$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t)$$

Lubomír Skála

ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY

ACADEMIA

Lubomír Skála

ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY

ACADEMIA
PRAHA 2005

Obsah

Předmluva

Tato učebnice kvantové mechaniky vznikla na základě přednášky Úvod do kvantové mechaniky, konané autorem v rozsahu dvou hodin přednášek a dvou hodin cvičení týdně na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze. Vzhledem k úvodnímu charakteru tohoto textu jsem se snažil o úplnost výkladu a srozumitelnost na úrovni vhodné pro čtenáře, kteří se s kvantovou mechanikou dosud nesetkali, mají však již určité nepříliš rozsáhlé znalosti z klasické fyziky. Díky tomu může tuto učebnici používat poměrně široký okruh zájemců z okruhu studentů vysokých škol, doktorandů, vědeckých pracovníků i dalších zájemců o kvantovou mechaniku. V souladu s jejím názvem jsem se v této knize omezil na výklad hlavních principů kvantové mechaniky, souvislosti kvantové a klasické mechaniky a ilustraci teorie na jednoduchých problémech. Výklad končí výpočtem atomu vodíku, úvodem do relativistické kvantové mechaniky a stručnou diskusí některých obecnějších otázek souvisejících s interpretací kvantové mechaniky a jejími moderními aplikacemi. Kapitoly, které lze při prvním čtení vynechat, jsou označeny hvězdičkou.

Vzhledem k relativní obtížnosti kvantové mechaniky a nezbytnosti jejího procvičení na příkladech jsem do zvláštní kapitoly zařadil poměrně velké množství řešených příkladů, jejichž řazení přibližně odpovídá výkladu v hlavním textu. Příklady nejen ilustrují výklad hlavního textu na řešení konkrétních problémů, ale často ho i dále rozvíjejí. Vybrané fyzikální konstanty nezbytné pro řešení příkladů jsou uvedeny v závěru knihy.

Některé doplňující partie převážně matematického charakteru lze najít v dodatcích. Knihu mohou proto používat i matematicky méně erudovaní čtenáři.

Seznam literatury je poměrně obsáhlý a obsahuje i odkazy na původní práce zakladatelů kvantové mechaniky.

Recenzentům RNDr. V. Kapsovi, CSc., a doc. RNDr. J. Klímovi, CSc., děkuji za kritické přečtení rukopisu a četné podněty, kterými pomohli k vylepšení textu. Kolegové RNDr. O. Bílek, Mgr. J. Králík, Mgr. T. Novák a Mgr. V. Tichý přispěli dalšími cennými připomínkami. Mgr. Z. Morávek, Ph.D., si zaslouží poděkování za nakreslení většiny obrázků. Obrázek na obálce je ze skenovacího tunelového mikroskopu na Matematicko-fyzikální fakultě UK (atomy na (111) povrchu monokrystalu křemíku, zobrazená oblast má velikost 21 nm x 21 nm). Jeho autory jsou doc. RNDr. I. Ošťádal, CSc., doc. RNDr. P. Sobotík, CSc., a Mgr. P. Kocán, Ph.D. Studentům druhého ročníku fyziky na Matematicko-fyzikální fakultě UK v letech 2001–2004 děkuji za pomoc s odstraňováním chyb v rukopise a přípravou některých příkladů a obrázků.

Děkuji rovněž Ediční radě Akademie věd České republiky, která rozhodla o finančním příspěvku AV ČR na vydání této učebnice. Tento finanční příspěvek umožnil výrazné snížení ceny výtisku.

Na závěr děkuji vedoucí redakce přírodních a technických věd nakladatelství Academia Ing. Jitce Zykánové i ostatním členům redakce za vzornou spolupráci při přípravě této knihy do tisku.

V Praze dne 19. února 2005

Lubomír Skála

Kapitola 1

Vznik kvantové mechaniky

All science is either physics or stamp collecting.
Ernest Rutherford

1.1 Historický přehled

Na konci 19. století se řada fyziků domnívala, že pomocí tehdy známých zákonů lze objasnit všechny fyzikální děje[1].

Popis fyzikálních dějů se v 19. století dělil na dvě velké skupiny. Na jedné straně byl pomocí rovnic klasické mechaniky popisován pohyb částic. Na straně druhé se popis fyzikálních dějů zaměřoval na vlny, ať už to bylo v mechanice kontinua, teorii kmitů strun, optice či teorii elektromagnetických vln (Maxwellovy rovnice, 1861). Tyto dvě charakteristiky hmoty, její částicové a vlnové vlastnosti, se zdály být navzájem neslučitelné. Následující vývoj však ukázal, že tomu tak není.

Jak dnes víme, jedním z charakteristických rysů mikrosvěta je diskrétnost hodnot fyzikálních veličin neboli jejich kvantování. Tyto vlastnosti se projevovaly už tehdy například v chemii, kde se předpokládala existence základních kamenů hmoty — atomů (diskrétnost hmoty). Pojem atomu pochází již ze starověku od Démokrita a vznikl na základě filozofické spekulace — myšlenky, že se veškerá hmota skládá ze stejných drobných částic — atomů. Periodická soustava prvků byla v 19. století sestavena na základě empirických faktů, nebyla však teoreticky objasněna. Dalším projevem kvantování byla čárová spektra celé řady atomů a molekul (například Balmerova série atomu vodíku, 1885), která ukazovala na diskrétnost energie v těchto systémech, z teoretického hlediska však byla záhadou.

V devadesátých letech 19. století se pak začaly objevovat další jevy, které se nedaly vysvětlit v rámci klasické fyziky (viz také [14] nebo [57]) a které souvisí

[1] Ve fyzikální části katalogu University of Chicago na rok 1898/1899 Albert Michelson napsal: „It seems probable that most of the grand underlying principles have been firmly established and that further advances are to be sought chiefly in the rigorous application of these principles to all the phenomena which come under our notice.“

s ději, které se odehrávají uvnitř atomů. Jako příklad uveďme Röntgenovo záření (1895), radioaktivitu (Becquerel, 1896) a objev elektronu (Thomson, 1897).

Současně s těmito objevy došlo i k prudkému rozvoji experimentálních technik. Jako příklad uvádíme difrakci Röntgenova záření (Laue, 1912), jejíž pomocí lze získat Laueův difrakční diagram, z něhož pak lze určit rozložení atomů v krystalové mřížce. Dalším příkladem je mlžná komora (Wilson 1912), přístroj používaný ke sledování trajektorií ionizovaných částic. Podobně ionizační Geigerův–Müllerův počítač (Geiger, 1913) zaznamenává dopad částic na detektor. Postupně se tak začala objevovat řada experimentálních poznatků, o nichž nikdo nevěděl, jak je vysvětlit (atomová a molekulová spektra, viskozita, elasticita, elektrická a tepelná vodivost, index lomu aj.).

Tato tzv. *krize klasické fyziky* se začala ještě jasněji projevovat začátkem 20. století. Jak známo, při pokusech objasnit spektrum absolutně černého tělesa, kde klasická fyzika zcela selhala, došel Planck v roce 1900 k závěru, že pozorované spektrum lze objasnit pouze za předpokladu, že absolutně černé těleso a elektromagnetické záření, s nímž je v rovnováze, si vyměňují energii v jakýchsi dávkách či kvantech, která jsou rovna $h\nu$

$$E = h\nu = \hbar\omega. \tag{1.1}$$

Zde $h \approx 6,626 \times 10^{-34}$ Js je Planckova konstanta, $\hbar = h/(2\pi) \approx 1,054 \times 10^{-34}$ Js je odvozená Planckova konstanta často používaná v kvantové fyzice, ν je frekvence elektromagnetického záření a $\omega = 2\pi\nu$ je odpovídající kruhová frekvence. Tento poznatek opět naznačuje, že elektromagnetické záření má kromě vlnových vlastností i vlastnosti částicové (korpuskulární). Zmíněná kvanta elektromagnetického záření se nazývají *fotony*. Dnes je známo, že i záření kosmického pozadí o teplotě 2,7 K splňuje rozdělovací zákon, nalezený Planckem.

Dalším významným krokem byla teorie fotoefektu (Einstein, 1905), při kterém se předává energie fotonu elektronu v pevné látce. Tento efekt se podařilo Einsteinovi objasnit, když předpokládal, že dopadající foton má energii danou vztahem (1.1). Později byl zaveden i vztah pro impulz fotonu

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \tag{1.2}$$

kde $\mathbf{k}$ je vlnový vektor dopadajícího elektromagnetického záření o velikosti $k = 2\pi/\lambda$ a λ je vlnová délka související s frekvencí ν vztahem $\lambda\nu = c$, kde c označuje rychlost světla. Vidíme, že kvantu elektromagnetického vlnění se kromě energie $\hbar\omega$ připisuje i hybnost (impulz) $\hbar\mathbf{k}$, tj. další korpuskulární vlastnost. Za teorii fotoefektu dostal Einstein Nobelovu cenu (1921). Dalším významným příspěvkem Einsteina k této problematice byla jeho teorie měrných tepel (Einstein, 1907). Využitím předpokladu, že energie kmitů krystalů je násobkem $\hbar\omega$, se Einsteinovi podařilo objasnit nízkoteplotní chování měrných tepel, které je ve sporu s ekvipartičním teorémem, známým z termodynamiky a statistické fyziky.

Pojem atomu dostal svou vědeckou podobu už začátkem 19. století, a to zásluhou chemie. Ve fyzice se začalo uvažovat o vnitřní struktuře atomů až na přelomu 20. století. Vše ukazovalo na to, že atomy jsou složené elektrodynamické soustavy a že jejich stavebními kameny jsou nabité částice.

Thomsonův model atomu z konce 19. století předpokládal, že kladný náboj je v atomu spojitě rozprostřen v kouli o určitém poloměru a v tomto kladném náboji se pohybují tehdy již známé elektrony. Významným krokem k dalšímu pochopení struktury atomů byly experimenty Rutherforda (1911), při kterých byl zkoumán rozptyl částic α na atomech. Ukázalo se, že experimentální výsledky lze objasnit jedině za předpokladu, že celý kladný náboj je soustředěn v bodovém jádru atomu. To vedlo k tzv. *planetárnímu modelu atomu*, neumožňovalo to však objasnit stabilitu atomů. Podle klasické fyziky musejí elektrony obíhající jádro kvůli svému nenulovému zrychlení vyzařovat elektromagnetické záření a ztrácet energii. Za poměrně krátkou dobu, řádově ps, by tak muselo dojít k vyzáření energie elektronů a kolapsu atomů. To se nepozoruje a atomy a molekuly jsou v základním stavu stabilní. Je zřejmé, že klasická fyzika v případě atomů a molekul zcela selhává.

Určitý pokrok v tomto směru znamenala Bohrova kvantová teorie (1913). Podle Bohrovy teorie je třeba z pohybů částice možných podle klasické fyziky vybrat jen pohyby splňující Wilsonovu–Sommerfeldovu kvantovací podmínku (Wilson, 1915)

$$\oint p\,\mathrm{d}q = nh, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{1.3}$$

kde p a q jsou kanonicky sdružený impulz (hybnost) a souřadnice. Integrace se zde provádí přes cyklický pohyb ve fázovém prostoru. V případě více než jednoho stupně volnosti se tato podmínka aplikuje na každý stupeň volnosti zvlášť. Druhým předpokladem v Bohrově teorii je, že takto vybrané trajektorie jsou stabilní stacionární stavy, ve kterých nedochází k výše zmíněnému kolapsu[2]. Třetím postulátem je vzorec, podle kterého se počítá frekvence ω_{mn} vyzářeného či absorbovaného elektromagnetického záření

$$\omega_{mn} = \frac{|E_m - E_n|}{\hbar}, \tag{1.4}$$

kde E_m a E_n jsou energie výchozího a konečného stavu při uvažovaném přechodu. Tento vzorec vyjadřuje zákon zachování energie. Pro atom vodíku dostal Bohr

---

[2]Bohr původně zformuloval své postuláty takto [N. Bohr, Philosophical Magazine **26** (1913), 1]:
(1) That the dynamical equilibrium of the systems in the stationary states can be discussed by help of the ordinary mechanics, while the passing of the systems between different stationary states can not be treat on that basis.
(2) That the latter process is followed by the emission of a *homogenous* radiation, for which the relation between the frequency and the amount of energy emitted is the one given by *Planck*' s theory.
Později upřesnil první postulát následujícím způsobem [N. Bohr, On the application of quantum theory to the structure of atoms. Part. I: The fundamental postulates. Supplement of the Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1924. Přeloženo z Zeitschrift für Physik **13** (1923), 117]: (1) The first postulate of the quantum theory for an isolated atomic system states that, among the kinematically conceivable relative motions of the particles of the atom, there exist certain states, the so–called stationary states, which are distinguished by a peculiar stability, shown by the fact, that every permanent change in the motion of the isolated system must consist in a complete transition from the original to another of these stationary states.

energie

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\mathrm{Ry}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{1.5}$$

kde 1 Ry $\approx 2,1799 \times 10^{-18}$ J = 13,605 eV je jeden Rydberg. Tento výsledek je v souladu s tzv. *Ritzovým kombinačním principem*[3], podle něhož lze spektroskopicky pozorované absorpční či emisní frekvence atomů popsat pomocí vzorce

$$\nu_{mn} = cR\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right), \tag{1.6}$$

kde c je rychlost světla, R je Rydbergova konstanta a m a n jsou přirozená čísla. Existence energetických hladin elektronů v atomech byla později potvrzena experimenty Francka a Hertze. Zjednodušená myšlenka těchto experimentů spočívá v tom, že svazek elektronů známé energie přechází přes zředěný plyn. Po průchodu plynem pak mají některé elektrony jinou energii, ale změna energie je diskrétní. Bohužel, Bohrova teorie zcela selhala u systémů složitějších, než je atom vodíku nebo vodíku podobný ion s jediným elektronem.

Comptonův jev (1922), při němž byl zkoumán rozptyl Röntgenových paprsků na elektronech, byl důkazem reálné existence kvant elektromagnetického pole s energií $E = \hbar\omega$ a impulzem $p = E/c = \hbar\omega/c$. Comptonův jev se liší od fotoelektrického jevu tím, že foton odevzdává energii elektronu jen částečně.

V roce 1925 Uhlenbeck a Goudsmit objevili spin elektronu, pozoruhodnou vlastnost, která nemá klasickou analogii, hraje však významnou roli při objasnění stability hmoty (souvisí s tzv. Pauliho vylučovacím principem).

Neuspokojivá situace s Bohrovou teorií přetrvávala až do roku 1925, kdy Heisenberg během pobytu na ostrově Helgolandu vymyslel teorii, která se stala známou jako *maticová kvantová mechanika* [51]. Jeho myšlenkový postup lze popsat zhruba takto: Diskrétní stavy v atomech jsou, jak je vidět z předcházejícího výkladu, číslovány jedním indexem m. Při procesech, kdy dochází k přechodům mezi těmito stavy, je třeba, jako v případě ν_{mn}, použít dva indexy. To naznačuje, že zobecněné souřadnice p a q z klasické mechaniky je třeba v kvantové mechanice nahradit maticemi s maticovými elementy p_{mn} a q_{mn}. To znamená, že např. energie daná pro klasický jednorozměrný konzervativní systém Hamiltonovou funkcí

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V, \tag{1.7}$$

kde V je potenciální energie a m_0 hmotnost, se v Heisenbergově kvantové mechanice stane maticí nekonečného řádu

$$H_{mn} = \frac{(p^2)_{mn}}{2m_0} + V_{mn}. \tag{1.8}$$

[3]Původně byl tento princip zformulován takto: Jestliže máme dvě různé frekvence náležející ke stejné sérii, tak atom může vyzařovat i jejich rozdíl, tato frekvence však patří k jiné sérii.

Násobení matic není na rozdíl od funkcí používaných v klasické fyzice komutativní (pro matice obecně neplatí $qp = pq$). Heisenberg ukázal, že kvantová obdoba klasické Poissonovy závorky je úměrná komutátoru $[q,p]$ matic q a p

$$[q,p] = qp - pq, \tag{1.9}$$

a požadoval, aby zůstaly zachovány formální vlastnosti klasických Poissonových závorek i v kvantové mechanice. Tak se Heisenberg (1925) dostal k předpokladu

$$qp - pq = i\,\text{konst}, \tag{1.10}$$

kde konst je konstanta a q a p jsou matice. Řešením problému lineárního harmonického oscilátoru (Born a Jordan, 1925) [19] a atomu vodíku (Pauli, 1926) a požadavkem, aby se výsledky shodovaly s již známými teoretickými a experimentálními výsledky, lze ukázat, že konst $= \hbar$. Stacionární energie určoval Heisenberg tak, že pomocí vhodné transformace převedl matici H do diagonálního tvaru. Čísla na diagonále této matice (tzv. vlastní čísla) pak udávají energie jednotlivých stacionárních stavů. Při přechodu mezi těmito stacionárními stavy dochází k absorpci či emisi kvanta světla s frekvencí podle rovnice (1.4).

Nedostatkem Heisenbergovy maticové formulace kvantové mechaniky je značná obtížnost hledání transformací převádějících matice nekonečného řádu na diagonální tvar. Tento problém byl překonán s pomocí tzv. *vlnové kvantové mechaniky* navržené Schrödingerem.

V roce 1924 přišel de Broglie se zajímavou myšlenkou, že korpuskulárně–vlnové vlastnosti a vztahy (1.1) a (1.2) dosud používané pro elektromagnetické záření lze přenést i na volný elektron. Tato myšlenka byla skvěle potvrzena při experimentálním studiu rozptylu elektronů na krystalech niklu (Davisson a Germer, 1926). Nebylo samozřejmě příliš jasné, jaký je význam frekvence ω, vlnového vektoru $\mathbf{k}$ či vlnové délky λ pro elektron, nicméně to znamenalo korpuskulárně–vlnový přístup jak k fotonu, tak i k další částici, elektronu.

Této myšlenky, za kterou dostal de Broglie v roce 1929 Nobelovu cenu, se chopil Schrödinger a zavedl obecněji i pro elektron v potenciálovém poli tzv. *vlnovou funkci*, pro niž odvodil pohybovou rovnici, která od té doby nese jeho jméno (1926, [82]). V sérii článků pak nalezl nejen řešení této rovnice pro několik základních úloh kvantové mechaniky jako je atom vodíku nebo Zeemanův a Starkův jev, ale ukázal i ekvivalenci maticové a vlnové kvantové mechaniky (1926). Schrödingerova formulace kvantové mechaniky (někdy se používá i název vlnová mechanika) se ukázala z hlediska řešení praktických úloh vhodnější než Heisenbergova formulace a až na některé výjimky, např. když jsou příslušné matice konečného řádu, je dnes všeobecně používána k řešení kvantověmechanických problémů.

Problémem Schrödingerovy teorie zůstávala interpretace vlnové funkce. Tato otázka byla vyřešena Bornem v roce 1926, který zavedl tzv. *pravděpodobnostní interpretaci* kvantové mechaniky. Přestože se o této i dalších otázkách dodnes vedou diskuse, tato interpretace je dnes všeobecně přijata.

Kvantování elektromagnetického pole, tj. pole s nekonečným počtem stupňů volnosti, bylo provedeno Diracem (1927). Rovněž v roce 1927 zavedl Pauli do vlnové

Obrázek 1.1: Účastníci pátého Solvayovského kongresu v Bruselu v roce 1927. Tento kongres významně přispěl k formulaci základů kvantové mechaniky.

rovnice spin, objevený Uhlenbeckem a Goudsmitem. Obecnou formulaci kvantové mechaniky bez ohledu na její konkrétní matematickou reprezentaci zavedl Dirac v roce 1930. Rovněž Dirac nalezl relativistickou rovnici pro elektron objasňující existenci spinu a předpověděl existenci pozitronu (1928), později objeveného Andersonem a Neddermeyerem v kosmickém záření (1933). Následovaly další zajímavé kroky v rozvoji a aplikacích kvantové teorie, které však nevybočují zásadním způsobem z nastíněného přístupu a přesahují rámec tohoto úvodu. Proto se zde jimi nebudeme zabývat a odkazujeme čtenáře na jiné učebnice kvantové teorie, např. [16, 24, 28, 37, 38, 39, 40, 76].

Navzdory významnému pokroku v následujících letech, kdy byly mnohé otázky objasněny, diskuse o interpretaci kvantové mechaniky pokračuje až do dnešních dnů (podrobněji viz kap. 19).

1.2 Měření a pravděpodobnosti

V souvislosti s kvantováním fyzikálních veličin se v kvantové mechanice objevuje i pojem pravděpodobnosti, že určitá hodnota fyzikální veličiny bude při konkrétním měření naměřena. Předpokládáme-li, že při měření můžeme dostat několik různých výsledků, a předpokládáme-li, že jednotlivá měření jsou navzájem nezávislá, je zavedení pravděpodobnosti naměření určitého výsledku při opakovaných mnohonásobných měřeních obvyklým postupem známým z teorie pravděpodobnosti. Zvláštností kvantové fyziky je to, že ve shodě s experimentem předpokládá, že při sčítání pravděpodobností může dojít za určitých podmínek k interferenčním jevům podobně jako např. v optice v Youngově pokusu s rozptylem světla.

1.3 Rozptyl na dvojštěrbině

Známým experimentem ukazujícím podstatu interference je rozptyl monochromatického světla na dvojštěrbině (tj. dvou paralelních štěrbinách). Pokud by na dvojštěrbinu dopadal tok klasických částic, intenzita zčernání stínítka při obou otevřených štěrbinách by se rovnala součtu intenzit, které bychom dostali při otevření pouze první či druhé štěrbiny

$$I_{12} = I_1 + I_2. \tag{1.11}$$

V případě světla (Youngův pokus) dochází k interferenci, kterou lze popsat tak, že se sčítají intenzity elektrického pole od obou štěrbin

$$\mathbf{E}_{12} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2. \tag{1.12}$$

Zčernání stínítka je úměrné kvadrátu velikosti odpovídající intenzity pole, a proto v Youngově pokusu dostáváme (viz obr. 1.2)

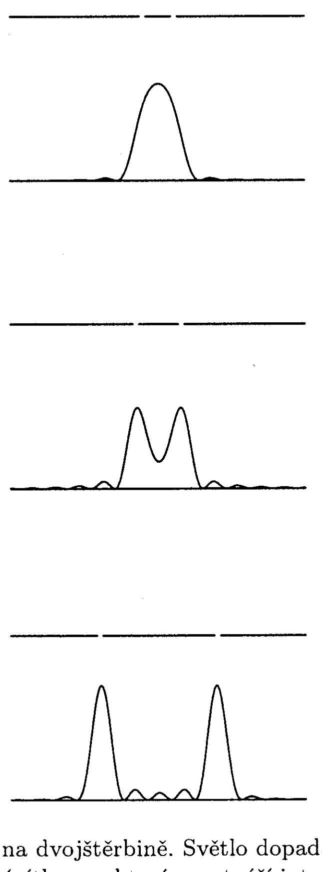
$$I_{12} \neq I_1 + I_2. \tag{1.13}$$

Díky interferenci může být intenzita zčernání v určitém místě při otevření obou štěrbin nižší než při otevření jediné štěrbiny.

Budeme-li nyní snižovat intenzitu dopadajícího světla až do okamžiku, kdy světlo dopadá v jednotlivých kvantech (fotonech), dojde při dopadu jednotlivých fotonů na stínítko ke zčernání jednotlivých bodů stínítka. Nicméně, pokud necháme takovýto experiment probíhat dostatečně dlouho, začnou jednotlivé body opět vytvářet stejný interferenční obrazec jako při velké intenzitě světla. Pozoruhodné na tomto experimentu je to, že i jednotlivé fotony reagují na existenci dvou otevřených štěrbin stejně jako monochromatická vlna.

Analogický experiment lze provést nejen s fotony, ale i s dalšími částicemi, např. neutrony (viz např. [96]). Podle klasické fyziky takové chování není možné, neboť projde-li částice jednou štěrbinou, neměla by mít na ni existence druhé štěrbiny žádný vliv. Toto chování souvisí zřejmě s vlnovým charakterem pohybu částic, který v klasické fyzice není zahrnut.

Chceme-li popsat tuto kvantověmechanickou interferenci, můžeme každé částici v uvedeném experimentu přiřadit tzv. *vlnovou funkci* $\psi(x,t)$, přičemž v analogii



Obrázek 1.2: Rozptyl světla na dvojštěrbině. Světlo dopadá shora na dvojštěrbinu, prochází jí a dopadá na spodní stínítko, na kterém vytváří interferenční obrazec s intenzitou světla naznačenou v obrázku. U horního obrázku je vzdálenost štěrbin malá, u spodního je největší.

s optikou bude hustota pravděpodobnosti nalezení částice v místě x v čase t při opakovaných měřeních rovna

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2, \tag{1.14}$$

kde x udává vzdálenost od roviny symetrie ležící uprostřed mezi štěrbinami. Vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce přitom musí zřejmě platit rovnice

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, dx = 1, \tag{1.15}$$

která vyjadřuje skutečnost, že někam na stínítko částice určitě dopadne (tzv. *normovací podmínka*). Tuto *pravděpodobnostní interpretaci* vlnové funkce, která se používá pro popis mikrosvěta, zavedl Born [18]. Pokud bychom zavedli pravděpodobnosti p_1 a p_2 zčernání určitého místa stínítka při otevřené první, resp. druhé štěrbině, pak pravděpodobnost zčernání při obou otevřených štěrbinách se nerovná součtu pravděpodobností p_1 a p_2

$$p_{12} \neq p_1 + p_2. \tag{1.16}$$

V některých místech se dokonce může stát i to, že $p_{12} = 0$, přestože $p_1 \neq 0$ a $p_2 \neq 0$. To souvisí s tím, že na rozdíl od klasického pohybu částic se průchod jednou či druhou štěrbinou v mikrosvětě navzájem nevylučují a projevuje se zde vlnový charakter pohybu částic. U mikročástic proto můžeme očekávat jiné chování, než na jaké jsme zvyklí v klasickém světě.

1.4 Kvantování

Jak už jsme uvedli výše, zásluhou de Broglieho byly vztahy

$$\boxed{E = \hbar\omega} \tag{1.17}$$

a

$$\boxed{\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}} \tag{1.18}$$

přeneseny z fotonu i na elektron a později i na další částice. V souvislosti s tímto předpokladem lze volný elektron popsat vlnovou funkcí ve tvaru rovinné vlny

$$\psi(\mathbf{r},t) = \mathrm{e}^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}, \tag{1.19}$$

kde výraz $\mathbf{kr}$ znamená skalární součin vektorů $\mathbf{k}$ a $\mathbf{r}$. Je zřejmé, že odpovídající hustota pravděpodobnosti $|\psi|^2 = 1$ je stejná v libovolném bodu prostoru, nelze ji však normovat vztahem $\int |\psi|^2 \, dV = 1$, kde integrace probíhá přes celý prostor. Takové vlnové funkce se normují jiným způsobem (viz kap. 4.2–4.3).

Nyní si položme otázku, jak lze z matematického hlediska objasnit kvantování fyzikálních veličin. Pokud částice není volná, ale její pohyb v prostoru je nějakým způsobem omezen (např. pohyb elektronu v coulombovském poli jádra atomu), tak musí splňovat určité hraniční podmínky. Například při oběhu okolo jádra o úhel $\varphi = 2\pi$ ve sférických souřadnicích, tj. při návratu do fyzikálně ekvivalentního místa, se nesmí hustota pravděpodobnosti změnit. Jiným příkladem mohou být tzv. *vázané stavy* v atomu vodíku, kdy hustota pravděpodobnosti nalézt elektron nekonečně daleko od jádra je rovna nule. Ukazuje se, že ne každá funkce, která je řešením Schrödingerovy rovnice, splňuje takové hraniční podmínky. Tím dochází k výběru možných vlnových funkcí a následně rovněž k výběru možných hodnot fyzikálních veličin, jako je například energie. Kvantování tedy vzniká v důsledku hraničních podmínek aplikovaných na hustotu pravděpodobnosti, resp. vlnovou funkci.

Ve výše uvedených kvantověmechanických interferenčních jevech hraje podstatnou roli velikost Planckovy konstanty $h \approx 6,626\times10^{-34}$ Js. Ze vztahu $p = \hbar k = h/\lambda$ platného pro volnou částici vyplývá pro de Broglieovu vlnovou délku

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{1.20}$$

Pro makroskopickou částici o hmotnosti $m = 1$ kg s rychlostí $v = 1$ m s^{-1} dostáváme $\lambda \approx 10^{-33}$ m. Uvedené interferenční jevy se v tomto případě odehrávají na tak malých charakteristických rozměrech, že je nelze experimentálně pozorovat a lze používat klasickou mechaniku. Naproti tomu pro elektron o hmotnosti $m \approx 9,109 \times 10^{-31}$ kg a $v = 10^6$ m s^{-1} (elektron v atomu) dostaneme $\lambda \approx 10^{-9}$ m, což je srovnatelné s velikostí atomu. U atomů je proto nutné používat místo klasické mechaniky mechaniku kvantovou.

V souvislosti s uvedenými jevy byla ve dvacátých letech minulého století zformulována podstata tzv. *korpuskulárně-vlnového dualizmu*: Částice v mikrosvětě mají obecně jak částicové, tak vlnové vlastnosti. Někdy se projevují více částicové, jindy vlnové vlastnosti. Obecně nelze částicové a vlnové chování oddělit.

1.5 Nástin zavedení nečasové Schrödingerovy rovnice

Science must begin with myths, and with the criticism of myths.
Karl Popper

V tomto odstavci naznačíme, jakými přibližnými úvahami lze dospět k nečasové Schrödingerově rovnici (podle [59]). Matematicky přesnější postup pocházející od Schrödingera je uveden v dodatku D.1.

Schrödinger předpokládal, že i částice mají vlnový charakter a že na vlnu odpovídající volné částici lze, stejně jako v klasické fyzice, použít vlnovou rovnici[4].

[4]Traduje se, že když se Debye seznámil s idejemi de Broglieho, poznamenal: „Vlny obvykle vyhovují vlnové rovnici. Dalším krokem by mělo být nalezení takové rovnice." Tuto poznámku prý slyšel Schrödinger, kterého to inspirovalo k hledání rovnice, nesoucí nyní jeho jméno.

Vyjdeme proto z klasické vlnové rovnice pro volnou částici

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi = 0. \tag{1.21}$$

Dále uvážíme, že v případě volné částice se v kvantové ani klasické mechanice neuplatňují žádné okrajové podmínky. To znamená, že nedochází ke kvantování a že řešení by měla být v obou případech stejná. Vezmeme tedy řešení ve tvaru

$$\psi = \mathrm{e}^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}. \tag{1.22}$$

Po dosazení tohoto řešení do vlnové rovnice (1.21) dostaneme

$$\left(-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right)\psi = 0, \tag{1.23}$$

odkud vyplývá známý vztah $\omega = kc$. S použitím tohoto vztahu můžeme vlnovou rovnici pro volnou částici přepsat do tvaru

$$(\Delta + k^2)\psi = 0. \tag{1.24}$$

Nyní předpokládáme, že pro volnou částici platí de Broglieův vztah

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \tag{1.25}$$

takže dostáváme

$$\left(\Delta + \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0. \tag{1.26}$$

Tuto rovnici můžeme přepsat do tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi, \tag{1.27}$$

kde

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{1.28}$$

je energie volné částice s impulzem $\mathbf{p}$. Rovnice (1.27), kterou jsme takto získali, je nečasová Schrödingerova rovnice pro volnou částici.

Nečasovou Schrödingerovu rovnici pro částici pohybující se v časově nezávislém poli s potenciální energií V lze získat tak, že v rovnici (1.26) dosadíme místo $\mathbf{p}^2$ vztah vyplývající z klasické fyziky

$$\mathbf{p}^2 = 2m(E - V). \tag{1.29}$$

Výsledkem je nečasová Schrödingerova rovnice pro částici pohybující se v poli s potenciální energií V

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi. \tag{1.30}$$

Je zřejmé, že nejde o exaktní odvození a že platnost takto nalezené rovnice je třeba ověřit a porovnat její fyzikální důsledky s experimentálními výsledky.

Kapitola 2

Postuláty kvantové mechaniky

The grand aim of all science is to cover the greatest number of empirical facts by logical deduction from the smallest possible number of hypotheses or axioms.
Albert Einstein

Základní předpoklady kvantové mechaniky, tj. její postuláty, lze zformulovat různými způsoby. U některých formulací je kladen větší důraz na jejich fyzikální obsah, u jiných zase na matematickou přesnost. Proto se různé učebnice liší počtem postulátů, jejich vlastní formulací i jejich matematickou přesností (viz např. [13, 15, 16, 17, 18, 24, 27, 33, 37, 57, 62, 63, 68, 71, 74, 76, 79, 80, 81, 85]). Vzhledem k tomu, že při formulaci postulátů nelze oddělit jejich fyzikální a matematickou část a přitom nám jde o úvod do kvantové mechaniky, použijeme zde formulaci, která zahrnuje z fyzikálního hlediska vše podstatné a přitom neklade příliš vysoké nároky na matematickou erudici čtenáře. Matematicky orientované zájemce odkazujeme např. na knihy [15, 32, 68, 71, 79].

2.1 Postulát o vlnové funkci

If your experiment needs statistics, you ought to have done a better experiment.
Ernest Rutherford

Podle prvního postulátu kvantové mechaniky předpokládáme, že **veškeré informace o stavu kvantověmechanického systému (částice) jsou popsány vlnovou funkcí**, což je komplexní funkce

$$\psi = \psi(x, y, z, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \tag{2.1}$$

reálných proměnných x, y, z a t (prostorové souřadnice a čas). Máme zde tedy na mysli kvantovou mechaniku jedné částice ve vnějších polích. Zobecnění na více částic se provádí tak, že se předpokládá, že místo na souřadnicích jedné částice a čase vlnová funkce závisí na souřadnicích všech částic a čase. Podobně, má-li částice nějaký vnitřní stupeň volnosti (např. spin), je třeba odpovídající souřadnici (v tomto případě např. z-ovou komponentu spinu) zařadit mezi výše uvedené proměnné. Uvedený postulát se proto nesmí chápat v absolutním slova smyslu, ale s ohledem na určitý počet částic a odpovídající proměnné, které ve fyzikálním popisu používáme.

Dále předpokládáme, že kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce udává *hustotu pravděpodobnosti* výskytu částice v místě $\mathbf{r}$ a čase t

$$\boxed{\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2.} \tag{2.2}$$

Pravděpodobnost nalézt částici v objemovém elementu $\mathrm{d}V = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ v bodě $\mathbf{r}$ a čase t je tudíž rovna[1]

$$\mathrm{d}p(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2\,\mathrm{d}V. \tag{2.3}$$

Tato *pravděpodobnostní interpretace* kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce je součástí tzv. *kodaňské interpretace* kvantové mechaniky [18]. Díky této interpretaci musí platit *normovací podmínka*

$$\boxed{\int |\psi|^2\,\mathrm{d}V = 1,} \tag{2.4}$$

kde integrace probíhá přes celý prostor. Pokud vlnová funkce tuto podmínku nesplňuje, je ji třeba vynásobit vhodnou konstantou (*normování vlnové funkce*). Vlnová funkce ψ musí být podle této normovací podmínky kvadraticky integrabilní[2]. Vzhledem ke vztahu (2.2) se někdy o vlnové funkci hovoří jako o *amplitudě pravděpodobnosti* nebo přesněji o *amplitudě hustoty pravděpodobnosti.*

Zavedení pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce má hluboké důsledky. Nejprve si všimněme, že veličina obdobná vlnové funkci v klasické mechanice neexistuje. Dále je zřejmé, že v kvantové mechanice je nutné opustit pojem trajektorie částice popsané funkcí $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, tj. jeden ze základních pojmů klasické mechaniky. Popis pohybu částic pomocí jejich trajektorií není v kvantové mechanice obecně možný[3].

Vzhledem k zavedení pravděpodobností je zřejmě žádoucí zavést i tzv. *kvantový soubor*, který je podobný souborům známým ze statistické fyziky. Předpokládáme, že máme soubor o nekonečném nebo z praktického hlediska velmi velkém počtu jednotlivých částic, které jsou navzájem totožné a jsou popsány toutéž vlnovou funkcí. Veličina $\rho(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}V$ pak udává relativní počet případů, kdy při měření polohy částic najdeme některou z nich v objemu $\mathrm{d}V$ v bodě časoprostoru $(\mathbf{r},t)$. Měření na kvantovém souboru si můžeme představit také jako opakované měření na jediném

---

[1] Jak je to obvyklé, písmeno V používáme v této učebnici jednak k označení objemu, jednak jím označujeme potenciální energii. Pokud není konkrétní význam tohoto symbolu zřejmý, tak na jeho smysl v textu upozorníme.

[2] Z výše uvedené definice však zavádíme někdy výjimky, např. v případě volné částice, kdy se normování provádí zpravidla na δ-funkci (viz kap. 4.2 a 4.3).

[3] Trajektorie se zavádějí např. v Bohmově interpretaci kvantové mechaniky. Tato teorie však, na rozdíl od klasické mechaniky, zahrnuje i pravděpodobnostní popis a poskytuje stejné fyzikální výsledky jako standardní kvantová mechanika.

systému, který po každém měření převedeme vždy do stavu odpovídajícímu uvažované vlnové funkci. Vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce se proto dále velmi podstatně odchylujeme od klasické mechaniky, neboť např. střední hodnoty fyzikálních veličin se vztahují k opakovaným měřením na kvantovém souboru.

Klasická mechanika je lokální teorií v tom smyslu, že např. průchod částice jednou štěrbinou v experimentu se dvěma štěrbinami nezávisí na tom, zda v okamžiku průchodu částice určitou štěrbinou je druhá štěrbina otevřená nebo zavřená. V případě kvantové mechaniky je stav částice místo trajektorií $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$, kterou je třeba znát v celém prostoru a o níž lze očekávat, že se změní, pokud dojde v uspořádání experimentu ke změně (například takové, že jedna štěrbina je uzavřena). V tomto smyslu je proto kvantová mechanika, na rozdíl od klasické mechaniky, nelokální.

Podobně jako v případě elektromagnetického záření dochází vzhledem ke vztahu (2.2) k interferenci i v kvantové mechanice. Zásadní rozdíl mezi interferencí v kvantové mechanice a interferencí elektromagnetického záření v klasické fyzice je v tom, že v kvantové mechanice dochází k interferenci mezi amplitudami pravděpodobnosti, zatímco v teorii elektromagnetického pole nebo optice dochází k interferenci mezi reálnými fyzikálními veličinami — elektromagnetickými vlnami. To má hluboké důsledky, které lze dobře vidět v případě různých kvantových paradoxů, jako např. Schrödingerovy kočky nebo EPR paradoxu (viz kap. 19).

Na vlnovou funkci ψ klademe požadavky, které souvisejí s její pravděpodobnostní interpretací. O vlnové funkci předpokládáme, že je

- kvadraticky integrabilní,
- konečná,
- jednoznačná,
- spojitá a
- při konečných změnách potenciálu má spojité parciální derivace $\partial\psi/\partial x$, $\partial\psi/\partial y$ a $\partial\psi/\partial z$.

Poslední podmínka souvisí s požadavkem spojitosti hustoty toku pravděpodobnosti v rovnici kontinuity (viz kap. 6.2). Jak už jsme uvedli výše, v některých případech je vhodné uvažovat i vlnové funkce, které nejsou kvadraticky integrabilní.

Z matematického hlediska lze vlnovou funkci považovat za vektor v *Hilbertově prostoru*[4] kvadraticky integrabilních funkcí se *skalárním součinem*[5] definovaným

[4]Hilbertovým prostorem nazýváme komplexní lineární vektorový prostor (viz dodatek D.2), který je separabilní a úplný a v němž je definován skalární součin.

[5]Skalární součin je pravidlo, které libovolným dvěma prvkům u a v lineárního vektorového prostoru přiřazuje komplexní číslo (u, v) a přitom pro všechny vektory platí: a) $(u, v) = (v, u)^*$, kde hvězdička označuje komplexní sdružení, b) $(u, v + w) = (u, v) + (u, w)$, c) $(u, \alpha v) = \alpha(u, v)$, kde α je libovolná komplexní konstanta, d) $(u, u) \geq 0$ a e) $(u, u) = 0$ tehdy a jen tehdy, pokud je u nulový vektor $u = 0$.

vztahem

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t)\varphi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}V, \tag{2.5}$$

kde ψ a φ jsou vlnové funkce. V této souvislosti si všimněme, že v klasické mechanice se stav částice určuje pomocí šesti funkcí $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ a $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t)$, kde funkce $\mathbf{r}$ a $\mathbf{p}$ udávají polohu a impulz (hybnost) částice. Ve fázovém prostoru je stav částice udán bodem v šestirozměrném fázovém prostoru. Naproti tomu počet funkcí báze uvažovaného Hilbertova prostoru je obecně nekonečný. Z tohoto hlediska je stav částice v kvantové mechanice zadán funkcí v prostoru o nekonečném počtu dimenzí. V tomto smyslu je kvantová mechanika nesrovnatelně bohatší než klasická mechanika.

2.2 Postulát o operátorech

Mathematics may be defined as the subject in which we never know what we are talking about, nor whether what we are saying is true.
Bertrand Russell, Mysticism and Logic

Dosud jsme hovořili pouze o vlnové funkci a její souvislosti s pravděpodobností nalézt částici v daném místě časoprostoru. V postulátu o operátorech předpokládáme, že **každé fyzikální veličině, kterou můžeme pro danou částici naměřit, je přiřazen operátor, který působí na vlnovou funkci.**

Přitom předpokládáme, že tyto operátory jsou *lineární*[6] a *hermitovské*[7].

Lineárnost operátorů požadujeme v kvantové mechanice proto, aby byl splněn tzv. *princip superpozice*: Jsou-li ψ_1 a ψ_2 vlnové funkce daného fyzikálního systému, pak i funkce $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, kde c_1 a c_2 jsou libovolná komplexní čísla, je vlnovou funkcí tohoto systému. Tento princip je v souladu s linearitou Schrödingerovy rovnice uvedené v kap. 2.5.

Hermitovské operátory jsou z fyzikálního hlediska zajímavé tím, že mají reálná vlastní čísla (viz dodatek D.3), což je významné z hlediska měření fyzikálních veličin (viz následující postulát). Poznamenejme však, že v kvantové mechanice se někdy zavádějí i nehermitovské operátory (např. anihilační a kreační operátory v kap. 11.1), které však nereprezentují měřitelné veličiny.

Nyní uvedeme definice některých důležitých operátorů:

[6] Lineárním operátorem nazýváme takový operátor $\hat{A}$, který splňuje podmínku

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2,$$

kde c_1 a c_2 jsou libovolné komplexní konstanty a ψ_1 a ψ_2 jsou libovolné funkce z prostoru, v němž operátor $\hat{A}$ působí. Operátory označujeme stříškou.

[7] Hermitovským operátorem nazýváme takový operátor, pro který platí

$$\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle$$

pro všechny funkce ψ a φ z jeho definičního oboru (viz dodatek D.3).

Kartézským souřadnicím přiřazujeme v kvantové mechanice operátory

$$\boxed{\hat{x}\psi = x\psi,} \tag{2.6}$$

$$\boxed{\hat{y}\psi = y\psi} \tag{2.7}$$

a

$$\boxed{\hat{z}\psi = z\psi.} \tag{2.8}$$

Operátor souřadnice na vlnovou funkci tedy působí tak, že ji vynásobí příslušnou souřadnicí.

Operátory kartézských složek hybnosti (impulzu) jsou definovány vztahy

$$\boxed{\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x},} \tag{2.9}$$

$$\boxed{\hat{p}_y\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y},} \tag{2.10}$$

$$\boxed{\hat{p}_z\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z}} \tag{2.11}$$

nebo zkráceně

$$\boxed{\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla,} \tag{2.12}$$

kde $\hbar = h/(2\pi)$ je Planckova konstanta.

Je-li klasická veličina funkcí souřadnic a hybnosti $F = F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, získáme odpovídající kvantověmechanický operátor dosazením příslušných operátorů $\hat{F} = F(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$. Tento postup někdy selhává. Například provedeme-li přiřazení

$$xp_x \longrightarrow x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{2.13}$$

a

$$p_x x \longrightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x, \tag{2.14}$$

dostaneme v těchto případech různý výsledek. V takových případech někdy pomůže symetrizace. Například v našem případě bychom mohli vyjít ze symetrizovaného výrazu $(xp_x + p_x x)/2$, do kterého teprve dosadíme příslušné operátory.

Z uvedeného příkladu je rovněž zřejmé, že na rozdíl od klasických veličin u operátorů v kvantové mechanice záleží na jejich pořadí. Operátory nejsou obecně komutativní, jak je vidět i z důležitých *komutačních relací*[8]

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar,} \tag{2.15}$$

[8]Komutátor operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ je definován vztahem

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Komutační relace (2.15) až (2.17) je třeba chápat v operátorovém smyslu, tj. při působení na vlnovou funkci ψ.

$$\boxed{[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar} \tag{2.16}$$

a

$$\boxed{[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar,} \tag{2.17}$$

které lze ověřit dosazením definic operátorů souřadnic a složek impulzu.

Operátor kinetické energie je roven

$$\boxed{\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta,} \tag{2.18}$$

kde m je hmotnost částice.

Hamiltonův operátor nebo zkráceně *hamiltonián* částice pohybující se v poli sil s potenciální energií $V(\mathbf{r}, t)$ je dán vztahem

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t).} \tag{2.19}$$

Podobně lze definovat i hamiltonův operátor pro pohyb částice v elektromagnetickém poli

$$\boxed{\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + qU(\mathbf{r}, t),} \tag{2.20}$$

kde q je náboj částice, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ je vektorový potenciál a $U(\mathbf{r}, t)$ označuje skalární potenciál elektromagnetického pole.

Pro *operátor momentu hybnosti* $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ dostaneme[9]

$$\boxed{\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),} \tag{2.21}$$

$$\boxed{\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)} \tag{2.22}$$

a

$$\boxed{\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).} \tag{2.23}$$

Na závěr poznamenejme, že v kvantové fyzice existují i veličiny, které nemají klasický protějšek (např. spin elektronu). V takovém případě je nutné zavést příslušný operátor nezávisle na klasické fyzice.

[9]Místo momentu hybnosti se někdy používá název impulzmoment.

2.3 Postulát o kvantování

I cannot believe that God plays dice with the cosmos.
Albert Einstein

Tzv. *kvantovací postulát* zavádí do kvantové mechaniky kvantování fyzikálních veličin:

Jediné hodnoty, které může měřitelná fyzikální veličina A při jednotlivých měřeních nabývat, jsou vlastní čísla A_n odpovídajícího operátoru $\hat{A}$ [10].

Například při měření energie můžeme naměřit pouze vlastní čísla E_n operátoru energie, tj. hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{2.24}$$

Dále postulujeme výraz pro střední hodnotu opakovaných měření veličiny A na kvantověmechanickém souboru. **Je-li systém popsán v okamžiku měření normovanou vlnovou funkcí ψ, pak výsledkem měření na odpovídajícím kvantověmechanickém souboru je střední hodnota veličiny A daná vztahem**

$$\boxed{\overline{A} = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle.} \tag{2.25}$$

Tento vztah se často zapisuje i v poněkud symetričtějším tvaru

$$\overline{A} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \tag{2.26}$$

který je výhodný z hlediska tzv. *Diracovy symboliky* (viz kap. 10.3). Kratší, často užívaný zápis téhož výrazu má tvar

$$\overline{A} = \langle\hat{A}\rangle, \tag{2.27}$$

kde vlnová funkce ψ systému není explicitně uvedena.

Vzhledem k tomu, že jak vlnové funkce $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$, tak i operátory $\hat{A} = \hat{A}(t)$ mohou obecně záviset na čase, mohou na čase záviset i střední hodnoty $\overline{A} = \overline{A}(t)$. Například střední hodnotu energie určíme ze vztahu

$$E \equiv \overline{H} = \langle\hat{H}\rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t)\,\mathrm{d}V. \tag{2.28}$$

Nyní se budeme zabývat otázkou, jaká je souvislost výsledků jednotlivých měření A_n veličiny A s její střední hodnotou $\overline{A}$. Pro jednoduchost budeme předpokládat, že provádíme měření na kvantověmechanickém souboru o N identických

---

[10] *Vlastní čísla A_n a vlastní funkce ψ_n* operátoru $\hat{A}$ jsou dána netriviálním řešením *vlastního problému*

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n.$$

Zde pro jednoduchost předpokládáme, že operátor $\hat{A}$ má diskrétní spektrum vlastních čísel. V případě spojitého spektra se postupuje analogicky.

systémech, kde N je velmi velké celé číslo. Dále předpokládáme, že hodnota A_n, kterou lze při měření naměřit, byla naměřena celkem N_n krát a že platí

$$N = \sum_n N_n \tag{2.29}$$

a

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n. \tag{2.30}$$

Konečně předpokládáme, že vlastní funkce ψ_n tvoří *bázi* příslušného Hilbertova prostoru[11] a že tato báze je *ortonormální*[12]

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}. \tag{2.31}$$

Pak můžeme střední hodnotu $\overline{A}$ psát jednak podle (2.25)

$$\overline{A} = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle, \tag{2.32}$$

jednak podle obecné definice střední hodnoty

$$\overline{A} = \sum_n p_n A_n, \tag{2.33}$$

kde

$$p_n = \lim_{N\to\infty} \frac{N_n}{N} \tag{2.34}$$

je pravděpodobnost naměření hodnoty A_n. Rozvineme-li nyní funkci ψ do báze funkcí ψ_n

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n, \tag{2.35}$$

kde

$$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle, \tag{2.36}$$

dostaneme dosazením rovnice (2.35) do (2.32) a uvážením vztahu (2.30) a ortonormality (2.31) následující výsledek

$$\overline{A} = \sum_n |c_n|^2 A_n. \tag{2.37}$$

Porovnáním tohoto vztahu s rovnicí (2.33) vidíme, že pravděpodobnost naměření hodnoty A_n je při známé normované vlnové funkci ψ dána výrazem

$$\boxed{p_n = |c_n|^2,} \tag{2.38}$$

kde c_n je koeficient rozvoje ψ do ψ_n. Tento výsledek se v kvantové mechanice velice často využívá. Je třeba zdůraznit, že platí pouze pro ortonormální bázi funkcí ψ_n a normovanou funkci ψ. Nakonec si všimněme, že z veličin dostupných při měření, tj. A_n a p_n, nelze v obecném případě zpětně určit fáze koeficientů c_n, tj. ani vlnovou funkci ψ.

---

[11] To znamená, že libovolnou funkci ψ z tohoto prostoru lze vyjádřit jako rozvoj $\psi = \sum_n c_n\psi_n$.

[12] Pro lineární hermitovské operátory používané v kvantové mechanice lze vždy nalézt úplnou ortonormální bázi.

2.4 Postulát o redukci vlnové funkce

Anybody who is not shocked by this subject has failed to understand it.
Niels Bohr
(o kvantové mechanice)

V předcházejícím postulátu jsme uvedli, že při jednotlivých měřeních na kvantovém systému můžeme naměřit pouze vlastní čísla příslušného operátoru. Nyní postulujeme, co se přitom stane s vlnovou funkcí:

Měření fyzikální veličiny A s výsledkem měření A_n, kde A_n je vlastní číslo odpovídajícího operátoru $\hat{A}$, převádí měřený systém do stavu s vlnovou funkcí ψ_n, která je vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$ s vlastním číslem A_n (tzv. **redukce vlnové funkce**; někdy se poněkud méně vhodně hovoří o kolapsu vlnové funkce)[13].

Tedy ať byla před měřením vlnová funkce systému jakákoli, bezprostředně po měření veličiny A je systém v novém stavu s vlnovou funkcí ψ_n, pro kterou platí

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n. \tag{2.39}$$

Při měření nedochází ke změně vlnové funkce pouze tehdy, je-li systém v některém z vlastních stavů operátoru $\hat{A}$.

Chceme-li naměřit několik fyzikálních veličin $A, B, C, \ldots$ pro systém ve stavu charakterizovaném vlnovou funkcí ψ_n v určitém čase t (současné měření těchto veličin), musí být tato vlnová funkce vlastní funkcí všech uvažovaných operátorů

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n, \tag{2.40}$$

$$\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n, \tag{2.41}$$

$$\hat{C}\psi_n = C_n\psi_n \tag{2.42}$$

atd. Jak známo, společný systém vlastních funkcí několika lineárních hermitovských operátorů existuje pouze tehdy, jestliže všechny tyto operátory spolu navzájem komutují

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad [\hat{A}, \hat{C}] = 0, \quad [\hat{B}, \hat{C}] = 0, \ldots. \tag{2.43}$$

Množiny navzájem komutujících operátorů hrají důležitou roli při klasifikaci kvantověmechanických stavů. Obzvláště důležité jsou množiny o maximálním možném počtu navzájem komutujících operátorů, tzv. *úplné množiny pozorovatelných (veličin)*.

Všimněme si, že vzhledem k redukci vlnové funkce

$$\psi \longrightarrow \psi_n \tag{2.44}$$

nelze v kvantové mechanice z jednoho měření určit původní vlnovou funkci ψ (výjimkou je triviální případ $\psi = \psi_n$, kdy se stav při měření nemění). Jak už jsme

[13] V případě vícenásobných (tzv. *degenerovaných*) vlastních čísel systém přejde do stavu s vlnovou funkcí z podprostoru, jehož bází jsou vlastní funkce odpovídající tomuto vlastnímu číslu.

uvedli výše, není to obecně možné ani z mnoha měření na kvantověmechanickém souboru, kde můžeme v principu určit pravděpodobnosti p_n, nikoli však koeficienty rozvoje funkce ψ do funkcí ψ_n. To je zásadní rozdíl proti klasické mechanice, kde lze pohybové rovnice integrovat v čase nazpět. Tento rozdíl souvisí s tím, že v kvantové mechanice se uvažuje vliv měřicího přístroje na měřený objekt (dochází k redukci vlnové funkce), zatímco v klasické mechanice se tento vliv zanedbává. Při měření se získává nová informace o měřeném systému. Není proto překvapující, že se v důsledku toho změní při měření i vlnová funkce obsahující veškerou informaci o měřeném systému. V porovnání s klasickou mechanikou je tudíž kvantová mechanika dokonalejší a přesnější teorií.

Nakonec si všimněme, že měřicí přístroj lze považovat za *filtr*, který má jeden vstup a mnoho výstupů [37]. Měřicí přístroj třídí vstupní informaci ψ do jednotlivých výstupních kanálů charakterizovaných vlastními čísly A_n a vlnovými funkcemi ψ_n. O tom, že je taková představa na místě, svědčí příklad spektrometru, do něhož vstupuje bílé světlo, které se rozkládá na monochromatické rovinné vlny $\exp(i\mathbf{k}_n\mathbf{r})$. Roli vlastních čísel zde zřejmě hrají vlnové vektory $\mathbf{k}_n$, roli vlastních funkcí rovinné vlny.

2.5 Postulát o časové Schrödingerově rovnici

What is that breathes fire into the equations and makes a universe for them to describe .... Why does the universe go to all the bother of existing?
Stephen Hawking

Podobně jako v klasické mechanice, i v kvantové mechanice potřebujeme pohybovou rovnici, určující vývoj systému v čase.

Postulát o časové Schrödingerově rovnici (evoluční, pohybové rovnici) popisuje časový vývoj vlnové funkce: **Je-li v $t = t_0$ systém ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$, pak je jeho následný vývoj dán časovou Schrödingerovou rovnicí** (viz též obr. 2.1)

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t),} \tag{2.45}$$

kde $\hat{H}$ je hamiltonián (evoluční operátor).

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta\psi + V(x)\psi = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Obrázek 2.1: Časová Schrödingerova rovnice napsaná rukou Ervina Schrödingera. Poskytl prof. A. Zeilinger z Univerzity ve Vídni.

Vzhledem k tomu, že časová Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnicí prvního řádu v čase, je nutné k určení vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$ zadat jednu počáteční podmínku, tj. $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$. Tuto funkci je nutné znát v celém prostoru. Schrödingerova rovnice pak umožňuje určit vlnovou funkci pro $t > t_0$.

Pro konzervativní systémy s potenciální energií $V(\mathbf{r})$ lze časovou Schrödingerovu rovnici (2.45) získat formálně tak, že v klasickém výrazu pro celkovou energii

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V \tag{2.46}$$

provedeme záměnu

$$\boxed{E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \tag{2.47}$$

a

$$\boxed{\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla.} \tag{2.48}$$

Výsledná operátorová rovnost musí platit ve smyslu působení operátorů na vlnovou funkci, tj. musí platit Schrödingerova rovnice (2.45). Podobně lze postupovat i v případě pohybu v elektromagnetickém poli.

Vzhledem k tomu, že hamiltonián $\hat{H}$ i operátor $i\hbar(\partial/\partial t)$ jsou lineární operátory, je lineárním operátorem i celkový operátor Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}. \tag{2.49}$$

Princip superpozice proto vyplývá z časové Schrödingerovy rovnice.

Z toho, že v časové Schrödingerově rovnici vystupuje čas v první derivaci, zatímco prostorové souřadnice v druhé derivaci, tj. čas a prostorové souřadnice nejsou zastoupeny ekvivalentním způsobem, je zřejmé, že jde o rovnici nerelativistickou. Základními myšlenkami relativistické kvantové mechaniky se zabýváme v kap. 17.

Nakonec si všimněme, že vlnová funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$ a funkce konst $\psi(\mathbf{r}, t)$, kde konst je komplexní konstanta různá od nuly, popisují stejný fyzikální stav, neboť splňují stejnou Schrödingerovu rovnici a po provedení normování vedou obě funkce na stejné fyzikální výsledky.

Kapitola 3

Nečasová Schrödingerova rovnice

The chessboard is the world; the pieces are the phenomena of the universe; the rules of the game are what we call the laws of Nature. The player on the other side is hidden from us. We know that his play is always fair, just, and patient. But also we know, to our cost, that he never overlooks a mistake, or makes the smallest allowance for ignorance.
T. H. Huxley

3.1 Odvození nečasové Schrödingerovy rovnice

V této kapitole předpokládáme, že vývoj systému v čase je popsán časovou Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t), \tag{3.1}$$

kde $\hat{H}$ je časově nezávislý hamiltonián odpovídající pohybu částice v časově nezávislých vnějších polích. V takovém případě můžeme provést separaci proměnných a předpokládat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t). \tag{3.2}$$

Po dosazení tohoto předpokladu do časové Schrödingerovy rovnice (3.1) dostaneme

$$i\hbar\frac{\frac{d\varphi(t)}{dt}}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = E, \tag{3.3}$$

kde jsme uvážili, že obě strany výsledné rovnice musí být rovny téže konstantě E rozměru energie. Dostáváme tedy dvě rovnice

$$\boxed{\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})} \tag{3.4}$$

a

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\varphi(t)}{\mathrm{d}t} = E\varphi(t). \tag{3.5}$$

První z těchto rovnic se nazývá *nečasová Schrödingerova rovnice*. Vidíme, že energie E jsou vlastní čísla hamiltoniánu $\hat{H}$ nebo též *vlastní energie*[1]

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}), \quad n = 1, 2, 3, \dots. \tag{3.6}$$

Po určení vlastních energií E_n a vlastních funkcí ψ_n lze integrovat rovnici (3.5) s výsledkem

$$\varphi_n(t) = N\mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)}, \tag{3.7}$$

kde N je normovací konstanta. Obvykle klademe $N = 1$, což znamená, že za předpokladu platnosti normování

$$\int |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \,\mathrm{d}V = 1 \tag{3.8}$$

nečasová část vlnové funkce $\psi_n(\mathbf{r})$ určuje časově nezávislou hustotu pravděpodobnosti

$$\rho_n(\mathbf{r}, t) = \rho_n(\mathbf{r}) = |\psi_n(\mathbf{r})|^2. \tag{3.9}$$

3.2 Stacionární stavy a jejich vlastnosti

Stavy popsané výše zmíněnými vlnovými funkcemi

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})\mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)} \tag{3.10}$$

se nazývají *stacionárními stavy*. Podobné stavy se, až na triviální případy, jako je např. nehybný hmotný bod, v klasické mechanice nevyskytují. V Bohrově teorii musela být jejich existence postulována. Nyní shrneme vlastnosti stacionárních stavů, ze kterých vyplývá i jejich pojmenování:

1. Hustota pravděpodobnosti pro stacionární stavy

$$|\psi_n(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \tag{3.11}$$

   na čase nezávisí. Na čase nezávisí ani norma vlnové funkce

$$\int |\psi_n(\mathbf{r}, t)|^2 \,\mathrm{d}V = \int |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \,\mathrm{d}V. \tag{3.12}$$

2. Střední hodnota libovolného časově nezávislého operátoru $\hat{A}$ ve stacionárních stavech ψ_n na čase nezávisí

$$\langle\hat{A}\rangle_n = \int \psi_n^*(\mathbf{r}, t)\hat{A}\psi_n(\mathbf{r}, t) \,\mathrm{d}V = \int \psi_n^*(\mathbf{r})\hat{A}\psi_n(\mathbf{r}) \,\mathrm{d}V. \tag{3.13}$$

[1] Pro jednoduchost zde uvažujeme pouze diskrétní energetické spektrum. Pro spojité spektrum je situace analogická.

3. Pro stacionární stavy je časově nezávislá i hustota toku pravděpodobnosti $\mathbf{j}$, zavedená v kap. 6.

4. Obecné nestacionární řešení časové Schrödingerovy rovnice s časově nezávislým hamiltoniánem lze vyjádřit pomocí rozvoje do ortonormálních stacionárních stavů $\psi_n(\mathbf{r})\exp[E_n t/(i\hbar)]$

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)}, \tag{3.14}$$

kde c_n jsou časově nezávislá komplexní čísla, která jsou dána počáteční podmínkou $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$. Střední hodnota energie v takových stavech

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{H} \psi(\mathbf{r},t)\, \mathrm{d}V \tag{3.15}$$

na čase nezávisí (viz kap. 13.3).

Časová nezávislost vlastností stacionárních stavů je nezbytná k objasnění stability atomů, molekul a dalších stavebních kamenů hmoty.

Kapitola 4

Volná částice

Every body continues in its state of rest, or of uniform motion in a right line, unless it is compelled to change that state by forces impressed upon it.
Isaac Newton, Laws of Motion I

Jako ilustraci řešení Schrödingerovy rovnice nejprve vyřešíme nejjednodušší možný problém — volně se pohybující částici. Protože se uvažovaná částice pohybuje volně, na její vlnovou funkci nejsou naloženy žádné okrajové podmínky a lze tedy očekávat, že její energie ani impulz nebudou kvantovány.

4.1 Stacionární stavy

Pro jednoduchost budeme nejdříve diskutovat volnou částici v jedné dimenzi. Naším cílem je vyřešit nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x). \tag{4.1}$$

Tuto rovnici přepíšeme do tvaru

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = 0. \tag{4.2}$$

Vzhledem k tomu, že pro energii volné částice platí $E \geq 0$, označíme

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \tag{4.3}$$

kde $k \geq 0$ je reálné číslo, obvykle nazývané *vlnovým vektorem.* Abychom nalezli řešení obyčejné diferenciální rovnice s konstantními koeficienty (4.2), musíme nalézt řešení odpovídajícího charakteristického polynomu

$$\lambda^2 + k^2 = 0, \tag{4.4}$$

z kterého vyplývá

$$\lambda_{1,2} = \pm ik. \tag{4.5}$$

Odtud vidíme, že partikulární řešení rovnice (4.2) lze psát ve tvaru

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\pm ikx}. \tag{4.6}$$

Ze vztahu

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \pm\hbar k\psi(x) \tag{4.7}$$

vyplývá, že impulz částice s touto vlnovou funkcí je roven

$$p = \pm\hbar k. \tag{4.8}$$

Vlnové funkce $\psi(x)$ tedy můžeme psát ve tvaru

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)}, \tag{4.9}$$

kde p je dáno rovnicí (4.8).

Výslednou časově závislou vlnovou funkci zapíšeme ve tvaru rovinné vlny

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{(Et-px)/(i\hbar)}, \tag{4.10}$$

kde impulz p může nabývat jak kladných, tak záporných hodnot a celková energie částice je rovna její kinetické energii

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \tag{4.11}$$

Shrneme-li tyto výsledky, vlnová funkce (4.10) je vlastní funkcí hamiltoniánu

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \tag{4.12}$$

s vlastní energií $E = p^2/(2m)$. Tato funkce je současně vlastní funkcí operátoru impulzu

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{4.13}$$

s vlastní hodnotou $p = \pm\hbar k$. Protože tyto operátory spolu komutují

$$[\hat{T}, \hat{p}] = 0 \tag{4.14}$$

a mají tudíž společný systém vlastních funkcí, lze jednorozměrný pohyb volné částice charakterizovat pomocí dvou kvantových čísel — kinetické energie $E = p^2/(2m)$ a impulzu p.

Na závěr si všimněme, že de Broglieův vztah (4.8) mezi vlnovým vektorem a impulzem částice jsme zde nemuseli předpokládat, ale vyšel nám řešením Schrödingerovy rovnice pro volnou částici.

4.2 Normování na konečný objem

Ve výše uvedeném výpočtu jsme záměrně nezmínili otázku normování vlnové funkce, neboť je zřejmé, že prostorovou část vlnové funkce (4.10) nelze při integraci přes celý prostor normovat vztahem

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = 1. \tag{4.15}$$

Vzhledem k tomu, že volná částice je idealizací, není tato skutečnost z fyzikálního hlediska příliš na závadu a lze ji z matematického hlediska napravit dvěma způsoby, které dále popíšeme.

Při *normování na konečný objem* postupujeme tak, že nejprve zavedeme umělé kvantování pomocí tzv. *cyklické nebo periodické hraniční podmínky*

$$\psi(x) = \psi(x + L), \tag{4.16}$$

kde ψ je vlnová funkce (4.9) a velké přirozené číslo L je délka intervalu, se kterým se vlnová funkce periodicky opakuje. Je zřejmé, že tato podmínka vede na kvantování impulzu

$$p_n = \frac{2\pi\hbar n}{L}. \tag{4.17}$$

Z důvodu periodicity exponenciály zde stačí uvažovat $n = 1, \ldots, L$. Vzhledem k periodicitě vlnové funkce (4.16) pak lze zavést její normování při integraci přes libovolný interval délky L, takže dostáváme vlnové funkce s kvantovanými impulzy

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \mathrm{e}^{-p_n x/(i\hbar)}. \tag{4.18}$$

Veškeré vypočty se pak provádějí s těmito vlnovými funkcemi. Na konci výpočtů pak stačí provést limitu $L \to \infty$ a L z konečných výsledků vymizí.

Pro vlnovou funkci závisející na třech prostorových souřadnicích se provede výše uvedená normovací procedura pro každý rozměr zvlášť.

4.3 Normování na Diracovu δ-funkci

Při matematicky poněkud přesnějším postupu normujeme vlnovou funkci na Diracovu δ-funkci (viz dodatek D.4). Při tom využíváme vyjádření δ-funkce ve tvaru

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ikx} \,\mathrm{d}x. \tag{4.19}$$

Normujeme-li prostorovou část vlnové funkce (4.10) vztahem

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)}, \tag{4.20}$$

pak dostaneme skalární součin

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x)^* \psi_{p'}(x)\, \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{(p-p')x/(i\hbar)}\, \mathrm{d}x = \delta(p-p'), \tag{4.21}$$

který odpovídá vztahu (4.19).

Toto normování má významné přednosti z hlediska tzv. relací úplnosti a Diracovy symboliky (viz kap. 10).

4.4 Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice

Je zřejmé, že obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro jednorozměrný pohyb volné částice lze psát ve tvaru superpozice řešení (4.10)

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \mathrm{e}^{[p^2/(2m)t - px]/(i\hbar)}\, \mathrm{d}p, \tag{4.22}$$

kde $c(p)$ je komplexní koeficient rozvoje do rovinných vln závislý na p. Z tohoto výrazu je vidět, že funkce $c(p)$ je Fourierovým obrazem[1] funkce $\psi(x,0)$, který lze určit pomocí zpětné transformace

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) \mathrm{e}^{px/(i\hbar)}\, \mathrm{d}x. \tag{4.23}$$

V třírozměrném případě lze obecné řešení psát ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int c(\mathbf{p}) \mathrm{e}^{[p^2/(2m)t - \mathbf{pr}]/(i\hbar)}\, \mathrm{d}^3\mathbf{p}, \tag{4.24}$$

kde integrace probíhá přes celý třírozměrný prostor impulzů a $\mathrm{d}^3\mathbf{p} = \mathrm{d}p_x\, \mathrm{d}p_y\, \mathrm{d}p_z$. Funkce $c(\mathbf{p})$ je Fourierovým obrazem funkce $\psi(\mathbf{r},0)$, který lze určit ze vztahu

$$c(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r},0) \mathrm{e}^{\mathbf{pr}/(i\hbar)}\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{4.25}$$

4.5 Řešení časové Schrödingerovy rovnice ve tvaru vlnového klubka

Nyní budeme diskutovat speciální případ řešení jednorozměrné časové Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, které lze psát v $t = 0$ ve tvaru tzv. *gaussovského vlnového balíku* či *vlnového klubka*

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-(x-a)^2/(2d^2)}, \tag{4.26}$$

[1] Fourierův obraz funkce $f(x)$ je definován vztahem $F(k) = 1/(\sqrt{2\pi}) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ikx)\, \mathrm{d}x$. Z Fourierova obrazu $F(k)$ lze určit původní funkci pomocí inverzní Fourierovy transformace $f(x) = 1/\sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \exp(ikx)\, \mathrm{d}k$.

kde d je kladné reálné číslo. Odpovídající Fourierův obraz této funkce je dán vztahem (4.23). Snadno lze ověřit, že vlnová funkce (4.26) splňuje normovací podmínku

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 \, \mathrm{d}x = \frac{1}{(\pi d^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-(x-a)^2/d^2} \, \mathrm{d}x = 1. \tag{4.27}$$

Odtud je také vidět, že $|x-a| = d$ udává vzdálenost od středu vlnového balíku, pro niž hustota pravděpodobnosti klesne na hodnotu $1/\mathrm{e}$ ve srovnání s její maximální hodnotou.

Výhodou vlnové funkce (4.26) je to, že s ní lze analyticky vypočítat střední hodnotu

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x \psi(x,0) \, \mathrm{d}x = a, \tag{4.28}$$

která je totožná s polohou středu balíku. Podobně lze snadno vypočítat i

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \frac{d^2}{2} + a^2. \tag{4.29}$$

Odtud pak dostáváme

$$\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)^* \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \psi(x,0) \, \mathrm{d}x \tag{4.30}$$

neboli

$$\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)^* \Big(x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2\Big) \psi(x,0) \, \mathrm{d}x. \tag{4.31}$$

Uvážíme-li nyní, že $\langle x \rangle$ je číslo a pro $\langle x \rangle$ a $\langle x^2 \rangle$ máme dva předcházející vztahy, dostaneme střední kvadratickou odchylku souřadnice

$$\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2}. \tag{4.32}$$

Podobný výpočet můžeme provést i pro operátor impulzu. Nejdříve dostaneme

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)^* \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) \psi(x,0) \, \mathrm{d}x = 0 \tag{4.33}$$

(integrál je roven nule, neboť integrovaná funkce je lichá). Dále vypočítáme

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)^* \left(-\hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right) \psi(x,0) \, \mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \tag{4.34}$$

Výsledkem je střední kvadratická odchylka impulzu

$$\left\langle \left(\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle\right)^2 \right\rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \tag{4.35}$$

Pro vlnový balík (4.26) je tedy nenulová střední kvadratická odchylka souřadnice $\langle(x - \langle x\rangle)^2\rangle$ i impulzu $\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle$. Při měřeních na kvantověmechanickém souboru daném touto vlnovou funkcí tedy nedostáváme *ostré hodnoty* souřadnice a impulzu, nýbrž hodnoty, jejichž pravděpodobnostní rozdělení je více nebo méně široké v závislosti na volbě parametru d. Je zřejmé, že čím je částice přesněji lokalizována v tzv. *souřadnicovém prostoru* (x-prostoru), tím nepřesněji je určen její impulz v *impulzovém prostoru* (p-prostoru) a naopak.

Součin kvadratických odchylek

$$\langle(x - \langle x\rangle)^2\rangle\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \tag{4.36}$$

je konstantní. Hodnota konstanty $\hbar^2/4$ souhlasí s minimem na pravé straně relací neurčitosti (viz kap. 7). V případech blížících se klasické fyzice lze neurčitost souřadnice i impulzu zanedbat.

Kapitola 5

Částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě

I shall certainly admit a system as empirical or scientific only if it is capable of being tested by experience. These considerations suggest that not the verifiability but the falsifiability of a system is to be taken as a criterion of demarcation. ... It must be possible for an empirical scientific system to be refuted by experience.
Karl Popper

Problém pohybu částice v potenciálové jámě budeme nejdříve řešit v jednorozměrném případě.

5.1 Jednorozměrná potenciálová jáma

5.1.1 Stacionární stavy

Předpokládáme, že v intervalu $\langle 0, a\rangle$ je potenciální energie $V(x)$ rovna nule $V = 0$. Mimo tento interval nabývá potenciální energie nekonečné hodnoty $V \to \infty$. Pohyb částice je omezen na interval $\langle 0, a\rangle$ a mimo tento interval se částice nemůže vyskytovat. Pro řešení nečasové Schrödingerovy rovnice tedy platí

$$\psi(x) = 0 \tag{5.1}$$

pro $x < 0$ a $x > a$. Zbývá vyřešit Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x) \tag{5.2}$$

v intervalu $\langle 0, a\rangle$.

Charakteristický polynom odpovídající této diferenciální rovnici s konstantními koeficienty má tvar

$$\lambda^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0. \tag{5.3}$$

Vzhledem k tomu, že energie částice v jámě musí být větší než nula nebo rovna nule, můžeme označit

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \tag{5.4}$$

kde $k \geq 0$ je reálné číslo. Pak dostaneme

$$\lambda = \pm ik. \tag{5.5}$$

Obecné řešení rovnice (5.2) lze psát ve tvaru

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}, \tag{5.6}$$

kde A a B jsou libovolné komplexní konstanty[1].

Podle postulátu o vlnové funkci požadujeme, aby vlnová funkce byla spojitá. Vzhledem k tomu, že platí $\psi(x) = 0$ pro $x < 0$ a $x > a$, musí být zřejmě splněny okrajové podmínky

$$\psi(0) = 0 \tag{5.7}$$

a

$$\psi(a) = 0. \tag{5.8}$$

První podmínku splníme tak, že položíme $A = -B$, tj. místo obecné vlnové funkce (5.6) vezmeme funkci ve tvaru

$$\psi(x) = N \sin(kx), \tag{5.9}$$

kde N je normovací konstanta. Druhou podmínku

$$\sin(ka) = 0 \tag{5.10}$$

splníme tak, že požadujeme

$$ka = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{5.11}$$

kde n je přirozené číslo, tzv. *kvantové číslo*[2]. Vlnový vektor k i odpovídající energie jsou kvantovány

$$k_n = \frac{\pi}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{5.12}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{5.13}$$

Vidíme, že kvantování je, jak je to v kvantové mechanice obvyklé, důsledkem okrajových podmínek, které musí vlnová funkce splňovat.

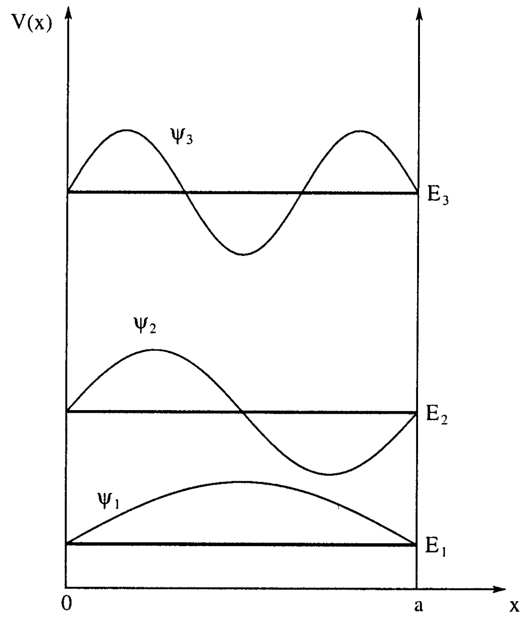
Vlnové funkce příslušející těmto energiím mají tvar

$$\psi_n(x) = N \sin \frac{\pi x n}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{5.14}$$

---

[1] V případě dvojnásobného kořenu charakteristického polynomu $k = 0$ by řešení mělo tvar $\psi = A + Bx$. S takovým řešením však lze splnit dále uvedené okrajové podmínky pouze pro fyzikálně nezajímavý případ $A = B = 0$, a proto ho neuvažujeme.

[2] Řešení s kvantovým číslem $n = 0$ vede na řešení $\psi(x) = 0$, které nemá fyzikální význam, neboť odpovídající hustota pravděpodobnosti je v celém intervalu $\langle 0, a \rangle$ rovna nule.



Obrázek 5.1: Nekonečně hluboká potenciálová jáma. Vlnové funkce ψ_n a energie E_n pro základní stav ($n = 1$) a první dva excitované stavy ($n = 2, 3$).

Normovací konstantu N určíme z požadavku

$$\int_0^a |N|^2 \sin^2 \frac{\pi x n}{a} \,\mathrm{d}x = 1, \tag{5.15}$$

který po jednoduché integraci vede na

$$N = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \mathrm{e}^{i\alpha}, \tag{5.16}$$

kde α je libovolné reálné číslo. Vlnová funkce $\psi(x)$ je určena až na tzv. *fázový faktor* $\exp(i\alpha)$, který zpravidla volíme roven jedné.

Energie E_n a vlnové funkce $\psi_n(x)$ jsou znázorněny na obr. 5.1. Vidíme, že energie stacionárních stavů mají následující vlastnosti:

- Energie E_n jsou větší než nula. Stav s energií $E_n = 0$ není pro konečnou šířku jámy a možný.
- Energetické spektrum E_n, $n = 1, 2, 3, \ldots$ je *diskrétní* a *nedegenerované*[3].

[3]Vlastní číslo se nazývá nedegenerované, pokud mu přísluší pouze jedna lineárně nezávislá vlastní funkce.

- Energie E_n jsou úměrné n^2
$$E_n \sim n^2, \tag{5.17}$$
zatímco jejich rozdíly rostou lineárně s n
$$E_{n+1} - E_n \sim n. \tag{5.18}$$
Podíl
$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n} \tag{5.19}$$
je úměrný $1/n$. S rostoucím n se tedy postupně blížíme ke klasickému případu, kdy energie nejsou kvantovány (jsou spojité).

Vlnové funkce $\psi_n(x)$ mají podobný tvar jako řešení pro kmity struny v klasické fyzice. To je dáno podobností příslušných diferenciálních rovnic. Vlastnosti vlnových funkcí lze shrnout takto:

- Vlnové funkce $\psi_n(x)$ jsou ortonormální
$$\int_0^a \psi_m^*(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{5.20}$$
a tvoří bázi příslušného Hilbertova prostoru.
- Počet uzlů (nulových bodů) funkcí $\psi_n(x)$ v intervalu $(0, a)$ je roven $n - 1$.
- Funkce $\psi_n(x)$ jsou sudé, resp. liché vzhledem ke středu intervalu $\langle 0, a\rangle$, což lze vyjádřit pomocí jejich *parity* $(-1)^{n-1}$. Vlnová funkce *základního stavu* s nejnižší energií ($n = 1$) je sudá, s rostoucím n se parita funkcí pravidelně střídá.

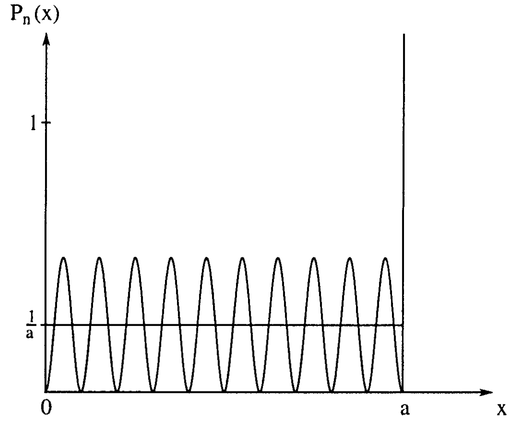
Hustota pravděpodobnosti $|\psi_n(x)|^2$ pro $n = 10$ je ukázána na obr. 5.2. Pomineme-li oscilace v závislosti na x, s rostoucím kvantovým číslem n se střední hustota pravděpodobnosti[4] nalézt částici v určitém místě blíží hodnotě $1/a$. To odpovídá klasickému pohledu, kdy jsou všechna místa výskytu částice v jámě stejně pravděpodobná.

Jak už jsme uvedli výše, ve stacionárních stavech se hodnoty fyzikálních veličin nevyvíjejí v čase. Tato řešení tedy neodpovídají řešením známým z klasické fyziky, kdy se hmotný bod pohybuje v potenciálové jámě tak, že se uvnitř jámy pohybuje volně, odráží se pružně na stěnách a mění přitom svůj impulz z hodnoty p na $-p$.

5.1.2 Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro částici v jednorozměrné potenciálové jámě lze psát ve tvaru
$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)}. \tag{5.21}$$

[4]Zde máme na mysli střední hodnotu $\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x/(x_2 - x_1)$ přes dostatečně dlouhý interval (x_1, x_2).



Obrázek 5.2: Nekonečně hluboká potenciálová jáma. Hustota pravděpodobnosti $P_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ pro $n = 10$. Z klasické fyziky pro hustotu pravděpodobnosti vyplývá $P(x) = 1/a$.

Koeficienty c_n jsou určeny počáteční podmínkou v čase $t = 0$

$$\psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \tag{5.22}$$

odkud vyplývá

$$c_n = \int_0^a \psi_n^*(x)\psi(x,0)\,\mathrm{d}x. \tag{5.23}$$

Požadavek normování funkce $\psi(x,t)$ vede na podmínku

$$\int_0^a |\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = \sum_{m,n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int_0^a \psi_m^*(x)\psi_n(x)\mathrm{e}^{(E_n-E_m)t/(i\hbar)}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \tag{5.24}$$

Pravděpodobnost naměření energie E_n ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(x,t)$ je rovna

$$p_n = |c_n|^2. \tag{5.25}$$

Střední energie se rovná

$$\langle E\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n. \tag{5.26}$$

Jako konkrétní příklad odpovídající uvažovanému problému vezmeme koeficienty c_n ve tvaru

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x' n}{a} = \psi_n^*(x'), \tag{5.27}$$

kde x' je pevný bod v intervalu $(0, a)$. Pro tyto koeficienty c_n budeme předpokládat počáteční podmínku ve tvaru

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{N} \psi_n^*(x')\psi_n(x), \tag{5.28}$$

kde $N \gg 1$. Podle relací úplnosti (viz kap. 10.4) se tato funkce blíží Diracově δ-funkci

$$\psi(x, 0) \approx \delta(x - x') \tag{5.29}$$

a částice je v čase $t = 0$ lokalizována v blízkém okolí bodu x'. Protože funkce $\psi(x, 0)$ je s dobrým přiblížením sudá vzhledem k bodu x' a její derivace je vzhledem k témuž bodu lichá, je počáteční impulz částice $\int_0^a \psi^*(x, 0)\hat{p}_x\psi(x, 0)\,\mathrm{d}x$ přibližně roven nule. Uvážíme-li dále, že uvnitř jámy nepůsobí na částici žádná síla, vidíme, že vlnový balík popsaný vlnovou funkcí $\psi(x, t)$ odpovídající uvažované počáteční podmínce se vůči stěnám jámy nepohybuje. Kdybychom chtěli dostat pohybující se částici odrážející se od stěn jámy, mohli bychom vzít např. počáteční podmínku

$$\psi'(x, 0) = \sum_{n=1}^{N} \psi_n^*(x')\psi_n(x)\mathrm{e}^{-p_0 x/(i\hbar)}. \tag{5.30}$$

Tato podmínka odpovídá nenulovému počátečnímu impulzu, který je přibližně roven p_0.

5.2 Třírozměrná potenciálová jáma

Třírozměrná potenciálová jáma je charakterizována potenciální energií $V(x, y, z) = 0$ pro $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$ a $0 \le z \le c$, kde a, b a c jsou rozměry jámy. Mimo tuto jámu nabývá potenciální energie nekonečné hodnoty $V \to \infty$. Vlnová funkce je rovna nule mimo uvedenou oblast a na hranicích této oblasti.

Je zřejmé, že nečasovou Schrödingerovu rovnici pro tento problém

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \tag{5.31}$$

lze řešit separací proměnných

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z). \tag{5.32}$$

V souvislosti s tím předpokládáme, že celková energie E se dá psát jako součet

$$E = E_x + E_y + E_z. \tag{5.33}$$

Po dosazení těchto dvou předpokladů do Schrödingerovy rovnice (5.31) dostaneme tři jednorozměrné Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_x(x) = E_x\psi_x(x), \tag{5.34}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\psi_y(y) = E_y\psi_y(y) \tag{5.35}$$

a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\psi_z(z) = E_z\psi_z(z), \tag{5.36}$$

které představují tři jednorozměrné potenciálové jámy ve směrech x, y a z o šířkách a, b a c. Použijeme-li výsledky získané pro jednorozměrnou potenciálovou jámu, dostaneme normované vlnové funkce ve tvaru

$$\psi_{lmn}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\pi x l}{a}\sin\frac{\pi y m}{b}\sin\frac{\pi z\, n}{c}, \quad l,m,n = 1,2,3,\ldots \tag{5.37}$$

odpovídající energiím

$$E_{lmn} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{l^2}{a^2}+\frac{m^2}{b^2}+\frac{n^2}{c^2}\right), \quad l,m,n = 1,2,3,\ldots. \tag{5.38}$$

Vidíme, že např. pro $a = b = c$ odpovídá některým energiím vyšším než E_{111} několik různých lineárně nezávislých funkcí. V takovém případě jde o *degenerovanou* energii. Energie základního stavu E_{111} je nedegenerovaná.

S degenerací energetických hladin se často setkáváme u vícerozměrných úloh. Pomocí teorie grup se dá ukázat, že degenerace hladin souvisí se symetrií úlohy. Čím vyšší je symetrie hamiltoniánu, tím větší degenerace energií se dá očekávat.

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro třírozměrnou potenciálovou jámu bychom nalezli podobným způsobem jako v jednorozměrném případě.

Kapitola 6

Rovnice kontinuity

Whence is it that Nature does nothing in vain: and whence arises all that order and beauty which we see in the world?
Isaac Newton

Nejprve ukážeme, že normování vlnové funkce vyhovující časové Schrödingerově rovnici zůstává v čase zachováno.

6.1 Normování vlnové funkce

Uvažujeme časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t) \tag{6.1}$$

a rovnici k ní komplexně sdruženou

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(\hat{H}\psi(\mathbf{r},t)\right)^*. \tag{6.2}$$

Z těchto rovnic násobíme první zleva ψ^*, druhou zprava ψ a obě rovnice odečteme. Výsledkem je rovnice

$$i\hbar \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \psi^* \hat{H}\psi - \left(\hat{H}\psi\right)^* \psi. \tag{6.3}$$

Provedeme-li nyní integraci přes celý prostor a zaměníme-li pořadí integrace a derivace podle času, dostaneme

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int |\psi|^2 \,\mathrm{d}V = \int \psi^* \hat{H}\psi \,\mathrm{d}V - \int \left(\hat{H}\psi\right)^* \psi \,\mathrm{d}V. \tag{6.4}$$

Předpokládáme-li, že hamiltonián $\hat{H}$ je hermitovský operátor, je pravá strana rovna nule a platí, že normování vlnové funkce se zachovává v čase

$$\int |\psi|^2 \,\mathrm{d}V = \text{konst.} \tag{6.5}$$

Vidíme, že uvažovaná částice existuje ve všech časech a že se nerozpadá ani nemizí. Pro hustotu pravděpodobnosti proto musí platit rovnice analogická rovnici kontinuity známé z mechaniky kontinua.

6.2 Rovnice kontinuity

Rovnici kontinuity odvodíme z rovnice (6.3) následujícím způsobem. Nejprve zavedeme hustotu pravděpodobnosti ρ

$$\rho = |\psi|^2 \tag{6.6}$$

a předpokládáme, že potenciální energie $V(\mathbf{r}, t)$ v hamiltoninánu

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}, t) \tag{6.7}$$

je reálná. V takovém případě $V(\mathbf{r}, t)$ z rovnice (6.3) vymizí a dostaneme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \Delta \psi - (\Delta \psi^*)\psi\right] = 0. \tag{6.8}$$

Chceme-li nyní napsat rovnici kontinuity ve tvaru

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,} \tag{6.9}$$

je zřejmé, že tzv. *hustotu toku pravděpodobnosti*[1] můžeme psát ve tvaru

$$\boxed{\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right).} \tag{6.10}$$

Z tohoto výrazu je vidět, že hustota toku pravděpodobnosti $\mathbf{j}$ je rovna nule pro reálné vlnové funkce.

Dále vidíme, že hustota toku pravděpodobnosti není určena jednoznačně, neboť k poslednímu výrazu můžeme přidat libovolný konstantní vektor, případně vektor závislý pouze na čase a rovnice kontinuity zůstane splněna. První případ je v souladu s tím, že při přechodu k jinému inerciálnímu systému se změní o konstantní vektor i hustota toku pravděpodobnosti. Druhý případ odpovídá obecné časově závislé transformaci mezi souřadnými systémy.

Pro volnou částici dostaneme při normování vlnové funkce na objem V

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{1}{i\hbar}(Et - \mathbf{pr})} \tag{6.11}$$

[1] Uvádíme vžitý český název. V angličtině se používá termín probability current density.

hustotu toku pravděpodobnosti

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m}\frac{1}{V} = \frac{\mathbf{v}}{V}, \tag{6.12}$$

kde $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ má smysl rychlosti částice. Hustota toku pravděpodobnosti pro volnou částici je rovna její rychlosti vztažené na jednotku objemu.

Kapitola 7

Relace neurčitosti

In effect, we have redefined the task of science to be the discovery of laws that will enable us to predict events up to the limits set by the uncertainty principle.
Stephen Hawking

7.1 Úvod k relacím neurčitosti

Nejprve předpokládejme, že uvažovaný kvantový systém je ve vlastním stavu ψ_m operátoru $\hat{A}$ a že odpovídající vlastní číslo je rovno a_m

$$\hat{A}\psi_m = a_m\psi_m. \tag{7.1}$$

Příkladem takového operátoru může být časově nezávislý hamiltonián, a_m má pak význam energie stacionárního stavu. Předpokládáme rovněž ortonormalitu funkcí ψ_m

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}. \tag{7.2}$$

Střední hodnota operátoru $\hat{A}$ v tomto stavu je samozřejmě rovna a_m

$$\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_m\rangle = \langle\hat{A}\rangle = a_m. \tag{7.3}$$

Střední kvadratická odchylka při měření na kvantověmechanickém souboru popsaném funkcí ψ_m je rovna nule

$$\left\langle\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)^2\right\rangle = \left\langle\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2\right\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2 = a_m^2 - a_m^2 = 0. \tag{7.4}$$

V takovém případě říkáme, že ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_m nabývá fyzikální veličina A *ostrou hodnotu* a_m.

Nyní uvažujme systém v obecném stavu

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n \tag{7.5}$$

splňujícím normovací podmínku

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{7.6}$$

V takovém případě dostaneme analogickým výpočtem

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \tag{7.7}$$

a

$$\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 (a_n - \langle \hat{A} \rangle)^2 \geq 0, \tag{7.8}$$

kde $|c_n|^2$ udává pravděpodobnost, že systém při měření najdeme ve stavu ψ_n. V obecném případě je střední kvadratická odchylka při měření veličiny A nenulová. V takovém případě říkáme, že tato veličina nemá ve stavu ψ ostrou hodnotu. Rovnost v uvedeném vztahu platí jen tehdy, pokud platí $p_n = |c_n|^2 = \delta_{mn}$, kdy $\langle \hat{A} \rangle = a_m$ a měřená veličina má ostrou hodnotu.

Měříme-li dvě veličiny A a B, bude v obecném případě platit vztah

$$\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle \geq 0. \tag{7.9}$$

Relace neurčitosti, které v dalším odvozujeme, ukazují, že v případě, kdy operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ nekomutují, je nutné v této nerovnosti nahradit nulu kladným číslem, které souvisí se střední hodnotou komutátoru $[\hat{A}, \hat{B}]$. V takovém případě je tedy spodní mez k součinu středních kvadratických odchylek kladná.

7.2 Odvození relací neurčitosti

Budeme předpokládat, že $\hat{A}$, $\hat{B}$ a $\hat{C}$ jsou hermitovské operátory a že platí komutační relace

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \tag{7.10}$$

Konkrétním příkladem mohou být operátory souřadnice $\hat{x} = x$ a impulzu $\hat{p}_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$, pro něž platí

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \tag{7.11}$$

Dále použijeme definici středních hodnot veličin popsaných operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ ve stavu ψ

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \tag{7.12}$$

a

$$\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi | \hat{B} \psi \rangle \tag{7.13}$$

a zavedeme operátory $\Delta\hat{A}$ a $\Delta\hat{B}$ odchylek od těchto středních hodnot

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \tag{7.14}$$

a

$$\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle. \tag{7.15}$$

Snadno lze ověřit, že pro tyto operátory platí podobná komutační relace jako pro $\hat{A}$ a $\hat{B}$

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = i\hat{C}, \tag{7.16}$$

neboť posunutí počátku odečítání hodnot veličin A a B nemění hodnotu komutátoru.

Pro střední kvadratickou odchylku v kvantové mechanice platí podobné pravidlo jako v klasické fyzice

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \left\langle\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)^2\right\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \tag{7.17}$$

Dále využijeme Schwarzovu nerovnost[1] ve tvaru (viz dodatek D.5)

$$\langle u|u\rangle\langle v|v\rangle \geq |\langle u|v\rangle|^2, \tag{7.18}$$

kde $\langle u|v\rangle$ označuje skalární součin.

Při jejím použití na náš případ

$$u = \Delta\hat{A}\psi, \tag{7.19}$$

$$v = \Delta\hat{B}\psi \tag{7.20}$$

dostaneme

$$\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{A}\psi\rangle\langle\Delta\hat{B}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle\right|^2. \tag{7.21}$$

Protože operátor $\Delta\hat{A}$ je hermitovský operátor podobně jako $\hat{A}$, můžeme skalární součin na pravé straně této nerovnosti zapsat ve tvaru

$$\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\psi\rangle. \tag{7.22}$$

Operátor $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$ nyní napíšeme pomocí jeho hermitovské a antihermitovské části

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right) + \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{D} + i\hat{C}\right), \tag{7.23}$$

kde

$$\hat{D} = \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \tag{7.24}$$

je hermitovský operátor. Nyní vypočítáme pravou stranu ve Schwarzově nerovnosti (7.21)

$$\frac{1}{4}\left|\langle\psi|(\hat{D} + i\hat{C})\psi\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left(\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle + i\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle\right)^*\left(\langle\psi|\hat{D}\psi\rangle + i\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle\right). \tag{7.25}$$

Jestliže tyto dvě závorky roznásobíme a uvážíme, že střední hodnoty hermitovských operátorů $\hat{C}$ a $\hat{D}$ jsou reálné, dostaneme

$$\frac{1}{4}\left|\langle\psi|(\hat{D} + i\hat{C})\psi\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left(\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2 + \langle\psi|\hat{D}\psi\rangle^2\right). \tag{7.26}$$

Vzhledem k tomu, že $\Delta\hat{A}$ a $\Delta\hat{B}$ jsou hermitovské operátory, Schwarzova nerovnost (7.21) nabývá tvar

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle \geq \frac{1}{4}\left(\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2 + \langle\psi|\hat{D}\psi\rangle^2\right). \tag{7.27}$$

[1] Někdy bývá nazývána Schwarzovou–Cauchyovou–Buňakovského nerovností.

Střední hodnota operátoru $\hat{D}$ závisí na tvaru vlnové funkce a obvykle se musí počítat pro každý případ zvlášť. Proto se obvykle vynechává a pak dostáváme *relaci neurčitosti* ve tvaru

$$\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle \geq \frac{\langle\psi|\hat{C}\psi\rangle^2}{4}. \tag{7.28}$$

Zkráceně ji zapisujeme ve tvaru

$$\boxed{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{\langle\hat{C}\rangle^2}{4}} \tag{7.29}$$

nebo

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle^{\frac{1}{2}}\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle^{\frac{1}{2}} \geq \frac{|\langle\hat{C}\rangle|}{2}. \tag{7.30}$$

Poněkud jednodušší, avšak méně obecné odvození relací neurčitosti lze nalézt v dodatku D.6.

Fyzikální význam relací neurčitostí je dán interpretací vlnové funkce a způsobem výpočtu středních hodnot měřených fyzikálních veličin. Relace neurčitosti platí pro měření na kvantověmechanickém souboru popsaném vlnovou funkcí ψ. Na jediné měření nelze relace neurčitosti aplikovat. Vzhledem k pravděpodobnostnímu charakteru kvantové mechaniky jsou střední kvadratické odchylky vystupující v relacích neurčitosti obecně nenulové a díky komutačním relacím mezi odpovídajícími nekomutujícími operátory existuje spodní mez pro součin těchto odchylek. Pro komutující operátory je na pravé straně relací neurčitosti nula, takže v takovém případě se na součin středních kvadratických odchylek neklade žádné omezení.

Na závěr poznamenejme, že při použití relací neurčitosti závisí rovněž na charakteru vlnových funkcí, jejichž pomocí počítáme střední hodnotu $\langle\hat{C}\rangle$. Pro některé vlnové funkce může být tato hodnota nulová, přestože je operátor $\hat{C}$ různý od nuly.

7.3 Heisenbergovy relace neurčitosti

Heisenberg [52] odvodil relaci neučitosti pro operátory souřadnice $\hat{x}$ a impulzu $\hat{p}_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$, pro které z rovnic (7.11), (7.21) a (7.29) vyplývá

$$\boxed{\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}} \tag{7.31}$$

nebo

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle^{\frac{1}{2}}\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\rangle^{\frac{1}{2}} \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{7.32}$$

Heisenberg tuto relaci zapisoval ve tvaru

$$\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{7.33}$$

kde si musíme být vědomi přesného smyslu Δx a Δp_x vyplývajícího z rovnice (7.32). Analogické relace platí i pro operátory $\hat{y}$ a $\hat{p}_y$ resp. $\hat{z}$ a $\hat{p}_z$.

Nyní si všimneme dvou limitních případů. Pro lokalizovanou částici s vlnovou funkcí blížící se δ-funkci, tj. v případě $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle \to 0$, dostáváme $\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\rangle \to \infty$. Pro delokalizovanou volnou částici s vlnovou funkcí ve tvaru rovinné vlny dostáváme druhý krajní případ $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle \to \infty$ a $\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\rangle \to 0$. Vidíme, že pokus o lokalizaci částice v souřadnicovém prostoru (x-prostoru) vede k její delokalizaci v impulzovém prostoru (p_x-prostoru) a naopak.

Podobný jev je znám i z optiky. Čím kratší pulz světla chceme vytvořit, tím širší spektrum frekvencí je třeba použít a naopak.

Zajímavým případem je vlnová funkce ve tvaru gaussovského klubka diskutovaná v kap. 4.5, pro kterou platí rovnítko v relacích neurčitosti. Závěr o lokalizaci resp. delokalizaci částice v x-prostoru či p_x-prostoru platí samozřejmě i pro tento případ.

Snadno se přesvědčíme, že platí rovněž komutační relace

$$[\hat{x}, \hat{p}_x - qA_x] = i\hbar, \tag{7.34}$$

kde A_x je x-ová složka vektorového potenciálu elektromagnetického pole. Postup z předcházející kapitoly lze proto použít i pro operátory v této komutační relaci.

7.4 Důsledky relací neurčitosti

Nejprve uvažujme elektron, který při svém pohybu ve Wilsonově mlžné komoře vytváří určitou stopu, kterou lze zaznamenat. Protože je známa rychlost elektronu i jeho trajektorie, tak se zdá, že to je ve sporu s relacemi neurčitosti, podle kterých lze tyto veličiny změřit jen s jistou neurčitostí. Otázkou je, jak velké jsou tyto neurčitosti ve srovnání s experimentálně dosažitelnou přesností. Pro hrubé řádové odhady budeme předpokládat, že platí rovnítko v Heisenbergově relaci neurčitosti (7.33). Předpokládáme, že poloha elektronu v mlžné komoře je určena s přesností $\Delta x \approx 10^{-6}$ m, rychlost elektronu je $v \approx 10^7$ m s^{-1} a jeho hmotnost se rovná $m_e \approx 10^{-30}$ kg. Neurčitost rychlosti můžeme vypočítat ze vztahu

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m_e}, \tag{7.35}$$

kde neurčitost impulzu Δp_x je podle Heisenbergovy relace neurčitosti rovna

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x}. \tag{7.36}$$

Dosazením uvedených hodnot dostaneme odhad $\Delta v_x \approx 10^2$ m s^{-1}, tj. neurčitost složky rychlosti v_x je asi o 5 řádů nižší než rychlost $v \approx 10^7$ m s^{-1}. Vzhledem k dosažitelné experimentální přesnosti proto není nutné relace neurčitosti brát v úvahu a lze použít klasický popis[2].

[2]Výše uvedená diskuze se vztahuje ke kvantověmechanickým souborům s uvažovanými neurčitostmi souřadnic a impulzu.

Na druhé straně uvažujme elektron pohybující se v atomu vodíku o lineárním rozměru $l \approx 10^{-10}$ m, to znamená, že lineární neurčitost polohy elektronu je přibližně rovna l. Dále předpokládáme, že pracujeme v souřadnicovém systému s počátkem v jádru tohoto atomu, takže můžeme předpokládat

$$\langle \hat{x} \rangle = 0 \tag{7.37}$$

a

$$\langle \hat{p}_x \rangle = 0. \tag{7.38}$$

Pak můžeme relaci neurčitosti (7.31) psát ve tvaru

$$\langle \hat{x}^2 \rangle \langle \hat{p}_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \tag{7.39}$$

Zavedeme-li nyní kinetickou energii vztahem

$$T = \left\langle \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m_\mathrm{e}} \right\rangle \tag{7.40}$$

a nahradíme-li každý z členů $\langle \hat{x}^2 \rangle$, $\langle \hat{y}^2 \rangle$ a $\langle \hat{z}^2 \rangle$ v Heisenbergových relacích neurčitosti s rovnítkem výrazem l^2, dostaneme

$$T \geq \frac{3\hbar^2}{8m_\mathrm{e}l^2}. \tag{7.41}$$

Dosazením do tohoto vzorce dostaneme řádový odhad pravé strany 10 eV. Velikost kinetické, a tedy i celkové energie v atomech by tudíž měla být řádově 10 eV nebo větší, což odpovídá experimentu (energie základního stavu atomu vodíku je rovna -13,605 eV) [3]. Kdybychom podobný odhad provedli pro energii nukleonu v jádru o rozměrech $l \approx 10^{-14}$ m, dostali bychom energie řádově 1 MeV, což opět přibližně odpovídá skutečnosti. Omezujeme-li tedy prostorový pohyb částice, pak v důsledku relací neurčitosti stoupá její kinetická energie. Současně vidíme, že v posledních dvou případech je neurčitost polohy částice srovnatelná s rozměry oblasti, v níž se částice pohybuje. Proto je klasická fyzika v takových případech zcela nepoužitelná.

[3] Přesněji lze postupovat pomocí tzv. viriálového teorému, který dává do souvislosti střední hodnoty kinetické a potenciální energie.

Kapitola 8

Lineární harmonický oscilátor v souřadnicové reprezentaci

The most incomprehensible fact about the universe is that it is comprehensible.
Albert Einstein

Než přistoupíme k řešení Schrödingerovy rovnice pro lineární harmonický oscilátor, uvedeme několik poznámek.

Analytické řešení Schrödingerovy rovnice je možné jen pro malý počet fyzikálně zajímavých úloh. Lineární harmonický oscilátor patří mezi jednu z těchto výjimek a jeho významnost je dána tím, že potenciální energii tohoto oscilátoru lze považovat za první členy Taylorova rozvoje obecné potenciální energie $V(x)$ v okolí jejího minima $x = x_0$

$$V(x) = V(x_0) + \left.\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left.\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \cdots . \tag{8.1}$$

Protože první derivace potenciální energie v minimu je rovna nule, pak, omezíme-li se na rozvoj do druhého řádu a odečítáme-li energii od hodnoty $V(x_0)$, dostaneme potenciální energii ve zjednodušeném tvaru

$$V(x) = \frac{1}{2} \left.\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=x_0} (x - x_0)^2, \tag{8.2}$$

který odpovídá lineárnímu harmonickému oscilátoru.

Podobným způsobem lze postupovat i ve více dimenzích a pro vícečásticové systémy. Provedeme-li rozvoj potenciální energie do druhého řádu odchylek od minima, můžeme zavedením normálních souřadnic převést rozvoj potenciální energie do normálního tvaru, kdy lze vícerozměrný potenciál napsat jako sumu kvadratických členů typu (8.2). Výslednou vícerozměrnou Schrödingerovu rovnici pro systém nezávislých lineárních oscilátorů v jednotlivých normálních souřadnicích pak lze řešit separací proměnných. Tento postup se používá při zkoumání kmitů molekul, krystalů a řadě dalších případů. Z toho vyplývá důležitá role lineárního harmonického oscilátoru pro mnoho fyzikálně zajímavých problémů.

Na druhé straně je třeba si uvědomit určitá fyzikální omezení tohoto modelu. Skutečnost, že při zvětšování souřadnice $x \to \infty$ roste síla $F = -\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$ nade všechny meze, je nefyzikální. U reálných systémů dojde při zvětšování x dříve či později k disociaci systému (viz např. dvouatomové molekuly), což znamená, že potenciální energie $V(x)$ musí pro $x \to \infty$ nabývat konečné hodnoty.

Potenciál symetrický vzhledem ke svému minimu, jako je potenciál lineárního harmonického oscilátoru, neumožňuje popsat např. takový jev, jako je tepelná roztažnost látek. Je-li párový potenciál mezi atomy v látce symetrický vzhledem ke svému minimu, nedochází při zvyšování teploty, kdy systém přechází směrem k vyšším energiím, ke změně střední vzdálenosti mezi atomy. Obvyklou tepelnou roztažnost, kdy se průměrné vzdálenosti mezi atomy s teplotou zvyšují, lze popsat pouze nesymetrickým potenciálem, který roste pomaleji pro $x > x_0$ než pro $x < x_0$. Bohužel, při zavedení vyšších než kvadratických členů do potenciálu už není odpovídající Schrödingerova rovnice analyticky řešitelná.

8.1 Stacionární stavy

Nyní nalezneme řešení nečasové Schrödingerovy rovnice pro lineární harmonický oscilátor, která má v obvyklém označení tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{8.3}$$

Nejdříve zavedeme bezrozměrné proměnné

$$\xi = \frac{x}{x_0} \tag{8.4}$$

a

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}, \tag{8.5}$$

kde

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{8.6}$$

Při použití těchto nových proměnných má Schrödingerova rovnice (8.3) jednodušší tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\psi(\xi) = 0. \tag{8.7}$$

V souladu s požadavky kladenými na vlnovou funkci budeme požadovat, aby řešení této rovnice byla konečná, jednoznačná, spojitá a kvadraticky integrabilní na intervalu $\xi \in (-\infty, \infty)$.

Nejprve se budeme zabývat asymptotikou vlnové funkce ψ pro $\xi \to \pm\infty$, kdy lze λ v rovnici zanedbat. Snadno ověříme, že v asymptotické oblasti $\xi \to \infty$ lze řešení rovnice

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = 0 \tag{8.8}$$

psát pro $\xi \to \pm\infty$ ve tvaru

$$\psi(\xi) = A\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + B\mathrm{e}^{\xi^2/2}, \tag{8.9}$$

kde A a B jsou libovolné konstanty[1]. Pro znaménko plus v exponenciále vlnová funkce ψ diverguje pro $\xi \to \pm\infty$ a nelze ji normovat. Je proto zřejmé, že nezávisle na vlastním čísle λ, a tedy i na energii E se vlnové funkce asymptoticky chovají jako funkce

$$\psi(\xi) = A\mathrm{e}^{-\xi^2/2}. \tag{8.10}$$

Vzhledem k tomuto závěru budeme v dalším hledat řešení Schrödingerovy rovnice (8.7) ve tvaru

$$\psi(\xi) = v(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}, \tag{8.11}$$

kde $v(\xi)$ je zatím neurčená funkce modulující exponenciálu $\exp(-\xi^2/2)$.

Abychom nalezli rovnici pro tuto funkci, dosadíme tento vztah do rovnice (8.7) a po úpravě dostaneme diferenciální rovnici

$$v'' - 2\xi v' + (\lambda - 1)v = 0, \tag{8.12}$$

kde čárka označuje derivaci podle ξ. Funkci $v(\xi)$ budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \tag{8.13}$$

Pro derivace této funkce dostáváme

$$v'(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k\ \xi^{k-1} \tag{8.14}$$

a

$$v''(\xi) = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1)\xi^{k-2}. \tag{8.15}$$

Dosazením těchto vztahů do rovnice (8.12) a přečíslováním sčítacích indexů obdržíme

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k\ + (\lambda - 1)a_k\right] \xi^k = 0. \tag{8.16}$$

Protože tento vztah má platit pro všechna ξ, musí být výraz v hranaté závorce roven nule. To vede na rekurentní vztah

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{8.17}$$

[1]Obecněji lze místo uvedených exponenciál vzít funkce $\xi^m \exp(\pm\xi^2/2)$. Tato řešení jsou však v následujícím postupu rovněž zahrnuta.

Zvolíme-li buď $a_0 = 1$, $a_1 = 0$ nebo $a_0 = 0$, $a_1 = 1$, je příslušná funkce (8.11) řešením Schrödingerovy rovnice (8.7) [2]. V prvním případě dostaneme sudou funkci, ve druhém funkci lichou. To souvisí s tím, že díky symetrii potenciální energie $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ je hustota pravděpodobnosti $|\psi(x)|^2$ sudá.

Vlnová funkce (8.11) však musí splňovat požadavky kladené na vlnovou funkci. Z požadavku, že vlnová funkce musí být kvadraticky integrabilní vyplývá, že musí platit

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = \lim_{\xi\to\pm\infty} \psi(\xi) = 0. \tag{8.18}$$

Podívejme se nyní na chování funkce $v(\xi)$ dané rekurentním vztahem (8.17). Je zřejmé, že pro velká k přechází tento rekurentní vztah na

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \approx \frac{2k}{(k+2)(k+1)}. \tag{8.19}$$

Tento poměr koeficientů je však pro velká k stejný jako v případě funkce $f(\xi) = \exp(\xi^2) = \sum b_k \xi^k$, kdy lze ukázat, že pro koeficienty se sudým indexem platí

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{2}{k+2}. \tag{8.20}$$

Odtud vidíme, že řada $v(\xi)$ se pro velká ξ chová jako funkce $\exp(\xi^2)$, což znamená, že vlnová funkce (8.11) pro $\xi \to \pm\infty$ diverguje[3]. Funkce $v(\xi)$ proto nemůže mít předpokládáný tvar nekonečné řady. Nezbývá tudíž než předpokládat, že funkce $v(\xi)$ má tvar polynomu, tj. že počínaje určitým n platí

$$a_{n+2} = 0 \tag{8.21}$$

(viz rekuretní vztah (8.17)). To ale znamená, že dosud libovolné λ musí splňovat podmínku

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{8.22}$$

S ohledem na vztah (8.5) dostáváme tedy i kvantování energií stacionárních stavů

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots.} \tag{8.23}$$

Kvantování energií je opět dáno okrajovými podmínkami, v tomto případě podmínkou (8.18).

Polynomy $v(\xi)$ lze zapsat ve tvaru tzv. *Hermitových polynomů*

$$H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n} \mathrm{e}^{-\xi^2}. \tag{8.24}$$

---

[2]Řešení typu $a_0 \neq 0$ a současně $a_1 \neq 0$ nepřichází v úvahu, neboť vzhledem k rekurentnímu vztahu (8.17) nelze pro sudé i liché koeficienty a_n najednou splnit dále uvedenou podmínku $a_{n+2} = 0$.

[3]Viz též [16].

Hermitovy polynomy jako jedny z ortogonálních polynomů mají řadu zajímavých vlastností (viz dodatek D.9). Kromě vztahu

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \tag{8.25}$$

vyhovují rovněž rovnicím

$$\frac{\mathrm{d}H_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \tag{8.26}$$

a

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi). \tag{8.27}$$

Hermitovy polynomy jsou ortogonální s *váhovou funkcí* $\exp(-\xi^2)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} H_m(\xi)H_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi = 2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{mn}. \tag{8.28}$$

Uvedeme explicitní vyjádření několika Hermitových polynomů

$$H_0(\xi) = 1, \tag{8.29}$$

$$H_1(\xi) = 2\xi, \tag{8.30}$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \tag{8.31}$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \tag{8.32}$$

a

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \tag{8.33}$$

Dále platí [4]

$$H_{2n}(0) = (-1)^n 2^n (2n-1)!! \tag{8.34}$$

a

$$H_{2n+1}(0) = 0. \tag{8.35}$$

Vzhledem ke vztahům (8.11) a (8.28) je zřejmé, že vlnové funkce $\psi_n(\xi)$ splňující normovací podmínku

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)|^2\,\mathrm{d}\xi = 1 \tag{8.36}$$

mají tvar

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{8.37}$$

kde $\xi = x/x_0$.

Normované vlnové funkce $\psi_n(x)$ splňující normovací podmínku v proměnné x

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \tag{8.38}$$

[4] Dvojfaktoriál je definován vztahy $(2n-1)!! = 1.3.5\ldots(2n-1)$ a $(2n)!! = 1.2.4\ldots(2n)$.

mají tvar

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-(x/x_0)^2/2} H_n(x/x_0), \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{8.39}$$

Energie základního stavu nebo též tzv. *nulová energie* odpovídající $n = 0$ je pro fyzikálně zajímavé frekvence $\omega > 0$ větší než nula

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{8.40}$$

To je podstatný rozdíl proti klasické fyzice, kde částice může mít nulovou energii v minimu potenciální energie $V(x)$. Nenulovost této energie souvisí s relacemi neurčitosti, podle kterých je v základním stavu při prostorovém omezení pohybu, tj. konečné hodnotě $\langle(\Delta x)^2\rangle$, nenulová hodnota $\langle(\Delta p)^2\rangle$, a tedy i kinetická energie. Existenci takových *nulových kmitů* lze ověřit například v případě kmitů krystalové mřížky, kde, na rozdíl od klasické fyziky, vlivem nulových kmitů nevymizí rozmazání difrakčního obrazu ani při snižování teploty k absolutní nule $T \to 0$. Nulové kmity existují i v případě tzv. elektromagnetického vakua (stav elektromagnetického pole s nulovým počtem fotonů).

Vlnová funkce základního stavu lineárního harmonického oscilátoru má jednoduchý tvar

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-x^2/(2x_0^2)}. \tag{8.41}$$

Vlastní energie E_n a odpovídající vlnové funkce $\psi_n(x)$ lineárního harmonického oscilátoru jsou ukázány na obr. 8.1.

Zajímavé je, že energie E_n jsou ekvidistantní, což platí pouze pro lineární harmonický oscilátor. Pozoruhodné je rovněž to, že vlnové funkce jsou nenulové i v klasicky zakázané oblasti, kde platí

$$E < V(x). \tag{8.42}$$

Je proto nenulová pravděpodobnost nalézt částici i mimo vnitřní oblast potenciální energie $V(x)$, viz obr. 8.2.

Vlnové funkce $\psi_n(\xi)$ se chovají pro $\xi \to \pm\infty$ jako funkce

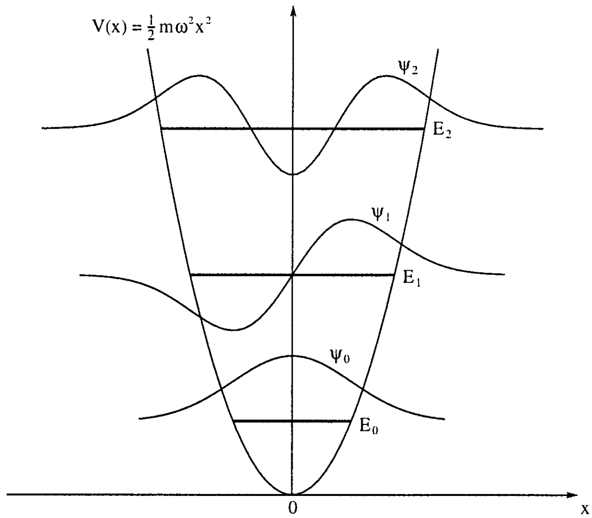
$$\psi_n(\xi) \approx \xi^n \mathrm{e}^{-\xi^2/2}. \tag{8.43}$$

Všechny stavy lineárního harmonického oscilátoru mají charakter tzv. *vázaných stavů*, pro které je částice lokalizována v určité oblasti prostoru. Pro takové stavy lze ukázat, že příslušné *energetické spektrum* je v jednorozměrném případě nedegenerované (viz příklad 1 v kap. 21.12).

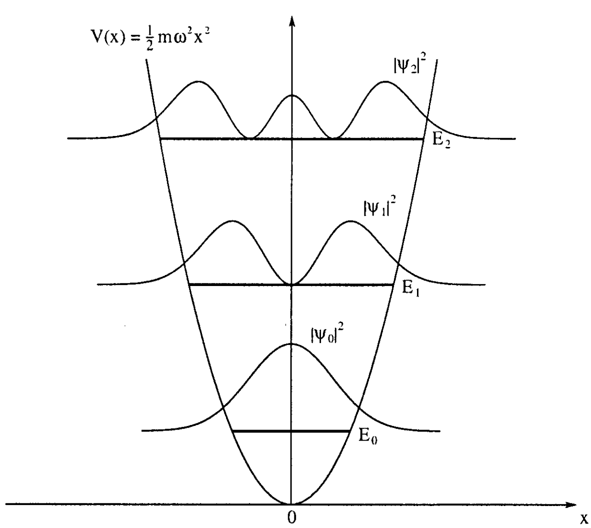
Jak už jsme uvedli, vlnové funkce $\psi_n(x)$ jsou buď sudé, nebo liché

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x), \tag{8.44}$$

kde faktor $(-1)^n$ vyjadřuje *paritu* vlnové funkce.



Obrázek 8.1: Lineární harmonický oscilátor. Vlastní energie E_n a odpovídající vlnové funkce $\psi_n(x)$ pro $n = 0, 1, 2$. Úsečky znázorňující polohu vlastních energií představují klasicky dovolenou oblast.

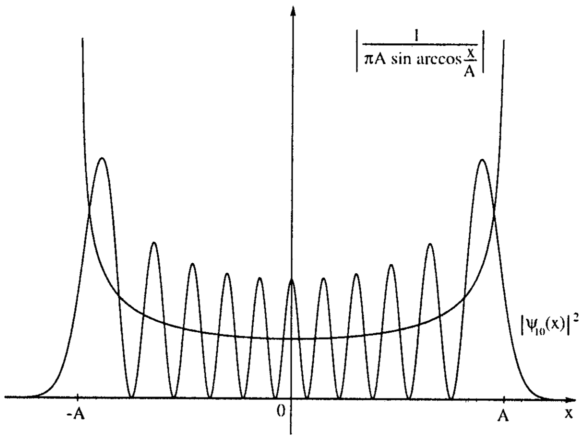


Obrázek 8.2: Lineární harmonický oscilátor. Vlastní energie E_n a hustoty pravděpodobnosti $|\psi_n(x)|^2$ pro $n = 0, 1, 2$.

S rostoucí energií E_n se zvětšuje oblast, v níž je částice lokalizována. Přitom se rovněž zmenšuje relativní vzdálenost hladin

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{1}{n + 1/2}, \tag{8.45}$$

vliv kvantování se zmenšuje a blížíme se klasické oblasti. To platí i pro hustotu pravděpodobnosti, která se pro velká n blíží klasické pravděpodobnosti nalézt částici v místě x (viz obr. 8.3) [5].



Obrázek 8.3: Lineární harmonický oscilátor. Porovnání kvantové hustoty pravděpodobnosti $|\psi_n(x)|^2$ pro $n = 10$ s klasickou hustotou pravděpodobnosti $|1/[\pi A \sin \arccos(x/A)]|$.

Nyní určíme střední hodnoty několika fyzikálně zajímavých veličin ve stacionárních stavech lineárního harmonického oscilátoru. Budeme předpokládat vlnové funkce ve tvaru

$$\psi_n(\xi) = N_n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \tag{8.46}$$

kde

$$N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}} \tag{8.47}$$

je normovací faktor a

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x. \tag{8.48}$$

[5] V klasickém případě lze za předpokladu $x = A\cos\omega t$ z energie rovné $E_n = \hbar\omega(n + 1/2) = (1/2)mv_{max}^2$ určit maximální rychlost $v_{max} = \sqrt{\hbar\omega(2n+1)/m}$ a amplitudu pohybu $A = v_{max}/\omega = \sqrt{\hbar(2n+1)/(m\omega)}$. Pravděpodobnost nalezení částice v bodě x je nepřímo úměrná rychlosti $P(x) = |c/\dot{x}| = |c/[\omega A \sin \arccos(x/A)]|$, kde c je konstanta. Po znormování této pravděpodobnosti dostaneme $P(x) = |1/[\pi A \sin \arccos(x/A)]| = 1/[\pi A\sqrt{1 - (x/A)^2}]$.

Vzhledem k sudosti, resp. lichosti funkcí $\psi_n(x)$ (viz rovnice (8.44)) zřejmě platí

$$\langle\hat{x}\rangle_n = \langle\psi_n|x|\psi_n\rangle = 0 \tag{8.49}$$

a

$$\langle\hat{p}\rangle_n = \langle\psi_n| - i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)|\psi_n\rangle = 0. \tag{8.50}$$

Dále dostáváme

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = N_n^2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi^2}H_n^2(\xi)\xi^2\,\mathrm{d}\xi. \tag{8.51}$$

Nyní využijeme vztahu (8.24), který dosadíme za jeden Hermitův polynom, a dostaneme

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = N_n^2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)(-1)^n\frac{\mathrm{d}^n\mathrm{e}^{-\xi^2}}{\mathrm{d}\xi^n}\xi^2\,\mathrm{d}\xi. \tag{8.52}$$

Provedeme-li nyní n-krát integraci per partes, obdržíme

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = N_n^2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n\left(H_n(\xi)\xi^2\right)}{\mathrm{d}\xi^n}\,\mathrm{d}\xi. \tag{8.53}$$

Napíšeme-li nyní $H_n(\xi)\xi^2$ jako polynom

$$H_n(\xi)\xi^2 = a_n\xi^{n+2} + a_{n-2}\xi^n + \cdots, \tag{8.54}$$

dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}^n\left(H_n(\xi)\xi^2\right)}{\mathrm{d}\xi^n} = a_n\frac{(n+2)!}{2}\xi^2 + a_{n-2}n!. \tag{8.55}$$

Pro Hermitovy polynomy platí

$$a_{n-2} = -a_n\frac{n(n-1)}{4}, \tag{8.56}$$

kde

$$a_n = 2^n. \tag{8.57}$$

Uvážíme-li dále, že

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi} \tag{8.58}$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi^2}\xi^2\,\mathrm{d}\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \tag{8.59}$$

dostaneme po úpravě

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega}(n+1/2). \tag{8.60}$$

Z posledního vztahu můžeme vypočítat i střední hodnotu potenciální energie

$$\langle\hat{V}\rangle_n = \frac{m\omega^2}{2}\langle\hat{x}^2\rangle_n = \frac{\hbar\omega(n+1/2)}{2} = \frac{E_n}{2}. \tag{8.61}$$

Pro střední kinetickou energii dostaneme

$$\langle \hat{T} \rangle_n = E_n - \langle \hat{V} \rangle_n = \frac{E_n}{2}. \tag{8.62}$$

Odtud vyplývá i střední hodnota kvadrátu operátoru impulzu

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_n = 2m\langle \hat{T} \rangle_n = m\hbar\omega(n + 1/2). \tag{8.63}$$

Platí proto vztah

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n \langle \hat{p}^2 \rangle_n = \hbar^2 (n + 1/2)^2. \tag{8.64}$$

Vidíme, že pro základní stav $n = 0$ jsou splněny relace neurčitosti s rovnítkem

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_{n=0} \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_{n=0} = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{8.65}$$

Pro vyšší stavy platí relace neurčitosti se znaménkem větší.

Ve stacionárních stavech lineárního harmonického oscilátoru, které jsme zde nalezli, se střední hodnoty časově nezávislých fyzikálních veličin nemění v čase. Dále budeme zkoumat pohyb časově závislého gaussovského vlnového klubka vytvořeného ze stacionárních stavů, o kterém ukážeme, že se pohybuje podobně jako klasická částice.

8.2 Řešení časové Schrödingerovy rovnice ve tvaru gaussovského klubka

Vlnovou funkci lineárního harmonického oscilátoru v čase v $t = 0$ budeme předpokládat ve tvaru gaussovského klubka

$$\psi(\xi, 0) = N\mathrm{e}^{-(\xi - \xi_0)^2/2}, \tag{8.66}$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \tag{8.67}$$

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_0 \tag{8.68}$$

a x_0 je libovolně zadaný střed klubka. Normovací faktor je označen N.

Položíme-li $\xi_0 = 2\lambda$, dostaneme

$$\psi(\xi, 0) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2 - \lambda^2}\mathrm{e}^{2\xi\lambda - \lambda^2}. \tag{8.69}$$

Z teorie ortogonálních polynomů je však známo, že druhá exponenciála je tzv. *vytvářející funkce* pro Hermitovy polynomy, pro kterou platí (viz dodatek D.9)

$$\mathrm{e}^{2\xi\lambda - \lambda^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{\lambda^n}{n!}. \tag{8.70}$$

Dostáváme proto

$$\psi(\xi,0) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2-\lambda^2}\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{\lambda^n}{n!}. \tag{8.71}$$

Časová závislost stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru je dána faktorem $\exp[E_n t/(i\hbar)]$. Časově závislou vlnovou funkci odpovídající počáteční podmínce (8.66) můžeme tudíž psát ve tvaru

$$\psi(\xi,t) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2-\lambda^2}\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{\lambda^n}{n!}\mathrm{e}^{(n+1/2)\hbar\omega t/(i\hbar)} \tag{8.72}$$

nebo též

$$\psi(\xi,t) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\omega t/(2i)}\sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi)\frac{[\lambda\exp(-i\omega t)]^n}{n!}. \tag{8.73}$$

Sumu v této rovnici můžeme sečíst pomocí vytvářející funkce s výsledkem

$$\psi(\xi,t) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\omega t/(2i)}\mathrm{e}^{-\lambda^2\exp(-2i\omega t)+2\lambda\exp(-i\omega t)\xi}. \tag{8.74}$$

Položíme-li nyní $\lambda = \xi_0/2$, dostaneme po úpravě

$$\psi(x,t) = N\mathrm{e}^{-i\omega t/2}\mathrm{e}^{i(m\omega/\hbar)[x_0^2\cos(\omega t)-2xx_0]\sin(\omega t)/2}\times \tag{8.75}$$
$$\times\mathrm{e}^{-(m\omega/\hbar)[x^2-2xx_0\cos(\omega t)+x_0^2\cos^2(\omega t)]/2}.$$

Odpovídající hustota pravděpodobnosti je rovna

$$|\psi(x,t)|^2 = N^2\mathrm{e}^{-(m\omega/\hbar)[x-x_0\cos(\omega t)]^2}, \tag{8.76}$$

kde

$$N = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}. \tag{8.77}$$

Z předposledního výrazu vidíme, že střed vlnového balíku se pohybuje po klasické trajektorii $x = x_0\cos(\omega t)$. O tom se můžeme přesvědčit i přímým výpočtem $\langle\hat{x}\rangle$, který dává

$$\langle\hat{x}\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{e}^{-(m\omega/\hbar)[x-x_0\cos(\omega t)]^2}\,\mathrm{d}x = x_0\cos(\omega t). \tag{8.78}$$

Podobně můžeme vypočítat i

$$\langle\hat{x}^2\rangle = x_0^2\cos^2(\omega t) + \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{8.79}$$

Analogicky dostaneme

$$\langle\hat{p}\rangle = -m\omega x_0\sin(\omega t) \tag{8.80}$$

a

$$\langle\hat{p}^2\rangle = m^2\omega^2x_0^2\sin^2(\omega t) + \frac{\hbar m\omega}{2}. \tag{8.81}$$

Z výše uvedených vztahů dále dostáváme

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \tag{8.82}$$

a

$$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}. \tag{8.83}$$

Vidíme, že tyto střední kvadratické odchylky se nemění v čase a že jsou splněny relace neurčitosti s rovnítkem

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{8.84}$$

Na rozdíl od jiných vlnových balíků se uvažovaný vlnový balík s rostoucím časem nerozplývá.

Dále dostáváme

$$m\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = -mx_0\omega^2\cos(\omega t) \tag{8.85}$$

a

$$\langle\hat{F}\rangle = -k\langle\hat{x}\rangle = -mx_0\omega^2\cos(\omega t), \tag{8.86}$$

kde jsme zavedli *operátor síly*

$$\hat{F} = -k\hat{x}. \tag{8.87}$$

Pro pohyb středu vlnového balíku proto platí klasická pohybová rovnice

$$m\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = \langle\hat{F}\rangle. \tag{8.88}$$

Vidíme, že veličiny stojící v klasických pohybových rovnicích jsou zřejmě kvantově-mechanické střední hodnoty příslušných operátorů. Obecnější diskuse těchto otázek je uvedena v kap. 12.4.

Celková energie uvažovaného vlnového balíku je rovna součtu energie klasického oscilátoru a nulové energie kvantového oscilátoru

$$E = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2 + \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{8.89}$$

Na závěr si všimněme, že pro makroskopický hmotný bod s hmotností $m = 1$ kg a kruhovou frekvencí $\omega = 1\ \mathrm{s}^{-1}$ je pravděpodobnost nalézt bod mimo klasickou trajektorii nepatrná (viz rovnice (8.76)). Současně lze s přesností řádu $\hbar$ zanedbat i členy $\frac{\hbar}{2m\omega}$, $\frac{\hbar m\omega}{2}$ a $\frac{\hbar\omega}{2}$ v rovnicích (8.79), (8.81) a (8.89) a přejít tak pro $\hbar \to 0$ ke klasickým vztahům. Zároveň je z porovnání posledních dvou členů v rovnici (8.89) a z rovnice $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ vidět, že pro makroskopický hmotný bod jsou v námi uvažovaném vlnovém balíku zastoupeny stacionární stavy s neobyčejně vysokými kvantovými čísly n řádu $1/\hbar$.

Kapitola 9

Energetické spektrum Schrödingerovy rovnice

Common sense is nothing more than a deposit of prejudices laid down in the mind before you reach eighteen.
Albert Einstein

Jak jsme viděli v případě harmonického oscilátoru, chování vlnové funkce $\psi(x)$ pro $x \to \pm\infty$ je dáno tvarem potenciální energie $V(x)$ v této oblasti. Nyní budeme uvažovat často se vyskytující případ, kdy potenciální energie jde pro $x \to \pm\infty$ ke konstantě.

Uvažujeme jednorozměrnou nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{9.1}$$

O potenciální energii předpokládáme, že nabývá limitních hodnot (viz obr. 9.1)

$$\lim_{x\to\pm\infty} V(x) = V_{\pm}, \tag{9.2}$$

kde bez újmy na obecnosti platí

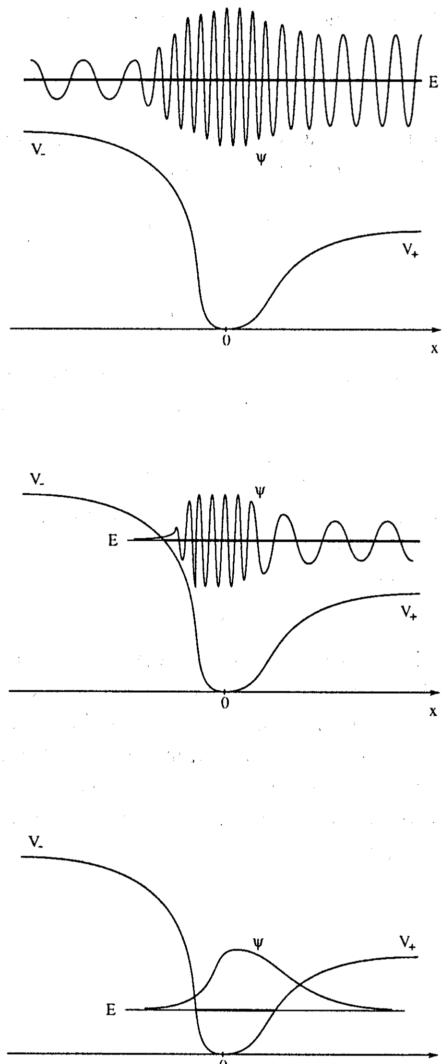
$$V_- \geq V_+. \tag{9.3}$$

O charakteru energetického spektra a vlnových funkcí lze v takovém případě udělat následující závěry.

Nejdříve budeme uvažovat případ, kdy vlastní energie leží nad oběma limitními hodnotami potenciální energie (horní část obr. 9.1)

$$E > V_- \geq V_+. \tag{9.4}$$

V tomto případě jde o *spojité energetické spektrum*, které není kvantované. Každá energie je dvakrát degenerovaná (přísluší k ní vždy dvě lineárně nezávislá řešení), což odpovídá pohybu částice ve dvou možných směrech. Vlnové funkce mají oscilující charakter, nejsou kvadraticky integrabilní, zůstávají ale omezené.



Obrázek 9.1: Kvalitativní tvar vlnových funkcí ψ pro různé hodnoty energie E. Energie zobrazeného stavu klesá při přechodu od horního obrázku směrem dolů.

Dále uvažujeme případ, kdy energie leží nade dnem minima potenciální energie v obr. 9.1 a přitom platí (spodní část obr. 9.1)

$$E < V_+ \leq V_- . \tag{9.5}$$

V tomto případě dostáváme *diskrétní energetické spektrum.* Odpovídající energie jsou *nedegenerované* (každé energii přísluší vždy jen jedna vlnová funkce, viz příklad 1 z kap. 21.12), všechny energie E_n jsou navzájem různé

$$E_1 < E_2 < E_3 \cdots \tag{9.6}$$

a je jich buď konečný, nebo nekonečný, avšak spočetný počet. Fyzikálně významná řešení klesají pro velké $|x|$ následujícím způsobem

$$\psi(x) \approx \mathrm{e}^{-x\sqrt{2m(V_+ - E)}/\hbar}, \quad x \to \infty, \tag{9.7}$$

a

$$\psi(x) \approx \mathrm{e}^{x\sqrt{2m(V_- - E)}/\hbar}, \quad x \to -\infty. \tag{9.8}$$

Tato řešení jsou kvadraticky integrabilní a nazývají se *vázané stavy*. Zbývající stavy v této oblasti exponenciálně divergují pro velké $|x|$ a nemají fyzikální význam. Platí-li navíc

$$V(x) = \text{konst} \tag{9.9}$$

pro $|x| > x_0$, kde x_0 je kladné, tj. má-li potenciál konečný poloměr, existuje v této oblasti pouze konečný počet hladin.

Konečně, v oblasti energií

$$V_+ < E < V_- \tag{9.10}$$

(prostřední část obr. 9.1) platí kombinace závěrů ze dvou předcházejících případů. Energetické spektrum je spojité a nedegenerované. Vlnové funkce jsou exponenciálně tlumené pro $x \to -\infty$, oscilují pro $x \to \infty$ a nejsou kvadraticky integrabilní.

Uvedené závěry platí přesně jen pro jednorozměrnou Schrödingerovu rovnici. Ve více dimenzích lze postupovat analogicky, mohou však nastávat složitější případy, jako například vícenásobné degenerace energetických hladin, které obvykle souvisejí se symetrií řešeného problému.

Kapitola 10

Základy teorie reprezentací*

In mathematics you don't understand things. You just got used to them.
John von Neumann

10.1 Impulzová reprezentace

Dosud jsme pracovali s vlnovou funkcí $\psi(x)$, tj. v *souřadnicové reprezentaci*. Podle postulátů kvantové mechaniky dochází při měření k redukci vlnové funkce, která se mění na některou z vlastních funkcí operátoru odpovídajícího měřené fyzikální veličině. Pravděpodobnost naměření příslušné vlastní hodnoty je dána kvadrátem koeficientu rozvoje normované vlnové funkce $\psi(x)$ do ortonormálních vlastních funkcí tohoto operátoru. Obecně je tedy žádoucí provést rozklad funkce $\psi(x)$ do těchto vlastních funkcí neboli přejít do jiné reprezentace. To může být výhodné i proto, že někdy lze nečasovou Schrödingerovu rovnici v této nové reprezentaci řešit jednodušeji než v reprezentaci původní.

Nejdříve budeme zkoumat rozklad vlnové funkce $\psi(x)$ do vlastních funkcí operátoru impulzu, tj. do rovinných vln.

Vyjdeme z vlastností Fourierovy transformace, která navzájem spojuje vlnovou funkci $\psi(x)$ a její Fourierův obraz $\varphi(p)$ (tzv. *impulzová reprezentace*)

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)} \, \mathrm{d}p \tag{10.1}$$

a

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \mathrm{e}^{px/(i\hbar)} \, \mathrm{d}x, \tag{10.2}$$

kde p označuje x-ovou složku impulzu. Dosazením posledního vztahu do předcházející rovnice dostaneme

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \psi(x') \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{p(x'-x)/(i\hbar)} \, \mathrm{d}p. \tag{10.3}$$

Odtud vyplývá vyjádření Diracovy δ-funkce

$$\delta(x'-x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{p(x'-x)/(i\hbar)}\,dp, \tag{10.4}$$

použité při normování vlnových funkcí volné částice ve tvaru rovinných vln (kap. 4.3).

Nyní nalezneme vyjádření operátorů souřadnice $\hat{x}$ a impulzu $\hat{p}$ při působení na Fourierův obraz $\varphi(p)$. Je zřejmé, že při provedení derivace podle parametru platí

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)p\,e^{-px/(i\hbar)}\,dp. \tag{10.5}$$

V impulzové reprezentaci, to znamená při působení na Fourierův obraz $\varphi(p)$, má proto operátor impulzu jednoduchý tvar

$$\hat{p} = p. \tag{10.6}$$

Podobně dostaneme

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)(-i\hbar)\frac{d}{dp}e^{-px/(i\hbar)}\,dp. \tag{10.7}$$

Provedeme-li nyní integraci per partes a předpokládáme-li, že vlnová funkce jde pro $p \to \pm\infty$ k nule, dostaneme

$$\hat{x}\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar\frac{d\varphi(p)}{dp}e^{-px/(i\hbar)}\,dp. \tag{10.8}$$

Operátor souřadnice má tudíž při působení na funkci φ, tj. v impulzové reprezentaci, tvar

$$\hat{x} = i\hbar\frac{d}{dp}. \tag{10.9}$$

Snadno lze ověřit, že komutační relace

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{10.10}$$

platí i v impulzové reprezentaci.

V třírozměrném případě bychom dostali

$$\boxed{\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}} \tag{10.11}$$

a

$$\boxed{\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\nabla.} \tag{10.12}$$

10.2 Energetická reprezentace

V podobném duchu lze zavést i tzv. *energetickou reprezentaci.* Předpokládáme, že známe ortonormální vlastní funkce ψ_n a vlastní energie E_n hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{10.13}$$

Vlastní funkce ψ obecně odlišného hamiltoniánu $\hat{H}' \neq \hat{H}$

$$\hat{H}'\psi = E\psi \tag{10.14}$$

rozvineme do funkcí ψ_n

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n. \tag{10.15}$$

Po dosazení tohoto rozvoje do Schrödingerovy rovnice (10.14) dostaneme

$$\hat{H}' \sum_n c_n\psi_n = E \sum_n c_n\psi_n. \tag{10.16}$$

Po vynásobení funkcí ψ_m^* zleva a provedení integrace přes celý prostor dostaneme s ohledem na předpokládanou ortonormalitu funkcí ψ_m maticový problém

$$\sum_n H'_{mn}c_n = Ec_m, \tag{10.17}$$

kde matice H' představuje hamiltonián $\hat{H}'$ v tzv. *energetické reprezentaci*

$$H'_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\hat{H}'\psi_n(x)\,\mathrm{d}x \tag{10.18}$$

a sloupcový vektor vytvořený z koeficientů c_n je vlastní funkcí hamiltoniánu $\hat{H}'$ v této reprezentaci. Původní hamiltonián $\hat{H}$ je v této reprezentaci diagonální.

Existují i další možné reprezentace, spojené s určitou konkrétní volbou báze Hilbertova prostoru (viz dodatek D.7). Z fyzikálního hlediska jsou různé reprezentace Schrödingerovy rovnice ekvivalentní, v některé reprezentaci však může být řešení Schrödingerovy rovnice matematicky jednodušší.

10.3 Diracova symbolika

Sjednocující kvantověmechanickou symboliku zavedl Dirac ve své známé knize [26]. Následujíce Diraca, zavádíme tzv. *ket-vektor* $|\psi\rangle$ (část anglického slova bra-cket, tj. závorka), který označuje fyzikální stav uvažovaného systému bez uvedení konkrétních souřadnic, v nichž stav popisujeme. Situace je zde analogická jako v případě vektorových prostorů, kdy vektor můžeme buď označit určitým abstraktním symbolem, např. $\mathbf{a}$, nebo ho zadat prostřednictvím jeho složek a_i v určité bázi prostoru. Protože v kvantové mechanice pracujeme v lineárních vektorových prostorech se skalárním součinem, můžeme složky ket-vektoru vypočítat pomocí skalárních součinů mezi uvažovaným normovaným vektorem a ortonormálními vektory báze. Zatímco ket-vektor odpovídá označení **a**, složkám a_i v kvantové mechanice odpovídá vlnová funkce, např. v souřadnicové reprezentaci

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \tag{10.19}$$

Zde $|x\rangle$ označuje vektory báze, $\langle x|$ jsou hermitovsky sdružené vektory

$$|x\rangle^+ = \langle x| \tag{10.20}$$

a symbol $\langle\ |\ \rangle$ představuje skalární součin v uvažovaném prostoru. Vektory hermitovsky sdružené ke ket-vektorům se nazývají *bra-vektory*. Tyto vektory potřebujeme např. při formulaci normovací podmínky

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{10.21}$$

Dalším konkrétním případem je impulzová reprezentace

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle, \tag{10.22}$$

kde funkce $\varphi(p)$ je Fourierovým obrazem funkce $\psi(x)$.

Jiným příkladem je energetická reprezentace, kdy stav systému ψ popisujeme v bázi funkcí ψ_n, které jsou vlastními funkcemi hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{10.23}$$

Použijeme-li rozvoj

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n \tag{10.24}$$

a předpokládáme-li ortonormalitu funkcí ψ_n, můžeme popisovat stav systému s pomocí koeficientů c_n

$$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle. \tag{10.25}$$

10.4 Relace ortonormality a úplnosti

Nejdříve uvažujeme maticový vlastní problém typu

$$Ax_n = \lambda_n x_n, \tag{10.26}$$

kde A je hermitovská matice (tj. $A = A^+$, kde $+$ označuje hermitovské sdružení[1]), x_n je sloupcový vektor a λ_n je reálné vlastní číslo. Je známo, že vlastní vektory x_n lze vždy nalézt tak, že splňují *relace ortonormality*

$$x_m^+x_n = \delta_{mn}. \tag{10.27}$$

[1] Tj. komplexní sdružení a transpozice matice.

Dále je známo, že matici A lze vyjádřit pomocí vlastních vektorů a vlastních čísel ve tvaru[2]

$$A = \sum_m x_m \lambda_m x_m^+. \tag{10.28}$$

Vlastní vektory splňují rovněž *relace úplnosti*

$$\sum_m x_m x_m^+ = 1, \tag{10.29}$$

kde symbol 1 označuje jednotkovou matici. O tom, že tento vztah platí, se můžeme přesvědčit, když vynásobíme touto maticí obecný vektor

$$x = \sum_n c_n x_n. \tag{10.30}$$

S použitím relací ortonormality (10.27) dostáváme

$$\left(\sum_m x_m x_m^+\right) x = \left(\sum_m x_m x_m^+\right)\left(\sum_n c_n x_n\right) = \tag{10.31}$$

$$= \sum_{m,n} x_m \delta_{mn} c_n = \sum_n c_n x_n = x.$$

To znamená, že suma v rovnici (10.29) působí skutečně jako jednotková matice.

Podobným způsobem můžeme postupovat i v případě vlastního problému operátoru $\hat{A}$ s diskrétním spektrem vlastních čísel

$$\hat{A}\psi_n(x) = \lambda_n \psi_n(x), \tag{10.32}$$

kde $\hat{A}$ je hermitovský operátor, $\psi_n(x)$ je vlastní funkce a λ_n je reálné vlastní číslo. Vlastní funkce $\psi_n(x)$ lze vždy nalézt tak, že splňují *relace ortonormality*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{mn}. \tag{10.33}$$

I v tomto případě lze operátor $\hat{A}$ vyjádřit pomocí vlastních funkcí a vlastních čísel ve tvaru

$$\hat{A} = \sum_m \psi_m(x)\lambda_m \psi_m^*(x). \tag{10.34}$$

Vlastní funkce splňují rovněž *relace úplnosti*

$$\sum_m \psi_m(x)\psi_m^*(x') = \delta(x - x'), \tag{10.35}$$

[2] V tomto případě jde, na rozdíl od skalárního součinu v předcházející rovnici, o tzv. tenzorový součin vektorů.

kde symbol $\delta(x)$ označuje Diracovu δ-funkci. O tom, že tento vztah platí, se můžeme přesvědčit, když aplikujeme tento vztah na obecnou funkci

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \tag{10.36}$$

S použitím relací ortonormality (10.33) dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Big(\sum_m \psi_m(x) \psi_m^*(x') \Big) \psi(x') \, \mathrm{d}x' = \tag{10.37}$$

$$= \sum_m \Big(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x') \psi(x') \, \mathrm{d}x' \Big) \psi_m(x) = \sum_m c_m \psi_m(x) = \psi(x).$$

To znamená, že suma v rovnici (10.35) působí při integraci jako jednotkový operátor (Diracova δ-funkce).

Ve smyslu Diracovy symboliky můžeme vztahy (10.26) nebo (10.32) zapsat obecněji pomocí ket-vektorů

$$\hat{A}|n\rangle = \lambda_n |n\rangle, \tag{10.38}$$

kde $|n\rangle$ je ket-vektor. Toto vyjádření bez uvedení proměnných (číslo řádku v případě sloupcového vektoru nebo proměnná x pro funkci $\psi(x)$) umožňuje jednotný zápis obou uvedených případů. Ke každému ket-vektoru $|n\rangle$ přísluší hermitovsky sdružený bra-vektor $\langle n|$. Relace ortonormality lze zapsat ve tvaru

$$\boxed{\langle m|n\rangle = \delta_{mn},} \tag{10.39}$$

kde symbol $\langle m|n\rangle$ označuje skalární součin. Operátor $\hat{A}$ lze vyjádřit ve tvaru

$$\boxed{\hat{A} = \sum_m |m\rangle \lambda_m \langle m|.} \tag{10.40}$$

Vlastní funkce splňují relace úplnosti

$$\boxed{\sum_m |m\rangle\langle m| = 1,} \tag{10.41}$$

kde symbol 1 označuje jednotkový operátor.

Podobným způsobem lze postupovat i v případě spojitého spektra operátorů, pouze se zamění sumace za integraci přes spojité spektrum.

Přechod od vlnové funkce $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ v souřadnicové reprezentaci k jejímu Fourierovu obrazu $\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle$, tj. do impulzové reprezentace, lze pomocí Diracovy symboliky provést jednoduše

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x|1|\psi\rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \, |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle \varphi(p) \, \mathrm{d}p. \tag{10.42}$$

Položíme-li

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)}, \tag{10.43}$$

dostaneme vzorec známý z Fourierovy transformace. Pro inverzní transformaci můžeme psát

$$\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle = \langle p|1|\psi\rangle = \langle p| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle\psi(x)\, \mathrm{d}x. \tag{10.44}$$

Použijeme-li vztahu

$$\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{px/(i\hbar)}, \tag{10.45}$$

dostaneme vzorec pro inverzní Fourierovu transformaci.

Obecný pohled na přechod mezi reprezentacemi pomocí unitárních transformací lze nalézt v dodatku D.7.

Kapitola 11

Lineární harmonický oscilátor ve Fockově reprezentaci*

Beauty is the first test; there is no permanent place in the world for ugly mathematics.
Godfrey Harold Hardy

11.1 Anihilační a kreační operátory

Lineární harmonický oscilátor lze studovat rovněž pomocí obecného formalizmu — s použitím tzv. *anihilačních* a *kreačních* operátorů. Výhodou řešení v této tzv. *Fockově reprezentaci*[1] je to, že ukazuje, že např. kvantování energií E_n je nezávislé na konkrétní reprezentaci Schrödingerovy rovnice a je dáno komutačními relacemi. Kromě toho je tento aparát široce využíván v teorii pevných látek a v kvantové teorii polí, jako je pole elektromagnetické a další, kde je nutné uvažovat systémy s proměnným počtem částic (např. fotonů). V případě takových systémů se bez použití anihilačních a kreačních operátorů neobejdeme.

Budeme uvažovat nečasovou Schrödingerovu rovnici ve tvaru

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\psi(x), \tag{11.1}$$

kterou přepíšeme do tvaru

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}-\xi^2\right)\psi=-\frac{2E}{\hbar\omega}\psi, \tag{11.2}$$

kde

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{11.3}$$

[1]Používáme vžité označení. Původní jméno ruského fyzika je V. A. Fok.

Schrödinger si všiml, že v tomto vztahu vystupuje analogie rozdílu čtverců pro algebraické veličiny $\alpha^2 - \beta^2 = (\alpha + \beta)(\alpha - \beta)$, a zavedl tzv. *anihilační*

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} - i\omega m\hat{x}) \tag{11.4}$$

a hermitovsky sdružený *kreační* operátor[2]

$$\hat{b}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} + i\omega m\hat{x}), \tag{11.5}$$

kde $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ a $\hat{x} = x$. S využitím komutační relace

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{11.6}$$

lze snadno ověřit, že platí

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \hbar\omega(\hat{b}^{+}\hat{b} + 1/2). \tag{11.7}$$

Dále je zřejmé, že operátory $\hat{b}$ a $\hat{b}^{+}$ nejsou hermitovské, k sobě jsou však navzájem hermitovsky sdružené a pro jejich komutátor platí jednoduchý výsledek

$$[\hat{b}, \hat{b}^{+}] = 1. \tag{11.8}$$

Z vyjádření hamiltoniánu (11.7) vidíme, že k nalezení vlastních čísel (energií) hamiltoniánu $\hat{H}$ stačí určit vlastní čísla operátoru

$$\hat{N} = \hat{b}^{+}\hat{b}, \tag{11.9}$$

$$\hat{b}^{+}\hat{b}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.10}$$

Operátor $\hat{N}$ bývá v kvantové teorii pole nazýván *operátorem počtu částic*, neboť vlastní čísla tohoto operátoru udávají v této teorii např. počet fotonů s určitým vlnovým vektorem a s určitou polarizací. Tohoto názvu se přidržíme i zde, i když v našem případě nebudou vlastní čísla tohoto operátoru udávat počet částic, ale hodnotu kvantového čísla n.

11.2 Vlastní čísla operátoru počtu částic

Předpokládejme, že řešíme vlastní problém (11.10), kde operátory $\hat{b}$ a $\hat{b}^{+}$ splňují komutační relace (11.8) a vlastní vektory jsou normované

$$\langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle = 1. \tag{11.11}$$

[2] V literatuře se můžeme setkat i s anihilačním a kreačním operátorem, které se liší od uvedené definice faktory i, resp. $-i$.

Vynásobením rovnice (11.10) zleva bra-vektorem $\langle\psi_\lambda|$ dostaneme

$$\langle\psi_\lambda|\hat{b}^+\hat{b}|\psi_\lambda\rangle = \lambda. \tag{11.12}$$

Protože anihilační a kreační operátor jsou k sobě navzájem hermitovsky sdružené, můžeme tento vztah přepsat do tvaru

$$\langle\hat{b}\psi_\lambda|\hat{b}\psi_\lambda\rangle = \lambda, \tag{11.13}$$

kde jsme operátory napsali přímo do příslušných bra- a ket-vektorů. Skalární součin v poslední rovnici je však skalární součin mezi dvěma stejnými stavy, který je podle vlastností skalárního součinu reálný a větší než nula nebo roven nule. Vlastní čísla λ musí být proto nezáporná

$$\lambda \geq 0. \tag{11.14}$$

Z vlastností skalárního součinu dále vyplývá, že $\lambda = 0$ právě tehdy, když

$$|\hat{b}\psi_\lambda\rangle = 0. \tag{11.15}$$

Nyní vynásobíme rovnici (11.10) anihilačním operátorem $\hat{b}$ zleva

$$\hat{b}\hat{b}^+\hat{b}|\psi_\lambda\rangle = \lambda\hat{b}|\psi_\lambda\rangle \tag{11.16}$$

a použijeme komutační relaci (11.8)

$$\left(\hat{b}^+\hat{b} + 1\right)\hat{b}|\psi_\lambda\rangle = \lambda\hat{b}|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.17}$$

Po převedení jedničky na pravou stranu dostaneme

$$\hat{b}^+\hat{b}|\hat{b}\psi_\lambda\rangle = (\lambda - 1)|\hat{b}\psi_\lambda\rangle, \tag{11.18}$$

kde $|\hat{b}\psi_\lambda\rangle$ označuje stav vzniklý aplikací operátoru $\hat{b}$ na stav $|\psi_\lambda\rangle$. Odtud vyplývá, že jestliže stav $|\psi_\lambda\rangle$ odpovídá vlastnímu číslu λ, potom stav $|\hat{b}\psi_\lambda\rangle$ odpovídá vlastnímu číslu $\lambda - 1$. Proto se také operátor $\hat{b}$ nazývá anihilační. Vektor $|\hat{b}\psi_\lambda\rangle$ není obecně normovaný. Vzhledem k rovnicím (11.11) a (11.13) má normovaný stav tvar

$$|\psi_{\lambda-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\,\hat{b}|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.19}$$

Opakováním tohoto postupu dostaneme obecný výraz pro normované stavy $|\psi_\lambda\rangle$

$$|\psi_{\lambda-n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda-1)\cdots(\lambda-n+1)}}\hat{b}^n|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.20}$$

Na základě tohoto vztahu by bylo možné postupným použitím anihilačního operátoru získávat stavy se stále nižším a nižším kvantovým číslem λ

$$|\psi_\lambda\rangle,\ |\psi_{\lambda-1}\rangle,\ |\psi_{\lambda-2}\rangle, \ldots. \tag{11.21}$$

To je ale ve sporu s naším předchozím závěrem (11.14), že vlastní čísla λ nemohou být menší než nula. Uvedenou sekvenci stavů s klesajícím vlastním číslem λ lze zřejmě přerušit pouze tak, že jeden z těchto stavů je roven nule. Vzhledem k rovnici (11.19)

$$\sqrt{\lambda}|\psi_{\lambda-1}\rangle = \hat{b}|\psi_\lambda\rangle \tag{11.22}$$

a vztahu (11.15) je vidět, že to nastává, pokud je nejnižší možná hodnota λ rovna nule. Odpovídající *základní stav* je roven $|\psi_0\rangle$. Vidíme tedy, že vlastní čísla operátoru $\hat{N}$ jsou rovna

$$\lambda = 0, 1, 2, \ldots. \tag{11.23}$$

Vlastní čísla hamiltoniánu (11.7) se pak rovnají

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{11.24}$$

Je vidět, že tato vlastní čísla se nám podařilo najít pouze na základě několika jednoduchých algebraických vlastností operátorů, bez použití souřadnicové či jiné konkrétní reprezentace. Kvantování energií lineárního harmonického oscilátoru vyplývá z komutační relace pro anihilační a kreační operátory, která je důsledkem komutační relace mezi operátory souřadnice a impulzu.

Podobně jako jsme postupovali pro anihilační operátor, můžeme postupovat i pro kreační operátor. Po vynásobení rovnice (11.10) kreačním operátorem $\hat{b}^+$ zleva

$$\hat{b}^+\hat{b}^+\hat{b}|\psi_\lambda\rangle = \lambda\hat{b}^+|\psi_\lambda\rangle \tag{11.25}$$

dostaneme s použitím komutační relace (11.8)

$$\hat{b}^+\hat{b}|\hat{b}^+\psi_\lambda\rangle = (\lambda + 1)|\hat{b}^+\psi_\lambda\rangle. \tag{11.26}$$

Odtud vyplývá, že jestliže stav $|\psi_\lambda\rangle$ odpovídá vlastnímu číslu λ, stav $|\hat{b}^+\psi_\lambda\rangle$ odpovídá vlastnímu číslu $\lambda + 1$. Proto nazýváme operátor $\hat{b}^+$ kreačním operátorem. Vzhledem k rovnicím (11.11) a (11.13) má normovaný stav tvar

$$|\psi_{\lambda+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda + 1}}\,\hat{b}^+|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.27}$$

Obecně platí

$$|\psi_{\lambda+n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(\lambda + 1)\cdots(\lambda + n)}}(\hat{b}^+)^n|\psi_\lambda\rangle. \tag{11.28}$$

Napíšeme-li skalární součin $\langle\hat{b}\psi_m|\hat{b}\psi_n\rangle$ dvojím způsobem

$$\langle\hat{b}\psi_m|\hat{b}\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\hat{b}^+\hat{b}\psi_n\rangle = n\langle\psi_m|\psi_n\rangle \tag{11.29}$$

a

$$\langle\hat{b}\psi_m|\hat{b}\psi_n\rangle = \langle\hat{b}^+\hat{b}\psi_m|\psi_n\rangle = m\langle\psi_m|\psi_n\rangle, \tag{11.30}$$

dostaneme

$$(n - m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = 0. \tag{11.31}$$

Odtud vyplývá, že stavy lineárního harmonického oscilátoru s různými vlastními energiemi jsou ortogonální.

Rovněž snadné je vypočítat maticové elementy anihilačních a kreačních operátorů v bázi vlastních stavů $|\psi_n\rangle$

$$\langle\psi_m|\hat{b}|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\sqrt{n}\psi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} \tag{11.32}$$

a

$$\langle\psi_m|\hat{b}^+|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}. \tag{11.33}$$

I z těchto výrazů je vidět, že operátory $\hat{b}$ a $\hat{b}^+$ nejsou hermitovské.

11.3 Vlnové funkce

Vlnovou funkci základního stavu lineárního harmonického oscilátoru můžeme vypočítat ze vztahu (11.15)

$$\hat{b}\psi_0(\xi) = 0, \tag{11.34}$$

kde anihilační operátor $\hat{b}$ je dán vztahem (11.4) a $\psi_0(\xi)$ je vlnová funkce základního stavu v souřadnicové reprezentaci. Odtud dostáváme

$$\hat{b}\psi_0(\xi) = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right)\psi_0(\xi) = 0, \tag{11.35}$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \tag{11.36}$$

Rovnice (11.35) má nám již známé řešení

$$\psi_0(\xi) = N_0 \mathrm{e}^{-\xi^2/2}, \tag{11.37}$$

kde N_0 je normovací faktor.

Normované vlnové funkce vyšších stavů lze získat vícenásobným použitím vztahu

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{b}^+\psi_{n-1}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{i}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \xi\right)\psi_{n-1}(\xi). \tag{11.38}$$

Lze ukázat, že takto získané vlnové funkce souhlasí až na nepodstatné fázové faktory s řešeními uvedenými v kap. 8. Podobným způsobem lze nižší stavy získat z vyšších stavů použitím anihilačního operátoru.

Kapitola 12

Souvislost kvantové a klasické mechaniky

The alteration of motion is ever proportional to the motive force impressed; and is made in the direction of the right line in which that force is impressed.
Isaac Newton, Laws of Motion II

12.1 Hamiltonova–Jacobiho rovnice*

Přechod od kvantové mechaniky ke klasické mechanice lze provést různými způsoby. Nejdříve ukážeme, že v případě pohybu po trajektorii lze z časové Schrödingerovy rovnice odvodit Hamiltonovu–Jacobiho rovnici známou z klasické mechaniky. Pro jednoduchost budeme předpokládat jednorozměrný pohyb částice.

Vlnová funkce volné částice má v jedné prostorové dimenzi tvar

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{(Et-px)/(i\hbar)}. \tag{12.1}$$

Pro částici, která není volná, zobecníme tento vztah na výraz

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{is(x,t)/\hbar}, \tag{12.2}$$

kde funkce $s(x,t)$ má význam fáze vlnové funkce. Tato funkce je obecně komplexní

$$s = s_1 + is_2, \tag{12.3}$$

kde s_1 a s_2 označují reálnou a imaginární část s.

Časovou Schrödingerovu rovnici s potenciální energií V vynásobíme zleva ψ^*, provedeme integraci přes všechna x a využijeme toho, že operátor impulzu je hermitovský operátor

$$i\hbar \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2m}\int \left| -i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|^2 \mathrm{d}x + \int V|\psi|^2\,\mathrm{d}x. \tag{12.4}$$

Po dosazení vztahů (12.2) a (12.3) dostaneme

$$\int \frac{\partial s}{\partial t}\mathrm{e}^{-2s_2/\hbar}\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2m}\int \left| -i\hbar\frac{\partial \mathrm{e}^{is/\hbar}}{\partial x}\right|^2 \mathrm{d}x + \int V\mathrm{e}^{-2s_2/\hbar}\,\mathrm{d}x = 0 \tag{12.5}$$

nebo podrobněji

$$\int \frac{\partial s_1}{\partial t} e^{-2s_2/\hbar}\, dx + i \int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-2s_2/\hbar}\, dx + \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_1}{\partial x} \right|^2 e^{-2s_2/\hbar}\, dx + \tag{12.6}$$

$$+ \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|^2 e^{-2s_2/\hbar}\, dx + \int V e^{-2s_2/\hbar}\, dx = 0.$$

Druhý integrál v této rovnici je roven nule

$$\int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-2s_2/\hbar}\, dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int e^{-2s_2/\hbar}\, dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2\, dx = 0. \tag{12.7}$$

Dále budeme předpokládat, že hustota pravděpodobnosti

$$|\psi|^2 = e^{-2s_2/\hbar} \tag{12.8}$$

je blízká nule všude s výjimkou bodu $x = \langle x \rangle$, kde nabývá svého maxima a kde platí

$$\left. \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|_{x=\langle x \rangle} = 0. \tag{12.9}$$

Nahradíme-li hustotu pravděpodobnosti δ-funkcí

$$|\psi|^2 = \delta(x - \langle x \rangle) \tag{12.10}$$

a použijeme-li předpoklad (12.9), z rovnic (12.6)–(12.7) dostaneme

$$\frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial x} \right)^2 + V(\langle x \rangle, t) = 0. \tag{12.11}$$

Tuto rovnici můžeme porovnat s Hamiltonovou–Jacobiho rovnicí z klasické mechaniky

$$\frac{\partial S(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S(x,t)}{\partial x} \right)^2 + V(x,t) = 0. \tag{12.12}$$

Vidíme, že po provedení limitního přechodu ke klasické trajektorii $\langle x \rangle = \langle x \rangle(t)$ pravděpodobnostní popis vymizí a funkce s_1 hraje roli klasické akce S. Ze vztahu (12.8) vidíme, že nahrazení $|\psi|^2$ pomocí δ-funkce odpovídá provedení limity $\hbar \to 0$. To vysvětluje, proč se Planckova konstanta $\hbar$ v klasické mechanice nevyskytuje. To je v souladu i s tzv. *principem korespondence*, podle něhož výsledky kvantové mechaniky přecházejí na výsledky klasické mechaniky v limitě $\hbar \to 0$ nebo velkých kvantových čísel.

Obecně lze klasickou mechaniku použít pouze pro stavy, které jsou dostatečně lokalizované jak v x-, tak p-prostoru (jejich kvantověmechanické neurčitosti jsou zanedbatelné) a jejichž rozplývání s rostoucím časem lze zanedbat (viz např. kap. 8.2). Takové stavy lze s dobrým přiblížením reprezentovat body ve fázovém prostoru a je možné zavést klasický pohyb po trajektorii.

Aniž bychom výše uvedený přechod ke klasické mechanice prováděli, můžeme dosadit vztah (12.2) do časové Schrödingerovy rovnice s výsledkem

$$\frac{\partial s(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial s(x,t)}{\partial x}\right)^2 + V(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 s(x,t)}{\partial x^2}. \tag{12.13}$$

Pokud předpokládáme $\hbar \to 0$, vidíme, že tato rovnice má stejný tvar jako Hamiltonova–Jacobiho rovnice. Proto když známe řešení Hamiltonovy–Jacobiho rovnice, můžeme pomocí vztahu (12.2) nalézt přibližné řešení Schrödingerovy rovnice v tzv. *kvaziklasické aproximaci.*

12.2 Bohrova kvantovací podmínka*

Uvažujme klasickou konzervativní soustavu s potenciální energií závisející pouze na souřadnici $V = V(x)$ a s energií E, která je integrálem pohybu. Jak známo, v takovém případě lze akci $S(x,t)$ psát ve tvaru

$$S(x,t) = -Et + \tilde{S}(x), \tag{12.14}$$

kde $\tilde{S}$ závisí pouze na x.

V analogii s klasickým případem budeme předpokládat

$$s(x,t) = -Et + \tilde{s}(x). \tag{12.15}$$

Z rovnice (12.13) pak pro $\hbar \to 0$ dostaneme

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}\tilde{s}}{\mathrm{d}x}\right)^2 + V = E. \tag{12.16}$$

Odtud vyplývá

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{s}}{\mathrm{d}x} = \pm\sqrt{2m(E-V)} = \pm p, \tag{12.17}$$

kde jsme využili rovnice $E = p^2/(2m) + V$ platné pro klasický konzervativní systém. Vezmeme-li v tomto výsledku znaménko plus[1], vidíme, že funkce $\tilde{s}$ je rovna akci známé z klasické fyziky

$$\tilde{s}(x) = \int_0^x p(x')\,\mathrm{d}x'. \tag{12.18}$$

Vlnová funkce je tudíž v aproximaci, kdy zanedbáváme $\hbar$ v rovnici (12.13), rovna

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{\left[Et - \int_0^x p(x')\,\mathrm{d}x'\right]/(i\hbar)}. \tag{12.19}$$

Podobný výraz je znám i z optiky z teorie eikonálu.

[1]Znaménko plus vede na kladnou akci, jak je to v klasické fyzice obvyklé.

Z poslední rovnice lze snadno odvodit i Bohrovu kvantovací podmínku. Předpokládejme, že x je cyklická souřadnice (např. úhel rotace okolo osy z v Bohrově modelu atomu vodíku s kruhovou trajektorií elektronu okolo jádra). V takovém případě se po vykonání jednoho cyklu pohybu dostaneme do fyzikálně ekvivalentního místa a vlnová funkce $\psi(x,t)$ se nesmí změnit. Musí proto platit

$$\frac{1}{\hbar}\oint p(x)\,\mathrm{d}x = 2\pi n, \tag{12.20}$$

kde n je celé číslo. Odtud dostáváme *Bohrovu kvantovací podmínku*[2]

$$\boxed{\oint p(x)\,\mathrm{d}x = nh.} \tag{12.21}$$

To znamená, že změny akce při cyklickém pohybu nemohou být libovolné a musí být násobkem h. Vzhledem k tomuto kvantování akce jsou pak kvantovány i další související fyzikální veličiny.

Obecně platí, že tzv. *adiabatické invarianty* zavedené Ehrenfestem

$$\oint p_i\,\mathrm{d}q_i = I_i,$$

kde q_i je zobecněná souřadnice a p_i je odpovídající zobecněný impulz, jsou kvantovány

$$I_i = n_i h, \quad n_i = 1, 2, 3, \ldots .$$

Všimněme si, kdy je roven nule člen

$$\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 s(x,t)}{\partial x^2} \tag{12.22}$$

v rovnici (12.13). Tento člen vymizí v limitě $\hbar \to 0$. Je ale roven nule také v případě, když je výraz

$$\frac{\partial s(x,t)}{\partial x} = p \tag{12.23}$$

konstantní. To znamená, že pokud se zobecněný impulz během cyklického pohybu nemění, Bohrova teorie může dát správné výsledky. To platí např. pro kvantování kruhového pohybu elektronu v atomu vodíku nebo pohybu částice v nekonečně hluboké jámě, kdy pomocí Bohrovy teorie obdržíme správné hodnoty energií. Ve složitějších případech však Bohrova teorie selhává.

12.3 Operátory časové derivace

Kvantověmechanická střední hodnota veličiny A, která se měří v experimentu

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\hat{A}\psi(x,t)\,\mathrm{d}x, \tag{12.24}$$

[2]Podrobnou diskuzi včetně oprav vyššího řádu lze nalézt v [86].

závisí obecně na čase. Tato časová závislost je dána časovou závislostí vlnových funkcí, na čase však může záviset i samotný operátor $\hat{A} = \hat{A}(t)$.

Vypočítáme-li časovou derivaci této střední hodnoty, dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\,\mathrm{d}x. \tag{12.25}$$

Vypočítáme-li nyní $\partial\psi/\partial t$ z časové Schrödingerovy rovnice,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi, \tag{12.26}$$

dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\right)^* \hat{A}\psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\hat{A}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x. \tag{12.27}$$

Vzhledem k tomu, že hamiltonián je hermitovský operátor, můžeme tento vztah napsat ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \right\rangle. \tag{12.28}$$

Definujeme-li nyní *operátor časové derivace* veličiny A vztahem

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}],} \tag{12.29}$$

tak platí

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\right\rangle.} \tag{12.30}$$

Časovou derivaci střední hodnoty měřené veličiny tedy získáme vypočítáním střední hodnoty odpovídajícího operátoru časové derivace.

Uvedený výraz pro operátor časové derivace můžeme porovnat s klasickou *Poissonovou rovnicí*

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\}, \tag{12.31}$$

kde u je klasická veličina, H je Hamiltonova funkce, $\{u, v\}$ označuje Poissonovu závorku

$$\{u, v\} = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k}\frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k}\frac{\partial u}{\partial p_k}\right) \tag{12.32}$$

a q_k a p_k jsou zobecněné souřadnice a impulzy. Odtud je vidět, že klasické Poissonově závorce odpovídá v kvantové mechanice komutátor příslušných operátorů dělený $i\hbar$

$$\{u, v\} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{u}, \hat{v}]. \tag{12.33}$$

Jestliže operátor $\hat{A}$ nezávisí explicitně na čase, platí

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}]. \tag{12.34}$$

V takovém případě je tedy rozhodující komutátor operátoru $\hat{A}$ s hamiltoniánem $\hat{H}$.

Z hlediska výpočtů je užitečné, že operátory časové derivace splňují analogické vlastnosti jako obvyklé derivace. Snadno lze ověřit, že platí

$$\frac{\mathrm{d}(\hat{A}+\hat{B})}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t} \tag{12.35}$$

a

$$\frac{\mathrm{d}(\hat{A}\hat{B})}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t}. \tag{12.36}$$

12.4 Ehrenfestovy rovnice

V tomto odstavci se zaměříme na další pochopení souvislosti kvantové a klasické mechaniky.

Vzhledem k tomu, že operátory souřadnice a impulzu nezávisí explicitně na čase, můžeme napsat operátory časové derivace pro tyto veličiny ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}, \hat{H}] \tag{12.37}$$

a

$$\frac{\mathrm{d}\hat{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{H}]. \tag{12.38}$$

Tyto operátorové rovnice jsou kvantové analogie Hamiltonových rovnic z klasické fyziky

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \{q_k, H\} \tag{12.39}$$

a

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \{p_k, H\}. \tag{12.40}$$

Nyní budeme předpokládat, že hamiltonián má obvyklý tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + V(x, y, z, t). \tag{12.41}$$

Potom z rovnice (12.37) dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2mi\hbar}\left(\hat{x}\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2\hat{x}\right) = \frac{1}{2mi\hbar}\left(\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x}\right). \tag{12.42}$$

Nyní použijeme komutační relaci

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar \tag{12.43}$$

k vyjádření $\hat{x}\hat{p}_x$ v prvním členu v závorce a $\hat{p}_x\hat{x}$ ve druhém členu. Po opětovném použití této komutační relace dostaneme

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{p}_x}{m}.} \tag{12.44}$$

Vidíme proto, že souvislost mezi operátory rychlosti a impulzu je v kvantové mechanice stejná, jako mezi klasickou rychlostí a impulzem.

Podobně můžeme postupovat i v případě rovnice (12.38). Dosazením za hamiltonián obdržíme

$$\frac{\mathrm{d}\hat{p}_x}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}(\hat{p}_x V - V\hat{p}_x) = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x} - i\hbar V\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar V\frac{\partial}{\partial x}\right), \tag{12.45}$$

což vede k výsledku

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\hat{p}_x}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V}{\partial x}.} \tag{12.46}$$

Zavedeme-li *operátor síly* vztahem

$$\hat{F}_x = -\frac{\partial V}{\partial x}, \tag{12.47}$$

vidíme, že operátor časové změny impulzu je roven operátoru síly, podobně jako je tomu v klasické fyzice pro klasické veličiny. Rovnice (12.46) proto představuje kvantový protějšek klasického Newtonova zákona.

Kvantověmechanickým vystředováním rovnic (12.44) a (12.46) dostaneme dvě *Ehrenfestovy rovnice*

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t}\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}_x\rangle}{m}} \tag{12.48}$$

a

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}_x\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\mathrm{d}\hat{p}_x}{\mathrm{d}t}\right\rangle = \left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \langle\hat{F}_x\rangle.} \tag{12.49}$$

V explicitním tvaru je můžeme zapsat v následující podobě

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \psi^* x\psi \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \frac{1}{m}\int \psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \tag{12.50}$$

a

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \int \psi^*\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z, \tag{12.51}$$

kde integrace probíhá přes celý třírozměrný prostor. Pro časové derivace kvantověmechanických středních hodnot operátorů souřadnice a impulzu platí podobné vztahy jako v klasické fyzice.

Z Ehrenfestových rovnic lze odvodit i kvantověmechanickou obdobu *Newtonova zákona*. Postupným použitím Ehrenfestových rovnic dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\langle\hat{p}_x\rangle}{m} = \frac{1}{m}\left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \frac{\langle\hat{F}_x\rangle}{m}. \tag{12.52}$$

Pro kvantověmechanické střední hodnoty příslušných kvantověmechanických operátorů platí vztah

$$\boxed{m\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = \langle\hat{F}_x\rangle.} \tag{12.53}$$

Přechod ke klasické mechanice lze ve smyslu naší poznámky v kap. 12.1 provést pro stavy, které jsou dostatečně lokalizovány jak v x-, tak p-prostoru a jejichž rozplývání s rostoucím časem lze zanedbat. Budeme-li pro jednoduchost opět uvažovat pouze jednorozměrný případ a uvážíme-li, že $\hat{x} = x$ a $\hat{F}(x) = F(x)$, můžeme provést Taylorův rozvoj síly v rovnici (12.53) okolo hodnoty $\langle x\rangle$

$$\langle F(x)\rangle = F(\langle x\rangle) + \left.\frac{\mathrm{d}F(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\langle x\rangle}\langle x - \langle x\rangle\rangle + \frac{1}{2}\left.\frac{\mathrm{d}^2F(x)}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=\langle x\rangle}\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle + \cdots . \tag{12.54}$$

Druhý člen na pravé straně této rovnice je roven nule. Pokud lze další členy v této rovnici zanedbat, dostaneme z posledních dvou rovnic Newtonův zákon v podobě známé z klasické mechaniky, kde se místo $\langle x\rangle$ obvykle používá proměnná x

$$m\frac{\mathrm{d}^2\langle x\rangle}{\mathrm{d}t^2} = F(\langle x\rangle). \tag{12.55}$$

Abychom mohli použít klasický popis a reprezentovat stavy systému body ve fázovém prostoru, je nutné, aby kvantověmechanické neurčitosti, jako $\Delta x = \langle (x - \langle x\rangle)^2\rangle^{1/2}$ či Δp_x z relace neurčitosti (7.33) a další podobné členy objevující se v rovnicích typu (12.54), byly malé. Pokud nejsou tyto podmínky splněny, nelze klasickou mechaniku použít.

Zatímco časová Schrödingerova rovnice je lineární rovnicí pro vlnovou funkci ψ a platí pro ni princip superpozice, Newtonova rovnice (12.55) pro $\langle x\rangle$ není pro obecnou sílu $F(\langle x\rangle)$ lineární. Lineární kvantová mechanika (ve smyslu působení na vlnovou funkci) proto v sobě zahrnuje i nelineární klasickou mechaniku (ve smyslu nelineární závislosti sil na $\langle x\rangle$).

Střední hodnoty časově nezávislých operátorů, včetně střední hodnoty souřadnice $\langle\hat{x}\rangle$, nezávisí pro stacionární stavy na čase (viz kap. 3.2). Odtud vyplývá, že pohyb popsaný klasickou mechanikou s časově proměnnou hodnotou x-ové souřadnice nelze získat limitním přechodem ze stacionárních stavů kvantové mechaniky. Limitní přechod ke klasické mechanice lze proto provést jen pro nestacionární stavy, jako jsou např. vlnové klubko pro volnou částici (kap. 4.5) nebo lineární harmonický oscilátor (kap. 8.2).

Kapitola 13

Integrály pohybu

That all things are changed, and nothing really perishes, and that the sum of matter remains exactly the same, is sufficiently certain.
Francis Bacon

13.1 Časově nezávislá veličina

Fyzikální veličina A je *integrálem pohybu*, pokud se v čase zachovává, tj. pokud platí

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} \right\rangle = 0. \tag{13.1}$$

Fyzikální význam integrálů pohybu je kromě jiného dán také tím, že některé integrály pohybu, jako např. energie stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, závisí na *kvantových číslech*, která se v čase nemění a lze je tedy užít k označení odpovídajících stacionárních stavů.

Předpokládejme dále, že operátor této veličiny nezávisí explicitně na čase

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} = 0. \tag{13.2}$$

Jestliže operátor $\hat{A}$ komutuje s hamiltoniánem

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0, \tag{13.3}$$

potom je podle definice operátoru časové derivace (12.29) veličina A integrálem pohybu.

Kromě toho předpokládejme, že i hamiltonián $\hat{H}$ nezávisí na čase, takže místo časové Schrödingerovy rovnice můžeme řešit nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \tag{13.4}$$

Pokud je splněna komutační podmínka (13.3), pak je známo, že existuje společný systém vlastních funkcí časově nezávislých operátorů $\hat{A}$ a $\hat{H}$ [1]

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x), \tag{13.5}$$

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \tag{13.6}$$

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice se dá v našem případě psát ve tvaru

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)}, \tag{13.7}$$

kde c_n jsou rozvojové keoficienty. Přitom předpokládáme, že funkce $\psi_n(x)$ tvoří úplný ortonormální systém a funkce $\psi(x,t)$ je normovaná. Odtud vidíme, že pravděpodobnost, že se uvažovaný systém nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi_n(x)$

$$p_n = |c_n|^2, \tag{13.8}$$

i kvantověmechanické střední hodnoty

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n p_n a_n \tag{13.9}$$

a

$$\langle\hat{H}\rangle = \sum_n p_n E_n \tag{13.10}$$

jsou časově nezávislé.

13.2 Volná částice

Hamiltonián pro volný pohyb částice předpokládáme ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}. \tag{13.11}$$

Je zřejmé, že operátory všech tří složek impulzu komutují s tímto hamiltoniánem, tj.

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0, \tag{13.12}$$

$$[\hat{p}_y, \hat{H}] = 0 \tag{13.13}$$

a

$$[\hat{p}_z, \hat{H}] = 0. \tag{13.14}$$

Pro volnou částici jsou proto všechny tři složky impulzu integrály pohybu. Integrálem pohybu je samozřejmě i celková energie

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}, \tag{13.15}$$

kde p_x, p_y a p_z jsou hodnoty složek impulzu.

[1] Pro jednoduchost předpokládáme diskrétní spektrum vlastních čísel obou operátorů.

13.3 Zákon zachování energie

Časová změna střední hodnoty energie je dána vztahem

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{H}\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\mathrm{d}\hat{H}}{\mathrm{d}t}\right\rangle = \left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\right\rangle. \tag{13.16}$$

Odtud vidíme, že pokud nezávisí hamiltonián $\hat{H}$ na čase, je energie $\langle\hat{H}\rangle$ integrálem pohybu. Jinými slovy, celková energie systému v poli sil nezávislých na čase je integrálem pohybu. Toto tvrzení představuje *zákon zachování energie* v kvantové mechanice.

13.4 Pohyb v centrálním poli

V případě *centrálního pole* předpokládáme, že hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r), \tag{13.17}$$

kde potenciální energie $V(r)$ závisí na vzdálenosti r od počátku souřadnic.

V takovém případě je výhodné použít sférické souřadnice, ve kterých lze operátor Δ napsat ve tvaru (viz dodatek D.8)

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}, \tag{13.18}$$

kde úhlová část tohoto operátoru je rovna

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{13.19}$$

Tento operátor souvisí s *operátorem kvadrátu momentu hybnosti*, pro který ve sférických souřadnicích platí

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}. \tag{13.20}$$

Složky operátoru momentu hybnosti jsou ve sférických souřadnicích rovny

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{13.21}$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{13.22}$$

a

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{13.23}$$

Z rovnice (13.20) vidíme, že operátor kinetické energie má ve sférických souřadnicích tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}. \tag{13.24}$$

Poslední člen je kvantovou analogií výrazu pro odstředivou energii $L^2/(2mr^2)$, známého z klasické fyziky.

Z uvedených vztahů je zřejmé, že všechny složky operátoru momentu hybnosti i jeho kvadrát komutují s hamiltoniánem (13.17) pro pohyb v centrálním poli

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = [\hat{L}_y, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0, \tag{13.25}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0. \tag{13.26}$$

Při pohybu v centrálním poli jsou proto všechny složky momentu hybnosti i jeho kvadrát integrály pohybu. Tento výsledek je analogický výsledkům známým z klasické mechaniky.

Vzhledem ke komutačním relacím

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \tag{13.27}$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \tag{13.28}$$

a

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \tag{13.29}$$

vyplývajícím z komutátorů

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \tag{13.30}$$

však nejsou všechny tři složky momentu hybnosti současně měřitelné (nemají současně ostrou hodnotu). Současně lze měřit pouze kvadrát momentu hybnosti a jednu z jeho složek, např. jeho z-ovou komponentu. To je důvod, proč se mezi kvantovými čísly pro atom vodíku objevují kvantová čísla l a m, charakterizující kvadrát momentu hybnosti a jeho z-ovou komponentu (viz kap. 16).

Kapitola 14

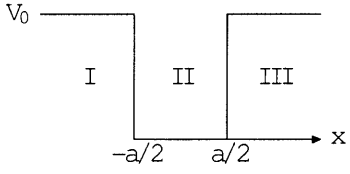
Potenciálová jáma konečné hloubky a potenciálový val

God is subtle but he is not malicious.
Albert Einstein, Fine Hall, The Mathematical Institute of Princeton University

V této kapitole budeme diskutovat několik jednoduchých jednorozměrných úloh, na kterých budeme ilustrovat některé další zajímavé kvantové jevy.

14.1 Potenciálová jáma konečné hloubky

Na rozdíl od nekonečně hluboké potenciálové jámy nyní předpokládáme poněkud reálnější problém, kdy potenciálová jáma má konečnou hloubku (viz obr. 14.1). Předpokládáme, že v oblasti $-a/2 \leq x \leq a/2$ je potenciální energie V nulová a mimo tuto oblast je rovna V_0, kde V_0 je větší než nula. Taková potenciální energie může přibližně popisovat například krátkodosahové síly, které váží nukleony v jádru atomu (silná interakce), nebo pohyb elektronu v polovodiči mikroskopických rozměrů.



Obrázek 14.1: Potenciálová jáma konečné hloubky.

Budeme řešit nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{14.1}$$

Vzhledem k tomu, že uvažovaná jáma má konečnou hloubku a šířku a potenciální energie je konstantní pro $|x| > a/2$, má tato Schrödingerova rovnice jednak diskrétní energetické spektrum s konečným nenulovým počtem hladin s energiemi $0 < E < V_0$, jednak spojité spektrum s energiemi $E \geq V_0$ (viz kap. 9). Ve shodě s postuláty kvantové mechaniky budeme hledat vlnové funkce $\psi(x)$, které jsou konečné, jednoznačné, spojité a mají spojité derivace při konečných změnách potenciálu (body $x = \pm a/2$).

Nejdříve budeme diskutovat diskrétní energetické spektrum.

14.1.1 Diskrétní spektrum

V případě diskrétního spektra hledáme řešení, která jsou kvadraticky integrabilní, tzn. že vlnové funkce musí jít k nule pro $x \to \pm\infty$.

Při řešení Schrödingerovy rovnice je výhodné využít symetrie potenciálu vzhledem k bodu $x = 0$. Je zřejmé, že hamiltonián $\hat{H}$ ve Schrödingerově rovnici (14.1) komutuje s *operátorem inverze* $\hat{I}$, který převádí souřadnici x na $-x$

$$[\hat{H}, \hat{I}] = 0. \tag{14.2}$$

Existuje tudíž společný systém vlastních funkcí obou operátorů. Protože platí $\hat{I}^2 = 1$, pro vlastní čísla operátoru inverze dostáváme

$$\lambda^2 = 1, \tag{14.3}$$

odkud vyplývá

$$\lambda = \pm 1. \tag{14.4}$$

Vlastní funkce hamiltoniánu musí být proto buď sudé (pro $\lambda = 1$), nebo liché (pro $\lambda = -1$)[1]. Tato vlastnost vlnových funkcí významně zjednoduší formulaci tzv. *sešívacích podmínek*, kladených na vlnovou funkci v bodech $x = \pm a/2$.

Vzhledem k symetrii úlohy se stačí zajímat o řešení Schrödingerovy rovnice na intervalu $x \geq 0$. Ze Schrödingerovy rovnice (14.1) pak dostaneme dvě diferenciální rovnice. První rovnice má tvar

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + k^2\right)\psi_{\mathrm{II}} = 0, \tag{14.5}$$

kde vlnový vektor k je dán vztahem

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \tag{14.6}$$

a která platí pro $0 \leq x \leq a/2$. Druhá rovnice

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \alpha^2\right)\psi_{\mathrm{III}} = 0, \tag{14.7}$$

[1] To platí pro diskrétní část energetického spektra, v níž jsou v jednorozměrném případě všechny energie nedegenerované (viz kap. 9). V případě spojitého spektra, kdy jsou energie dvakrát degenerované, tento závěr neplatí.

kde α je dáno vztahem

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}, \tag{14.8}$$

platí pro $x > a/2$. Vzhledem k tomu, že se zajímáme o diskrétní spektrum s energiemi $0 < E < V_0$, předpokládáme, že α je reálné kladné číslo.

Sudá řešení

Nejdříve budeme diskutovat sudá řešení. V tomto případě můžeme vzít řešení pro $x \geq 0$ ve tvaru

$$\psi_{\mathrm{II}} = A \cos kx \tag{14.9}$$

a

$$\psi_{\mathrm{III}} = B\mathrm{e}^{-\alpha x}, \tag{14.10}$$

kde A a B jsou konstanty. Z požadavku spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodě $x = a/2$ dostáváme dvě *sešívací podmínky* pro konstanty A a B

$$A \cos \frac{ka}{2} = B\mathrm{e}^{-\frac{\alpha a}{2}} \tag{14.11}$$

a

$$-A \sin \frac{ka}{2} = -B\frac{\alpha}{k}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha a}{2}}. \tag{14.12}$$

Z požadavku existence netriviálního řešení soustavy rovnic pro A a B obdržíme podmínku, že determinant soustavy musí být roven nule

$$k \tan \frac{ka}{2} = \alpha = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}. \tag{14.13}$$

Přepsáním této rovnice dostaneme

$$\tan \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1}. \tag{14.14}$$

Jinak vyjádřeno, musí platit

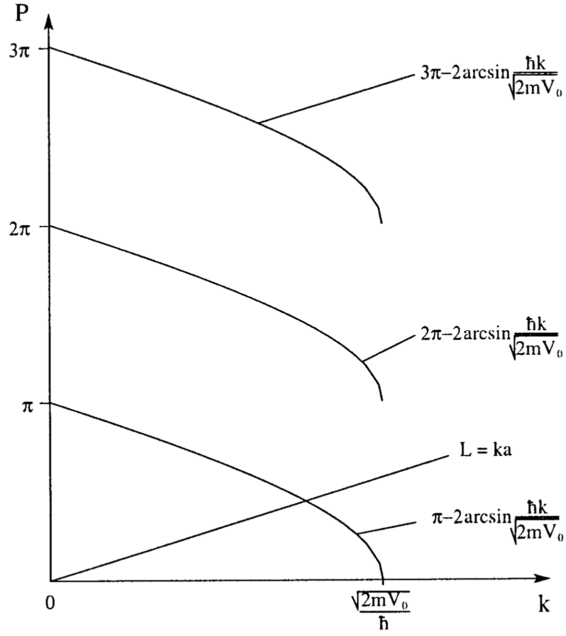
$$ka = 2 \arctan \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1} + 2n\pi, \tag{14.15}$$

kde n je celé číslo. Využijeme-li vztahů

$$\arccos x = \arctan \frac{\sqrt{1 - x^2}}{x} = \arctan \sqrt{\frac{1}{x^2} - 1} \tag{14.16}$$

a

$$\arcsin x + \arccos x = \frac{\pi}{2}, \tag{14.17}$$



Obrázek 14.2: Potenciálová jáma konečné hloubky. Levá (L) a pravá (P) strana rovnic (14.19) a (14.31) pro sudé i liché stavy.

obdržíme rovnici

$$2\arctan\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2k^2}-1}+2n\pi = 2\arccos\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}+2n\pi = \tag{14.18}$$

$$= -2\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}+(2n+1)\pi.$$

Výsledný vztah určující možné hodnoty vlnového vektoru $0 < k < \sqrt{2mV_0}/\hbar$, a tedy i energie $E = \hbar^2k^2/(2m)$ má pro sudé vázané stavy tvar

$$ka = (2n+1)\pi - 2\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}. \tag{14.19}$$

Na obr. 14.2 vidíme levou stranu $L = ka$ a pravou stranu P rovnice (14.19) pro sudé vázané stavy a rovnice (14.31) pro liché vázané stavy jako funkci k (viz dále). Pravá strana je nakreslena pro různá $n = 0, 1, 2, \ldots$. Průsečík mezi přímkou $L = ka$ a pravou stranou udává možné hodnoty k-vektoru. Vidíme, že vždy, i pro velmi úzkou a mělkou potenciálovou jámu, existuje průsečík levé strany s pravou stranou pro $n = 0$. Vždy tedy existuje alespoň jeden sudý vázaný stav. S rostoucí hodnotou a se přímka $L = ka$ odchyluje od vodorovné osy. Podobně, s rostoucí hodnotou V_0 se posunují křivky udávající pravou stranu P doprava. V závislosti na těchto dvou parametrech se pak objevují další průsečíky levé a pravé strany a počet vázaných stavů v diskrétním spektru energií roste. Celkový počet sudých vázaných stavů je konečný a větší než jedna nebo roven jedné.

Celkem snadno lze provést přechod k nekonečně hluboké potenciálové jámě, kdy platí $V_0 \gg E$. V takovém případě je $\arcsin(\hbar k/\sqrt{2mV_0}) \approx 0$, což znamená, že vlnový vektor je roven

$$k \approx (2n+1)\frac{\pi}{a}. \tag{14.20}$$

Odpovídající energie a normované sudé vlnové funkce pak mají pro $n = 0, 1, 2, \ldots$ tvar

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1)^2 \tag{14.21}$$

a

$$\psi_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\frac{(2n+1)\pi x}{a}. \tag{14.22}$$

Tyto výsledky jsou v souladu s řešeními získanými v kap. 5.

Pro velice mělkou jámu (V_0 velmi malé) nebo velice úzkou jámu (a velmi malé) dostáváme pro sudý základní stav ($n = 0$)

$$k \approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}, \tag{14.23}$$

$$E_1 \approx V_0 \tag{14.24}$$

a

$$\alpha \approx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sqrt{V_0 - E_1}. \tag{14.25}$$

Hodnota α se blíží nule a příslušná vlnová funkce klesá velmi pomalu s rostoucí vzdáleností od potenciálové jámy.

Lichá řešení

Lichá řešení lze diskutovat analogicky. Řešení pro $x \geq 0$ můžeme vzít ve tvaru

$$\psi_{\mathrm{II}} = A\sin kx \tag{14.26}$$

a

$$\psi_{\mathrm{III}} = B\mathrm{e}^{-\alpha x}, \tag{14.27}$$

kde A a B jsou konstanty. Z požadavku spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodě $x = a/2$ dostáváme dvě rovnice pro konstanty A a B

$$A\sin\frac{ka}{2} = B\mathrm{e}^{-\frac{\alpha a}{2}} \tag{14.28}$$

a

$$A \cos\frac{ka}{2} = -B\frac{\alpha}{k}e^{-\frac{\alpha a}{2}}. \tag{14.29}$$

Z požadavku nulovosti determinantu této soustavy pro A a B dostaneme podmínku

$$k \cot\frac{ka}{2} = -\alpha = -\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}. \tag{14.30}$$

Tento vztah můžeme upravit podobným způsobem jako pro sudé stavy s výsledkem

$$ka = 2n\pi - 2\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots. \tag{14.31}$$

Křivky zobrazující pravou stranu pro liché stavy mají stejný tvar jako pro sudé stavy a jsou pouze posunuty směrem nahoru o π (viz obr. 14.2). Diskuse je proto pro tento případ analogická.

Pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu, kdy platí $V_0 \gg E$, dostaneme

$$k \approx 2n\frac{\pi}{a}. \tag{14.32}$$

Odpovídající energie a normované liché vlnové funkce pak mají pro $n = 1, 2, 3, \ldots$ tvar

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n)^2 \tag{14.33}$$

a

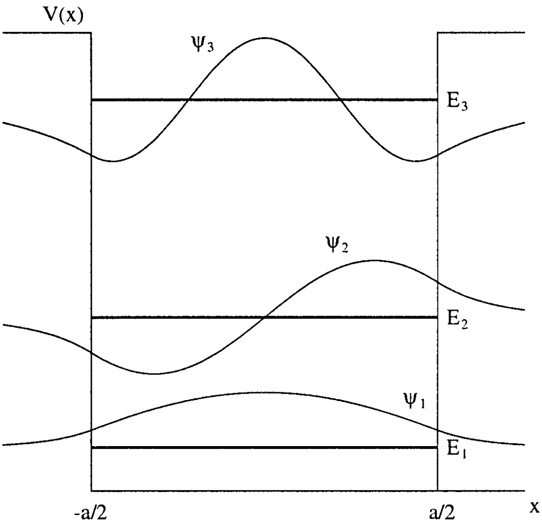
$$\psi_{\mathrm{II}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{2n\pi x}{a}. \tag{14.34}$$

Energie vázaných stavů a odpovídající vlnové funkce pro potenciálovou jámu konečné hloubky jsou ilustrovány na obr. 14.3. Energií je konečný počet větší než jedna nebo roven jedné. Vlnové funkce jsou střídavě sudé a liché a jsou nenulové i v klasicky zakázané oblasti mimo potenciálovou jámu.

14.1.2 Spojité spektrum

Pohybuje-li se částice s energií $E > V_0$ směrem od záporných hodnot x ke kladným hodnotám, může dojít buď k průchodu částice oblastí jámy, nebo vlivem působení jámy k jejímu odrazu.

Nejprve provedeme stručnou diskusi s použitím označení z kap. 14.1.1. Pro $E > V_0$ je výraz (14.8) menší než nula, α je ryze imaginární a v oblasti mimo potenciálovou jámu dostaneme místo jednoho klesajícího řešení dvě oscilující lineárně nezávislá řešení. V této oblasti tedy budeme mít dvě konstanty v lineární kombinaci těchto funkcí místo jedné funkce. Sešívací podmínky na vlnovou funkci, tj. podmínky na spojitost funkce $\psi(x)$ a její derivace v bodě $x = a/2$, jsou dvě, stejně jako v případě vázaných stavů. Dostáváme tedy dvě rovnice pro tři konstanty, z čehož je zřejmé, že energie $E > V_0$ nejsou kvantovány a vytvářejí spojité



Obrázek 14.3: Potenciálová jáma konečné hloubky. Energie E_n a vlnové funkce ψ_n základního stavu a dvou excitovaných stavů.

spektrum. Ke každé energii $E > V_0$ existují dvě lineárně nezávislá řešení, která se pro $|x| \gg a/2$ chovají přibližně jako funkce

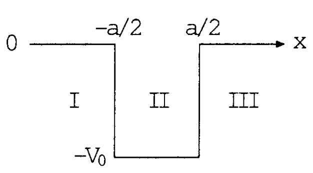
$$\psi(x) \approx \mathrm{e}^{\pm x\sqrt{2m(E-V_0)}/(i\hbar)}. \tag{14.35}$$

Tyto dvě funkce představují pohyb částice ve směru kladné a záporné osy x.

Nyní provedeme podrobnou diskuzi. Abychom dostali mimo oblast jámy podobnou situaci jako v případě volné částice, budeme předpokládat, že potenciální energie částice s energií $E > 0$ je rovna nule všude s výjimkou oblasti jámy $-a/2 \le x \le a/2$, kde platí

$$V(x) = -V_0 \tag{14.36}$$

a přitom $V_0 > 0$ (viz obr. 14.4).



Obrázek 14.4: Potenciálová jáma konečné hloubky. Spojité spektrum.

V oblasti I, tj. pro $x < -a/2$, budeme předpokládat, že vlnová funkce částice je rovna

$$\psi_\mathrm{I} = A\mathrm{e}^{ik_0 x} + B\mathrm{e}^{-ik_0 x}, \tag{14.37}$$

kde

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \tag{14.38}$$

Přitom předpokládáme, že vlnová funkce $A \exp(ik_0x)$ odpovídá pohybu částice zleva směrem k jámě a funkce $B \exp(-ik_0x)$ představuje částici odraženou nazpět.

V oblasti II, tj. pro $-a/2 \leq x \leq a/2$, bereme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_{\mathrm{II}} = \alpha \mathrm{e}^{ikx} + \beta \mathrm{e}^{-ikx}, \tag{14.39}$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} > 0. \tag{14.40}$$

Konečně, v oblasti III pro $x > a/2$ předpokládáme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_{\mathrm{III}} = C\mathrm{e}^{ik_0x}, \tag{14.41}$$

který odpovídá průchodu částice přes oblast jámy.

Pravděpodobnost průchodu částice oblastí jámy lze určit z poměru hustoty toku pravděpodobnosti odpovídajícímu průchodu oblastí jámy k hustotě toku pravděpodobnosti odpovídajícímu dopadu částice (podrobně viz příklad 1 v kap. 21.11). Odtud dostaneme *koeficient průchodu*[2]

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \tag{14.42}$$

a podobně i *koeficient odrazu*

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2. \tag{14.43}$$

Součet těchto koeficientů je roven jedné

$$R + T = 1. \tag{14.44}$$

K určení těchto koeficientů vyjádříme konstanty A a B pomocí konstanty C.

Sešívací podmínky na vlnovou funkci a její derivaci v bodě $x = a/2 \equiv b$ mají tvar

$$C\mathrm{e}^{ik_0b} = \alpha\mathrm{e}^{ikb} + \beta\mathrm{e}^{-ikb} \tag{14.45}$$

a

$$\frac{k_0}{k}C\mathrm{e}^{ik_0b} = \alpha\mathrm{e}^{ikb} - \beta\mathrm{e}^{-ikb}. \tag{14.46}$$

Z těchto dvou rovnic dostáváme

$$\alpha = \frac{C}{2}\left(1 + \frac{k_0}{k}\right)\mathrm{e}^{i(k_0-k)b} \tag{14.47}$$

[2]Tento vztah pro koeficient průchodu neplatí pro obecnější problémy, pro které $V(x \to -\infty) \neq V(x \to +\infty)$.

a

$$\beta = \frac{C}{2}\left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k_0+k)b}. \tag{14.48}$$

Podobně, sešívací podmínky v bodě $x = -b$ mají tvar

$$A\ e^{-ik_0 b} + Be^{ik_0 b} = \alpha e^{-ikb} + \beta e^{ikb} \tag{14.49}$$

a

$$A\ e^{-ik_0 b} - Be^{ik_0 b} = \frac{k}{k_0}\left(\alpha e^{-ikb} - \beta e^{ikb}\right). \tag{14.50}$$

Z posledních dvou rovnic vypočítáme A a B a do výsledků dosadíme α a β z rovnic (14.47) a (14.48)

$$A = \frac{C}{4}\left[\left(1 + \frac{k}{k_0}\right)\left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{-ika} + \left(1 - \frac{k}{k_0}\right)\left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{ika}\right] e^{ik_0 a}, \tag{14.51}$$

$$B = \frac{C}{4}\left[\left(1 - \frac{k}{k_0}\right)\left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{-ika} + \left(1 + \frac{k}{k_0}\right)\left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{ika}\right]. \tag{14.52}$$

Dosazením těchto výsledků do rovnice (14.43) a (14.44) dostaneme koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0}\right)^2 \sin^2 ka}. \tag{14.53}$$

Koeficient odrazu je roven $R = 1 - T$.

Nejprve si všimněme, že pokud potenciálová jáma neexistuje ($V_0 = 0$), potom je $k = k_0$ a koeficient průchodu T je roven jedné. Podobně, pro velmi mělkou jámu ($V_0 > 0$ je malé číslo blížící se nule) se koeficient průchodu blíží jedné. Koeficient průchodu T v závislosti na energii částice E je ukázán na obr. 14.5.

Zajímavý je následující případ. Předpokládejme, že platí $ka = n\pi$, kde n je celé číslo. Potom dostáváme $\sin ka = 0$, takže koeficient průchodu T se rovná jedné navzdory přítomnosti jámy (viz maxima v obr. 14.5). Je zřejmé, že se to stane při energiích

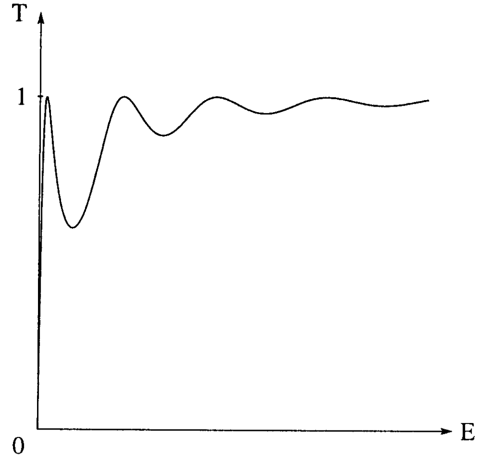
$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 - V_0 > 0. \tag{14.54}$$

Platí-li tedy

$$n^2 > \frac{2a^2 m V_0}{\hbar^2\pi^2}, \tag{14.55}$$

existují ve spojitém spektru energií výše uvedené *rezonanční energie*, pro něž je koeficient průchodu roven jedné. V tomto případě proto k odrazu částice nedochází. Protože pro tyto energie platí $ka = n\pi$ a $k = 2\pi/\lambda$, pro rezonanční energie je šířka jámy celistvým násobkem poloviny de Broglieovy vlnové délky

$$a = n\frac{\lambda}{2}. \tag{14.56}$$



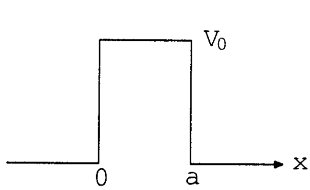
Obrázek 14.5: Pravděpodobnost průchodu T potenciálovou jámou v závislosti na energii částice E.

Poznamenejme, že vlnová funkce je přitom na okrajích jámy $x = \pm a/2$ různá od nuly.

Tento jev nemá v klasické mechanice analogii, neboť pro klasickou částici s energií $E > 0$ platí $T = 1$ nezávisle na energii.

14.2 Potenciálový val

Nyní budeme diskutovat tzv. *tunelový jev*, tj. průchod částice *potenciálovým valem* (viz obr. 14.6). Uvažovaný pravoúhlý val má šířku a a výšku $V_0 > 0$. Dopadající částice má energii $0 < E < V_0$. Takový model může například představovat zjednodušenou situaci na rozhraní vodič – izolátor – vodič, kde vrstva izolátoru vytváří bariéru pro volný pohyb elektronu.



Obrázek 14.6: Potenciálový val.

Částice dopadající na potenciálový val se buď odrazí, nebo s jistou pravděpodobností valem projde. Podobně jako v případě potenciálové jámy lze zavést koeficienty průchodu a odrazu. Je zřejmé, že výsledky pro uvažovaný val můžeme dostat z výsledků pro potenciálovou jámu, provedeme-li záměnu

$$V_0 \to -V_0. \tag{14.57}$$

Vlnový vektor (14.40) má pro potenciálový val tvar

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \tag{14.58}$$

kde $E < V_0$. Výsledky pro potenciálový val proto dostaneme z výsledků pro potenciálovou jámu přechodem

$$k \to i\kappa, \tag{14.59}$$

kde vlnový vektor

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \tag{14.60}$$

je reálný. Uvážíme-li vztah $\sin i\kappa a = i \sinh \kappa a$, dostaneme z rovnice (14.53) koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_0}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_0}\right)^2 \sinh^2 \kappa a}, \tag{14.61}$$

kde vlnový vektor k_0 daný vztahem (14.38) odpovídá volnému pohybu částice. Koeficient odrazu je roven $R = 1 - T$.

Pro libovolně široký a vysoký val je nenulová pravděpodobnost průchodu částice valem. S rostoucí šířkou a a s rostoucím rozdílem energií $V_0 - E$ však tato pravděpodobnost velmi rychle klesá. Pro valy o makroskopických rozměrech a makroskopické částice je pravděpodobnost průchodu valem nepatrná.

Kapitola 15

Moment hybnosti

By convention there is colour, by convention sweetness, by convention bitterness, but in reality there are atoms and space.
Democritus

15.1 Vlastnosti momentu hybnosti

Moment hybnosti je v analogii s klasickou fyzikou definován vztahy (2.21)–(2.23). Podobně, operátor kvadrát momentu hybnosti je roven

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{15.1}$$

S použitím výrazů (2.21)–(2.23) a komutačních relací mezi operátory souřadnice a impulzu

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \tag{15.2}$$

lze ukázat, že platí

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z. \tag{15.3}$$

Cyklickou záměnou indexů dostaneme i komutátory pro ostatní složky momentu hybnosti. Lze rovněž ukázat, že libovolná složka operátoru momentu hybnosti komutuje s kvadrátem momentu hybnosti

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0. \tag{15.4}$$

Současně lze proto měřit vždy pouze jednu složku momentu hybnosti a celkový moment hybnosti. Při vyjádření operátorů v souřadnicové reprezentaci lze rovněž ukázat, že operátory $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ a $\hat{L}^2$ jsou hermitovské (viz příklady v kap. 21.13).

15.2 Kvantování momentu hybnosti v centrálním poli

V případě pohybu částice v centrálním poli $V = V(r)$ je výhodné použít sférické souřadnice. Jak už jsme uvedli v kap. 13.4, ve sférických souřadnicích jsou výše uvedené operátory dány vztahy (viz též dodatek D.8)

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{15.5}$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{15.6}$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{15.7}$$

a

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}, \tag{15.8}$$

kde

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{15.9}$$

Jak jsme ukázali v kap. 13.4, v centrálním poli $V = V(r)$ jsou složky momentu hybnosti a jeho kvadrát integrály pohybu, neboť platí

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = [\hat{L}_y, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \tag{15.10}$$

a

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0. \tag{15.11}$$

Vzhledem k tomu, že operátory $\hat{L}_z$, $\hat{L}^2$ a $\hat{H}$ navzájem komutují, existuje společný systém vlastních funkcí těchto operátorů. Místo operátoru $\hat{L}_z$ jsme mohli vzít i operátor $\hat{L}_x$ nebo $\hat{L}_y$, s ohledem na vyjádření těchto operátorů ve sférických souřadnicích je však nejjednodušší použít operátor $\hat{L}_z$. Dříve než budeme studovat vodíku podobný atom, bude výhodné vyřešit nejdříve poněkud jednodušší úlohu, spočívající v nalezení vlastních funkcí a vlastních čísel operátorů $\hat{L}_z$ a $\hat{L}^2$ ve sférických souřadnicích

$$\hat{L}_z\chi = \mu\hbar\chi \tag{15.12}$$

a

$$\hat{L}^2\chi = \lambda\hbar^2\chi, \tag{15.13}$$

kde μ a λ jsou bezrozměrná vlastní čísla těchto operátorů. Získané vlastní funkce $\chi = \chi(\theta,\varphi)$ pak využijeme při hledání vlnových funkcí pro vodíku podobný atom, které budeme moci hledat v separovaném tvaru

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\chi(\theta,\varphi). \tag{15.14}$$

S použitím rovnic (15.8) a (15.9) nejdříve zapíšeme vlastní problém (15.13) ve tvaru

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\chi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\chi}{\partial\varphi^2} + \lambda\chi = 0. \tag{15.15}$$

Nyní provedeme separaci proměnných

$$\chi(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{15.16}$$

a po vydělení celé rovnice součinem $\chi = \Theta\Phi$ dostaneme rovnici

$$\frac{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)}{\Theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}}{\Phi} + \lambda = 0. \tag{15.17}$$

Tato rovnice má platit pro všechny úhly θ a φ, musí proto platit

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = \mathrm{konst.} \tag{15.18}$$

Funkce $\Phi(\varphi)$ musí být jednoznačná v tom smyslu, že nesmí změnit hodnotu při pootočení o úhel 2π okolo osy z

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi). \tag{15.19}$$

Odtud vyplývá, že musí platit

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi}, \tag{15.20}$$

kde

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots. \tag{15.21}$$

Faktor $1/\sqrt{2\pi}$ zajišťuje normování funkce $\Phi(\varphi)$ při integraci přes interval $\varphi \in \langle 0, 2\pi)$.

Funkci $\Phi(\varphi)$ dosadíme do rovnice (15.17) a dostaneme

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta + \lambda\Theta = 0. \tag{15.22}$$

V této rovnici provedeme substituci

$$\xi = \cos\theta, \tag{15.23}$$

kde $-1 \le \xi \le 1$. Pro diferenciál ξ platí $\mathrm{d}\xi = -\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$. Po úpravě má rovnice (15.22) v proměnné ξ tvar

$$(1-\xi^2)\Theta'' - 2\xi\Theta' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0, \tag{15.24}$$

kde čárka označuje derivaci vzhledem ke ξ. Tato rovnice má dva singulární body $\xi = \pm 1$.

Nejdříve budeme diskutovat řešení v okolí bodu $\xi = 1$. Provedeme-li substituci

$$z = \xi - 1, \tag{15.25}$$

dostaneme rovnici

$$\Theta'' - \frac{2(z+1)}{1-(z+1)^2}\Theta' + \frac{\lambda - \frac{m^2}{1-(z+1)^2}}{1-(z+1)^2}\Theta = 0, \tag{15.26}$$

kde čárka označuje derivaci podle proměnné z. Po úpravě obdržíme

$$\Theta'' + \frac{2}{z}\frac{z+1}{z+2}\Theta' - \left[\frac{\lambda}{z(z+2)} + \frac{m^2}{z^2(z+2)^2}\right]\Theta = 0. \tag{15.27}$$

Nyní budeme hledat funkci Θ ve tvaru mocninné řady

$$\Theta = z^\gamma \left(a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots\right). \tag{15.28}$$

Nejprve určíme exponent γ. V okolí singulárního bodu $\xi \to 1$, tj. $z \to 0$, můžeme vzít Θ ve tvaru

$$\Theta = a_0 z^\gamma. \tag{15.29}$$

Po dosazení tohoto vztahu do rovnice (15.27) a zanedbání členů řádu vyššího než $z^{\gamma-2}$ dostaneme

$$\gamma(\gamma-1)z^{\gamma-2} + \frac{2}{z}\frac{1}{2}\gamma z^{\gamma-1} - \frac{m^2}{4}z^{\gamma-2} = 0 \tag{15.30}$$

nebo po úpravě

$$\left[\gamma(\gamma-1) + \gamma - \frac{m^2}{4}\right] z^{\gamma-2} = 0. \tag{15.31}$$

Odtud vyplývá

$$\gamma = \pm\frac{m}{2}. \tag{15.32}$$

Abychom však dostali řešení, které nediverguje pro $z \to 0$, je třeba vzít

$$\gamma = \frac{|m|}{2}. \tag{15.33}$$

Analogickým způsobem lze postupovat i pro $\xi = -1$, kdy lze provést substituci $z = 1 + \xi$. Výsledkem je opět rovnice (15.33).

Shrneme-li výsledky dvou předcházejících odstavců, můžeme hledat Θ ve tvaru

$$\Theta = (1-\xi)^{\frac{|m|}{2}}(1+\xi)^{\frac{|m|}{2}}v = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}v, \tag{15.34}$$

kde $v = v(\xi)$ je funkce, kterou můžeme vyjádřit ve tvaru mocninné řady

$$v = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu \xi^\nu. \tag{15.35}$$

Dosazením rovnice (15.34) do rovnice (15.24) obdržíme diferenciální rovnici pro funkci v

$$(1-\xi^2)v'' - 2(|m|+1)\xi v' + (\lambda - |m| - m^2)v = 0. \tag{15.36}$$

Dosadíme-li nyní řadu (15.35) do této rovnice, dostaneme rekurentní vztah mezi koeficienty b_ν

$$b_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu-1) + 2(|m|+1)\nu - \lambda + |m| + |m|^2}{(\nu+2)(\nu+1)} b_\nu. \tag{15.37}$$

Pro $\nu \to \infty$ vidíme, že $b_{\nu+2} \approx b_\nu$. Řada (15.35) se proto pro velká ν chová podobně jako geometrická řada s kvocientem ξ^2, jejíž součet je úměrný $1/(1-\xi^2)$. Taková funkce by však změnila chování funkce Θ dané rovnicí (15.34) v okolí bodů $\xi = \pm 1$ a funkce Θ by v těchto bodech divergovala. Abychom splnili požadavky kladené na vlnovou funkci, musíme předpokládat, že se řada (15.35) redukuje na polynom, tj. existuje k, pro něž je koeficient b_{k+2} roven nule. Následující koeficienty dané rekurentním vztahem (15.37) jsou pak také rovny nule. Musí proto platit

$$k(k-1) + 2(|m|+1)k - \lambda + |m| + |m|^2 = 0. \tag{15.38}$$

Odtud vidíme, že vlastní číslo λ nemůže být libovolné, ale může nabývat jen určitých kvantovaných hodnot

$$\lambda = (k + |m|)(k + |m| + 1), \tag{15.39}$$

kde $k = 0, 1, 2, \ldots$. Kvantování λ opět vyplývá z podmínek kladených na vlnovou funkci.

Položíme-li

$$k + |m| = l, \tag{15.40}$$

dostaneme vlastní čísla λ v obvyklém tvaru

$$\lambda = l(l+1), \tag{15.41}$$

kde nové vlastní číslo l může nabývat hodnot

$$l = 0, 1, 2, \ldots \tag{15.42}$$

a současně platí

$$\mu = m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l. \tag{15.43}$$

Vidíme, že vlastní čísla operátoru kvadrátu momentu hybnosti a jeho z-ové komponenty jsou v centrálním poli kvantovány.

Z matematického hlediska se ukazuje, že funkce Θ jsou *přidružené Legendrovy polynomy* (viz dodatek D.9)

$$\Theta(\xi) = P_l^{|m|}(\xi), \tag{15.44}$$

kde $\xi = \cos\theta$. Přidružené Legendrovy polynomy $P_l^{|m|}$ lze vyjádřit prostřednictvím obyčejných *Legendrových polynomů*

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\xi^l}\left(\xi^2 - 1\right)^l \tag{15.45}$$

vztahem

$$P_l^{|m|}(\xi) = \left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}\xi^{|m|}} P_l(\xi). \tag{15.46}$$

Například, Legendrovy polynomy nejnižších řádů jsou rovny

$$P_0(\xi) = 1, \tag{15.47}$$

$$P_1(\xi) = \xi, \tag{15.48}$$

$$P_2(\xi) = \frac{1}{2}\left(3\xi^2 - 1\right), \tag{15.49}$$

$$P_3(\xi) = \frac{1}{2}\left(5\xi^3 - 3\xi\right) \tag{15.50}$$

a

$$P_4(\xi) = \frac{1}{8}\left(35\xi^4 - 30\xi^2 + 3\right). \tag{15.51}$$

Přitom platí podmínka udávající normování

$$P_l(1) = 1. \tag{15.52}$$

Přidružené Legendrovy polynomy nultého řádu jsou rovny obyčejným Legendrovým polynomům

$$P_l^0(\xi) = P_l(\xi). \tag{15.53}$$

Shrneme-li výsledky této kapitoly, vlastními funkcemi operátorů kvadrátu momentu hybnosti a jeho z-ové komponenty jsou tzv. *kulové funkce*

$$\boxed{Y_{lm}(\theta,\varphi) = N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi},} \tag{15.54}$$

kde N_{lm} je normovací faktor

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}}. \tag{15.55}$$

Pro operátory kvadrátu momentu hybnosti a jeho z-ové komponenty platí

$$\boxed{\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}, \quad l = 0,1,2,\ldots} \tag{15.56}$$

a

$$\boxed{\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}, \quad m = -l,\ldots,l.} \tag{15.57}$$

Kulové funkce tvoří úplný ortonormální systém při integraci přes celý prostorový úhel 4π ve sférických souřadnicích

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{15.58}$$

kde $\sin\theta\ \mathrm{d}\theta\ \mathrm{d}\varphi$ je element prostorového úhlu ve sférických souřadnicích. Obecnou vlnovou funkci závisející na proměnných θ a φ lze do kulových funkcí rozvinout obvyklým způsobem

$$\psi(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=l} c_{lm}Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{15.59}$$

Na závěr poznamenejme, že uvedené výsledky lze odvodit také pomocí operátorů $\hat{L}^{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, které mají podobné vlastnosti jako kreační a anihilační operátory $\hat{b}^+$ a $\hat{b}$ zavedené v případě lineárního harmonického oscilátoru.

Kapitola 16

Vodíku podobný atom

I ask you to look both ways. For the road to a knowledge of the stars leads through the atom; and important knowledge of the atom has been reached through the stars.
Arthur Eddington

Jak už bylo řečeno dříve, podle klasické fyziky by atom vodíku ani žádné jiné atomy či molekuly neměly být stabilní. Při pohybu elektronů v poli jader má díky jejich nenulovému zrychlení docházet k vyzařování elektromagnetického pole a během doby kratší než 1 ps by mělo dojít ke kolapsu takových systémů. To se nepozoruje a experimenty naopak ukazují na existenci stabilních stacionárních stavů atomů a molekul. Existenci takových stavů objasňuje teprve kvantová mechanika.

V kap. 16.1–16.2 budeme zkoumat stacionární stavy *vodíku podobného atomu* s hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}, \tag{16.1}$$

kde $Z = 1$ pro atom vodíku, $Z = 2$ pro ion He^+ atd. Předpokládáme tedy, že elektron o náboji $-e$ a hmotnosti m_e se pohybuje v coulombovském poli nehybného jádra o náboji Ze. Spin elektronu a jádra zde neuvažujeme a k popisu pohybu používáme nečasovou Schrödingerovu rovnici.

Pokud bychom chtěli započítat pohyb jádra, zavedli bychom místo souřadnic jádra a elektronu polohu těžiště soustavy a relativní polohu elektronu a jádra. Příslušnou dvoučásticovou Schrödingerovu rovnici lze separovat na dvě nezávislé Schrödingerovy rovnice odpovídající volnému nekvantovanému pohybu celé soustavy jádro a elektron v těžišťovém souřadném systému a vzájemnému pohybu v relativních souřadnicích. Schrödingerova rovnice pro relativní pohyb má pak tvar rovnice (16.1), hmotnost elektronu m_e je však nahrazena redukovanou hmotností soustavy jádro plus elektron.

Vzhledem k tomu, že coulombovský potenciál v hamiltoniánu (16.1) jde k nule pro $r \to \infty$, je zřejmé, že stacionární stavy vodíku podobného atomu s energií $E \geq 0$ jsou nekvantované stavy odpovídající *spojitému spektru* (viz kap. 9). Naproti tomu stavy s energií $E < 0$ mohou být díky přitažlivému coulombovskému potenciálu *vázanými stavy*, pro které platí podmínka $\psi(r) \to 0$ pro $r \to \infty$ a které mohou být díky této podmínce kvantovány. Zde se budeme zabývat hlavně diskrétním spektrem vodíku podobného atomu, které se experimentálně projevuje čárovými spektry. Spojitým spektrem, které odpovídá energiím $E \geq 0$, se budeme zabývat pouze okrajově.

Při řešení problému s hamiltonánem (16.1) je výhodné použít sférické souřadnice r, θ a φ. Coulombovský potenciál závisí pouze na radiální souřadnici r, a jde proto o pohyb v centrálním poli. Díky tomuto poli jsou kvadrát orbitálního momentu hybnosti a jeho z-ová komponenta integrály pohybu (viz kap. 15.2). Je zřejmé, že vázané stavy vodíku podobného atomu lze klasifikovat pomocí kvantových čísel l a m charakterizujících tyto veličiny

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi). \tag{16.2}$$

Zde jsme připsali i třetí kvantové číslo n, které odpovídá kvantování v radiálním směru a je dáno coulombovským potenciálem v rovnici (16.1). Vzhledem k tomu, že coulombovský potenciál závisí pouze na souřadnici r, energie vázaných stavů vodíku podobného atomu nebudou zřejmě záviset na kvantových číslech l a m

$$E = E_n. \tag{16.3}$$

V centrálním poli úhlová část pohybu nepřispívá ke kvantování energií. Všimněme si, že stavy vodíku podobného atomu charakterizujeme pomocí tří kvantových čísel, což odpovídá počtu prostorových proměnných. Stejnou závislost (16.3) dostáváme i při řešení „vodíku podobného atomu“ v dvourozměrném prostoru.

16.1 Diskrétní spektrum

Hamiltonián (16.1) má ve sférických souřadnicích tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2}\right] - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}, \tag{16.4}$$

kde operátor $\Delta_{\theta,\varphi}$ je dán vztahem (15.9).

Vzhledem k tomu, že tento hamiltonián vytváří společně s operátory kvadrátu momentu hybnosti (15.8)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi} \tag{16.5}$$

a jeho z-ové komponenty (15.7)

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{16.6}$$

systém tří navzájem komutujících operátorů, existuje společný systém vlastních funkcí těchto operátorů. Uvážíme-li, že poslední dva operátory nezávisí na proměnné r, můžeme předpokládat vlnové funkce ψ v separovaném tvaru

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{16.7}$$

kde $R(r)$ je dosud neurčená radiální část vlnové funkce a kulové funkce $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ jsou vlastní funkce operátorů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$, viz rovnice (15.56) a (15.57)

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{16.8}$$

a

$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}, \quad m = -l, \ldots, l. \tag{16.9}$$

Dosadíme-li předpoklad (16.7) do nečasové Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem (16.4) a využijeme-li předposledního vztahu, dostaneme po vykrácení Y_{lm} rovnici pro radiální část vlnové funkce $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} R = ER, \tag{16.10}$$

kde E je vlastní energie. Zbývá nalézt řešení této jednorozměrné Schödingerovy rovnice v proměnné r.

Tato rovnice se poněkud zjednoduší, použijeme-li substituci

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}. \tag{16.11}$$

Z rovnice (16.10) pak dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} u - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} u = Eu. \tag{16.12}$$

Abychom tuto rovnici dále zjednodušili, zavedeme vhodné jednotky. Vzdálenost budeme vyjadřovat v bezrozměrných jednotkách

$$\rho = \frac{r}{a_B}, \tag{16.13}$$

kde a_B je tzv. *Bohrův poloměr*

$$a_B = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \tag{16.14}$$

Číselně vyjádřeno je Bohrův poloměr roven $a_B \approx 0{,}0529177 \times 10^{-9}$ m = 0,529177 Å. Podobně, energii budeme vyjadřovat pomocí bezrozměrné veličiny ϵ

$$\epsilon = \frac{E}{\mathrm{Ry}}, \tag{16.15}$$

kde jeden *Rydberg* je roven

$$\mathrm{Ry} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2a_B} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}. \tag{16.16}$$

Číselně je jeden Rydberg roven 1 Ry $\approx 2{,}17991 \times 10^{-18}$ J = 13,605 eV. Jak se ukáže dále, Bohrův poloměr je vzdálenost od jádra, v níž je největší pravděpodobnost nalézt elektron v základním stavu atomu vodíku. Podobně, jeden Rydberg až na znaménko udává energii základního stavu atomu vodíku. Zavedené jednotky jsou proto z hlediska atomárního světa přirozené. Kromě Rydbergu se často zavádí také jednotka 1 Hartree = 2 Ry ≈ 27,211 eV.

Při použití těchto proměnných dostaneme Schrödingerovu rovnici ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[\epsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0, \tag{16.17}$$

kterou budeme řešit podobným způsobem jako v případě lineárního harmonického oscilátoru nebo výpočtu vlastních funkcí operátoru momentu hybnosti.

Nejdříve určíme asymptotické chování funkce u pro $r \to \infty$, tj. $\rho \to \infty$. V tomto případě přechází rovnice (16.17) na jednodušší rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \epsilon u = 0, \tag{16.18}$$

jejíž řešení splňující podmínku $u \to 0$ pro $\rho \to \infty$ zapíšeme ve tvaru

$$u(\rho) = \text{konst}\ \mathrm{e}^{-\alpha\rho}, \tag{16.19}$$

kde

$$\alpha = \sqrt{-\epsilon} \tag{16.20}$$

a pro vázané stavy s energií $E < 0$ platí

$$\epsilon < 0. \tag{16.21}$$

Řešení u na celém intervalu $0 < \rho < \infty$ budeme hledat ve tvaru

$$u(\rho) = \mathrm{e}^{-\alpha\rho} f(\rho), \tag{16.22}$$

kde $f(\rho)$ je nová funkce. Dosazením tohoto předpokladu do rovnice (16.17) vidíme, že funkce f musí splňovat rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\rho^2} - 2\alpha\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\rho} + \left[\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f = 0. \tag{16.23}$$

Řešení této rovnice budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$f(\rho) = \rho^\gamma \left(a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \cdots\right), \tag{16.24}$$

kde γ a a_i jsou dosud neurčené konstanty. Přitom budeme požadovat, aby radiální část vlnové funkce byla normovaná, tj. aby platil vztah

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2\, \mathrm{d}r = 1, \tag{16.25}$$

kde $r^2\, \mathrm{d}r$ je radiální část objemového elementu ve sférických souřadnicích.

Konstantu γ určíme z podmínky konečnosti funkce f pro $\rho \to 0$. Pro $\rho \to 0$ můžeme místo (16.24) předpokládat

$$f(\rho) = a_0 \rho^\gamma. \tag{16.26}$$

Pak platí

$$f' = a_0 \gamma \rho^{\gamma-1} \tag{16.27}$$

a

$$f'' = a_0 \gamma(\gamma-1)\rho^{\gamma-2}. \tag{16.28}$$

Dosazením těchto vztahů do diferenciální rovnice (16.23) dostaneme s přesností do nejnižšího řádu v ρ

$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1), \tag{16.29}$$

což vede na dvě možné hodnoty

$$\gamma = l+1 \tag{16.30}$$

nebo

$$\gamma = -l. \tag{16.31}$$

Pro hodnotu γ podle vztahu (16.31) však funkce u pro $\rho \to 0$ diverguje, takže je nutné použít vztah (16.30). Dostáváme proto

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu. \tag{16.32}$$

Tento výsledek dosadíme do rovnice (16.23) a dostaneme

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \left[a_{\nu+1}\left((\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)\right) + \right. \tag{16.33}$$

$$\left. + a_\nu \left(2Z - 2\alpha(\nu+l+1)\right)\right] \rho^{\nu+l} = 0.$$

Vzhledem k tomu, že požadujeme platnost této rovnice pro libovolná ρ, musí pro koeficienty a_ν platit rekurentní vztah

$$a_{\nu+1} = \frac{2\alpha(\nu+l+1) - 2Z}{(\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)} a_\nu, \quad \nu = 0, 1, 2, \ldots. \tag{16.34}$$

Díky požadavku (16.25) však musí jít radiální část vlnové funkce

$$R(\rho) = \frac{e^{-\alpha\rho} f(\rho)}{\rho} \tag{16.35}$$

pro $\rho \to \infty$ k nule. Ze vztahu (16.34) však pro velká ν dostáváme

$$a_{\nu+1} \approx \frac{2\alpha}{\nu} a_\nu, \tag{16.36}$$

což vede na funkci $f = \rho^{l+1}e^{2\alpha\rho}$. To ukazuje, že pokud je řada ve vztahu (16.32) nekonečná, funkce $R(\rho)$ pro $\rho \to \infty$ nejde k nule[1]. Musíme proto požadovat, aby tato řada přešla na polynom, tj. aby koeficienty a_ν byly počínaje určitou hodnotou ν nulové. To se stane, pokud bude čitatel v rovnici (16.34) pro jistou hodnotu $\nu = n_r$ roven nule

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2Z, \tag{16.37}$$

kde

$$n_r = 0, 1, 2, \dots \tag{16.38}$$

je celé nezáporné číslo. Podmínka (16.37) je zřejmě *kvantovací podmínkou* pro možné hodnoty $\alpha = \sqrt{-\epsilon}$, a tedy i energie

$$\alpha = \frac{Z}{n_r + l + 1}. \tag{16.39}$$

Místo kvantového čísla n_r se obvykle zavádí tzv. *hlavní kvantové číslo*

$$n = n_r + l + 1, \tag{16.40}$$

kde $n = 1, 2, 3, \dots$. Pro možné hodnoty energie pak dostáváme

$$\epsilon = -\alpha^2 = -\frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots. \tag{16.41}$$

Vrátíme-li se k původním jednotkám, dostaneme kvantované hodnoty energie vázaných stacionárních stavů vodíku podobného atomu (viz obr. 16.1)

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^2e^2}{2a_\mathrm{B}}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots.} \tag{16.42}$$

Energie těchto stavů jsou záporné. To je v souladu s tím, že k ionizaci atomu v takových stavech je třeba dodat energii. Speciálně, energie základního stavu s nejnižší energií $n = 1$ atomu vodíku ($Z = 1$) je rovna -1 Ry.

Možné hodnoty tzv. *orbitálního kvantového čísla* l vyplývají z rovnice (16.40)

$$l = 0, \dots, n - 1. \tag{16.43}$$

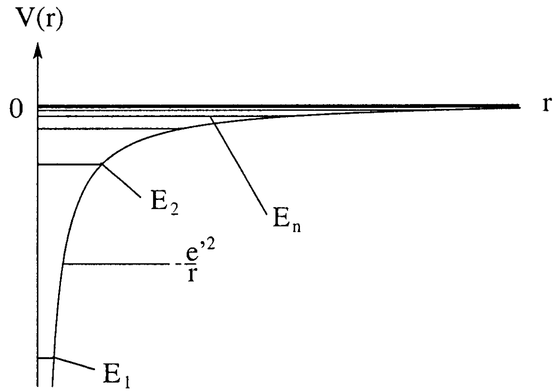
Současně tzv. *magnetické kvantové číslo* m může nabývat hodnoty (viz rovnice (15.43))

$$m = -l, \dots, l. \tag{16.44}$$

Energie základního stavu E_1 není degenerována (přísluší jí jeden stav s kvantovými čísly $n = 1$ a $l = m = 0$). Naproti tomu vyšší energie E_n, $n = 2, 3, 4, \dots$ jsou degenerované, neboť jim přísluší několik různých stavů s různými hodnotami l a m.

---

[1] Podrobnější diskuse viz [16].



Obrázek 16.1: Energie E_n pro atom vodíku ($Z = 1$). $(e')^2$ označuje $e^2/(4\pi\varepsilon_0)$.

Pro každé $l = 0, \ldots, n-1$ máme celkem $2l+1$ hodnot $m = -l, \ldots, l$. Degenerace hladiny E_n je tudíž rovna

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2. \tag{16.45}$$

Použijeme-li kvantové číslo n a rovnici (16.39) pro α, rekurentní vztah (16.34) dostane tvar

$$a_{\nu+1} = -\frac{2Z}{n}\frac{n-(l+\nu+1)}{(\nu+1)(2l+\nu+2)}a_\nu, \quad \nu = 0, 1, 2, \ldots. \tag{16.46}$$

Hodnota koeficientu a_0 je dána normovací podmínkou (16.25). Po dosazení vztahu (16.46) do rovnice (16.32) dostaneme

$$f(\rho) = a_0\rho^{l+1}\left[1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)}\frac{2Z\rho}{n} + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2 + \cdots\right.$$
$$\left.\cdots + (-1)^{n-l-1}\frac{(n-l-1)(n-l-2)\cdots 1}{(n-l-1)!(2l+2)(2l+3)\cdots(n+l)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^{n-l-1}\right]. \tag{16.47}$$

Normované radiální části vlnových funkcí lze zapsat ve tvaru

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi), \tag{16.48}$$

kde

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} = \frac{2Zr}{na_\mathrm{B}} \tag{16.49}$$

a $L_k^s(\xi)$ jsou *přidružené Laguerrovy polynomy* (viz dodatek D.9), které lze získat z *obyčejných Laguerrových polynomů* $L_k(\xi)$

$$L_k(\xi) = \mathrm{e}^{\xi}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}\xi^k}\left(\mathrm{e}^{-\xi}\xi^k\right) \tag{16.50}$$

pomocí vztahu

$$L_k^s(\xi) = \frac{\mathrm{d}^s}{\mathrm{d}\xi^s}L_k(\xi). \tag{16.51}$$

Normovací koeficient je roven

$$N_{nl} = \left[\left(\frac{2Z}{na_{\mathrm{B}}}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{1/2}. \tag{16.52}$$

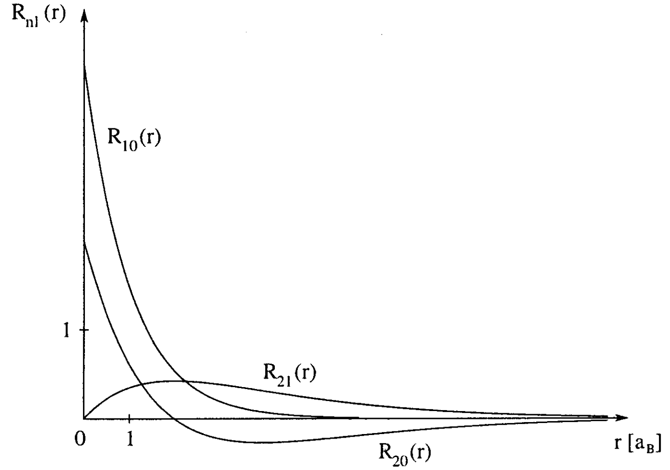
Podrobně uvedeme několik normovaných radiálních částí vlnových funkcí (viz obr. 16.2–16.3)

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_{\mathrm{B}}}\right)^{3/2} 2\mathrm{e}^{-Zr/a_{\mathrm{B}}}, \tag{16.53}$$

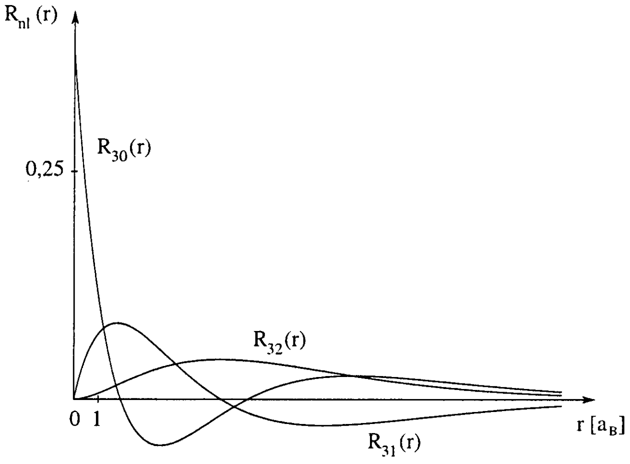
$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_{\mathrm{B}}}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_{\mathrm{B}}}\right)\mathrm{e}^{-Zr/(2a_{\mathrm{B}})} \tag{16.54}$$

a

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a_{\mathrm{B}}}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_{\mathrm{B}}\sqrt{3}}\mathrm{e}^{-Zr/(2a_{\mathrm{B}})}. \tag{16.55}$$



Obrázek 16.2: Radiální části $R_{nl}(r)$ vlnových funkcí pro atom vodíku ($Z = 1$) pro $n = 1$, $l = 0$ a $n = 2$, $l = 0, 1$. a_{B} označuje Bohrův poloměr.



Obrázek 16.3: Radiální části $R_{nl}(r)$ vlnových funkcí pro atom vodíku pro $n = 3$ a $l = 0, 1, 2$.

Pro úplnost uvádíme i několik normovaných úhlových částí vlnových funkcí

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}, \tag{16.56}$$

$$Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\, \mathrm{e}^{-i\varphi}, \tag{16.57}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta \tag{16.58}$$

a

$$Y_{11}(\theta, \varphi) = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\, \mathrm{e}^{i\varphi}. \tag{16.59}$$

Tyto funkce jsou normovány vzhledem k integraci přes celý prostorový úhel 4π ve sférických souřadnicích.

Celkové vlnové funkce vázaných stavů vodíku podobného atomu mají tvar

$$\boxed{\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)} \tag{16.60}$$

a tvoří pro $n = 1, 2, 3, \ldots$, $l = 0, \ldots, n-1$ a $m = -l, \ldots, l$ úplný ortonormální systém funkcí, do něhož lze rozvinout obecné řešení nečasové Schrödingerovy rovnice pro vázané stavy.

Pravděpodobnost nalézt elektron v objemovém elementu $(r, r + \mathrm{d}r)$, $(\theta, \theta + \mathrm{d}\theta)$ a $(\varphi, \varphi + \mathrm{d}\varphi)$ je rovna

$$\mathrm{d}p(r, \theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2\, \mathrm{d}r\, \mathrm{d}\Omega, \tag{16.61}$$

kde $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$. Integrací tohoto vztahu přes celý prostorový úhel dostaneme pravděpodobnost nalézt elektron v oblasti mezi $(r, r + dr)$

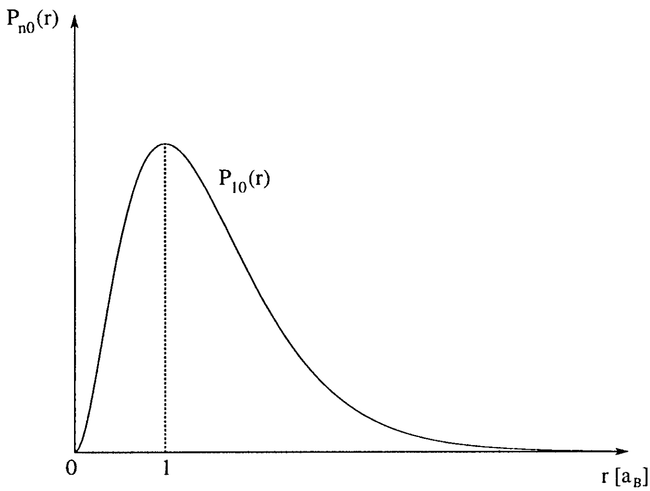
$$dp(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 \, dr. \tag{16.62}$$

Podobně pravděpodobnost nalézt elektron v určitém prostorovém úhlu $(\theta, \theta + d\theta)$ a $(\varphi, \varphi + d\varphi)$ je rovna

$$dp(\theta, \varphi) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \, d\Omega. \tag{16.63}$$

Při inverzi souřadnic $\mathbf{r} \longrightarrow -\mathbf{r}$ mají vlnové funkce ψ_{nlm} v souladu s prostorovu symetrií problému sudou či lichou paritu

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \longrightarrow (-1)^l \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi). \tag{16.64}$$

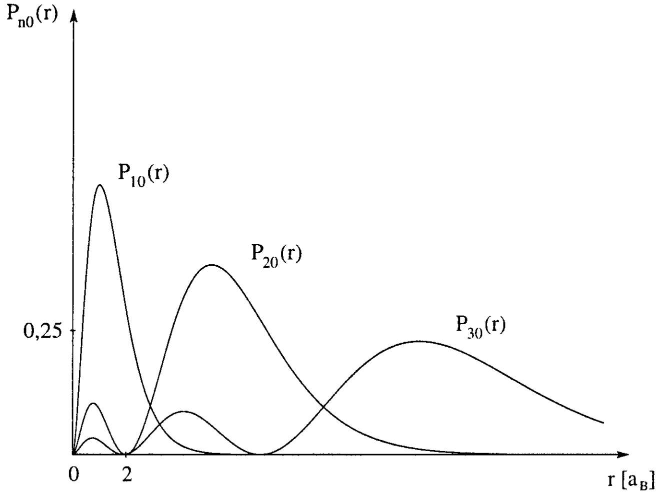


Obrázek 16.4: Radiální hustota pravděpodobnosti $P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$ pro základní stav atomu vodíku ($n = 1$, $l = 0$).

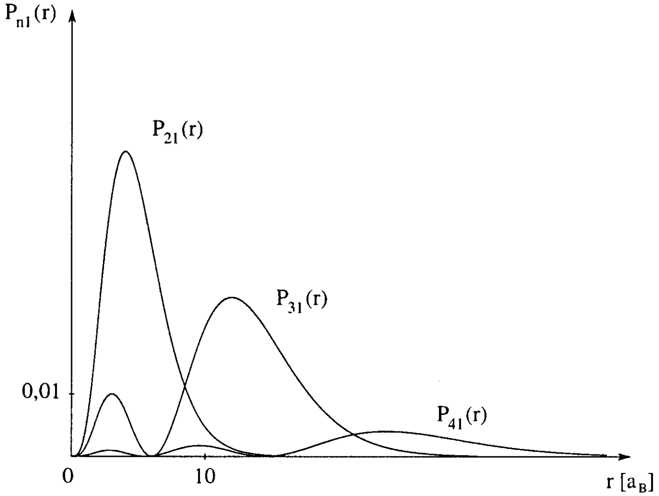
Radiální hustoty pravděpodobnosti

$$P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2 \tag{16.65}$$

jsou ukázány na obr. 16.4–16.6. Vidíme, že hustota pravděpodobnosti pro základní stav $P_{10}(r)$ má pro atom vodíku maximum v bodě $r = a_B$ (Bohrův poloměr). Maximum je v bodě odpovídajícím poloměru kruhové dráhy pro základní stav v Bohrově modelu atomu vodíku. Pro vyšší excitované stavy atomu vodíku mají hustoty pravděpodobnosti na intervalu $r \in (0, \infty)$ celkem $n - l - 1$ nulových bodů. Mezi těmito body hustota pravděpodobnosti osciluje a s rostoucí vzdáleností od jádra se maxima hustoty pravděpodobnosti rozšiřují. S rostoucí energií elektronu se bod, v němž je největší pravděpodobností nalézt elektron, vzdaluje od jádra. Pro velmi vysoká n



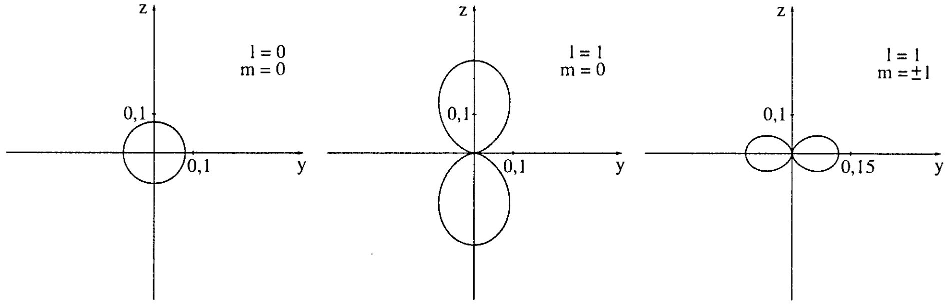
Obrázek 16.5: Radiální hustoty pravděpodobnosti $P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$ pro atom vodíku pro $l = 0$ a $n = 1, 2, 3$.



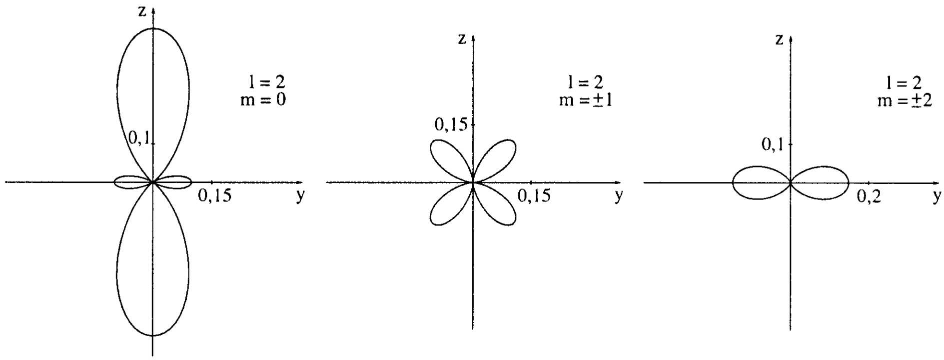
Obrázek 16.6: Radiální hustoty pravděpodobnosti $P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$ pro atom vodíku pro $l = 1$ a $n = 2, 3, 4$.

(tzv. *Rydbergovy stavy*) je elektron od jádra již velmi vzdálen, a stačí proto i jen poměrně malá energie k ionizaci atomu a k jeho přechodu do spojitého spektra s energií $E \geq 0$. S rostoucím nábojem jádra Z se maxima hustot pravděpodobnosti přesunují směrem k jádru a energie E_n klesají (zvětšují se v absolutní hodnotě).

Stacionární stavy vodíku podobného atomu s kvantovým číslem $l = 0$ se nazý-



Obrázek 16.7: Polární diagramy funkcí $|Y_{lm}|^2$ pro $l = 0$ (s-stavy) a $l = 1$ (p-stavy).



Obrázek 16.8: Polární diagramy funkcí $|Y_{lm}|^2$ pro $l = 2$ (d-stavy).

vají *s-stavy*. Podobně, stavy s $l = 1$ se nazývají *p-stavy* a stavy s $l = 2$ *d-stavy*. Označení dalších stavů je podle abecedy (f, g, h atd.)[2].

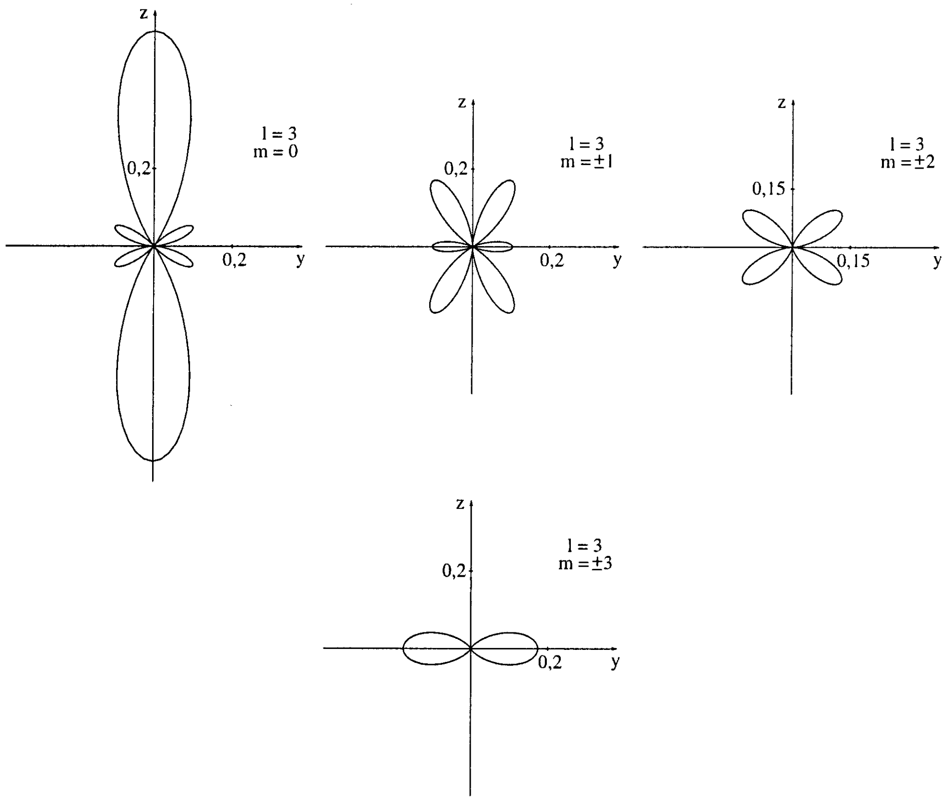
V obr. 16.7–16.9 jsou ukázány kvadráty velikosti kulových funkcí $|Y_{lm}|^2$ pro s-, p- a d-stavy. Jde o tzv. *polární diagramy*, v nichž se na paprsek mířící ve směru daném úhly θ a φ vynáší $|Y_{lm}|^2$. Z těchto obrázků je zřejmé kvantování z-ové komponenty momentu hybnosti a určitá podobnost s klasickou představou o pohybu elektronu po kruhové trajektorii.

O existenci diskrétních hladin E_n svědčí spektroskopická měření[3]. Při přechodu elektronu mezi hladinami m a n se vyzařuje nebo absorbuje elektromagnetické záření o frekvenci dané zákonem zachování energie

$$\nu = \frac{|E_m - E_n|}{h}. \tag{16.66}$$

[2]Toto označení je přeneseno ze spektroskopie, kde byla zavedena označení čar Σ, Π, Δ atd.

[3]V souvislosti s konečnou dobou života excitovaných stavů mají experimentálně zjištěné spektrální čáry malou, avšak nenulovou šířku.



Obrázek 16.9: Polární diagramy funkcí $|Y_{lm}|^2$ pro $l = 3$ (f-stavy).

Tento výsledek souhlasí s empirickým Ritzovým kombinačním principem. Podle toho, která je výchozí hladina n, dostáváme různé série čar:

- $n = 1$ Lymanova série (v ultrafialové oblasti),
- $n = 2$ Balmerova série (ve viditelné oblasti),
- $n = 3$ Ritzova–Paschenova série (v infračervené oblasti),
- $n = 4$ Brackettova série (v infračervené oblasti),
- $n = 5$ Pfundova série (v infračervené oblasti).

Správnost vztahu pro energii (16.42) byla ověřena nejen pro atom vodíku, ion He^+ apod., ale i pro tak extrémní případ, jako je ion atomu železa Fe^{+25}, jehož spektrum je pozorovatelné v záření hvězd. Podobně byl tento vztah ověřen i pro mezoatom, v němž je místo elektronu mezon μ^-. Vztah platí i pro deuterium, avšak s jinou redukovanou hmotností než v případě atomu vodíku.

16.2 Spojité spektrum

Diskusi řešení Schrödingerovy rovnice pro spojité spektrum vodíku podobného atomu s energií $E \geq 0$ provedeme velmi stručně. Podrobněji viz např. [24].

Vyjdeme z rovnice (16.17), která platí nezávisle na znaménku energie E resp. ϵ

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[\epsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0. \tag{16.67}$$

Opět nejdříve určíme asymptotické chování funkce u pro $r \longrightarrow \infty$, tj. $\rho \longrightarrow \infty$, které je dáno rovnicí (16.18)

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \epsilon u = 0. \tag{16.68}$$

Protože předpokládáme $\epsilon \geq 0$, můžeme položit

$$\epsilon = k^2, \tag{16.69}$$

kde $k \geq 0$ je reálné číslo mající význam k-vektoru. Pak můžeme psát řešení v oblasti $\rho \longrightarrow \infty$ ve tvaru

$$u(\rho) \approx A\,\mathrm{e}^{ik\rho} + B\mathrm{e}^{-ik\rho}, \tag{16.70}$$

kde A a B jsou libovolné konstanty. Vidíme, že na rozdíl od diskrétního spektra se tentokrát neuplatňuje podmínka $u \longrightarrow 0$ pro $\rho \longrightarrow \infty$. Vzhledem k neexistenci takové okrajové podmínky nejsou energie $E \geq 0$ kvantované.

Asymptotické chování funkce $u(\rho)$ pro $\rho \longrightarrow 0$ vyjde stejné jako v případě záporných energií, takže můžeme předpokládat

$$u_{kl}(\rho) = \mathrm{e}^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu. \tag{16.71}$$

Dále lze postupovat podobně jako u diskrétního spektra. Lze nalézt rekurentní vztah pro koeficienty a_ν a sumu na pravé straně zapsat pomocí hypergeometrické funkce (viz [24]).

Výsledné nenormované vlnové funkce mají tvar

$$\psi_{klm} = \frac{u_{kl} Y_{lm}}{r}, \tag{16.72}$$

kde k může nabývat libovolných hodnot $k \geq 0$. Ke každé energii $E \geq 0$ přísluší dvě řešení odpovídající vektorům $\pm ik$ v rovnici (16.70) (rozbíhající se a sbíhající se vlna). Tato řešení nejsou kvadraticky integrabilní a lze je normovat na δ-funkci. Kvadrát momentu hybnosti (kvantové číslo l) a jeho z-ová komponenta (kvantové číslo m) zůstávají integrály pohybu.

16.3 Magnetický moment a moment hybnosti*

Při pohybu elektronu okolo jádra atomu vzniká podle klasické fyziky proudová smyčka, a lze proto očekávat vznik odpovídajícího magnetického momentu. Tuto situaci nyní popíšeme z hlediska kvantové mechaniky.

Pohybuje-li se elektron s nábojem $q = -e$ v elektromagnetickém poli s vektorovým potenciálem $\mathbf{A}$, dostáváme

$$(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 = -\hbar^2\Delta - 2ie\hbar\mathbf{A}\nabla - ie\hbar\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} + e^2\mathbf{A}^2. \tag{16.73}$$

Pro konstantní magnetické pole $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ mířící podél osy z můžeme vzít vektorový potenciál ve tvaru

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0). \tag{16.74}$$

Vynecháme-li pro slabá magnetická pole člen $\mathbf{A}^2$ v rovnici (16.73) a uvážíme-li vztah $\mathrm{div}\,\mathbf{A} = 0$, dostaneme hamiltonián pro vodíku podobný atom v uvažovaném magnetickém poli ve tvaru

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} - \frac{ie\hbar B}{2m_\mathrm{e}}\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{eB}{2m_\mathrm{e}}\hat{L}_z.\end{aligned} \tag{16.75}$$

Napíšeme-li dodatečnou potenciální energii odpovídající magnetickému poli ve tvaru $-\mathbf{B}\,\hat{\mathbf{M}} = -B\,\hat{M}_z$, vidíme, že *operátor z-ové složky magnetického momentu* elektronu souvisejícího s jeho orbitálním momentem hybnosti je roven

$$\hat{M}_z = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}}\hat{L}_z. \tag{16.76}$$

Pro stacionární stavy popsané funkcemi ψ_{nlm}, pro které $\hat{L}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}$, $m = -1, \ldots, l$, nabývá magnetický moment hodnot $-m\mu_B$, kde $\mu_B = e\hbar/(2m_\mathrm{e})$ je *Bohrův magneton.* Obecně můžeme psát

$$\boxed{\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{2m_\mathrm{e}}\hat{\mathbf{L}}.} \tag{16.77}$$

Dodatečná energie vodíku podobného atomu ve stavu popsaném funkcí ψ_{nlm} závisí na magnetickém kvantovém čísle m

$$\Delta E = mB\mu_B, \quad m = -l, \ldots, l. \tag{16.78}$$

Připojíme-li k tomuto výsledku ještě *výběrové pravidlo* $\Delta m = 0, \pm 1$, které lze odvodit výpočtem pravděpodobnosti přechodu mezi odpovídajícími hladinami [87], vidíme, že původní spektrální čára odpovídající přechodu mezi dvěma energetickými hladinami E_n se v magnetickém poli štěpí na tři hladiny (tzv. *normální Zeemanův jev*).

16.4 Spin elektronu*

Ve Sternově–Gerlachově experimentu (1922) bylo zjištěno, že svazek atomů vodíku v základním stavu s nulovým momentem hybnosti $l = 0$, a tedy i s nulovým magnetickým momentem $\hat{\mathbf{M}}$ se v nehomogenním magnetickém poli $\mathbf{B}$ štěpí na dva svazky.

Na tomto výsledku je zajímavé, že ke štěpení svazku vůbec dochází. Pozoruhodné je rovněž to, že podle vztahu (16.44) má z-ová složka momentu hybnosti celkem $2l + 1$ možných hodnot, kde $2l + 1$ je buď nula, nebo liché číslo. Z tohoto a dalších experimentů proto vyplývá, že kromě uvedeného magnetického momentu souvisejícího s orbitálním momentem hybnosti má elektron ještě vlastní magnetický moment, který souvisí s jeho vnitřním momentem hybnosti, pro který zřejmě musí platit $l = 1/2$, kdy $2l+1 = 2$. Tento vnitřní moment hybnosti se nazývá *spin* a příslušný operátor se označuje $\hat{\mathbf{S}}$. V souvislosti s tímto závěrem se kromě kvantových čísel n, l a m zavádí i čtvrté *spinové kvantové číslo* $m_s = \pm 1/2$. Z Einsteinova–de Haasova experimentu, který umožnil změřit poměr magnetického momentu a spinu elektronu, vyplývá vztah

$$\boxed{\hat{\mathbf{M}} = -\frac{e}{m_e}\hat{\mathbf{S}}.} \tag{16.79}$$

Podle tohoto vztahu je poměr velikosti magnetického momentu a spinu elektronu dvakrát větší než v případě orbitálního momentu hybnosti.

Abychom nalezli operátor spinu $\hat{\mathbf{S}}$, budeme předpokládat v analogii s orbitálním momentem hybnosti komutační relace

$$\boxed{[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y.} \tag{16.80}$$

Vzhledem k tomu, že v souladu s výše uvedeným závěrem je hodnota průmětu spinu na libovolnou osu měření rovna $\pm\hbar/2$ (Uhlenbeckova–Goudsmitova hypotéza), lze operátory $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ a $\hat{S}_z$ reprezentovat hermitovskými maticemi řádu dvě. Tyto matice budeme psát ve tvaru

$$\boxed{\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,} \tag{16.81}$$

kde nové hermitovské matice σ_x, σ_y a σ_z řádu dvě mají vlastní čísla ± 1.

Kvadráty těchto matic mají dvojnásobné vlastní číslo 1 a v reprezentaci jejich vlastních vektorů je lze reprezentovat jednotkovými maticemi. Protože jednotková matice zůstává jednotkovou maticí v libovovolné reprezentaci, platí obecně

$$\sigma_x^2 = 1, \quad \sigma_y^2 = 1, \quad \sigma_z^2 = 1. \tag{16.82}$$

Z rovnic (16.80) vyplývá

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y. \tag{16.83}$$

Využitím vztahů (16.82)–(16.83) dále dostaneme

$$2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = (\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y + \sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) = 0. \tag{16.84}$$

Platí tedy

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x, \quad \sigma_x\sigma_z = -\sigma_z\sigma_x, \quad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y \tag{16.85}$$

(matice spolu antikomutují). S využitím vztahů (16.83)–(16.85) dostaneme rovněž

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2\sigma_x\sigma_y = 2i\sigma_z. \tag{16.86}$$

Odtud dostáváme

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y. \tag{16.87}$$

Lze nalézt různé matice vyhovující těmto vztahům. Položíme-li

$$\boxed{\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},} \tag{16.88}$$

nebude řešení uvedených rovnic stále ještě jednoznačné, lze však ukázat, že existuje řešení

$$\boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} \tag{16.89}$$

a

$$\boxed{\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}} \tag{16.90}$$

(podrobně viz např. [16]). Matice σ_x, σ_y a σ_z se nazývají *Pauliho matice.* Lze ukázat, že libovolnou hermitovskou matici řádu dvě lze vyjádřit jako lineární kombinaci Pauliho matic a jednotkové matice. Reprezentace spinu pomocí Pauliho matic je velice často využívána. Relativistickou teorii spinu lze vybudovat pomocí Diracovy rovnice (kap. 17.2).

Snadno lze ověřit, že vlastní funkce operátoru z-ové komponenty spinu $\hat{S}_z$ odpovídající vlastním číslům $\hbar/2$ a $-\hbar/2$ jsou rovny

$$\uparrow \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{16.91}$$

(stav představovaný touto funkcí se často označuje jako „spin nahoru“) a

$$\downarrow \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{16.92}$$

(„spin dolů“).

Pokud hamiltonián obsahuje operátor spinu, vlnovou funkci píšeme ve tvaru obecné dvousložkové vlnové funkce

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \tag{16.93}$$

kde ψ_1 odpovídá částici s kladnou z-ovou složkou spinu $\hbar/2$ a ψ_2 odpovídá opačné z-ové složce $-\hbar/2$. Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v libovolném ze dvou spinových stavů je rovna

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^+\psi. \tag{16.94}$$

Vezmeme-li v úvahu vztah (16.79), můžeme pro pohyb elektronu v konstantním magnetickém poli $\mathbf{B}$ a skalárním potenciálu V napsat tzv. *Pauliho rovnici*

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_\mathrm{e}} - eV + \frac{e}{m_\mathrm{e}}\hat{\mathbf{S}}\mathbf{B}\right]\psi,} \tag{16.95}$$

kde vlnová funkce ψ má tvar (16.93). Podle této rovnice závisí energie vodíku podobného atomu v magnetickém poli jak na jeho orbitálním momentu hybnosti, tak i na jeho spinu.

Při přesnějším relativistickém výpočtu vodíku podobného atomu s pomocí Diracovy rovnice se zavádí operátor celkového momentu hybnosti $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Podle této teorie se ukazuje, že energie vodíku podobného atomu závisí na dvou kvantových číslech n a $j = l \pm 1/2$

$$E = E_{nj}. \tag{16.96}$$

Tak lze objasnit i tzv. *jemnou strukturu hladin*, kterou vzorec (16.42) nepopisuje.

Dosud jsme neuvažovali magnetický moment jádra vodíku podobného atomu. Uvážíme-li interakci magnetického momentu jádra s magnetickými momenty elektronu, můžeme popsat i *hyperjemnou strukturu hladin*, kdy je vzhledem k hmotnosti jader rozštěpení hladin o asi tři řády menší než v případě jemné struktury (viz např. [24]).

Kapitola 17

Základy relativistické kvantové mechaniky*

The distinction between past, present and future is only an illusion, however persistent.
Albert Einstein

Jak známo, speciální teorie relativity je založena na dvou hlavních postulátech:

- principu relativity, podle kterého jsou všechny inerciální systémy ekvivalentní,
- postulátu o konstantní rychlosti světla c ve všech inerciálních systémech.

Při speciální *Lorentzově transformaci*, kdy se dva inerciální systémy pohybují vůči sobě konstantní rychlostí v podél osy x, se x-ová souřadnice a čas t transformují podle známých vzorců

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \tag{17.1}$$

a

$$t' = \frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}. \tag{17.2}$$

Energii

$$E = mc^2 = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}c^2 \tag{17.3}$$

můžeme vyjádřit ve tvaru

$$E^2 = c^2 \left[\frac{m_0^2 v^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} + \frac{m_0^2 c^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} - \frac{m_0^2 v^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} \right]. \tag{17.4}$$

První člen v závorce lze zapsat pomocí impulzu $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ a druhý a třetí člen lze sloučit

$$E^2 = c^2 \left[\mathbf{p}^2 + \frac{m_0^2 (c^2 - v^2)}{\frac{c^2 - v^2}{c^2}} \right]. \tag{17.5}$$

Výsledkem je výraz, který je vhodný k přechodu od klasické ke kvantové mechanice

$$E^2 = c^2\mathbf{p}^2 + m_0^2c^4. \tag{17.6}$$

První možností, kterou lze přejít ke kvantové mechanice, je vyjít z výrazu (17.6) a dosadit do něj místo klasických veličin operátory

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \tag{17.7}$$

$$\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla. \tag{17.8}$$

Tento postup vede na Kleinovu–Gordonovu rovnici pro volnou částici (kap. 17.1).

Druhou možností je vyjít z výrazu

$$E = \pm\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m_0^2c^4}, \tag{17.9}$$

odmocninu jistým způsobem „linearizovat“ a zavést výše uvedené operátory. Tato cesta vede k Diracově rovnici (kap. 17.2).

17.1 Kleinova–Gordonova rovnice

Nejprve dosadíme operátory (17.7) a (17.8) do relativistického vztahu mezi energií a impulzem (17.6). Chápeme-li rovnost operátorů na obou stranách výsledné rovnice ve smyslu stejného výsledku jejich působení na vlnovou funkci $\psi(\mathbf{r}, t)$, dostaneme *Kleinovu-Gordonovu rovnici*[1] pro volnou částici

$$\boxed{\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0.} \tag{17.10}$$

D'Alembertův operátor $\Box = \Delta - (1/c^2)(\partial^2/\partial t^2)$ se chová při Lorentzových transformacích jako skalár, tj. stejně jako konstanta $m_0^2c^2/\hbar^2$. Všechny členy Kleinovy–Gordonovy rovnice mají proto tentýž tenzorový tvar (tato rovnice je zapsána v *kovariantním tvaru*). Kovariantní forma zápisu zaručuje invariantnost důsledků vyplývajících z této rovnice vzhledem k Lorentzovým transformacím. Kleinova–Gordonova rovnice je proto, na rozdíl od časové Schrödingerovy rovnice, relativistickou pohybovou rovnicí.

Rovnici kontinuity se pokusíme odvodit podobným způsobem jako v případě Schrödingerovy rovnice. Nejprve rovnici (17.10) vynásobíme zleva komplexně sdruženou funkcí ψ^*. Potom komplexně sdružíme Kleinovu–Gordonovu rovnici a násobíme ji zprava funkcí ψ a obě výsledné rovnice odečteme. Výsledek můžeme zapsat ve tvaru

$$\psi^*\Delta\psi - (\Delta\psi^*)\psi - \frac{1}{c^2}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\psi\right) = 0 \tag{17.11}$$

[1] Někdy též Kleinova–Gordonova–Schrödingerova rovnice.

nebo též

$$\mathrm{div}\,\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi\right] - \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) = 0. \tag{17.12}$$

Protože předpokládáme, že částice nevzniká ani nezaniká, měla by platit rovnice kontinuity. V případě nerelativistické Schrödingerovy rovnice platí pro hustotu toku pravděpodobnosti vztah (6.10)

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2m_0 i}\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi\right]. \tag{17.13}$$

Použijeme-li tuto definici i v případě Kleinovy–Gordonovy rovnice, dostaneme pro hustotu pravděpodobnosti výraz

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0c^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right). \tag{17.14}$$

Nyní ovšem narazíme na problém, který vedl Diraca k hledání jiné evoluční rovnice. Kleinova–Gordonova rovnice je totiž rovnicí druhého řádu v čase a pro určení vlnové funkce ψ je třeba zadat jako počáteční podmínku v $t = t_0$ nejen vlnovou funkci $\psi(\mathbf{r}, t)$, ale i její derivaci $\partial\psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$. V $t = t_0$ lze tedy zadat dvě funkce, což ve svých důsledcích znamená, že hustota pravděpodobnosti daná vztahem (17.14) může nabývat i záporných hodnot. Je zřejmé, že tento výraz nelze interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti. Podstatu tohoto problému objasníme na příkladu volné částice.

17.1.1 Volná částice

Dosazením do Kleinovy–Gordonovy rovnice (17.10) se lze přesvědčit, že vlnová funkce volné částice má stejný tvar jako v případě časové Schrödingerovy rovnice

$$\psi = N\mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(Et - \mathbf{pr})}, \tag{17.15}$$

kde N je normovací konstanta, energie částice je rovna

$$E = \pm\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m_0^2c^4} \tag{17.16}$$

a $\mathbf{p}$ je její impulz. Na rozdíl od Schrödingerovy rovnice máme nyní dvě vlnové funkce: Řešení s kladnou energií

$$\psi_+ = N\mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(|E|t - \mathbf{pr})}, \tag{17.17}$$

pro něž je $\rho > 0$, a řešení se zápornou energií

$$\psi_- = N\mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(-|E|t - \mathbf{pr})}, \tag{17.18}$$

pro které je $\rho < 0$. Stav volné částice se zápornou energií a s $\rho < 0$ zřejmě nemá přímý fyzikální smysl. Proto vlnovou funkci ψ_- komplexně sdružíme a dostaneme funkci

$$\psi_-^* = N\mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(|E|t + \mathbf{pr})}, \tag{17.19}$$

odpovídající kladné energii a opačnému impulzu, než měla původní částice. Současně dojde i ke změně znaménka ρ a vlnovou funkci ψ^*_- lze již fyzikálně interpretovat. Z důvodů diskutovaných dále se uvedená operace nazývá *nábojovým sdružením* nebo *nábojovou konjugací.*

17.1.2 Částice v elektromagnetickém poli

O tom, zda částice má či nemá náboj, lze rozhodnout na základě její interakce s elektromagnetickým polem. Potenciály elektromagnetického pole můžeme zavést podobným způsobem jako v nerelativistickém případě pomocí přechodu

$$-i\hbar\nabla \rightarrow -i\hbar\nabla - q\mathbf{A} \tag{17.20}$$

a

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qU, \tag{17.21}$$

kde $\mathbf{A}$ a U jsou vektorový a skalární potenciál pole a q je náboj částice. Výsledná Kleinova–Gordonova rovnice pro pohyb částice v elektromagnetickém poli má tvar

$$\left[\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 - \frac{1}{c^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qU\right)^2 + m_0^2c^2\right]\psi = 0. \tag{17.22}$$

Jestliže nyní komplexně sdružíme poslední rovnici, dostaneme rovnici, jejíž operátor se liší pouze znaménkem náboje

$$\left[\left(-i\hbar\nabla + q\mathbf{A}\right)^2 - \frac{1}{c^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + qU\right)^2 + m_0^2c^2\right]\psi^* = 0. \tag{17.23}$$

Zde vidíme důvod, proč se výše uvedená operace nazývá nábojovým sdružením: Kromě změny znaménka energie a impulzu se při ní mění rovněž znaménko náboje. Vlnová funkce ψ^* popisuje tzv. *antičástici* k původní částici.

Vzhledem k tomu, že vlnové funkce je jednosložková, částice popisovaná Kleinovou–Gordonovou rovnicí nemá žádné vnitřní stupně volnosti (na rozdíl od řešení Diracovy rovnice diskutované dále). Proto se Kleinova–Gordonova rovnice hodí k popisu částic s nulovým spinem (např. π^+ a π^- mezony). Kleinova–Gordonova rovnice se však, stejně jako Diracova rovnice, nehodí k popisu vzniku nebo zániku částic při jejich interakcích. K tomu se používají metody vyvinuté v kvantové teorii pole.

17.1.3 Přechod k časové Schrödingerově rovnici

Od Kleinovy–Gordonovy rovnice lze pro volnou částici přejít ke Schrödingerově rovnici následujícím způsobem. Nejprve odseparujeme fázi odpovídající klidové energii $E_0 = m_0c^2$

$$\psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r},t)e^{m_0c^2t/(i\hbar)}, \tag{17.24}$$

kde φ je nová vlnová funkce. Pak dostaneme

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \frac{2m_0c^2}{i\hbar}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2}\varphi\right)e^{m_0c^2t/(i\hbar)}. \tag{17.25}$$

Po dosazení tohoto výrazu do Kleinovy–Gordonovy rovnice (17.10) obdržíme rovnici

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{2m_0}{i\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\right)\varphi = 0. \tag{17.26}$$

V nerelativistickém přiblížení budeme předpokládat energii ve tvaru

$$E = E' + m_0c^2, \tag{17.27}$$

kde E' je korekce ke klidové energii m_0c^2, pro niž platí

$$E' \ll m_0c^2. \tag{17.28}$$

Pro volnou částici s vlnovou funkcí

$$\psi = e^{(Et-\mathbf{pr})/(i\hbar)} \tag{17.29}$$

dostáváme

$$\varphi = e^{(E't-\mathbf{pr})/(i\hbar)}. \tag{17.30}$$

Pro časové derivace funkce φ platí

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{E'}{i\hbar}\varphi \tag{17.31}$$

a

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = \left(\frac{E'}{i\hbar}\right)^2\varphi. \tag{17.32}$$

Vzhledem k předpokladu (17.28) pak můžeme člen s druhou derivací podle času v rovnici (17.26) vzhledem ke členu s první derivací zanedbat a po úpravě dostaneme časovou Schrödingerovu rovnici pro vlnovou funkci φ

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\varphi. \tag{17.33}$$

Napíšeme-li energii E' ve tvaru $E' = m_0v^2/2$, z podmínky (17.28) vidíme, že Schrödingerova rovnice platí s přesností do prvního řádu ve $(v/c)^2$.

V případě, že se částice pohybuje ve slabém poli popsaném vektorovým a skalárním potenciálem, bychom opět použili vztahů (17.20) a (17.21) a uvážili malost členu s druhou časovou derivací. V tomto případě musí být navíc splněna podmínka $|qU| \ll m_0c^2$.

17.2 Diracova rovnice

Okolnost, že veličina ρ v rovnici (17.14), kterou bychom chtěli interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti, může nabývat záporných hodnot, vedla Diraca v r. 1928 ke hledání jiné rovnice, pro kterou by hustota pravděpodobnosti byla větší než nula nebo rovna nule. Tato rovnice nese nyní jeho jméno.

Dirac zavedl vícekomponentovou vlnovou funkci, která může popisovat vnitřní stupně volnosti částice

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}. \tag{17.34}$$

O pohybové rovnici učiníme následující předpoklady:

- Vzhledem k tomu, že druhá časová derivace v Kleinově–Gordonově rovnici vede k tomu, že hustota pravděpodobnosti ρ může být záporná, budeme hledat pohybovou rovnici ve tvaru parciální diferenciální rovnice prvního řádu v čase.
- Z důvodů relativistické kovariantnosti budeme předpokládat i první derivace vzhledem k prostorovým proměnným.
- Protože čas a prostor jsou homogenní, omezíme se na rovnice s konstantními koeficienty.
- Vzhledem k požadavku platnosti principu superpozice budeme předpokládat, že pohybová rovnice je lineární.
- Protože neuvažujeme žádné zdroje částic, budeme rovněž předpokládat, že tato rovnice je homogenní (bez pravé strany).

Za těchto předpokladů můžeme pohybovou rovnici napsat v obecném tvaru

$$\boxed{\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \frac{i m_0 c}{\hbar}\beta\psi = 0,} \tag{17.35}$$

kde α_k a β jsou čtyři konstantní matice tvaru $N \times N$. Konečně, budeme požadovat, aby „v kvadrátu“ upřesněném dále tato rovnice dávala Kleinovu–Gordonovu rovnici.

Nejdříve zkusíme odvodit rovnici kontinuity. Podobně jako v případě Schrödingerovy a Kleinovy–Gordonovy rovnice hermitovsky sdružíme rovnici (17.35) a násobíme ji zprava ψ. Po vynásobení rovnice (17.35) zleva hermitovsky sdruženou funkcí ψ^+ a sečtení těchto dvou výsledků dostaneme

$$\frac{1}{c}\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi\right) + \sum_{k=1}^{3}\left(\psi^+\alpha_k\frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \frac{\partial\psi^+}{\partial x_k}\alpha_k^+\psi\right) + \tag{17.36}$$

$$+\frac{i m_0 c}{\hbar}\left(\psi^+\beta\psi - \psi^+\beta^+\psi\right) = 0.$$

Abychom dostali rovnici kontinuity, budeme předpokládat, že všechny čtyři uvažované matice jsou hermitovské

$$\alpha_k^+ = \alpha_k, \quad k = 1, 2, 3, \tag{17.37}$$

$$\beta^+ = \beta. \tag{17.38}$$

Položíme-li nyní

$$\rho = \psi^+\psi = \sum_{l=1}^{N} \psi_l^* \psi_l \tag{17.39}$$

a

$$j_k = c\psi^+ \alpha_k \psi, \quad k = 1, 2, 3, \tag{17.40}$$

dostaneme rovnici kontinuity v obvyklém tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \tag{17.41}$$

Současně z rovnice (17.39) vidíme, že $\rho \geq 0$, a lze proto tuto funkci interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti.

Nyní uvážíme, že v „kvadrátu" máme dostat z Diracovy rovnice (17.35) Kleinovu–Gordonovu rovnici (17.10). Vyjdeme z operátoru

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{i m_0 c}{\hbar}\beta, \tag{17.42}$$

který násobíme zleva hermitovsky sdruženým operátorem

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{i m_0 c}{\hbar}\beta, \tag{17.43}$$

a žádáme, aby tento součin byl roven

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}. \tag{17.44}$$

Po rozepsání všech členů zjistíme (podrobně viz např. [24]), že tato rovnost bude splněna, pokud kvadrát všech čtyř matic je jednotková matice

$$\beta^2 = 1, \tag{17.45}$$

$$\alpha_k^2 = 1, \quad k = 1, 2, 3, \tag{17.46}$$

a pokud tyto matice navzájem antikomutují

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0, \quad k = 1, 2, 3, \tag{17.47}$$

$$\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 2\delta_{kl}, \quad k, l = 1, 2, 3. \tag{17.48}$$

Matice α_k a β nemohou být řádu $N = 1$, neboť čísla spolu komutují. Nemohou být ani řádu $N = 2$, neboť nelze nalézt čtyři antikomutující hermitovské matice řádu dvě. Z rovnice (17.47) vyplývá

$$\det(\alpha_k)\det(\beta) = \det(-\beta)\det(\alpha_k) = (-1)^N \det(\beta)\det(\alpha_k), \tag{17.49}$$

což znamená, že N musí být sudé.

Nejnižším řádem, který mohou mít matice α_k a β, je proto $N = 4$. Rovnice (17.46)–(17.48) spolu s podmínkami hermitovosti (17.37)–(17.38) neurčují matice α_k a β jednoznačně. Jednou z možností jsou matice

$$\boxed{\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}} \tag{17.50}$$

a

$$\boxed{\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},} \tag{17.51}$$

kde 0, resp. 1 jsou nulová, resp. jednotková matice řádu dvě a σ_k jsou *Pauliho matice* (16.88)–(16.90).

17.2.1 Volná částice

Pro volnou částici vyjdeme z Diracovy rovnice (17.35) v hamiltonovském tvaru

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \tag{17.52}$$

kde

$$\hat{H} = c\sum_{k=1}^{3}\alpha_k\hat{p}_k + \beta m_0 c^2 \tag{17.53}$$

a $\hat{p}_k = -i\hbar(\partial/\partial x_k)$ je operátor impulzu.

Protože hamiltonián pro volnou částici nezávisí na čase, budeme předpokládat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\mathrm{e}^{Et/(i\hbar)}, \tag{17.54}$$

kde $\varphi(\mathbf{r})$ je prostorová část vlnové funkce. Protože jde o volnou částici, zkusíme použít vlnovou funkci $\varphi(\mathbf{r})$ ve tvaru

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathbf{pr}/(i\hbar)}. \tag{17.55}$$

Uvedená vlnová funkce je zobecněním vlnové funkce ve tvaru rovinné vlny známé z řešení Schrödingerovy nebo Kleinovy–Gordonovy rovnice.

Nejdříve podrobněji rozepíšeme výraz vystupující v rovnicích (17.52)–(17.53)

$$\alpha_k \hat{p}_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \hat{p}_k \\ \sigma_k \hat{p}_k & 0 \end{pmatrix}. \tag{17.56}$$

Použijeme-li definici matic σ_k a operátorů $\hat{p}_k$, dostaneme

$$\sum_{k=1}^{3} \alpha_k \hat{p}_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \hat{p}_z & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ 0 & 0 & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & -\hat{p}_z \\ \hat{p}_z & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & 0 & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & -\hat{p}_z & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{17.57}$$

Dosadíme-li nyní poslední výraz do Diracovy rovnice (17.52)–(17.53) a použijeme-li předpoklad (17.55), obdržíme soustavu čtyř lineárních rovnic pro koeficienty $u_1, \ldots, u_4$

$$\begin{pmatrix} m_0c^2 - E & 0 & cp_z & c(p_x - ip_y) \\ 0 & m_0c^2 - E & c(p_x + ip_y) & -cp_z \\ cp_z & c(p_x - ip_y) & -m_0c^2 - E & 0 \\ c(p_x + ip_y) & -cp_z & 0 & -m_0c^2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0. \tag{17.58}$$

Podmínkou netriviálního řešení této soustavy je nulovost jejího determinantu. Rozvineme-li determinant soustavy podle prvních dvou řádků, dostaneme výsledek

$$det = \left(E^2 - c^2p^2 - m_0^2c^4\right)^2. \tag{17.59}$$

Možné hodnoty energie volné částice jsou tedy rovny

$$E_\pm = \pm\sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}, \tag{17.60}$$

stejně jako v případě Kleinovy–Gordonovy rovnice. Každá z těchto energií je dvakrát degenerovaná.

Vzhledem k degeneracím energií má matice soustavy (17.58) hodnost dvě. Abychom nalezli vlastní vektory $u_1, \ldots, u_4$ pro určitou energii, nalezneme v soustavě (17.58) submatici řádu dvě, jejíž determinant je různý od nuly pro všechny hodnoty impulzu $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$. Pro energii E_+ je takovou submaticí

$$\begin{pmatrix} -m_0c^2 - E & 0 \\ 0 & -m_0c^2 - E \end{pmatrix}. \tag{17.61}$$

Pak můžeme zvolit u_1 a u_2, u_3 a u_4 vypočítáme. Pro $u_1 = 1$ a $u_2 = 0$ dostaneme řešení ve tvaru

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{m_0c^2+E_+} \\ \frac{c(p_x+ip_y)}{m_0c^2+E_+} \end{pmatrix}, \tag{17.62}$$

kde

$$N \doteq \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{c^2p^2}{(m_0c^2+E_+)^2}}} \tag{17.63}$$

je normovací konstanta. Druhé řešení odpovídající energii E_+ vezmeme ve tvaru

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{m_0c^2+E_+} \\ -\frac{cp_z}{m_0c^2+E_+} \end{pmatrix}. \tag{17.64}$$

Analogickým způsobem určíme i řešení odpovídající záporným energiím E_-

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} -\frac{cp_z}{m_0c^2-E_-} \\ -\frac{c(p_x+ip_y)}{m_0c^2-E_-} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{17.65}$$

a

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} -\frac{c(p_x-ip_y)}{m_0c^2-E_-} \\ \frac{cp_z}{m_0c^2-E_-} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{17.66}$$

Lze ověřit, že tato čtyři řešení jsou ortonormální.

Volná částice má následující integrály pohybu:

Prvním integrálem pohybu je energie $E_\pm$. To znamená, že integrálem pohybu je velikost energie $|E| = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}$ i její znaménko.

Protože hamiltonián (17.53) nezávisí na čase a komutuje s operátorem impulzu $\hat{\mathbf{p}}$, je impulz volné částice dalším integrálem pohybu.

Lze ověřit, že integrálem pohybu je i veličina daná operátorem

$$\frac{\hbar}{2}\sum_{k=1}^{3} \mathbf{\Sigma}_k \hat{p}_k, \tag{17.67}$$

kde matice $\mathbf{\Sigma}_k$ jsou rovny

$$\mathbf{\Sigma}_k = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}. \tag{17.68}$$

Operátor

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Sigma}_k, \quad k = 1, 2, 3, \tag{17.69}$$

interpretujeme jako operátor *spinu*, tj. vnitřního momentu částice. Vlastní hodnoty tohoto operátoru jsou $\pm\hbar/2$. Z rovnice (17.67) vyplývá, že integrálem pohybu je průmět spinu do směru pohybu.

Dvě řešení s kladnou energií E_+ lze fyzikálně interpretovat přímo. Podobně jako v případě Kleinovy–Gordonovy rovnice, řešení se zápornou energií E_- lze vhodnou transformací převést na řešení s kladnou energií [24, 38]; dvě odpovídající řešení popisují antičástici.

Je zřejmé, že třetí a čtvrtá složka řešení (17.62) a (17.64) se chovají přibližně jako v/c a v nerelativistické limitě je lze zanedbat. Proto lze v nerelativistické oblasti použít dvousložkové spinové funkce

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{17.70}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{17.71}$$

a operátor spinu se složkami

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \tag{17.72}$$

jak jsme to učinili v kap. 16.4.

Z výše uvedeného je zřejmé, že Diracova rovnice se hodí k popisu částic se spinem $\hbar/2$, jako jsou elektron či pozitron, proton či antiproton, neutron apod. Prakticky se formalismu založeného na Diracově rovnici používá např. pro elektrony v atomech nebo molekulách, kde elektrony mají relativně malé kinetické energie ve srovnání s klidovou energií, a proto není třeba používat kvantovou teorii pole popisující vznik a zánik částic.

Z řešení Kleinovy–Gordonovy a Diracovy rovnice jsme viděli, že požadavek relativistické formulace kvantové mechaniky má závažné fyzikální důsledky: Předpovídá existenci antičástic a současně ukazuje na existenci vnitřního stupně volnosti částic — spinu.

Kapitola 18

Pravděpodobnostní interpretace kvantové mechaniky*

Probable impossibilities are to be preferred to improbable possibilities.
Aristoteles

18.1 Příklad. Házení kostkou

Nejprve na příkladu shrneme rozdíly mezi klasickým a kvantovým popisem.

Uvažujeme obyčejnou hrací kostku, která při hodu dává možné hodnoty $n = 1, \ldots, 6$. Postupujeme tak, že zavřeme oči, hodíme kostkou a přikryjeme ji neprůhlednou nádobkou.

Klasický popis můžeme shrnout následujícím způsobem:

- Před zvednutím nádobky je stav kostky popsán pravděpodobnostní funkcí $P(n) = 1/6$.
- Možné hodnoty n jsou $1, \ldots, 6$.
- Provedeme-li tento experiment N krát, $N \gg 1$, je četnost výsledku n rovna $N\,P(n)$, kde $P(n) = 1/6$.
- Po zvednutí nádobky dochází k redukci původní funkce $P(n)$ na $P(n) = \delta_{n,i}$, kde i může nabývat hodnot $1, \ldots, 6$.

Z hlediska kvantové mechaniky popíšeme tento experiment takto:

- Před zvednutím nádobky je stav kostky popsán ket-vektorem tvaru $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{6} c_n |n\rangle$, kde[1] $c_n = 1/\sqrt{6}$. Ket-vektory $|\psi\rangle$ a $|n\rangle$ jsou normované, $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$.
- Možné výsledky „měření“, tj. zjištění výsledku hodu, jsou $n = 1, \ldots, 6$.

[1] Kvantová mechanika připouští i obecnější stavy s $c_n = \exp(i\varphi_n)/\sqrt{6}$, kde φ_n jsou reálné fáze.

- Pro N hodů, $N \gg 1$, je četnost výsledku n rovna $N\,|c_n|^2$.
- Po zvednutí nádobky dochází k redukci ket-vektoru $|\psi\rangle$ na jeden z ket-vektorů $|i\rangle$, $i = 1, \ldots, 6$.

Hlavní rozdíly mezi klasickým a kvantovým popisem lze shrnout takto:

- Při zadání všech podmínek experimentu, jako jsou počáteční souřadnice a rychlost kostky, vlastnosti stolu, viskozita vzduchu atd., lze v klasické fyzice v principu předpovědět výsledek hodu. V kvantové mechanice je jedinou možností statistický popis, výsledek hodu nelze přesně předpovědět.
- Jestliže po zvednutí nádobky zjistíme výsledek např. $i = 3$, můžeme v klasické fyzice předpokládat, že kostka byla v tomto stavu i před provedením tohoto měření. V kvantové fyzice je však ket-vektor po měření, tj. $|3\rangle$, různý od ket-vektoru $|\psi\rangle$ před měřením.
- Při současném hodu N kostek, $N \gg 1$, je v klasickém případě $N\,P(i)$ kostek ve stavu i před měřením a po něm. V kvantovém popisu jsou naproti tomu všechny kostky před měřením ve stavu popsaném ket-vektorem $|\psi\rangle$. Po měření je $N\,|c_i|^2$ kostek ve stavu popsaném vektorem $|i\rangle$, $i = 1, \ldots, 6$, přičemž pravděpodobnost nalézt kostku ve stavu s ket-vektorem $|i\rangle$ je $1/6$. Výsledný stav souboru N kostek není tedy popsán jediným ket-vektorem, ale jde o tzv. *smíšený soubor.*

18.2 Deterministický popis klasické mechaniky

Klasická mechanika je založena na následujících předpokladech:

- Měření souřadnic, času a dalších fyzikálních veličin lze provádět s libovolnou přesností.
- Interakci měřicího přístroje s měřeným objektem lze zanedbat nebo přesně popsat.
- Fyzikální veličiny nabývají spojitých hodnot (nejsou kvantovány).
- Počáteční podmínky při řešení pohybových rovnic lze určit s libovolnou přesností.
- Pohybové rovnice poskytují přesný, deterministický popis vývoje v čase.

18.3 Nezbytnost pravděpodobnostního popisu

Výše uvedené předpoklady neplatí z následujících důvodů:

- Přesnost měření fyzikálních veličin reprezentovaných nekomutujícími operátory je omezena relacemi neurčitosti.

- Protože fyzikální objekty mají určitý nenulový rozměr, citlivé oblasti reálných detektorů polohy nejsou ostře definovány a částečně se překrývají, lze při měřeních vzdáleností dosáhnout jen omezené přesnosti. Předpoklad, že můžeme změřit zcela přesnou souřadnici, jde proto za možnosti reálného experimentu. Totéž platí i pro měření času a dalších veličin.

- Počáteční podmínky nelze, stejně jako vlastní měření, určit s libovolnou přesností.

- Interakci měřicího přístroje s měřeným objektem nelze v mikrosvětě zanedbat. Při zahrnutí měřicího přístroje do detailního popisu bychom narazili na problém velikého počtu částic v zpravidla makroskopickém přístroji, které bychom museli detailně popsat, včetně změření odpovídajících počátečních podmínek dalším navazujícím přístrojem, atd. V kvantové mechanice proto necharakterizujeme tuto interakci detailním způsobem a do vlnové funkce nezahrnujeme souřadnice popisující měřicí přístroj na mikroskopické úrovni.

- Výsledky měření zaznamenané měřicím přístrojem musí být po rozumně dlouhou dobu stabilní, tzn. že proces měření musí být v určitém smyslu ireverzibilní.

- Experimenty ukazují, že fyzikální veličiny jsou velmi často kvantovány. Předpoklad spojitosti fyzikálních veličin není obecně odůvodněný.

- Reálné fyzikální detektory nemají účinnost 100 % (nezaregistrují všechny měřené události). Vzhledem k tomuto faktu a dalším výše uvedeným okolnostem proto nelze s absolutní přesností předpovědět konkrétní výsledek jednoho měření. Proto se v kvantové mechanice omezujeme na předpověď relativní četnosti (pravděpodobnosti) jednotlivých možných výsledků měření.

Tyto závěry jsou v plném souladu s výsledky fyzikálních experimentů, které ukazují, že výsledky měření mají v oblasti mikrosvěta velmi často pravděpodobnostní charakter.

Nyní uvedeme ještě několik poznámek.

Prostorové a časové vlastnosti objektů existují, jen pokud jsou garantovány fakty. Klasická fyzika se zcela přesnou polohou těles a přesnými měřeními je z tohoto hlediska „přeúplná“, neboť se snaží o podrobnější popis, než odpovídá fyzikální realitě. Podobně je tomu i s měřením času. Z hlediska fyzikálních měření není prostor ani čas nekonečně diferencovaný a výsledky měření nemají kardinalitu reálných čísel.

Determinismus ve smyslu klasické mechaniky proto neplatí. Přesněji řečeno, lze ho s dobrou přesností použít v oblasti platnosti klasické mechaniky, je však nepoužitelný v mikrosvětě. Snaha zavést „přesnější“ popis ve smyslu klasické mechaniky do mechaniky kvantové, např. pomocí tzv. *skrytých parametrů*, je snaha popisovat více, než je v reálném fyzikálním světě. Z tohoto hlediska není kvantová mechanika neúplná — „neúplná“ je realita vzhledem ke klasickému popisu, který je přeúplný.

Jak jsme uvedli výše, nelze předpovědět s absolutní jistotou, že určitý detektor dá při měření signál, například, že zaregistruje částici v daném místě. Místo toho se v kvantové mechanice implicitně předpokládá, že s pravděpodobností rovnou jedné právě jeden z detektorů dá při měření signál. Kvantová mechanika pak určuje pouze *relativní pravděpodobnost*, že jeden z těchto detektorů signál poskytne. V kvantové mechanice se tudíž určuje *relativní pravděpodobnost dosud nerealizovaných, avšak možných výsledků experimentů.* Kvantová mechanika je v tomto smyslu pravděpodobnostní teorií udávající možné výsledky fyzikálních měření, která je v souladu se speciální teorií relativity (viz Kleinova–Gordonova a Diracova rovnice). Schrödingerova rovnice je nerelativistické přiblížení ke Kleinově–Gordonově rovnici.

Evoluční rovnice kvantové mechaniky, jako je například Schrödingerova rovnice, jsou symetrické v čase. Co udává směr času, je směr od realizovaných počátečních podmínek k dosud nerealizovaným, avšak možným výsledkům experimentů, které jsou popisovány pomocí pravděpodobností.

V některých kvantověmechanických paradoxech se diskutuje působení na dálku s rychlostí, která může být vyšší, než je rychlost světla. Jde však o korelace mezi pravděpodobnostmi, nejde proto o skutečný přenos informace. Podmínka konečné rychlosti přenosu informace (maximálně rychlostí světla) je proto splněna.

Do tohoto pravděpodobnostního popisu zapadá i pojem částic. Složené částice jsou takové, u kterých lze kromě jejich polohy určit i jejich vnitřní strukturu. Elementární částice jsou pak takové, které nemají na dané úrovni popisu žádnou vnitřní strukturu: buď existují, nebo neexistují.

18.4 Význam vlnové funkce

It is only a mathematical expression for evaluating probabilities and depends on the knowledge of whoever is doing the computing (o vlnové funkci).
C. A. Fuchs, A. Peres [41]

Význam vlnové funkce jako amplitudy hustoty pravděpodobnosti je dostatečně ověřen a není zpochybňován.

Otázkou je, zda vlnová funkce reprezentuje fyzikální stav. V této souvislosti už nejsou názory tak jednoznačné a otázkou je, co vlastně pod fyzikálním stavem rozumíme a jakým způsobem ho charakterizujeme.

Pokud se fyzikálním stavem rozumí stav existující nezávisle na měřeních v podobném smyslu jako v klasické mechanice, tak o takovém stavu kvantová mechanika poskytuje pouze neúplné pravděpodobnostní informace.

Protože však informace o fyzikálních systémech lze získávat pouze pomocí měření a protože výsledky měření mají obecně pravděpodobnostní charakter, domníváme se, že fyzikální stav je třeba charakterizovat pomocí obecnějšího pravděpodobnostního popisu, tak jak se to dělá v kvantové mechanice. Vlnová funkce je pouze matematický objekt sloužící k popisu výsledků měření a se samotným fyzikálním stavem ji nelze ztotožnit.

Obecně dochází při měření nejdříve k realizaci počátečního stavu při interakci měřeného systému s okolím, resp. určitou částí měřicího přístroje (příprava stavu). Tento počáteční stav je reprezentován zadáním počáteční podmínky kladené na vlnovou funkci. Při následném časovém vývoji se mění vlnová funkce udávající pravděpodobnosti jednotlivých možných výsledků měření v souladu s odpovídající evoluční rovnicí. Když pak provedeme měření, dochází ke změně pravděpodobnostního popisu na základě nově zjištěných naměřených faktů a mění se proto i vlnová funkce reprezentující fyzikální stav (redukce vlnové funkce).

Kapitola 19

Otázky spojené s interpretací kvantové mechaniky*

19.1 Standardní interpretace

There is no quantum world ... it is wrong to think that the task of physics is to find out how Nature is. Physics concerns what we can say about Nature.
Niels Bohr

V předcházejících kapitolách jsme vyložili základní pojmový a matematický aparát kvantové mechaniky a demonstrovali jsme jeho použití při řešení některých jednoduchých fyzikálních problémů. Tyto problémy představují jen nepatrný zlomek nesčetných aplikací kvantové teorie ve fyzice, chemii a dalších oborech. Je třeba konstatovat, že dosud žádné experimentální výsledky nejsou v rozporu s kvantovou mechanikou. Navzdory tomu existuje celá řada pokusů najít alternativní interpretace kvantové mechaniky s jinými pojmovými a filozofickými dopady, než je tzv. *kodaňská*, *standardní* či *ortodoxní interpretace*, která byla diskutována v předcházejících kapitolách. Jednotlivé interpretace přitom nejsou často přesně vymezeny a různí autoři je vykládají v některých bodech rozdílně. Proto se v této kapitole pokusíme nastínit hlavní obtíže spojené s chápáním kvantové mechaniky a uvedeme nejdůležitější pokusy o jejich řešení. Protože kvantová mechanika je z hlediska chápání fyzikálních procesů v přírodě fundamentální teorií, domníváme se, že každý fyzik by se měl alespoň rámcově seznámit s podstatou problémů a otázek vznikajících při popisu fyzikálního světa s pomocí kvantové mechaniky (podrobněji viz např. [28, 41, 61, 75]).

19.2 Redukce vlnové funkce

When does the nonlinear process of "reduction" (of ψ) take place?
Alan Turing

Vývoj vlnové funkce určují dva postuláty. Jednak je to postulát o časové Schrödingerově rovnici, jednak je to postulát o redukci vlnové funkce při měření. Už samotná existence dvou zcela odlišných postulátů se zdá být zvláštní. V prvním případě jde o časovou evoluci popsanou lineární Schrödingerovou rovnicí, v druhém případě jde o nelineární proces, který vede k výběru právě jednoho ze všech možných výsledků měření. Je zřejmé, že výběr právě jednoho výsledku při jednom měření, jinými slovy neexistence makroskopických superpozicí stavů, nemůže být objasněn pomocí lineární Schrödingerovy rovnice a postulát o redukci vlnové funkce nebo jemu obdobný nelze vynechat.

Pomocí vlnové funkce popisujeme detailně jen měřený objekt, mikroskopický popis měřicího přístroje zde zahrnut není. V principu bychom mohli do vlnové funkce zahrnout i souřadnice charakterizující zpravidla makroskopický měřicí přístroj. Potom bychom však potřebovali další měřicí přístroj k změření stavu celého systému měřený objekt plus měřicí přístroj. Tuto proceduru bychom mohli postupně opakovat s dalšími měřicími přístroji a se stále složitějšími vlnovými funkcemi. Nehledě na nereálnost takového postupu pro makroskopické přístroje je zřejmé, že tento v zásadě nekonečný řetězec se přeruší právě pomocí postulátu o redukci vlnové funkce.

V této souvislosti vzniká také otázka, zda má nějaký smysl zavádět vlnovou funkci celého vesmíru. Při obvyklé interpretaci vlnovou funkci chápeme jako funkci určující pravděpodobnosti výsledků měření na daném objektu pomocí vnějšího měřicího přístroje. Protože však mimo vesmír žádný měřicí přístroj neexistuje, nemá v přesném slova smyslu význam zavádět ani vlnovou funkci celého vesmíru.

Otázkou je, kdy dochází při měření k redukci vlnové funkce. Podle standardní interpretace dochází k redukci vlnové funkce při registraci experimentálního výsledku měřicím přístrojem. Protože však ani měřicí přístroj ani jeho interakci s měřeným objektem nepopisujeme detailně, lze na tuto otázku zodpovědět pouze tak, že na dané úrovni popisu měření dojde k redukci v tom okamžiku, kdy měřicí přístroj zaznamená výsledek měření.

Další otázkou je, zda lze vlnové funkci popisující měřený objekt mezi jednotlivými měřeními připsat nějakou fyzikální realitu „samu o sobě". V obvyklé interpretaci kvantová mechanika popisuje pouze výsledky měření. Pokud provádíme více měření, tak z kvantové mechaniky vyplývají i určité korelace mezi výsledky těchto měření. Vlnová funkce je z tohoto hlediska matematický objekt sloužící k předpovědi výsledků měření, a proto nemá smysl připisovat vlnové funkci mezi měřeními fyzikální realitu.

19.3 Schrödingerova kočka a Wignerův přítel

Unperformed experiments have no results.
Asher Peres

Jeden z tzv. *paradoxů kvantové mechaniky* lze názorně demonstrovat na *myšlenkovém experimentu* (německy *Gedankenexperiment*) navrženém Schrödingerem. Předpokládáme, že máme kočku v uzavřené izolované komoře, kde je umístěna nádobka s jedovatým plynem, který je uvolněn pomocí zařízení, které reaguje na radioaktivní rozpad atomu. Stav kočky „živá" nebo „mrtvá" popíšeme pomocí stavových vektorů $|\psi_+\rangle$ a $|\psi_-\rangle$. Pro případ, že s pravděpodobností 1/2 dojde k usmrcení kočky, můžeme odpovídající stavový vektor zapsat např. ve tvaru $|\psi\rangle = (|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle)/\sqrt{2}$ nebo $|\psi\rangle = (|\psi_+\rangle - |\psi_-\rangle)/\sqrt{2}$. To by ovšem znamenalo, že kočka bude před nahlédnutím do komory ve stavu, kdy není ani živá, ani mrtvá. Když zavrhneme toto z hlediska klasické fyziky absurdní řešení, musíme se opět ptát, kdy dojde k redukci vlnové funkce: Když radioaktivní částice uvolní jedovatý plyn, když kočka zemře nebo v nějakém jiném čase? Podle standardní interpretace k redukci vlnové funkce dojde při „měření", tj. při registraci stavu kočky nějakým měřicím přístrojem v komoře, který pak lze kdykoliv zjistit nahlédnutím do komory. Pokud uvnitř takový přístroj není, „měřením" je otevření komory a zjištění stavu kočky.

Jinou otázkou je, zda lze vůbec makroskopický objekt, jako je kočka, popisovat prostřednictvím vlnové funkce. Schrödingerova rovnice popisuje vývoj systému, který se pohybuje v klasických pevně zadaných vnějších polích, jinak však se svým okolím neinteraguje. Reálná kočka ale s okolím interaguje, vyzařuje a přijímá energii. V takovém případě je třeba místo vlnové funkce použít aparátu kvantové statistické fyziky, kdy dojde k tzv. *dekoherenci*, tj. k vymizení interferenčních jevů známých z kvantové mechaniky, a uvedený paradox vymizí (viz níže).

Podstata jiného paradoxu, nazývaného Wignerův přítel, je následující. Experimentátor v laboratoři provede měření a z jeho hlediska dojde k redukci příslušné vlnové funkce. Jeho přítel, který je mimo izolovanou laboratoř, však výsledek experimentu nezná a zjistí ho teprve po svém vstupu do laboratoře. Pro experimentátora a jeho přítele tedy dojde k redukci vlnové funkce v různých časech. Z hlediska obvyklé interpretace to není překvapující, protože vstup přítele do laboratoře a zjištění výsledku je jiné „měření" než zjištění výsledku experimentátorem v laboratoři.

19.4 Dekoherence

It never speaks of events in the system, but only of outcomes of observations upon system, implying the existence of external equipment.
John Stewart Bell
(o standardní interpretaci kvantové mechaniky)

Cílem teorie *dekoherence* je ukázat, jak může interakce s okolním prostředím způsobit, že se kvantový systém začne chovat klasicky. Jak už jsme uvedli, Schrödingerova rovnice popisuje pouze systémy pohybující se v zadaných klasických vnějších polích, jinak ale neinteragující s okolím. Pro dynamiku systémů interagujících s okolím je třeba používat tzv. *matici hustoty*, resp. *zobecněnou kinetickou rovnici*, která z ní vyplývá (viz např. [6]). V této zobecněné kinetické rovnici pak vystupují tzv. *paměťové funkce*, které v čase vyhasínají a charakterizují ztrátu fázové paměti systému v důsledku jeho interakce s okolím. Zhruba řečeno, po uplynutí určitého času se ztrácí informace o fázi vlnové funkce a s tím související kvantové interference a systém se na delších časových škálách začíná chovat klasicky. Tato dekoherence vysvětluje, proč v makrosvětě obvykle nepozorujeme kvantové superpozice a kvantovou interferenci.

19.5 Indeterminismus

The outcome of a measurement is brought into being by the act of measurement itself, a joint manifestation of the state of the probed system and the probing apparatus.
N. David Mermin

Kvantová mechanika není deterministickou teorií v tom smyslu, že existují fyzikální měření, jejichž výsledky nejsou jednoznačně dány stavem systému před měřením: Jestliže vlnová funkce není vlastní funkcí operátoru popisujícího měřenou veličinu, není výsledek měření jednoznačně určen a můžeme určit pouze pravděpodobnost jednotlivých možných výsledků. Kvantová mechanika je proto pravděpodobnostní teorií.

V tomto ohledu se kvantová mechanika liší od klasické mechaniky, která není pravděpodobnostní teorií a při zadání počátečních podmínek a působících sil umožňuje jednoznačně předpovědět následný časový vývoj systému. Pravděpodobnost v kvantové mechanice nelze eliminovat ani při znalosti všech počátečních podmínek a sil působích na měřený objekt (viz kap. 18).

Aby se vyrovnali s touto skutečností, někteří fyzici navrhli zavést do kvantové mechaniky jakési další souřadnice či tzv. *skryté parametry*, jejichž hodnoty nám nejsou známy, které však určují, jak dopadne výsledek experimentu při jednotlivých měřeních.

19.6 Nelokálnost

If the predictions of quantum mechanics are correct (even for systems made of remote correlated particles) and if physical reality can be described in a local (or separable) way, then quantum mechanics is necessarily incomplete: some "elements of reality" exist in Nature that are ignored by this theory.
Albert Einstein
(v podobě zformulované v [61])

Nejprve připomeneme experimenty Gregora Mendela, který na základě korelací barvy květů rostlin hrachu dospěl k závěru, že tyto korelace svědčí o existenci jakéhosi neznámého parametru, který určuje barvu květů a o kterém dnes víme, že souvisí s genetickou informací. Podobně je možné postupovat i ve fyzice, kde lze na základě korelací výsledků experimentů usoudit na existenci dosud neznámých parametrů, které tyto výsledky ovlivňují. Pokud takové parametry existují, je stávající teorie zřejmě neúplná.

Nyní se zaměříme na další vlastnost kvantové mechaniky, kterou je její *nelokálnost*. Příkladem nelokálního chování je tzv. *EPR myšlenkový experiment* nebo paradox (podle autorů Einsteina, Podolského a Rosena [29]), ve kterém jsou vlastnosti částic vzdálených v prostoru jistým způsobem korelovány. Představme si, že měříme pár stejných částic se spinem $\pm\hbar/2$, jejichž celkový spin je roven nule a které se pohybují opačnými směry podél osy x (obdobný experiment lze provést i s fotony). Když jsou částice od sebe dostatečně daleko, aby spolu nikterak neinteragovaly, změříme z-ovou komponentu spinu jedné částice a potom i z-ovou komponentu spinu druhé částice. Protože celkový spin je roven nule, není nutné měření na druhé částici vůbec provádět, protože ze zákona zachování víme, že při tomto měření musíme naměřit opačnou hodnotu než na částici první. Po provedení měření na první částici se dostane druhá částice do vlastního stavu odpovídajícího operátoru z-ové komponenty spinu druhé částice. Tento experiment lze provést nejen při měření podél osy z, ale i při libovolném pootočení obou měřicích přístrojů podél osy x. Výsledek měření na druhé částici je tedy ovlivněn měřením na první částici, přestože tyto částice jsou od sebe vzdáleny a neinteragují spolu[1]. Podle kvantové mechaniky nejsou částice v takových provázaných neboli *entanglovaných* stavech na sobě nezávislé. Pokud výsledky vzdálených měření závisí vždy jen na podmínkách měření v daném místě (předpoklad o lokálnosti), je výsledkem diskuse v článku [29] důkaz, že jestliže jsou výsledky kvantové mechaniky správné a jestliže je fyzikální realita lokální (někdy se užívá slovo separabilní), pak je kvantová mechanika neúplná teorie.

Později byly pro korelaci jednotlivých párů výsledků v experimentech podobných výše popsanému a za předpokladu lokálního popisu odvozeny obecné *Bellovy nerovnosti* [9], které se odlišují od korelačních funkcí, ke kterým vede kvantová mechanika. Pomocí těchto korelačních funkcí lze rozhodnout, zda lze přírodu popisovat pomocí lokálního popisu (jako v klasické mechanice), nebo ne (jako v kvantové mechanice). Experimentální výsledky jsou však v plném souhlasu s kvantovou mechanikou a všechny dosavadní pokusy zavést lokální teorie byly vyvráceny.

Vše tedy svědčí pro to, že popis vícečásticových systémů je třeba provádět tak, jak se to dělá v kvantové mechanice, tj. pomocí mnohačásticové vlnové funkce závisející na souřadnicích všech částic a odpovídajících počátečních podmínkách. Výsledky experimentů pak závisejí na stavu všech částic a na nich provedených měřeních, přestože měříme jen na jedné částici (nelokálnost). Tento popis je třeba zachovat, i když se částice během experimentu vzdálí na velkou vzdálenost, jako např. v EPR experimentu. Takový popis je v souladu s obecnou teorií pravděpodobnosti, kde pravděpodobnosti obecně závisí na všech proměnných, které na dané úrovni popisu používáme.

19.7 Některé neortodoxní formulace kvantové mechaniky

I think it is safe to say that no one understands quantum mechanics.
Richard Feynman

[1] Poznamenejme, že zde nejde o šíření informace nadsvětelnou rychlostí. Druhý experimentátor bude s jistotou znát výsledek svého dosud neprovedeného měření teprve poté, co mu první experimentátor sdělí (např. telefonem) výsledek svého měření.

Podstatu *Bohmovy teorie* lze velmi stručně popsat tak, že popisuje pohyb částic po klasických trajektoriích pomocí klasických rovnic, ve kterých však vystupuje jistý „kvantový potenciál" dosti neobvyklých vlastností, který se určuje prostřednictvím rovnic kvantové mechaniky. Někteří autoři se domnívají, že tato teorie je z hlediska interpretace jedna z nejúspěšnějších. Problémem této teorie je však to, že je jednak nerelativistická, jednak zavádí trajektorie, které se v experimentech v kvantové oblasti neobjevují, a proto se do teorie zavádí kvantový potenciál.

Další možnou modifikací kvantové mechaniky je doplnění Schrödingerovy rovnice o *nelineární*, případně *stochastické* členy. Tyto dodatečné členy lze zvolit tak, že jejich vliv je zanedbatelný pro mikroskopické objekty, hrají však významnou roli u makroskopických stavů, kde lze jejich prostřednictvím popsat redukci vlnové funkce. V takovém případě není třeba zavádět redukci vlnové funkce jako nezávislý postulát.

Základním prvkem další interpretace jsou tzv. *historie*, tj. možné posloupnosti událostí v uvažovaném systému. Cílem tohoto přístupu je nalézt historie pro uzavřený systém, které vykazují zanedbatelnou interferenci a lze jim proto přiřadit obvyklé pravděpodobnosti, se kterými se pak pracuje podle běžné logiky. Tak lze potom objasnit vznik přibližně klasického chování makroskopických objektů. Důležitým pojmem jsou přitom tzv. *konzistentní historie*, na které pak navazuje tzv. *logická interpretace* kvantové teorie. Výhodou této interpretace je to, že poskytuje popis vývoje uzavřených systémů bez nutnosti zahrnovat měřicí procesy.

Jedno z možných řešení problému redukce vlnové funkce, které navrhl Wigner, spočívá v tom, že k redukci vlnové funkce dojde teprve, když odpovídající informace dorazí do mozku pozorovatele (tzv. *subjektivní interpretace*). Taková teorie má samozřejmě problém s předpokladem, že lidský mozek, ve kterém se odehrává redukce, má výlučný charakter. Fyzikální teorii by mělo být možné zformulovat objektivními přístupy, nezávislými na naší existenci. Je rovněž obtížné si představit, že různé osoby dospějí ke stejným závěrům týkajícím se fyzikálních experimentů, když nepřipustíme existenci objektivního fyzikálního světa.

Podle další dosti exotické interpretace je vývoj ve vesmíru ireverzibilní, při měření se však realizují všechny možné výsledky přicházející v úvahu a vesmír se při každém měření štěpí na mnoho různých neinteragujících světů. Když pozorujeme náhodné výsledky kvantověmechanického experimentu, je to třeba interpretovat podle této tzv. *mnohasvětové interpretace* tak, že výsledky nejsou pravděpodobnostní, my však provádíme pozorování jen v jednom ze vznikajících světů. Toto štěpení se odehrává při každé kvantověmechanické interakci. V této interpretaci dochází k nahrazení menšího problému problémem větším a navíc ji nelze dokázat, protože jednotlivé stále vznikající světy podle této interpretace neinteragují.

Přehlednou diskusi různých interpretací kvantové mechaniky lze nalézt v [61].

Kapitola 20

Zajímavé aplikace kvantové mechaniky*

Our best theories are not only truer than common sense, they make far more sense than common sense does.
David Deutsch

20.1 Kvantová kryptografie

Kvantová kryptografie je poměrně novým oborem, který souvisí s korelacemi v EPR experimentu (kap. 19.6). Hlavní myšlenkou je vytvořit zcela bezpečný systém pro přenos kryptografického klíče, tj. posloupnosti čísel 0 a 1, která je využívána k zakódování a následně k dekódování zasílané zprávy. V prvním kroku si dva vzdálení účastníci, obvykle nazývaní Alice a Bob, vymění klíč, který pak využívají k zakódování, resp. dekódování zpráv, které si vyměňují. Jestliže je klíč zcela náhodný, nemůže nikdo cizí zprávy dekódovat, i když jsou zasílány veřejně. Jestliže však během výměny klíčů někdo cizí, obvykle nazývaný Eva, zachytí klíč, může zprávy dekódovat. Výměna klíčů je proto v kryptografii kritickým krokem, který zásadně ovlivňuje zabezpečení výměny zpráv. Je zřejmé, že obvyklá zabezpečení klíče jsou napadnutelná, ať už technickými prostředky nebo selháním lidského faktoru.

Naproti tomu kvantové sdílení klíče spočívá na základních zákonech kvantové mechaniky, které nelze překonat. Hlavní myšlenkou je, že účastníci Alice a Bob sdílejí společný klíč prostřednictvím kvantových měření na částicích, které jsou v korelovaném stavu. Nyní si uvědomíme, co se stane, jestli se Eva pokusí zachytit např. vyměňované fotony pohybující se optickým vláknem. Jestliže Eva chce, aby její vniknutí do systému zůstalo nepozorováno, nebude určitě pouze měřit (zachycovat) fotony, protože to by změnilo korelační vlastnosti pozorované Alicí a Bobem, ale musí fotony také vysílat. Určitou možností by proto mohlo být „klonování“ fotonů, tj. vytvoření několika identických kopií zachyceného fotonu. Několik z nich by mohlo být využito k změření vlastností zachyceného fotonu a poslední z nich by mohl být opět vyslán do optického vlákna, aniž by kdokoliv něco zaznamenal. Ukazuje se však, že „kvantové klonování“ je principiálně nemožné, neboť neexistuje způsob, jak několik částic převést do stejného neznámého stavu, jako má daná částice.

Pokud se tedy Eva pokusí získat nějakou informaci, tak to automaticky změní vlastnosti fotonů na obou koncích optického vlákna a Alice a Bob, když porovnají zachycená data a jejich korelaci, to zjistí. Alice a Bob nemohou zabránit Evě v zachycení fotonu, vědí však, která data mohou být použita jako dokonale bezpečný klíč.

20.2 Teleportace

Pojem kvantové teleportace, podobně jako kvantové počítání, souvisí s nelokálností kvantové mechaniky. Hlavní idea spočívá ve využití korelací mezi dvěma částicemi v entanglovaném stavu k dálkovému přenosu libovolného spinového stavu třetí částice. Probíhá to následujícím způsobem: Nejprve se dvě částice v entanglovaném stavu pohybují do vzdálených oblastí prostoru. První z nich dorazí do laboratoře Alice, druhá dorazí do laboratoře Boba. Potom Alice dostane třetí částici ve stavu $|\varphi\rangle$. Cílem je převést částici Boba do přesně stejného stavu $|\varphi\rangle$, jako má třetí částice, ať už byl jakýkoliv (třetí částice se přitom samozřejmě nepřenáší). Pak říkáme, že stav $|\varphi\rangle$ byl teleportován.

Poněkud přesněji se teleportace provádí následujícím způsobem. Alice odolá pokušení změřit stav $|\varphi\rangle$ třetí částice, který má být teleportován. Místo toho Alice provede určité kombinované měření, zahrnující třetí částici a její částici z entanglovaného páru. Přitom se mezi oběma částicemi nesmí dělat žádný rozdíl, neboť v opačném případě přestane teleportace fungovat. Potom Alice nějakým klasickým způsobem (např. telefonem) sdělí Bobovi výsledek měření. Nakonec Bob provede se svou částicí určitou unitární transformaci, která závisí na klasické informaci, kterou obdržel. Tato transformace převede jeho částici do přesně stejného stavu $|\varphi\rangle$, jako měla třetí částice a teleportace stavu je provedena. Celý scénář je založen na přenosu jednak kvantové informace prostřednictvím entanglovaného stavu, jednak klasické informace (telefonem). Rychlost teleportace je proto omezena rychlostí světla.

Viděno z jiného pohledu, Bob, ještě než získá od Alice klasickou informaci, už má k dispozici neúplnou kvantovou informaci přenášenou pomocí entanglovaných stavů. Klasická informace je pak se zpožděním využita k úplné rekonstrukci stavu.

Ve srovnání s klasickým přenosem informace se při kvantové teleportaci provádí mnohem víc. Za prvé, stav, který se přenáší, nemusí být vybrán Alicí a může být zcela libovolný. Za druhé, přenos klasické binární informace, kterou zasílá Alice Bobovi, nestačí k rekonstrukci kvantového stavu, neboť kvantový stav závisí na spojitých parametrech, zatímco výsledky experimentu odpovídají pouze diskrétní informaci. Teleportace by v klasické teorii informace odpovídala zaslání nekonečného počtu bitů (zaslání úplné informace s naprostou přesností by vyžadovalo nekonečný čas).

Je zřejmé, že princip teleportace je zcela odlišný od klasických způsobů komunikace, které obvykle používáme.

20.3 Kvantové počítače

Základní myšlenka kvantových počítačů je využít při numerických výpočtech nikoliv klasické bity, které mohou být jen ve dvou stavech 0 a 1, ale „kvantové bity“ nebo též „q bity“, tj. kvantové systémy, které mohou být nejen ve stavech $|0\rangle$ či $|1\rangle$, ale i v jejich libovolné lineární superpozici. Je zřejmé, že kontinuum stavů je mnohem bohatší než dva diskrétní stavy. Pro klasické bity dimenze odpovídajícího prostoru roste lineárně s počtem bitů (např. tři klasické bity představují vektor o třech složkách, z nichž každá je rovna 0 nebo 1). Pro kvantové bity dimenze prostoru roste exponenciálně, což je vlastnost tenzorového součinu prostorů (např. pro tři kvantové bity je dimenze prostoru rovna $2^3 = 8$). Pokud bychom pracovali s velkým počtem kvantových bitů, dostali bychom prostor obrovské dimenze, v němž by mohlo probíhat mnoho druhů interferenčních efektů. Kdybychom dosáhli toho, že všechny větve stavového vektoru budou pracovat paralelně a budou provádět nezávislé výpočty, mohli bychom dosáhnout enormního urychlení výpočtů. Některá omezení, která platí pro klasické algoritmy, pro kvantové počítače neplatí.

Mezi klasickými a kvantovými bity je mnoho rozdílů. Zatímco klasické bity mají dva referenční stavy, které jsou jednou provždy dané, kvantové bity mohou používat libovolnou ortogonální bázi odpovídajícího prostoru. Klasické bity mohou být libovolně často kopírovány, zatímco pro kvantové bity to není možné. Na druhé straně, klasické bity lze přenášet maximálně rychlostí světla, zatímco využití entanglementu a teleportace pro kvantové bity toto omezení odstraňuje. Musíme si však uvědomit, že je větší rozdílnost mezi kvantovými bity a informací než v případě klasických bitů. Abychom přenesli a obdrželi užitečnou informaci pomocí kvantových bitů, musíme specifikovat jaký druh měření s nimi provádíme (to souvisí s libovolností báze, kterou jsme zmínili výše). Ve skutečnosti, Alice a Bob, jako všechny lidské bytosti, mohou komunikovat pouze klasickým způsobem. Informace je v principu klasická, lze ji však přenášet pomocí kvantových bitů.

Velkým nepřítelem kvantových počítačů je dekoherence, která se snaží zrušit užitečné kvantové superpozice, což vede k redukci úplné kvantové informace na klasickou. To je důvod, proč jsou dosavadní experimenty s kvantovými počítači omezeny na malý počet bitů. Přestože faktorizace velkých čísel pomocí kvantového počítání, která už byla realizována, je důležitá zejména v kryptografii, bylo by žádoucí využít kvantové počítání i pro jiné úlohy.

V každém případě jsou kvantové počítače, kvantová kryptografie i teleportace nové a zajímavé obory, ve kterých vědecký výzkum právě probíhá.

Podrobnější diskuzi k výše uvedeným aplikacím kvantové mechaniky lze nalézt např. v [28, 61].

Kapitola 21

Řešené příklady

21.1 Úvodní příklady

1. Vypočítejte de Broglieovu vlnovou délku

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

a) elektronu s kinetickou energií 1 eV,
b) protonu s kinetickou energií 1 eV,
c) molekuly UF_6 s hmotností $m \approx 5,86 \times 10^{-10}$ kg a kinetickou energií 1 eV,
d) tělesa s hmotností 1 kg a rychlostí 100 km/h.
Řešení
Kinetická energie je v nerelativistické oblasti rovna

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2},$$

odkud dostáváme

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}.$$

Po dosazení dostaneme
a) $\lambda \approx 1,23 \times 10^{-9}$ m,
b) $\lambda \approx 2,86 \times 10^{-11}$ m,
c) $\lambda \approx 1,53 \times 10^{-12}$ m,
d) $\lambda = h/(mv) \approx 2,39 \times 10^{-35}$ m.
Vidíme, že pro makroskopická tělesa je de Broglieova vlnová délka zanedbatelná vůči jejich vlastním rozměrům.

2. Odvoďte výraz pro de Broglieovu vlnovou délku nerelativistického elektronu urychleného potenciálním rozdílem U.
Řešení
Ze zákona zachování energie

$$eU = \frac{p^2}{2m_e}$$

dostaneme

$$p = \sqrt{2m_e eU}$$

a

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}.$$

3. Pomocí de Broglieova vztahu

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

odhadněte velikost difrakce tenisového míčku o hmotnosti $m = 0,1$ kg a rychlosti $v = 0,5$ m s^{-1} při průletu oknem o šířce $x = 1$ m a výšce $y = 1,5$ m.

Řešení

De Broglieova vlnová délka je rovna

$$\lambda = \frac{h}{mv} \approx 1,3 \times 10^{-32}\,\mathrm{m}.$$

Difrakční úhly ve směrech x a y lze odhadnout z poměru de Broglieovy vlnové délky a rozměrů x a y

$$\theta_x \approx \frac{\lambda}{x} \approx 1,3 \times 10^{-32}\,\mathrm{rad},$$

$$\theta_y \approx \frac{\lambda}{y} \approx 8,7 \times 10^{-33}\,\mathrm{rad}.$$

Difrakce je tedy zanedbatelná.

4. Uvažujte difrakci termalizovaného svazku atomů He^4 na krystalu s jednoduchou kubickou mřížkou o mřížkové konstantě $d = 0,2$ nm. Pomocí výrazu pro de Broglieovu vlnovou délku odhadněte, při jaké teplotě bude difrakce pozorovatelná.

Řešení

Kinetická energie atomů je rovna

$$E = \frac{3}{2}kT,$$

kde $k \approx 1,38 \times 10^{-23}$ J K^{-1} je Boltzmannova konstanta. Uvážíme-li vztah

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2},$$

dostaneme

$$T = \frac{h^2}{3mk\lambda^2}.$$

Aby difrakce byla pozorovatelná, musí platit $\lambda \approx d$. Odtud dostáváme $T \approx$ 39 K.

5. Určete fázovou a grupovou rychlost relativistické částice.
Řešení
Energie relativistické částice je rovna

$$E = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}.$$

Volná částice je popsána rovinnou vlnou s frekvencí

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

a vlnovým vektorem o velikosti

$$k = \frac{p}{\hbar}.$$

Pro fázovou a grupovou rychlost dostaneme

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \sqrt{c^2 + \frac{m_0^2c^4}{p^2}}$$

a

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{pc^2}{\sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}}.$$

6. S použitím vztahů $E = \hbar\omega$ a $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ určete změnu vlnové délky Röntgenova záření při jeho rozptylu na volných elektronech (Comptonův jev).
Řešení
Předpokládáme, že foton se při rozptylu odchýlí od přímého směru o úhel rozptylu θ. Dále předpokládáme, že před interakcí fotonu s elektronem má elektron klidovou hmotnost m_e a po interakci hmotnost

$$m = \frac{m_e}{\sqrt{1 - (v/c)^2}},$$

kde v je rychlost elektronu. Impulz fotonu je před interakcí $\hbar\mathbf{k}$ a po interakci $\hbar\mathbf{k}'$. Odpovídající frekvence jsou rovny $\omega = ck$ a $\omega' = ck'$. Zákony zachování energie a impulzu mají tvar

$$\hbar\omega - \hbar\omega' = c^2(m - m_e),$$

$$\hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{k}' = m\mathbf{v}.$$

Úpravou těchto rovnic dostaneme

$$\omega - \omega' = \frac{c^2}{\hbar}(m - m_e),$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \frac{m\mathbf{v}}{\hbar}.$$

Výpočtem kvadrátu obou rovnic a odečtením první výsledné rovnice od druhé obdržíme vztah

$$\omega\,\omega'(1-\cos\theta) = \frac{m_e c}{\hbar}(c\,\omega - c\,\omega').$$

Vydělením této rovnice $\omega\,\omega'$ a zavedením $\lambda = 2\pi c/\omega$ a $\lambda' = 2\pi c/\omega'$ dostaneme zvětšení vlnové délky při rozptylu

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_0 \sin^2\frac{\theta}{2},$$

kde

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = \frac{h}{m_e c}$$

je Comptonova vlnová délka elektronu.

Pro viditelné světlo s vlnovou délkou $\lambda \approx 10^{-7}$ m dostáváme

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{\lambda_0}{\lambda} \approx 10^{-5}.$$

Pro Röntgenovy paprsky s $\lambda \approx 10^{-11}$–10^{-10} m obdržíme

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{\lambda_0}{\lambda} \approx 10^{-2} - 10^{-1}.$$

Na rozdíl od viditelného světla je Comptonův rozptyl pro Röntgenovo záření dobře pozorovatelný.

7. Určete Comptonovu vlnovou délku elektronu.
Řešení
Dostáváme

$$\lambda_0 = \frac{h}{m_e c} \approx 2,43 \times 10^{-12}\,\mathrm{m}.$$

8. Objasněte interferenci světla v Youngově dvojštěrbinovém experimentu.
Řešení
Předpokládáme, že vzdálenost štěrbin je h, vzdálenost od štěrbin ke stínítku je $r \gg h$ a difrakční úhel θ určující odklon paprsku od kolmé roviny procházející mezi štěrbinami je velmi malý. Při dopadu rovinné vlny s vlnovým vektorem $k = 2\pi/\lambda$ na štěrbiny vznikají dvě vlny, které se v místě dopadu na stínítko liší o fázi $\Delta\phi = k\Delta s$, kde $\Delta s = h\sin\theta$ je rozdíl drah štěrbina — bod dopadu

$$\psi_1 = |\psi_1| e^{i(\phi + kr - \omega t)},$$

$$\psi_2 = |\psi_2| e^{i[\phi + k(r+\Delta s) - \omega t]}.$$

Součtová vlna a odpovídající intenzita jsou rovny

$$\psi = e^{i(\phi + kr - \omega t)}\left(|\psi_1| + |\psi_2| e^{ikh\sin\theta}\right),$$

$$I(\theta) = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2|\cos(kh\sin\theta).$$

Intenzita obrazu na stínítku tedy v závislosti na úhlu θ osciluje. Ve speciálním případě $|\psi_1| = |\psi_2|$ dostaneme

$$I(\theta) = 4|\psi_1|^2 \cos^2 \frac{kh \sin\theta}{2}.$$

Pro jedinou štěrbinu, tj. pro $I_1 = |\psi_1|^2$ nebo $I_2 = |\psi_2|^2$, oscilace v závislosti na úhlu θ nedostaneme.

21.2 Bohrův model

1. Volná částice o hmotnosti m se pohybuje v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě se stěnami v bodech $x = 0$ a $x = a$. Určete kvantované energie částice pomocí Bohrovy kvantovací podmínky.
Řešení
Velikost impulzu p částice zůstává během pohybu konstantní, pouze se při odrazu od stěny mění znaménko impulzu. Bohrova kvantovací podmínka má tudíž tvar
$$\oint p\,\mathrm{d}x = 2p \int_0^a \mathrm{d}x = nh.$$
Odtud dostáváme
$$p_n = \frac{nh}{2a}$$
a
$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8ma^2},$$
kde $n = 1, 2, 3, \ldots$.

2. Částice o hmotnosti m v gravitačním poli Země dopadá svisle na vodorovnou desku, od které se pružně odráží a dopadá zase zpět. Tření v atmosféře se neuvažuje. Pomocí Bohrovy kvantovací podmínky určete kvantované hodnoty maximální výšky H_n pohybu nad deskou a příslušné energie E_n.
Řešení
Celková energie $E = mgH$ se zachovává a platí
$$E = \frac{p^2}{2m} + mgz,$$
kde z je svislá vzdálenost od desky a p je impulz částice. Odtud vyplývá
$$p = \pm\sqrt{2m(E - mgz)}.$$
Z Bohrovy kvantovací podmínky
$$\oint p\,\mathrm{d}z = 2\int_0^H \sqrt{2m(E - mgz)}\,\mathrm{d}z = nh$$

dostaneme

$$H_n = \frac{1}{g}\left(\frac{3ngh}{4\sqrt{2}m}\right)^{2/3}$$

a

$$E_n = mgH_n = m\left(\frac{3ngh}{4\sqrt{2}m}\right)^{2/3},$$

kde $n = 1, 2, 3, \ldots$.

3. S použitím Bohrovy kvantovací podmínky určete kvantované amplitudy kmitů a energie lineárního harmonického oscilátoru.
Řešení
Použijeme integrál pohybu — energii, která je rovna

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 A^2}{2},$$

kde $\omega = \sqrt{k/m}$ je frekvence a A amplituda kmitů. Z tohoto vztahu vyplývá

$$p = \sqrt{m^2\omega^2(A^2 - x^2)}.$$

Zavedeme-li proměnnou φ vztahem $x = A\sin\varphi$, dostaneme z Bohrovy kvantovací podmínky

$$\oint p\,\mathrm{d}x = mA\omega \oint \sqrt{1 - x^2/A^2}\,\mathrm{d}x = mA^2\omega \int_0^{2\pi} \cos^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi = mA^2\omega\pi = nh.$$

Kvantování amplitudy a energie je tudíž dáno vztahy

$$A_n^2 = \frac{nh}{m\pi\omega}$$

a

$$E_n = \frac{mA_n^2\omega^2}{2} = n\hbar\omega,$$

kde $n = 1, 2, 3, \ldots$.

4. Částice se pod vlivem centrální síly pohybuje ve vzdálenosti r od počátku souřadnic (tuhý rovinný rotátor). Pomocí Bohrovy kvantovací podmínky určete možné energie částice.
Řešení
Poloha částice je dána zobecněnou souřadnicí φ (úhel v polárních souřadnicích). Příslušný zobecněný impulz

$$p_\varphi = \frac{1}{2}\frac{\partial(mr^2\dot{\varphi}^2)}{\partial\dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}$$

je konstantní. Bohrova kvantovací podmínka dává

$$\oint p_\varphi\,\mathrm{d}\varphi = 2\pi p_\varphi = nh, \quad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Energie rotátoru je rovna

$$E_n = \frac{p_\varphi^2}{2J} = \frac{n^2\hbar^2}{2J},$$

kde $J = mr^2$ je moment setrvačnosti částice.

5. Elektron se nachází v centrálním poli

$$V = -\frac{A}{r^s}, \quad A > 0.$$

Určete, pro jaká s mohou existovat stabilní stavy elektronu.
Řešení
Efektivní potenciální energie je rovna

$$V_{ef} = \frac{p_\varphi^2}{2m_e r^2} - \frac{A}{r^s}.$$

Aby existovalo minimum V_{ef}, musí být $s < 2$.

6. S použitím Bohrovy kvantovací podmínky určete kvantované energie elektronu v atomu vodíku. Pro jednoduchost předpokládejte, že elektron se pohybuje okolo jádra po kružnici. Výpočet proveďte v polárních souřadnicích.
Řešení
Vyjdeme z Lagrangiánu pro pohyb elektronu po kružnici

$$L = T - V = \frac{1}{2}m_e(r\dot{\varphi})^2 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r},$$

kde T a V jsou kinetická a potenciální energie elektronu. V centrálním poli je zobecněný impulz

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}} = m_e r^2\dot{\varphi}$$

konstantní. Dosadíme-li tento výraz do Bohrovy kvantovací podmínky, dostaneme při integraci přes úhel 2π

$$\oint p_\varphi \,\mathrm{d}q = \oint m_e r^2\dot{\varphi}\,\mathrm{d}\varphi = m_e r^2\dot{\varphi}\,2\pi = nh.$$

Odtud vyplývá

$$\dot{\varphi} = \frac{n\hbar}{m_e r^2}.$$

Dále použijeme rovnosti odstředivé a coulombovské síly

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{m_e r^2\dot{\varphi}^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}.$$

Dosadíme-li do tohoto vztahu výraz pro $\dot{\varphi}$, dostaneme kvantované hodnoty poloměru r_n

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{m_e e^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Poloměr základního stavu atomu vodíku ($n = 1$) je roven Bohrově poloměru $a_B = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_e e^2) \approx 0{,}0529177$ nm.

Pro energii postupně dostáváme

$$E = T + V = \frac{1}{2}m_e r^2\dot{\varphi}^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} = \frac{1}{2}m_e r^2 \frac{n^2\hbar^2}{m_e^2 r^4} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_e e^2}{4\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2} =$$

$$= \frac{1}{2}m_e\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2 - m_e\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2$$

neboli

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Velikost energie základního stavu atomu vodíku $m_e e^4/(32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2) = 1$ Ry $\approx$ 13,605 eV se nazývá jeden Rydberg.

7. Pomocí Bohrovy teorie určete energie vodíku podobného atomu za předpokladu, že elektron se pohybuje po eliptické dráze.

Řešení

Vyjdeme z obecných kvantovacích podmínek

$$\oint p_i \,\mathrm{d}q_i = n_i h$$

a z výrazu pro celkovou energii

$$E = \frac{1}{2}m_e\dot{r}^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{p_\varphi^2}{2m_e r^2}.$$

Ze vztahů platných pro uvažované centrální pole

$$p_\varphi = m_e r^2\dot{\varphi} = \mathrm{konst}$$

a

$$p_r = m_e\dot{r} = \sqrt{2m_e E + \frac{2m_e Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{p_\varphi^2}{r^2}}$$

dostaneme

$$I_\varphi = \int_0^{2\pi} p_\varphi \,\mathrm{d}\varphi = 2\pi p_\varphi$$

a

$$I_r = 2\int_{r_{min}}^{r_{max}} p_r \,\mathrm{d}r.$$

Výraz pro p_r zapíšeme ve tvaru

$$p_r = \sqrt{-A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}},$$

kde

$$A = -2m_e E > 0,$$

$$B = \frac{m_e Z e^2}{4\pi\varepsilon_0} > 0$$

a

$$C = p_\varphi^2 \geq 0.$$

Z podmínky extrému $\dot{r} = p_r/m_e = 0$ určíme

$$r_{min} = \frac{B - \sqrt{B^2 - AC}}{A}$$

a

$$r_{max} = \frac{B + \sqrt{B^2 - AC}}{A},$$

kde předpokládáme

$$B^2 \geq AC.$$

Dále použijeme výsledek

$$\int p_r \,\mathrm{d}r = \sqrt{-Ar^2 + 2Br - C} + \frac{B}{\sqrt{A}} \arcsin \frac{rA - B}{\sqrt{B^2 - AC}} + $$
$$+ \sqrt{C} \arctan \frac{C - Br}{\sqrt{C(-Ar^2 + 2Br - C)}}.$$

Po dosazení r_{min} a r_{max} a provedení limitních přechodů v krajních bodech integrálu dostaneme

$$I_r = 2\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{-A + \frac{2B}{r} - \frac{C}{r^2}}\,\mathrm{d}r = 2\pi\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \sqrt{C}\right) =$$
$$= 2\pi\left(-p_\varphi + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m_e}{-2E}}\right).$$

Z této rovnice odvodíme výraz pro energii

$$E = -\frac{4\pi^2 m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 (I_r + I_\varphi)^2}.$$

Zaměníme-li adiabatické invarianty I_r a I_φ veličinami $n_r h$ a $n_\varphi h$, dostaneme

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}\frac{1}{n^2},$$

kde $n = n_r + n_\varphi$, $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ a $n_\varphi = 1, 2, 3, \ldots$. Energie jsou stejné jako v případě kruhových drah.

Stavy se stejnou hodnotou n a různými hodnotami n_φ se liší excentricitou

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{n_\varphi^2}{n^2}}.$$

Pro $n_\varphi = n$ dostáváme kruhové trajektorie.

8. Pro pohyb elektronu po eliptické dráze ve vodíku podobném atomu ukažte, že délka dráhy je celistvým násobkem de Broglieho vlnové délky.
Řešení
Výběr drah se uskutečňuje pomocí podmínek

$$\oint p_r \, \mathrm{d}r = n_r h$$

a

$$\oint p_\varphi \, \mathrm{d}\varphi = n_\varphi h,$$

kde

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}$$

a

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}.$$

Vzhledem ke vztahu

$$2T = \sum_k p_k \dot{q}_k$$

dostáváme

$$2 \int_0^\tau T \, \mathrm{d}t = \sum_k \int_0^\tau p_k \dot{q}_k \, \mathrm{d}t = \sum_k \oint p_k \, \mathrm{d}q_k = nh,$$

kde

$$n = n_r + n_\varphi$$

a

$$2T \, \mathrm{d}t = m_\mathrm{e} v \, \mathrm{d}s = \frac{h}{\lambda} \, \mathrm{d}s.$$

Proto platí

$$\oint \frac{\mathrm{d}s}{\lambda} = n.$$

9. Elektron s nábojem $-e$ a pozitron s nábojem e vytváří vázaný stav analogický atomu vodíku, tzv. pozitronium. Určete jeho ionizační potenciál I a vlnovou délku λ Lymanovy α čáry (přechod z $n = 1$ do $n = 2$).
Řešení
Místo hmotnosti m_e elektronu v příkladu 6 dosadíme redukovanou hmotnost $m_\mathrm{e}/2$ (elektron a pozitron mají stejnou hmotnost). Pak dostaneme $I = -E_1 \approx 10{,}9 \times 10^{-18}$ J =6,80 eV a $\lambda \approx 0{,}243$ nm.

10. Předpokládejme, že v atomu vodíku místo elektrostatické síly

$$F = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e_1 e_2}{r^2}$$

působí gravitační síla

$$F = -g\frac{m_1 m_2}{r^2}.$$

Jaký by byl poloměr atomu vodíku v základním stavu?

Řešení

Je zřejmé, že je třeba provést přechod $4\pi\varepsilon_0 \to 1/g$, $e_1 \to m_1$ a $e_2 \to m_2$. Vzorec z příkladu 6

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0\frac{n^2\hbar^2}{m_\mathrm{e}e^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

pak získá tvar

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{g m_\mathrm{e}^2 m_\mathrm{p}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

kde m_e je hmotnost elektronu a m_p je hmotnost protonu. Po dosazení dostaneme $r_1 \approx 1,20 \times 10^{29}$ m (světelný rok je přibližně roven $9,46 \times 10^{15}$ m).

11. S použitím výsledku

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{g m_\mathrm{e}^2 m_\mathrm{p}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

z příkladu 10 odhadněte velikost kvantového čísla n pro gravitačně vázaný systém Země a Slunce.

Řešení

Protože vzdálenost Země a Slunce je přibližně $1,5 \times 10^{11}$ m, dostáváme ze vztahu

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{g m_\mathrm{Z}^2 m_\mathrm{S}}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

kde $m_\mathrm{Z} \approx 5,98 \times 10^{24}$ kg a $m_\mathrm{S} \approx 1,97 \times 10^{30}$ kg, odhad

$$n \approx 2,52 \times 10^{74}.$$

Kvantování není proto třeba uvažovat.

12. Pomocí Bohrových kvantovacích podmínek určete možné energie atomu vodíku, který se volně pohybuje v kvádru $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$ a $0 \le z \le c$.

Řešení

Souřadnice a hmotnost elektronu označíme $\mathbf{r}_e$ a m_e, pro proton použijeme souřadnice $\mathbf{r}_p$ a hmotnost m_p. Dále zavedeme souřadnice těžiště a relativní souřadnice jádra a elektronu

$$\mathbf{R} = \frac{m_\mathrm{e}\mathbf{r}_e + m_\mathrm{p}\mathbf{r}_p}{m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p.$$

Těžiště se pohybuje jako volná částice s hmotností $M = m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}$ v zadaném kvádru. Relativní pohyb částic je ekvivalentní pohybu elektronu s redukovanou hmotností $\mu = \frac{m_\mathrm{e} m_\mathrm{p}}{m_\mathrm{e}+m_\mathrm{p}}$ v poli pevného jádra. Impulzy P_x, P_y a P_z těžiště se kvantují podobně jako v příkladu 1. Použijeme-li dále výsledku příkladu 6, dostaneme energie

$$E_{n_1,n_2,n_3,n} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + E_{rel} = \frac{h^2}{2M}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) - \frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2},$$

kde kvantová čísla nabývají hodnot $n_i = 1, 2, 3, \ldots$ a $n = 1, 2, 3, \ldots$.

21.3 Operátory

1. Lineární operátor $\hat{A}$ má vlastnosti $\hat{A}(u+v) = \hat{A}u + \hat{A}v$ a $\hat{A}(cu) = c\hat{A}u$, kde c je komplexní číslo. Určete, které z následujících operátorů jsou lineární:
a) $\hat{A}u = \lambda u$, kde λ je komplexní konstanta,
b) $\hat{A}u = u^*$,
c) $\hat{A}u = u^2$,
d) $\hat{A}u = \mathrm{d}u/\mathrm{d}x$,
e) $\hat{A}u = 1/u$,
f) $\hat{A}\hat{B} = [\hat{H}, \hat{B}] = \hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H}$, kde $\hat{H}$ je hamiltonián.
Řešení
a, d, f.

2. Vynásobte operátory $\hat{A} - \hat{B}$ a $\hat{A} + \hat{B}$.
Řešení
Podle pravidel pro práci s operátory dostáváme

$$(\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 + [\hat{A}, \hat{B}].$$

3. Ukažte, že pro operace s operátory platí distributivní zákon

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_j \hat{A}_j\right] = \sum_i \sum_j [\hat{A}_i, \hat{A}_j].$$

Řešení
Rozepsáním dostaneme výše uvedený výsledek.

4. Jsou dány tři operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ a $\hat{C}$. Vyjádřete komutátor $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ pomocí komutátorů $[\hat{A}, \hat{C}]$ a $[\hat{B}, \hat{C}]$.
Řešení

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} =$$
$$= \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B} + \hat{C}\hat{B}) - (\hat{C}\hat{A} - \hat{A}\hat{C} + \hat{A}\hat{C})\hat{B} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

5. Je operátor určený vztahem

$$\hat{A}\psi = \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + 3\psi^2$$

lineární?
Řešení
Vzhledem ke druhému členu to není lineární operátor.

6. Vypočítejte kvadrát operátoru $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x$.
Řešení
Aplikujeme-li dvakrát operátor $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x$ na vlnovou funkci $\psi(x)$, dostaneme

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)^2 \psi = \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + 2x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} + x^2\psi + \psi.$$

Odtud vyplývá

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)^2 = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x^2 + 1.$$

7. Vypočítejte třetí mocninu operátoru $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{1}{x}$.
Řešení

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{1}{x}\right)^3 = \frac{d^3}{\mathrm{d}x^3} + \frac{3}{x}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}.$$

8. Porovnejte operátory $\left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2$ a $\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\right)^2$.
Řešení

$$\left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 = x^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\right)^2 = x^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 3x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + 1.$$

9. Vypočítejte kvadrát operátoru $\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}$, kde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ a $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. S operátorem kinetické energie $\hat{T} = (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2/(2m)$ se setkáváme při popisu pohybu nabité částice v elektromagnetickém poli.
Řešení
Postupně dostáváme

$$(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2\psi = (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2\psi = (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})(-i\hbar\nabla\psi - q\mathbf{A}\psi) =$$

$$= -\hbar^2\Delta\psi + iq\hbar\,\mathrm{div}(\mathbf{A}\psi) + iq\hbar\mathbf{A}\nabla\psi + q^2\mathbf{A}^2\psi.$$

Vezmeme-li v úvahu rovnost $\mathrm{div}(\mathbf{A}\psi) = (\mathrm{div}\,\mathbf{A})\psi + \mathbf{A}\nabla\psi$, dostaneme

$$(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 = -\hbar^2\Delta + 2iq\hbar\mathbf{A}\nabla + iq\hbar\,\mathrm{div}\,\mathbf{A} + q^2\mathbf{A}^2.$$

10. Vypočítejte komutátor $[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, x]$.
Řešení
Působíme-li na vlnovou funkci $\psi(x)$ operátorem $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, dostaneme

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x\psi) - x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \psi.$$

Odtud vyplývá

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, x\right] = 1.$$

11. Ukažte, že platí $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, kde $\hat{x} = x$ a $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$.
Řešení
Dosazením definic operátorů do komutátoru a použitím podobného postupu jako v příkladu 10 ověříme platnost uvedeného vztahu.

12. Ukažte, že neexistují matice konečného řádu, které by splňovaly komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ pro operátor souřadnice a impulzu.
Řešení
Vypočítáme stopu levé strany komutační relace $[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar\mathbf{1}$

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{xp} - \mathbf{px}),$$

kde stopa matice $\mathbf{A}$ je definována vztahem[1]

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = \sum_i A_{ii}$$

a $\mathbf{1}$ označuje jednotkovou matici. Pro stopu matice platí

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{AB}) = \sum_{ij} A_{ij}B_{ji} = \sum_{ji} B_{ji}A_{ij} = \mathrm{Tr}(\mathbf{BA}),$$

odkud vyplývá

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{xp} - \mathbf{px}) = 0.$$

To je spor s pravou stranou komutační relace.

13. Vypočítejte komutátor

$$[\hat{x} - \hat{p}, \hat{x} + \hat{p}].$$

Řešení

$$[\hat{x} - \hat{p}, \hat{x} + \hat{p}] = 2i\hbar.$$

[1] Označení pochází z anglického slova trace.

14. Vypočítejte komutátor
$$[\hat{x}\hat{p}, \hat{x}].$$

Řešení

$$[\hat{x}\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar x.$$

15. Vypočítejte komutátor $[\frac{\partial}{\partial x}, f(x, y, z)]$, kde f je komplexní funkce.
Řešení
Podle pravidel pro práci s operátory dostáváme
$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, f\right]\psi = \frac{\partial}{\partial x}(f\psi) - f\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x}\psi.$$
Platí proto
$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, f\right] = \frac{\partial f}{\partial x}.$$

16. Vypočítejte komutátor operátoru souřadnice $\hat{x}$ a Laplaceova operátoru Δ.
Řešení
$$[\hat{x}, \Delta] = -2\frac{\partial}{\partial x}.$$

17. Nechť $\hat{A}$ je operátor komplexního sdružení, tj. $\hat{A}\psi = \psi^*$. Zjistěte, zda je tento operátor lineární a hermitovský. Čemu je roven komplexně sdružený operátor $\hat{A}^*$?
Řešení
Operátor $\hat{A}$ není lineární a hermitovský. Operátor $\hat{A}^*$ je roven jednotkovému operátoru.

18. Nalezněte operátor, který převede vlnovou funkci $\psi(x)$ na funkci $\psi(x+a)$, kde a je reálné číslo (operátor translace).
Řešení
Operátor translace $\hat{T}_a$ definujeme vztahem
$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a).$$
S použitím Taylorova rozvoje dostáváme následující vztah mezi $\psi(x+a)$ a $\psi(x)$
$$\psi(x+a) = \psi(x) + a\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{a^2}{2!}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\psi(x).$$
Definujeme-li funkci operátoru pomocí Taylorovy řady, dostaneme
$$\hat{T}_a = \mathrm{e}^{a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}.$$

19. Ukažte, že platí

$$e^{-a\hat{p}/(i\hbar)}\psi(x) = \psi(x+a).$$

Řešení

Tento výsledek vyplývá z řešení předcházejícího příkladu.

20. Nalezněte operátor, který převede vlnovou funkci $\psi(\mathbf{r})$ na funkci $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$, kde $\mathbf{a}$ je reálný vektor (operátor translace v třírozměrném prostoru).

Řešení

Podobně jako v předcházející úloze nejdříve definujeme

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}).$$

S použitím Taylorova rozvoje funkce $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ v okolí bodu $\mathbf{r}$ dostaneme

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{\mathbf{a}.\nabla}.$$

21. Nalezněte operátor hermitovsky sdružený k operátoru $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

Řešení

Podle definice hermitovsky sdruženého operátoru platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^+ \psi\right]^* \varphi\,\mathrm{d}x.$$

Za předpokladu, že funkce $\psi(x)$ a $\varphi(x)$ jsou kvadraticky integrabilní (tzn. že integrály $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2\,\mathrm{d}x$ a $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2\,\mathrm{d}x$ existují), musí platit

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = \lim_{x\to\pm\infty} \varphi(x) = 0.$$

Pomocí integrace per partes pak dostaneme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = [\psi^*\varphi]_{x=-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\varphi\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^* \varphi\,\mathrm{d}x.$$

Odtud vyplývá

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^+ = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}.$$

22. Najděte operátor hermitovsky sdružený k operátoru $\mathrm{d}^n/\mathrm{d}x^n$.

Řešení

Vícenásobným použitím integrace per partes (viz příklad 21) dostaneme

$$\left(\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\right)^+ = (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}.$$

23. Ověřte, že operátor impulzu $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ je hermitovský.
Řešení
Porovnáním s řešením příkladu 21 vidíme, že imaginární jednotka ve výrazu pro operátor impulzu $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ zajišťuje hermitovost tohoto operátoru.

24. Snadno lze ukázat, že operátor $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ je hermitovský pro funkce, které jdou k nule pro $x \to \pm\infty$ (viz příklady 21 a 23). Zjistěte, jaké podmínky musí splňovat funkce $\psi(x)$ a $\varphi(x)$, aby tento operátor splňoval podmínku

$$\int_a^b \psi^* \hat{p}\varphi \,\mathrm{d}x = \int_a^b (\hat{p}\psi)^* \varphi \,\mathrm{d}x$$

i pro konečný interval (a, b).
Řešení
Z rovnice

$$\int_a^b \psi^*(-i\hbar)\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = \int_a^b \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^* \varphi \,\mathrm{d}x$$

vyplývá obecný vztah

$$\int_a^b \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi^*\varphi)\,\mathrm{d}x = [\psi^*\varphi]_a^b = 0.$$

Položíme-li $\psi = \varphi$, dostaneme

$$|\psi(a)|^2 = |\psi(b)|^2,$$

odkud vyplývá, že mezi $\psi(a)$ a $\psi(b)$ musí platit vztah

$$\psi(b) = \mathrm{e}^{i\delta}\psi(a),$$

kde δ je reálný fázový faktor. Budeme-li analogicky předpokládat

$$\varphi(b) = \mathrm{e}^{i\delta'}\varphi(a),$$

dostaneme z výše uvedeného obecného vztahu podmínku

$$\mathrm{e}^{i(\delta-\delta')} = 1.$$

Vidíme, že fázový faktor δ musí být pro všechny funkce stejný nebo se může lišit o celočíselný násobek 2π.

25. Skalární součin můžeme zavést také v prostoru křivočarých souřadnic q. V takovém prostoru je skalární součin dán předpisem

$$\int_a^b \psi^*(q)\,\varphi(q)\,w(q)\,\mathrm{d}q,$$

kde $w(q)$ je váhová funkce.
Jako q vezměte radiální souřadnici r ve sférických souřadnicích. Dokažte, že

odpovídající operátor hybnosti je hermitovský. Váhová funkce je v tomto případě rovna r^2.
Řešení
Operátor hybnosti má tvar

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)$$

a skalární součin je roven

$$\int_0^\infty \psi^*(r)\varphi(r)r^2 \,\mathrm{d}r.$$

Pokud je operátor $\hat{p}$ hermitovský, platí rovnost

$$\int_0^\infty i\hbar \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi^*)\varphi r^2 \,\mathrm{d}r = \int_0^\infty \psi^*(-i\hbar)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\varphi)\, r^2 \,\mathrm{d}r.$$

Na levé straně použijeme integraci per partes. Člen bez integrálů vymizí v důsledku charakteru vlnových funkcí v nekonečnu a chování r v počátku. Dostáváme

$$-i\hbar \int_0^\infty r\psi^* \frac{\partial}{\partial r}(\varphi r)\,\mathrm{d}r = -i\hbar \int_0^\infty \psi^* r \frac{\partial}{\partial r}(\varphi r)\,\mathrm{d}r.$$

Odtud je vidět, že se obě strany v předcházející rovnici rovnají.

26. Ověřte, že Laplaceův operátor Δ je hermitovský.
Řešení
Hermitovost Laplaceova operátoru Δ vyplývá z výsledku příkladu 22 pro $n = 2$.

27. Najděte operátor hermitovsky sdružený k operátoru translace z příkladu 20.
Řešení
Hermitovsky sdružený operátor je definován vztahem

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\hat{T}_\mathbf{a}\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int \left[\hat{T}_\mathbf{a}^+\psi(\mathbf{r})\right]^* \varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V,$$

kde integrujeme přes celý prostor. Abychom nalezli operátor $\hat{T}_\mathbf{a}^+$, provedeme v integrálu

$$I = \int \psi^*(\mathbf{r})\hat{T}_\mathbf{a}\varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V = \int \psi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}+\mathbf{a})\,\mathrm{d}V$$

substituci $\mathbf{r}+\mathbf{a} = \mathbf{r}'$. Výsledkem je

$$I = \int \psi^*(\mathbf{r}'-\mathbf{a})\varphi(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}V',$$

což můžeme zapsat ve tvaru

$$I = \int \left[\hat{T}_{-\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})\right]^* \varphi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V.$$

Odtud dostáváme

$$\hat{T}_\mathbf{a}^+ = \hat{T}_{-\mathbf{a}}.$$

28. Najděte operátor hermitovsky sdružený k operátoru $e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}$ (α je reálné číslo).
Řešení
Podle definice platí
$$e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi})^n}{n!}.$$
S použitím výsledku příkladu 22 dostáváme
$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n\right]^+ = (-i)^n\left(-\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n = \left(i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n.$$
Proto platí
$$\left(e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}\right)^+ = e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}.$$

29. Dokažte, že operátor násobení reálnou funkcí je hermitovský.
Řešení
Vzhledem k předpokládané reálnosti funkce $f(x,y,z)$ je zřejmé, že podmínka hermitovosti
$$\int \psi^*(f\varphi)\,\mathrm{d}V = \int (f\psi)^*\varphi\,\mathrm{d}V$$
je splněna.

30. Nalezněte operátor hermitovsky sdružený k součinu dvou operátorů $\hat{A}\hat{B}$.
Řešení
Hermitovsky sdružený operátor $(\hat{A}\hat{B})^+$ je dán vztahem
$$\int \psi^*(\hat{A}\hat{B}\varphi)\,\mathrm{d}V = \int [(\hat{A}\hat{B})^+\psi]^*\varphi\,\mathrm{d}V.$$
S použitím operátorů $\hat{A}^+$ a $\hat{B}^+$ postupně dostáváme
$$\int \psi^*(\hat{A}\hat{B}\varphi)\,\mathrm{d}V = \int (\hat{A}^+\psi)^*(\hat{B}\varphi)\,\mathrm{d}V = \int (\hat{B}^+\hat{A}^+\psi)^*\varphi\,\mathrm{d}V.$$
Platí tedy vztah
$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+.$$

31. Ukažte, že kvantověmechanická střední hodnota operátoru kvadrátu libovolné fyzikální veličiny je nezáporná.
Řešení
Operátor $\hat{A}$ fyzikální veličiny je hermitovský, tj. platí $\hat{A} = \hat{A}^+$. Střední hodnota kvadrátu odpovídající fyzikální veličiny pro systém ve stavu ψ je rovna
$$\int \psi^*\hat{A}^2\psi\,\mathrm{d}V.$$
Pro tuto hodnotu platí
$$\int (\hat{A}\psi)^*\hat{A}\psi\,\mathrm{d}V = \int |\hat{A}\psi|^2\,\mathrm{d}V \geq 0.$$

32. Pro operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$, pro které platí $[\hat{A},\hat{B}] = 1$, vypočítejte $[\hat{A},\hat{B}^2]$.
Řešení
S použitím vztahu $[\hat{A},\hat{B}] = 1$ dostaneme

$$[\hat{A},\hat{B}^2] = \hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} = \hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\hat{B} =$$

$$= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{B} + \hat{B}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 2\hat{B}.$$

33. Pro operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$, pro které platí $[\hat{A},\hat{B}] = 1$, vypočítejte $[\hat{A}, f(\hat{B})]$. Funkce $f(x)$ je definovaná pomocí rozvoje do řady.
Řešení
Nejprve dokážeme indukcí platnost vztahu

$$[\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}.$$

Z příkladu 32 vyplývá platnost této rovnice pro $n = 2$. Z předpokladu platnosti výše uvedeného vztahu pro dané n dostáváme pro $n+1$

$$[\hat{A},\hat{B}^{n+1}] = \hat{A}\hat{B}^{n+1} - \hat{B}(\hat{A}\hat{B}^n - n\hat{B}^{n-1}) =$$

$$= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{B}^n + n\hat{B}^n = (n+1)\hat{B}^n.$$

Tím je tedy výše uvedený vztah dokázán pro všechna $n \geq 2$. Podle definice platí

$$f(\hat{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{B}^n.$$

Odtud postupně dostáváme

$$\hat{A}f(\hat{B}) - f(\hat{B})\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}(\hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}^n\hat{A}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{(n-1)!}\hat{B}^{n-1}.$$

Po přečíslování řady dostaneme následující výsledek

$$\hat{A}f(\hat{B}) - f(\hat{B})\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n+1)}(0)}{n!}\hat{B}^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[f']^{(n)}(0)}{n!}\hat{B}^n = f'(\hat{B}).$$

34. Předpokládejme, že platí

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C},$$

$$[\hat{A},\hat{C}] = 0$$

a

$$[\hat{B},\hat{C}] = 0.$$

Dokažte vztah

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\hat{C}/2}.$$

Řešení
Pro integrál

$$I(\alpha) = e^{\alpha\hat{A}}e^{\alpha\hat{B}}e^{-\alpha(\hat{A}+\hat{B})}$$

dostaneme

$$\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = \hat{A}e^{\alpha\hat{A}}e^{\alpha\hat{B}}e^{-\alpha(\hat{A}+\hat{B})} + e^{\alpha\hat{A}}\hat{B}e^{\alpha\hat{B}}e^{-\alpha(\hat{A}+\hat{B})} - e^{\alpha\hat{A}}e^{\alpha\hat{B}}(\hat{A}+\hat{B})e^{-\alpha(\hat{A}+\hat{B})}$$

nebo po jednoduché úpravě

$$\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = \hat{A}I - e^{\alpha\hat{A}}e^{\alpha\hat{B}}\hat{A}e^{-\alpha(\hat{A}+\hat{B})}.$$

Na úpravu výrazu $e^{\alpha\hat{B}}\hat{A}$ použijeme vztah

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})\hat{C},$$

který lze za předpokladu $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$ dokázat podobným postupem jako v příkladu 33. Pak dostaneme

$$\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = \alpha\hat{C}I(\alpha).$$

Integrací této rovnice obdržíme

$$I(\alpha) = e^{\alpha^2\hat{C}/2+K},$$

kde K je integrační konstanta. Z podmínky $I(0) = 1$ vyplývá $K = 0$. Pro $\alpha = 1$ pak dostaneme

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\hat{C}/2}.$$

35. Ověřte, že klasické Poissonovy závorky splňují vztahy

$$\{f,g\} = -\{g,f\},$$
$$\{f,g_1+g_2\} = \{f,g_1\} + \{f,g_2\},$$
$$\{f_1f_2,g\} = f_1\{f_2,g\} + \{f_1,g\}f_2,$$
$$\{f,g_1g_2\} = \{f,g_1\}g_2 + g_1\{f,g_2\}$$

a Jacobiho identitu

$$\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0.$$

První a poslední vlastnost definují Lieovu algebru.
Řešení
Klasické Poissonovy závorky jsou definovány vztahem

$$\{f,g\} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right),$$

kde q_i a p_i jsou zobecněné souřadnice a impulzy. Uvedené vztahy lze ověřit přímým dosazením a využitím pravidel pro derivaci součtu, resp. součinu funkcí.

36. Ověřte, že komutátor dvou operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ definovaný rovnicí

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

splňuje vztahy

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}],$$
$$[\hat{A}, \hat{B}_1 + \hat{B}_2] = [\hat{A}, \hat{B}_1] + [\hat{A}, \hat{B}_2],$$
$$[\hat{A}_1\hat{A}_2, \hat{B}] = \hat{A}_1[\hat{A}_2, \hat{B}] + [\hat{A}_1, \hat{B}]\hat{A}_2,$$
$$[\hat{A}, \hat{B}_1\hat{B}_2] = [\hat{A}, \hat{B}_1]\hat{B}_2 + \hat{B}_1[\hat{A}, \hat{B}_2]$$

a

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

Řešení
Tyto vztahy lze ověřit pomocí definice komutátoru.

37. Ukažte, že operátory $\hat{x}$ a $\hat{p}$ splňují v souřadnicové i impulzové reprezentaci vztah

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\{x, p\},$$

kde $\{\,,\}$ je Poissonova závorka.
Řešení
V souřadnicové reprezentaci platí

$$\hat{x} = x$$

a

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}.$$

Podobně v impulzové reprezentaci platí

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$$

a

$$\hat{p} = p.$$

Uvážíme-li ještě rovnost

$$\{x, p\} = 1,$$

snadno uvedený vztah ověříme.

38. Pro klasické Poissonovy závorky $\{f, g\}$ platí vztah

$$\{f, gh\} = g\{f, h\} + \{f, g\}h.$$

Nalezněte tvar kvantové analogie Poissonových závorek za předpokladu, že i pro tuto analogii platí výše uvedený vztah.

Řešení

Pro Poissonovy závorky platí

$$\{f_1 f_2, g\} = \{f_1, g\} f_2 + f_1 \{f_2, g\}$$

a

$$\{f, g_1 g_2\} = \{f, g_1\} g_2 + g_1 \{f, g_2\}.$$

V těchto výrazech dále položíme $f = f_1 f_2$ a $g = g_1 g_2$. Pak dostáváme

$$\{f_1 f_2, g_1 g_2\} = [\{f_1, g_1\} g_2 + g_1 \{f_1, g_2\}] f_2 + f_1 [\{f_2, g_1\} g_2 + g_1 \{f_2, g_2\}]$$

a

$$\{f_1 f_2, g_1 g_2\} = [\{f_1, g_1\} f_2 + f_1 \{f_2, g_1\}] g_2 + g_1 [\{f_1, g_2\} f_2 + f_1 \{f_2, g_2\}].$$

Oba výrazy si mají být rovny, musí tedy platit

$$\{f_1, g_1\} g_2 f_2 + f_1 g_1 \{f_2, g_2\} = \{f_1, g_1\} f_2 g_2 + g_1 f_1 \{f_2, g_2\}$$

neboli

$$\{f_1, g_1\}[g_2, f_2] = [g_1, f_1]\{f_2, g_2\}.$$

Žádáme-li, aby tento vztah platil i pro operátory v kvantové mechanice, vidíme, že kvantová analogie klasických Poissonových závorek musí být až na konstantu C rovna komutátoru příslušných operátorů

$$\{\hat{f}, \hat{g}\} = C[\hat{f}, \hat{g}].$$

V klasické fyzice je Poissonova závorka reálná. Požadujeme proto, aby operátor $C[\hat{f}, \hat{g}]$ byl hermitovský. Za předpokladu, že operátory $\hat{f}$ a $\hat{g}$ jsou hermitovské, dostaneme z tohoto požadavku

$$-C^*[\hat{f}, \hat{g}] = C[\hat{f}, \hat{g}].$$

Odtud vyplývá

$$C = i\,\text{konst},$$

kde konst je reálná konstanta.

39. S použitím výsledků příkladu 38 ukažte, že platí komutační relace

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar,$$

kde $\hbar$ je konstanta rozměru Js.

Řešení

V klasické fyzice platí

$$\{x, p\} = 1.$$

Přejdeme-li ke kvantové mechanice, dostaneme pro „kvantové Poissonovy závorky“

$$\{\hat{x}, \hat{p}\} = 1.$$

Položíme-li dále $\hat{f} = \hat{x}$ a $\hat{g} = \hat{p}$, obdržíme z výsledků příkladu 38

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{1}{C}\{\hat{x}, \hat{p}\}.$$

Položíme-li dále $C = 1/(i\hbar)$, kde $\hbar$ je konstanta rozměru akce (Js), dostaneme

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar.$$

Dostáváme tedy Heisenbergovy komutační relace, kde hodnotu konstanty $\hbar$ je nutné určit porovnáním teoretických výsledků s experimentálními.

40. Dokažte, že komutační relace pro operátory souřadnice a impulzu $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ platí i pro kanonicky sdružené operátory souřadnice a impulzu dané vztahy

$$\hat{Q}\psi = x\psi$$

a

$$\hat{P}\psi = -i\hbar\frac{1}{z(x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[z(x)\psi\right],$$

kde je $z(x)$ libovolná funkce proměnné x.
Řešení
Komutátor operátorů $\hat{Q}$ a $\hat{P}$ je výraz

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q}.$$

Pro lepší přehlednost vezmeme nejprve první člen v rozdílu a necháme jej působit na funkci ψ

$$\hat{Q}\hat{P} = -i\hbar\frac{x}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(z\psi) = -i\hbar\frac{x}{z}\psi\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} - i\hbar x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}.$$

Pro druhý člen dostaneme

$$\hat{P}\hat{Q} = -i\hbar\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(zx\psi) = -i\hbar\frac{1}{z}\left(\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x}x\psi + z\ \psi + z\ x\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right).$$

Spojíme-li oba výrazy dohromady, dostaneme hledanou rovnost

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar.$$

41. Pro operátory souřadnice a impulzu platí komutační relace

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar,$$

kde

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}.$$

Uvažujme vlastní funkce operátoru $\hat{p}$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)},$$

pro které postupně dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} [(x\psi)^*(\hat{p}\psi) - (\hat{p}\psi)^*(x\psi)] \, \mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} [(x\psi)^*(p\psi) - (p\psi)^*(x\psi)] \, \mathrm{d}x = 0.$$

Vychází nám nula, což podle komutační relace nemůže platit. Kde je v této úvaze chyba?

Řešení

Správný postup je následující. Postupně dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^*(x\hat{p} - \hat{p}x)\psi_p \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} [(x\psi_{p'})^*(\hat{p}\psi_p) - (\hat{p}\psi_{p'})^*(x\psi_p)] \, \mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} [(x\psi_{p'})^*(p\psi_p) - (p'\psi_{p'})^*(x\psi_p)] \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x(p - p')\mathrm{e}^{x(p'-p)/(i\hbar)} \, \mathrm{d}x.$$

Použijeme-li nyní vztahů

$$\delta(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ipx/\hbar} \, \mathrm{d}x$$

a

$$p \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \delta(p) = -\delta(p),$$

dostaneme

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x(p - p')\mathrm{e}^{x(p'-p)/(i\hbar)} \, \mathrm{d}x =$$

$$= i\hbar(p-p') \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{x(p'-p)/(i\hbar)} \, \mathrm{d}x = -i\hbar(p'-p) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'} \delta(p'-p) = i\hbar\delta(p'-p).$$

Uvažované vlnové funkce jsou normované na Diracovu δ-funkci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^* \psi_p \, \mathrm{d}x = \delta(p' - p),$$

komutační relace mezi operátory souřadnice a impulzu proto platí.

42. Nalezněte kvantověmechanický operátor odpovídající klasickému součinu ve tvaru xp_x.

Řešení

Očekáváme, že klasickému součinu xp_x bude odpovídat operátor

$$\hat{A} = (1 - a)\hat{x}\hat{p}_x + a\hat{p}_x\hat{x},$$

kde a je reálná konstanta. Tuto konstantu vybereme tak, aby střední hodnota $\langle \hat{A} \rangle$ byla reálná. Položíme-li

$$\psi = \psi_1 + i\psi_2,$$

kde ψ_1 a ψ_2 jsou reálná a imaginární část vlnové funkce, a použijeme-li vyjádření $\hat{x}$ a $\hat{p}_x$ v souřadnicové reprezentaci, dostaneme

$$\langle \hat{A} \rangle = -i\hbar \int \left[x \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + \psi_2 \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) + a \left(\psi_1^2 + \psi_2^2 \right) \right] \mathrm{d}V +$$

$$+\hbar \int x \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) \mathrm{d}V.$$

První člen na pravé straně je čistě imaginární a musí být roven nule, druhý člen je reálný. Protože v důsledku normování platí

$$\int \left(\psi_1^2 + \psi_2^2 \right) \mathrm{d}V = 1,$$

lze podmínku nulovosti prvního členu zapsat ve tvaru

$$\frac{1}{2} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi_1^2 + \psi_2^2 \right) \mathrm{d}V = -a,$$

což po integraci per partes dává

$$a = \frac{1}{2}.$$

Vidíme, že reálná vlastní čísla zajišťuje symetrická kombinace

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x} \right).$$

Když přejdeme ke komplexním a

$$a = \frac{1}{2} + ib,$$

kde b je reálné, dostaneme obdobným způsobem

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x} \right) + ib \left(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x \right).$$

Střední hodnota druhého členu je díky komutační relaci

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

rovna $b\hbar$ nezávisle na vlnové funkci. Tento člen pouze posouvá hodnotu měření o konstantní hodnotu a lze ho vynechat.

43. Nalezněte tvar operátoru časové derivace pro součin dvou operátorů

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{A}\hat{B}\right).$$

Řešení
Z definice operátoru časové derivace

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}]$$

dostaneme rozepsáním

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t}.$$

Platí proto podobné pravidlo jako v případě derivace součinu funkcí.

44. Nalezněte tvar operátoru časové derivace pro součet dvou operátorů

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{A} + \hat{B}\right).$$

Řešení
Rozepsáním dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{A} + \hat{B}\right) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t}.$$

Platí proto podobné pravidlo jako v případě derivace součtu funkcí.

21.4 Měření

1. Předpokládejme, že máme dva systémy, které se nacházejí ve stavu popsaném stejnou vlnovou funkcí. Na každém systému jednou změříme odpovídajícím měřicím přístrojem veličinu A. Na prvním systému naměříme hodnotu A_1, na druhém odlišnou hodnotu $A_2 \neq A_1$. Co můžeme říci o stavu, ve kterém se systémy nacházely před měřením?
Řešení
Kdyby uvažovaná vlnová funkce ψ byla vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$, naměřili bychom v obou případech stejnou hodnotu. Odtud vyplývá, že uvažovaná vlnová funkce není vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$. To souhlasí také s tím, že v rozvoji $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ jsou zřejmě koeficienty odpovídající vlastním číslům A_1 a A_2 nenulové. Naopak, pokud bychom naměřili stejné hodnoty $A_1 = A_2$, neznamená to, že oba systémy byly ve stavu popsaném stejnou vlnovou funkcí.

2. Předpokládejme, že systém je v neznámém stavu. Provedeme měření veličiny A a dostaneme hodnotu A_1. Ihned poté toto měření zopakujeme. Jakou hodnotu naměříme při opakovaném měření?
Řešení
Po prvním měření se vlnová funkce systému změní na vlnovou funkci odpovídající vlastnímu číslu A_1. Pokud měření vzápětí zopakujeme, dostaneme s pravděpodobností rovnou jedné opět hodnotu A_1. Slovo vzápětí je zde podstatné, protože časový vývoj systému by mohl být takový, že po uplynutí určitého času od prvního měření by se systém mohl nacházet ve stavu popsaném jinou vlnovou funkcí (která je určena řešením časové Schrödingerovy rovnice).

3. Máme k dispozici jediný systém nacházející se v neznámém stavu popsaném vlnovou funkcí ψ. Lze navrhnout experiment, jehož pomocí bychom mohli tento stav určit?
Řešení
Pokud o neznámém stavu nemáme další informace, nelze měřením stav tohoto systému určit. Když změříme libovolnou veličinu A a naměříme např. hodnotu A_n odpovídající vlastní funkci ψ_n, potom jediné, co můžeme říci, je, že maticový element $\int \psi_n^*(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x$ je nenulový. Po měření se systém bude nacházet ve stavu ψ_n. Původní stav je dalšímu měření nedostupný. Jedinou možností je zkoumat historii vzniku stavu ψ až po poslední předcházející měření. Po tomto měření je systém ve stavu popsaném vlastní funkcí odpovídajícího operátoru, která se vyvíjí podle časové Schrödingerovy rovnice. Ze známé počáteční vlnové funkce po posledním měření lze pak určit vlnovou funkci ψ v čase, o který se zajímáme.

4. Navrhněte postup na vytváření systémů v nějakém předem zvoleném stavu popsaném normovanou vlnovou funkcí ψ.
Řešení
Nejprve je nutné nalézt fyzikální veličinu s operátorem $\hat{A}$, pro kterou je funkce ψ vlastní funkcí odpovídající nedegenerovanému vlastnímu číslu, např. a. Potom budeme postupně brát systémy uvažovaného typu (nezáleží na tom, v jakých budou stavech) a budeme měřit veličinu A. Pokud naměříme hodnotu různou od a, stav „zapomeneme“. Pokud je naměřená hodnota rovna a, připravili jsme požadovaný stav. Zbývá ukázat, že takový operátor může reprezentovat fyzikální veličinu. Snadno se lze přesvědčit, že operátor definovaný vztahem

$$\hat{A}\varphi(x) = a\psi(x) \int \psi^*(y)\varphi(y)\,\mathrm{d}y$$

je lineární hermitovský operátor a funkce $\psi(x)$ je jeho vlastní funkcí odpovídající vlastnímu číslu a. Díky tomu, že jde o lineární hermitovský operátor, může existovat fyzikální veličina, kterou reprezentuje. Praktická konstrukce odpovídajícího měřicího přístroje však může být obtížná.

21.5 Vlnové funkce

1. Zdůvodněte, které z následujících funkcí mohou být vlnovými funkcemi stacionárních stavů částice na intervalu $x \in (-\infty, \infty)$:
   a) $\psi = x$ pro $x \geq 0$ a $\psi = 0$ pro $x < 0$,
   b) $\psi = x^2$,
   c) $\psi = \mathrm{e}^{-|x|}$,
   d) $\psi = \mathrm{e}^{-x}$,
   e) $\psi = \cos x$,
   f) $\psi = \sin |x|$,
   g) $\psi = \mathrm{e}^{-x^2}$,
   h) $\psi = 1$ pro $-1 \leq x \leq 1$ a $\psi = 0$ pro $x < -1$ a $x > 1$,
   i) $\psi = x(a - x)$ pro $0 \leq x \leq a$ a $\psi = 0$ jinak.
   Řešení
   a) Není konečná pro $x \to \infty$ a nemá spojitou derivaci v $x = 0$,
   b) není konečná pro $x \to \pm\infty$,
   c) nemá spojitou derivaci v $x = 0$,
   d) není konečná pro $x \to -\infty$,
   e) ano, volná částice,
   f) nemá spojitou derivaci v $x = 0$,
   g) ano, základní stav lineárního harmonického oscilátoru,
   h) nemá spojitou derivaci v $x = \pm 1$,
   i) nemá spojitou derivaci v $x = 0, a$.
   Poznámka: Spojitost derivace vlnové funkce není vyžadována v případě nekonečné změny potenciálu. Funkce f) a i) mohou být vlnovými funkcemi, pokud vztyčíme nekonečné bariéry např. v bodech $x = 0, \pi$, resp. $x = 0, a$.

2. Popisují funkce $\psi(x)$ a $\exp[if(x)]\psi(x)$, kde $f(x)$ je reálná funkce, stejný stav?
   Řešení
   Ne, tyto dva stavy se obecně liší hustotami toku pravděpodobnosti j.

3. Proveďte přechod od Fourierovy řady k Fourierově transformaci.
   Řešení
   Fourierova řada pro funkci ψ s periodou L má tvar

$$\psi(x) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{in\frac{2\pi}{L}x},$$

   kde

$$c_n = \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{e}^{-in\frac{2\pi}{L}x} \psi(x)\, \mathrm{d}x.$$

   Označíme

$$k = n\frac{2\pi}{L}$$

   a zavedeme diferenci

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}\Delta n,$$

kde $\Delta n = 1$. Pak dostaneme

$$\psi(x) = \frac{1}{L}\sum_k c(k)\mathrm{e}^{ikx}\frac{L}{2\pi}\Delta k,$$

což v limitě $L \to \infty$ přechází na

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} c(k)\mathrm{e}^{ikx}\,\mathrm{d}k.$$

Pro $c(k)$ dostaneme

$$c(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x.$$

Ve fyzice se v posledních dvou vztazích obvykle používá stejný faktor $1/\sqrt{2\pi}$.

4. Určete Fourierův obraz funkce $\psi(x) = h\exp(ik_0x)$ pro $-a/2 \leq x \leq a/2$ a $\psi(x) = 0$ jinak.
Řešení
Fourierův obraz je dán vztahem

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x.$$

Výsledkem je

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}ha\frac{\sin[(k_0 - k)a/2]}{(k - k_0)a/2}.$$

5. Určete Fourierův obraz funkce $\psi(x)$ ve tvaru pravoúhlého pulzu $\psi(x) = 1/\sqrt{2a}$ pro $-a \leq x \leq a$ a $\psi(x) = 0$ jinak.
Řešení
Při použití proměnné $p = \hbar k$ určíme Fourierův obraz podle vzorce

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\mathrm{e}^{px/(i\hbar)}\,\mathrm{d}x.$$

Výsledkem je

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}}\frac{\sin(pa/\hbar)}{p}.$$

6. Určete hustotu pravděpodobnosti, se kterou dopadne částice na stínítko při rozptylu částice na jedné štěrbině o šířce $2a$.
Řešení
Podle příkladu 5 je amplituda pravděpodobnosti, že částice má složku impulzu ve směru napříč štěrbinou, rovna

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}}\frac{\sin(pa/\hbar)}{p}.$$

Má-li částice složku impulzu napříč štěrbinou rovnou p, odchýlí se na vzdálenosti l od štěrbiny ke stínítku od středu štěrbiny o hodnotu $\Delta x = v\Delta t = (p/m)\Delta t$, kde doba pohybu částice od štěrbiny ke stínítku je rovna $\Delta t = l/(p_0/m)$ a p_0 je složka impulzu částice ve směru pohybu od štěrbiny ke stínítku. Dostáváme tedy vztah mezi impulzem p a místem dopadu ve tvaru $p = \Delta x\, p_0/l$. Amplituda pravděpodobnosti, že částice dopadne na stínítko ve vzdálenosti Δx od roviny procházející středem štěrbiny je tudíž rovna

$$\phi(\Delta x) = N\frac{\sin[\Delta x\, p_0 a/(l\hbar)]}{\Delta x\, p_0/l},$$

kde N je normovací konstanta. Při mnohonásobném opakování experimentu se na stínítku vytvoří obraz s rozdělením hustoty úměrným $|\phi(\Delta x)|^2$.

7. Vypočítejte hustotu pravděpodobnosti, se kterou dopadne částice na stínítko při rozptylu částice na dvou paralelních štěrbinách, z nichž každá má šířku $2a$ a jejich vzájemná vzdálenost je rovna $2b$.
Řešení
S použitím výsledků pro jednu štěrbinu dostaneme

$$\phi(x') = N\left\{\frac{\sin[(x'-b)p_0 a/(l\hbar)]}{(x'-b)p_0/l} + \frac{\sin[(x'+b)p_0 a/(l\hbar)]}{(x'+b)p_0/l}\right\},$$

kde x' udává vzdálenost bodu na stínítku od roviny půlící prostor mezi štěrbinami a N je normovací faktor. První člen se vztahuje ke štěrbině se středem v bodě $x' = b$, druhý ke štěrbině se středem v bodě $x' = -b$. Interferenční obrazec na stínítku odpovídá hustotě pravděpodobnosti $|\phi(x')|^2$.

8. Nalezněte Fourierův obraz funkce

$$f(x) = \frac{\delta}{\pi}\frac{1}{x^2+\delta^2}$$

udávající Lorentzův tvar spektrální čáry.
Řešení
Integrál vypočítáme podle vzorce

$$\int_0^\infty \frac{\cos kx}{x^2+\delta^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2\delta}\mathrm{e}^{-k\delta},$$

který platí pro $k > 0$ a $\mathrm{Re}\,\delta > 0$.

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x = 2\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{\delta}{\pi}\int_0^\infty \frac{\cos kx}{x^2+\delta^2}\,\mathrm{d}x =$$

$$= 2\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{\delta}{\pi}\frac{\pi}{2\delta}\mathrm{e}^{-k\delta} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-k\delta}.$$

Fourierův obraz je roven

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-|k|\delta}.$$

9. Určete Fourierův obraz gaussovské funkce

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-x^2/(2\Delta^2)}.$$

Řešení

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx}\, dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(k\Delta)^2/2}.$$

Fourierovým obrazem gaussovské funkce je opět gaussovská funkce.

10. Nalezněte Fourierův obraz vlnových funkcí stacionárních stavů částice v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě.
Řešení
Vlnové funkce stacionárních stavů částice v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě na intervalu $0 \leq x \leq a$ jsou rovny

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

Fourierův obraz určíme podle vztahu

$$\varphi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) e^{px/(i\hbar)}\, dx.$$

Po použití vzorce $\sin x = [\exp(ix) - \exp(-ix)]/(2i)$ a vypočtu integrálů dostaneme

$$\varphi_n(p) = \sqrt{\frac{2}{ah}} \frac{n\pi a[1 - (-1)^n \exp(-ipa/\hbar)]}{(pa/\hbar)^2 - (n\pi)^2}.$$

11. Pro částici ve stavu popsaném normovanou vlnovou funkcí $\psi(x, y, z)$ vypočtěte pravděpodobnost, že její souřadnice z má hodnotu v intervalu (z_1, z_2) a složka impulzu p_y má hodnotu v intervalu (p_1, p_2).
Řešení
Nejdříve určíme vlnovou funkci $\psi(x, p_y, z)$

$$\psi(x, p_y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z) e^{p_y y/(i\hbar)}\, dy.$$

Hledaná pravděpodobnost má tvar

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{p_1}^{p_2} dp_y \int_{z_1}^{z_2} |\psi(x, p_y, z)|^2\, dz.$$

12. Předpokládejte, že funkce ψ_1 a ψ_2 jsou dvě lineárně nezávislé a normované vlastní funkce lineárního hermitovského operátoru $\hat{A}$ odpovídající témuž vlastnímu číslu.

a) Ukažte, že libovolná netriviální lineární kombinace $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ je opět vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$ s toutéž vlastní hodnotou.
b) Za předpokladu, že ψ_1 a ψ_2 nejsou ortogonální, nalezněte dvě lineární kombinace těchto funkcí takové, aby byly navzájem ortogonální.
Řešení
Předpokládáme, že platí

$$\hat{A}\psi_1 = a\psi_1$$

a

$$\hat{A}\psi_2 = a\psi_2.$$

a) Platí

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 = c_1a\psi_1 + c_2a\psi_2 = a(c_1\psi_1 + c_2\psi_2).$$

b) Ortogonální jsou např. funkce

$$\psi_1' = \psi_1,$$

$$\psi_2' = \psi_2 - \frac{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}\psi_1,$$

kde $\langle\ |\ \rangle$ označuje skalární součin funkcí (Grammova–Schmidtova ortogonalizační metoda).

13. Najděte bra-vektor konjugovaný ke
a) ket-vektoru $\alpha|\psi\rangle$,
b) ket-vektoru $\hat{A}|\psi\rangle$,
kde α je komplexní číslo a $\hat{A}$ je operátor.
Řešení
Mějme ket-vektor $|\varphi\rangle$ a bra-vektor $\langle\psi|$. Skalární součin těchto vektorů je roven

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*\varphi\,\mathrm{d}\tau.$$

a) Ze vzorce pro skalární součin plyne antilinearita skalárního součinu v bra-vektoru

$$\alpha|\psi\rangle = |\alpha\psi\rangle \qquad \longleftrightarrow \qquad \langle\alpha\psi| = \alpha^*\langle\psi|.$$

Bra-vektor konjugovaný ke ket-vektoru $\alpha|\psi\rangle$ je proto $\alpha^*\langle\psi|$.
b) Postupujeme podobně jako v předchozím bodě. Použijeme vztah

$$\langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+\varphi\rangle,$$

kde křížek označuje hermitovské sdružení. Pak dostaneme výsledek

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle \qquad \longleftrightarrow \qquad \langle\hat{A}^+\psi|.$$

21.6 Vlastní čísla a vlastní funkce

1. Dokažte, že vlastní hodnoty hermitovského operátoru jsou reálné.
Řešení
Uvažujeme vlastní problém tvaru

$$\hat{A}\psi = a\psi,$$

kde $\hat{A}$ je hermitovský operátor, a je vlastní číslo a ψ je odpovídající vlastní funkce. Potom dostaneme

$$\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle = a\langle\psi|\psi\rangle,$$

kde $\langle\ |\ \rangle$ označuje skalární součin funkcí. Po hermitovském sdružení dostaneme z vlastního problému

$$(\hat{A}\psi)^+ = a^*\psi^+,$$

kde křížek označuje hermitovské sdružení a hvězdička znamená komplexní sdružení. Z poslední rovnice vyplývá

$$\langle\hat{A}\psi|\psi\rangle = a^*\langle\psi|\psi\rangle.$$

Pro hermitovský operátor platí

$$\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\psi\rangle,$$

což znamená, že vlastní čísla a jsou reálná

$$a = a^*.$$

2. Ukažte, že pro nečasovou Schrödingerovu rovnici s reálnou potenciální energií $V(x)$ vyhovuje téže rovnici jak reálná, tak imaginární část vlnové funkce.
Řešení
Z rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi = E\psi$$

komplexním sdružením dostaneme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi^* = E\psi^*.$$

Odtud vyplývá, že reálná část $\psi_1 = (\psi + \psi^*)/2$ i imaginární část $\psi_2 = (\psi - \psi^*)/(2i)$ vlnové funkce vyhovují Schrödingerově rovnici s toutéž energií E. Pro reálné hamiltoniány toto tvrzení platí i ve více dimenzích. Obecně platí, že zatímco hermitovost hamiltoniánu se při unitárních transformacích báze zachovává, s jeho reálností tomu tak není.

3. Je funkce $\psi(x) = A\cos(kx)$, kde k je reálné, vlastní funkcí operátoru impulzu?
Řešení
Není, nevyhovuje rovnici
$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \lambda\psi.$$

4. Určete vlnovou funkci částice, která má
a) ostrou hodnotu polohy,
b) ostrou hodnotu impulzu.
Řešení
Nabývá-li nějaká veličina ostrou hodnotu, naměří se jedno z vlastních čísel operátoru, který je této veličině přiřazen
$$\hat{A}\psi = a\psi.$$

a) Pokud má částice ostrou souřadnici, platí
$$\hat{x}\psi(x) = x_0\psi(x),$$
kde x_0 je vlastním číslem operátoru $\hat{x}$. V souřadnicové reprezentaci z definice $\hat{x} = x$ dostaneme
$$(x - x_0)\,\psi(x) = 0.$$
Námi hledaná funkce je tedy Diracova δ-funkce
$$\psi(x) = \delta\,(x - x_0)\,.$$
Normovací konstanta je rovna jedné.

b) Pokud má částice ostrou hodnotu impulzu p_0, platí
$$\hat{p}\psi = p_0\psi.$$
Operátor $\hat{p}$ má v souřadnicové reprezentaci tvar
$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}.$$
Řešíme diferenciální rovnici
$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = p_0\psi,$$
z které vyplývá
$$\psi\,(x) = N\mathrm{e}^{-p_0x/(i\hbar)}.$$
Normovací konstanta N závisí na použitém typu normování.

5. Nalezněte tvar operátoru souřadnice $\hat{x}$ v impulzové reprezentaci a určete jeho vlastní hodnoty a vlastní funkce.
Řešení
Mezi vlnovou funkcí $\psi(x)$ v souřadnicové reprezentaci a vlnovou funkcí $\varphi(p)$ v impulzové reprezentaci platí vztah

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)}\, \mathrm{d}p.$$

Odtud dostáváme

$$x\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right) \mathrm{e}^{-px/(i\hbar)}\, \mathrm{d}p.$$

Po provedení integrace per partes dostaneme pro funkce splňující podmínku

$$\lim_{p \to \pm\infty} \varphi(p) = 0$$

výraz

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

ze kterého vyplývá

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}.$$

Řešením problému vlastních čísel

$$\hat{x}\varphi = x_0 \varphi$$

dostáváme postupně

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}p} = x_0 \varphi,$$

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\varphi} = \frac{x_0}{i\hbar}\, \mathrm{d}p$$

a

$$\varphi(p) = \mathrm{e}^{px_0/(i\hbar)},$$

kde x_0 je reálné vlastní číslo. Při normování na Diracovu δ-funkci můžeme psát

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{px_0/(i\hbar)}.$$

6. Nalezněte vlastní čísla a vlastní funkce operátorů $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ a $i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.
Řešení
Z vlastního problému

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \lambda\psi$$

dostáváme

$$\psi = \mathrm{e}^{\lambda x}.$$

Z podmínky konečnosti vlnové funkce $\psi(x)$ pro $x \to \pm\infty$ vyplývá $\lambda = i\alpha$, kde α je libovolné reálné číslo. Podobně pro operátor $i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ platí

$$\psi = \mathrm{e}^{-i\lambda x},$$

kde λ je reálné. V obou případech je spektrum vlastních čísel spojité. Vlnové funkce se obvykle normují na δ-funkci, takže např. druhá normovaná vlnová funkce je rovna

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-i\lambda x}.$$

7. Nalezněte vlastní čísla a vlastní funkce operátoru $x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.
Řešení
Vyjdeme z vlastního problému

$$\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi = \lambda\psi.$$

Po separaci proměnných dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\psi} = (\lambda - x)\,\mathrm{d}x.$$

Integrací této rovnice obdržíme

$$\psi = \mathrm{e}^{\lambda x - x^2/2}.$$

Tato vlnová funkce vyhovuje podmínkám konečnosti, jednoznačnosti a spojitosti pro libovolná reálná i komplexní λ.

8. Určete vlastní čísla a vlastní funkce operátoru $-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$, kde φ je úhel rotace okolo osy z ve sférických souřadnicích.
Řešení
Řešení rovnice

$$-i\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\varphi} = \lambda\psi$$

hledáme ve tvaru

$$\psi = \mathrm{e}^{i\lambda\varphi}.$$

Vzhledem k požadavku jednoznačnosti vlnové funkce ψ musí platit

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi).$$

Odtud vyplývají možné hodnoty λ

$$\lambda = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

Při normování na interval délky 2π dostaneme vlnové funkce

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi}.$$

9. Nalezněte vlastní čísla a vlastní funkce operátoru $\sin\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\right)$, kde φ je úhel rotace okolo osy z ve sférických souřadnicích.
Řešení
Řešíme vlastní problém

$$\sin\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\right)\psi = \lambda\psi$$

nebo podrobněji

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\frac{\mathrm{d}^{2k+1}\psi}{\mathrm{d}\varphi^{2k+1}} = \lambda\psi.$$

Podobně jako v příkladu 8 hledáme řešení ve tvaru

$$\psi = \mathrm{e}^{\alpha\varphi}.$$

Z požadavku jednoznačnosti vlnové funkce

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

vyplývá

$$\alpha = im, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

Po dosazení do vlastního problému dostáváme

$$\lambda = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}(im)^{2k+1} = \sin(im) = i\sinh(m).$$

10. Nalezněte vlastní čísla a vlastní funkce operátoru $\mathrm{e}^{ia\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}}$, kde φ je úhel rotace okolo osy z ve sférických souřadnicích.
Řešení
Analogickým postupem jako v příkladu 9 dostaneme

$$\psi = \mathrm{e}^{im\varphi}$$

a

$$\lambda = \mathrm{e}^{-am}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

11. Určete vlastní čísla a vlastní funkce operátoru $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}$.
Řešení
Po zavedení substituce $\chi(r) = r\psi(r)$ dostaneme jednoduchou diferenciální rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} = \lambda\chi,$$

která má řešení

$$\chi_1 = A\mathrm{e}^{\sqrt{\lambda}r}$$

a

$$\chi_2 = B\mathrm{e}^{-\sqrt{\lambda}r}.$$

Pro $\lambda = -\alpha^2 < 0$ (kde α je reálné) jsou tyto funkce konečné pro $r \to \infty$. Abychom zajistili konečnost vlnové funkce $\psi(r)$

$$\psi(r) = \frac{A\mathrm{e}^{\sqrt{\lambda}r} + B\mathrm{e}^{-\sqrt{\lambda}r}}{r}$$

pro $r \to 0$, je třeba, aby čitatel pro $r \to 0$ konvergoval k nule společně s jmenovatelem. Musí tedy platit

$$B = -A,$$

což vede na vlastní funkci

$$\psi(r) = N\frac{\sin(\alpha r)}{r}.$$

12. Určete, jaký charakter má energetické spektrum nečasové Schrödingerovy rovnice pro následující potenciální energie:
a) $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = \text{konst} > 0$ pro $|x| \geq a$,
b) $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$,
c) $V(\mathbf{r}) = \text{konst}/r$.
Řešení
a) Energetické spektrum je diskrétní v intervalu energií $(0, \text{konst})$ a spojité pro interval $\langle \text{konst}, \infty)$. Diskrétních hladin je konečný počet.
b) Vzhledem k vlastnosti $V(\mathbf{r}) \to \infty$ pro $r \to \infty$ je energetické spektrum diskrétní na intervalu $(0, \infty)$. Diskrétních hladin je nekonečný počet.
c) Pro konst > 0 je potenciální energie kladná a má minimum pro $r \to \infty$. Energetické spektrum je proto spojité na intervalu $\langle 0, \infty)$. Pro konst < 0 je potenciální energie záporná a má vlastnost $V(\mathbf{r}) \to -\infty$ pro $r \to 0$ a $V(\mathbf{r}) \to 0$ pro $r \to \infty$. Energetické spektrum je diskrétní na intervalu $(-\infty, 0)$ a spojité na intervalu $\langle 0, \infty)$. Diskrétních hladin je nekonečný počet.

21.7 Volná částice

1. Ukažte, že nepůsobí-li na soustavu částic žádné vnější síly, je celkový impulz soustavy integrálem pohybu.
Řešení
Operátor impulzu a hamiltonián soustavy částic jsou rovny

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_i \hat{p}_i$$

a

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_i V_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{i<j} V_{ij}(\mathbf{r}_{ij}),$$

kde m_i je hmotnost částic, $\sum_i V_i$ je potenciální energie v poli vnějších sil a $\sum_{i<j} V_{ij}$ je potenciální energie odpovídající vnitřním párovým interakcím

částic. S použitím komutačních relací mezi operátory souřadnic a impulzu dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} = -\sum_i \nabla_i V_i.$$

V nepřítomnosti vnějších sil je tedy celkový impulz integrálem pohybu.

2. V klasické fyzice se těžiště izolované soustavy vzájemně interagujících částic pohybuje rovnoměrně přímočaře. Ukažte, že v kvantové mechanice platí podobné tvrzení.
Řešení
Pro operátor časové derivace polohy těžiště platí

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{r}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m},$$

kde $\hat{\mathbf{p}}$ je operátor celkové hybnosti a m je celková hmotnost soustavy. Operátor celkové hybnosti komutuje s hamiltoniánem, z čehož vyplývá

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{p}}}{\mathrm{d}t} = 0.$$

Odtud dostáváme

$$\frac{\mathrm{d}^2\hat{\mathbf{r}}}{\mathrm{d}t^2} = 0$$

a

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle}{\mathrm{d}t^2} = 0.$$

To znamená, že střední poloha těžiště $\langle\mathbf{r}\rangle$ se pohybuje rovnoměrně přímočaře.

3. Napište obecné řešení jednorozměrné časové Schrödingerovy rovnice pro volnou částici.
Řešení
Řešení časové Schrödingerovy rovnice

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

hledáme v separovaném tvaru

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t).$$

Odtud dostáváme

$$i\hbar\frac{1}{\chi}\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} = E,$$

kde E je separační konstanta. Z požadavku konečnosti funkce $\varphi(x)$ pro $x \to \pm\infty$ vyplývá $E \geq 0$. Položíme-li $E = \hbar^2k^2/(2m)$, kde k je obecné reálné číslo, dostaneme

$$\varphi(x) = \mathrm{e}^{ikx}$$

a

$$\chi(t) = \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}Et},$$

Obecné řešení má tvar

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\mathrm{e}^{ikx-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\,\mathrm{d}k,$$

kde $c(k)$ závisí na k.

4. Nalezněte obecnou vlnovou funkci volné částice ve sférických souřadnicích. Určete vlnovou funkci pro $l = 0$ (s stav).
Řešení
Schrödingerova rovnice pro radiální část vlnové funkce R má tvar

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[\frac{\mathrm{d}(rR)}{\mathrm{d}r}\right] + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0,$$

kde

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

a μ je hmotnost částice. Po zavedení nové funkce

$$\chi = \sqrt{r}R$$

dostaneme

$$\chi'' + \frac{\chi'}{r} + \left[k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right]\chi = 0.$$

Řešením této rovnice jsou Besselovy funkce poločíselného řádu. Vzhledem k tomu, že vlnová funkce musí být pro $r \to 0$ konečná, může to být pouze Besselova funkce prvního druhu, takže dostaneme

$$R(k,r) = \frac{\text{konst}}{\sqrt{kr}}J_{l+1/2}(kr).$$

Obecné řešení můžeme psát ve tvaru

$$\psi(k,\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm}Y_{lm}(\theta,\varphi)\frac{1}{\sqrt{kr}}J_{l+1/2}(kr).$$

Pro $l = 0$ dostaneme

$$R(k,r) = \frac{N}{r}\sin kr.$$

Vzhledem k tomu, že jde o spojité spektrum, je třeba provést normování na δ-funkci

$$\int_0^{\infty} R^*(k',r)R(k,r)r^2\,\mathrm{d}r = \delta(k-k').$$

Odtud dostaneme

$$N = \sqrt{\frac{2}{\pi}}.$$

5. Určete hustotu toku pravděpodobnosti pro
a) volnou částici popsanou rovinnou vlnou

$$\psi = A\mathrm{e}^{(Et-\sqrt{2mE}x)/(i\hbar)},$$

b) vlnovou funkci

$$\psi = A\mathrm{e}^{(Et-\sqrt{2mE}x)/(i\hbar)} + B\mathrm{e}^{(Et+\sqrt{2mE}x)/(i\hbar)}.$$

Řešení
a) Dosazením do vztahu

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\psi\right)$$

dostaneme

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{-\sqrt{2mE}}{i\hbar}\psi - \frac{\sqrt{2mE}}{i\hbar}\psi^*\psi\right) = \frac{\sqrt{2mE}}{m}|\psi|^2 = \frac{p}{m}|\psi|^2 = v|\psi|^2.$$

b) Podobně odvodíme

$$j = \frac{\sqrt{2mE}}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = v\left(|A|^2 - |B|^2\right).$$

První člen odpovídá pohybu částice v kladném směru osy x, druhý odpovídá pohybu v opačném směru. Pokud je $|A| = |B|$, je tok hustoty pravděpodobnosti roven nule.

6. V čase $t = 0$ je vlnová funkce volné částice rovna

$$\psi(x, 0) = N\mathrm{e}^{-x^2/(2a^2)+ik_0x},$$

kde a a k_0 jsou reálná čísla. Určete normovací koeficient N a hustotu toku pravděpodobnosti j. Dále určete charakteristický rozměr oblasti, v níž je částice lokalizována.
Řešení
Normovací koeficient N je dán podmínkou $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2\,\mathrm{d}x = 1$. Po dosazení vlnové funkce ψ dostáváme

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2/a^2}\,\mathrm{d}x = |N|^2 a\sqrt{\pi} = 1.$$

Odtud vyplývá, že můžeme položit

$$N = \left(1/a\sqrt{\pi}\right)^{1/2}.$$

Hustota pravděpodobnosti je rovna

$$\rho(x,0) = |\psi(x,0)|^2 = |N|^2 \mathrm{e}^{-x^2/a^2}.$$

Tato funkce má maximum v bodě $x = 0$ a rychle klesá s růstem $|x| > a$. Oproti maximu klesne hustota pravděpodobnosti v bodech $x = \pm a$ na $1/\mathrm{e}$ své původní hodnoty.

Hustotu toku pravděpodobnosti vypočítáme podle vztahu

$$j(x,0) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} - \psi \frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\right) = |N|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \mathrm{e}^{-x^2/a^2} = \frac{\hbar k_0}{m}\rho.$$

Tento výraz má klasickou analogii v teorii kontinua. Faktor ρ je určen reálnou částí vlnové funkce a výraz $\hbar k_0/m$ (analogie klasické rychlosti částice) je dán imaginární částí vlnové funkce.

7. Nalezněte Fourierův obraz vlnové funkce z příkladu 6. Určete šířku vlnového balíku v prostoru Fourierova obrazu (k-prostoru).
Řešení
Vlnovou funkci $\psi(x,0)$ zapíšeme ve tvaru rozvoje do rovinných vln

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \mathrm{e}^{ikx}\, \mathrm{d}k.$$

Odtud vyplývá

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) \mathrm{e}^{-ikx}\, \mathrm{d}x = \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i(k_0-k)x - x^2/(2a^2)}\, \mathrm{d}x.$$

Po doplnění výrazu v exponenciále na úplný čtverec dostaneme

$$c(k) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-a^2(k_0-k)^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-[x - i(k_0-k)a^2]^2/(2a^2)}\, \mathrm{d}x = Na\mathrm{e}^{-a^2(k_0-k)^2/2}.$$

Pološířka vlnového balíku v k-prostoru je rovna $\Delta k = \sqrt{2}/a$. Pravděpodobnost, že částice má vlnový vektor k v intervalu $(k, k + \mathrm{d}k)$ je rovna

$$|c(k)|^2\, \mathrm{d}k = N^2 a^2 \mathrm{e}^{-a^2(k_0-k)^2}\, \mathrm{d}k.$$

8. Pro částici z příkladu 6 vypočítejte střední hodnotu souřadnice $\langle \hat{x} \rangle$ a impulzu $\langle \hat{p} \rangle$, kde $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$.
Řešení

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi|^2\, \mathrm{d}x = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{e}^{-x^2/a^2}\, \mathrm{d}x = 0,$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\hbar k_0 + \frac{i\hbar x}{a^2}\right) \psi\, \mathrm{d}x = \hbar k_0.$$

9. Pro částici z příkladu 6 vypočítejte $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$ a $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$, kde $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$. Ověřte platnost Heisenbergových relací neurčitosti.
Řešení
Podle příkladu 8 je $\langle x\rangle = 0$, a proto platí

$$\Delta\hat{x} = x - \langle x\rangle = x.$$

Odtud vyplývá

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi|^2\,\mathrm{d}x = |N|^2\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-x^2/a^2}\,\mathrm{d}x = \frac{|N|^2}{2}\sqrt{\pi}a^3.$$

Po dosazení $N = (1/a\sqrt{\pi})^{1/2}$ dostaneme

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \frac{a^2}{2}.$$

Výpočet $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$ můžeme provést buď v souřadnicové reprezentaci s použitím operátoru $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$, nebo v impulzové reprezentaci. V impulzové reprezentaci využijeme vztahu $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \hbar^2\langle(k-k_0)^2\rangle$ a rozdělení $|c(k)|^2\,\mathrm{d}k$ z příkladu 7 znormujeme. Normovanou hustotu pravděpodobnosti v k-prostoru budeme předpokládat ve tvaru

$$B\mathrm{e}^{-(k-k_0)^2a^2}.$$

Normovací koeficient vypočteme z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty} B\mathrm{e}^{-(k-k_0)^2a^2}\,\mathrm{d}k = 1,$$

která vede na $B = a/\sqrt{\pi}$. Nyní dostáváme

$$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = B\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}(k-k_0)^2\mathrm{e}^{-(k-k_0)^2a^2}\,\mathrm{d}k =$$

$$= B\hbar^2\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(a^2)}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-(k-k_0)^2a^2}\,\mathrm{d}k\right] = B\hbar^2\frac{\sqrt{\pi}}{2a^3} = \frac{\hbar^2}{2a^2}.$$

Vidíme, že při zvětšování a^2 roste lineárně $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$, zatímco $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$ lineárně klesá.

Relace neurčitosti jsou v tomto případě splněny s rovnítkem

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}.$$

10. Pro částici s vlnovou funkcí $\psi(x,0)$ podle příkladu 6 určete časovou závislost vlnové funkce $\psi(x,t)$ pro $t > 0$.

Řešení
Vlnová funkce $\psi(x,t)$ je dána vztahem

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}} \, dk.$$

Po dosazení $c(k)$ z příkladu 7 dostaneme

$$\psi(x,t) = \frac{Na}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m} - \frac{a^2 k^2}{2} + a^2 k k_0 - \frac{a^2 k_0^2}{2} \right) dk.$$

Po doplnění argumentu exponenciály na úplný čtverec lze tento integrál převést do tvaru Poissonova integrálu

$$\psi(x,t) = \frac{Na}{\sqrt{2\pi}} e^{-a^2 k_0^2/2} \exp\left[\frac{\left(k_0 + \frac{ix}{a^2}\right)^2}{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}} \frac{a^2}{2} \right] \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{a^2}{2} \left(k\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}} - \frac{k_0 + \frac{ix}{a^2}}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \right)^2 \right] dk.$$

Po vyčíslení tohoto integrálu dostaneme

$$\psi(x,t) = \frac{N}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp\left[-\frac{x^2 - 2ia^2 x k_0 + \frac{i\hbar a^2 k_0^2}{m} t}{2\left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right) a^2} \right]$$

nebo po úpravě

$$\psi(x,t) = N \frac{\sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \times$$

$$\times \exp\left\{ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{2a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} + i \left[\frac{k_0 x + \frac{\hbar t}{ma^2} \frac{x^2}{2a^2} - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t}{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \right] \right\}.$$

11. Pro částici s vlnovou funkcí $\psi(x,t)$ podle příkladu 10 určete hustotu pravděpodobnosti $\rho(x,t)$ a hustotu toku pravděpodobnosti $j(x,t)$.
Řešení
S využitím výsledků příkladu 10 dostaneme

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{|N|^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left\{ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} \right\}.$$

Tento výraz ukazuje, že maximum hustoty pravděpodobnosti se pohybuje rychlostí $\hbar k_0/m$ a pološířka odpovídající křivky roste s časem (vlnový balík se rozplývá)

$$a' = a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}.$$

Hustota toku pravděpodobnosti se rovná

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\psi\frac{ik_0 - \frac{x}{a^2}}{1+\frac{i\hbar}{ma^2}t} - \psi^*\psi\frac{-ik_0 - \frac{x}{a^2}}{1-\frac{i\hbar t}{ma^2}}\right) = \rho\frac{\hbar k_0}{m}\frac{1+\frac{\hbar t}{ma^2}\frac{x}{a^2k_0}}{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}.$$

21.8 Potenciálová jáma

1. Stav částice v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě se stěnami v bodech $x = 0$ a $x = a$ je v $t = 0$ popsán vlnovou funkcí $\psi(x) = Nx(a-x)$. Určete pro tento stav rozdělení pravděpodobností energií stacionárních stavů E_n, střední hodnotu energie $\langle E\rangle$ a střední kvadratickou odchylku $\langle(\Delta E)^2\rangle$.
Řešení
Nejprve je třeba nalézt normovací faktor N. Z normovací podmínky

$$N^2\int_0^a x^2(a-x)^2\,\mathrm{d}x = 1$$

dostaneme

$$N^2 = \frac{30}{a^5}.$$

Dále je nutné rozložit vlnovou funkci ψ do báze vlastních funkcí

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1,2,3,\ldots.$$

Dostáváme

$$c_n = \int_0^a \psi_n^*(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x = N\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}\,\mathrm{d}x =$$

$$= N\sqrt{\frac{2}{a}}\left\{a\left[-\frac{a^2}{n\pi}(-1)^n\right] + \frac{a^3}{n\pi}(-1)^n - \frac{2a^3}{(n\pi)^3}\left[(-1)^n - 1\right]\right\} =$$

$$= N\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{2a^3}{(n\pi)^3}\left[1-(-1)^n\right].$$

Odtud vyplývá pravděpodobnost naměření energie E_n ve stavu ψ

$$|c_n|^2 = \frac{240}{(n\pi)^6}\left[1-(-1)^n\right]^2,$$

která je různá od nuly pouze pro n liché. Například pravděpodobnost naměření energie E_1 je blízká jedné

$$|c_1|^2 = \frac{240}{\pi^6}2^2 \approx 0,9986.$$

Střední hodnotu energie $\langle E\rangle$ vypočítáme nejjednodušeji pomocí vztahu

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H}\psi\,\mathrm{d}x = N^2 \int_0^a x(a-x)[-\hbar^2/(2m)](\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2)[x(a-x)]\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{5\hbar^2}{ma^2} = \frac{10}{\pi^2}E_1,$$

kde

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

Střední energie je tedy o něco vyšší než E_1.

Střední hodnotu $\langle E^2\rangle$ vypočítáme podobně

$$\langle E^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H}^2\psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{H}\psi)^*(\hat{H}\psi)\,\mathrm{d}x =$$

$$= N^2 \int_0^a \left\{[-\hbar^2/(2m)](\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2)\,[x(a-x)]\right\}^2 \mathrm{d}x = \left(\frac{\hbar^2}{m}N\right)^2 a = \frac{30\hbar^4}{m^2a^4}.$$

Odtud vyplývá

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \frac{5\hbar^4}{m^2a^4}.$$

2. Elektron je v pravoúhlé nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě o šířce $a = 0,1$ nm. Určete průměrnou sílu na stěny jámy za předpokladu, že elektron je v základním stavu.

Řešení

Předpokládejme obecněji, že hamiltonián soustavy závisí na parametru α

$$\hat{H} = \hat{H}(\alpha).$$

Pak na α závisí i energie

$$E = E(\alpha).$$

Vypočítáme-li derivaci energie podle α, dostaneme

$$\frac{\partial E}{\partial\alpha} = \frac{\partial\int\psi^*\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x}{\partial\alpha} = \int\frac{\partial\psi^*}{\partial\alpha}\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x + \int\psi^*\frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha}\psi\,\mathrm{d}x + \int\psi^*\hat{H}\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\,\mathrm{d}x =$$

$$= E\frac{\partial}{\partial\alpha}\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}x + \int\psi^*\frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha}\psi\,\mathrm{d}x = \int\psi^*\frac{\partial\hat{H}}{\partial\alpha}\psi\,\mathrm{d}x,$$

kde jsme využili Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

a toho, že vlnová funkce je normována nezávisle na α. Derivaci energie podle parametru lze tedy určit pomocí střední hodnoty derivace hamiltoniánu podle parametru (tzv. Hellmanův–Feynmanův teorém).

Nyní se vrátíme k našemu příkladu. Průměrná síla na stěny jámy je dána vztahem

$$F = -\frac{\partial E_n}{\partial a}.$$

V našem případě je energie rovna

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

což vede na

$$F = \frac{h^2 n^2}{ma^3}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Pro základní stav $n = 1$ dostáváme $F \approx 0,5 \times 10^{-6}$ N.

3. Určete maticové elementy operátoru dipólového momentu qx, impulzu $\hat{p}_x$ a kvadrátu souřadnice x^2 v bázi vlastních funkcí ψ_n částice v nekonečně hluboké jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě se stěnami v bodech $x = -a/2$ a $x = a/2$.

Řešení

Vlastní stavy částice v jámě mají tvar

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \ldots,$$

a

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \ldots.$$

Maticový element operátoru dipólového momentu $\langle \psi_m | qx | \psi_n \rangle$ je roven nule s vyjímkou případů, kdy funkce ψ_m a ψ_n mají různou paritu. Je-li m sudé a n liché, dostaneme

$$\langle \psi_m | qx | \psi_n \rangle = \frac{4q}{a} \int_0^{a/2} x \sin \frac{m\pi x}{a} \cos \frac{n\pi x}{a} \, \mathrm{d}x.$$

Zavedeme-li $y = \pi x/a$, obdržíme

$$\langle \psi_m | qx | \psi_n \rangle = \frac{2aq}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \{\sin[(m+n)y] + \sin[(m-n)y]y\} \, \mathrm{d}y.$$

Použijeme-li vztah

$$\int_0^{\pi/2} y \sin[(m+n)y] \, \mathrm{d}y = \frac{\sin[(m+n)\pi/2]}{(m+n)^2} = \frac{(-1)^{\frac{m+n-1}{2}}}{(m+n)^2},$$

dostaneme

$$\langle \psi_m | qx | \psi_n \rangle = (-1)^{\frac{m-n+1}{2}} \frac{8aqmn}{\pi^2 (m^2 - n^2)^2}.$$

Integrál $\langle\psi_m|x^2|\psi_n\rangle$ je různý od nuly jenom tehdy, mají-li obě funkce stejnou paritu. Jsou-li m i n sudá čísla, dostaneme

$$\langle\psi_m|x^2|\psi_n\rangle = \frac{4}{a}\int_0^{a/2} x^2 \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{2a^2}{\pi^3}\int_0^{\pi/2} y^2\{\cos[(m-n)y] - \cos[(m+n)y]\}\,\mathrm{d}y.$$

Použijeme-li výsledek

$$\int_0^{\pi/2} y^2\cos[(m-n)y]\,\mathrm{d}y = \frac{\pi\cos[(m-n)\pi/2]}{(m-n)^2} = \frac{\pi(-1)^{\frac{m-n}{2}}}{(m-n)^2},$$

obdržíme

$$\langle\psi_m|x^2|\psi_n\rangle = (-1)^{\frac{m-n}{2}}\frac{8a^2mn}{\pi^2(m^2-n^2)^2}.$$

Pro m a n lichá platí podobně

$$\langle\psi_m|x^2|\psi_n\rangle = \frac{4a^2(m^2+n^2)}{\pi^2(m^2-n^2)^2}.$$

Maticový element $\langle\psi_m|\hat{p}_x|\psi_n\rangle$ je různý od nuly pro funkce s různou paritou. Pro m sudé a n liché dostáváme

$$\langle\psi_m|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = -\frac{2i\hbar}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\sin\frac{m\pi x}{a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos\frac{n\pi x}{a}\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{2mi\hbar}{a}\int_0^{\pi/2}\{\cos[(m-n)y] - \cos[(m+n)y]\}\,\mathrm{d}y = (-1)^{m-n}\frac{4imn\hbar}{a(m^2-n^2)}.$$

Je-li m liché a n sudé, dostaneme stejný výsledek.

4. Časově závislou vlnovou funkci částice v jednorozměrné potenciálové jámě na intervalu $0 \le x \le a$ můžeme zapsat ve tvaru

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{E_n t/(i\hbar)}\psi_n(x),$$

kde

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}.$$

Určete střední hodnotu souřadnice $\langle x\rangle$ pro případ $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$ a $c_n = 0$ pro $n > 2$.

Řešení

Výpočtem dostáváme

$$\langle x\rangle = \int_0^a \psi(x,t)^* x\psi(x,t)\,\mathrm{d}x = \frac{I_1 + I_2 + 2I_3\cos[(E_2-E_1)t/\hbar]}{a},$$

kde

$$I_1 = \int_0^a x \sin^2(\pi x/a)\,\mathrm{d}x = \frac{a^2}{4},$$

$$I_2 = \int_0^a x \sin^2(2\pi x/a)\,\mathrm{d}x = \frac{a^2}{4}$$

a

$$I_3 = \int_0^a x \sin(\pi x/a)\sin(2\pi x/a)\,\mathrm{d}x = -\frac{8}{9}\frac{a^2}{\pi^2}.$$

Výsledkem je

$$\langle x\rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}.$$

Střední hodnota souřadnice osciluje s frekvencí $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$.

21.9 Relace neurčitosti

1. Ukažte, že při Brownově pohybu v kapalině lze zanedbat důsledky relací neurčitosti a lze proto použít klasickou mechaniku. Předpokládejte, že pohybující se částice má hmotnost $m = 10^{-13}$ kg, rozměr $l = 10^{-6}$ m, poloha částice je určena s přesností $\Delta x = l/100$ a rychlost částice je $v_x = 10^{-6}$ m s^{-1}.
   Řešení
   Vyjdeme z relací neurčitosti

   $$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

   nebo pomocí rychlosti

   $$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}.$$

   Odtud dostáváme

   $$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x\, m} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-8}10^{-13}}\,\mathrm{m\,s^{-1}} = 10^{-13}\,\mathrm{m\,s^{-1}}.$$

   Neurčitost rychlosti je 10^{-13} m s^{-1}, což je o 7 řádů méně, než je velikost rychlosti. Důsledky relací neurčitosti lze zanedbat.

2. Předpokládejte, že atom vodíku je v základním stavu. Pokud bychom chtěli zjistit, po jaké klasické trajektorii se elektron v atomu vodíku pohybuje, museli bychom v krátkých časových intervalech měřit jeho polohu s nepřesností d mnohem menší, než jsou rozměry atomu, a přitom by atom musel zůstávat v základním stavu. Ukažte, že to je podle kvantové mechaniky nemožné, neboť už první měření změní stav atomu tak, že nebude v základním stavu.
   Řešení
   Předpokládejme, že rozměr atomu je dán Bohrovým poloměrem $a_\mathrm{B} \approx 0,0529$ nm. Když změříme polohu elektronu s přesností $d \ll a_\mathrm{B}$, dostaneme elektron do stavu, v němž je neurčitost jeho polohy rovna $\Delta x \approx d$. Za předpokladu,

že střední impulz elektronu v tomto stavu je nulový, dostaneme podle relací neurčitosti

$$p \approx \frac{\hbar}{d}.$$

Odpovídající kinetická energie je rovna

$$T \approx \frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{2m_e}\left(\frac{\hbar}{a_B}\right)^2\left(\frac{a_B}{d}\right)^2.$$

Po dosazení $(\hbar/a_B)^2/(2m_e) = 1$ Ry dostaneme

$$T \approx \left(\frac{a_B}{d}\right)^2 \mathrm{Ry}.$$

Je-li např. $d = a_B/10$, je tato energie v absolutní hodnotě asi $100\times$ větší, než je energie atomu v základním stavu (–1 Ry). Při takovém měření tedy s velikou pravděpodobností dojde k ionizaci atomu a trajektorii elektronu se nepodaří změřit.

3. Nalezněte vlnovou funkci $\psi(x)$, která popisuje stav částice odpovídající rovnosti v Heisenbergových relacích neurčitosti $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle \geq \hbar^2/4$, kde $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$.
Řešení
Rovnost ve Schwarzově nerovnosti $(u,u)(v,v) \geq |(u,v)|^2$ platí pouze v případě kolineárních vektorů u a v. Musí proto platit

$$[a(x-x_0) - i(\hat{p}-p_0)]\psi = 0,$$

kde a je konstanta a $x_0 = \langle x\rangle$ a $p_0 = \langle\hat{p}\rangle$. Po úpravě dostáváme

$$\left[a(x-x_0) - \hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + ip_0\right]\psi = 0.$$

Zvolíme-li vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{g(x)},$$

dostaneme

$$a(x-x_0) - \hbar\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} + ip_0 = 0.$$

Řešení této diferenciální rovnice má tvar

$$g(x) = \frac{a}{2\hbar}(x-x_0)^2 + i\frac{p_0}{\hbar}x + \mathrm{konst.}$$

Výsledkem je vlnová funkce ve tvaru

$$\psi(x) = N\mathrm{e}^{a(x-x_0)^2/(2\hbar)+ip_0x/\hbar},$$

kde N je normovací konstanta a musí platit $a < 0$. Takové stavy, které jsou příkladem tzv. koherentních stavů, jsou nejvhodnější k přenosu signálu, neboť mají nejmenší možnou hodnotu součinu $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$.

4. Uvažujme stacionární stavy lineárního harmonického oscilátoru s hamiltoniánem
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$
Pomocí komutační relace
$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$
lze odvodit vztah
$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}.$$
Tomu odpovídají relace neurčitosti
$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4m^2}\langle\hat{p}\rangle^2.$$
Pro stacionární stavy mají energie ostrou hodnotu, $\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle = 0$, takže by mělo platit $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle \to \infty$. To je však ve sporu s tím, že pro vázané stavy splňující normovací podmínku
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1$$
musí mít $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$ konečnou hodnotu. Kde je v této úvaze chyba?
Řešení
Navzdory tomu, že $[\hat{x}, \hat{H}] = i\hbar\hat{p}/m \neq 0$, pro uvažované stavy z důvodu symetrie platí $\langle\hat{p}\rangle = 0$ a na pravé straně uvedené relace neurčitosti je nula. Podobně lze postupovat i ve více dimenzích.

21.10 Lineární harmonický oscilátor

1. Určete amplitudu nulových kmitů matematického kyvadla s hmotností $m = 1$ kg a délkou $l = 1$ m pohybujícího se v gravitačním poli o zrychlení g.
Řešení
V bodech obratu pro kvantový harmonický oscilátor platí
$$\frac{m\omega^2 A^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2},$$
kde A je amplituda kmitů. Odtud dostáváme
$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$
Po dosazení frekvence kmitů
$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$$
a vyčíslení dostaneme
$$A \approx 5,8 \times 10^{-18} \text{ m}.$$
Amplituda kmitů je z makroskopického hlediska zanedbatelná.

2. Určete energie a vlnové funkce stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru vloženého do vnějšího homogenního elektrického pole o intenzitě $\mathcal{E}$, má-li kmitající částice náboj q.
Řešení
Vyjdeme ze Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\frac{m\omega^2}{2}x^2 - q\mathcal{E}x\right)\psi = E\psi.$$

Doplníme-li potenciální energii na úplný čtverec, dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x'^2} + \frac{m\omega^2}{2}x'^2\psi = E'\psi,$$

kde

$$x' = x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$$

a

$$E' = E + \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.$$

Výsledná řešení lze psát ve tvaru

$$\psi_n = C_n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'$$

a

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

3. Lineární harmonický oscilátor je ve stacionárním stavu s kvantovým číslem n. Určete střední hodnotu $\langle x^2\rangle_n$ a střední hodnotu potenciální energie $\langle V\rangle_n$ v tomto stavu.
Řešení
Stacionární stavy oscilátoru jsou určeny vlnovou funkcí

$$\psi_n = C_n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

a $H_n(\xi)$ jsou Hermitovy polynomy. Máme vypočítat

$$\langle x^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 x^2 \,\mathrm{d}x = C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} H_n^2(\xi)\xi^2 \,\mathrm{d}\xi.$$

Nahradíme-li jeden z Hermitových polynomů vztahem

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$$

a integrujeme-li n-krát per partes, dostaneme

$$\langle x^2 \rangle_n = C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} (\xi^2 H_n)\, d\xi =$$

$$= C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n(\xi^2 H_n)}{d\xi^n}\, d\xi.$$

Dále dostáváme

$$\frac{d^n(\xi^2 H_n)}{d\xi^n} = \frac{d^n}{d\xi^n}\left(a_n \xi^{n+2} + a_{n-2}\xi^n + \cdots\right) = a_n \frac{(n+2)!}{2!}\xi^2 + a_{n-2} n!.$$

Pro Hermitovy polynomy platí

$$a_n = 2^n$$

a

$$a_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{4} a_n.$$

Po použití integrálů

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi = \sqrt{\pi}$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2}\, d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

dostaneme

$$\langle x^2 \rangle_n = C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \left[\frac{(n+2)!}{2} 2^n \frac{\sqrt{\pi}}{2} - 2^n \frac{n(n-1)}{4} n! \sqrt{\pi}\right] = \frac{\hbar}{m\omega}(n + 1/2).$$

Výsledkem je

$$\langle V \rangle_n = \frac{m\omega^2}{2} \langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{2}(n + 1/2) = \frac{E_n}{2}.$$

Střední hodnota potenciální energie $\langle V \rangle_n$ je rovna polovině celkové energie E_n.

4. Pro lineární harmonický oscilátor s energií $(7/2)\hbar\omega$ určete střední hodnotu kinetické energie $\langle \hat{T} \rangle$.
Řešení
Pomocí vztahu

$$E_n = \langle \hat{T} \rangle_n + \langle V \rangle_n$$

a výsledku předcházejícího příkladu dostaneme

$$\langle \hat{T} \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{2}(n + 1/2) = \frac{E_n}{2},$$

kde dosadíme $n = 3$.

Tento výsledek lze získat i přímým výpočtem

$$\langle \hat{T} \rangle_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2 dx.$$

Pro $n = 3$ použijeme funkci

$$\psi_3 = \sqrt{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\frac{1}{2^3\,3!}}\, e^{-\xi^2/2} H_3(\xi),$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

a

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi.$$

Přejdeme-li k integrační proměnné ξ, dostaneme

$$\langle \hat{T} \rangle_3 = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^3\,3!}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\xi^2/2}(8\xi^3 - 12\xi)\right]\right\}^2 d\xi =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}\,3!}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}(4\xi^8 - 36\xi^6 + 93\xi^4 - 54\xi^2 + 9)\, d\xi.$$

Použijeme-li nyní výsledek

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^{2n} e^{-\alpha\xi^2}\, d\xi = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}},$$

obdržíme

$$\langle \hat{T} \rangle_3 = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}\,3!}\frac{21}{2}\sqrt{\pi} = \frac{1}{2}\hbar\omega(3 + 1/2).$$

5. Nalezněte energie a vlnové funkce stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru v impulzové reprezentaci.
   Řešení
   Schrödingerova rovnice má v impulzové reprezentaci tvar

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)^2\right]\psi(p) = E\psi(p).$$

Zavedeme-li bezrozměrnou proměnnou

$$\eta = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

a položíme-li

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

dostaneme stejnou rovnici jako v souřadnicové reprezentaci

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\eta^2} + (\lambda - \eta^2)\psi = 0,$$

avšak v proměnné η. Odtud vyplývají energie

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

a vlnové funkce

$$\psi_n(p) = N_n H_n(\eta) \mathrm{e}^{-\eta^2/2}.$$

6. Pro lineární harmonický oscilátor v základním stavu s vlnovou funkcí

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\alpha x^2/2},$$

kde

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar},$$

vypočítejte pravděpodobnost nalezení částice mimo klasickou oblast.
Řešení
Máme určit pravděpodobnost nalezení částice v oblasti

$$E < V(x),$$

tj.

$$\frac{\hbar\omega}{2} < \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Odtud vyplývá, že neklasická oblast je dána vztahem

$$|x| > \sqrt{\frac{1}{\alpha}}.$$

Hledaná pravděpodobnost je rovna

$$P = \int_{|x|>1/\sqrt{\alpha}} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{1/\sqrt{\alpha}}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \, \mathrm{d}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{\infty} \mathrm{e}^{-y^2} \, \mathrm{d}y.$$

Po numerickém vyčíslení posledního integrálu dostaneme pravděpodobnost nalezení částice v neklasické oblasti asi 16 %.

7. Z relací neurčitosti určete spodní mez k energii lineárního harmonického oscilátoru.
Řešení
Vždy lze zvolit souřadnou soustavu, pro niž $\langle \hat{x} \rangle = 0$ a $\langle \hat{p} \rangle = 0$, kde $\hat{p} = -i\hbar(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$. Potom můžeme psát

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right\rangle = \frac{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle.$$

Ze vztahu

$$(\sqrt{a} - \sqrt{b})^2 \geq 0$$

plyne

$$a + b \geq 2\sqrt{ab}.$$

V našem případě to znamená, že platí

$$\frac{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \geq \sqrt{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle}\, \omega.$$

Uvážíme-li, že podle relací neurčitosti platí nerovnost

$$\sqrt{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle} \geq \hbar/2,$$

vidíme, že energie harmonického oscilátoru musí splňovat podmínku

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \geq \hbar\omega/2.$$

8. Dvě částice na sebe navzájem působí pružnou silou $F = k(x_1 - x_2)$ a pohybují se volně podél osy x (jednorozměrný pohyb). Nalezněte vlastní funkce a vlastní energie tohoto systému.
Řešení
Nejdříve zavedeme souřadnici těžiště X a relativní souřadnici $x = x_1 - x_2$. Po separaci proměnných dostaneme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi = N \mathrm{e}^{-PX/(i\hbar)} \mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} x,$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}},$$

P je celkový impulz, m_1 a m_2 jsou hmotnosti částic a μ je redukovaná hmotnost. Celková energie je rovna součtu energie translačního pohybu systému jako celku a energie harmonického oscilátoru s redukovanou hmotností μ

$$E = \frac{P^2}{2(m_1 + m_2)} + \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

9. Dvě částice s hmotností m pohybující se podél osy x na sebe vzájemně působí elastickou silou $F = -kx$. Navíc je každá z částic přitahována k bodu $x = 0$ rovněž elastickou silou, ale s jinou konstantou pružnosti κ. Určete energie a vlnové funkce stacionárních stavů tohoto systému.

Řešení

Potenciální energii v této úloze můžeme psát ve tvaru

$$V(x_1, x_2) = \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{2}\kappa(x_1^2 + x_2^2).$$

Zavedeme-li souřadnici těžiště X a relativní souřadnici x

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2},$$

$$x = x_1 - x_2,$$

dostaneme Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{M\Omega^2}{2}X^2\psi + \frac{\mu\omega^2}{2}x^2\psi = E\psi,$$

kde $M = 2m$ je celková hmotnost, $\mu = m/2$ je redukovaná hmotnost,

$$\Omega = \sqrt{\frac{\kappa}{M}}$$

a

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa + 2k}{2\mu}}.$$

Po separaci proměnných

$$\psi(x_1, x_2) = \varphi(X)\chi(x)$$

dostaneme Schrödingerovy rovnice pro dva neinteragující oscilátory

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}X^2} + \frac{M\omega^2}{2}X^2\varphi = E_1\varphi$$

a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mu\omega^2}{2}x^2\chi = E_2\chi,$$

kde

$$E = E_1 + E_2.$$

Výsledné řešení lze psát ve tvaru

$$\psi_{n_1,n_2}(X, x) = N\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_{n_1}(\xi)\mathrm{e}^{-\tau^2/2}H_{n_2}(\tau),$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}}X,$$

$$\tau = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x$$

a N je normovací konstanta. Odpovídající energie jsou rovny

$$E_{n_1,n_2} = \hbar\Omega(n_1 + 1/2) + \hbar\omega(n_2 + 1/2), \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \ldots.$$

10. Předpokládejme, že vlnová funkce $\psi(x,t)$ je řešením časové Schrödingerovy rovnice pro lineární harmonický oscilátor s hamiltoniánem

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

Ukažte, že střední hodnota souřadnice

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)x\psi(x,t)\,\mathrm{d}x$$

osciluje okolo počátku s úhlovou frekvencí ω.

Řešení

Časová změna $\langle\hat{x}\rangle$ a $\langle\hat{p}\rangle$ je podle Ehrenfestových rovnic rovna

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$$

a

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{p}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle.$$

S použitím těchto vztahů dostaneme rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\langle\hat{x}\rangle = 0.$$

Podobným způsobem lze odvodit i rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{p}\rangle}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\langle\hat{p}\rangle = 0.$$

11. Ukažte, že těžiště vlnového balíku

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\nu+1}}\sum_{j=-\nu}^{\nu} \psi_{n+j}(x)\mathrm{e}^{-i\omega(n+j+1/2)t}, \quad 0 < \nu \leq n,$$

sestrojeného z vlastních funkcí lineárního harmonického oscilátoru $\psi_n(x)$ se přibližně pohybuje podle zákonů klasické mechaniky. Ověřte, že vlnový balík se nerozplývá v čase. Proveďte přechod ke kvaziklasickému případu $n \gg \nu \gg 1$.

Řešení

Pro těžiště balíku dostáváme

$$\langle\hat{x}\rangle = \int \psi^*(x,t)x\psi(x,t)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{2\nu+1}\sum_{j,j'=-\nu}^{\nu}\int \psi^*_{n+j}(x)x\psi_{n+j'}(x)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-i\omega(j'-j)t}.$$

Zavedeme-li proměnnou

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/(m\omega)}}$$

a použijeme-li vztahy

$$2\xi H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi)$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} H_m(\xi)H_n(\xi)\,\mathrm{d}\xi = 2^n n!\sqrt{\pi}\,\delta_{mn},$$

dostaneme přibližný vztah platný pro $n \gg \nu \gg 1$

$$\langle\hat{x}\rangle = A\cos\omega t,$$

kde

$$A = \frac{a}{2\nu+1}\sum_{j=-\nu}^{\nu-1}\sqrt{\frac{2(n+j+1)}{2n+1}}$$

a

$$a = \sqrt{\frac{\hbar(2n+1)}{m\omega}}$$

je amplituda klasických kmitů. Odtud vyplývá, že $\langle x\rangle$ vyhovuje klasické pohybové rovnici lineárního harmonického oscilátoru

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2\langle\hat{x}\rangle = 0.$$

Po analogickém výpočtu $\langle\hat{x}^2\rangle$ dostaneme

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2 = \left(C^2 - \frac{A^2}{2}\right) + \left(B^2 - \frac{A^2}{2}\right)\cos 2\omega t,$$

kde

$$C^2 = \frac{a^2}{2}$$

a

$$B^2 = \frac{a^2}{2}\frac{1}{2\nu+1}\sum_{j=-\nu}^{\nu-2}\frac{\sqrt{(n+j+1)(n+j+2)}}{n+1/2}.$$

Vidíme, že střední hodnota $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$ osciluje okolo určité hodnoty a balík se s časem nerozplývá.

Při přechodu ke kvaziklasickému případu dostaneme

$$A \approx a\left(1 - \frac{1}{2\nu+1}\right),$$

$$B^2 \approx \frac{a^2}{2}\left(1 - \frac{2}{2\nu+1}\right),$$

tj.

$$\langle\hat{x}\rangle \approx a\cos\omega t$$

a

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle \approx \frac{a^2}{2\nu+1}.$$

S rostoucím počtem členů $2\nu+1$ ve vlnovém balíku klesá $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$ k nule.

21.11 Potenciálové bariéry

1. Ukažte, že při průchodu libovolnou jednorozměrnou potenciálovou bariérou je splněna podmínka

$$R + T = 1,$$

kde R je koeficient odrazu a T koeficient průchodu.

Řešení

Předpokládáme, že jinak libovolná potenciální energie $V(x)$ splňuje podmínky

$$\lim_{x\to\infty} V(x) = V_0 \geq 0$$

a

$$\lim_{x\to-\infty} V(x) = 0.$$

Vlnová funkce má proto tvar

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{i\kappa x}, \quad x \to \infty$$

a

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}, \quad x \to -\infty,$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

a

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Nyní využijeme rovnici kontinuity. V uvažovaném stacionárním případě hustota pravděpodobnosti i tok hustoty pravděpodobnosti nezávisí na čase

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial j}{\partial t} = 0,$$

takže pro hustotu toku pravděpodobnosti můžeme psát

$$\frac{\mathrm{d}j}{\mathrm{d}x} = 0.$$

To znamená, že hustota toku pravděpodobnosti je konstantní, $j =$ konst. Nyní dostáváme

$$j(x \to \infty) = \frac{\hbar\kappa|A|^2}{m}$$

a

$$j(x \to -\infty) = \frac{\hbar k}{m}(1 - |B|^2).$$

Odtud vyplývá

$$\frac{\kappa}{k}|A|^2 + |B|^2 = 1.$$

První člen je podíl hustot toků pravděpodobnosti prošlé a dopadající vlny, tzv. koeficient průchodu

$$T = \frac{\kappa}{k}|A|^2.$$

Druhý člen je roven podílu hustot toků pravděpodobnosti odražené a dopadající vlny, tj. koeficient odrazu

$$R = |B|^2.$$

2. Uvažujte tok částic o hmotnosti m a energii E pohybujících se podél kladného směru osy x proti pravoúhlému potenciálovému schodu ve tvaru $V = V_0$ pro $x > 0$ a $V = 0$ pro $x \leq 0$. Pro elektron může potenciálový schod představovat povrch pevné látky s výstupní prací rovnou velikosti schodu. Jiným příkladem může být průlet elektronu dvěma za sebou umístěnými kovovými trubicemi, z nichž první je uzemněná a druhá je připojena na záporné napětí vůči zemi. Jaká relativní část částic se od potenciálového schodu odrazí pro $V_0 = 3E/4$?

Řešení

Schrödingerova rovnice má tvar

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad x \leq 0$$

a

$$\psi'' + \frac{k^2}{4}\psi = 0, \quad x > 0,$$

kde

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Řešení pro $x \le 0$ se na rozdíl od řešení pro $x > 0$ skládá z dopadající i odražené vlny

$$\psi = N\left(e^{ikx} + r e^{-ikx}\right), \quad x \le 0,$$

$$\psi = N s\, e^{ikx/2}, \quad x > 0.$$

Z podmínek spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodě $x = 0$ dostaneme

$$1 + r = s$$

a

$$k(1 - r) = ks/2,$$

což vede na $r = 1/3$ a $s = 4/3$. S použitím výsledků příkladu 1 pro $B = r$ a $A = s$ dostaneme koeficient odrazu $R = 1/9$ a koeficient průchodu $T = 8/9$. Na potenciálovém schodu se odrazí 1/9 částic.

3. Částice se pohybuje v kladném směru podél osy x v potenciálovém poli $V(x) = 0$ pro $x \le 0$ a $V(x) = V_0$ pro $x > 0$ (potenciálový schod). Pro oba případy $E < V_0$ a $E > V_0$ určete tvar vlnové funkce a vypočítejte koeficienty odrazu R a průchodu T.

Řešení

V oblasti I ($x \le 0$ a $V = 0$) má Schrödingerova rovnice tvar

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_I^2 \psi_I = 0,$$

kde

$$k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Její řešení lze psát jako lineární kombinaci

$$\psi_I = C_1 e^{ik_I x} + C_2 e^{-ik_I x}.$$

V oblasti II ($x > 0$ a $V = V_0$) nabývá Schrödingerova rovnice tvar

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k_{II}^2 \psi_{II} = 0,$$

kde

$$k_{II}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2},$$

přičemž $k_{II}^2 > 0$ pro $E > V_0$ a $k_{II}^2 < 0$ pro $E < V_0$. Její řešení lze psát ve tvaru

$$\psi_{II} = C_3 e^{ik_{II} x} + C_4 e^{-ik_{II} x}.$$

Sešívací podmínky v bodě $x = 0$ vedou na rovnice

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0),$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{I}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0},$$

tj. na

$$C_1 + C_2 = C_3 + C_4,$$

$$ik_{\mathrm{I}}(C_1 - C_2) = ik_{\mathrm{II}}(C_3 - C_4).$$

To znamená, že čtyři konstanty $C_1, \ldots, C_4$ musí vyhovovat dvěma posledním rovnicím a normovací podmínce. Jednu konstantu lze proto zvolit libovolně. Vzhledem k zadání lze v oblasti II očekávat pro $E > V_0$ pouze částici pohybující se ve směru kladné osy x s impulzem $p = \hbar k_{\mathrm{II}} > 0$. Pro $E > V_0$ můžeme proto položit $C_4 = 0$. Je-li $E < V_0$, kdy $k_{\mathrm{II}} = i\alpha$, $\alpha > 0$, funkce $\exp(-ik_{\mathrm{II}}x)$ se chová jako funkce $\exp(\alpha x)$, která diverguje pro $x \to \infty$. Pro $E < V_0$ je tedy nutné předpokládat $C_4 = 0$. Sešívací podmínky vedou na rovnice

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{k_{\mathrm{I}} - k_{\mathrm{II}}}{k_{\mathrm{I}} + k_{\mathrm{II}}}$$

a

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{2k_{\mathrm{I}}}{k_{\mathrm{I}} + k_{\mathrm{II}}}.$$

Nyní určíme koeficienty odrazu a průchodu z poměrů odpovídajících hustot toku pravděpodobnosti

$$R = \left|\frac{j_{\text{odraz}}}{j_{\text{dopad}}}\right|$$

a

$$T = \left|\frac{j_{\text{průchod}}}{j_{\text{dopad}}}\right|.$$

Pro $E > V_0$ dostáváme

$$j_{\text{průchod}} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_{\mathrm{II}}^* \frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x} - \psi_{\mathrm{II}} \frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{II}}^*}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\hbar k_{\mathrm{II}}}{m}|C_3|^2.$$

Dále obdržíme

$$j_{\text{dopad}} = \frac{\hbar k_{\mathrm{I}}}{m}|C_1|^2$$

a

$$j_{\text{odraz}} = -\frac{\hbar k_{\mathrm{I}}}{m}|C_2|^2.$$

Výsledkem je

$$R = \left|\frac{k_{\mathrm{I}} - k_{\mathrm{II}}}{k_{\mathrm{I}} + k_{\mathrm{II}}}\right|^2$$

a

$$T = \left|\frac{4k_{\mathrm{I}}k_{\mathrm{II}}}{(k_{\mathrm{I}} + k_{\mathrm{II}})^2}\right|.$$

Pro $E < V_0$, kdy $k_{II} = i\alpha$, je funkce $\psi_{II} = C_3 \exp(-\alpha x)$ reálná a ubývá s rostoucím x. V takovém případě dostaneme $j_{\text{průchod}} = 0$ a koeficienty odrazu a průchodu jsou rovny

$$R = \left| \frac{k_I - i\alpha}{k_I + i\alpha} \right|^2 = 1$$

a

$$T = 0.$$

4. Vypočítejte koeficienty odrazu a průchodu částice pravoúhlou potenciálovou bariérou (valem) o výšce $V_0 > 0$ a šířce a, tj. $V(x) = V_0$ pro $0 \le x \le a$ a $V(x) = 0$ jinak.

Řešení

Podobně jako v příkladu 3 použijeme vzorce

$$R = \left| \frac{j_{\text{odraz}}}{j_{\text{dopad}}} \right|$$

a

$$T = \left| \frac{j_{\text{průchod}}}{j_{\text{dopad}}} \right|.$$

Označíme oblast I ($x < 0$, $V = 0$), oblast II ($0 \le x \le a$, $V = V_0$) a oblast III ($x > a$, $V = 0$). Dále označíme

$$k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

a

$$k_{II}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}.$$

Schrödingerova rovnice a její řešení mají v jednotlivých oblastech tvar

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_I^2 \psi_I = 0,$$

$$\psi_I = C_1 e^{ik_I x} + C_2 e^{-ik_I x},$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k_{II}^2 \psi_{II} = 0,$$

$$\psi_{II} = C_3 e^{ik_{II} x} + C_4 e^{-ik_{II} x}$$

a

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k_I^2 \psi_{III} = 0,$$

$$\psi_{III} = C_5 e^{ik_I x} + C_6 e^{-ik_I x}.$$

Protože v oblasti III nás zajímá pouze prošlá vlna, můžeme položit $C_6 = 0$.

Z podmínek spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodech $x = 0$ a $x = a$

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0),$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{I}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}$$

a

$$\psi_{\mathrm{II}}(a) = \psi_{\mathrm{III}}(a),$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi_{\mathrm{III}}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a}$$

dostaneme rovnice

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= C_3 + C_4, \\ ik_{\mathrm{I}}(C_1 - C_2) &= ik_{\mathrm{II}}(C_3 - C_4), \\ C_3\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{II}}a} + C_4\mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{II}}a} &= C_5\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{I}}a}, \\ ik_{\mathrm{II}}(C_3\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{II}}a} - C_4\mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{II}}a}) &= ik_{\mathrm{I}}C_5\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{I}}a}. \end{aligned}$$

Koeficienty odrazu a průchodu odvodíme pomocí vztahu pro hustotu toku pravděpodobnosti

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} - \psi\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\right).$$

Výsledkem je

$$j_{\mathrm{dopad}} = \frac{\hbar k_{\mathrm{I}}}{m}|C_1|^2,$$

$$j_{\mathrm{odraz}} = -\frac{\hbar k_{\mathrm{I}}}{m}|C_2|^2,$$

$$j_{\mathrm{průchod}} = \frac{\hbar k_{\mathrm{I}}}{m}|C_5|^2,$$

$$R = \left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2$$

a

$$T = \left|\frac{C_5}{C_1}\right|^2.$$

Položíme-li $C_5 = 1$, soustavu rovnic pro $C_1, \ldots, C_4$ můžeme napsat ve tvaru

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -\frac{k_{\mathrm{II}}}{k_{\mathrm{I}}} & \frac{k_{\mathrm{II}}}{k_{\mathrm{I}}} \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{ik_{\mathrm{II}}a} & \mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{II}}a} \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{ik_{\mathrm{II}}a} & -\mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{II}}a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathrm{e}^{ik_{\mathrm{I}}a} \\ \frac{k_{\mathrm{I}}}{k_{\mathrm{II}}}\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{I}}a} \end{pmatrix}.$$

Nyní určíme poměry koeficientů C_2/C_1 a C_5/C_1

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{\Delta_2}{\Delta_1},$$

$$\frac{C_5}{C_1} = \frac{\Delta}{\Delta_1},$$

kde

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -\frac{k_{II}}{k_I} & \frac{k_{II}}{k_I} \\ e^{ik_I a} & 0 & e^{ik_{II}a} & e^{-ik_{II}a} \\ \frac{k_I}{k_{II}} e^{ik_I a} & 0 & e^{ik_{II}a} & -e^{-ik_{II}a} \end{vmatrix} =$$

$$= 4e^{ik_I a}\left[\cos k_{II}a - i\frac{(k_I^2 + k_{II}^2)\sin k_{II}a}{2k_I k_{II}}\right],$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -\frac{k_{II}}{k_I} & \frac{k_{II}}{k_I} \\ 0 & e^{ik_I a} & e^{ik_{II}a} & e^{-ik_{II}a} \\ 0 & \frac{k_I}{k_{II}} e^{ik_I a} & e^{ik_{II}a} & -e^{-ik_{II}a} \end{vmatrix} = 2i\frac{e^{ik_I a}}{k_I k_{II}}(k_{II}^2 - k_I^2)\sin k_{II}a$$

a

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -\frac{k_{II}}{k_I} & \frac{k_{II}}{k_I} \\ 0 & 0 & e^{ik_{II}a} & e^{-ik_{II}a} \\ 0 & 0 & e^{ik_{II}a} & -e^{-ik_{II}a} \end{vmatrix} = 4.$$

Po dosazení těchto výsledků do vztahů pro R a T dostaneme pro $E > V_0 > 0$, kdy k_{II} je reálné,

$$R = \frac{(k_{II}^2 - k_I^2)^2 \sin^2 k_{II}a}{|2k_I k_{II}\cos k_{II}a - i(k_I^2 + k_{II}^2)\sin k_{II}a|^2} =$$

$$= \frac{(k_{II}^2 - k_I^2)^2 \sin^2 k_{II}a}{4k_I^2 k_{II}^2 + (k_{II}^2 - k_I^2)^2 \sin^2 k_{II}a}$$

a

$$T = \frac{4k_I^2 k_{II}^2}{4k_I^2 k_{II}^2 + (k_{II}^2 - k_I^2)^2 \sin^2 k_{II}a}.$$

Je vidět, že $R+T = 1$ a že pro $k_{II}a = n\pi$ dostáváme $T = 1$ a $R = 0$ (bariéra je průzračná). Tyto výsledky lze použít i v případě, že $V_0 < 0$, tj. částice prochází nad potenciálovou jámou.

Pro $E < V_0$ a $V_0 > 0$ dostaneme $k_{II} = i\beta$, kde β je reálné. Potom platí $\sin k_{II}a = i\sinh\beta a$ a koeficienty R a T mají tvar

$$R = \frac{(k_I^2 + \beta^2)^2 \sinh^2 \beta a}{4k_I^2\beta^2 + (k_I^2 + \beta^2)^2 \sinh^2 \beta a}$$

a

$$T = \frac{4k_I^2\beta^2}{4k_I^2\beta^2 + (k_I^2 + \beta^2)^2 \sinh^2 \beta a}.$$

Pro $\beta a \gg 1$ dostaneme

$$T \approx \frac{16k_I^2\beta^2}{(k_I^2 + \beta^2)^2} e^{-2\beta a}.$$

5. Vypočítejte koeficient průchodu T pravoúhlou bariérou podle posledního vzorce z příkladu 4 pro částici o hmotnosti $m = 1$ kg, rychlosti $v = 1$ m s^{-1}, šířce bariéry $a = 1$ m a potenciální energii $V_0 = 1$ J.
Řešení
Energie částice
$$E = \frac{mv^2}{2}$$
je rovna $E = 1/2$ J. S použitím vztahů $k_{\mathrm{I}} = \beta = 1/\hbar$ a výrazu pro T obdržíme
$$T \approx 4\mathrm{e}^{-2/\hbar} \approx 4 \times 10^{-8{,}2\times 10^{33}}.$$
V makroskopických případech je pravděpodobnost průchodu bariérou nepatrná.

6. Vyšetřete chování částice v potenciálovém poli $V(x) \to \infty$ pro $x < 0$, $V(x) = 0$ pro $0 \le x \le a$ (oblast I), $V(x) = V_0 > 0$ pro $a < x < b$ (oblast II) a $V(x) = 0$ pro $x \ge b$ (oblast III). Omezte se na případ energií $0 < E < V_0$.
Řešení
Vlnová funkce má v jednotlivých oblastech tvar
$$\psi_{\mathrm{I}} = C_1 \sin kx,$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = C_2\mathrm{e}^{-\kappa(x-a)} + D_2\mathrm{e}^{\kappa(x-a)},$$
$$\psi_{\mathrm{III}} = C_3\mathrm{e}^{ik(x-b)} + D_3\mathrm{e}^{-ik(x-b)},$$
kde
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$
a
$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$
Ze sešívacích podmínek v bodech $x = a$ a $x = b$ dostáváme
$$C_2 = \frac{C_1}{2}\left(\sin ka - \frac{k}{\kappa}\cos ka\right),$$
$$D_2 = \frac{C_1}{2}\left(\sin ka + \frac{k}{\kappa}\cos ka\right),$$
$$C_3 = \frac{C_2}{2}\mathrm{e}^{-\kappa c}\left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) + \frac{D_2}{2}\mathrm{e}^{\kappa c}\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right),$$
$$D_3 = \frac{C_2}{2}\mathrm{e}^{-\kappa c}\left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) + \frac{D_2}{2}\mathrm{e}^{\kappa c}\left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right),$$
kde
$$c = b - a.$$

Tyto vztahy platí pro libovolnou energii E, energetické spektrum je proto spojité.

Zajímavé výsledky dostaneme, když se v oblasti III omezíme pouze na vlnu pohybující se v kladném směru osy x, tj. položíme-li $D_3 = 0$. V takovém případě dostaneme podmínku pro energii E

$$L \equiv \tan\alpha + \frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} =$$

$$= \mathrm{e}^{-\frac{2c}{a}\sqrt{\beta^2-\alpha^2}} \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} + i\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} - i\alpha} \left(\tan\alpha - \frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} \right) \equiv P,$$

kde

$$\alpha = a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

a

$$\beta = a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}.$$

V následujícím výpočtu budeme předpokládat

$$\frac{2c}{a}\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} \gg 1,$$

takže pravá strana P je blízká nule.

Pro $c \to \infty$ dostáváme podmínku

$$\tan\alpha + \frac{\alpha}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}} = 0,$$

jejímž řešením je hodnota α_0, které přísluší energie E_0 podle vztahu

$$\alpha_0 = a\sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}.$$

Pro c konečné budeme předpokládat, že platí

$$E = E_0 + \Delta E, \quad |\Delta E| \ll |E_0|$$

a

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1, \quad |\alpha_1| \ll |\alpha_0|.$$

Ukážeme, že energie

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[(\alpha_0 + \alpha_1)^2 - \alpha_0^2\right]$$

má nenulovou imaginární složku, kterou přibližně vypočítáme.

Nejprve nahradíme v pravé straně P proměnnou α hodnotou α_0 a využijeme vztahu

$$\tan \alpha_0 = -\frac{\alpha_0}{\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2}}.$$

Po úpravě dostaneme

$$P = -2\left(\beta^2 - 2\alpha_0^2 + 2i\alpha_0\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2}\right)\frac{\alpha_0}{\beta^2\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2}}\mathrm{e}^{-2c\sqrt{\beta^2-\alpha_0^2}/a}.$$

Na levé straně použijeme vzorec

$$\tan(\alpha_0 + \alpha_1) = \frac{\tan\alpha_0 + \tan\alpha_1}{1 - \tan\alpha_0 \tan\alpha_1},$$

do kterého dosadíme $\tan\alpha_1 \approx \alpha_1$ a vztah pro $\tan\alpha_0$. Výsledkem je výraz

$$L = \frac{\alpha_0 + \alpha_1}{\sqrt{\beta^2(\alpha_0 + \alpha_1)^2}} + \frac{\alpha_1\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2} - \alpha_0}{\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2} + \alpha_0\alpha_1}.$$

Po provedení Taylorova rozvoje do prvního řádu v α_1 dostaneme

$$L = \left(1 + \frac{\alpha_0^2}{\beta^2 - \alpha_0^2} + \frac{1}{\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2}} + \frac{\alpha_0^2}{(\beta^2 - \alpha_0^2)^{3/2}}\right)\alpha_1.$$

Porovnáním levé a pravé strany nalezneme

$$\alpha_1 = \frac{(\beta^2 - \alpha_0^2)^{3/2}}{\beta^2\left(\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2} + 1\right)}P.$$

Nás zajímá imaginární část energie, která je do prvního řádu v α_1 rovna

$$\mathrm{Im}(\Delta E) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\alpha_0\mathrm{Im}(\alpha_1) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\alpha_0\frac{(\beta^2 - \alpha_0^2)^{3/2}}{\beta^2\left(\sqrt{\beta^2 - \alpha_0^2} + 1\right)}\mathrm{Im}(P),$$

kde

$$\mathrm{Im}(P) = -4\frac{\alpha_0^2}{\beta^2}\mathrm{e}^{-2c\sqrt{\beta^2-\alpha_0^2}/a} < 0.$$

Vynecháme-li z našeho hlediska nepodstatné reálné opravy k energii, můžeme psát

$$E \approx E_0 + i\,\mathrm{Im}(\Delta E),$$

kde $\mathrm{Im}(\Delta E) < 0$.

Imaginární člen ve výrazu pro energii E ukazuje, že hustota pravděpodobnosti s časem exponenciálně ubývá

$$|\psi|^2 \sim \mathrm{e}^{-2|\mathrm{Im}(\Delta E)|t/\hbar} = \mathrm{e}^{-t/\tau},$$

kde $\tau = \hbar/(2|\mathrm{Im}(\Delta E)|)$ je doba života stavu.

21.12 Další jednorozměrné problémy

1. Uvažujte jednorozměrnou nečasovou Schrödingerovu rovnici a dokažte, že splňuje-li vlnová funkce podmínku $\psi(x) \to 0$ pro $x \to \pm\infty$, je odpovídající energetické spektrum nedegenerované.
Řešení
Důkaz provedeme sporem. Předpokládejme, že dvě lineárně nezávislé vlnové funkce ψ a φ odpovídají téže vlastní energii E

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + V\varphi = E\varphi.$$

Platí tedy

$$\frac{2m}{\hbar^2}(V - E) = \frac{\psi''}{\psi} = \frac{\varphi''}{\varphi}$$

a

$$\psi''\varphi - \varphi''\psi = 0.$$

Neurčitý integrál z této rovnice je roven

$$\int (\psi''\varphi - \varphi''\psi)\,\mathrm{d}x = K,$$

kde K je konstanta. Použijeme-li integraci per partes, dostaneme

$$\psi'\varphi - \varphi'\psi = K.$$

Protože vlnové funkce jdou k nule pro $x \to \pm\infty$, musí platit $K = 0$ a

$$\frac{\psi'}{\psi} = \frac{\varphi'}{\varphi}.$$

Po integraci této rovnice obdržíme

$$\ln\psi = \ln\varphi + C,$$

kde C je konstanta. To znamená, že funkce ψ a φ jsou lineárně závislé

$$\psi = \varphi\,\mathrm{e}^C.$$

2. Nalezněte potenciální energii $V(x)$ a energii E, pro které vlnová funkce

$$\psi(x) = A(x/x_0)^n \mathrm{e}^{-x/x_0}, \quad x \geq 0,$$

vyhovuje nečasové Schrödingerově rovnici.
Řešení
Druhá derivace funkce $\psi(x)$ je rovna

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right]\psi(x).$$

Dosazením do Schrödingerovy rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

dostaneme

$$E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right].$$

Odtud vyplývá

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2}$$

a

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x}\right].$$

3. Určete energii $E < 0$ vázaného stavu částice v poli krátkodosahové potenciální energie $V(x) = -V_0\delta(x)$, $V_0 > 0$.
Řešení
Položíme-li

$$k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

nečasová Schrödingerova rovnice má tvar

$$\psi(x)'' - k^2\psi(x) + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\delta(x)\psi(x) = 0.$$

Integrujeme-li tuto rovnici od $-\varepsilon$ do ε, $\varepsilon > 0$, dostaneme

$$\psi(\varepsilon)' - \psi(-\varepsilon)' - k^2\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,\mathrm{d}x + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) = 0.$$

V limitě $\varepsilon \to 0+$ tento vztah přejde na rovnici

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) = 0.$$

Protože musí platit $\psi(x) \to 0$ pro $x \to \pm\infty$, má Schrödingerova rovnice pro $x \neq 0$ řešení

$$\psi(x) \sim \mathrm{e}^{-kx}, \quad x > 0,$$

a

$$\psi(x) \sim \mathrm{e}^{kx}, \quad x < 0.$$

Pro toto řešení dostáváme

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) + 2k\psi(0) = 0.$$

Porovnáním s výše uvedenou rovnicí vidíme, že

$$k = \frac{mV_0}{\hbar^2}.$$

Energie vázaného stavu je rovna

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}.$$

Příslušná vlnová funkce se rovná

$$\psi(x) = N\mathrm{e}^{-mV_0|x|/\hbar^2},$$

kde

$$N = \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}.$$

4. Částice se v gravitačním poli mířícím podél osy z pružně odráží od hladké pevné podložky. Určete její energie a vlnové funkce.
Řešení
Potenciální energie je rovna

$$V(z) = mgz, \quad z > 0,$$

a

$$V(z) \to \infty, \quad z \leq 0.$$

Schrödingerova rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}z^2} + mgz\psi = E\psi.$$

Okrajové podmínky kladené na vlnovou funkci jsou $\psi(0) = 0$ a $\psi(z) \to 0$ pro $z \to \infty$. Provedeme-li substituci

$$\frac{2m^2 g}{\hbar^2}z - \frac{2mE}{\hbar^2} = cu,$$

kde c je dosud neurčená konstanta, a označíme-li

$$a = \frac{2m^2 g}{\hbar^2},$$

$$b = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

dostaneme

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}u^2} - \frac{c^3}{a^2}u\psi = 0.$$

Položíme-li

$$c = a^{2/3},$$

dostaneme obzvlášť jednoduchou rovnici

$$\frac{d^2\psi}{du^2} - u\psi = 0,$$

jejímž řešením je Airyho funkce

$$\mathrm{Ai}(u) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos(t^3/3 + ut)\,dt.$$

Dostáváme tedy

$$\psi(u) = N\ \mathrm{Ai}(u),$$

kde N je normovací konstanta. Z okrajové podmínky pro $z = 0$

$$\psi(u)|_{z=0} = \psi((az - b)/c)|_{z=0} = 0$$

obdržíme kvantovací podmínku

$$\psi\left[-\left(\frac{2}{\hbar^2 g^2 m}\right)^{1/3} E\right] = 0.$$

Označíme-li záporné kořeny Airyho funkce jako $-R_n$, vlastní energie a vlnové funkce jsou rovny

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2 g^2 m}{2}\right)^{1/3} R_n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

$$\psi_n(u) = N_n \mathrm{Ai}\left[\left(\frac{2m^2 g^2}{\hbar^2}\right)^{1/3} z - R_n\right].$$

Normovací konstanta je dána vztahem

$$N_n = \frac{1}{\left[\int_{-R_n}^\infty A_n^2(u)\,du\right]^{1/2}}.$$

Několik prvních kořenů Airyho funkce $\mathrm{Ai}(x)$ je přibližně rovno $x_1 \approx -2,34$, $x_2 \approx -4,09$, $x_3 \approx -5,52$ a $x_4 \approx -6,78$.

5. V impulzové reprezentaci určete energie a vlnové funkce částice pohybující se v poli s potenciální energií $V(x) = Ax$.
Řešení
Schrödingerova rovnice má v impulzové reprezentaci tvar

$$\frac{p^2}{2m}\varphi + A\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)\varphi = E\varphi.$$

Po separaci proměnných dostaneme

$$\frac{d\varphi}{\varphi} = \frac{E - p^2/2m}{i\hbar A}\,dp,$$

což vede na řešení

$$\varphi(p) = N e^{i[p^3/(6m) - Ep]/(\hbar A)}.$$

Vlnová funkce je konečná pro libovolné energie E a energetické spektrum je spojité. Normování vlnové funkce určíme z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_E^*(p)\varphi_{E'}(p)\,dp = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-E')p/(\hbar A)}\,dp = \delta(E - E').$$

Protože platí

$$\delta(E - E') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E-E')x}\,dx,$$

můžeme položit

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar A}}.$$

Pokud bychom řešení této úlohy hledali v souřadnicové reprezentaci, bylo by to mnohem pracnější.

6. Nalezněte energie a vlnové funkce elektronu v jednorozměrném modelu nekonečné periodické pevné látky za předpokladu, že vlnovou funkci lze přibližně vyjádřit ve tvaru

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n,$$

kde sčítání probíhá přes jednotlivé atomy, φ_n jsou funkce atomárního charakteru lokalizované na jednotlivých atomech

$$\varphi_n = \varphi(x - na),$$

a je mřížová konstanta a c_n jsou koeficienty lineární kombinace. Například pro jednorozměrný model vodivostního pásu krystalu lithia bychom za funkce φ_n mohli vzít $2s$ funkce lokalizované na jednotlivých atomech. Pro jednoduchost o funkcích φ_n předpokládáme, že jejich vzájemný překryv je zanedbatelně malý a lze je považovat za ortonormální. Nečasovou Schrödingerovu rovnici převeďte do maticového tvaru v bázi funkcí φ_n a v hamiltoniánu předpokládejte interakci pouze do nejbližších sousedů (tzv. metoda těsné vazby).

Řešení

Po převedení Schrödingerovy rovnice do maticového tvaru dostaneme

$$\sum_n H_{mn} c_n = E c_n,$$

kde

$$H_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{H} \varphi_n\,dx$$

a
$$\int \varphi_m^* \varphi_n \, dx = \delta_{mn}.$$
Dále budeme předpokládat
$$H_{mm} = \alpha,$$
$$H_{m,m\pm1} = \beta$$
a
$$H_{mn} = 0$$
jinak. Místo Schrödingerovy rovnice dostáváme diferenční rovnici druhého řádu s konstantními koeficienty
$$\beta c_{n+1} + (\alpha - E)c_n + \beta c_{n-1} = 0.$$
Řešení této rovnice lze nalézt analogicky jako řešení diferenciální rovnice
$$ay'' + by' + cy = 0.$$
Zkusíme řešení ve tvaru
$$c_n = \lambda^n,$$
které vede na charakteristický polynom
$$\beta\lambda^2 + (\alpha - E)\lambda + \beta = 0.$$
Odtud dostáváme
$$\lambda_{1,2} = -\frac{\alpha - E}{2\beta} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha - E}{2\beta}\right)^2 - 1}.$$
Po substituci
$$-\frac{\alpha - E}{2\beta} = \cos\theta$$
obdržíme
$$\lambda_{1,2} = e^{\pm i\theta}.$$
Obecné řešení lze psát ve tvaru
$$c_n = Ae^{in\theta} + Be^{-in\theta},$$
kde energie souvisí s θ vztahem
$$E = \alpha + 2\beta\cos\theta.$$
Je zřejmé, že θ musí být reálné, jinak by koeficienty c_n divergovaly pro $n \to \pm\infty$. Dále je zřejmé, že se stačí omezit na libovolný interval délky 2π, např.
$$\theta \in \langle -\pi, \pi).$$

V uvažovaném modelu se proto původní atomární energie α rozštěpí na pás energií o středu α a šíři $4|\beta|$. Pokud bychom zavedli vlnový vektor k vztahem

$$\theta = ka,$$

interval

$$k \in \langle -\pi/a, \pi/a)$$

odpovídá tzv. první Brillouinově zóně.

21.13 Moment hybnosti

1. Dokažte, že operátor momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ je hermitovský.
Řešení
Budeme uvažovat x-ovou složku operátoru momentu hybnosti

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Máme dokázat, že platí

$$-i\hbar \int \psi^* \left(y\frac{\partial \varphi}{\partial z} - z\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \mathrm{d}V = -i\hbar \int \left(y\frac{\partial \psi}{\partial z} - z\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^* \varphi \, \mathrm{d}V.$$

Po vykrácení $i\hbar$ dostáváme

$$\int y\frac{\partial}{\partial z}(\psi^*\varphi)\,\mathrm{d}V = \int z\,\frac{\partial}{\partial y}(\psi^*\varphi)\,\mathrm{d}V.$$

Integrál na levé straně upravíme

$$\int y\frac{\partial}{\partial z}(\psi^*\varphi)\,\mathrm{d}V = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} y\,[\psi^*\varphi]_{z=-\infty}^{\infty}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y.$$

Poslední integrál je roven nule za předpokladu, že funkce ψ a φ jdou k nule pro $z \to \pm\infty$.

Podobný výpočet lze provést i pro integrál na pravé straně.

2. Dokažte, že pro operátor momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ platí $\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}$.
Řešení
S použitím komutačních relací mezi operátory $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ a $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ dostaneme pro x-ovou složku

$$\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) - (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) =$$

$$= (\hat{z}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z)(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x) = i\hbar(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = i\hbar\hat{L}_x.$$

Pomocí cyklické záměny souřadnic lze odvodit podobné výsledky i pro zbývající složky.

3. Ukažte, že operátor kvadrátu momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ komutuje s libovolnou složkou operátoru $\hat{\mathbf{L}}$. Při důkazu můžete využít výsledek příkladu 2.
Řešení
Dokážeme vztah
$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0.$$
Platí
$$\hat{\mathbf{L}}^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z^2.$$
Nejprve k tomuto výrazu přičteme a odečteme $\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z$. Vytkneme-li pak společné činitele a použijeme výsledku příkladu 2, dostaneme hledaný vztah.
Jiný postup:
$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y +$$
$$+\hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z = -\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z = 0.$$

4. Určete komutační relace složek operátorů momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}}$ a souřadnice x.
Řešení
$$[x, \hat{L}_x] = 0, \quad [x, \hat{L}_y] = i\hbar z, \quad [x, \hat{L}_z] = -i\hbar y.$$

5. Určete komutační relace složek operátorů momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}}$ a x-ové složky impulzu $\hat{p}_x$.
Řešení
$$[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{p}_x, \hat{L}_y] = \hbar^2\frac{\partial}{\partial z}, \quad [\hat{p}_x, \hat{L}_z] = -\hbar^2\frac{\partial}{\partial y}.$$

6. Vyjádřete operátory $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ a $\hat{L}_z$ ve sférických souřadnicích.
Řešení
Podle definice platí
$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
a
$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right).$$
Sférické souřadnice jsou definovány vztahy
$$x = r\sin\theta\cos\varphi,$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$

a

$$z = r\cos\theta.$$

Dále použijeme vzorec

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial r}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Pak dostáváme

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial (x^2+y^2+z^2)^{1/2}}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial \arccos(z/r)}{\partial x} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{z}{r}\frac{\sin\theta\cos\varphi}{r} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}$$

a

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial \arctan(y/x)}{\partial x} = -\frac{\tan\varphi}{(1+\tan^2\varphi)r\sin\theta\cos\varphi} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}.$$

Podobným způsobem odvodíme

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi,$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r},$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r},$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}$$

a

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0.$$

S použitím těchto vztahů dostáváme

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

a

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}.$$

Po dosazení těchto vztahů do definice složek operátoru $\hat{\mathbf{L}}$ dostaneme hledané výrazy

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

a

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

7. Odvoďte tvar operátorů $\hat{L}^{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ a $\hat{\mathbf{L}}^2$ ve sférických souřadnicích.
Řešení
S použitím výsledků příkladu 6 dostaneme

$$\hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \mathrm{e}^{i\varphi}$$

a

$$\hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \mathrm{e}^{-i\varphi}.$$

K výpočtu $\hat{\mathbf{L}}^2$ použijeme identitu

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}^+\hat{L}^- + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z.$$

Dále použijeme vztahy

$$\hat{L}^+\hat{L}^- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + i\frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi},$$

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

a dostaneme

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right).$$

S použitím identit

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} = \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

a

$$\cot^2\theta + 1 = \frac{1}{\sin^2\theta}$$

nalezneme konečný výsledek

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right).$$

8. Za jakých podmínek mohou být kvadrát momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}}^2$ a jeho z-ová složka integrály pohybu?
Řešení
Pro hamiltonián $\hat{H} = -\hbar^2\Delta/(2m) + V(\mathbf{r})$ podle pravidel pro operátory časové derivace platí ve sférických souřadnicích

$$\frac{\mathrm{d}\hat{L}_z}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, V\right].$$

Pravá strana je rovna nule v poli s osou symetrie okolo osy z. z-ová složka momentu hybnosti je tedy v takovém poli integrálem pohybu.

Ve sférických souřadnicích lze odvodit

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{L}}^2}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}, V\right].$$

Odtud vyplývá, že kvadrát momentu hybnosti je integrálem pohybu v centrálním poli $V = V(r)$.

21.14 Rotátor

1. Tuhé těleso s momentem setrvačnosti J rotuje volně okolo osy z (tuhý rovinný rotátor). Nalezněte energie jeho stacionárních stavů a odpovídající vlnové funkce.
Řešení
Hamiltonián rotátoru je v polárních souřadnicích roven

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2J} = -\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Řešení nečasové Schrödingerovy rovnice můžeme psát ve tvaru

$$\psi = A\mathrm{e}^{ik\varphi} + B\mathrm{e}^{-ik\varphi},$$

kde

$$k = \sqrt{\frac{2JE}{\hbar^2}}$$

a A a B jsou konstanty. Předpokládáme-li $A = 0$ nebo $B = 0$, pak z důvodu spojitosti vlnové funkce musí platit

$$k = m,$$

kde m je celé číslo. Vlastní energie a vlnové funkce mají tvar

$$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2J}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots,$$

a

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots.$$

2. Pro vlastní stavy tuhého rovinného rotátoru z příkladu 1 určete střední hodnotu momentu hybnosti $\hat{L}_z = -i\hbar(\partial/\partial\varphi)$ a střední hodnotu operátoru kvadrátu momentu hybnosti $\hat{L}_z^2$.
Řešení
Vzhledem ke vztahům $\hat{L}_z\psi_m = m\hbar\psi_m$ a $\hat{L}_z^2\psi_m = m^2\hbar^2\psi_m$ platí
$$\langle\hat{L}_z\rangle_m = m\hbar$$
a
$$\langle\hat{L}_z^2\rangle_m = m^2\hbar^2.$$

3. Určete, jak se v čase mění vlnová funkce rovinného rotátoru, jestliže je v $t = 0$ rovna
$$\psi = A\sin^2\varphi,$$
kde φ je úhel rotace okolo osy z.
Řešení
Máme nalézt řešení časové Schrödingerovy rovnice
$$i\hbar\frac{\partial\psi(\varphi,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2\psi(\varphi,t)}{\partial\varphi^2}$$
se zadanou počáteční podmínkou. Vlnové funkce stacionárních stavů jsou rovny
$$\psi_n(\varphi,t) = \mathrm{e}^{in\varphi - i\frac{\hbar n^2}{2J}t}.$$
Obecné řešení má tvar
$$\psi(\varphi,t) = \sum_n c_n\psi_n(\varphi,t),$$
kde konstantní koeficienty c_n jsou určeny počáteční podmínkou
$$\psi(\varphi,0) = \sum_n c_n\mathrm{e}^{in\varphi} = A\sin^2\varphi.$$
Odtud dostáváme
$$\psi(\varphi,t) = \frac{A}{2}\left[1 - \cos(2\varphi)\mathrm{e}^{-\frac{2i\hbar}{J}t}\right].$$

21.15 Atom vodíku

1. Vyjádřete ionizační potenciál základního stavu atomu vodíku v eV.
Řešení
$$I = -E_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2a_\mathrm{B}} \approx 13,605\ \mathrm{eV}.$$

2. Jakým napětím je třeba urychlit elektron, aby měl energii dostatečnou k excitaci atomu vodíku ze základního do prvního excitovaného stavu?
Řešení
Energie základního stavu atomu vodíku je rovna $E_1 \approx -13,605$ eV. Pro energii prvního excitovaného stavu platí $E_2 = E_1/2^2 \approx -3,401$ eV. Elektron tedy musí mít energii rovnou nebo větší než $E_2 - E_1 \approx 10,204$ eV a musí být urychlen napětím alespoň 10,204 V. Při příliš velké energii elektronu by však došlo k excitaci do některého z vyšších excitovaných stavů nebo ionizaci atomu.

3. Vodíková výbojka vyzařuje, kromě jiných vlnových délek, také záření s vlnovou délkou $\lambda = 656$ nm v červené oblasti viditelného spektra. Tato vlnová délka odpovídá přechodu atomu vodíku mezi dvěma hladinami E_m a E_n. Určete, jaké hodnoty m a n odpovídají uvedené vlnové délce.
Řešení
Energie fotonu s uvedenou vlnovou délkou je rovna
$$E = \hbar\omega = \hbar 2\pi \frac{c}{\lambda} \approx 1,889 \text{ eV}.$$
Tato energie se rovná $E_3 - E_2$, kde $E_n \approx -13,605/n^2$ eV jsou energie atomu vodíku. Uvedené záření tedy vzniká při přechodu atomu vodíku ze stacionárního stavu s energií E_3 do stavu s energií E_2.

4. Pro stacionární stavy elektronu v atomu vodíku určete ve sférických souřadnicích složky hustoty toku pravděpodobnosti.
Řešení
Ve sférických souřadnicích má gradient složky
$$\left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right).$$
Dosadíme-li tento výraz do definice
$$\mathsf{j} = \frac{\hbar}{2m_e i}\left[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi\right]$$
a použijeme-li vlnovou funkci
$$\psi_{nlm} = N_{nlm} R_{nl}(r) P_{lm}(\cos\theta) \mathrm{e}^{im\varphi},$$
dostaneme
$$j_r = 0,$$
$$j_\theta = 0$$
a
$$j_\varphi = \frac{\hbar m}{m_e r \sin\theta} \left|\psi_{nlm}\right|^2.$$
Složka j_φ je různá od nuly pro $m \neq 0$.

5. Elektron v atomu vodíku se nachází v základním stavu. Určete $\langle r\rangle$, $\langle r^2\rangle$ a nejpravděpodobnější vzdálenost elektronu od jádra r_0.
Řešení
Pro elektron v základním stavu atomu vodíku platí

$$\psi_{100} = N\mathrm{e}^{-r/a_\mathrm{B}},$$

kde normovací konstanta N je dána integrálem ve sférických souřadnicích

$$\int |\psi_{100}|^2\,\mathrm{d}V = |N|^2 4\pi \int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_\mathrm{B}} r^2\,\mathrm{d}r = \pi|N|^2 a_\mathrm{B}^3 = 1.$$

Odtud vyplývá

$$N = \sqrt{\frac{1}{\pi a_\mathrm{B}^3}}.$$

S použitím integrálu

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^n\,\mathrm{d}x = n!$$

dostáváme

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty r|\psi_{100}|^2 4\pi r^2\,\mathrm{d}r = \frac{4}{a_\mathrm{B}^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_\mathrm{B}} r^3\,\mathrm{d}r = \frac{4}{a_\mathrm{B}^3}\frac{3!}{2^4}a_\mathrm{B}^4 = \frac{3}{2}a_\mathrm{B},$$

$$\langle r^2\rangle = \int_0^\infty r^2|\psi_{100}|^2 4\pi r^2\,\mathrm{d}r = \frac{4}{a_\mathrm{B}^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_\mathrm{B}} r^4\,\mathrm{d}r = 3a_\mathrm{B}^2.$$

Nejpravděpodobnější hodnotu r_0 dostaneme z podmínky maxima funkce

$$|\psi_{100}|^2 r^2 = |N|^2 \mathrm{e}^{-2r/a_\mathrm{B}} r^2.$$

Požadavek nulové derivace této funkce vede na rovnici

$$\mathrm{e}^{-2r/a_\mathrm{B}} r^2 \left(2r - \frac{2r^2}{a_\mathrm{B}}\right) = 0.$$

Odtud vyplývá

$$r_0 = a_\mathrm{B},$$

kde a_B je Bohrův poloměr.

6. Určete vlnové funkce a energetické spektrum atomu vodíku s respektováním pohybu jeho jádra.
Řešení
Označíme-li souřadnici elektronu $\mathbf{r}_\mathrm{e}$ a souřadnici jádra $\mathbf{r}_\mathrm{p}$, můžeme hamiltonián atomu vodíku napsat ve tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\Delta_\mathrm{e} - \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{p}}\Delta_\mathrm{p} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_\mathrm{e} - \mathbf{r}_\mathrm{p}|},$$

kde m_e je hmotnost elektronu a m_p hmotnost protonu. Po zavedení relativní vzdálenosti

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_\mathrm{e} - \mathbf{r}_\mathrm{p}$$

a souřadnice těžiště

$$\mathbf{R} = \frac{m_\mathrm{e}\mathbf{r}_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}\mathbf{r}_\mathrm{p}}{m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}}$$

a využití vztahů jako

$$\frac{\partial}{\partial x_\mathrm{e}} = \frac{\partial x}{\partial x_\mathrm{e}}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_\mathrm{e}}\frac{\partial}{\partial X}$$

nebo

$$\frac{\partial}{\partial x_\mathrm{p}} = \frac{\partial x}{\partial x_\mathrm{p}}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_\mathrm{p}}\frac{\partial}{\partial X}$$

lze hamiltonián zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p})}\Delta_\mathbf{R} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_\mathbf{r} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r},$$

kde

$$\mu = \frac{m_\mathrm{e} m_\mathrm{p}}{m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}}$$

je redukovaná hmotnost soustavy. Je vidět, že tento hamiltonián je součtem dvou částí: První popisuje volný pohyb částice o hmotnosti $m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}$ umístěné v těžišti soustavy, druhá odpovídá atomu vodíku s pevným jádrem a s hmotností elektronu m_e nahrazenou redukovanou hmotností μ. Proto můžeme v příslušné vlnové funkci provést separaci proměnných

$$\varphi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{R})\psi_{nlm}(\mathbf{r}),$$

kde vlnová funkce

$$\Psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathbf{PR}/(i\hbar)}$$

popisuje volný pohyb atomu vodíku jako celku s hybností $\mathbf{P}$ a funkce $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ je vlnová funkce známá z řešení atomu vodíku s pevným jádrem, avšak s redukovanou hmotností μ. Je zřejmé, že výsledné energie atomu vodíku jsou se započtením translačního pohybu rovny

$$E_{n,\mathbf{P}} = E_n + \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p})},$$

kde E_n je energie atomu vodíku s pevným jádrem a s redukovanou hmotností elektronu μ.

7. Uvažujte Balmerovu sérii pro atom vodíku a deuterium. Jestliže poměr vlnových délek odpovídajících stejným kvantovým číslům je roven $\rho = 1,000272$, určete odtud poměr hmotnosti elektronu a protonu.

Řešení
Vlnové délky Balmerovy série jsou dány vztahem

$$\frac{1}{\lambda_n} = \frac{\mu e^2}{8\pi^2\hbar^2\varepsilon_0}\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 3, 4, 5, \ldots,$$

kde μ je redukovaná hmotnost. Jejich poměr je pro vodík a deuterium roven

$$\rho = \frac{\lambda_n^H}{\lambda_n^D} = \frac{\frac{2m_e m_p}{m_e + 2m_p}}{\frac{m_e m_p}{m_e + m_p}} = 1 + \frac{1}{2r+1},$$

kde m_e je hmotnost elektronu, m_p označuje hmotnost protonu a neutronu, které pokládáme za zhruba stejné, a $r = m_p/m_e$. Po dosazení uvedeného poměru vlnových délek dostaneme $r = 1838$.

21.16 Další vícerozměrné problémy

1. Určete energie a vlnové funkce stacionárních stavů částice v třírozměrné pravoúhlé potenciálové jámě s potenciální energií $V = 0$ pro $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$ a $V \to \infty$ jinak. Pro symetrický případ $a = b = c$ určete stupeň degenerace pěti nejnižších energetických hladin.
Řešení
V oblasti mimo jámu je vlnová funkce rovna nule. Schrödingerovu rovnici uvnitř jámy

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$$

lze separovat

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z).$$

Okrajové podmínky pro vlnové funkce ψ_i mají tvar

$$\psi_1(0) = \psi_1(a) = 0,$$

$$\psi_2(0) = \psi_2(b) = 0$$

a

$$\psi_3(0) = \psi_3(c) = 0.$$

Třírozměrný problém se tudíž rozpadá na tři jednorozměrné úlohy, známé z řešení jednorozměrné potenciálové jámy s výsledkem

$$\psi_{lmn}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{l\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} \sin\frac{n\pi z}{c},$$

$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2}\right),$$

kde $l, m, n = 1, 2, 3, \ldots$. Pro $a = b = c$ jsou degenerace hladin E_{111}, E_{211}, E_{221}, E_{311} a E_{222} rovny 1, 3, 3, 3 a 1.

2. Elektron je uzavřen v nekonečně hluboké třírozměrné pravoúhlé potenciálové jámě o rozměrech $a = b = c = 1$ cm. Kolik stavů elektronu má energii menší než 1 eV?
Řešení
Po dosazení do výrazu pro energii z předcházejícího příkladu dostaneme
$$(l^2 + m^2 + n^2)_{max} \approx 2,66 \times 10^{14}.$$
Odtud určíme počet stavů
$$N \approx \frac{\frac{4}{3}\pi(2,66 \times 10^{14})^{3/2}}{8} \approx 2,27 \times 10^{21}.$$

3. „Kvark“ s hmotností $\mu = m_p/3$ je uzavřen v pravoúhlé nekonečně hluboké potenciálové jámě o délce stran 2×10^{-15} m. Určete jeho excitační energii ze základního do prvního excitovaného stavu v MeV.
Řešení
Energetické hladiny v jámě jsou rovny
$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(l^2 + m^2 + n^2), \quad l, m, n = 1, 2, 3, \ldots.$$
Excitační energie je rovna
$$\Delta E = E_{211} - E_{111} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}.$$
Po dosazení dostaneme $\Delta E \approx 461$ MeV.

4. Určete vlnové funkce a energie částice v neproniknutelné sféricky symetrické dutině s poloměrem a pro sféricky symetrický stav odpovídající $l = 0$. Vypočítejte tlak částice na stěny dutiny.
Řešení
Pro částici v centrálním poli můžeme provést separaci proměnných
$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)P_{lm}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots, \; m = -l, \ldots, l,$$
kde P_{lm} je přidružený Legendrův polynom. Radiální část vlnové funkce $R(r)$ vyhovuje pro $r < a$ rovnici
$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0,$$
kde μ je hmotnost částice, a je rovna nule pro $r > a$. Okrajová podmínka pro R má tvar
$$R(a) = 0.$$
Po substituci
$$R = \frac{\chi}{r}$$

dostaneme pro $l = 0$ rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi = 0,$$

která má řešení

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi r}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2.$$

Průměrná síla působící radiálně na stěny dutiny je rovna

$$F_n = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial a}\right\rangle_n = \left\langle -\frac{\partial \hat{H}}{\partial a}\right\rangle_n = -\frac{\partial \langle \hat{H}\rangle_n}{\partial a} = -\frac{\partial E_n}{\partial a}.$$

Odtud dostáváme

$$F_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^3}n^2.$$

Tlak na stěnu dutiny je roven

$$p_n = \frac{F_n}{4\pi a^2} = \frac{\pi\hbar^2}{4\mu a^5}n^2.$$

5. Určete energie a vlnové funkce stacionárních stavů třírozměrného harmonického oscilátoru s potenciální energií

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}\mu\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right).$$

Pro izotropický oscilátor $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ určete stupeň degenerace čtyř nejnižších energetických hladin.

Řešení

Schrödingerovu rovnici pro třírozměrný harmonický oscilátor

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + \frac{1}{2}\mu\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right)\psi = E\psi$$

lze separovat

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_y(z)$$

s výsledkem

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi_x}\frac{\mathrm{d}^2\psi_x}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_x^2 x^2\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi_y}\frac{\mathrm{d}^2\psi_y}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_y^2 y^2\right) +$$

$$+ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi_z}\frac{\mathrm{d}^2\psi_z}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_z^2 z^2\right) = E.$$

Vzhledem k nezávislosti proměnných x, y a z musí být každá ze závorek rovna konstantě, které označíme E_x, E_y a E_z, a musí platit

$$E_x + E_y + E_z = E.$$

Úloha je tedy převedena na řešení tří jednorozměrných oscilátorů v proměnných x, y a z s kvantovanými hodnotami energie

$$E_{xl} = \hbar\omega_x(l + 1/2), \quad l = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$E_{ym} = \hbar\omega_y(m + 1/2), \quad m = 0, 1, 2, \ldots,$$

a

$$E_{zn} = \hbar\omega_z(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Pro izotropický oscilátor je celková energie rovna

$$E_{lmn} = \hbar\omega(l + m + n + 3/2).$$

Stupeň degenerace hladin E_{111}, $E_{211} = E_{121} = E_{112}$, $E_{122} = E_{212} = E_{221} = E_{311} = E_{131} = E_{113}$ a $E_{222} = E_{123} = E_{132} = E_{213} = E_{231} = E_{312} = E_{321}$ je roven 1, 3, 6 a 7.

6. Nalezněte řešení Schrödingerovy rovnice pro sféricky symetrický třírozměrný harmonický oscilátor s potenciální energií $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$.

Řešení

Vzhledem k tomu, že jde o sféricky symetrickou úlohu, můžeme hledat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)P_{lm}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots, m = -l, \ldots, l.$$

Funkce R musí splňovat rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1)}{r^2}R\right] + \frac{\mu\omega^2}{2}r^2R = ER,$$

kde μ je hmotnost částice. Po provedení substituce

$$R = \frac{\chi}{r}$$

a označení

$$\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}r,$$

$$\lambda = \frac{E}{\hbar\omega}$$

dostaneme rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left[2\lambda - \frac{l(l+1)}{\xi^2} - \xi^2\right]\chi = 0.$$

Je zřejmé, že pro $\xi \longrightarrow \infty$ se musí χ chovat jako funkce $\exp(-\xi^2/2)$

$$\chi \approx \mathrm{e}^{-\xi^2/2}.$$

Pro $\xi \longrightarrow 0$ můžeme dosadit

$$\chi \approx \xi^\alpha,$$

což vede na

$$\alpha(\alpha - 1) = l(l + 1).$$

Odtud dostáváme

$$\alpha_1 = l + 1, \quad \alpha_2 = -l.$$

Pro $\xi \longrightarrow 0$ musí být vlnová funkce konečná, je tedy třeba vzít řešení α_1 a předpokládat funkci χ ve tvaru

$$\chi = \xi^{l+1} v(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

kde $v(\xi)$ je funkce, která musí vyhovovat rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\xi^2} + 2\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\xi}\left(\frac{l+1}{\xi} - \xi\right) + 2\left(\lambda - l - \frac{3}{2}\right) v = 0.$$

Řešení této rovnice hledáme ve tvaru řady

$$v = \sum_{k=k_0}^{\infty} a_k \xi^k,$$

což vede na rekurentní vztah

$$a_{k+2} = \frac{2(k + l + 3/2 - \lambda)}{(k+2)(k+2l+3)} a_k, \quad k = k_0, k_0 + 2, \ldots.$$

Pro $\xi \longrightarrow 0$ dostáváme

$$\chi \approx \xi^{l+1+k_0}.$$

Z tohoto vztahu a výše odvozené podmínky pro $\xi \longrightarrow 0$

$$\chi \approx \xi^{l+1}$$

vidíme, že musí být $k_0 = 0$. Dále, ze vztahu pro $k \longrightarrow \infty$

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k$$

vyplývá, že pro $\xi \longrightarrow \infty$ se v chová jako $\exp(\xi^2)$ a χ jako $\exp(\xi^2)/2$. Řada pro funkci v proto musí obsahovat konečný počet členů a musí platit

$$\lambda = p + l + \frac{3}{2},$$

kde p je celé číslo. Vezmeme-li v úvahu, že $k_0 = 0$ a označíme-li

$$p = 2n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

dostaneme

$$\lambda = 2n + l + \frac{3}{2}$$

a

$$E_n = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Tyto energetické hladiny jsou degenerované. Pro zadané sudé $N = 2n + l$ můžeme vzít $l = 0, 2, 4, \ldots, N$. Pro $N = 2n + l + 1$ liché dostaneme $l = 1, 3, 5, \ldots, N$. Kromě toho při zadaných n a l existuje ještě $2l + 1$ násobná degenerace vzhledem ke kvantovému číslu $m = -l, \ldots, l$. Odpovídající vlnové funkce jsou rovny

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = N\xi^l v_{2n}(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}P_{lm}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}.$$

7. Částice o hmotnosti μ se pohybuje volně v rovině yz v oblasti vymezené obdélníkem $0 \le y \le a$ a $0 \le z \le b$. Zbývající část roviny je pro částici nedostupná. Při pohybu podél osy x na ni působí síla $F = -kx$. Určete energetické hladiny a vlnové funkce částice.
Řešení
S použitím výsledků příkladů 1 a 5 můžeme napsat vlnové funkce v oblasti $0 \le y \le a$ a $0 \le z \le b$ ve tvaru

$$\psi_{lmn} = NH_l(\xi)\exp(-\xi^2/2)\sin\frac{m\pi y}{a}\sin\frac{n\pi z}{b},$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x,$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

a $l = 0, 1, 2, \ldots$, $m, n = 1, 2, 3, \ldots$. Mimo uvedenou oblast je vlnová funkce rovna nule. Vlastní energie jsou rovny

$$E_{lmn} = \hbar\omega(l + 1/2) + \frac{\hbar^2 m^2\pi^2}{8\mu a^2} + \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8\mu b^2}.$$

21.17 Pohyb v elektromagnetickém poli

1. Určete energetické hladiny a vlnové funkce nabité částice v homogenním magnetickém poli $\mathbf{B}$ orientovaném ve směru osy z.
Řešení

Pro směr magnetické indukce podél osy z zvolíme vektorový potenciál ve tvaru $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$. Schrödingerovu rovnici

$$\frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m}\psi = E\psi$$

upravíme do tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{i\hbar}{m}qBy\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{q^2}{2m}B^2y^2\psi = E\psi.$$

Protože koeficienty této rovnice nezávisí na x a z, můžeme předpokládat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi = \mathrm{e}^{i\alpha x}\mathrm{e}^{i\beta z}\varphi(y),$$

kde α a β jsou reálná čísla. Po dosazení do předcházející rovnice dostaneme rovnici pro φ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}y'^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}y'^2\varphi = E'\varphi,$$

kde

$$\omega_0 = \frac{qB}{m},$$

$$E' = E - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}$$

a

$$y' = y + \frac{\hbar\alpha}{qB}.$$

Uvedenou rovnici pro lineární harmonický oscilátor lze řešit obvyklým způsobem

$$\varphi_n(y') = \mathrm{konst}\, H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

$$E'_n = \hbar\omega_0(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

kde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}y'.$$

Celková vlnová funkce a energie částice v magnetickém poli jsou rovny

$$\psi_{n\alpha\beta} = N_n\,\mathrm{e}^{i(\alpha x + \beta z)}H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

kde

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{h}\left(\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

a

$$E_{n\beta} = \hbar\omega_0(n + 1/2) + \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

První člen představuje kvantovanou energii pohybu v rovině kolmé ke směru magnetického pole. Druhý člen určuje nekvantovanou energii vzhledem k pohybu ve směru magnetické indukce. Tento výsledek je v souladu s klasickým pohybem po kruhové trajektorii v rovině x, y s frekvencí ω_0 a volným pohybem podél osy z. Na rozdíl od klasického kruhového pohybu, kdy dostáváme dva harmonické kmity s frekvencí ω_0 podél os x a y posunuté o $\pi/2$, má stav s vlnovou funkcí $\psi_{n\alpha\beta}$ nedefinovanou rovnovážnou polohu x_0 v souřadnici x. Protože energie $E_{n\beta}$ nezávisí na α, máme zde případ nekonečně vysoké degenerace odpovídající různým možným hodnotám rovnovážné polohy x_0. Obecné řešení má proto tvar

$$\psi_{n\beta}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\alpha) \mathrm{e}^{i(\alpha x + \beta z)} H_n(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \, \mathrm{d}\alpha,$$

kde $c(\alpha)$ je funkce závisející na α. Speciálně, tuto funkci lze zvolit tak, že funkce $\psi_{n\beta}$ popisuje stav s určitou rovnovážnou polohou x_0.

2. Ukažte, jak se při tzv. cejchovací transformaci vektorového a skalárního potenciálu elektromagnetického pole

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad U \to U' = U - \frac{\partial f}{\partial t},$$

kde $f(\mathbf{r}, t)$ je reálná funkce, mění řešení Schrödingerovy rovnice.
Řešení
Nejdříve napíšeme časové Schrödingerovy rovnice s potenciály $\mathbf{A}$, U a $\mathbf{A}'$, U'

$$\frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2}{2m}\psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qU\right)\psi,$$

$$\frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla f)^2}{2m}\psi' = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qU + q\frac{\partial f}{\partial t}\right)\psi'.$$

Dosazením

$$\psi = \mathrm{e}^{-iqf/\hbar}\psi'$$

do první rovnice ověříme platnost druhé rovnice.

3. Určete hustotu toku pravděpodobnosti pro částici v magnetickém poli.
Řešení
Rozepsáním výrazu $(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2$ v časové Schrödingerově rovnici dostaneme

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{i\hbar q}{m}\mathbf{A}\nabla\psi + \frac{i\hbar q}{2m}(\mathrm{div}\mathbf{A})\psi + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\psi + qU\psi.$$

Komplexně sdružená rovnice má tvar

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* - \frac{i\hbar q}{m}\mathbf{A}\nabla\psi^* - \frac{i\hbar q}{2m}(\mathrm{div}\mathbf{A})\psi^* + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\psi^* + qU\psi^*.$$

První rovnici vynásobíme ψ^*, druhou ψ, obě rovnice odečteme a výsledek vydělíme $i\hbar$

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*] + \frac{q}{m}[\psi^*\mathbf{A}\nabla\psi + \nabla\psi^*\mathbf{A}\psi + (\mathrm{div}\mathbf{A})\psi^*\psi].$$

Vzhledem k tomu, že

$$\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^* = \mathrm{div}[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*]$$

a

$$\psi^*\mathbf{A}\nabla\psi + \nabla\psi^*\mathbf{A}\psi + (\mathrm{div}\mathbf{A})\psi^*\psi = \mathrm{div}(\mathbf{A}\psi^*\psi),$$

dostáváme

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0,$$

kde

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*] - \frac{q}{m}\mathbf{A}|\psi|^2.$$

Lze ověřit, že při cejchovací transformaci

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla f, \quad U \to U - \frac{\partial f}{\partial t}$$

spojené s transformací vlnové funkce

$$\psi \longrightarrow \mathrm{e}^{iqf/\hbar}\psi$$

zůstává hustota toku pravděpodobnosti $\mathbf{j}$ beze změny.

4. Odvoďte operátorové rovnice pro $\mathrm{d}\hat{x}/\mathrm{d}t$ a $\mathrm{d}\hat{p}_x/\mathrm{d}t$, jestliže je hamiltonián pro pohyb částice v elektromagnetickém poli roven

$$\hat{H} = \frac{[\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]^2}{2m} + qU(\mathbf{r},t).$$

Řešení

Pro zjednodušení označíme

$$\hat{P}_x = \hat{p}_x - qA_x.$$

Pak dostáváme

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x},\hat{H}] = \frac{1}{i\hbar 2m}[\hat{x},\hat{P}_x^2] = \frac{1}{i\hbar 2m}(\hat{x}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x^2\hat{x}) =$$

$$= \frac{1}{i\hbar 2m}[(\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x})\hat{P}_x + \hat{P}_x(\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x})] = \frac{\hat{P}_x}{m}.$$

V analogii s klasickou fyzikou je tedy operátor rychlosti roven operátoru kinematické hybnosti dělenému hmotností.

Dále vypočítáme

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}_x}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{p}_x - qA_x) = -q\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar 2m}[\hat{P}_x, \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2] + \frac{q}{i\hbar}[\hat{P}_x, U].$$

Je zřejmé, že platí

$$[\hat{P}_x, U] = [\hat{p}_x, U] = -i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Dále můžeme psát

$$[\hat{P}_x, \hat{P}_y^2] = (\hat{P}_x\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{P}_x)\hat{P}_y + \hat{P}_y(\hat{P}_x\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{P}_x).$$

Nejdříve vypočítáme

$$\hat{P}_x\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{P}_x = (\hat{p}_x - qA_x)(\hat{p}_y - qA_y) - (\hat{p}_y - qA_y)(\hat{p}_x - qA_x) =$$

$$= q[(\hat{p}_y A_x - A_x\hat{p}_y) - (\hat{p}_x A_y - A_y\hat{p}_x)] = q\left(-i\hbar\frac{\partial A_x}{\partial y} + i\hbar\frac{\partial A_y}{\partial x}\right) =$$

$$= i\hbar q\,(\mathrm{rot}\mathbf{A})_z = i\hbar q B_z,$$

odkud vyplývá

$$[\hat{P}_x, \hat{P}_y^2] = i\hbar q(B_z\hat{P}_y + \hat{P}_y B_z).$$

Dostáváme tedy

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}_x}{\mathrm{d}t} = -q\frac{\partial A_x}{\partial t} - q\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{q}{2m}\left(\hat{P}_y B_z + B_z\hat{P}_y - \hat{P}_z B_y - B_y\hat{P}_z\right).$$

Vzhledem ke vztahům

$$-\frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{\partial U}{\partial x} = E_x$$

a

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{P}_x}{m}$$

pak dostáváme na pravé straně Lorentzovu sílu v operátorovém tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}_x}{\mathrm{d}t} = qE_x + \frac{q}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\hat{y}}{\mathrm{d}t}B_z + B_z\frac{\mathrm{d}\hat{y}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}\hat{z}}{\mathrm{d}t}B_y - B_y\frac{\mathrm{d}\hat{z}}{\mathrm{d}t}\right),$$

kde E_i a B_i jsou složky intenzit elektrického a magnetického pole. Podobnost s nekvantovým výrazem pro Lorentzovu sílu je zřejmá.

21.18 Časová Schrödingerova rovnice

1. Systém se dvěma stacionárními stavy popsanými vlnovými funkcemi ψ_0 a ψ_1 se v čase $t < 0$ nachází ve stavu popsaném funkcí ψ_0. V $t = 0$ začne na systém působit na čase nezávislá porucha. Určete vlnovou funkci $\psi(t)$ pro $t > 0$.
   Řešení
   Předpokládáme, že vlnové funkce ψ_0 a ψ_1 vyhovují rovnicím

$$\hat{H}\psi_n = i\hbar\frac{\partial\psi_n}{\partial t}, \qquad n = 0, 1,$$

kde

$$\psi_n(t) = \varphi_n \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}E_n t}, \qquad n = 0, 1,$$

a platí

$$\int \varphi_m^* \varphi_n \,\mathrm{d}V = \delta_{mn}.$$

Symboly φ_n a E_n zde označují časově nezávislé vlnové funkce stacionárních stavů a odpovídající vlastní energie, integrace se provádí přes celý prostor. Závislost vlnových funkcí na prostorových proměnných $\mathbf{r}$ zde nevypisujeme.

Po zapnutí poruchy $\hat{W}$ má Schrödingerova rovnice tvar

$$(\hat{H} + \hat{W})\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Její řešení hledáme ve tvaru

$$\psi(t) = a_0(t)\psi_0 + a_1(t)\psi_1,$$

kde

$$|a_0(t)|^2 + |a_1(t)|^2 = 1$$

a

$$a_0(0) = 1, \quad a_1(0) = 0.$$

Schrödingerovu rovnici vynásobíme zleva φ_0^*, resp. φ_1^*, provedeme integraci přes celý prostor a dostaneme soustavu rovnic

$$i\hbar\dot{a}_0 = a_0 W_{00} + a_1 W_{01} \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(E_1 - E_0)t},$$

$$i\hbar\dot{a}_1 = a_0 W_{10} \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(E_0 - E_1)t} + a_1 W_{11},$$

kde

$$W_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{W} \varphi_n \,\mathrm{d}V.$$

Zavedeme-li nové označení

$$\alpha_0(t) = a_0(t)$$

a

$$\alpha_1(t) = \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}(E_1 - E_0)t} a_1(t),$$

dostaneme homogenní soustavu dvou obyčejných diferenciálních rovnic s konstantními koeficienty

$$i\hbar\dot{\alpha}_0 = \alpha_0 W_{00} + \alpha_1 W_{01},$$

$$i\hbar\dot{\alpha}_1 = \alpha_0 W_{10} + \alpha_1 (W_{11} + E_1 - E_0).$$

Partikulární řešení této soustavy hledáme ve tvaru

$$\alpha_0(t) = A\mathrm{e}^{-i\Omega t}$$

a

$$\alpha_1(t) = B\mathrm{e}^{-i\Omega t},$$

kde A, B a Ω jsou konstanty. Koeficienty A a B vyhovují soustavě lineárních rovnic

$$(W_{00} - \hbar\Omega)A + W_{01}B = 0$$

a

$$W_{10}A + (W_{11} + E_1 - E_0 - \hbar\Omega)B = 0.$$

Z podmínky nulovosti determinantu této soustavy dostáváme hodnoty Ω

$$\hbar\Omega_{1,2} = W_{00} + \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{|W_{01}|^2 + \frac{\gamma^2}{4}},$$

kde

$$\gamma = W_{11} - W_{00} + E_1 - E_0.$$

Obecné řešení má tvar

$$\alpha_0 = A_1\mathrm{e}^{-i\Omega_1 t} + A_2\mathrm{e}^{-i\Omega_2 t},$$

$$\alpha_1 = B_1\mathrm{e}^{-i\Omega_1 t} + B_2\mathrm{e}^{-i\Omega_2 t},$$

kde

$$B_n = \frac{\hbar\Omega_n - W_{00}}{W_{01}} A_n.$$

Z počátečních podmínek plyne

$$A_1 + A_2 = 1, \quad B_1 + B_2 = 0.$$

Vyloučíme-li s použitím těchto rovnic A_2 a B_2, dostaneme

$$\alpha_0 = A_1(\mathrm{e}^{-i\Omega_1 t} - \mathrm{e}^{-i\Omega_2 t}) + \mathrm{e}^{-i\Omega_2 t},$$

$$\alpha_1 = B_1(\mathrm{e}^{-i\Omega_1 t} - \mathrm{e}^{-i\Omega_2 t}),$$

kde

$$A_1 = \frac{W_{00} - \hbar\Omega_2}{\hbar(\Omega_1 - \Omega_2)},$$

$$B_1 = \frac{W_{10}}{\hbar(\Omega_1 - \Omega_2)}.$$

Tím jsme nalezli řešení Schrödingerovy rovnice. Nyní určíme chování koeficientů $|a_n|^2 = |\alpha_n(t)|^2$ v čase. Dosazením odvodíme vztahy

$$|a_0|^2 = 1 + 4(A_1^2 - A_1)\sin^2 \sigma t,$$

$$|a_1|^2 = 4|B_1|^2 \sin^2 \sigma t,$$

kde

$$\sigma = \frac{\Omega_1 - \Omega_2}{2} = \frac{\sqrt{|W_{01}|^2 + \frac{\gamma^2}{4}}}{\hbar}.$$

S použitím výrazů pro Ω_1 a Ω_2 lze ukázat, že platí

$$4(A_1^2 - A_1) = (2A_1 - 1)^2 - 1 = \frac{\gamma^2}{4\sigma^2\hbar^2} - 1 = -\frac{|W_{01}|^2}{\sigma^2\hbar^2}.$$

Nakonec obdržíme výsledek

$$|\alpha_0|^2 = |a_0|^2 = 1 - \frac{|W_{01}|^2}{\sigma^2\hbar^2}\sin^2 \sigma t$$

a

$$|\alpha_1|^2 = |a_1|^2 = \frac{|W_{01}|^2}{\sigma^2\hbar^2}\sin^2 \sigma t.$$

Systém periodicky přechází mezi stavy ψ_0 a ψ_1. Perioda tohoto pohybu je rovna $T = 2\pi/\sigma$.

2. Předpokládejme, že v čase $t = 0$ je vlnová funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$ vlastní funkcí časově nezávislého operátoru $\hat{A}$ s vlastní hodnotou λ a že operátor $\hat{A}$ komutuje s hamiltoniánem $\hat{H}$. Ukažte, že funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$ je ve všech časech $t > 0$ vlastní funkcí operátoru $\hat{A}$ příslušející časově nezávislé vlastní hodnotě λ.
Řešení
Je-li Δt malý časový interval, dostáváme s použitím časové Schrödingerovy rovnice

$$\psi(\mathbf{r}, \Delta t) = \psi(\mathbf{r}, 0) + \Delta t \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r}, 0) + \Delta t \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r}, 0)}{i\hbar}.$$

Zapůsobíme-li na tuto rovnici zleva operátorem $\hat{A}$, dostaneme

$$\hat{A}\psi(\mathbf{r}, \Delta t) = \hat{A}\psi(\mathbf{r}, 0) + \Delta t \frac{\hat{A}\hat{H}\psi(\mathbf{r}, 0)}{i\hbar} = \hat{A}\psi(\mathbf{r}, 0) + \Delta t \frac{\hat{H}\hat{A}\psi(\mathbf{r}, 0)}{i\hbar} =$$

$$= \lambda\left(\psi(\mathbf{r}, 0) + \Delta t \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r}, 0)}{i\hbar}\right) = \lambda\psi(\mathbf{r}, \Delta t).$$

Opakováním tohoto postupu lze ukázat, že vztah

$$\hat{A}\psi(\mathbf{r}, t) = \lambda\psi(\mathbf{r}, t)$$

platí pro libovolné časy.

3. Pro časově nezávislý hamiltonián nalezněte unitární operátor $\hat{U}(t)$ určující časový vývoj řešení časové Schrödingerovy rovnice.
Řešení
Snadno ověříme, že časové Schrödingerově rovnici vyhovuje vlnová funkce

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}t}\psi(\mathbf{r}, 0)$$

a že operátor

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}t}$$

splňuje podmínku

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = 1.$$

4. Pro časově závislý hamiltonián nalezněte unitární operátor $\hat{U}(t)$, který určuje časový vývoj řešení časové Schrödingerovy rovnice.
Řešení
Pro jednoduchost nebudeme psát prostorové souřadnice. Uvažujeme-li časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\psi(t)$$

a použijeme-li rovnici

$$\psi(t) = \hat{U}(t)\psi(0),$$

dostaneme

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t)$$

s počáteční podmínkou

$$\hat{U}(0) = 1.$$

Označíme-li

$$\frac{1}{i\hbar} = \kappa,$$

můžeme řešení rovnice

$$\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = \kappa\hat{H}(t)\hat{U}(t)$$

napsat ve tvaru

$$\hat{U}(t) = 1 + \kappa\int_0^t \hat{H}(t')\,\mathrm{d}t' + \kappa^2\int_0^t \hat{H}(t')\int_0^{t'} \hat{H}(t'')\,\mathrm{d}t''\,\mathrm{d}t' +$$

$$+\kappa^3\int_0^t \hat{H}(t')\int_0^{t'} \hat{H}(t'')\int_0^{t''} \hat{H}(t''')\,\mathrm{d}t'''\,\mathrm{d}t''\,\mathrm{d}t' + \cdots .$$

O tom se můžeme snadno přesvědčit derivací tohoto výrazu člen po členu

$$\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = \kappa\hat{H}(t)\left[1 + \kappa\int_0^t \hat{H}(t')\,\mathrm{d}t' + \kappa^2\int_0^t \hat{H}(t')\int_0^{t'} \hat{H}(t'')\,\mathrm{d}t''\,\mathrm{d}t' + \right.$$

$$+\kappa^3 \int_0^t \hat{H}(t') \int_0^{t'} \hat{H}(t'') \int_0^{t''} \hat{H}(t''')\,\mathrm{d}t'''\,\mathrm{d}t''\,\mathrm{d}t' + \cdots \Bigg] = \kappa \hat{H}(t)\hat{U}(t).$$

Všimněme si, že operátory $\hat{H}$ jsou ve výrazu pro $\hat{U}(t)$ časově uspořádány $t' \geq t'' \geq t''' \geq \cdots$.

5. Dokažte invariantnost časové Schrödingerovy rovnice vzhledem ke Galileovým transformacím.

Řešení

Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný pohyb. Uvažujeme dva inerciální systémy se souřadnicemi (x, t) a (x', t'), které se vůči sobě pohybují rychlostí v

$$x = x' + vt',$$

$$t = t'.$$

Pro potenciální energii V platí

$$V'(x - vt, t) = V(x, t).$$

Předpokládáme, že v čárkovaném souřadném systému platí Schrödingerova rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi'}{\partial x'^2} + V'\psi'$$

a máme dokázat rovnici

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi.$$

Hustota pravděpodobnosti $\rho(x, t)$ nalezení částice v určitém místě nemůže záviset na volbě souřadného systému

$$\rho'(x', t') = \rho(x, t)$$

neboli

$$\rho'(x - vt, t) = \rho(x, t).$$

Odtud vyplývá, že funkce ψ a ψ' se mohou lišit pouze fázovým faktorem

$$\psi(x, t) = \mathrm{e}^{iS(x,t)}\psi'(x', t') = \mathrm{e}^{iS(x,t)}\psi'(x - vt, t).$$

Impulzy v obou souřadných systémech souvisí vztahem

$$p = p' + mv.$$

Podobně jako pro souřadnice platí

$$\rho'(p', t') = \rho(p, t)$$

neboli

$$\rho'(p - mv, t) = \rho(p, t).$$

Dosazením

$$\psi'(x', t') = \mathrm{e}^{-iS(x,t)}\psi(x, t)$$

do Schrödingerovy rovnice v čárkovaných proměnných dostaneme po úpravě

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + i\hbar\left(\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x} - v\right)\frac{\partial\psi}{\partial x} +$$

$$+\left[V(x,t) + i\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \hbar v\frac{\partial S}{\partial x} - \hbar\frac{\partial S}{\partial t}\right]\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Fázový faktor $\exp[iS(x,t)]$ byl dosud libovolný. Nyní ho zvolíme tak, abychom obdrželi Schrödingerovu rovnici v nečárkovaných proměnných, tj. zvolíme S tak, aby platilo

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x} - v = 0$$

a

$$i\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \hbar v\frac{\partial S}{\partial x} - \hbar\frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Z první rovnice odvodíme

$$S = \frac{mvx}{\hbar} + \varphi(t),$$

kde $\varphi(t)$ je libovolná funkce času. Z druhé rovnice určíme $\varphi(t)$ a dostaneme

$$S = \frac{mvx}{\hbar} - \frac{mv^2t}{2\hbar},$$

kde jsme vynechali nepodstatnou aditivní konstantu. Výsledkem je

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{i[mvx/\hbar - mv^2t/(2\hbar)]}\psi'(x - vt, t).$$

Jak se dalo očekávat, vlnová funkce ψ je rovna součinu vlnové funkce ψ' a fázového faktoru $\exp\{i[mvx/\hbar - mv^2t/(2\hbar)]\}$, který popisuje pohyb volné částice pohybující se společně s čárkovaným souřadným systémem vzhledem k nečárkovanému souřadnému systému.

Hustota pravděpodobnosti $\rho(p,t)$ je rovna

$$\rho(p,t) = |c(p,t)|^2,$$

kde

$$c(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\,\mathrm{d}x.$$

Dosazením výše uvedeného vztahu mezi ψ a ψ' dostaneme

$$c(p,t) = \mathrm{e}^{i[mv^2/(2\hbar) - pv/\hbar]t} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x',t) \mathrm{e}^{-i(p-mv)x'/\hbar} \, \mathrm{d}x'.$$

Integrál na pravé straně je roven

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x',t) \mathrm{e}^{-i(p-mv)x'/\hbar} \, \mathrm{d}x' = c'(p - mv, t),$$

a tedy platí

$$c(p,t) = \mathrm{e}^{i[mv^2/(2\hbar) - pv/\hbar]t} c'(p - mv, t).$$

Odtud vyplývá

$$\rho'(p',t') = \rho(p,t).$$

Tím je invariantnost dokázána.

Dodatky

D.1 Odvození nečasové Schrödingerovy rovnice

V tomto dodatku ukážeme, jak Schrödinger odvodil nečasovou rovnici, nyní nesoucí jeho jméno [82]. Pro jednoduchost zde budeme uvažovat pouze jednorozměrné systémy.

Schrödinger vyšel z klasické Hamiltonovy–Jacobiho rovnice pro konzervativní systém

$$H\left(q, \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}q}\right) = E, \tag{D.1}$$

kde H je Hamiltonova funkce, q zobecněná souřadnice, S časově nezávislá akce a E energie. K úpravě této rovnice použijeme substituce

$$S = K \ln \psi, \tag{D.2}$$

kde $\psi = \psi(q)$. Po dosazení do Hamiltonovy–Jacobiho rovnice (D.1) dostaneme

$$H\left(q, \frac{K}{\psi}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q}\right) = E. \tag{D.3}$$

Po použití vztahu $H = p^2/(2m) + V$ v této rovnici a vynásobení ψ^2 obdržíme

$$K^2 \frac{\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q}\right)^2}{2m} + (V - E)\psi^2 = 0. \tag{D.4}$$

Platí-li tento vztah, platí i

$$\delta \int_{-\infty}^{\infty} F \,\mathrm{d}q = 0, \tag{D.5}$$

kde δ označuje variaci podle ψ a

$$F = K^2 \frac{\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q}\right)^2}{2m} + (V - E)\psi^2. \tag{D.6}$$

Podmínku extrému funkcionálu (D.5) můžeme napsat ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\psi} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q}\right)} = 0. \tag{D.7}$$

Ze dvou posledních rovnic dostaneme

$$-\frac{K^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}q^2} + V\psi = E\psi. \tag{D.8}$$

Položíme-li $K = \pm\hbar$, obdržíme nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}q^2} + V\psi = E\psi. \tag{D.9}$$

Pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce ψ z výše uvedeného postupu nevyplývá. Je však zřejmé, že integrál $\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\,\mathrm{d}q$ musí být konečný a pro $q \to \pm\infty$ musí platit $\psi(q) \to 0$.

D.2 Lineární vektorové prostory

Množinu prvků $u, v, w, \ldots$ nazýváme komplexním *vektorovým prostorem* V, a tyto prvky nazýváme *vektory*, pokud je definováno sčítání vektorů

$$u + v$$

a násobení vektorů komplexními čísly $a, b, c, \ldots$

$$au$$

s následujícími vlastnostmi:

1. Pokud je $u, v \in V$ je i $u + v \in V$.
2. Násobení komplexními čísly je distributivní ve vektorech $a(u + v) = au + av$.
3. Násobení komplexními čísly je distributivní v komplexních číslech $(a + b)u = au + bu$.
4. Násobení komplexními čísly je asociativní v komplexních číslech $a(bu) = abu$.
5. Sčítání vektorů je komutativní $u + v = v + u$.
6. Sčítání vektorů je asociativní $u + (v + w) = (u + v) + w$.
7. Existuje nulový prvek $0 \in V$, pro který pro každé $u \in V$ platí $u + 0 = u$.
8. Ke každému vektoru $u \in V$ existuje inverzní prvek u^{-1}, pro který platí $u + u^{-1} = 0$.

Příkladem takového vektorového prostoru je kvantověmechanický prostor ket-vektorů.

D.3 Hermitovské operátory

Lineární operátor $\hat{A}^+$ určený rovnicí

$$\int \varphi^* \hat{A}\psi \, d\tau = \int (\hat{A}^+\varphi)^* \psi \, d\tau, \tag{D.10}$$

kde φ a ψ jsou libovolné funkce a integrace probíhá přes příslušný prostor, se nazývá *hermitovsky sdružený* k operátoru $\hat{A}$. V kompaktnějším označení můžeme psát

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}^+\varphi|\psi\rangle \tag{D.11}$$

nebo s využitím vlastností skalárního součinu

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle^*. \tag{D.12}$$

Platí následující užitečné vztahy:

- Ze vztahů (D.10)–(D.12) vyplývá

  $$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|(\hat{A}^+)^+|\psi\rangle. \tag{D.13}$$

  To znamená, že platí

  $$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}. \tag{D.14}$$

- Pokud je c komplexní číslo, dostáváme z rovnice (D.12)

  $$\langle\varphi|c^+|\psi\rangle = \langle\psi|c|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|c^*|\psi\rangle. \tag{D.15}$$

  Vidíme tedy, že

  $$c^+ = c^*. \tag{D.16}$$

- Ze vztahu

  $$\langle\varphi|(\hat{A}+\hat{B})^+|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}+\hat{B}|\varphi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^* + \langle\psi|\hat{B}|\varphi\rangle^* = \tag{D.17}$$

  $$= \langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle + \langle\varphi|\hat{B}^+|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}^+ + \hat{B}^+|\psi\rangle \tag{D.18}$$

  dostáváme

  $$(\hat{A}+\hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+. \tag{D.19}$$

- Dále platí vztah

  $$\langle\varphi|(\hat{A}\hat{B})^+|\psi\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\varphi|\psi\rangle = \langle\hat{B}\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{B}^+\hat{A}^+|\psi\rangle \tag{D.20}$$

  neboli

  $$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+. \tag{D.21}$$

- Lineární operátor se nazývá *hermitovský* nebo samosdružený, pokud platí

$$\hat{A} = \hat{A}^+. \tag{D.22}$$

Ze vztahu (D.12) pak pro takový operátor vyplývá

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^*. \tag{D.23}$$

Naopak, jestli tento vztah platí pro libovolné funkce φ a ψ, je $\hat{A}$ hermitovský operátor.

- Snadno lze ukázat, že vlastní čísla hermitovského operátoru jsou reálná. Pro vlastní problém

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi, \tag{D.24}$$

kde funkce ψ je normovaná, podle rovnice (D.23) dostaneme

$$\lambda = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \lambda^*. \tag{D.25}$$

- Snadno lze rovněž ukázat, že vlastní funkce hermitovského operátoru příslušející různým vlastním číslům jsou ortogonální. Předpokládejme, že platí

$$\hat{A}\psi_1 = \lambda_1\psi_1 \tag{D.26}$$

a

$$\hat{A}\psi_2 = \lambda_2\psi_2, \tag{D.27}$$

kde $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Pak dostáváme

$$\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle = \lambda_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle \tag{D.28}$$

a

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle. \tag{D.29}$$

Z rovnic (D.23) a (D.25) pak vyplývá

$$\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle^* = \lambda_2^*\langle\psi_1|\psi_2\rangle^* = \lambda_2\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \lambda_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle, \tag{D.30}$$

což vede k rovnici

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0. \tag{D.31}$$

Protože $\lambda_1 \neq \lambda_2$, musí platit

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0. \tag{D.32}$$

Vlastní funkce příslušející degenerovaným hladinám obecně ortogonální nejsou. V takovém případě však lze pomocí obvyklého Grammova–Schmidtova ortogonalizačního procesu přejít k novým funkcím, které už budou ortogonální.

D.4 Diracova δ-funkce

Diracova δ-funkce, kterou lze přesně zavést pomocí teorie distribucí, působí jako jednotkový operátor při integraci

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a). \tag{D.33}$$

Diracovu δ-funkci lze vyjádřit pomocí vztahů (viz též [24])

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ikx}\,\mathrm{d}k, \tag{D.34}$$

$$\delta(x) = \lim_{L\to\infty} \frac{\sin xL}{\pi x}, \tag{D.35}$$

$$\delta(x) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{\pi}\frac{a}{a^2+x^2} \tag{D.36}$$

nebo

$$\delta(x) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-x^2/a^2}. \tag{D.37}$$

Pro Diracovu δ-funkci platí následující užitečné vztahy

$$\delta(x) = \delta(-x), \tag{D.38}$$

$$x\delta(x) = 0, \tag{D.39}$$

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}, \tag{D.40}$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \tag{D.41}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x)\delta(x-b)\,\mathrm{d}x = \delta(a-b), \tag{D.42}$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{\delta(x-a)+\delta(x+a)}{2|a|} \tag{D.43}$$

a

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{\left|\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_i}}, \tag{D.44}$$

kde x_i jsou kořeny rovnice $\varphi(x) = 0$.

Tvoří-li funkce $\psi_n(x)$ úplný ortonormální systém vlastních funkcí hermitovského operátoru s diskrétním spektrem vlastních čísel, platí tzv. *relace úplnosti*

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x-x'). \tag{D.45}$$

Podobný vztah platí i pro spojité spektrum (viz (D.34)).

Lze zavést i derivaci Diracovy δ-funkce $\delta'(x)$, pro niž platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) f(x)\,\mathrm{d}x = -\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} \tag{D.46}$$

a

$$x\delta'(x) = -\delta(x). \tag{D.47}$$

Tyto vztahy lze ověřit pomocí integrace per partes.

D.5 Důkaz Schwarzovy nerovnosti

Schwarzovu nerovnost

$$(u,u)(v,v) \geq |(u,v)|^2, \tag{D.48}$$

kde (u, v) označuje skalární součin, dokážeme následujícím způsobem. Vektor v vyjádříme jako součet vektoru paralelního k u a ortogonálního k u

$$v = u\frac{(u,v)}{(u,u)} + \left(v - u\frac{(u,v)}{(u,u)}\right). \tag{D.49}$$

Protože tyto dva vektory jsou ortogonální, platí

$$(v,v) = \frac{|(u,v)|^2}{(u,u)} + \left(v - u\frac{(u,v)}{(u,u)}, v - u\frac{(u,v)}{(u,u)}\right). \tag{D.50}$$

Vzhledem k tomu, že druhý člen na pravé straně této rovnice je větší nebo roven nule, dostáváme Schwarzovu nerovnost (D.48). Rovnítko ve Schwarzově nerovnosti platí pouze v případě

$$v - u\frac{(u,v)}{(u,u)} = 0, \tag{D.51}$$

tj. jsou-li vektory u a v kolineární

$$v = u\frac{(u,v)}{(u,u)}. \tag{D.52}$$

D.6 Alternativní odvození relací neurčitosti

V této příloze ukážeme, jak lze poněkud jiným matematickým způsobem odvodit relace neurčitosti [24].

Budeme předpokládat, že všechny tři operátory vystupující v komutační relaci

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \tag{D.53}$$

jsou hermitovské. Dále použijeme operátory odchylek od středních hodnot $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$ a $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$, pro které platí stejná komutační relace. Nyní uvažujme integrál

$$I(\alpha) = \int |(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi|^2\,\mathrm{d}\tau \geq 0, \tag{D.54}$$

kde α je libovolné reálné číslo a integrace probíhá přes příslušný prostor. Tento integrál, který je větší než nula nebo roven nule, rozepíšeme do tvaru

$$I(\alpha) = \int \psi^*(\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi \, \mathrm{d}\tau \tag{D.55}$$

nebo též

$$I(\alpha) = \alpha^2\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle + \alpha\langle\hat{C}\rangle + \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle. \tag{D.56}$$

Protože podle rovnice (D.54) musí platit $I(\alpha) \geq 0$ pro všechna α, musí být diskriminant kvadratické rovnice $I(\alpha) = 0$ menší než nula nebo roven nule. Z této podmínky vyplývají relace neurčitosti

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{\langle\hat{C}\rangle^2}{4}. \tag{D.57}$$

D.7 Unitární operátory a unitární transformace

Operátor $\hat{U}$ se nazývá *unitární*, pokud platí

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = 1 \tag{D.58}$$

neboli

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}. \tag{D.59}$$

Transformace operátoru $\hat{A}$ na operátor $\hat{A}'$ zadaná vztahem

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ \tag{D.60}$$

nebo

$$\hat{A} = \hat{U}^+\hat{A}'\hat{U}, \tag{D.61}$$

kde $\hat{U}$ je unitární operátor, se nazývá *unitární transformace.*

Zavedeme funkce

$$\varphi' = \hat{U}\varphi \tag{D.62}$$

a

$$\psi' = \hat{U}\psi. \tag{D.63}$$

Naopak platí

$$\varphi = \hat{U}^+\varphi' \tag{D.64}$$

a

$$\psi = \hat{U}^+\psi'. \tag{D.65}$$

Potom dostáváme

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{U}^+\varphi'|\hat{A}|\hat{U}^+\psi'\rangle = \langle\varphi'|\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+|\psi'\rangle = \langle\varphi'|\hat{A}'|\psi'\rangle. \tag{D.66}$$

To znamená, že maticové elementy operátoru $\hat{A}$ mezi funkcemi φ a ψ jsou rovny maticovým elementům operátoru $\hat{A}'$ mezi funkcemi φ' a ψ'.

Speciálně, jestliže funkce ψ je vlastní funkce operátoru $\hat{A}$ odpovídající vlastnímu číslu λ, je funkce $\hat{U}\psi$ vlastní funkcí operátoru $\hat{A}'$ odpovídající témuž vlastnímu číslu λ. Důkaz je jednoduchý. Jestliže platí

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi, \tag{D.67}$$

dostáváme

$$\hat{U}^{+}\hat{A}'\hat{U}\psi = \lambda\psi, \tag{D.68}$$

odkud vyplývá

$$\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{A}'\hat{U}\psi = \lambda\hat{U}\psi \tag{D.69}$$

a

$$\hat{A}'(\hat{U}\psi) = \lambda(\hat{U}\psi). \tag{D.70}$$

Pokud nás zajímají (reálná) vlastní čísla hermitovských operátorů, můžeme použít libovolnou unitární transformaci, abychom převedli zkoumaný vlastní problém (jako např. nečasovou Schrödingerovu rovnici) na matematicky výhodnější tvar. To se využívá při volbě různých reprezentací v kvantové mechanice.

D.8 Křivočaré souřadnice

Nejdříve uvedeme *Laméovy koeficienty* pro nejužívanější ortogonální křivočaré souřadnice.

Uvažujeme souřadnice

$$x = x(q_1, q_2, q_3), \quad y = y(q_1, q_2, q_3), \quad z = z(q_1, q_2, q_3). \tag{D.71}$$

Laméovy koeficienty jsou definovány vztahem

$$h_i = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2}. \tag{D.72}$$

Pro *cylindrické souřadnice* (r, φ, z) platí

$$x = r\cos\varphi, \quad y = r\sin\varphi, \quad z = z, \tag{D.73}$$

$$h_1 = 1, \quad h_2 = r, \quad h_3 = 1. \tag{D.74}$$

Pro *sférické souřadnice* (r, θ, φ) platí podobně

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta, \tag{D.75}$$

$$h_1 = 1, \quad h_2 = r, \quad h_3 = r\sin\theta. \tag{D.76}$$

V *kartézských souřadnicích* jsou Laméovy koeficienty rovny jedné

$$h_1 = 1, \quad h_2 = 1, \quad h_3 = 1. \tag{D.77}$$

Čtverec délky elementární úsečky je v těchto souřadnicích roven

$$\mathrm{d}s^2 = \sum_{i=1}^{3} \mathrm{d}s_i^2 \tag{D.78}$$

a pro objemový element platí

$$\mathrm{d}V = \mathrm{d}s_1 \mathrm{d}s_2 \mathrm{d}s_3, \tag{D.79}$$

kde

$$\mathrm{d}s_i = h_i \mathrm{d}q_i. \tag{D.80}$$

Složky rychlosti jsou dány vztahem

$$v_i = h_i \dot{q}_i \tag{D.81}$$

a kvadrát velikosti rychlosti je roven

$$v^2 = \sum_{i=1}^{3} v_i^2. \tag{D.82}$$

Gradient je definován vztahem

$$\mathrm{d}f = (\operatorname{grad}\psi)\,\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{D.83}$$

kde

$$\operatorname{grad}\psi = \left(\frac{1}{h_1}\frac{\partial\psi}{\partial q_1}, \frac{1}{h_2}\frac{\partial\psi}{\partial q_2}, \frac{1}{h_3}\frac{\partial\psi}{\partial q_3}\right). \tag{D.84}$$

Divergence je dána rovnicí

$$\operatorname{div}\mathbf{A} = \lim_{\Delta V\to 0} \frac{1}{\Delta V} \oint\oint_{\Sigma(\Delta V)} \mathbf{A}\,\mathrm{d}\mathbf{S} \tag{D.85}$$

a platí pro ni vyjádření

$$\operatorname{div}\mathbf{A} = \frac{1}{h_1h_2h_3}\left[\frac{\partial(A_1h_2h_3)}{\partial q_1} + \frac{\partial(h_1A_2h_3)}{\partial q_2} + \frac{\partial(h_1h_2A_3)}{\partial q_3}\right]. \tag{D.86}$$

Rotace je definována vztahem

$$(\operatorname{rot}\mathbf{A})\,\mathbf{n} = \lim_{\Delta S\to 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_{\Gamma(\Delta S)} \mathbf{A}\,\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{D.87}$$

kde

$$\operatorname{rot}\mathbf{A} = \left(\frac{1}{h_2h_3}\left(\frac{\partial(A_3h_3)}{\partial q_2} - \frac{\partial(A_2h_2)}{\partial q_3}\right),\right. \tag{D.88}$$

$$\left.\frac{1}{h_1h_3}\left(\frac{\partial(A_1h_1)}{\partial q_3} - \frac{\partial(A_3h_3)}{\partial q_1}\right), \frac{1}{h_1h_2}\left(\frac{\partial(A_2h_2)}{\partial q_1} - \frac{\partial(A_1h_1)}{\partial q_2}\right)\right). \tag{D.89}$$

Konečně, *Laplaceův operátor* je dán rovnicí

$$\Delta\psi = \operatorname{div}\operatorname{grad}\psi \tag{D.90}$$

a platí pro něj

$$\Delta\psi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3}\left[\frac{\partial}{\partial q_1}\left(\frac{h_2 h_3}{h_1}\frac{\partial\psi}{\partial q_1}\right) + \frac{\partial}{\partial q_2}\left(\frac{h_1 h_3}{h_2}\frac{\partial\psi}{\partial q_2}\right) + \right. \tag{D.91}$$
$$\left. + \frac{\partial}{\partial q_3}\left(\frac{h_1 h_2}{h_3}\frac{\partial\psi}{\partial q_3}\right)\right].$$

D.9 Ortogonální polynomy

Systém polynomů $f_n(x)$ stupně n se nazývá *ortogonální* na intervalu $a \le x \le b$ vzhledem k *váhové funkci* $w(x) \ge 0$, pokud platí [1]

$$\int_a^b w(x) f_m(x) f_n(x)\,\mathrm{d}x = 0, \quad m \ne n,\ m, n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{D.92}$$

Váhová funkce $w(x)$ určuje polynomy $f_n(x)$ až na konstantní faktor h_n

$$\int_a^b w(x) f_n^2(x)\,\mathrm{d}x = h_n. \tag{D.93}$$

Ortogonální polynomy můžeme zapsat ve tvaru

$$f_n(x) = d_n \sum_{m=0}^{N} c_m g_m(x). \tag{D.94}$$

Výrazy určující N, d_n, c_m, $g_m(x)$ a h_n pro vybrané ortogonální polynomy jsou uvedeny v tabulce. $P_n(x)$ zde označuje Legendrovy neboli sférické polynomy, $L_n^{(\alpha)}(x)$ přidružené Laguerrovy polynomy a $H_n(x)$ Hermitovy polynomy.

$f_n(x)$	N	d_n	c_m	$g_m(x)$	h_n
$P_n(x)$	$[\frac{n}{2}]$	$\frac{1}{2^n}$	$(-1)^m \binom{n}{m}\binom{2n-2m}{n}$	x^{n-2m}	$\frac{2}{2n+1}$
$L_n^{(\alpha)}(x)$	n	1	$\frac{(-1)^m}{m!}\binom{n+\alpha}{n-m}$	x^m	$\frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!}$
$H_n(x)$	$[\frac{n}{2}]$	$n!$	$\frac{(-1)^m}{m!(n-2m)!}$	$(2x)^{n-2m}$	$\sqrt{\pi}2^n n!$

Ortogonální polynomy jsou dány rovněž *Rodriguezovým vzorcem*

$$f_n(x) = \frac{1}{a_n \rho(x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\{\rho(x)[g(x)]^n\} \tag{D.95}$$

s koeficienty a funkcemi podle následující tabulky:

$f_n(x)$	a_n	$\rho(x)$	$g(x)$
$P_n(x)$	$(-1)^n 2^n n!$	1	$1-x^2$
$L_n^{(\alpha)}(x)$	$n!$	$\mathrm{e}^{-x}x^\alpha$	x
$H_n(x)$	$(-1)^n$	e^{-x^2}	1

Ortogonální polynomy vyhovují diferenciální rovnici

$$u_2(x)y'' + u_1(x)y' + u_0(x)y = 0, \tag{D.96}$$

kde funkce $u_i(x)$ jsou určeny tabulkou:

$y(x)$	$u_2(x)$	$u_1(x)$	$u_0(x)$
$P_n(x)$	$1-x^2$	$-2x$	$n(n+1)$
$L_n^{(\alpha)}(x)$	x	$\alpha+1-x$	n
$H_n(x)$	1	$-2x$	$2n$

Pro derivaci ortogonálních polynomů platí rovnice

$$g_2(x)\frac{\mathrm{d}f_n(x)}{\mathrm{d}x} = g_1(x)f_n(x) + g_0(x)f_{n-1}(x), \tag{D.97}$$

kde funkce $g_i(x)$ mají následující tvar:

$f_n(x)$	$g_2(x)$	$g_1(x)$	$g_0(x)$
$P_n(x)$	$1-x^2$	$-nx$	n
$L_n^{(\alpha)}(x)$	x	n	$-(n+\alpha)$
$H_n(x)$	1	0	$2n$

Ortogonální polynomy vyhovují také rekurentním vztahům

$$a_{1n}f_{n+1}(x) = (a_{2n} + a_{3n}x)f_n(x) - a_{4n}f_{n-1}(x) \tag{D.98}$$

s koeficienty a_{in} podle tabulky:

$f_n(x)$	a_{1n}	a_{2n}	a_{3n}	a_{4n}
$P_n(x)$	$n+1$	0	$2n+1$	n
$L_n^{(\alpha)}(x)$	$n+1$	$2n+\alpha+1$	-1	$n+\alpha$
$H_n(x)$	1	0	2	$2n$

Vytvářející funkce, pro kterou platí

$$g(x,z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n f_n(x) z^n, \tag{D.99}$$

je určena následující tabulkou:

$f_n(x)$	a_n	$g(x,z)$	pozn.
$P_n(x)$	1	$1/\sqrt{1-2xz+z^2}$	$-1 < x < 1$, $\lvert z\rvert < 1$
$L_n^{(\alpha)}(x)$	1	$(1-z)^{-\alpha-1}\mathrm{e}^{xz/(z-1)}$	$\lvert z\rvert < 1$
$H_n(x)$	$1/n!$	e^{2xz-z^2}	

Na závěr uvádíme speciální hodnoty ortogonálních polynomů:

$f_n(x)$	$f_n(-x)$	$f_n(1)$	$f_n(0)$	$f_0(x)$	$f_1(x)$
$P_n(x)$	$(-1)^n P_n(x)$	1	$\frac{(-1)^m}{4^m}\binom{2m}{m}$ pro $n = 2m$	1	x
			0 pro $n = 2m+1$		
$L_n^{(\alpha)}(x)$			$\binom{n+\alpha}{n}$	1	$\alpha + 1 - x$
$H_n(x)$	$(-1)^n H_n(x)$		$(-1)^m \frac{(2m)!}{m!}$ pro $n = 2m$	1	$2x$
			0 pro $n = 2m+1$		

Fyzikální konstanty

konstanta	*ozn.*	*hodnota*	*jednotky*
rychlost světla	c	299792458	$\mathrm{m\ s^{-1}}$
magnetická konstanta	μ_0	$12,566370614 \times 10^{-7}$	$\mathrm{N\ A^{-2}}$
elektrická konstanta	ε_0	$8,854187817 \times 10^{-12}$	$\mathrm{F\ m^{-1}}$
Planckova konstanta	$\hbar$	$1,054571596 \times 10^{-34}$	$\mathrm{J\,s}$
elementární náboj	e	$1,602176462 \times 10^{-19}$	C
Bohrův magneton	μ_B	$927,400899 \times 10^{-26}$	$\mathrm{J\,T^{-1}}$
konstanta jemné struktury	α	$7,297352533 \times 10^{-3}$	
Bohrův poloměr	a_B	$0,5291772083 \times 10^{-10}$	m
hmotnost elektronu	m_e	$9,10938188 \times 10^{-31}$	kg
magnetický moment elektronu	μ_e	$-928,476362 \times 10^{-26}$	$\mathrm{J\,T^{-1}}$
hmotnost protonu	m_p	$1,67262158 \times 10^{-27}$	kg
hmotnost neutronu	m_n	$1,67492716 \times 10^{-27}$	kg
Avogadrova konstanta	N_A	$6,02214199 \times 10^{23}$	$\mathrm{mol^{-1}}$
Faradayova konstanta	F	$96485,3415$	$\mathrm{C\,mol^{-1}}$
molární plynová konstanta	R	$8,314472$	$\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$
Boltzmannova konstanta	k	$1,3806503 \times 10^{-23}$	$\mathrm{J\,K^{-1}}$
gravitační konstanta	G	$6,673 \times 10^{-11}$	$\mathrm{m^3\,kg^{-1}\,s^{-2}}$

Jednotky energie :
1 erg $= 10^{-7}$ J
1 eV $= 1,602176462 \times 10^{-19}$ J
1 Ry $= 2,17987190 \times 10^{-18}$ J=13,6056917 eV
1 Hartree $= 4,35974381 \times 10^{-18}$ J=27,2113834 eV

Zpracováno podle [22] a [69].

Literatura

[1] Handbook of Mathematical functions, ed. M. ABRAMOWITZ, I. A. STEGUN, Dover Publications, New York 1972

[2] ACZEL A. D., Entanglement. The Greatest Mystery in Physics, Four Walls Eight Windows, New York 2001

[3] AFRIAT A., F. SELLERI, The Einstein, Podolsky and Rosen Paradox, Plenum Press, New York 1999

[4] ALONSO M., H. VALK, Quantum Mechanics: Principles and Applications, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts 1973

[5] AULETTA G., Foundations and Interpretation of Quantum Mechanics, World Scientific, Singapore 2001

[6] Energy transfer in condensed matter, ed. B. DI BARTOLO, Plenum Press, New York 1984

[7] BASDEVANT J. L., J. DALIBARD, Quantum Mechanics, Springer, Berlin 2002

[8] BAYFIELD J. E., Quantum Evolution, John Wiley, New York 1999

[9] BELL J. S., Physica **1** (1965), 195; viz též CLAUSER J. F., A. SHIMONY, Rep. Prog. Phys. **41** (1978), 1881; D'ESPAGNAT B., Scientific American **241** (1979), 128

[10] BERESTECKIJ V. B., E. M. LIFSIC, A. P. PITAJEVSKIJ, Relativistskaja kvantovaja teorija, Vol. 1, Nauka, Moskva 1968

[11] LIFSIC E. M., A. P. PITAJEVSKIJ, Relativistskaja kvantovaja teorija, Vol. 2, Nauka, Moskva 1971

[12] Quantum [Un]speakables. From Bell to Quantum Information, ed. R. A. BERTLMANN, A. ZEILINGER, Springer, Berlin 2002

[13] BETHE H. A., Intermediate Quantum Mechanics, W. A. Benjamin, New York a Amsterdam 1964

[14] BETHE H. A., Rev. Mod. Phys. **71** (1999), S1

[15] BLANK J., P. EXNER, M. HAVLÍČEK, Lineární operátory v kvantové mechanice, Univerzita Karlova, Praha 1993

[16] BLOCHINCEV D. I., Základy kvantové mechaniky, NČSAV, Praha 1956

[17] BOHM D., Quantum Theory, Prentice-Hall, New York 1952

[18] Born M., Atomic Physics, Blackie and son, London a Glasgow 1963

[19] Born M., P. Jordan, Z. Phys. **34** (1925), 858; Born M., P. Jordan, W. Heisenberg, Z. Phys. **35** (1926), 557

[20] Bub J., Interpreting the Quantum World, Cambridge University Press, Cambridge 1997

[21] Busch P., P. J. Lahti, P. Mittelstaedt, The Quantum Theory of Measurement, Springer, Berlin 1991

[22] Cohen E. R., B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **59** (1987), 1121

[23] Cook D. B., Schrödinger Mechanics, World Scientific, Singapore 1988

[24] Davydov A. S., Kvantová mechanika, SPN, Praha 1978

[25] Dickson W. M., Quantum Chance and Non-locality, Cambridge University Press, Cambridge 1998

[26] Dirac P. A. M., The Principles of Quantum Mechanics, Clarendon Press, Oxford 1947

[27] Drška L., B. Klimeš, J. B. Slavík, Základy atomové fyziky, NČSAV, Praha 1958

[28] Dušek M., Koncepční otázky kvantové teorie, Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2002

[29] Einstein A., B. Podolski, N. Rosen, Phys. Rev. **47** (1935), 777

[30] Elbaz E., Quantum, Springer, Berlin 1998

[31] d'Espagnat B., Conceptual Foundations of Quantum Mechanics, W. A. Benjamin, Reading, Massachusetts 1976

[32] Fano G., Mathematical Methods of Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York 1971

[33] Fermi E., Kvantovaja mechanika, Mir, Moskva 1968

[34] Feynman R. P., Rev. Mod. Phys. **20** (1948), 367

[35] Frieden B. Roy, Physics from Fisher Information, Cambridge University Press, Cambridge 1998

[36] Flügge S., Practical Quantum Mechanics, Vol. I, II, Springer, Berlin 1971

[37] Formánek J., Úvod do kvantové teorie, Academia, Praha 1983; Formánek J., Úvod do kvantové teorie, ve dvou dílech, Academia, Praha 2005

[38] Formánek J., Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole/1, Karolinum, Praha 1998

[39] Formánek J., Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole/2a, Karolinum, Praha 2000

[40] Formánek J., Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole/2b, Karolinum, Praha 2000

[41] Fuchs Ch. A., A. Peres, Physics Today, March 2000, 70

[42] Goldman I. I., V. D. Krivcenko, Sbornik zadac po kvantovoj mechanike, Gos. Izd. Tech.-Teor. Lit., Moskva 1957

[43] Grecko L. G., V. I. Sugakov, O. F. Tomasevic, A. M. Fedorcenko, Sbornik zadac po teoreticeskoj fizike, Vyssaja skola, Moskva 1972

[44] Fundamental Problems in Quantum Theory, ed. D. E. GREENBERGER, A. ZEILINGER, Annals of the New York Academy of Sciences, Vol. **755**, The New York Academy of Sciences, New York 1995

[45] GREINER W., Quantum Mechanics. An Introduction, Springer, Berlin 1989

[46] GREINER W., Quantum Mechanics. Special Chapters, Springer, Berlin 1998

[47] GREINER W., Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations, Springer, Berlin 1990

[48] GRIFFITHS R. B., Consistent Quantum Theory, Cambridge University Press, Cambridge 2002

[49] HEALEY R., The Philosophy of Quantum Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge 1989

[50] Quantum Measurement: Beyond Paradox, ed. R. A. HEALEY, G. HELLMAN, Minnesota Studies in Philosophy of Science, Vol. **XVII**, University of Minnesota Press, Minneapolis 1998

[51] HEISENBERG W., Z. Phys. **33** (1925), 879

[52] HEISENBERG W., Z. Phys. **43** (1927), 172

[53] Fundamentals of Quantum Information, ed. D. HEISS, Lecture Notes in Physics, Vol. **587**, Springer, Berlin 2002

[54] JAMMER M., The Conceptual Development of Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York 1967

[55] JOHNSON CH. S., L. G. PEDERSEN, Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics, Addison-Wesley, Reading 1974

[56] KAEMPFFER F. A., Concepts in Quantum Mechanics, Academic Press, New York a London 1965

[57] KLÍMA J., B. VELICKÝ, Kvantová mechanika I, II, skriptum, Univerzita Karlova v Praze, Praha 1985, 1990

[58] KOGAN V., V. GALICKIJ, Sbornik zadac po kvantovoj mechanike, Gos. Izd. Tech.-Teor. Lit., Moskva 1956

[59] KOMRSKA J., Čs. čas. fyz. **A 37** (1987), 492

[60] KOZEL S. M., E. I. RASBA, C. A. SLAVATINSKIJ, Sbornik zadac po fizike, Nauka, Moskva 1987

[61] LALÖE F., Am. J. Phys. **69** (2001), 655

[62] LANDAU L. D., E. M. LIFŠIC, Kvantovaja mechanika, Kratkij kurz teoretičeskoj fyziky, Vol. 2, Nauka, Moskva 1972

[63] LANDAU L. D., E. M. LIFŠIC, Kvantovaja mechanika, Nauka, Moskva 1974

[64] Methods of Quantization, ed. H. LATAL, W. SCHWEIGER, Lecture Notes in Physics, Vol. **572**, Springer, Berlin 2001

[65] LEVIC V. G., YU. A. VDOVIN, V. A. MJAMLIN, Kurs teoretickoj fiziki, Vol. II, Nauka, Moskva 1971

[66] Problems and Solutions on Quantum Mechanics, ed. YUNG-KUO LIM, World Scientific, Singapore 1998

[67] MEHRA J., H. RECHENBERG, The Historical Development of Quantum Theory, Vol. 1-6, Springer, New York 1982

[68] MESSIAH A., Quantum Mechanics, Vol. 1–2, North-Holland, Amsterdam 1970

[69] MOHR P. J., B. N. TAYLOR, Physics Today, August 2002, s. BG6-BG13

[70] Time in Quantum Mechanics, ed. J. G. MUGA, R. SALA MAYATO, I. L. EGUSQUIZA, Lecture Notes in Physics, Vol. 72, Springer, Berlin 2002

[71] VON NEUMANN J. V., Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Springer, Berlin 1932

[72] OMNÈS R., The Interpretation of Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton 1994

[73] OMNÈS R., Quantum Philosophy, Princeton University Press, Princeton 1999

[74] OMNÈS R., Understanding Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton 1999

[75] PERES A., Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer, Dordrecht 1995

[76] PIŠÚT J., L. GOMOLČÁK, V. ČERNÝ, Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa a SNTL, Bratislava a Praha 1975

[77] PIŠÚT J., V. ČERNÝ, P. PREŠNAJDR, Zbierka úloh z kvantovej mechaniky, Alfa a SNTL, Bratislava a Praha 1985

[78] POPPER K. R., Quantum Theory and Schism in Physics, Routledge, London 1982

[79] SHANKAR R., Principles of Quantum Mechanics, Plenum Press, New York a London 1994

[80] SCHIFF L. I., Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York 1955

[81] SCHMUTZER E., Grundlagen der Theoretischen Physik, Vol. I–IV, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1991

[82] SCHRÖDINGER E., Annalen der Physik **79** (1926), 361; SCHRÖDINGER E., Annalen der Physik **79** (1926), 489; SCHRÖDINGER E., Die Naturwissenschaften **14** (1926), 664; SCHRÖDINGER E., Annalen der Physik **79** (1926), 734; SCHRÖDINGER E., Annalen der Physik **80** (1926), 437; SCHRÖDINGER E., Annalen der Physik **81** (1926), 109

[83] SCHWABL F., Quantum Mechanics, Springer, Berlin 2002

[84] SILVERMAN M. P., More Than One Mystery, Springer, New York 1995

[85] SOKOLOV A. A., YU. M. LOSKUTOV, I. M. TERNOV, Kvantovaja mechanika, Gos. Uč.-ped. Izd. Min. Prosv. RSFSR, Moskva 1962

[86] SOMMERFELD A., Atombau und Spektrallinien, Vol. 1–2, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1951

[87] ŠPOLSKIJ E. V., Atomová fyzika I, II, SNTL Praha, Praha 1957, 1958

[88] Voprosy pricinosti v kvantovoj mechanike, ed. YA. P. TERLECKIJ, A. A. GUSEV, Izd. Inn. Lit., Moskva 1955

[89] ULJANOV V. V., Zadaci po kvantovoj mechanike i kvantovoj statistike, Vysca Skola, Charkov 1980

[90] Quantum Theory and Measurement, ed. J. A. WHEELER, W. H. ZUREK, Princeton University Press, Princeton 1983

[91] Quantum Questions, ed. K. WILBER, New Science Library, Shanbhala 1985

[92] WILLIAMS F., Topics in Quantum Mechanics, Birkahäuser, Boston 2003

[93] Problems and Solutions on Quantum Mechanics, ed. YUNG-KUO LIM, World Scientific, Singapore 1998

[94] ZAJAC R., J. PIŠÚT, J. ŠEBESTA, Historické pramene súčasnej fyziky, Univerzita Komenského Bratislava, Bratislava 1997

[95] ZEH H. D., The Physical Basis of The Direction of Time, Springer, Berlin 1989

[96] ZEILINGER A., Rev. Mod. Phys. **71** (1999), S288

Rejstřík

prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.

ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY

Vydala Academia
nakladatelství Akademie věd České republiky
Legerova 61, 120 00 Praha 2
s podporou Akademie věd České republiky
Praha 2005

Vazbu navrhl Robin Brichta
Redaktorka publikace Jitka Zykánová
Technická redaktorka Běla Trpišovská
Sazbu, grafickou úpravu a zlom do stránek provedl autor
Kniha byla vysázena systémem LaTeX

Vytiskla **SERIFA**®, s. r. o., Praha 5

Vydání 1.
Ediční číslo 10172
ISBN 80-200-1316-4