
- Známá věc z teorie difrakce – čím menší (nebo jemnější) je struktura, na které probíhá difrakce, tím větší (hrubší) je difrakční obrazec
- Stejná zákonitost platí i v kvantové mechanice: čím menší bude prostorová šířka vlnového klubka, tím větší bude jeho impulzová šířka a naopak
- *Příklad: Gaussovo vlnové klubko*

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}}\exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2a^2}\right] \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi b^2}}\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}p_0 x}{\hbar}\right),$$

kde $b = \hbar/a$.

5.2 Hamiltonián a Schrödingerova rovnice v souřadnicové reprezentaci

- Částice v jednom rozměru ve vnějším silovém poli, ve kterém má potenciální energii $V(x)$, má hamiltonián
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$
a částice ve třech dimenzích
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r}),$$
a částice ve třech dimenzích v elektromagnetickém poli
$$H = \frac{[-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})]^2}{2m} + q\varphi(\boldsymbol{r}),$$
kde $\boldsymbol{A}, \varphi$ je vektorový a skalární potenciál; tento hamiltonián je analogií klasického hamiltoniánu $H = \frac{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2}{2m} + q\varphi$
- Řešme Schrödingerovu rovnici pro volnou částici (při absenci pole $V(x)$) v jedné dimenzi
$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$
Rovnici řešíme separací proměnných, tedy předpokládáme $\psi(x,t) = X(x)T(t)$. Takto dostaneme pro T a X rovnice
$$\mathrm{i}\hbar T_t = ET, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}X_{xx} = EX,$$
kde indexy značí derivace podle příslušných veličin (všimněme si, že druhá rovnice je vlastně $\hat{H}X = EX$, tedy rovnice pro stacionární stavy; takovéto rovnici se proto říká **stacionární Schrödingerova rovnice**). Odtud obecné řešení rovnic
$$T(t) = c\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}Et}{\hbar}}, \qquad X(x) = a\mathrm{e}^{ikx} + b\mathrm{e}^{-ikx}, \quad \text{kde } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$
Tedy vlnová funkce
$$\psi(x,t) = (A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kx+\omega t)}$$
- Je vidět, že jde vlastně o dvě vlny, jedna běží podél osy x a druhá v opačném směru. Současně vidíme, že tyto vlny jsou i vlastními stavy operátoru hybnosti $\hat{p}$ s vlastními hodnotami po řadě $p = \pm\hbar k$. S každou vlnou je spojeno **vlnové číslo** $k = p/\hbar$ (a tedy vlnová délka $\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p$), frekvence $\omega = E/\hbar$ a energie $E = p^2/2m$.
- Máme-li vlnové klubko s relativně úzkým rozdělením hybností (úzkou funkcí $|\langle p|\psi\rangle|^2$) se střední hybností p_0, pak lze definovat tzv. fázovou a grupovou rychlost:
$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p_0}{2m}, \qquad v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{p_0}{m},$$
přičemž fázová rychlost nám říká, jak rychle běží jednotlivé vlny v klubku (u vln na vodě vrcholek nebo údolíčko), zatímco grupová rychlost vyjadřuje rychlost celého klubka

- Stacionární Schrödingerova rovnice má tvar
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi, \tag{13}$$
kde Δ je Laplaceův operátor
$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$$
- Vzhledem k symetrii potenciálu budeme rovnici řešit ve sférických souřadnicích, kde je nejjednodušší tvar potenciálu. Převedeme Laplaceův operátor Δ do těchto souřadnic:
$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$
- Je zajímavé, že operátor čtverce *orbitálního* momentu hybnosti $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ má podobný tvar jako druhá část Laplaceova operátoru, až na faktor $-1/\hbar^2 r^2$:
$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$
- Pak můžeme Schrödingerovu rovnici přepsat takto:
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2}\psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi \tag{14}$$
- Rovnici budeme řešit separací proměnných – předpokládáme, že řešení je ve tvaru součinu radiální a úhlové funkce:
$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$$
- Dosazením do rovnice (14), vydělením ψ a vynásobením $2mr^2$ dostaneme
$$\frac{\hat{L}^2 Y}{Y} = \frac{\hbar^2}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + 2mr^2\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)$$
- Levá strana nyní závisí na φ, θ, pravá pak jen na r. Proto se obě musejí rovnat téže společné konstantě λ. Tato podmínka nám dává dvě diferenciální rovnice
$$\hat{L}^2 Y = \lambda Y \tag{15}$$
$$\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + 2m_e r^2\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R = \lambda R, \tag{16}$$
- **Úhlová část:** Tím, že v rovnici (15) vystupuje operátor momentu hybnosti, je to vlastně rovnice pro nalezení vlastních stavů L^2, což jsme již řešili; řešeními jsou nám již známé funkce $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, vlastními hodnotami pak $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$, kde $l = 0, 1, 2, \ldots$
- **Radiální část:** rovnici (16) snadno upravíme za použití $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$ takto
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}R - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R = ER \tag{17}$$

- $\boxed{\text{Toto odlišuje orbitální moment od spinového nebo celkového momentu hybnosti – spinový nebo celkový může být celočíselný i poločíselný, orbitální jen celočíselný}}$
- Kvantové číslo j se v případě orbitálního momentu většinou značí jako l, máme tedy funkce $Y_{lm}(\theta,\varphi), P_{lm}(\theta)$ atd.
- Jak najdeme $P_{lm}(\theta)$? Snadné to bude pro $P_{ll}(\theta)$, protože víme, že musí platit $\hat{L}_+ Y_{ll} = 0$:

$$0 = \hat{L}_+ Y_{ll} = \hbar \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) P_{ll}(\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}$$

- Odtud pak dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}P_{ll}}{\mathrm{d}\theta} = l\cot\theta P_{ll} \quad \Rightarrow \quad P_{ll}(\theta) = c_l \sin^l\theta,$$

  kde c_l je normovací konstanta
- Po normování pak dostáváme pro Y_{ll}

$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l\theta \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}$$

- Další stavy $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ s $m < l$ dostaneme postupnou aplikací snižovacího operátoru $\hat{L}_-$ na stav $Y_{ll}(\theta,\varphi)$
- Takto získáme (včetně normování)

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^l \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{2^l l! \sin^m(\theta)} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta} \right)^{l-m} \sin^{2l}\theta$$

- Prvních několik normovaných Y_{lm}:

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}},$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi},$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 - 1), \quad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta\cos\theta \, \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}, Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, \mathrm{e}^{\pm2\mathrm{i}\varphi},$$

- Jak je to s radiální částí vlnové funkce? Ta může být libovolná, protože r v operátoru $\hat{\boldsymbol{L}}$ vůbec nevystupuje. Celkové vlnové funkce pak budou součiny $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ s libovolnou funkcí $R(r)$

7.3 Atom vodíku

- Řešíme úlohu o pohybu elektronu v přitažlivém centrálním poli s potenciální energií $V = -\alpha/r$, kde $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0$

- Vidíme tedy, že místo maximální pravděpodobnosti nalezení částice se pohybuje rychlostí v_g rovnou klasické rychlosti odpovídající střední hybnosti klubka p_0.
- Uvažujme vlnové klubko, které je v čase $t = 0$ dobře lokalizované; jak bude vypadat po nějakém dlouhém čase?
- Je-li dobře lokalizované, pak je velká šířka rozdělení jeho hybností; lze tedy čekat, že po dlouhé době bude klubko širší, protože obsahuje různé hybnosti a tedy i rychlosti – je neurčitá dráha, kterou urazí
- Přesně toto chování dává přesný výpočet nebo i experiment (když např. necháme vyletovat elektrony ze zdroje jen v krátkých časových intervalech, v detektoru je zachytíme naopak s relativně velkou časovou neurčitostí, protože není jednoznačné, jak dlouho letí)
- Toto chování se nazývá **rozplývání vlnového klubka** a je dáno disperzí vln odpovídajících různým hybnostem

5.3 Úlohy s jednorozměrným potenciálem (jámy, bariéry atd.)

- Uvažujme částici vázanou na přímku (která se tedy může pohybovat jen v jednom směru) v potenciálu $V(x)$, kde x je souřadnice měřená podél přímky
- V souřadnicové reprezentaci budeme hledat stacionární stavy částice, tedy řešení stacionární Schrödingerovy rovnice částice v jedné dimenzi

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{6}$$

  kde $\psi'' = \mathrm{d}^2\psi/\,\mathrm{d}x^2$
- Požadujeme, aby vlnová funkce pro $x \to \pm\infty$ nedivergovala (protože divergující funkce by nepopisovala žádnou fyzikální situaci)
- Zajímají nás nejen řešení rovnice (6) (tj. vlnové funkce $\psi(x)$), ale také hodnoty energie E, pro které vůbec nějaké řešení existuje; tyto hodnoty tvoří **energiové spektrum**
- Podle charakteru potenciálu dostaneme různé typy spektra vlastních hodnot energie
- **Finitní pohyb** je takový, že pohyb klasické částice se stejnou energií ve stejném potenciálu by byl omezen na konečnou oblast prostoru (přímky), **infinitní pohyb** – nekonečná oblast
- Obecně platí, že je-li pohyb finitní, je energiové spektrum diskrétní, pro infinitní pohyb je spojité
- Je-li potenciál takový, že se částice může dostat do nekonečně mnoha oddělených oblastí, z nichž každá má konečnou velikost (např. periodický potenciál), pak je spektrum pásové – existují intervaly energií, kterých částice může nabývat, a intervaly, energií z nichž částice nemůže nabývat
- *Příklady:*
  - Harmonický oscilátor – pohyb je finitní pro každou energii, proto je spektrum všude diskrétní
  - Nekonečně hluboká potenciálová jáma – pohyb je finitní pro každou energii, proto je spektrum všude diskrétní

– Volná částice – pohyb je infinitní pro každou energii, proto je spektrum spojité
– Potenciálová jáma konečné hloubky – v jámě je pohyb finitní, vně infinitní, proto jsou energie v jámě kvantovány, vně jámy pak libovolné
– Elektron v poli atomového jádra – pohyb finitní pro $E < 0$, infinitní pro $E > 0$, proto je spektrum pro $E < 0$ diskrétní, pro $E > 0$ spojité
– Periodický potenciál pro elektron v krystalu pocházející od přitažlivosti atomových jader – pásová struktura známá z fyziky pevných látek, např. vodivostní a valenční pás

6 Heisenbergovy relace neurčitosti

- Veličina A nabývá určité přesné hodnoty jen ve vlastních stavech příslušného operátoru $\hat{A}$; v ostatních stavech je hodnota A více či méně neurčitá
- Některé dvojice veličin nemohou současně nabývat přesných hodnot, neboť neexistuje stav, který by byl vlastním stavem obou současně, např. pro Pauliho matice $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ a $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- To, zda veličiny A, B současně mohou nabývat přesných hodnot, těsně souvisí s tím, zda komutují: jestliže $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, pak mohou, jestliže $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, pak nemohou[5]
- Existují určité nerovnosti pro neurčitosti takovýchto veličin – tzv. **relace neurčitosti**
- Uvažujme stav $|\psi\rangle$ a dvě veličiny reprezentované hermitovskými operátory $\hat{A}, \hat{B}$
- Budeme zkoumat kvadratickou neurčitost A a B, tedy

$$(\Delta A)^2 = \left\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \right\rangle, \quad (\Delta B)^2 = \left\langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \right\rangle$$

- $(\Delta A)^2$ souvisí s rozptylem naměřených hodnot při opakovaném měření veličiny A
- Zavedeme pomocné operátory

$$\hat{U} = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{1}, \quad \hat{V} = \hat{B} - \langle B \rangle \hat{1},$$

kde $\hat{1}$ je jednotkový operátor. Tím si „posuneme“ veličiny A a B o jejich střední hodnoty – tedy $\hat{U}, \hat{V}$ mají oba nulovou střední hodnotu, ale mají stejnou neurčitost jako $\hat{A}, \hat{B}$

- Definujme (poněkud uměle) stav

$$|\varphi\rangle = (\hat{U} + \mathrm{i}\lambda\hat{V})|\psi\rangle, \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

- Spočteme druhou mocninu velikosti $|\varphi\rangle$, což musí být nezáporné číslo:

$$0 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \psi | (\hat{U} - \mathrm{i}\lambda\hat{V})(\hat{U} + \mathrm{i}\lambda\hat{V}) | \psi \rangle = \langle \hat{U}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \hat{V}^2 \rangle + \mathrm{i}\lambda \langle [\hat{U}, \hat{V}] \rangle$$

[5] Poslední tvrzení není zcela přesné; např. pro operátory x-ové a y-ové složky momentu hybnosti existuje jeden společný vlastní stav, ačkoli nekomutují. Neexistuje ale báze Hilbertova prostoru složená z jejich společných vlastních stavů.

7.2.1 Orbitální moment hybnosti

- Budeme zkoumat orbitální moment hybnosti spojený s pohybem částice (nikoli s jejím spinem):

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}} &= \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}, \text{ tedy} \\ \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned} \tag{11}$$

- Budeme hledat vlnové funkce částice, která je ve společném vlastním stavu operátorů $\hat{L}^2$ a L_z (moment hybnosti vztahujeme k počátku soustavy souřadnic)
- Od obecného algebraického popisu přejdeme k popisu v souřadnicové reprezentaci
- Chceme-li najít vlastní stavy $\hat{L}^2$ a L_z v souřadnicové reprezentaci, přejdeme nejprve ke sférickým souřadnicím, které jsou pro popis momentu hybnosti vhodnější než kartézské:

$$x = r\cos\varphi\sin\theta, \quad y = r\sin\varphi\sin\theta, \quad z = r\cos\theta,$$

- V těchto souřadnicích lze kartézské složky operátoru momentu $\hat{\boldsymbol{L}}$ a operátory $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_\pm$ vyjádřit takto:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_y &= \mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_z &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \hat{L}^2 &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \\ \hat{L}_+ &= \hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_- &= \hbar\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \end{aligned}$$

všimněme si, že žádný z operátorů neobsahuje derivaci podle r; to znamená, že radiální závislost vlnové funkce nemá vliv na moment hybnosti

- Už víme, že existují společné vlastní stavy $\hat{L}^2$ a L_z indexované kvantovými čísly j, m. Označme jejich vlnovou funkci ve sférických souřadnicích jako $Y_{jm}(\theta, \varphi)$ (závislost na r prozatím neuvažujeme)
- Platí tedy $\hat{L}_z Y_{jm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{jm}(\theta, \varphi)$ a proto

$$\frac{\partial Y_{jm}}{\partial\varphi} = \mathrm{i}mY_{jm} \quad \Rightarrow \quad Y_{jm}(\theta, \varphi) = P_{jm}(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{12}$$

- Můžeme mít m poločísené? Nikoli: chceme-li, aby $Y_{jm}(\theta, \varphi)$ byla jednoznačná funkce, pak musí být periodickou funkcí úhlu φ s periodou 2π. Vzhledem k faktoru $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$ pak m musí být celé číslo, $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, a následkem toho i j musí být celé, $j = 0, 1, 2, \ldots$

- Ovšem časem jistě nastane situace, kdy čtverec vlastní hodnoty $\hat{L}_z$ přeroste vlastní hodnotu $\hat{L}^2$, což by bylo divné, neboť $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$. Proto asi dojde k podobnému „useknutí" jako u harmonického oscilátoru
- Abychom to ukázali řádně, využijeme identit
$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z, \quad \hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$$
- Protože $\hat{L}_-$ a $\hat{L}_+$ jsou vzájemně sdružené, platí pro normu vektorů $\hat{L}_+\psi$ a $\hat{L}_-\psi$ následující vztahy:
$$0 \leq ||\hat{L}_\pm\psi||^2 = \langle\psi|\hat{L}_\mp\hat{L}_\pm|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z)|\psi\rangle = \lambda - \gamma^2 \mp \hbar\gamma \tag{10}$$
- Tedy $\lambda \geq \gamma(\gamma \pm \hbar)$.
- Zřejmě platí $\lambda \geq 0$ [9], proto položíme $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$, kde j je nějaké nezáporné reálné číslo. K jakémukoli $\lambda \geq 0$ lze nalézt $j \geq 0$ tak, aby to platilo.
- Zároveň položíme $\gamma = \hbar m$, kde m je nějaké reálné číslo.
- Z nerovností $\lambda \geq \gamma(\gamma \pm \hbar)$ pak plyne, že
$$j(j+1) \geq m(m+1), \qquad j(j+1) \geq m(m-1) \qquad \Rightarrow \quad -j \leq m \leq j$$
- Opakovaným působením operátoru $\hat{L}_+$ na ψ stále zvětšujeme m, ale j zůstává konstantní. Jakmile nastane $m > j$, musí už být příslušný stav nulovým vektorem, jinak bychom měli spor s faktem, že $m \leq j$.
- Zároveň podle rovnice (10) víme, že toto nastane, právě když platí rovnost $\lambda - \gamma^2 - \hbar\gamma = 0$ neboli $m = j$. Pro dané j tedy budou možné hodnoty m tyto: $j, j-1, j-2, \ldots$
- Podobnými úvahami o L_- zjistíme, že další možné hodnoty m jsou $m = -j, -j+1, \ldots$
- Tyto dvě řady musejí navazovat, proto rozdíl $j - (-j) = 2j$ musí být celočíselý.
- Proto j může nabývat hodnot $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$ a pro dané j může m nabývat hodnot $-j, -j+1, \ldots, j-1, j$
- Možné kombinace m, j tedy jsou:

j	m
0	0
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1	$-1, 0, 1$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
2	$-2, -1, 0, 1, 2$
$\frac{5}{2}$	$-\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
3	$-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$
$\vdots$	$\vdots$

- Toto **kvantování momentu hybnosti** má dalekosáhlé důsledky, např. pro rotační spektra molekul, stavy elektronů v atomu, výběrová pravidla pro přechod mezi stavy atd.

[9] lze to ukázat třeba tak, že pro stav $|\psi\rangle$ (je-li normován) platí $\lambda = \langle\psi|\hat{L}^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{L}_x^2|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{L}_y^2|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{L}_z^2|\psi\rangle$ a každý z posledních třech členů je nezáporný – např. $\langle\psi|\hat{L}_x^2|\psi\rangle = |\,L_x|\psi\rangle\,|^2$ atd.

- Zvolme nyní $\lambda = -\mathrm{i}\frac{\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle}{2\langle\hat{V}^2\rangle}$. Toto číslo je reálné, protože $\langle\varphi|\hat{V}\hat{U}|\varphi\rangle = (\langle\varphi|\hat{U}\hat{V}|\varphi\rangle)^*$ ($\hat{U}, \hat{V}$ jsou hermitovské!) a tedy $\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle$ je ryze imaginární. Pak
$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\hat{U}^2\rangle - \frac{\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle^2}{4\langle\hat{V}^2\rangle} + \frac{\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle^2}{2\langle\hat{V}^2\rangle} = \langle\hat{U}^2\rangle + \frac{\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle^2}{4\langle\hat{V}^2\rangle} \geq 0$$
- Proto
$$\langle\hat{U}^2\rangle\langle\hat{V}^2\rangle \geq -\frac{\langle[\hat{U},\hat{V}]\rangle^2}{4}$$
- Nakonec tak dostáváme
$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|}{2} \tag{7}$$
- Příklad: pro $\hat{A} = \hat{x}, \hat{B} = \hat{p}$ máme $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar\hat{1} \Rightarrow \langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle = \mathrm{i}\hbar$, což dává nejznámější relaci neurčitosti – relaci pro hybnost a souřadnici: $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$
- Jiný příklad – složky momentu hybnosti: protože $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_z$, platí $\Delta L_x \Delta L_y \geq \hbar\langle L_z\rangle/2$ a cyklicky; důsledkem je, že pokud má mít moment hybnosti všechny tři složky určité, musí být všechny nulové
- Lze ukázat, že jsou-li $\hat{A}, \hat{B}$ komutující hermitovské operátory, pak existuje báze Hilbertova prostoru z jejich společných vlastních stavů
- *Příklady na relaci neurčitosti pro souřadnici a hybnost*
  - **Odhad velikosti atomu vodíku:** Předpokládejme, že elektron je zhruba v oblasti o poloměru r. Podle relace neurčitosti je neurčitost jeho hybnosti ve všech směrech asi $\Delta p = \hbar/\Delta x \approx \hbar/2r$. Kinetická a potenciální energie je tedy přibližně
$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \approx \frac{3\hbar^2}{8mr^2}, \qquad V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$
    Celková energie tedy
$$E = T + V \approx \frac{3\hbar^2}{8mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$
    Elektron by se rád přiblížil co nejtěsněji k jádru, aby snížil svoji potenciální energii, ale pokud bude jen v malé oblasti okolo jádra, bude zase velká jeho kinetická energie. Celková energie nabývá minima pro určité $r = r_0$:
$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}r} = -\frac{3\hbar^2}{4mr^3} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_0 = \frac{3\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$
    Po dosazení hodnot pro elektron vyjde 0.40×10^{-10} m. To jsou asi tři čtvrtiny Bohrova poloměru atomu, tedy typického poloměru atomu vodíku. Z relací neurčitosti tedy můžeme získat velmi dobrý odhad velikosti atomu.
  - **Odhad energie částice v nekonečně hluboké jámě:** Částice je v jámě o šířce a. Podle relace neurčitosti je neurčitost její hybnosti asi $\Delta p = \hbar/a$. Kinetická, potenciální a celková energie je tedy přibližně
$$T = \frac{1}{2}mv^2 \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \qquad V = 0, \qquad E = T + V \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Jak se dozvíme později, je skutečná energie $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, tedy π^2 krát větší. Vidíme ale, že relace neurčitosti dává celkem dobrý odhad energie.

– **Odhad rozlišovací schopnosti dalekohledu (např. astronomického):** Nechť je průměr objektivu d. Foton přilétající z hvězdy je tedy lokalizován v příčném směru s přesností d. Jeho příčná složka hybnosti tedy nemůže být určena přesněji než $\hbar/d$. Poměr příčné hybnosti a podélné hybnosti je ovšem roven úhlu, pod kterým foton dopadá do objektivu. Tedy neurčitost úhlu je asi

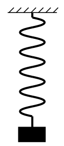
$$\Delta\varphi = \frac{\Delta p_{\text{příč.}}}{p_{\text{pod.}}} \approx \frac{\frac{\hbar}{d}}{\frac{2\pi\hbar}{\lambda}} = \frac{\lambda}{2\pi d}$$

Dalekohled tedy nedokáže rozlišit objekty úhlově menší než přibližně $\lambda/2\pi d$, proto čím větší objektiv, tím lepší rozlišení. Proto se staví velké dalekohledy.

7 Aplikace

7.1 Harmonický oscilátor

- Oscilátor – velice častá situace, kdykoli existuje nějaká síla vracející těleso do rovnovážné polohy
- Většina reálných oscilátorů není harmonických, ale pro malé výchylky je lze často za harmonické považovat
- Klasický oscilátor – např. závaží na pružině nebo kyvadlo



- Kvantový oscilátor – např. dvouatomové molekuly Cl_2, HCl nebo víceatomové molekuly CO_2 (to je spíše systém spřažených oscilátorů); energie soustavy je nejmenší při určité vzdálenosti atomových jader, při vzdálení či přiblížení jader se tedy objeví síla, která se snaží vrátit situaci zpět; není přesně harmonický
- Také mód elektromagnetického pole, podobně jako kmitový mód struny, se chová jako HO, tento oscilátor je přesně harmonický
- Hamiltonián harmonického oscilátoru (H.O.):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{8}$$

kde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

- V souřadnicové reprezentaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

- Tyto komutační relace plynou z vlastností trojrozměrných těles při rotacích[6]
- Pro orbitální moment lze navíc komutační relace získat přímým výpočtem z jejich definice (viz rovnice (11) v následujícím oddílu)
- Protože složky M.H. spolu nekomutují, nemohou současně všechny nabývat přesných hodnot kvůli relacím neurčitosti[7]
- Když nemůžeme najít společné vlastní stavy dvou složek momentu hybnosti, zkusme to alespoň pro jednu složku, např. $\hat{L}_z$[8]
- Ukazuje se ale, že zadání hodnoty samotného $\hat{L}_z$ by nestačilo k jednoznačnému určení stavu; vezměme proto navíc čtverec velikosti momentu:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

který komutuje se všemi složkami momentu: $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$; budeme hledat společné vlastní stavy $\hat{L}^2$ a L_z

- Definujme vzájemně sdružené operátory

$$\hat{L}_+ = L_x + \mathrm{i}L_y, \quad \hat{L}_- = L_x - \mathrm{i}L_y$$

- Komutační relace

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar L_+, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar L_-, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$$

- Předpokládejme, že jsme našli stav ψ, který je vlastním stavem jak $\hat{L}^2$, tak $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}^2\psi = \lambda\psi, \quad \hat{L}_z\psi = \gamma\psi$$

- Co se stane, zapůsobíme-li na ψ operátorem $\hat{L}_+$? Výsledkem bude opět vlastní stav jak $\hat{L}^2$, tak $\hat{L}_z$, což plyne z komutačních relací:

$$\hat{L}^2\hat{L}_+\psi = \hat{L}_+\hat{L}^2\psi = \lambda\hat{L}_+\psi, \quad \hat{L}_z\hat{L}_+\psi = \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar)\psi = (\gamma + \hbar)\hat{L}_+\psi,$$

tedy $\hat{L}_+\psi$ je vlastním stavem $\hat{L}^2$ se stejnou vlastní hodnotou jako měl ψ a současně vlastním stavem $\hat{L}_z$ s vlastní hodnotou o $\hbar$ větší, než měl ψ.

- Podobně je tomu se stavem $\hat{L}_-\psi$, ovšem vlastní hodnota $\hat{L}_z$ je o $\hbar$ menší, než měl ψ.
- Máme tedy podobnou situaci jako u harmonického oscilátoru. Jakmile nalezneme nějaký vlastní stav $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$, můžeme vytvářet další a další vlastní stavy opakovaným působením $\hat{L}_\pm$ na ψ. Přitom se mění vlastní hodnota $\hat{L}_z$ po skocích $\hbar$, ale vlastní hodnota $\hat{L}^2$ se nemění

[6] Moment hybnosti je generátorem rotace podobně jako hybnost je generátorem translace. Pokud nějaké těleso pootočíme nejprve kolem osy o_1 o úhel φ_1 a potom kolem osy o_2 o úhel φ_2, dostaneme jinou polohu tělesa, než když rotace provedeme v opačném pořadí. V případě, že o_1 je osa x a o_2 je osa y a $\varphi_1, \varphi_2 \ll 1$, liší se obě výsledné polohy tělesa natočením kolem osy z o úhel $\varphi_1\varphi_2$. To se v kvantové mechanice odráží ve faktu, že $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_z$

[7] jedinou výjimkou je případ, kdy všechny složky $\boldsymbol{L}$ jsou rovny nule; pak je na pravé straně relace neurčitosti (7) nula, proto mohou jednotlivé veličiny mít současně přesnou hodnotu

[8] vše, co bude následovat, by fungovalo i pro složky $\hat{L}_x$ a $\hat{L}_y$; samotnou osu z můžeme vybrat zcela libovolně, nezávisle na vnějších podmínkách

– Kvůli symetrii ve fázovém prostoru nejprve zavedeme nové operátory $\hat{X}, \hat{P}$, které vzniknou ze starých $\hat{x}, \hat{p}$ stejným naškálováním jako v klasickém případě:

$$\hat{X} = \hat{x}\sqrt{m\omega}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}}, \quad \Longrightarrow \quad \hat{H} = \frac{\omega}{2}\,(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$$

– Zavedeme operátor fázoru $\hat{z} = \hat{X} + \mathrm{i}\hat{P}$ a k němu sdružený operátor $\hat{z}^\dagger = \hat{X} - \mathrm{i}\hat{P}$. Vydělením faktorem $1/\sqrt{2\hbar}$ pak

– Operátor $\hat{a}$ je vlastně, až na faktor $1/\sqrt{2\hbar}$, kvantovým operátorem fázoru:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p} = \frac{\hat{X} + \mathrm{i}\hat{P}}{\sqrt{2\hbar}} = \frac{\hat{z}}{\sqrt{2\hbar}}, \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{z}^\dagger}{\sqrt{2\hbar}}$$

- Shrnutí harmonického oscilátoru: jeho energie je kvantovaná, nejnižší hladina má kladnou energii $\hbar\omega/2$, každá další je vzdálena o $\hbar\omega$ od té předchozí, rozsáhlé důsledky v mnoha oblastech fyziky

7.2 Moment hybnosti

- Jedna z velmi důležitých a zajímavých veličin v kvantové fyzice
- Moment hybnosti (M.H.) je základní veličina požívaná při popisu atomů a molekul, úzce souvisí s jejich energií
- Moment hybnosti částice bez vnitřní struktury je spojen s jejím pohybem (tj. její polohou a hybností), jde o tzv. **orbitální moment hybnosti $\hat{\boldsymbol{L}}_\mathrm{o} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$**
- Existuje i vnitřní moment hybnosti, tzv. **spin**, který může být nenulový i tehdy, je-li částice v klidu
- Budeme nyní zkoumat celkový moment hybnosti kvantového systému vzhledem k danému bodu, bez rozlišování na orbitální nebo spinový
- Podobně jako operátor hybnosti zprostředkoval posunutí vlnové funkce, operátor M.H. zprostředkuje její pootočení
- Kvantování momentu hybnosti plyne z vlastností našeho trojrozměrného prostoru při rotacích
- I skládání obyčejných rotací v prostoru je málo představitelné, v kvantové fyzice má dalekosáhlé důsledky
- Při hledání vlastních stavů momentu hybnosti postupujeme algebraicky, obdobně jako u harmonického oscilátoru
- Vyjdeme z *komutačních relací* pro operátory složek momentu hybnosti

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = \mathrm{i}\hbar \sum_{l=1}^{3} \varepsilon_{ikl} \hat{L}_l,$$

kde ε_{ikl} je Levi-Civitův antisymetrický symbol. Tedy

$$\boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_y}$$

- Tuto rovnici bychom mohli řešit a najít možné hodnoty energie a stavy; my se ale o totéž pokusíme algebraicky, bez použití souřadnicové reprezentace
- Definujeme operátory

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}, \qquad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}$$

- Operátory $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$ jsou vzájemně hermitovsky sdružené, samy o sobě nejsou hermitovské.
- Komutační relace pro $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$:

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{1}}$$

- Pomocí $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ vyjádříme hamiltonián takto:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\,(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

(v poslední rovnosti jsme využili komutační relaci)

- Předpokládejme, že jsme našli nějaký stacionární stav ψ s vlastní hodnotou E, tedy

$$\frac{\hbar\omega}{2}\,(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})\psi = E\psi.$$

Zkusme, jak působí hamiltonián na stavy $\hat{a}\psi$ a $\hat{a}^\dagger\psi$, přičemž opět využijeme komutační relaci $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{a}\psi &= \frac{\hbar\omega}{2}\,(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}\psi = \frac{\hbar\omega}{2}\,\hat{a}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - 2)\psi = (E - \hbar\omega)\hat{a}\psi \\
\hat{H}\hat{a}^\dagger\psi &= \frac{\hbar\omega}{2}\,(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}^\dagger\psi = \frac{\hbar\omega}{2}\,\hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + 2)\psi = (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\psi.
\end{aligned}$$

- Tedy i stavy $\hat{a}\psi$ a $\hat{a}^\dagger\psi$ jsou vlastními stavy hamiltoniánu s vlastními hodnotami posunutými o $\mp\hbar\omega$. Z libovolného stacionárního stavu ψ tedy dokážeme generovat nové stacionární stavy $\hat{a}^n\psi, (\hat{a}^\dagger)^n\psi$. Jde to tak ale donekonečna? Asi ne dolů, protože těžko si představit, že by energie harmonického oscilátoru mohla být záporná. A skutečně: platí

$$0 \le ||\hat{a}|\psi\rangle||^2 = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)||\psi\rangle||^2, \tag{9}$$

proto $E \ge \hbar\omega/2 = E_\mathrm{min}$

- Při každé aplikaci $\hat{a}$ se sníží hodnota energie o $\hbar\omega$, takže se někdy musíme dostat pod mezní hodnotu E_min – není to spor s rovnicí (9)?
- Co když budeme mít stav s energií právě rovnou E_min a zapůsobíme na něj anihilačním operátorem? Výsledkem bude nulový vektor podle rovnice (9), takže stav s nižší energií již nedostaneme a spor je odstraněn
- To znamená, že nejnižší vlastní hodnota hamiltoniánu je přesně $\hbar\omega/2$ a vlastní hodnoty energie jsou tedy $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, kde $n = 0, 1, 2, \ldots$

- Platí $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2)$, proto operátor $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ má vlastní hodnoty $0, 1, 2\ldots$, říkáme mu **operátor počtu excitací**
- Máme tedy úplný systém vlastních stavů Hamiltoniánu (a současně operátoru $\hat{n}$), který označíme $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots, \}$, a platí

$$\boxed{\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \quad \hat{n}|n\rangle = n\,|n\rangle}$$

- Nejnižší možná hodnota energie je $\hbar\omega/2$. Je nějaký fyzikální důvod pro to, že není nulová? Ano, kdyby byla nulová, musela by být částice v klidu (aby byla nulová kinetická energie) a být v bodě $x = 0$ (aby byla nulová potenciální energie). To však není možné kvůli relacím neurčitosti
- Je to věc jakéhosi „kompromisu“ souvisejícího s relacemi neurčitosti: aby byla co nejmenší potenciální energie, částice se snaží být blízko bodu $x = 0$. Ale pokud by byla příliš dobře lokalizovaná, zase by byla velká neurčitost hybnosti a kinetická energie by byla velká. Minimum celkové energie nastává pro lokalizaci ani příliš úzkou, ani moc širokou, ale někde mezi
- Žádný H.O. tedy nemůže být úplně v klidu, vždy má nějakou kladnou energii
- Pro běžné oscilátory kolem nás – např. kyvadlo délky 30 cm má frekvenci $\omega = 5.7$ rad/s, proto kvantum energie $\hbar\omega$ je asi 6×10^{-34} J – naprosto zanedbatelná energie
- Ale pro molekuly atd. – nesrovnatelně vyšší frekvence: např. molekula HCl má „tuhost vazby“ cca 480 N/m a redukovanou hmotnost 0,98 amu, tedy $\omega = 5 \times 10^{14}$ Hz a kvantum tedy bude $\hbar\omega = 0{,}3$ eV
- Energie vibrací molekuly nemůže nabývat libovolných hodnot, ale jen diskrétních – dobře pozorovatelné ve **vibračních spektrech molekul**
- Světlo – je ekvivalentní souboru H.O. Tedy celou teorii H.O. můžeme aplikovat na mód (způsob kmitání) světla v dutině nebo i v otevřeném prostoru
- Důsledek – energie elektromagnetického pole se nemůže měnit po libovolně malých množstvích, ale po kvantech o velikosti $\hbar\omega(= h\nu$, kde ν je frekvence světla) – tzv. **fotonech**
- Stav $|0\rangle$ – tzv. vakuum – nejnižší možný stav, přesto je v něm nějaká energie a nenulová fluktuace elektromagnetického pole
- Stav $|n\rangle$ – stav s n fotony a $\hat{n}$ – operátor počtu fotonů
- Můžeme mít stavy světla, které jsou superpozicí stavů s různým počtem fotonů, např. $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$
- Na základě předpokladu o kvantování světla lze odvodid **Planckův vyzařovací zákon**, který nám říká, jak září žhavá tělesa; bez předpokladu kvantování pole bychom dostali nesmyslný výsledek, tělesa by zářila nekonečně silně, celá fyzika by musela být jiná
- **Fotoelektrický jev** – jeho charakter rovněž prokazuje, že světlo interaguje s hmotou po kvantech, tj. že světlo je kvantované

- Kmity krystalové mřížky – soubor spřažených oscilátorů, každý kmitový mód je kvantován; tato kvanta – tzv. **fonony**, daly by se vznešeně nazvat „částice zvuku“
- Vraťme se k vlastním stavům hamiltoniánu a uvažujme normovaný n-tý stav $|n\rangle$. Bude stav $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ také normovaný? Nikoli:

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{n}+1)|n\rangle = n + 1$$

- Stav $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ tedy není normován a je roven $\sqrt{n+1}$-násobku normovaného stavu $|n+1\rangle$:

$$\boxed{\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$$

(druhá rovnice plyne z podobných úvah o stavu $\hat{a}|n\rangle$)

- Chceme-li nyní získat stacionární řešení Schrödingerovy rovnice v souřadnicové reprezentaci, stačí si uvědomit, že $\hat{x} \to x$, $\hat{p} \to -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x$ a proto

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} + \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{\sqrt{m\omega}}\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

- Pro základní stav ψ_0 s energií $E = \hbar\omega/2$ platí $\hat{a}\psi_0 = 0$. Nalezneme jej tedy řešením diferenciální rovnice

$$\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) + \frac{\mathrm{d}\psi_0(x)}{\mathrm{d}x} = 0,$$

kterou řešíme separací proměnných. Po normování dostáváme vlnovou funkci základního stavu ve tvaru

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\,\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

- Neurčitosti souřadnice a hybnosti v tomto stavu jsou

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \qquad \Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$$

- Vlnové funkce dalších stacionárních stavů $|1\rangle, |2\rangle, \ldots$ získáme opakovanou aplikací operátoru $\hat{a}^\dagger$ na ψ_0
- **Fyzikální význam operátorů** $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$:
  - Stav klasického harmonického oscilátoru je dán amplitudou A a fází φ, $x(t) = \Re(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi})$ a lze ho reprezentovat jako vektor (tzv. fázor) ve fázovém prostoru (x, p). Časový vývoj je reprezentován oběhem tohoto bodu po *elipse* okolo počátku souřadnic fázového prostoru. Vhodným naškálováním souřadnice a hybnosti (zavedním $X = x\sqrt{m\omega}$, $P = p/\sqrt{m\omega}$) lze docílit toho, že bod obíhá po *kružnici* kolem počátku $(X = 0, P = 0)$ úhlovou rychlostí ω:

$$X(t) = X(0)\cos\omega t + P(0)\sin\omega t, \quad P(t) = -X(0)\sin\omega t + P(0)\cos\omega t$$

  - Ekvivalentně lze reprezentovat stav harmonického oscilátoru tzv. fázorem – komplexním číslem $z = X + \mathrm{i}P$. Časový vývoj fázoru je dán jednoduchým vztahem $z(t) = z(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$
  - Jak je to s *kvantovým* harmonickým oscilátorem?