

Úvod do kvantové mechaniky

Představa částic, coby drobných kuliček analogických běžným objektům známým z makrosvěta, začíná selhávat již zhruba při Planckových hmotnostech (10^{-8} kg). Při ještě menších hmotách částic se začíná stále výrazněji projevovat jejich vlnová podstata. Již v roce 1905 ukázal Albert Einstein, že fotoelektrický jev (o kterém zde budeme ještě podrobněji hovořit) je vysvětlitelný pouze za předpokladu, že elektromagnetické záření má mimo obvyklých vlnových, zároveň i korpuskulární vlastnosti. Postuloval tak částici světla, která byla později nazvána **foton**.

Energie fotonu o frekvenci ν je dána jednoduchým Einsteinovým vztahem

$$E = \nu \cdot h, \quad (3.1)$$

za který Einstein obdržel Nobelovu cenu v roce 1921.



Albert Einstein (1879 – 1955)

Vidíme tedy, že energie fotonu je přímo úměrná jeho frekvenci, kde konstantou úměrnosti je přitom **Planckova konstanta** $h \approx 6 \cdot 10^{-34}$ J·s, která vyplynula z ještě dřívějších úvah Maxe Plancka (psal se rok 1900) o vlastnostech vyzařování absolutně černého tělesa (viz podrobněji v kapitole 11).



Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858 – 1947)

V kvantové mechanice je obvyklé pracovat nikoli s frekvencemi, ale s tzv. **úhlovými frekvencemi**

$$\omega = 2\pi\nu . \quad (3.2)$$

V této symbolice má pak Einsteinova formule (3.1) obvyklejší tvar

$$E = \omega \cdot \hbar , \quad (3.3)$$

kde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ je tzv. **redukovaná Planckova konstanta** která je považována za skutečně elementární kvantum **akce** (veličiny dané součinem energie a času). Protože mezi frekvencí a vlnovou délkou platí jednoduchý převodní vztah

$$\nu = \frac{c}{\lambda} , \quad (3.4)$$

kde c je rychlost postupu vlnění, dostáváme pro energii fotonu alternativní vyjádření

$$E = \frac{c \cdot h}{\lambda} = m \cdot c^2 . \quad (3.5)$$

Počátkem 20. let minulého století navrhl francouzský fyzik Louis de Broglie, že by formule (3.5) měla platit zcela obecně nejen pro fotony, ale i pro všechny ostatní částice.

Z rovnosti (3.5) okamžitě plyne de Broglieův vztah mezi hybností částice p a její vlnovou délkou λ :

$$\lambda = \frac{h}{mu} = \frac{h}{p}, \quad (3.6)$$

kde u nyní značí obecně rychlost částice.



Louis Victor Pierre Raymond vévoda de Broglie (1892 – 1987)

De Broglieova hypotéza byla skutečně experimentálně potvrzena v experimentech s elektrony a dalšími částicemi, které po průchodu dvěma úzkými štěrbinami vzájemně interferovaly, jako by se vskutku jednalo o vlnění o vlnové délce λ .

Jestliže jsou částice zároveň vlněním, pak musí být popsány obecnou vlnovou funkcí:

$$\psi = A \exp \left[-i\omega \left(t - \frac{x}{u} \right) \right]. \quad (3.7)$$

Dosadíme-li do tohoto obecného výrazu $2\pi\nu$ za ω a $\lambda\nu$ za u , dostaneme vlnovou funkci zcela konkrétní částice:

$$\psi = A \exp \left[-2\pi i \left(\nu t - \frac{x}{\lambda} \right) \right], \quad (3.8)$$

neboli z de Broglieova vztahu

$$\psi = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]. \quad (3.9)$$

Výraz (3.9) je matematickým vyjádřením vlnového ekvivalentu volné částice s celkovou energií E a hybností p , pohybující se ve směru $+x$.

Jestliže částice podléhá nejruznějším omezením, jakým je např. dutina rezonátoru, potřebujeme znát základní diferenciální rovnici, pro funkci ψ v takovémto omezujícím prostředí.

Derivujeme li (3.9) dvakrát podle x a jedenkrát podle t , dostaneme

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi,$$

Odtud

$$p^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (3.11)$$

$$E\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Při nerelativistických rychlostech (malých ve srovnání s rychlostí světla) je celková energie E částice prostým součtem její energie kinetické a potenciální energie V , která je obecně funkcí polohy x a času t :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V. \quad (3.13)$$

Vynásobením této rovnice vlnovou funkcí ψ částice máme

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi . \quad (3.14)$$

Dosazením výrazů (3.11) a (3.12) do (3.14) obdržíme hledanou diferenciální rovnici :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V\psi . \quad (3.15)$$

Tuto základní pohybovou rovnici kvantové mechaniky odvodil Erwin Schrödinger v roce 1925, který je tak právem považován za rok zrodu kvantové mechaniky.



Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887 – 1961)

Protože reálný prostoročas je čtyřrozměrný, přičemž jeden rozměr připadá na čas a zbylé 3 na prostor, je potřeba zobecnit Schrödingerovu rovnici na trojrozměrný tvar:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - V\psi , \quad (3.16)$$

kde Laplaceův operátor ∇^2 je tvaru

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \equiv \Delta . \quad (3.17)$$



Pierre-Simon, markýz de Laplace (1749 – 1827)

Pro naše účely nám prozatím kvůli zjednodušení výkladu postačí Schrödingerova rovnice v jednorozměrném tvaru (3.15).

Napíšeme si nyní rovnici k ní komplexně sdruženou:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - V\psi^* . \quad (3.18)$$

Nejprve vynásobíme (3.15) funkcí ψ^* a (3.18) funkcí ψ :

$$-i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) - \psi^* V\psi , \quad (3.19)$$

$$i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) - \psi V\psi^* . \quad (3.20)$$

Nyní odečteme (3.20) od (3.19) a dostaneme vztah

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) , \quad (3.21)$$

který lze podle věty o derivaci součinu zjednodušit na

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right). \quad (3.22)$$

Vynásobením faktorem $-\frac{i}{\hbar}$ a integrací této rovnice máme

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \psi^* \psi \, dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right]_{x_1}^{x_2}. \quad (3.23)$$

Veličina na levé straně, označuje časovou změnu absolutní hodnoty kvadrátu vlnové funkce v nějaké oblasti vymezené body x_1, x_2 .

Absolutní hodnota kvadrátu vlnové funkce je (na rozdíl od samotné vlnové funkce) reálnou veličinou a má tedy přímý fyzikální význam – jedná se o veličinu pozorovatelnou.

Jak ukázal Max Born roku 1927, její fyzikální význam je v tom, že určuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částice (kvanta energie) v daném místě a v daném čase.



Max Born (1882 – 1970)

Samotná veličina

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \psi^* \psi \, dx \equiv \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 \, dx = S_1 - S_2 \quad (3.24)$$

nám popisuje tzv. **zákon zachování pravděpodobnosti** mezi přítokem (S_1) a výtokem (S_2) pravděpodobnosti do oblasti vymezené body x_1, x_2 .

Veličina

$$S = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \quad (3.25)$$

se tedy nazývá **tok pravděpodobnosti**.

Mějmež volnou částici s energií E a hybností p .

Vlnová funkce této částice je dána vztahem (3.9) a funkce k ní komplexně sdružená bude

$$\psi^* = A^* \exp \left[\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]. \quad (3.26)$$

Máme tedy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{ip}{\hbar} A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] = \frac{ip}{\hbar} \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial x} &= \frac{ip}{\hbar} A^* \exp \left[\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] = -\frac{ip}{\hbar} \psi^*, \end{aligned} \quad (3.27)$$

takže z definice (3.25) dostáváme pro tok pravděpodobnosti

$$S = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{ip}{\hbar} \psi^* \psi + \frac{ip}{\hbar} \psi^* \psi \right) = \frac{p}{m} \psi^* \psi = |\psi|^2 u, \quad (3.28)$$

neboť $\frac{p}{m} = u$ je rychlost částice. Tok pravděpodobnosti je u volné

částice tedy prostým součinem hustoty její pravděpodobnosti a její rychlosti.

Zákon zachování pravděpodobnosti v tomto případě zní:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = |\psi|_{x_1}^2 \cdot u_1 - |\psi|_{x_2}^2 \cdot u_2 . \quad (3.29)$$

Kvantová mechanika tak koncem 20. let minulého století dospěla k překvapivému zjištění: ačkoliv Schrödingerova rovnice popisuje časový vývoj vlnové funkce zcela deterministicky (stejně jako Newtonova klasická mechanika popisuje deterministicky časový vývoj vlny na vodní hladině), sama vlnová funkce nemá vůbec žádný fyzikální význam. Teprve kvadrát její absolutní hodnoty je pozorovatelnou veličinou. Určuje však pouze prostorovou distribuci hustoty pravděpodobnosti nalezení částice (kvanta energie) v určité oblasti prostoru, v závislosti na čase. Teprve v okamžiku měření, kdy je částice skutečně nalezena v některém bodě prostoru, přestanou se projevovat její vlnové vlastnosti a naopak se projeví její vlastnosti korpuskulární. Tehdy hovoříme o tzv. **kolapsu vlnové funkce**. Přestože tedy před aktem měření nemůžeme o částici říci nic určitějšího, než co nám dovoluje kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce, lze stanovit střední hodnotu kterékoli její polohy, tj. oblast, v níž bude daná částice nejpravděpodobněji nalezena. V matematice odpovídá střední hodnota běžnému aritmetickému průměru:

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_i N_i x_i}{\sum_i N_i} , \quad (3.30)$$

kde N je četnost. Zabýváme-li se jedinou částicí, má četnost význam pravděpodobnosti P_i výskytu částice v okolí dx bodu x_i . Tato pravděpodobnost je

$$P_i = |\psi_i|^2 dx , \quad (3.31)$$

kde ψ_i je vlnová funkce částice vypočtená v bodě x_i . Provedením této substituce a záměnou sumace integrací (přechodem od diskrétního

sčítání ke spojitému) vidíme, že střední hodnota polohy jedné částice je

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx} . \quad (3.32)$$

Jmenovatel odpovídá pravděpodobnosti výskytu částice kdekoli ve vesmíru a je tedy roven jedné. Proto je

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx . \quad (3.33)$$

Stejný postup, jaký jsme právě odvodili, lze použít k výpočtu střední hodnoty nejen polohy, ale libovolné další kvantové veličiny.

Postup výpočtu $\langle p \rangle$ a $\langle E \rangle$ je možno získat derivováním vlnové funkce (3.9) volné částice podle x a t . Pro energii je výsledkem formule (3.12), kterou je možno zapsat rovněž v ekvivalentním tvaru

$$E\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi . \quad (3.34)$$

Pro hybnost dostáváme

$$p\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi . \quad (3.35)$$

Srovnáním levých a pravých stran (3.34), (3.35) dospíváme k dalšímu překvapivému závěru: dynamické veličině p odpovídá v kvantové mechanice diferenciální operátor

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.36)$$

a podobně dynamické veličině E odpovídá diferenciální operátor

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} . \quad (3.37)$$

Operátory nám říkají, jakou operaci máme provést s následující funkcí (značíme je obvykle stříškou kvůli odlišení od matic a vektorů).

Pro operátor \hat{T} kinetické energie odtud plyne

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} . \quad (3.38)$$

Pro operátor \hat{H} celkové energie částice (nazývaný též Hamiltonův operátor – zkráceně **hamiltonián**) tedy máme rovnost

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V , \quad (3.39)$$

která, po vynásobení obou stran vlnovou funkcí ψ zjevně vede na Schrödingerovu rovnici.



Sir William Rowan Hamilton (1805 – 1865)

Nalezených operátorů hybnosti a energie můžeme nyní využít k nalezení středních hodnot hybnosti a energie částice:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx, \quad (3.40)$$

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{E} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx. \quad (3.41)$$

klíčový výraz $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{G}(x, p) \psi dx$ se obvykle označuje zkráceným symbolem $\langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle$ nazývaným **Diracův bracket** (z anglického výrazu označujícího závorku), přičemž vektor $|\psi\rangle$ označujeme jako **ketvektor**, zatímco vektor k němu komplexně sdružený $\langle \psi |$ jako **bravektor**. Diracův bracket je z matematického hlediska skalárním součinem dvou navzájem komplexně sdružených vektorů (vlnových funkcí) v tzv. **Hilbertově prostoru** (nekonečněrozměrném komplexním prostoru funkcí, na němž je definován skalární součin riemannovskou integrací).



David Hilbert (1862 - 1943)

Obecně tak pro střední hodnotu nějaké kvantové veličiny G můžeme psát

$$\langle G(x, p) \rangle = \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle. \quad (3.42)$$

Střední odchylce veličiny g , která je klasicky definována vztahem $\Delta g = g - \langle g \rangle$, odpovídá v kvantové mechanice ekvivalentní operátorové vyjádření

$$\Delta \hat{G} = \hat{G} - \langle g \rangle \hat{1}. \quad (3.43)$$

Dosazením (3.43) do (3.42) dostaneme její střední hodnotu

$$\langle \Delta \hat{G} \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{G} | \psi \rangle = 0. \quad (3.44)$$

Variance veličiny g , definovaná vztahem $\langle g \rangle^2 = \langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2$, je v kvantové mechanice vyjádřena operátorovým vztahem

$$\langle \psi | \Delta \hat{G}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{G}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle^2. \quad (3.45)$$

Druhou odmocninu z variance označujeme jako střední kvadratickou odchylku.

Volná částice

Fázová a grupová rychlost

Je zřejmé, že de Broglieho vlny nelze vyjádřit jednoduchým vzorcem (3.9), který popisuje nekonečnou řadu vln se stejnou amplitudou A_0 . Místo toho očekáváme, že vlnové reprezentaci pohybující se volné částice bude odpovídat vlnové klubko, kde vytvářející vlny mají amplitudy, jež se mění s pravděpodobností výskytu částice. Jak známo, vlnové klubko lze získat superpozicí nejméně dvou vln, jež se vzájemně liší svojí vlnovou délkou. Závisí-li fázová rychlost těchto vln na vlnové délce, nepostupují obě vlny stejnou rychlostí a vlnové klubko má rychlost odlišnou od rychlosti jednotlivých generujících vln. Předpokládejme, že vlnové klubko je generováno dvěma vlnami, jež mají stejnou amplitudu A_0 , ale liší se o $d\omega$ v úhlové frekvenci a o dk ve vlnovém čísle. Generující vlny tak můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_0 \cos(\omega t - kx), \\ \psi_1 &= A_0 \cos[(\omega t + d\omega)t - (k + dk)x].\end{aligned}\tag{3.46}$$

Pro vlnové klubko tak s pomocí známých identit

$$\begin{aligned}\cos \alpha + \cos \beta &= 2 \cos \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \cos \frac{1}{2}(\alpha - \beta), \\ \cos(-\vartheta) &= \cos(\vartheta),\end{aligned}\tag{3.47}$$

dostaneme

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = 2A_0 \cos \frac{1}{2}[(2\omega + d\omega)t - (2k + dk)] \cos \frac{1}{2}(d\omega t - dkx).\tag{3.48}$$

Jelikož $d\omega$ a dk můžeme ve srovnání s ω a k zanedbat, můžeme vlnovou funkci (3.48) přibližně vyjádřit jako

$$\psi = 2A_0 \cos(\omega t - kx) \cos \frac{1}{2}(d\omega t - dkx),\tag{3.49}$$

což představuje vlnu s úhlovou frekvencí ω a vlnovým číslem k , která je modulována vlnou s kruhovou frekvencí $\frac{d\omega}{2}$ a vlnovým číslem $\frac{dk}{2}$.

Fázová rychlost je

$$w = \frac{\omega}{k},\tag{3.50}$$

kdežto grupová rychlost (rychlost pohybu vlnového klubka) je

$$u = \frac{d\omega}{dk}.\tag{3.51}$$

Úhlová frekvence a vlnové číslo de Broglieho vlny, příslušející částici s klidovou hmotou m_0 , která se pohybuje rychlostí v , je

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{mc^2}{\hbar} = \frac{m_0c^2}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}},$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{mv}{\hbar} = \frac{m_0v}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}.$$
(3.52)

Fázová rychlost w této částice je tedy

$$w = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v},$$
(3.53)

což pro částici s $m_0 > 0$ nejenže převyšuje rychlost částice samotné, ale dokonce i rychlost světla. Fázová rychlost w de Broglieho vln nemá sama o sobě přímý fyzikální význam

Naproti tomu grupová rychlost u de Broglieho vlnového klubka spojeného s částicí vychází

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\frac{d\omega}{dv}}{\frac{dk}{dv}} = \frac{\frac{m_0v}{\hbar\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}}}{\frac{m_0}{\hbar\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}}} = v.$$
(3.54)

De Broglieho vlnové klubko, spojené s pohybující se částicí, se pohybuje touž rychlostí, jako částice.

Gaussovské vlnové klubko

Nyní budeme diskutovat případ řešení jednorozměrné Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, které lze psát v $t = 0$ ve tvaru tzv.

gaussovského vlnového klubka

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2d^2}\right), \quad (3.55)$$

kde d je kladné reálné číslo. Snadno lze ověřit, že tato vlnová funkce splňuje normovací podmínku

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi d^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{d^2}\right) dx = 1, \quad (3.56)$$

kde $|x - a| = d$ udává vzdálenost od středu vlnového klubka, pro níž hustota pravděpodobnosti klesne na hodnotu $1/e$ ve srovnání s její amplitudou.

Obr. 3.1



Snadno vypočteme střední hodnotu vlnové funkce (3.55):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, 0) x \psi(x, 0) dx = a, \quad (3.57)$$

kteřá je dle očekávání totožná s polohou středu vlnového klubka. Podobně snadno lze vypočíst i

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) dx = \frac{d^2}{2} + a^2. \quad (3.58)$$

Odtud pak dostáváme střední kvadratickou odchylku souřadnice

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) (x - \langle x \rangle)^2 \psi(x,0) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) (x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2) \psi(x,0) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) dx - 2\langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x \psi(x,0) dx + \\ &= \langle x \rangle^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) \psi(x,0) dx = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

podobný výpočet můžeme provést i pro operátor impulsu. Nejdříve dostaneme

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x,0) dx = 0, \quad (3.60)$$

kde integrál vyšel roven nule, neboť integrovaná funkce je lichá. Dále vypočteme

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) i \frac{d^2}{dx^2} \psi(x,0) dx = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \quad (3.61)$$

Pro střední kvadratickou odchylku impulsu odtud plyne

$$\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \quad (3.62)$$

Pro vlnové klubko (3.55) vychází tedy nenulová střední kvadratická odchylka jak souřadnice, tak i impulsu. Při měřeních na kvantověmechanickém souboru daném touto vlnovou funkcí tedy nedostáváme ostré hodnoty souřadnice a impulsu, nýbrž hodnoty, jejichž distribuce pravděpodobnosti závisí na volbě parametru d . Je zřejmé, že čím je částice přesněji lokalizována v tzv. **souřadnicovém prostoru**, tím nepřesněji je lokalizována v **impulsovém prostoru** (tzn. tím nepřesněji je určen její impuls) a naopak. Součin kvadratických odchylek zůstává konstantní:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (3.63)$$

odkud po odmocnění máme

$$\langle x - \langle x \rangle \rangle \langle \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle \rangle = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.64)$$

Je zřejmé, že obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro jednorozměrný pohyb volné částice lze psát ve tvaru superpozice řešení (3.9)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \exp \frac{p^2 t - px}{2m i \hbar} dp, \quad (3.65)$$

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

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) \exp \frac{px}{i\hbar} dx. \quad (3.66)$$



Jean Baptiste Joseph Fourier (1768 – 1830)

Dosazením (3.66) a (3.55) do (3.65) získáme hledaný výraz pro jednorozměrnou vlnovou funkci volné částice

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\hbar\pi^{\frac{5}{4}}d^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{px}{i\hbar} - \frac{(x-a)^2}{2d^2}\right) dx \exp \frac{\frac{p^2}{2m}t - px}{i\hbar} dp. \quad (3.67)$$

Princip neurčitosti

Pozoruhodnou vlastností kvantového světa je jeho nekumutativita. Spočtěme si pro jednoduchost střední hodnotu součinu operátorů hybnosti a polohy:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}\hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial x}{\partial x} \right) dx = \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \right) = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\hbar}{i}, \quad (3.68) \\
\langle \hat{x}\hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.
\end{aligned}$$

Odkud plyne nerovnost

$$\langle \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x}\hat{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \neq 0. \quad (3.69)$$

Definujme algebraickou strukturu zvanou **komutátor**:

$$[\hat{p}; \hat{x}] = \langle \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x}\hat{p} \rangle. \quad (3.70)$$

Relaci (3.69) pak můžeme zapsat v obvyklejším tvaru

$$[\hat{p}; \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \neq 0. \quad (3.71)$$

Říkáme, že operátor polohy a hybnosti spolu vzájemně nekomutují. To je vlastnost, která v klasické mechanice nemá obdoby a naopak je zcela běžnou v mechanice kvantové.

Předpokládejme, že máme dvě nekomutující proměnné A, B . Potom

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (3.72)$$

Spočítejme střední kvadratické chyby měření. Pro součin jejich kvadrátů (variancí) platí

$$\begin{aligned}
(\Delta a_{kv})^2 (\Delta b_{kv})^2 &= \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle = \langle \Delta \hat{A} \psi | \Delta \hat{A} \psi \rangle \langle \Delta \hat{B} \psi | \Delta \hat{B} \psi \rangle = \\
&= \|\Delta \hat{A} \psi\|^2 \|\Delta \hat{B} \psi\|^2 \geq \left| \langle \Delta \hat{A} \psi | \Delta \hat{B} \psi \rangle \right|^2 = \left| \langle \psi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \langle \psi | \frac{1}{2} (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) + \frac{1}{2} (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} - \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \geq \\
&\geq \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [\hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle] | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{2} \langle \psi | i \hat{C} | \psi \rangle \right|^2
\end{aligned} \tag{3.73}$$

Po odmocnění dostáváme

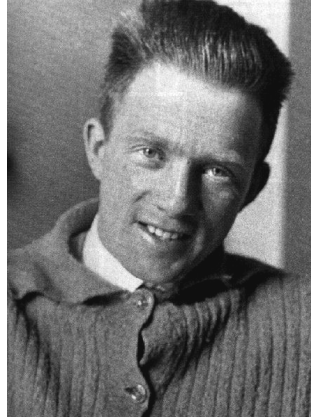
$$\Delta a_{kv} \Delta b_{kv} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|. \tag{3.74}$$

Dosadíme-li sem např. výsledek (3.71), máme $\hat{C} = \hbar \hat{1}$ a tedy

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle \right| = \frac{\hbar}{2}. \tag{3.75}$$

Pozorovatelné důsledky nekomutativity některých operátorů tedy spočívají v tom, že jim odpovídající veličiny nelze měřit současně s neomezenou přesností.

Matematicky tento princip poprvé formuloval německý fyzik Werner Heisenberg v roce 1928.



Werner Heisenberg (1901 – 1976)

Heisenbergův princip neurčitosti, jak se tento poznatek nazývá, tedy říká, že součin přesnosti, s jakou měříme např. hybnost částice a současně její polohu, bude vždy větší, než polovina redukované Planckovy konstanty. Změříme-li tedy např. hybnost s přesností na 34 desetinných míst (řád Planckovy konstanty), bude již neurčitost její polohy v řádu metrů. A naopak, změříme-li velice přesně polohu, rozmaže se nám informace o hybnosti.

Heisenbergovy relace neurčitosti platí mezi všemi veličinami, jejichž operátory spolu vzájemně nekomutují. Platí tedy např. i mezi energií a časem:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.76)$$

o čemž se snadno přesvědčíme, pokud dosadíme odpovídající operátory do (3.72).

Bezčasová Schrödingerova rovnice – stacionární stavy

Všimněme si nyní, že jednorozměrnou vlnovou funkci Ψ můžeme upravit do tvaru

$$\Psi = A \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] = A \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \equiv \psi \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (3.77)$$

v němž je Ψ součinem časově závislé funkce $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$ a funkce polohy ψ .

Ve skutečnosti mají všechny vlny v konzervativních silových polích časovou závislost tohoto tvaru.

Dosadíme-li nyní Ψ do Schrödingerovy rovnice (3.15), obdržíme po drobné úpravě rovnici

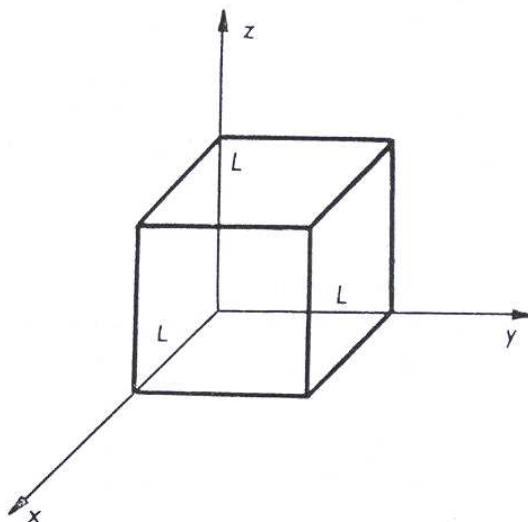
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 , \quad (3.78)$$

což je tzv. **stacionární vlnová rovnice**. Její trojrozměrný tvar je

$$\nabla^2 \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 . \quad (3.79)$$

Řešme nyní tuto rovnici pro nitro krychlové dutiny, kde je na ψ kladena hraniční podmínka $\psi = 0$ všude na stěnách dutiny.

Obr. 3.2



Rovnice (3.79) obsahuje všechny tři souřadnice x, y, z .

Abychom našli řešení, musíme ji nejprve separovat na tři nezávislé rovnice, z nichž každá obsahuje jen jednu souřadnici.

Předpokládejme proto, že vlnová funkce $\psi(x, y, z)$ je ve skutečnosti součinem tří funkcí $\psi_x(x)$, $\psi_y(y)$, $\psi_z(z)$, jež závisejí vždy jen na jedné proměnné x , y , resp. z , tj.

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z) . \quad (3.80)$$

Tento předpoklad je rozumný, neboť obsahuje jen nezávislost změny ψ s každou souřadnicí na změnách ψ s ostatními souřadnicemi.

Parciální derivace funkce (3.80) jsou

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \psi_y \psi_z \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} , \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &= \psi_x \psi_z \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} , \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &= \psi_x \psi_y \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Dosadíme-li nyní tyto parciální derivace spolu s $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$ do (3.79), dostaneme

$$\psi_y \psi_z \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} + \psi_x \psi_z \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} + \psi_x \psi_y \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_x \psi_y \psi_z = 0 . \quad (3.82)$$

Dělením této rovnice vlnovou funkcí (3.80) a uspořádáním členů máme

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} + \frac{1}{\psi_y} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} + \frac{1}{\psi_z} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} . \quad (3.83)$$

Každý člen na levé straně rovnice (3.83) je funkcí jiné proměnné a pravá strana je konstanta nezávislá na hodnotách x , y , z .

Každý člen nalevo se tudíž musí rovnat samostatně konstantě, což lze vyjádřit vztahy

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} = -k_x^2, \quad (3.84)$$

$$\frac{1}{\psi_y} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} = -k_y^2, \quad (3.85)$$

$$\frac{1}{\psi_z} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = -k_z^2, \quad (3.86)$$

kde konstanty k jsou ve skutečnosti složkami vlnového vektoru \mathbf{k} stojaté vlny uvnitř krychlové dutiny, které musí splňovat podmínku

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.87)$$

Rovnice (3.84), (3.85), (3.86) mohou mít jen sinová a kosinová řešení.

Okrajové podmínky kladené na ψ požadují, aby bylo $\psi = 0$ na stěnách dutiny, tj. v místech, kde je x, y, z rovno 0 nebo L .

Těmto okrajovým podmínkám vyhovuje jen funkce sinus, neboť jen ona se rovná v počátku 0.

Nyní již tedy můžeme zapsat hledanou vlnovou funkci ψ ve tvaru

$$\psi(x, y, z) = \psi_x \psi_y \psi_z = A \cdot \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z). \quad (3.88)$$

Volbou funkce sinus jsme zatím zajistili, aby bylo $\psi = 0$ v počátku.

Nyní musíme určit velikosti k_x, k_y, k_z komponent vlnového vektoru tak, aby $\psi = 0$ i při $x, y, z = L$.

Tyto, tzv. **vlastní hodnoty** vlnové funkce ψ , získáme z druhé okrajové podmínky, coby

$$\begin{aligned} k_x \cdot L &= \pi \cdot n_x; & n_x &\in \mathbf{N}, \\ k_y \cdot L &= \pi \cdot n_y; & n_y &\in \mathbf{N}, \\ k_z \cdot L &= \pi \cdot n_z; & n_z &\in \mathbf{N}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Toto můžeme napsat též ekvivalentním způsobem z pomoci vlnového čísla k pro nějž platí

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{L^2} + \frac{n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{L^2} \right); \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N}. \quad (3.90)$$

Vlnové funkce uvnitř dutiny jsou pak dány výrazem

$$\psi = A \cdot \sin \frac{n_x \pi \cdot x}{L} \cdot \sin \frac{n_y \pi \cdot y}{L} \cdot \sin \frac{n_z \pi \cdot z}{L}; \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N}. \quad (3.91)$$

a možné energie jsou

$$E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (3.92)$$

Hodnoty vlnového čísla k tvoří jednoduchou posloupnost jak jsme zvyklí v jednorozměrném případě.

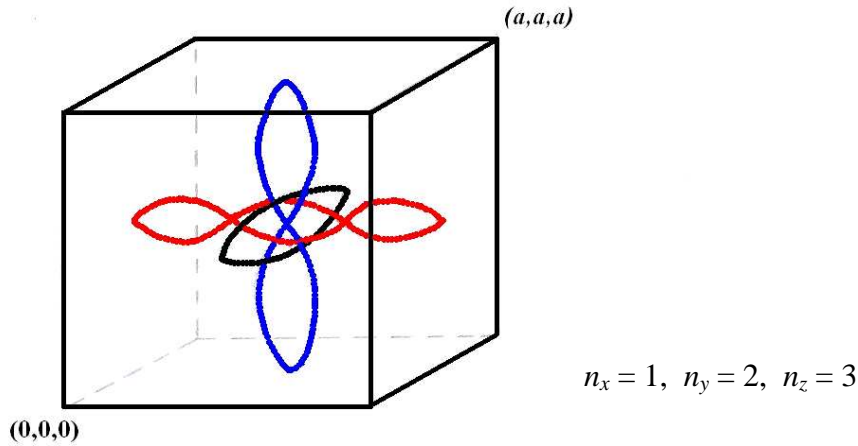
Může se stát, že i více než jedna stojatá vlna má tutéž hodnotu k , a tudíž stejnou frekvenci a stejnou energii. Tuto skutečnost použil dánský fyzik Niels Bohr pro popis energetických hladin elektronů v atomu vodíku.



Niels Henrik David Bohr (1885 – 1962)

Mají-li dvě nebo více stojatých vln společnou frekvenci, nazýváme je **degenerovanými stojatými vlnami**.

Obr. 3.3



V dutině je stupeň degenerace tím větší, čím větší má dutina stupeň symetrie.

V našem případě krychlové dutiny je vůbec největší.

K tomu, aby v krychlové dutině o straně L existoval mód (3.88), musí délka každé komponenty jeho vlnového vektoru být rovna celočíselnému násobku hodnoty π/L .

Módy můžeme znázornit zobrazením bodů (k_x, k_y, k_z) v třírozměrném prostoru.

V případě obecně obdélníkové dutiny o stranách délky L_x, L_y, L_z , můžeme (3.90) okamžitě zobecnit

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right); \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N} \quad (3.93)$$

odkud pro možné energie plyne

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad (3.94)$$

Lineární harmonický oscilátor

Harmonickým oscilátorem rozumíme systém, jehož potenciální energie je kvadratickou funkcí souřadnic. V nejjednodušším jednorozměrném případě si jej lze představit jako pohyb bodu pod vlivem síly, která je přímo úměrná vzdálenosti bodu od rovnovážné polohy a má opačný směr, tedy

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -k(x - x_0). \quad (3.95)$$

Řešením je harmonická funkce

$$x = x_0 + x_{\max} \sin(\omega t + \varphi). \quad (3.96)$$

Zpětným dosazením (3.96) do rovnice (3.95) zjistíme, že

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (3.97)$$

Pro kinetickou energii odtud dostáváme (s vědomím že $v_0 = 0$)

$$\begin{aligned} E &= \int_{x_0}^x F dx = m \int_{x_0}^x \frac{d^2 x}{dt^2} dx = \int_{x_0}^x \frac{dv}{dt} dx = \int_{v_0}^v \frac{dx}{dt} dv = \int_{v_0}^v v dv = \\ &= \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} k x_{\max}^2 \cos^2(\omega t + \varphi), \end{aligned} \quad (3.98)$$

a pro energii potenciální

$$\begin{aligned}
V &= \int_{x_0}^x -F dx = k \int_{x_0}^x (x - x_0) dx = k \left[\frac{x^2}{2} - x_0 x \right]_{x_0}^x = \\
&= k \left(\frac{x^2}{2} - x_0 x - \frac{x_0^2}{2} + x_0^2 \right) = \frac{k}{2} (x^2 - 2x_0 x + x_0^2) = \frac{k}{2} (x - x_0)^2 = \\
&= \frac{1}{2} k x_{\max}^2 \sin^2 (\omega t + \varphi).
\end{aligned}
\tag{3.99}$$

Celková energie harmonického oscilátoru tedy bude

$$W = E + V = \frac{1}{2} k x_{\max}^2 (\sin^2 (\omega t + \varphi) + \cos^2 (\omega t + \varphi)) = \frac{1}{2} m \omega^2 x_{\max}^2,
\tag{3.100}$$

a pro celkový hamiltonián kvantového oscilátoru odtud plyne

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2.
\tag{3.101}$$

Zavedeme-li hermitovské operátory

$$\hat{x}' = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x}, \quad \hat{p}' = \left(\frac{1}{m\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p},
\tag{3.102}$$

upravíme (3.101) na tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2).
\tag{3.103}$$

Operátory \hat{x}' a \hat{p}' splňují komutační relace

$$\begin{aligned}
[\hat{x}', \hat{p}'] &= -[\hat{p}', \hat{x}'] = -\left[\left(\frac{1}{m\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p}, \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x} \right] = \\
&= -\left[\left(\frac{m\omega}{m\omega\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p}\hat{x} - \left(\frac{m\omega}{m\omega\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x}\hat{p} \right] = -\frac{1}{\hbar}(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \\
&= -\frac{1}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = i.
\end{aligned} \tag{3.104}$$

Zavedeme-li nyní dvojici vzájemně adjungovaných operátorů

$$\hat{a}^- = \frac{1}{2}(\hat{x}' + i\hat{p}'), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{2}(\hat{x}' - i\hat{p}'), \tag{3.105}$$

které splňují komutační relaci

$$\begin{aligned}
[\hat{a}^-, \hat{a}^+] &= \frac{1}{2}[(\hat{x}' + i\hat{p}')(\hat{x}' - i\hat{p}') - (\hat{x}' - i\hat{p}')(\hat{x}' + i\hat{p}')] = \\
&= \frac{1}{2}[(\hat{x}'^2 + i\hat{p}'\hat{x}' - \hat{x}'i\hat{p}' + \hat{p}'^2) - (\hat{x}'^2 + \hat{x}'i\hat{p}' - i\hat{p}'\hat{x}' + \hat{p}'^2)] = \\
&= \frac{1}{2}[\hat{x}'^2 + i[\hat{p}', \hat{x}'] + \hat{p}'^2 - (\hat{x}'^2 + i[\hat{x}', \hat{p}'] + \hat{p}'^2)] = \\
&= \frac{i}{2}(-2[\hat{p}', \hat{x}']) = -i^2 = 1,
\end{aligned} \tag{3.106}$$

můžeme psát hamiltonián (3.103) ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^-\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}^-) = \frac{1}{2}\hbar\omega\{\hat{a}^-, \hat{a}^+\}, \tag{3.107}$$

kde veličinu $\{A, B\} = (AB + BA)$ nazýváme **antikomutátor**.

Vytvoříme-li dále operátor

$$\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}^-, \tag{3.108}$$

zjednoduší se nám (3.107) na

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.109)$$

Úloha nalezení vlastních hodnot energie lineárního harmonického oscilátoru se nám tím převedla na úlohu nalézt spektrum, operátoru \hat{N}

$$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle. \quad (3.110)$$

V kvantové mechanice bývá často zvykem vynechávat stále se opakující symbol ψ vlnové funkce v zápisu stavových vektorů a nahrazovat jej pouze indexy. Rovnici (3.110) tak budeme v dalším psát stručněji jako

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (3.111)$$

Vlastní vektory operátoru \hat{N} předpokládáme normované, takže

$$\langle n|n\rangle = 1. \quad (3.112)$$

Vynásobením rovnice (3.111) zleva bravektorem $\langle n|$ dostaneme

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = n. \quad (3.113)$$

Protože kreační a anihilační operátor jsou vzájemně hermitovsky sdružené, můžeme tento vztah přepsat do tvaru

$$\langle \hat{a}^- n | \hat{a}^- n \rangle = n, \quad (3.114)$$

neboť $\langle \hat{a}^- | = \hat{a}^+$, $| \hat{a}^- \rangle = \hat{a}^-$.

Podle vlastností skalárního součinu je však skalární součin mezi dvěma stejnými stavy reálný a větší nebo roven nule, kde nula nastává

tehdy a jen tehdy, je-li stavový vektor nulový. Odtud plyne pozorování, že

$$n \geq 0. \quad (3.115)$$

Vynásobíme nyní rovnici (3.111) anihilačním operátorem zleva

$$\hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^- |n\rangle = n \hat{a}^- |n\rangle \quad (3.116)$$

a použijeme komutační relaci (306)

$$(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^-) |a^- n\rangle = (\hat{a}^+ \hat{a}^- + 1) |a^- n\rangle = n |a^- n\rangle. \quad (3.117)$$

Po převedení jedničky na pravou stranu dostaneme

$$\hat{N} |\hat{a}^- n\rangle = (n-1) |\hat{a}^- n\rangle, \quad (3.118)$$

kde $|\hat{a}^- n\rangle$ označuje stav vzniklý působením operátoru \hat{a}^- na stav $|n\rangle$. Odtud vyplývá, že jestliže stav $|n\rangle$ odpovídá vlastní hodnotě n , potom stav $|\hat{a}^- n\rangle$ odpovídá vlastní hodnotě $n - 1$.

Podobně bychom dokázali platnost formule

$$\hat{N} |\hat{a}^+ n\rangle = (n+1) |\hat{a}^+ n\rangle, \quad (3.119)$$

podle níž stav $|\hat{a}^+ n\rangle$ odpovídá vlastní hodnotě $n + 1$.

Můžeme tedy zkonstruovat posloupnost vlastních vektorů

$$\left| (\hat{a}^-)^1 n \right\rangle, \left| (\hat{a}^-)^2 n \right\rangle, \dots, \left| (\hat{a}^-)^p n \right\rangle \quad (3.120)$$

odpovídajících vlastním hodnotám

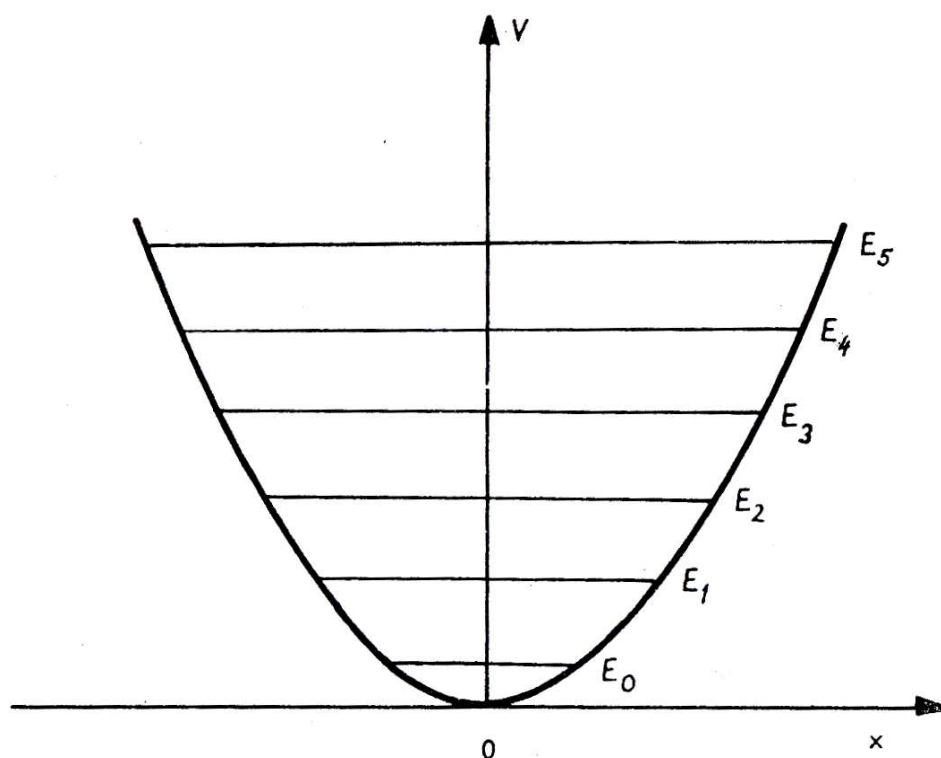
$$n-1, n-2, \dots, n-p. \quad (3.121)$$

Jak plyne z (3.115), je \hat{N} pozitivně definitní operátor, neboť jeho vlastní hodnoty jsou reálné a nezáporné. Zároveň je vidět, že posloupnost (3.120) může mít jen konečný počet členů, přičemž působením anihilačního operátoru na vakuový stav $|0\rangle$ se již nic nemění

$$\hat{a}^- |0\rangle = 0. \quad (3.122)$$

Podobným způsobem bychom ukázali, že působením kreačního operátoru na vakuový stav lze vytvořit nekonečnou posloupnost navzájem ortogonálních vlastních vektorů operátoru \hat{N} , příslušejících vlastním hodnotám 1, 2,

Obr. 3.4

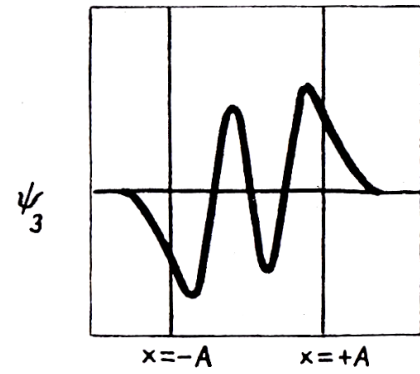
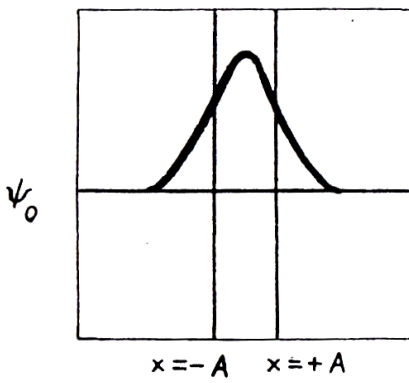
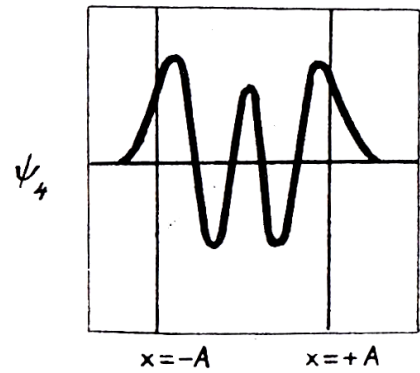
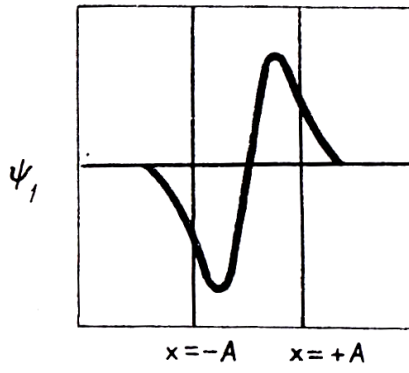
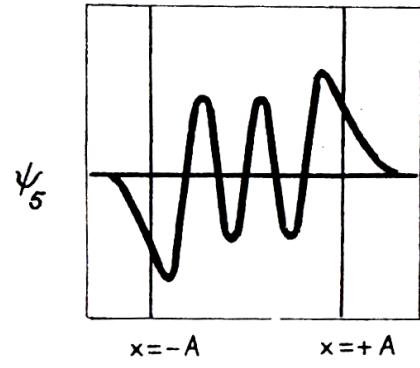
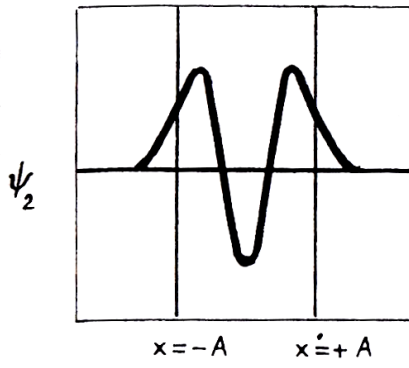


Z předchozí diskuse vyplývá, že vlastními hodnotami operátoru \hat{N} jsou všechna přirozená čísla včetně nuly.

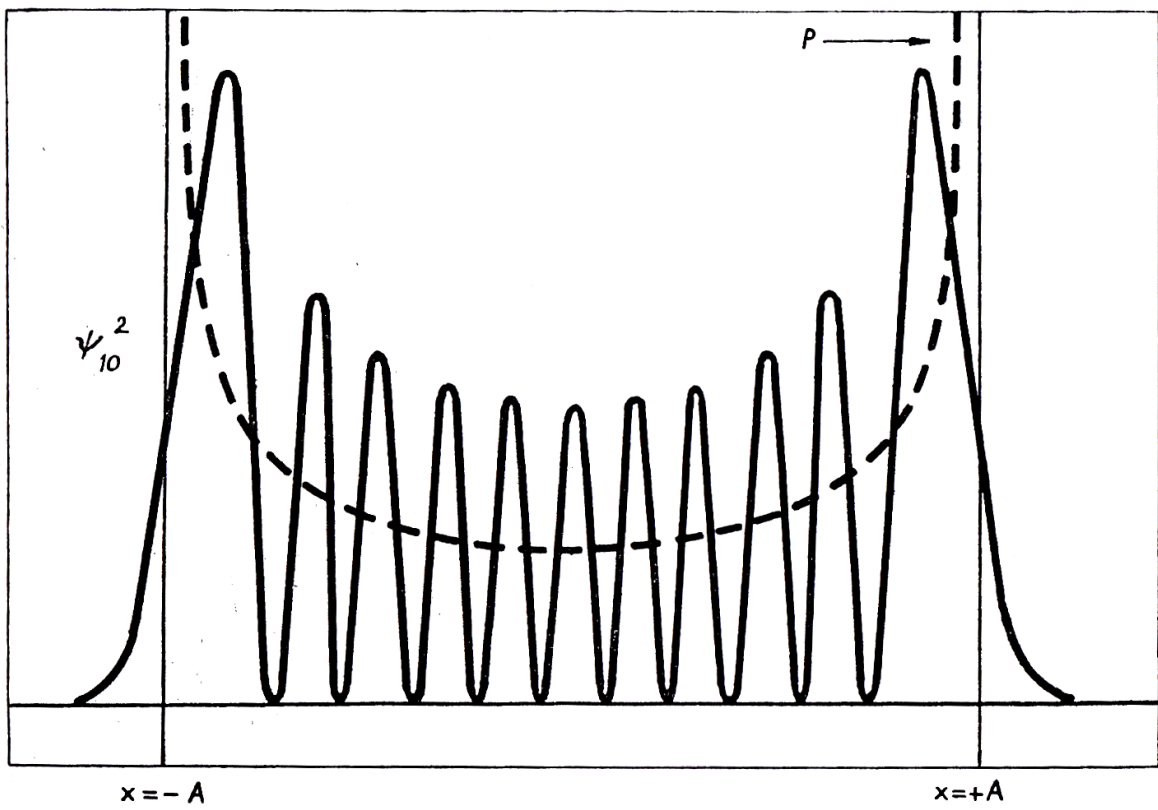
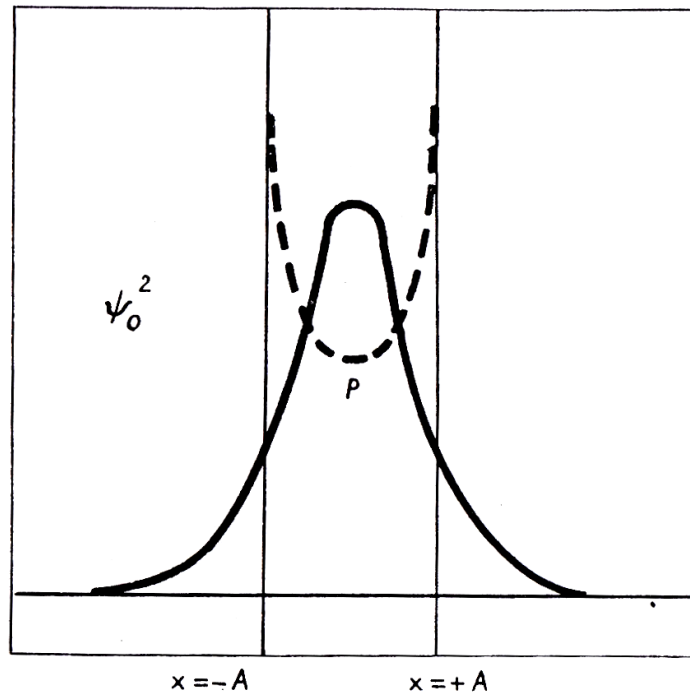
Pro vlastní hodnoty energie dostáváme z (3.109) vztah

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.123)$$

Obr. 3.5



Obr. 3.6



Protože operátor \hat{a}^- zmenšuje a operátor \hat{a}^+ zvětšuje počet kvant $\omega\hbar$ systému o jednotku, nazývají se příslušné operátory anihilační, resp. kreační. Operátor \hat{N} udává počet kvant n (obsazovací číslo) systému a nazývá se **operátorem počtu kvant**.

Vektor $|\hat{a}^+n\rangle$ není obecně normovaný. Vzhledem k rovnicím (3.118) a (3.119) má normovaný stav tvar

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ |n-1\rangle. \quad (3.124)$$

Opakováním tohoto postupu obdržíme obecný výraz pro normované stavy $|n\rangle$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle. \quad (3.125)$$

Impulsmoment

V klasické mechanice připisujeme hmotné částici impulsmoment \mathbf{l} definovaný vztahem

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_x - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x). \quad (3.126)$$

V kvantové mechanice složkám impulsmomentu odpovídají operátory

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hbar}{i} (\hat{\mathbf{r}} \times \nabla), \quad (3.127)$$

neboli po složkách

$$\begin{aligned}
\hat{l}_z &= \frac{\hbar}{i} \left(\hat{y} \frac{\partial}{\partial z} - \hat{z} \frac{\partial}{\partial y} \right), \\
\hat{l}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\hat{z} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{x} \frac{\partial}{\partial z} \right), \\
\hat{l}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} \frac{\partial}{\partial x} \right).
\end{aligned} \tag{3.128}$$

Odvoďme nyní komutační relace pro komponenty impulsmomentu. Pro první 2 komponenty impulsmomentu platí:

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \\
&= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = \\
&= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{y}, \hat{z}\hat{p}_x]\hat{p}_z - \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{y}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{z}, \hat{z}\hat{p}_x]\hat{p}_y + \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] + [\hat{z}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_y = \\
&= \hat{y}\hat{z}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{z}[\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z + [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{y}\hat{x}[\hat{p}_z, \hat{p}_z] - \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}]\hat{p}_z - \hat{x}[\hat{y}, \hat{p}_z]\hat{p}_z - [\hat{y}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{z}\hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_x] - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}]\hat{p}_x - \hat{z}[\hat{z}, \hat{p}_x]\hat{p}_y - [\hat{z}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_y + \\
&\quad + \hat{z}\hat{x}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] + \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}]\hat{p}_z + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y + [\hat{z}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_y = \\
&= -\hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{y}\hat{1}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{1}\hat{p}_y = \\
&= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{l}_z
\end{aligned} \tag{3.129}$$

Zcela analogicky se vypočtou zbylé dva komutátory ostatních složek impulsmomentu. Pro jednotlivé komutátory tedy platí.

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k. \tag{3.130}$$

Impulsmoment systému částic se definuje jako suma impulsmomentů jednotlivých částic

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_k \hat{\mathbf{l}}(k) = \sum_k [\hat{\mathbf{r}}(k) \times \hat{\mathbf{p}}(k)] = \sum_k \hat{\mathbf{r}}(k) \times \sum_k \hat{\mathbf{p}}(k) = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{P}}. \quad (3.131)$$

Zcela analogickým způsobem jako pro impulsmoment jedné částice, se dokáže platnost komutačních relací (3.130) pro impulsmoment systému částic, tedy

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (3.132)$$

kde

$$\hat{L}_i = \sum_k \hat{l}_i(k). \quad (3.133)$$

V minulém odstavci jsme viděli, že všechny stavy lineárního harmonického oscilátoru lze získat opakovaným působením kreačního operátoru na základní, neboli vakuový stav $|0\rangle$ oscilátoru.

Mějme nyní systém dvou nezávislých lineárních harmonických oscilátorů, jeden necht' je popsán operátory \hat{a}_1^- , \hat{a}_1^+ , druhý operátory \hat{a}_2^- , \hat{a}_2^+ .

Vzhledem k nezávislosti oscilátorů komutují operátory s indexem 1 s operátory s indexem 2.

Normovaný vlastní stav systému má podle (3.125) tvar

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} |0\rangle. \quad (3.134)$$

Definujme nyní operátory

$$\begin{aligned}
\hat{J}_x &= \frac{\hbar}{2}(a_1^+ a_2^- + a_2^+ a_1^-), \\
\hat{J}_y &= \frac{\hbar}{2i}(a_1^+ a_2^- - a_2^+ a_1^-), \\
\hat{J}_z &= \frac{\hbar}{2}(a_1^+ a_1^- - a_2^+ a_2^-),
\end{aligned} \tag{3.135}$$

a spočtěme jejich komutátory. Pro první dva operátory dostáváme

$$\begin{aligned}
& [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} \left[(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) \right] = \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} \left[(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 - \right. \\
&\quad \left. - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 \right] = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-) = \frac{i\hbar^2}{4} [\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} \left\{ \hat{a}_1^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] + [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] \hat{a}_2^- \right\} = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} \left\{ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_1^-] + \hat{a}_1^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+] \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+] \hat{a}_2^- + [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+] \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \right\} = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-) = i\hbar \hat{J}_z
\end{aligned} \tag{3.136}$$

Zcela analogicky se vypočtou zbylé dva komutátory. Pro jednotlivé komutátory dostáváme výsledek

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k, \tag{3.137}$$

shodný s komutačními relacemi pro operátory impulsmomentu. Systém dvou nezávislých harmonických oscilátorů lze tedy použít jako model impulsmomentu.

Definujme dále operátor \hat{N} jako

$$\hat{N} = \hat{N}_1 + \hat{N}_2 = a_1^+ a_1^- + a_2^+ a_2^-. \quad (3.138)$$

Jeho vlastní hodnoty jsou zřejmě $n = n_1 + n_2$ a

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left[(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 + 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 - \right. \\ &\quad \left. - (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 + 2\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 + (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 - 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 \right] = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ 2 \left[\hat{a}_1^+ (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + 1) \hat{a}_1^- \right] + 2 \left[\hat{a}_2^+ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- + 1) \hat{a}_2^- \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left[(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 + 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 + 2(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-) \right] = \\ &= \hbar^2 \left(\frac{\hat{N}^2}{4} + \frac{\hat{N}}{2} \right) = \hbar^2 \frac{\hat{N}}{2} \left(\frac{\hat{N}}{2} + 1 \right). \end{aligned} \quad (3.139)$$

Odtud plyne, že vlastní hodnoty \hat{J}^2 jsou tvaru

$$\hbar^2 j(j+1), \quad (3.140)$$

kde j nabývá hodnot $j = \frac{n}{2}$.

Z (3.135) a (3.139) je vidět, že vlastní stav $|n_1, n_2\rangle$ systému dvou nezávislých oscilátorů je také vlastním stavem operátorů \hat{J}^2 a \hat{J}_z

$$\hat{J}^2 |n_1, n_2\rangle = \hbar^2 \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) |n_1, n_2\rangle, \quad (3.141)$$

$$\hat{J}_z |n_1, n_2\rangle = \frac{\hbar}{2} (n_1 - n_2) |n_1, n_2\rangle,$$

a odpovídá hodnotám

$$j = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad m = \frac{n_1 - n_2}{2}. \quad (3.142)$$

Proto můžeme (3.141) přepsat do obvyklejšího tvaru

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \\ \hat{J}_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.143)$$

Pro pevně zvolené $n_1 + n_2$ existuje

$$n_1 + n_2 + 1 = 2j + 1 \quad (3.144)$$

různých možných hodnot m . Jsou to hodnoty

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (3.145)$$

Pro daný konkrétní případ impulsmomentu je buď

$$|m| = 0, 1, 2, \dots, j, \quad (3.146)$$

nebo

$$|m| = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, j. \quad (3.147)$$

Jak uvidíme dále, první série hodnot platí pro orbitální moment l , druhá pro spinový moment s částice.

Z (3.142) plyne, že $n_1 = j + m$, $n_2 = j - m$ a z (3.134) dostáváme explicitní tvar vlastních vektorů operátorů \hat{J}^2 a \hat{J}_z :

$$|j, m\rangle = \frac{(\hat{a}_1^+)^{j+m} (\hat{a}_2^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle. \quad (3.148)$$

Zavedeme nyní tzv. posunovací operátory:

$$\hat{J}_+ = \hbar \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-, \quad \hat{J}_- = \hbar \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-. \quad (3.149)$$

Snadno ověříme, že platí

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \quad (3.150)$$

Spočteme-li komutátor

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \hat{J}_z \hat{J}_x \pm i\hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_x \hat{J}_z \mp i\hat{J}_y \hat{J}_z = i\hbar \hat{J}_y \pm \hbar \hat{J}_x = \pm \hbar \hat{J}_\pm, \quad (3.151)$$

snadno odvodíme, že

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}_z |j, m\rangle \pm \hbar \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}_\pm |j, m\rangle. \quad (3.152)$$

$\hat{J}_\pm |j, m\rangle$ je tedy vlastním vektorem \hat{J}_z s vlastní hodnotou $\hbar(m \pm 1)$.

Odtud je vidět, že posunovací operátory sklápějí vlastní vektory zetové komponenty impulsmomentu, takže platí

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = C_m^\pm |j, m \pm 1\rangle, \quad (3.153)$$

kde C_m^\pm je konstanta úměrnosti, kterou bude nyní naším úkolem určit.

Za tímto účelem spočteme součiny posunovacích operátorů

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i(\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x) = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z \quad (3.154)$$

odkud ihned plyne

$$|C_m^\pm|^2 = \langle j, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1) \quad (3.155)$$

odkud

$$\hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j, m \pm 1 \rangle. \quad (3.156)$$

Takto můžeme nalézt $2j+1$ ortonormálních vektorů

$$|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \dots, |j, m\rangle, \dots, |j, -j\rangle, \quad (3.157)$$

které jsou společnými vlastními vektory operátorů \hat{J}^2, \hat{J}_z a tvoří bázi podprostoru $H^{(j)}$ Hilbertova prostoru.

Maticová reprezentace impulsmomentu

$(2j + 1)$ – rozměrné matice $\hat{\mathbf{J}}^{(j)}$ definované elementy

$$\left(\hat{\mathbf{J}}^{(j)}\right)_{m'm} \equiv \langle j, m' | \hat{\mathbf{J}} | j, m \rangle, \quad (3.158)$$

představují realizace operátorů $\hat{\mathbf{J}}$ v charakteristickém podprostoru operátoru $\hat{\mathbf{J}}^2$.

Tyto matice pochopitelně vyhovují komutačním relacím (3.137) a platí

$$\hat{\mathbf{J}} | j, m \rangle = \sum_{m'=-j}^j \hat{\mathbf{J}}_{m'm}^{(j)} | j, m' \rangle. \quad (3.159)$$

Pro nejnižší možné hodnoty j mají matice $\hat{\mathbf{J}}_k^{(j)}$ následující tvar (hodnota indexů m', m číslicích řádky a sloupce ubývá shora dolů a zleva doprava):

$$\hat{\mathbf{J}}_k^{(0)} = 0, \quad (3.160)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_k^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_k, \quad (3.161)$$

kde

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.162)$$

jsou tzv. Pauliho matice a

$$\hat{\mathbf{J}}_1^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathbf{J}}_2^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathbf{J}}_3^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.163)$$

Posunovací operátory (3.149) můžeme nahradit maticovými operátory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(0)} &= \hbar \left(C_{m'=0, m=0}^{\pm} \right) \delta_{m'(m\pm 1)}, \\ \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(1/2)} &= \hbar \begin{pmatrix} C_{m'=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}}^{\pm} & C_{m'=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}}^{\pm} \\ C_{m'=-\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}}^{\pm} & C_{m'=-\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}}^{\pm} \end{pmatrix} \delta_{m'(m\pm 1)}, \\ \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(1)} &= \hbar \begin{pmatrix} C_{m'=1, m=1}^{\pm} & C_{m'=1, m=0}^{\pm} & C_{m'=1, m=-1}^{\pm} \\ C_{m'=0, m=1}^{\pm} & C_{m'=0, m=0}^{\pm} & C_{m'=0, m=-1}^{\pm} \\ C_{m'=-1, m=1}^{\pm} & C_{m'=-1, m=0}^{\pm} & C_{m'=-1, m=-1}^{\pm} \end{pmatrix} \delta_{m'(m\pm 1)}, \end{aligned} \quad (3.164)$$

kde hodnoty v jednotlivých polích jsou dány dosazením odpovídajících vlastních hodnot do vztahu (3.155). Máme tedy

$$\hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(0)} = 0,$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{+}^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{J}}_{-}^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.165)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{+}^{(1)} = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{J}}_{-}^{(1)} = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Částice v centrálním poli

V této kapitole bude již výhodné operovat ve sférických souřadnicích r, ϑ, φ , kde platí známé převodní vztahy

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \vartheta. \end{aligned} \quad (3.166)$$

Laplaceův operátor $\Delta = \nabla^2$ má v nich tvar

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi}}{r^2}, \quad (3.167)$$

kde $\Delta_{\vartheta, \varphi}$ je tzv. úhlová část Laplaceova operátoru:

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.168)$$

Jednotlivé operátory impulsmomentu mají ve sférických souřadnicích tvar

$$\begin{aligned}
\hat{l}_x &= -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
\hat{l}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
\hat{l}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
\hat{l}^2 &= -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi}.
\end{aligned} \tag{3.169}$$

Hamiltonián částice v centrálním poli předpokládáme ve tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r), \tag{3.170}$$

což po dosazení z výše uvedených vztahů ve sférických souřadnicích dává

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{3.171}$$

Spočtěme nyní komutátory $[\hat{l}_i, \hat{l}^2]$. Např.

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}^2] &= \hat{l}_x \hat{l}^2 - \hat{l}^2 \hat{l}_x = \hat{l}_x (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) - (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \hat{l}_x = \\
&= \hat{l}_x \hat{l}_x^2 + \hat{l}_x \hat{l}_y^2 + \hat{l}_x \hat{l}_z^2 - \hat{l}_x^2 \hat{l}_x - \hat{l}_y^2 \hat{l}_x - \hat{l}_z^2 \hat{l}_x = \hat{l}_x \hat{l}_y^2 - \hat{l}_y^2 \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z^2 \hat{l}_x = \\
&= \hat{l}_y (\hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x) + (\hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x) \hat{l}_y + \hat{l}_z (\hat{l}_x \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_x) + (\hat{l}_x \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_x) \hat{l}_z = \\
&= \hat{l}_y [\hat{l}_x, \hat{l}_y] + [\hat{l}_x, \hat{l}_y] \hat{l}_y + \hat{l}_z [\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z] \hat{l}_z = \\
&= i\hbar (\hat{l}_y \hat{l}_z + \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_z) = 0.
\end{aligned} \tag{3.172}$$

Podobně se dokáže komutace ostatních dvou komponent impulsmomentu s kvadrátem celkového impulsmomentu. Platí tedy

$$\left[\hat{l}_x, \hat{l}^2 \right] = \left[\hat{l}_y, \hat{l}^2 \right] = \left[\hat{l}_z, \hat{l}^2 \right] = 0. \quad (3.173)$$

Jelikož operátory $\hat{l}^2, \hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ závisejí jen na úhlech ϑ a φ a derivacích podle nich, zatímco hamiltonián (3.171) závisí pouze na souřadnici r , derivacích podle ní a rovněž na kvadrátu impulsmomentu \hat{l}^2 se kterým však ostatní komponenty impulsmomentu (jak jsme právě ukázali) komutují, vyplývají odtud další důležité komutační relace

$$\left[\hat{l}^2, \hat{H} \right] = \left[\hat{l}_x, \hat{H} \right] = \left[\hat{l}_y, \hat{H} \right] = \left[\hat{l}_z, \hat{H} \right] = 0. \quad (3.174)$$

Díky tomu, že \hat{l}_z, \hat{l}^2 a \hat{H} navzájem komutují, existuje společný systém vlastních funkcí $|l, m\rangle$ těchto operátorů.

Označme tyto hledané vlastní funkce $|l, m\rangle \equiv Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ a předpokládejme, že je lze vyjádřit jako součin dvou úhlových funkcí

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\vartheta) \Phi_m(\varphi), \quad (3.175)$$

z nichž první je vlastní funkcí operátoru \hat{l}^2 a druhá vlastní funkcí operátoru \hat{l}_z . Druhá rovnice (3.143) v polárních souřadnicích zní

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m = \hbar m \Phi_m, \quad (3.176)$$

a její řešení je

$$\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}. \quad (3.177)$$

Z požadavku jednoznačnosti plyne, že Φ musí být periodická s periodou 2π , tj.

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi). \quad (3.178)$$

Jelikož

$$e^{im\varphi} = \cos(m\varphi) + i \sin(m\varphi), \quad (3.179)$$

musí být

$$\cos(m\varphi) = \cos(m\varphi + 2\pi), \quad \sin(m\varphi) = \sin(m\varphi + 2\pi). \quad (3.180)$$

Obě tyto rovnice jsou splněny pouze tehdy, když $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (což je ve shodě s (3.146)). Konstantu A určíme z normovací podmínky

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 2\pi A^2 = 1, \quad (3.181)$$

odkud konečně

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.182)$$

Víme již tedy, že

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{l,m}(\vartheta) e^{im\varphi}. \quad (3.183)$$

Pro nalezení vlastní funkce operátoru l^2 dosadíme jeho sférické vyjádření do první rovnice (3.143), což vede k rovnici

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \vartheta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.184)$$

V této rovnici provedeme substituci

$$\xi = \cos \vartheta. \quad (3.185)$$

Diferenciál ξ je

$$\partial \xi = -\sin \vartheta \partial \vartheta. \quad (3.186)$$

V této nové proměnné má rovnice (3.184) tvar

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta_{l,m} = 0, \quad (3.187)$$

a vzhledem k tomu, že

$$\sin^2 \vartheta = 1 - \cos^2 \vartheta, \quad (3.188)$$

můžeme psát (3.187) jako

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left((1 - \xi^2) \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] \Theta_{l,m} = 0 \quad (3.189)$$

neboli

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{d\xi^2} - 2\xi \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.190)$$

Tato rovnice má 2 singulární body $\xi = \pm 1$. Nejprve budeme diskutovat řešení v okolí bodu $\xi = 1$. Provedeme-li substituci

$$\begin{aligned} \chi &= \xi - 1, \\ d\chi &= d\xi \end{aligned} \quad (3.191)$$

dostaneme rovnici

$$\left[1 - (\chi + 1)^2 \right] \frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{d\chi^2} - 2(\chi + 1) \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \chi} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - (\chi + 1)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0, \quad (3.192)$$

nebo, po vydělení celé rovnice výrazem $1 - (\chi + 1)^2$

$$\frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{\partial \chi^2} - \frac{2(\chi+1)}{1-(\chi+1)^2} \frac{d\Theta_{l,m}}{d\chi} + \frac{1}{1-(\chi+1)^2} \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-(\chi+1)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0 \quad (3.193)$$

a po úpravě

$$\frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{\partial \chi^2} - \frac{2}{\chi} \frac{\chi+1}{\chi+2} \frac{d\Theta_{l,m}}{d\chi} + \left[\frac{l(l+1)}{\chi(\chi+2)} - \frac{m^2}{\chi^2(\chi+2)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.194)$$

Nyní budeme hledat funkci $\Theta_{l,m}$ ve tvaru mocninné řady

$$\Theta_{l,m} = \chi^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i \chi^i. \quad (3.195)$$

V okolí singulárního bodu $\xi \rightarrow 1$ tj. $\chi \rightarrow 0$ můžeme vzít $\Theta_{l,m}$ ve tvaru

$$\Theta_{l,m} = a_0 \chi^\gamma. \quad (3.196)$$

Po dosazení tohoto vztahu do rovnice (3.194) a zanedbání členů řádu vyššího než $\chi^{\gamma-2}$ dostaneme

$$\gamma(\gamma-1)\chi^{\gamma-2} - \gamma\chi^{\gamma-2} - \frac{m^2}{4}\chi^{\gamma-2} = 0 \quad (3.197)$$

nebo po úpravě

$$\left[\gamma(\gamma-1) - \gamma - \frac{m^2}{4} \right] \chi^{\gamma-2} = 0. \quad (3.198)$$

Odtud vyplývá

$$\gamma = \pm \frac{m}{2}. \quad (3.199)$$

Abychom však dostali řešení které nediverguje pro $\chi \rightarrow 0$, je třeba vzít

$$\gamma = \frac{|m|}{2}. \quad (3.200)$$

Analogickým způsobem lze postupovat i pro $\xi = -1$, kdy lze provést substituci $\chi = \xi + 1$ a výsledkem je opět rovnice (3.200).

$\Theta_{l,m}$ tedy můžeme hledat ve tvaru

$$\Theta_{l,m} = (1-\xi)^{\frac{|m|}{2}} (1+\xi)^{\frac{|m|}{2}} \eta(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \eta(\xi), \quad (3.201)$$

kde funkci $\eta(\xi)$ lze vyjádřit ve tvaru mocninné řady

$$\eta = \sum_i^{\infty} b_i \xi^i. \quad (3.202)$$

Dosazením rovnice (3.201) do rovnice (3.189) obdržíme diferenciální rovnici pro funkci η

$$(1-\xi^2) \frac{\partial^2 \eta}{d\xi^2} - 2(|m|+1)\xi \frac{\partial \eta}{\partial \xi} + [l(l+1) - |m| - m^2] \eta = 0. \quad (3.203)$$

Dosadíme-li nyní řadu (3.202) do této rovnice dostaneme rekurentní vztah mezi koeficienty b_i

$$b_{i+2} = \frac{i(i-1) + 2(|m|+1)i - l(l+1) + |m| + |m|^2}{(i+2)(i+1)} b_i. \quad (3.204)$$

Pro veliká i se řada (3.202) chová jako geometrická řada s kvocientem ξ^2 , jejíž součet je úměrný $(1-\xi^2)^{-1}$.

Abychom však splnili požadavky kladené na vlnovou funkci $\Theta_{l,m}$, musíme předpokládat, že se řada (3.202) redukuje na polynom. To znamená, že existuje k , pro něž je koeficient $b_{k+2} = 0$. Musí proto platit

$$k(k-1) + 2(|m|+1)l - l(l+1) + |m| + |m|^2 = 0. \quad (3.205)$$

Odtud je ihned vidět, že

$$l(l+1) = (k+|m|)(k+|m|+1), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.206)$$

neboli

$$l = (k+|m|). \quad (3.207)$$

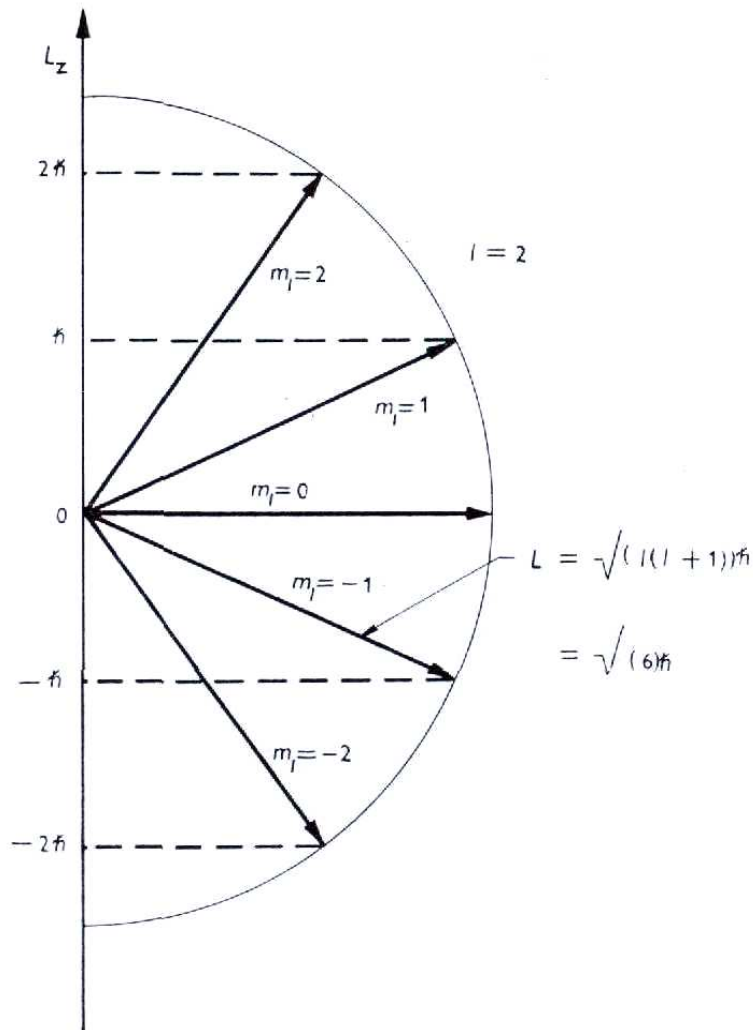
Srovnáním (3.145), (3.146) a (3.207) je vidět, že nové vlastní číslo l může nabývat pouze hodnot

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.208)$$

a současně platí

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (3.209)$$

Obr. 3.7



Z matematického hlediska tvoří funkce $\Theta_{l,m}$ takzvané **přidružené Legendreovy polynomy** $P_l^m \equiv \Theta_{l,m}$. Ty jsou definovány prostřednictvím **obyčejných Legendreových polynomů**

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l \quad (3.210)$$

vztahem

$$P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi). \quad (3.211)$$



Adrien-Marie Legendre (1752 – 1833)

Shrneme-li výsledky této kapitoly, vlastními funkcemi operátorů kvadrátu impulsmomentu a jeho z -ové komponenty jsou tzv. kulové funkce

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N_{l,m} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (3.212)$$

kde N_{lm} je normovací faktor

$$N_{lm} = \frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}. \quad (3.213)$$

Pro operátor kvadrátu impulsmomentu a jeho z -ové komponenty platí

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, & l &= 0, 1, 2, \dots \\ \hat{l}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm}, & m &= -l, \dots, l. \end{aligned} \quad (3.214)$$

Atom vodíku



Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868 – 1951)

Vodíkový atom se skládá z protonu – částice s elektrickým nábojem $+e$ – a z elektronu – částice s nábojem $-e$, která je 1836 krát lehčí než proton. Vzhledem k velikému rozdílu hmot obou částic můžeme proton prvním přiblížením považovat za nehybný, případné korekce na pohyb protonu se provedou jednoduchým nahrazením hmoty elektronu m_e za redukovanou hmotnost m_e' .

Trojrozměrná Schrödingerova rovnice pro pohyb elektronu v atomu vodíku tedy zní

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0, \quad (3.215)$$

kde potenciální energie je zde čistě elektrostatického charakteru:

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.216)$$

Z důvodu závislosti na r bude tedy výhodné, vyjádřit tuto rovnici ve sférických souřadnicích. Po vynásobení obou stran výrazem $r^2 \sin^2 \vartheta$ dostáváme parciální diferenciální rovnici pro elektronovou vlnovou funkci ψ v atomu vodíku ve tvaru

$$\begin{aligned} \sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \\ + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0. \end{aligned} \quad (3.217)$$

Schrödingerovu rovnici atomu vodíku lze v této podobě snadno řešit metodou separace proměnných. Hledáme tedy řešení vlnové funkce ψ ve tvaru

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi). \quad (3.218)$$

Funkce $R(r)$ popisuje radiální průběh elektronové vlnové funkce ψ směrem od jádra při konstantním ϑ a φ , funkce $\Theta(\vartheta)$ závislost ψ na úhlu ϑ podél poledníku koule se středem v jádru při konstantním r a φ , a konečně funkce $\Phi(\varphi)$ závislost ψ na azimutálním úhlu φ podél rovnoběžky této koule při konstantním r a ϑ . Odtud okamžitě vidíme, že

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial r} &= \Theta\Phi \frac{\partial R}{\partial r}, \\ \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} &= R\Phi \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} &= R\Theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}, \end{aligned} \quad (3.219)$$

Dosadíme-li do rovnice (3.217) za $\psi = R\Theta\Phi$ a zároveň tímto součinem celou rovnici podělíme, dostáváme tvar

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \\ + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (3.220)$$

Tato rovnice může být splněna pouze když se obě její strany rovnají téže konstantě, neboť jsou funkcemi různých proměnných.

Označíme-li tuto konstantu m_l^2 , dostáváme na pravé straně (2.220) diferenciální rovnici pro funkci Φ v podobě

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m_l^2. \quad (3.221)$$

Dosadíme-li m_l^2 za pravou stranu rovnice (3.220) a vydělíme celou rovnici funkcí $\sin^2 \vartheta$, dostáváme

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right). \quad (3.222)$$

Opět jsme obdrželi rovnici, kde se na každé straně vyskytují jiné proměnné, takže se obě strany musí rovnat téže konstantě. Označme tentokrát tuto konstantu $l(l+1)$.

Zbývající 2 rovnice pro funkce Θ a R tedy jsou

$$\begin{aligned} \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) &= l(l+1), \\ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) &= l(l+1). \end{aligned} \quad (3.223)$$

Rovnice (3.221), (3.223) jednoduše upravíme do obvyklejšího tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi &= 0, \\ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta &= 0, \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R &= 0. \end{aligned} \quad (3.224)$$

První a druhá rovnice systému (3.224) jsou formálně shodné s rovnicemi (3.176) a (3.184) pro vlastní funkce \hat{l}_z a \hat{l}^2 . Jejich řešení jsme již našli v předchozím odstavci. Zbývá tedy vyřešit třetí rovnici

(3.224) pro radiální komponentu elektronové vlnové funkce atomu vodíku, která dle očekávání skrývá vlastní stavy třetího ze vzájemně komutujících operátorů – jejího hamiltoniánu.

Ten má pro jednoelektronové (tzv. vodíkpodobné) atomy tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.225)$$

či ve sférických souřadnicích

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi}}{r^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.226)$$

Hledanou elektronovou vlnovou funkci ψ nyní můžeme vyjádřit jako součin již nalezeného řešení v podobě kulových funkcí – vlastních funkcí operátorů \hat{l}_z a \hat{l}^2 – a dosud neznámého řešení pro radiální část vlnové funkce R :

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (3.227)$$

Použitím substituce

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (3.228)$$

se rovnice (3.226) upraví na jednodušší tvar (celou rovnici (3.226) jsme ještě vynásobili výrazem $\frac{\hbar^2 r}{2m_e}$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} u - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} u = Eu. \quad (3.229)$$

Abychom tuto rovnici dále zjednodušili, zavedeme nové bezrozměrné jednotky. Vzdálenost definujeme jako

$$\rho = \frac{r}{a_B}, \quad (3.230)$$

kde

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (3.231)$$

je tzv. Bohrov poloměr.

Podobně definujeme energii pomocí bezrozměrné veličiny

$$\varepsilon = \frac{E}{Ry}, \quad (3.232)$$

kde jeden Rydberg je roven

$$Ry = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2a_B)} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}. \quad (3.233)$$

Jak se ukáže dále, Bohrov poloměr je vzdálenost od jádra, v níž je nejvyšší pravděpodobnost nalézt elektron v základním stavu atomu vodíku. Podobně je jeden Rydberg energií základního stavu atomu vodíku. Zavedené jednotky jsou proto z hlediska atomárního světa přirozené.



Johannes Robert Rydberg (1854 – 1919)

Při použití těchto proměnných se nám rovnice (3.229) dále zjednoduší na tvar

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u = 0. \quad (3.234)$$

Nejprve stanovíme asymptotické chování funkce u pro $r \rightarrow \infty$, tj. $\rho \rightarrow \infty$. V tomto případě přechází rovnice (3.234) na jednodušší rovnici

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \varepsilon u = 0, \quad (3.235)$$

jejíž řešením je funkce

$$u(\rho) = C e^{-\alpha\rho}, \quad (3.236)$$

kde C je konstanta a $\alpha = \sqrt{-\varepsilon} = i\sqrt{\varepsilon}$. Protože pro vázané stavy s energií $E < 0$ je $\varepsilon < 0$, funkce u splňuje podmínku $u \rightarrow 0$ pro $\rho \rightarrow \infty$. Řešení u na celém intervalu $\rho \in (0; \infty)$ budeme hledat ve tvaru

$$u(\rho) = f(\rho) e^{-\alpha\rho}, \quad (3.237)$$

kde $f(\rho)$ je neznámá funkce. Dosazením tohoto předpokladu do rovnice (3.234) dostáváme diferenciální rovnici pro funkci f :

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left(\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f = 0. \quad (3.238)$$

To je ovšem rovnice formálně obdobná rovnici (3.194), takže i řešení provedeme obdobným způsobem.

Řešení budeme opět hledat ve tvaru mocninné řady

$$f(\rho) = \rho^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i, \quad (3.239)$$

kde γ a a_i jsou dosud neurčené konstanty

V okolí singulárního bodu $\rho \rightarrow 0$ můžeme vzít f ve tvaru

$$f(\rho) = a_0 \rho^\gamma. \quad (3.240)$$

Po dosazení tohoto vztahu do rovnice (3.238) a zanedbání členů řádu vyššího než $\rho^{\gamma-2}$ dostaneme

$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1). \quad (3.241)$$

Odtud vyplývá

$$\gamma = \begin{matrix} l+1 \\ -l \end{matrix}, \quad (3.242)$$

druhý kořen však nevyhovuje, neboť pro něj při $\rho \rightarrow 1$ funkce u diverguje. Máme tedy

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i. \quad (3.243)$$

Dosazením řady (3.243) do rovnice (3.238) dostaneme

$$\sum_{i=0}^{\infty} \rho^{i+l} \left\{ a_{i+1} \left[(i+l+2)(i+l+1) - l(i+1) \right] + 2a_i \left[Z - \alpha(i+l+1) \right] \right\} = 0$$

(3.244)

Požadavek platnosti této rovnice pro libovolná ρ , vede k rekurentnímu vztahu mezi koeficienty a_i

$$a_{i+1} = \frac{2\alpha(i+l+1) - 2Z}{(i+l+2)(i+l+1) - l(i+1)} a_i .$$

(3.245)

Z požadavku aby radiální část vlnové funkce byla normovaná

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1,$$

(3.246)

kde $r^2 dr$ je radiální část objemového elementu ve sférických souřadnicích, plyne, že musí jít radiální část vlnové funkce

$$R(\rho) = \frac{f(\rho) e^{-\alpha\rho}}{\rho}$$

(3.247)

pro $\rho \rightarrow \infty$ k nule.

Pro veliká i se posloupnost (3.245) chová jako

$$a_{i+1} \approx \frac{2\alpha}{i} a_i ,$$

(3.248)

což vede na funkci

$$f = \rho^{l+1} e^{2\alpha\rho} .$$

(3.249)

Abychom však splnili požadavky kladené na vlnovou funkci $R(\rho)$, musíme předpokládat, že se řada (3.243) redukuje na polynom, tj. aby koeficienty a_i byly počínaje určitou hodnotou i již nulové. To znamená, že existuje $i = n_r$, pro něž je koeficient $a_{i+1} = 0$. Musí proto platit

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2Z, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (3.250)$$

Namísto kvantovacího čísla n_r se zavádí tzv. **hlavní kvantové číslo**

$$n = n_r + l + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.251)$$

Pro možné hodnoty energie pak dostáváme

$$\varepsilon = -\alpha^2 = -\frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.252)$$

Vrátíme-li se k původním jednotkám, dostaneme kvantované hodnoty energie vázaných stacionárních stavů vodíku podobného atomu

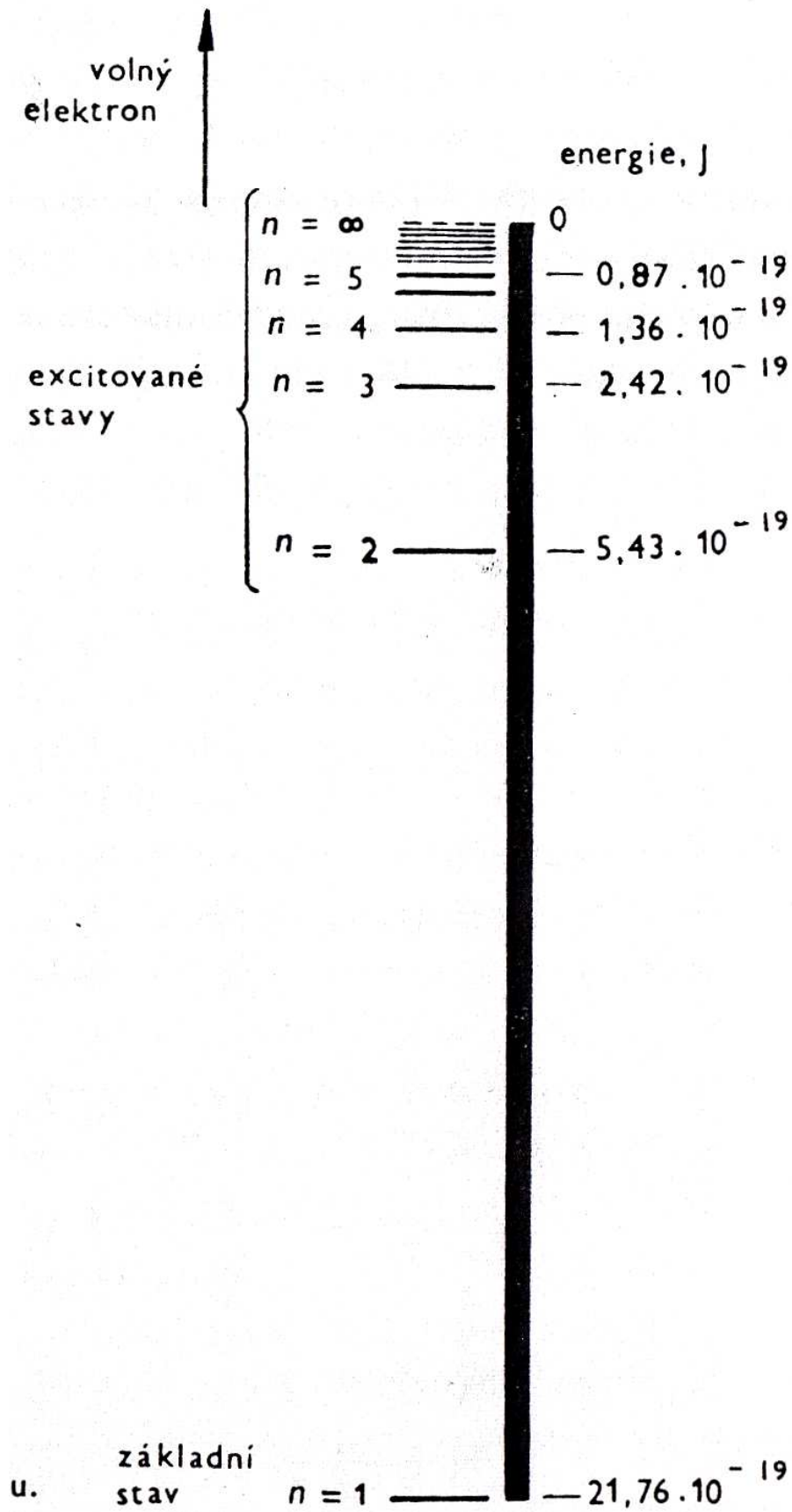
$$E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.253)$$

Všimněme si, že z (3.251) okamžitě vyplývá pro možné hodnoty l již dříve nalezený vztah (3.208). Toto l nazýváme **orbitálním kvantovým číslem**. Třetí kvantové číslo určené vztahem (3.209) se nazývá **magnetickým kvantovým číslem**.

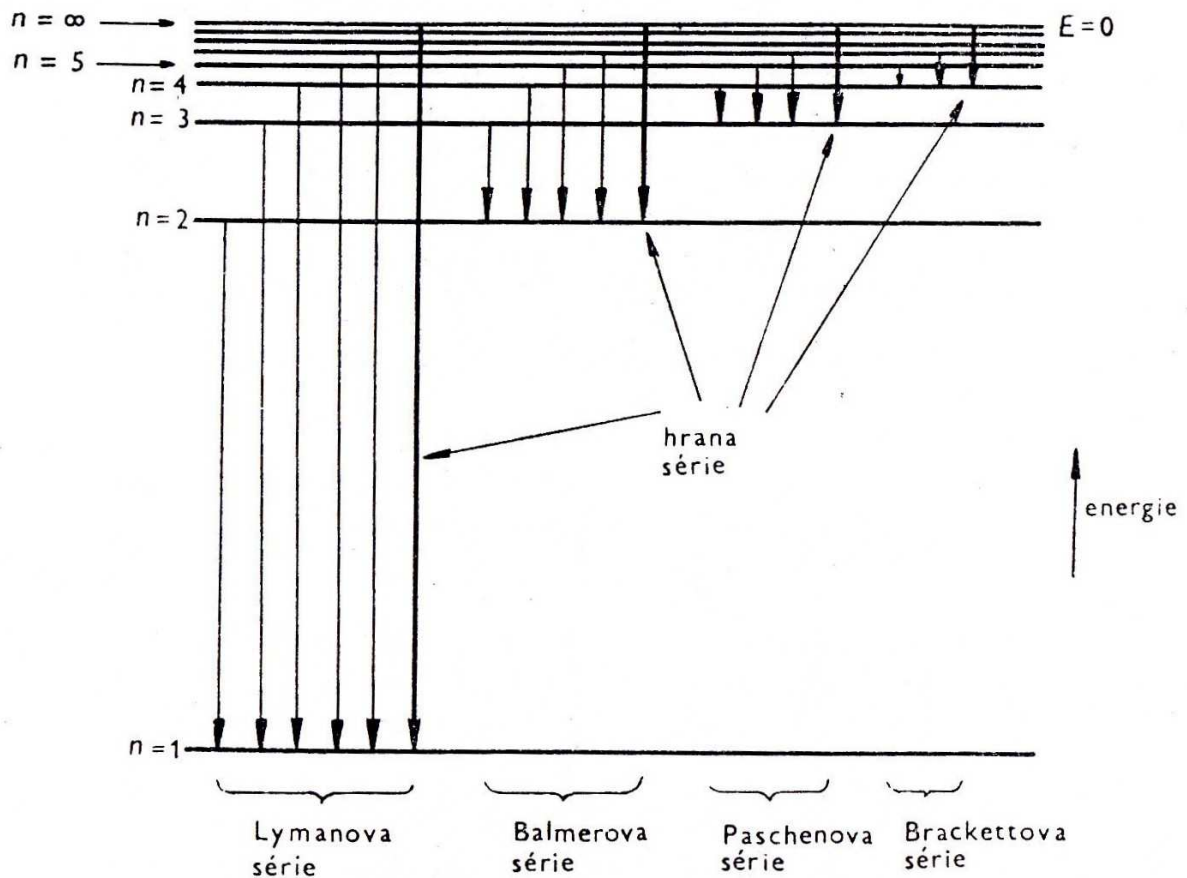
Pro každé $l = 0, \dots, n - 1$ máme celkem $2l + 1$ hodnot $m = -l, \dots, l$. Degenerace hladiny E_n je tudíž rovna

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (3.254)$$

Obr. 3.8



Obr. 3.9



Použijeme-li kvantové číslo n a rovnici (3.250), můžeme přepsat rekurentní vztah (3.245) do tvaru

$$a_{i+1} = -\frac{2Z}{n} \frac{n-(i+l+1)}{(i+1)(2l+i+2)} a_i. \quad (3.255)$$

Hodnota koeficientu a_0 je dána normovací podmínkou (3.246). Po dosazení (3.255) do rovnice (3.243) dostaneme

$$f(\rho) = a_0 \rho^{l+1} \left[1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)^1 + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)^2 + \dots \right. \\ \left. \dots + (-1)^{n-l-1} \frac{(n-l-1)(n-l-2)\dots 1}{(n-l-1)!(2l+2)(2l+3)\dots(n+l)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)^{n-l-1} \right]. \quad (3.256)$$

Normované radiální části vlnových funkcí lze zapsat ve tvaru

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) e^{-\frac{\xi}{2}} \quad (3.257)$$

kde

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} = \frac{2Zr}{na_B} \quad (3.258)$$

a

$$L_k^s(\xi) = \frac{d^s}{d\xi^s} L_k(\xi) \quad (3.259)$$

jsou tzv. *přidružené Laguerrovy polynomy* definované pomocí *obyčejných Laguerrových polynomů*

$$L_k(\xi) = e^\xi \frac{d^k}{d\xi^k} (\xi^k e^{-\xi}). \quad (3.260)$$



Edmond Nicolas Laguerre (1834 – 1886)

Normovací koeficient je roven

$$N_{lm} = \left\{ \left(\frac{2Z}{na_B} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.261)$$

Nalezli jsme tedy konečný tvar celkové vlnové funkce vázaných stavů vodíkového atomu.

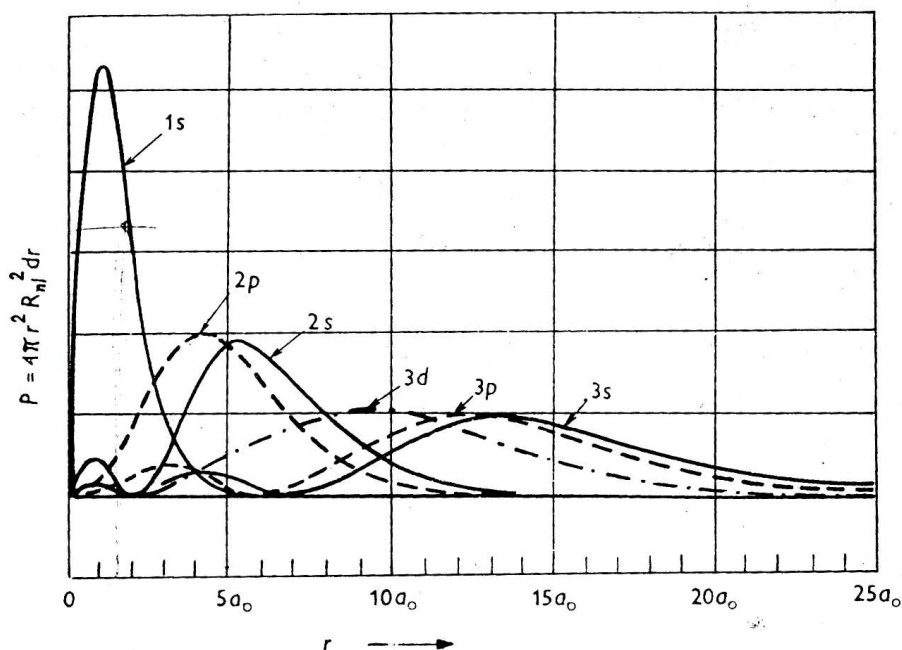
$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (3.262)$$

Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu vodíkového atomu písmeny s, p, d, f podle následující tabulky

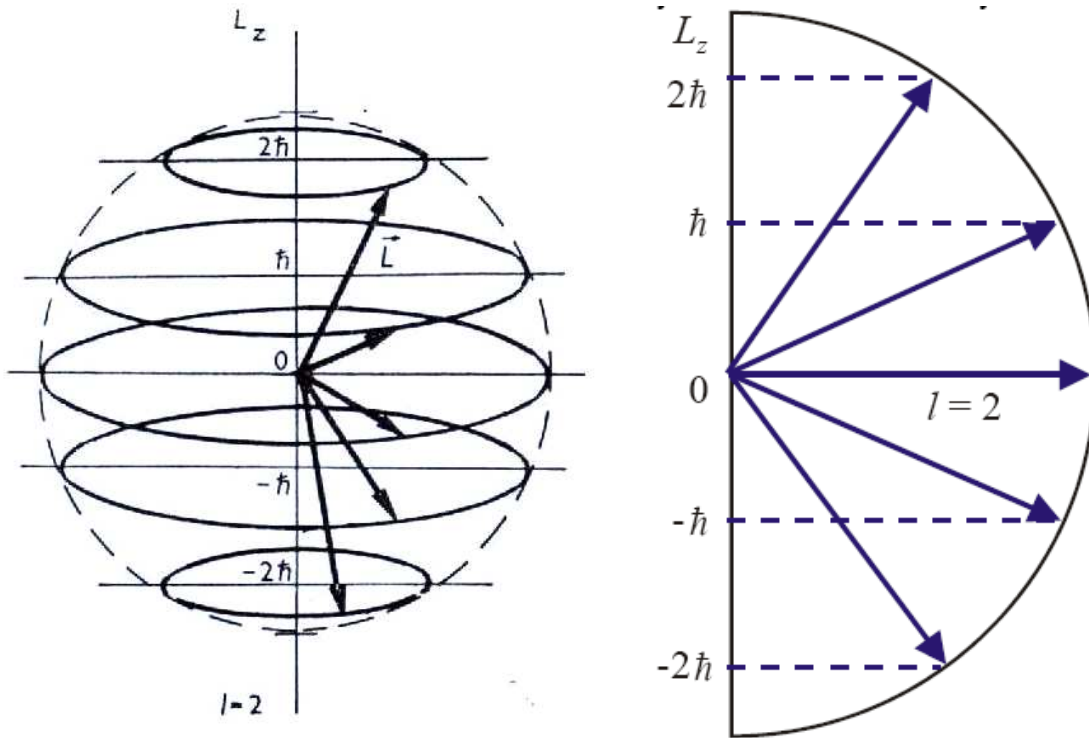
Tab. 3.1

Stav	l	m	n
s	0	0	1
p	1	-1,0,1	2
d	2	-2,-1,0,1,2	3
f	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4

Obr. 3.10



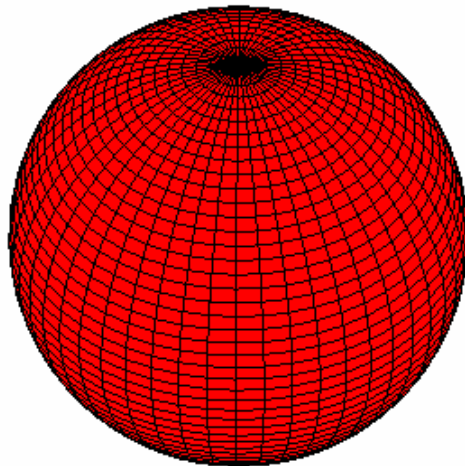
Obr. 3.11



Obr. 3.12

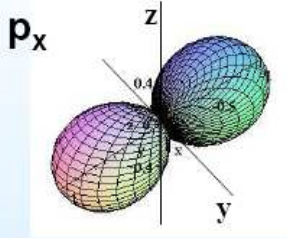
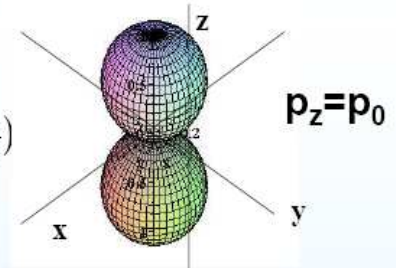
Orbital s

$$Y(s) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$



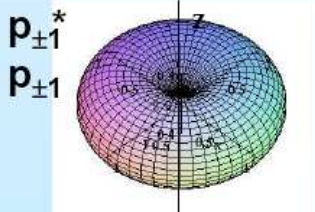
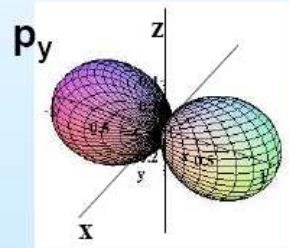
Orbitaly p

$$Y(p_z) = Y(p_0) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{r}\right)$$



$$Y(p_x) = \frac{Y(p_1) + Y(p_{-1})}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \varphi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{r}\right)$$

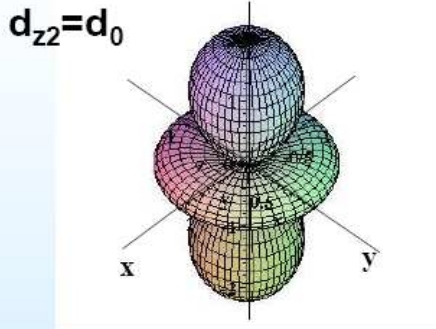
$$Y(p_y) = -i \frac{Y(p_1) - Y(p_{-1})}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \sin \varphi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{y}{r}\right)$$



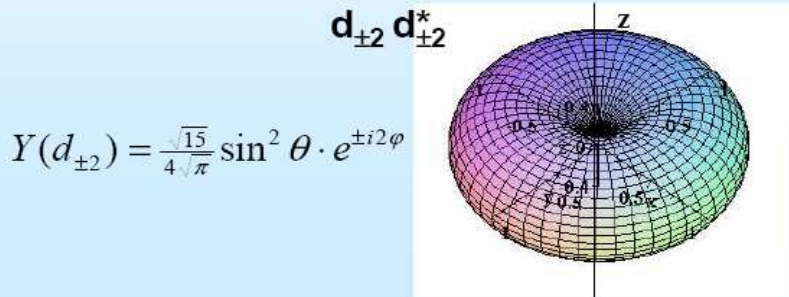
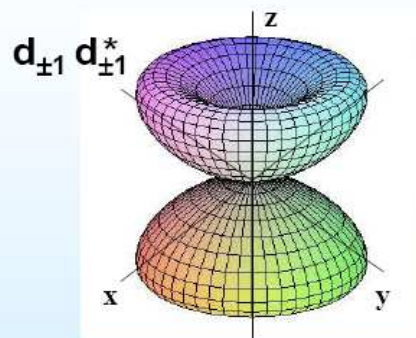
$$Y(p_{\pm 1}) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

Orbitaly d

$$Y(d_0) = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

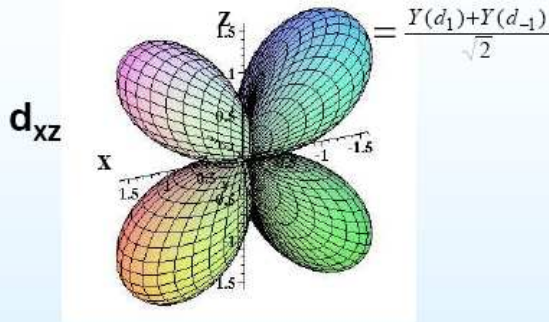


$$Y(d_{\pm 1}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

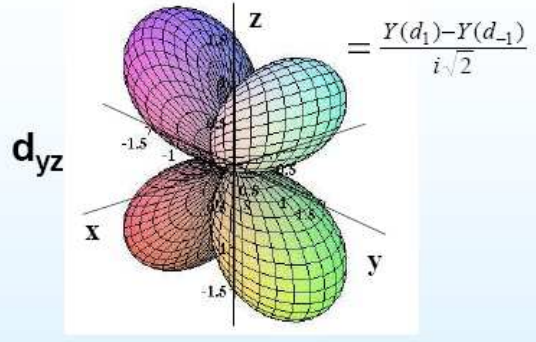


$$Y(d_{\pm 2}) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}$$

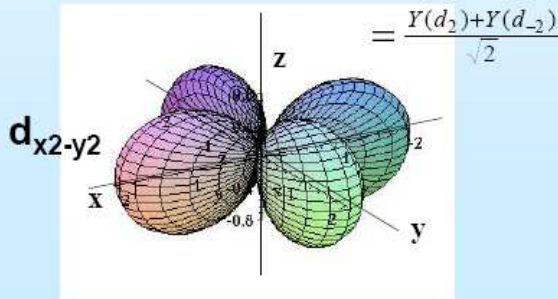
$$Y(d_{xz}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \cos \varphi = \frac{\sqrt{30}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{xz}{r^2}\right)$$



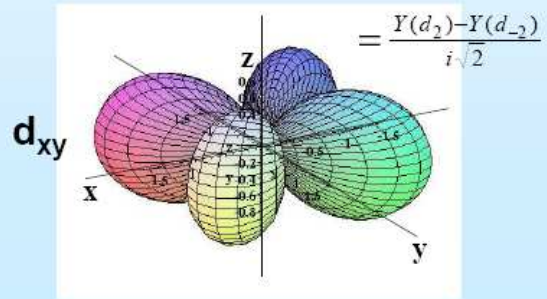
$$Y(d_{yz}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \sin \varphi = \frac{\sqrt{30}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{yz}{r^2}\right)$$



$$Y(d_{x^2-y^2}) = \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot \cos 2\varphi = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{x^2-y^2}{r^2}\right)$$

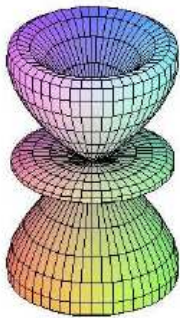


$$Y(d_{xy}) = \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot \sin 2\varphi = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{xy}{r^2}\right)$$



Orbitaly f

$f_{\pm 1} f_{\pm 1}^*$



$f_{z^3} = f_0$

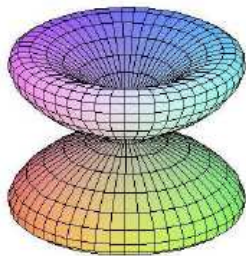


$$Y_{3,0} = 5 \cos^2 \theta - 3 \cos \theta = z(5z^2 - 3r^2)$$

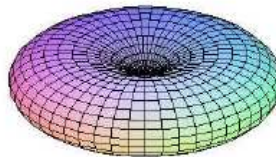
$$Y_{3,\pm 1} = \mp \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \cdot e^{\pm i\phi} = \frac{(x \mp iy)(5z^2 - 3r^2)}{r^3}$$

$$Y_{3,\pm 2} = \sin^2 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\phi} = \frac{z(x \pm iy)^2}{r^3}$$

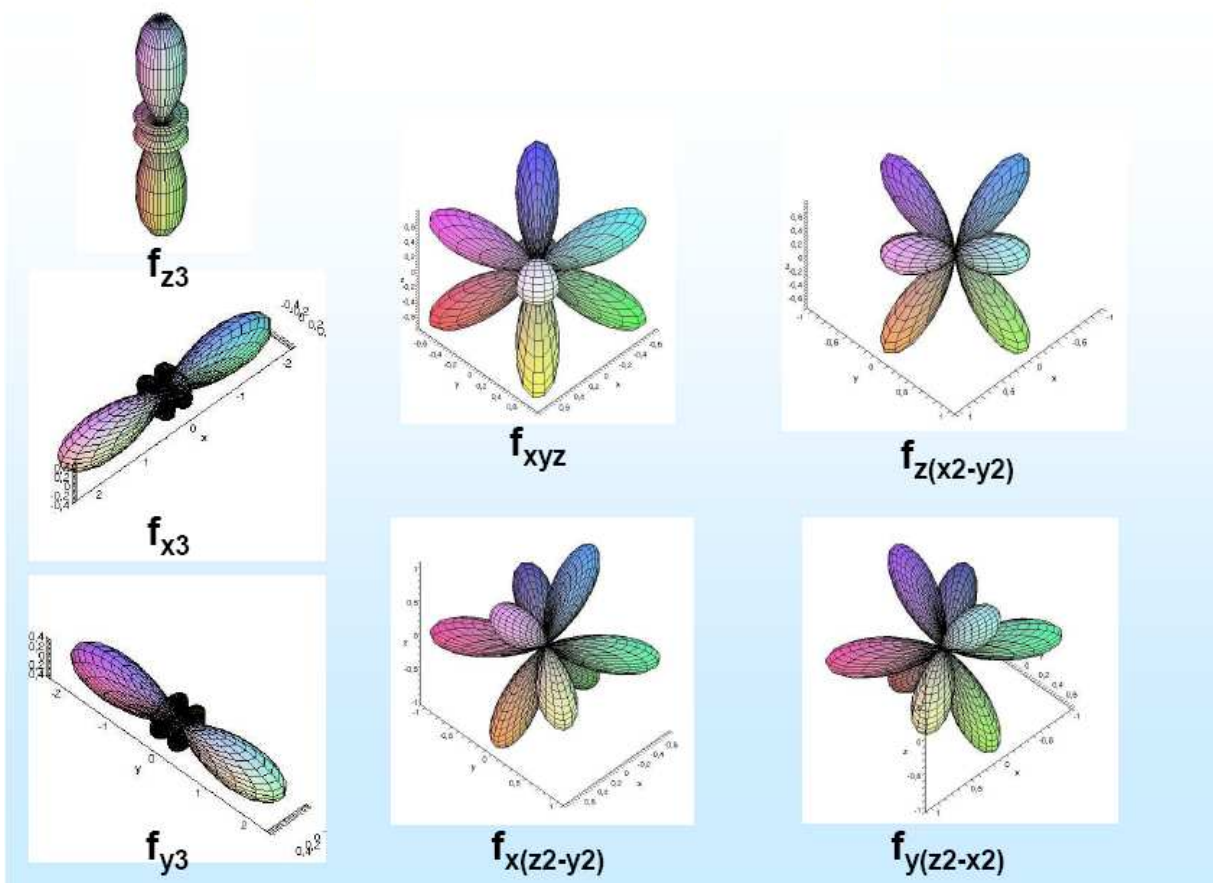
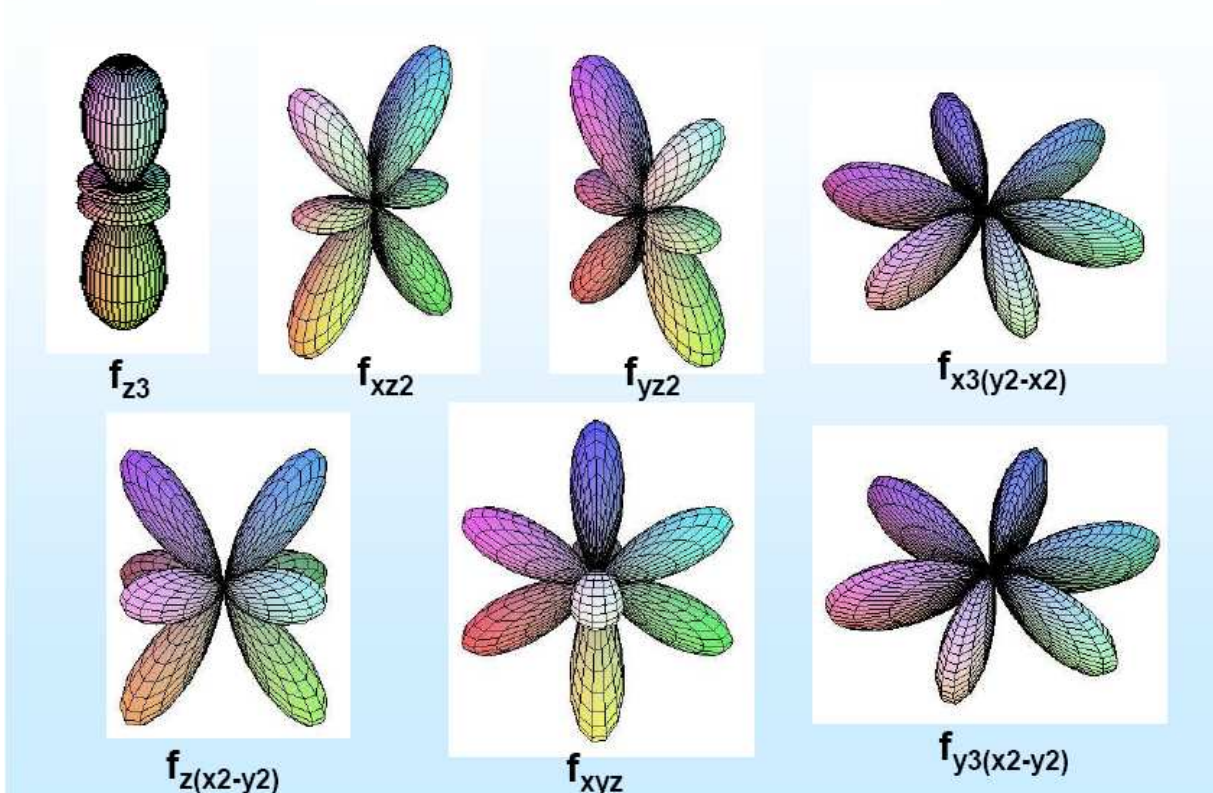
$f_{\pm 2} f_{\pm 2}^*$



$f_{\pm 3} f_{\pm 3}^*$



$$Y_{3,\pm 3} = \mp \sin^3 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 3i\phi} = \mp \frac{(x \pm iy)^3}{r^3}$$



Magnetický moment

Při pohybu elektronu v okolí jádra atomu vzniká podle klasické elektrodynamiky proudová smyčka a lze proto očekávat vznik odpovídajícího magnetického momentu. Pohybuje-li se elektron s nábojem $q = -e$ v elektromagnetickém poli s vektorovým potenciálem \mathbf{A} , platí

$$(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 = -\hbar^2\Delta - 2ie\hbar\mathbf{A}\nabla - ie\hbar \operatorname{div} \mathbf{A} + e^2\mathbf{A}^2. \quad (3.263)$$

Pro konstantní magnetické pole $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$ mířící podél osy z můžeme vzít vektorový potenciál ve tvaru

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0). \quad (3.264)$$

Vynecháme-li pro slabá magnetická pole člen \mathbf{A}^2 a uvědomíme-li si, že $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, dostaneme hamoltonián pro vodíku podobný atom v uvažovaném magnetickém poli ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} - \frac{ie\hbar B}{2m_e}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z. \end{aligned} \quad (3.265)$$

Dodatečnou potenciální energii odpovídající magnetickému poli můžeme vyjádřit ve tvaru součinu vektoru magnetické indukce s tzv. **operátorem magnetického momentu elektronu**:

$$-\mathbf{B}\hat{\boldsymbol{\mu}}^L = -B\hat{M}_z = \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z, \quad (3.266)$$

odkud

$$\hat{\mu}_z^L = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}_z, \quad (3.267)$$

či obecněji

$$\hat{\mu}^L = -\frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{L}}. \quad (3.268)$$

Pro stacionární stavy popsané funkcemi ψ_{nlm} , pro které je

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi_{nlm} &= \hbar m_l \psi_{nlm} \\ \hat{L} \psi_{nlm} &= \hbar \sqrt{l(l+1)} \psi_{nlm} \end{aligned} \quad (3.269)$$

nabývá magnetický moment hodnot

$$\begin{aligned} \hat{\mu}_z^L &= -\frac{\hbar e}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l, \\ \hat{\mu}^L &= -\frac{\hbar e}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = -\mu_B \sqrt{l(l+1)} \end{aligned} \quad (3.270)$$

ke $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e}$ je tzv. **Bohrův magneton**.

Dodatečná energie atomu vodíkového typu ve stavu popsaném funkcí ψ_{nlm} tedy závisí na magnetickém kvantovém čísle m_l jako

$$E_m = \mu_B m_l B, \quad m_l = -l, \dots, l. \quad (3.271)$$

Původní spektrální čára odpovídající přechodu mezi dvěma energetickými hladinami E_n se nám tak v magnetickém poli štěpí na 3 hladiny, což nazýváme **normální Zemanův jev**.

Spin

Existence vlastního vnitřního momentu hybnosti částic zvaného *spin* vyplynula v roce 1928 z Diracovy relativistické kvantové rovnice (8.99). Vztahy (3.146), (3.147) však naznačují, že i nerelativistická teorie impulsmomentu v sobě obsahuje prostor pro realizaci impulsmomentu v ještě jiné podobě, než jaká odpovídá orbitálnímu momentu částice daného pohybem celé částice v coulombickém poli jádra. Tomuto vlastnímu momentu hybnosti přísluší i vlastní magnetický moment μ nabité částice. K popisu spinového momentu hybnosti se užívá spinové kvantové číslo s . To má u každé částice pevně danou hodnotu. U elektronu je to kupř. $s = 1/2$. Velikost S momentu hybnosti daného spinem pak souvisí se spinovým kvantovým číslem s vztahem

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (3.272)$$

U elektronu nám kupř. vychází $S = \hbar \sqrt{\frac{3}{4}}$.

Prostorové kvantování spinu se popisuje spinovým magnetickým kvantovým číslem m_s .

Magnetické kvantové číslo udává směr vektoru \mathbf{S} tím, že určuje jeho složku ve směru vnějšího magnetického pole. Položíme-li směr vnějšího pole rovnoběžný s osou z , je složka spinu \mathbf{S} v tomto směru

$$S_z = m_s \hbar. \quad (3.273)$$

Možné hodnoty m_s pro danou hodnotu s jsou

$$m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s. \quad (3.274)$$

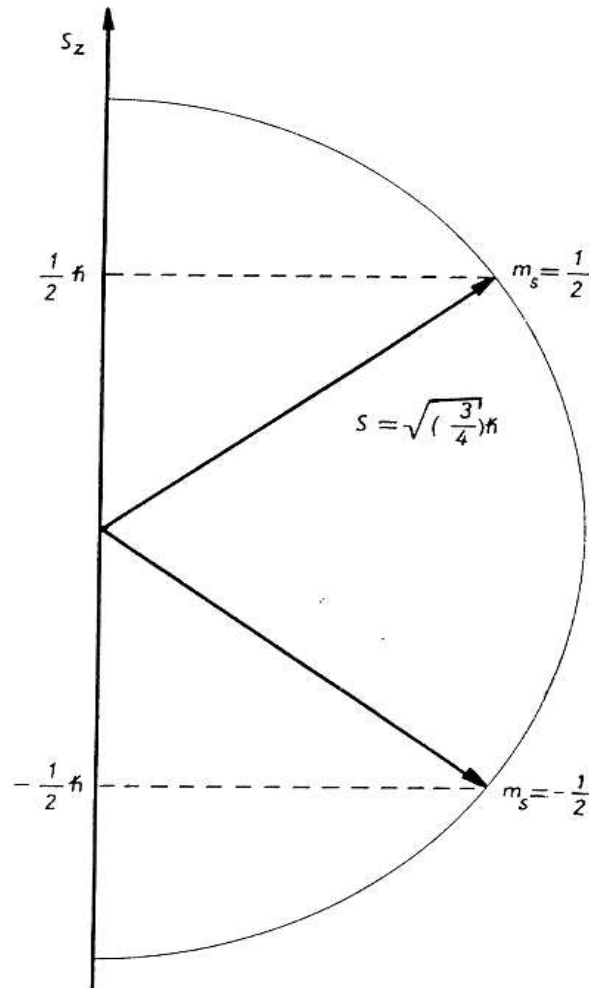
Takže počet možných orientací vektoru spinového momentu hybnosti je $2s + 1$.

Projekce spinu S_z částice se spinem $s = 0$ tak nabývá jediné hodnoty $S_z = 0$. Tvoří tak skalární veličinu a proto o částicích se spinem 0 hovoříme jako o **skalárních** částicích a o polích s těmito částicemi spojených jako o skalárních polích.

Projekce spinu částice se spinem $s = 1$ může nabývat 3 různých hodnot $S_z = (-1, 0, 1)$, které dohromady tvoří vektor. Proto o těchto částicích, jakož i polích s nimi spojených, hovoříme jako o částicích a polích **vektorových**.

Konečně projekce spinu částic s poločíselným spinem tvoří dohromady spinor (viz obr. 3.13)

Obr. 3.13



V souvislosti s nimi pak hovoříme o **spinorových** částicích a polích. Magnetický moment charakterizující spin elektronu souvisí s jeho spinovým momentem hybnosti $\hat{\mathbf{S}}$ vztahem

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}^S = -\frac{e}{m_e} \hat{\mathbf{S}} = -2\mu_B \hat{\mathbf{S}} = \gamma \hat{\mathbf{S}}. \quad (3.275)$$

kde $\gamma = -\frac{e}{m_e}$ je tzv. **gyromagnetický poměr**.

Možné hodnoty složky vektoru μ_s podél libovolné osy, např. osy z, jsou tudíž omezeny na

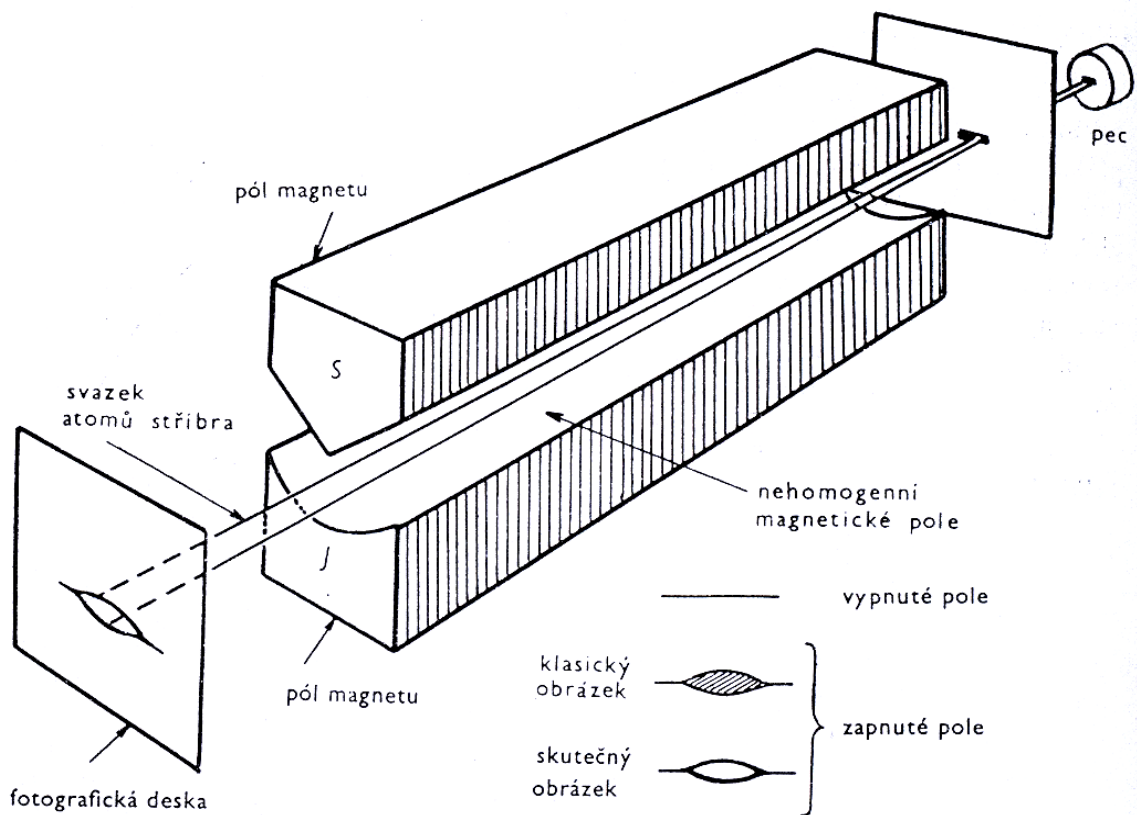
$$\hat{\mu}_z^S = \gamma \hbar m_s, \quad (3.276)$$

a pro celkový magnetický moment máme

$$\hat{\mu}^S = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = \gamma \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (3.277)$$

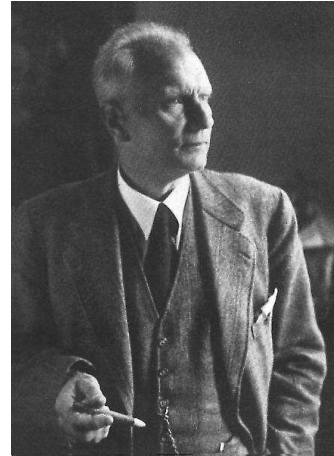
Prostorové kvantování poprvé přímo demonstrovali O. Stern a W. Gerlach v roce 1921 v experimentu znázorněném na následujícím obrázku:

Obr. 3.14





Otto Stern (1888 - 1969)



Walter Gerlach (1889 - 1979)

Pouštěli svazek elektronů do nehomogenního magnetického pole, průřez svazku po průchodu polem zaznamenávala fotografická deska. Stern a Gerlach zjistili, že se počáteční svazek štěpí na dvě odlišné části, odpovídající dvěma odlišným orientacím spinu elektronu v magnetickém poli.

Spočtíme nyní vlastní funkce operátoru z -ové komponenty spinu

$$S_z \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z, \text{ odpovídající vlastním hodnotám } \pm \frac{\hbar}{2}:$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}. \quad (3.278)$$

Ihned vidíme, že hledanými vlastními vektory jsou stavy

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.279)$$

Kde první index v ketvektorech přísluší celkovému spinu \mathbf{S} , druhý pak jeho z -ové komponentě \mathbf{S}_z .

Pokud Hamiltonián obsahuje operátor spinu, píšeme vlnovou funkci ve tvaru obecné dvousložkové vlnové funkce

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (3.280)$$

Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v libovolném ze dvou spinových stavů je rovna

$$\langle \psi | \psi \rangle = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2. \quad (3.281)$$

Zavedeme nyní tzv. *spinovou funkci* předpisem

$$\eta(\zeta) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a |\uparrow\rangle + b |\downarrow\rangle, \quad (3.282)$$

kde proměnná ζ nabývá hodnot $\pm \frac{1}{2}$.

Spinové funkce tvoří zřejmě dvoudimenzionální vektorový prostor s bází $\{|\uparrow\rangle; |\downarrow\rangle\}$.

Vezmeme-li v úvahu (3.275), můžeme pro pohyb elektronu v konstantním magnetickém poli \mathbf{B} a skalárním potenciálu φ sestavit tzv. *Pauliho rovnici*:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{(-i\hbar \nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_e} - e\varphi + \frac{e}{m_e} \hat{\mathbf{S}} \mathbf{B} \right] \psi, \quad (3.283)$$

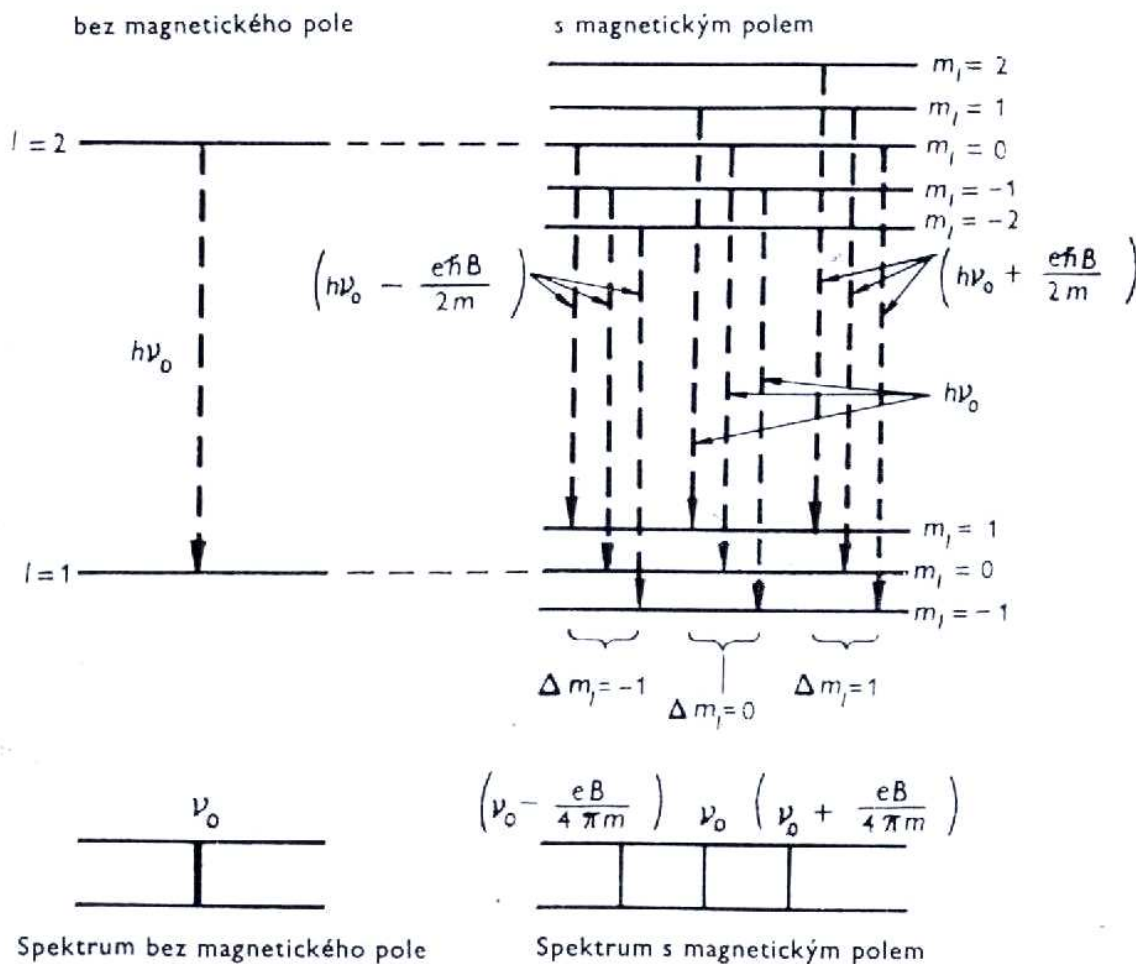
kde ψ je definována vztahem (3.280). Podle této rovnice závisí energie atomu vodíkového typu v magnetickém poli jak na jeho orbitálním momentu hybnosti, tak i na jeho spinu. To snadno pochopíme, přepíšeme-li vztah (3.271) kde namísto magnetického kvantového čísla dosadíme spinové magnetické číslo

$$E_s = 2\mu_B m_s B = -\gamma \hbar m_s B, \quad (3.284)$$

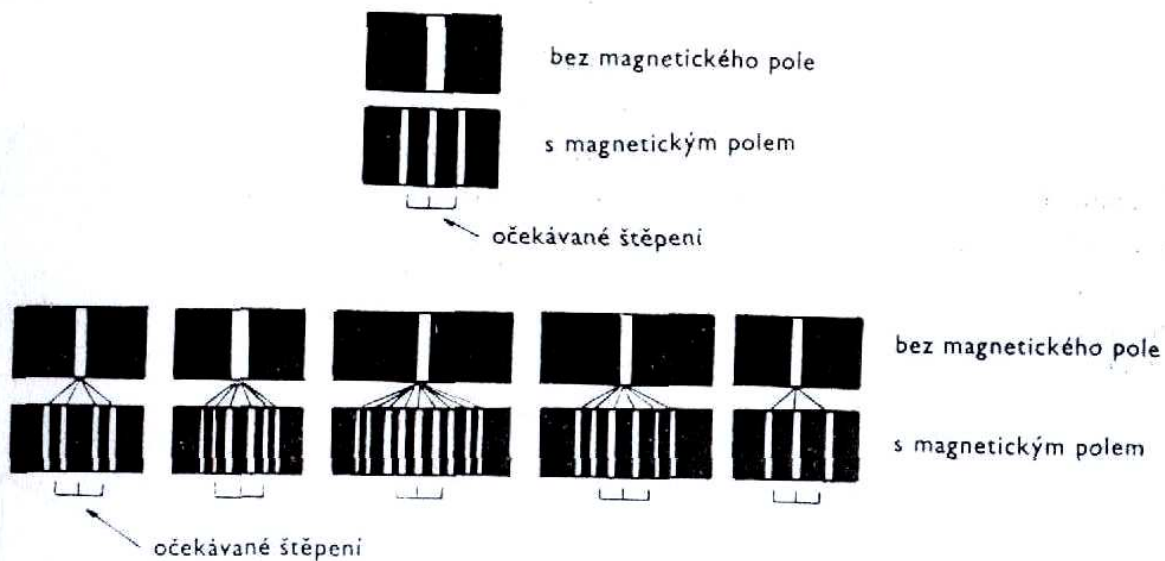
Specielně pro částice se spinem $\frac{1}{2}$, kde $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, tak platí

$$E_s = \pm \mu_B B.$$

Obr. 3.15



Obr. 3.16





Pieter Zeeman (1846 – 1943)

V případě působení malé poruchy na Zeemanův multiplet (může se jednat např. o poruchu ve formě časově proměnného pole) lze indukovat energetický přechod mezi sousedními hladinami multipletu. To je logicky spojeno s absorpcí či emisí kvanta

$$\Delta E = \hbar \omega_L = |\gamma| \hbar B, \quad (3.285)$$

kde

$$\omega_L = |\gamma| B \quad (3.286)$$

je tzv. *Larmorova frekvence* udávající zjevně podmínku pro frekvenci poruchy nutnou k tomu, aby porucha mohla indukovat přechody mezi sousedními hladinami Zeemanova multipletu.



Sir Joseph Larmor (1857 – 1942)

Obecným řešením je v tomto případě vlnová funkce

$$\chi(t) = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\omega_L t} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_L t}, \quad (3.287)$$

kde $a = \cos \frac{\vartheta}{2}$, $b = \sin \frac{\vartheta}{2}$, přičemž ϑ je úhel sklopení magnetického momentu vzhledem k ose z , vyvolaný působením poruchy. Platí tedy

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (3.288)$$

Pro vlnovou funkci odtud dostáváme

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}. \quad (3.289)$$

Střední hodnoty projekce operátorů spinu do jednotlivých os pak budou

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_x | \chi \rangle = \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} (e^{2i\omega_L t} + e^{-2i\omega_L t}) = \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} 2 \cos(2\omega_L t) = \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \cos(2\omega_L t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_y \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_y | \chi \rangle = \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} -i \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \\ i \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= i \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} (e^{-2i\omega_L t} - e^{2i\omega_L t}) = \frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \sin(2\omega_L t),
\end{aligned} \tag{3.291}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_z \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_z | \chi \rangle = \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \left(\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ -\sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2} - \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos \vartheta.
\end{aligned} \tag{3.292}$$

Předpokládejme nyní, že na gyromagnetickou částici působí kromě statického magnetického pole \mathbf{B}_0 orientovaného ve směru osy z , ještě i časově proměnné pole \mathbf{B}_1 konstantní amplitudy B_1 , jehož vektor rotuje konstantní úhlovou frekvencí ω v rovině x, y . Celkový vektor magnetické indukce pak bude

$$\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, B_0). \tag{3.293}$$

Celkový hamiltonián částice lze pak vyjádřit ve tvaru součtu

$$\hat{H} = -\gamma \mathbf{S} \mathbf{B} = -\frac{\hbar}{2} \gamma \hat{\mathbf{g}} \mathbf{B} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t), \quad (3.294)$$

kde první člen je dán výrazem (3.284), druhý člen, popisující působení pole \mathbf{B}_1 je tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t) &= -\hat{\boldsymbol{\mu}}^S \mathbf{B}_1 = -\gamma \hbar B_1 (\hat{S}_x \cos \omega t + \hat{S}_y \sin \omega t) = \\ &= -\frac{B_1 \gamma \hbar}{2} (\hat{S}_- e^{i\omega t} + \hat{S}_+ e^{-i\omega t}) = -\frac{B_1 \gamma \hbar^2}{2} \left[e^{i\omega t} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= -\frac{B_1 \gamma \hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.295)$$

Dle nestacionární poruchové teorie (viz kapitola 4) je pravděpodobnost přechodu mezi stavy, charakterizovanými kvantovými čísly m'_s a m_s úměrná čtverci maticového elementu poruchy

$$P_{m'_s, m_s} \sim \left| \langle m'_s | \hat{H}_1 | m_s \rangle \right|^2. \quad (3.296)$$

Díky tvaru hamiltoniánu (3.295) je zřejmé, že nenulové budou pouze maticové elementy, pro něž bude $m'_s = m_s \pm 1$. Magnetické pole \mathbf{B}_1 je tedy schopné indukovat energetické přechody pouze mezi sousedními hladinami Zeemanova multipletu. Při přechodu na hladinu s vyšší energií bude soustava energii absorbovat, při přechodu na hladinu s nižší energií bude energie emitována. Díky tomu, že maticové elementy (3.296) jsou symetrické, mají přechody v obou směrech stejnou pravděpodobnost.

Schrödingerovu rovnici pro gyromagnetickou částici v poli s hamiltoniánem (3.294) zapíšeme ve tvaru

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} &= -\frac{\hbar}{2} \gamma \hat{\mathbf{G}} \mathbf{B} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} B_1 \cos \omega t \\ -B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \left[\begin{pmatrix} 0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & iB_1 \sin \omega t \\ -iB_1 \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B_0 & 0 \\ 0 & -B_0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \begin{pmatrix} B_0 & B_1 (\cos \omega t + i \sin \omega t) \\ B_1 (\cos \omega t - i \sin \omega t) & B_0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \gamma \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{i\omega t} \\ B_1 e^{-i\omega t} & B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.297}$$

To je však systém diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}
i \frac{d\chi_1}{dt} &= -\frac{\gamma}{2} (B_0 \chi_1 + B_1 e^{i\omega t} \chi_2), \\
i \frac{d\chi_2}{dt} &= -\frac{\gamma}{2} (B_1 e^{-i\omega t} \chi_1 - B_0 \chi_2).
\end{aligned} \tag{3.298}$$

Řešení předpokládejme ve tvaru

$$\begin{aligned}
\chi_1(t) &= A_1 e^{i\lambda_1 t}, \\
\chi_2(t) &= A_2 e^{i\lambda_2 t},
\end{aligned} \tag{3.299}$$

tedy

$$\begin{aligned}
-A_1 \lambda_1 e^{i\lambda_1 t} &= -\omega_0 A_1 e^{i\lambda_1 t} - \omega_1 e^{i\omega t} A_2 e^{i\lambda_2 t}, \\
-A_2 \lambda_2 e^{i\lambda_2 t} &= \omega_0 A_2 e^{i\lambda_2 t} - \omega_1 e^{-i\omega t} A_1 e^{i\lambda_1 t}.
\end{aligned} \tag{3.300}$$

kde jsme označili

$$\begin{aligned}
\omega_0 &\equiv \frac{\gamma B_0}{2}, \\
\omega_1 &\equiv \frac{\gamma B_1}{2}.
\end{aligned} \tag{3.301}$$

První rovnici (3.300) vynásobíme faktorem $e^{-i\lambda_1 t}$, druhou faktorem $e^{-i\lambda_2 t}$. Po úpravě dostáváme

$$\begin{aligned} A_1 e^0 (\omega_0 - \lambda_1) &= -\omega_1 A_2 e^{it(\lambda_2 - \lambda_1 + \omega)}, \\ A_2 e^0 (\omega_0 + \lambda_2) &= \omega_1 A_1 e^{it(\lambda_1 - \lambda_2 - \omega)}. \end{aligned} \quad (3.302)$$

Položíme-li

$$\left. \begin{aligned} \lambda_2 - \lambda_1 + \omega &= 0 \\ \lambda_1 - \lambda_2 - \omega &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \lambda_2 = \lambda_1 - \omega, \quad (3.303)$$

redukuje se soustava (3.302) na systém homogenních rovnic

$$\begin{aligned} (\omega_0 - \lambda_1) A_1 + \omega_1 A_2 &= 0, \\ \omega_1 A_1 - (\omega_0 + \lambda_1 - \omega) A_2 &= 0, \end{aligned} \quad (3.304)$$

který má řešení pro

$$\begin{vmatrix} \omega_0 - \lambda_1 & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega_0 + \lambda_1 - \omega \end{vmatrix} = 0, \quad (3.305)$$

neboli

$$(\omega_0 - \lambda_1)(\omega - \lambda_1 - \omega_0) - \omega_1^2 = 0. \quad (3.306)$$

To vede na kvadratickou rovnici

$$\lambda_1^2 - \omega \lambda_1 - \omega_0^2 + \omega \omega_0 - \omega_1^2 = 0 \quad (3.307)$$

s řešením

$$\lambda_1^\pm = \frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}, \quad (3.308)$$

$$\lambda_2^\pm = -\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}.$$

Zpětným dosazením do (3.299) dostáváme

$$\chi_1(t) = A_1^+ e^{i\lambda_1^+ t} + A_1^- e^{i\lambda_1^- t}, \quad (3.309)$$

$$\chi_2(t) = A_2^+ e^{i\lambda_2^+ t} + A_2^- e^{i\lambda_2^- t}.$$

Zřejmě platí

$$A_2^+ = -A_2^- = A, \quad (3.309)$$

Položíme-li

$$\Omega \equiv \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}, \quad (3.310)$$

můžeme psát

$$\chi_2(t) = A e^{\frac{i\omega t}{2}} \left(e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t} \right) = 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \sin(\Omega t). \quad (3.311)$$

Pro derivaci $\chi_2(t)$ odtud máme

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_2(t)}{dt} &= 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \left(\Omega \cos \Omega t - \frac{i\omega t}{2} \sin \Omega t \right) = \\ &= i \frac{\gamma}{2} \left(B_1 e^{-i\omega t} \chi_1 - B_0 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \sin(\Omega t) \right). \end{aligned} \quad (3.312)$$

Položíme-li $t = 0$, platí

$$\frac{d\chi_2(0)}{dt} = 2iA\Omega = i\frac{\gamma}{2}B_1\chi_1(0), \quad (3.313)$$

neboli

$$2A\Omega = \frac{\gamma}{2}B_1\chi_1(0) = \omega_1\chi_1(0) \quad (3.314)$$

odkud

$$|A|^2 = \frac{\omega_1^2 \chi_1(0)}{2 \left[\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0 \right)^2 + \omega_1^2 \right]}. \quad (3.315)$$

Okamžitě vidíme, že rezonance nastává pro $\omega = 2\omega_0 = \omega_L$.

Z hlediska velikosti spinu dělíme částice na tzv. *fermiony* a *bosony*. Zatímco bosony mají spin vždy celočíselný, fermiony mají spin poločíselný. Rozdílnost spinu u bosonů a fermionů je příčinou jejich zcela odlišného fyzikálního chování. Žádné jiné rodiny částic se od sebe neliší tolik, jako právě tyto 2 rodiny. Odlišnost spinu způsobuje, že pro fermiony platí tzv. *Pauliho vylučovací princip*, zatímco pro bosony nikoli.

Pauliho princip

Předpokládejme 2 identické částice, z nichž jedna se nalézá v kvantovém stavu a , a druhá ve stavu b . Protože jsou obě dvě částice identické, neměla by se hustota pravděpodobnosti $|\psi|^2$ tohoto systému nijak změnit při vzájemné záměně částic, tj. když částice ve stavu a nahradí částici ve stavu b a naopak. V symbolickém zápisu tedy požadujeme

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2. \quad (3.316)$$

Vlnová funkce reprezentující částice po záměně může být tedy buď symetrická

$$\psi(1,2) = \psi(2,1), \quad (3.317)$$

nebo antisymetrická

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1) \quad (3.318)$$

je-li částice 1 ve stavu a a částice 2 ve stavu b je vlnová funkce tohoto systému

$$\psi_1 = \psi_a(1)\psi_b(2), \quad (3.319)$$

a je-li částice 2 ve stavu a a částice 1 ve stavu b , je vlnová funkce

$$\psi_2 = \psi_a(2)\psi_b(1). \quad (3.320)$$

Protože jsou obě částice ve skutečnosti nerozlišitelné, nemůžeme se nijak dozvědět, zda v daném okamžiku popisuje systém ψ_1 nebo ψ_2 . Pravděpodobnost obou dvou možností je stejná. Vhodným popisem systému je tedy superpozice (lineární kombinace) obou dvou funkcí, přičemž existují dvě takovéto možné kombinace:
Symetrická

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)], \quad (3.321)$$

antisymetrická

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]. \quad (3.322)$$

Faktor před závorkami je nutný kvůli normování vlnové funkce.

Záměna částic 1 a 2 nemá vliv na ψ_S , kdežto u ψ_A obrací znaménko. Obě dvě funkce přitom splňují (3.316).



Wolfgang Pauli (1900 – 1958)

Mezi chováním částic v systémech se symetrickou vlnovou funkcí a v systémech jejichž vlnová funkce je antisymetrická, existuje řada významných rozdílů. Nejdůležitější je ten, že v prvním případě mohou obě částice 1, 2 existovat současně v témž stavu $a = b$, kdežto položíme-li v druhém případě $a = b$, dostaneme $\psi_A = 0$, což vede k nulové hustotě pravděpodobnosti, že by takováto situace mohla nastat. Dá se ukázat, že všechny částice s poločíselným spinem (fermiony) jsou popsány antisymetrickou vlnovou funkcí (3.322), kdežto všechny částice se spinem rovným celému číslu (bosony) popisují symetrické vlnové funkce (3.321).

Pauliho vylučovací princip tedy říká, že nemohou existovat dva fermiony, jež by měly všechny kvantové náboje (kvantová čísla) úplně stejné (pozor, kvantovými čísly charakterizujícími částici může být i poloha a čas). Pokud se tedy mají 2 fermiony současně vyskytovat na téže energetické hladině v atomu, musí se navzájem lišit v dalších kvantových číslech. Shodují-li se v atomu vodíku pro dva elektrony kvantová čísla n, l, m , musí se vzájemně lišit jejich spinová kvantová čísla s . Naproti tomu, bosony jsou vůči sobě navzájem prakticky zcela netečné. V laserovém svazku může být vedle sebe nespočet bosonů v témže kvantovém stavu a žádnému z nich to nevadí. Z tohoto pohledu se bosony jeví jako velmi „přátelské“ částice. Je to však pouhé zdání, neboť ve dvou vzájemně se křižujících laserových

paprscích procházejí jednotlivé bosony vzájemně skrz sebe, aniž by to mělo jakýkoli vliv na změnu jejich dráhy a chování.

Pokusme se naše předchozí úvahy zobecnit na systém N stejných částic popsaných společnou vlnovou funkcí Ψ .

Definujme tzv. *operátor permutace*:

$$\hat{P}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & i & \cdots & j & \cdots & N \\ 1 & \cdots & j & \cdots & i & \cdots & N \end{pmatrix} \quad (3.323)$$

působící na funkci N spinových proměnných podle vztahu

$$\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) = \hat{P}_{ij} \Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N). \quad (3.324)$$

Obě dvě funkce opět popisují týž stav. Uvažujme fyzikální veličinu B systému N stejných částic, jíž přísluší operátor \hat{B} . Necht' $|\varphi\rangle$ je vlastní vektor operátoru \hat{B} příslušející vlastní hodnotě b . Je-li systém ve stavu

$$\hat{P}|\varphi\rangle \equiv |\hat{P}\varphi\rangle, \quad (3.325)$$

pak vzhledem k nerozlišitelnosti částic musíme při měření B dostat týž výsledek:

$$\hat{B}|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle \Rightarrow \hat{B}\hat{P}|\varphi\rangle = b|\hat{P}\varphi\rangle. \quad (3.326)$$

Vlastní vektory $|\varphi\rangle$ a $|\hat{P}\varphi\rangle$ hermitovského operátoru \hat{B} příslušejí téže vlastní hodnotě b . K tomu je nutnou a postačující podmínkou, aby pro libovolný permutační operátor \hat{P} platilo

$$[\hat{B}, \hat{P}] = 0. \quad (3.327)$$

Označíme-li stručně

$$\begin{aligned} (1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &\equiv (i, j), \\ (1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) &\equiv (j, i), \end{aligned} \quad (3.328)$$

můžeme přepsat (3.324) do tvaru

$$\hat{P}_{ij} \Psi(i, j) = \Psi(j, i). \quad (3.329)$$

Protože ke každému permutačnímu operátoru \hat{P} existuje operátor inverzní \hat{P}^{-1} , můžeme (3.329) zapsat jako

$$\Psi(i, j) = \hat{P}_{ij}^{-1} \Psi(j, i). \quad (3.330)$$

V Diracově symbolice platí pro (3.329) a (3.330) vztahy

$$\langle \hat{P}_{ij} \Psi_1(i, j) | \Psi_2(i, j) \rangle = \langle \Psi_1(i, j) | \hat{P}_{ij}^* | \Psi_2(i, j) \rangle = \langle \Psi_1(j, i) | \hat{P}_{ij}^{-1} | \Psi_2(j, i) \rangle \quad (3.331)$$

odkud plyne unitarita operátoru \hat{P} :

$$P^* = P^{-1}. \quad (3.332)$$

Protože kvadrát unitárního operátoru je identita:

$$\hat{P}^2 \equiv \hat{P}^* \hat{P} = \hat{P}^{-1} \hat{P} = \hat{1}, \quad (3.333)$$

můžeme této skutečnosti využít k nalezení vlastních hodnot operátoru \hat{P} . Na charakteristickou rovnici

$$\hat{P}\Psi = \lambda\Psi \quad (3.334)$$

zapůsobíme operátorem \hat{P} a dostaneme

$$\Psi = \hat{P}\lambda\Psi = \lambda\hat{P}\Psi = \lambda^2\Psi, \quad (3.345)$$

odkud okamžitě plyne $\lambda^2 = 1$ neboli $\lambda = \pm 1$. Vlastní funkce odpovídající vlastní hodnotě $\lambda = 1$ se nazývá symetrická

$$\hat{P}_{ij} \Psi^S = \Psi^S, \quad (3.346)$$

vlastní funkce odpovídající vlastní hodnotě $\lambda = -1$ se nazývá antisymetrická

$$\hat{P}_{ij} \Psi^A = -\Psi^A. \quad (3.347)$$

Poslední definici lze ve skutečnosti ještě více zobecnit s pomocí operátoru parity příslušné permutace $\hat{\Pi} \equiv (-1)^p$. Obecně pro antisymetrické vlnové funkce platí

$$\hat{P}_{ij} \Psi^A = (-1)^p \Psi^A. \quad (3.348)$$

Definujme projekční operátory zvané **symetrizátor** a **antisymetrizátor**.

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_p \hat{P}_p, \quad (3.349)$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p.$$

Snadno ověříme, že platí

$$\hat{P}\hat{S} = \hat{S}\hat{P} = \hat{S}, \quad \hat{P}\hat{A} = \hat{A}\hat{P} = (-1)^p \hat{A}. \quad (3.350)$$

S pomocí těchto projektorů můžeme zapsat (3.327) ve tvaru

$$\hat{S}\Psi^S = \Psi^S, \quad \hat{A}\Psi^A = \Psi^A. \quad (3.351)$$

Necht' $\{\psi_{k_i}(i)\}$ je množina jednočásticových stavů vzájemně neinteragujících částic. Ukážeme, jakým způsobem lze z nich konstruovat vlnovou funkci $\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$. V partikulárním tvaru ji můžeme vyjádřit jako součin

$$\prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i), \quad (3.352)$$

avšak tato funkce sama ještě nevyhovuje symetrizačnímu postulátu. Je proto nutné vyprojektovat z ní symetrickou a antisymetrickou komponentu:

$$\begin{aligned} \Psi^S(1, \dots, N) &= \hat{S} \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) = \frac{1}{N!} \sum_p \hat{P}_p \left(\prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right), \\ \Psi^A(1, \dots, N) &= \hat{A} \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) = \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p \left(\prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right). \end{aligned} \quad (3.353)$$

Výraz na pravé straně druhé rovnice (3.353) však není nic jiného, než determinant matice. Příslušná normovaná vlnová funkce se nazývá **Slaterův determinant**:



John Clarke Slater (1900 – 1976)

$$\Psi^A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p \left(\prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_1}(2) & \cdots & \psi_{k_1}(N) \\ \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_2}(2) & \cdots & \psi_{k_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(1) & \psi_{k_N}(2) & \cdots & \psi_{k_N}(N) \end{vmatrix}. \quad (3.354)$$

Transpozice dvou částic odpovídá záměně dvou sloupců Slaterova determinantu, v důsledku čehož mění determinant znaménko. Jsou-li mezi indexy k_i dva stejné, tj. jsou-li dvě částice v témže stavu, jsou dva řádky stejné a determinant je identicky roven nule. Tudíž i pravděpodobnost výskytu takového stavu je nulová. V systému stejných fermionů tedy nemohou být současně dvě částice v témže stavu. Dospíváme tak opět k Pauliho vylučovacímu principu, tentokrát v zobecněné podobě. Pro bosony však žádná analogie Pauliho principu neplatí.

Protože máme v kvantové mechanice dvě diametrálně odlišné rodiny částic, máme také dvě odlišné statistiky, jimiž popisujeme to, kterak částice „zabydlují“ jednotlivé energetické hladiny. Kvantová statistika popisující uspořádání bosonů se nazývá **Bose – Einsteinova statistika**, kvantová statistika popisující uspořádání fermionů se nazývá **Fermi – Diracova statistika**.



Enrico Fermi (1901 – 1954)



Satyendra Nath Bose (1894 – 1974)

Ve Fermi – Diracově statistice naproti tomu vykazuje každá energetická hladina stav nasycení, a energetické spektrum je diskrétní (čárové), neb jsou povoleny jen určité energetické hladiny, na kterých se částice spolu vzájemně snesou. Pro tyto částice platí Pauliho vylučovací princip, což se projevuje omezením rozdělovací funkce u nízkých energií (v jednom stavu může být nejvýše jeden fermion). Rozdělovací funkce určuje střední počet částic ve stavu s energií E :

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (3.355)$$

kde E_F je tzv. Fermiho energie.
Pro energie

$$E - E_F \gg k_B T \quad (3.356)$$

přechází Fermiovo – Diracovo rozdělení v klasické Maxwelllovo – Boltzmannovo rozdělení.



Ludwig Eduard Boltzmann (1844 – 1906)

Bose - Einsteinova statistika popisuje v podstatě klasický plyn obsahující vzájemně neinteragující částice. Tam obecně platí, že nejvíce částic je uspořádáno na nejnižších energiích, a jak energie v systému roste, zaujímají některé z nich energie vyšší. Rozdělovací funkce má v tomto případě tvar

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} - 1} . \quad (3.357)$$

Pro energie

$$E - E_F \gg k_B T \quad (3.358)$$

opět přechází Boseho-Einsteinovo rozdělení v klasické Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdělení.

Energetické uspořádání částic v Maxwelllově – Boltzmannově statistice v podstatě odpovídá statistickému rozdělení počtu částic v závislosti na jejich energii v ideálním plynu ohřátém na určitou teplotu T (tzv. Maxwelllovo – Boltzmannova rozdělení). Takovéto spektrum je spojité a vykazuje statistické maximum na energii

$$E = k_B T , \quad (3.359)$$

kde k je Boltzmannova konstanta.

Tak např. v atomu vodíku jsou energetické hladiny (slupky) K, L, M, N, ... obsazovány elektrony v závislosti na 3 kvantových číslech.

Orbitální kvantové číslo $l = 0, 1, 2, \dots$, určuje počet orbitalů na každé hladině. Zatímco na slupce K je jediný orbital 1s, na slupce L jsou již orbitaly 2s, 2p, na slupce M orbitaly 3s, 3p, 3d, a na slupce N, orbitaly 4s, 4p, 4d, 4f, a tak dále. **Magnetické kvantové číslo** pak určuje počet hladin na každém z orbitalů. Zatímco orbital s obsahuje jedinou hladinu, orbital p už má 3, orbital d jich má 5 a orbital f dokonce 7, obecně tedy $(2l+1)$ stavů. Na n -té slupce se tedy nalézá jen omezený počet n^2 energetických hladin (podslupek). Je zde však ještě **spinové kvantové číslo** s , které umožňuje elektronu zaujmout 2 různé stavy: jeden stav se spinem orientovaným kladně druhý stav se spinem orientovaným záporně. Na každém orbitalu nám tak Pauliho princip dovoluje existenci nanejvýše $2(2l+1)$ elektronů, což pro hlavní kvantové číslo n , určující energii slupky, představuje množství $2n^2$ elektronů. Na tomto jednoduchém případě dobře známém již z hodin fyziky a chemie na střední škole, jsme dobře demonstrovali podstatu

rozdílu mezi Bose – Einsteinovou a Fermi – Diracovu statistikou. Zatímco částice s celočíselným spinem podléhající Bose –Einsteinově statistice se stále chovají jako nezávislé a nemohou spolu tedy vytvořit vázané celky a jakkoli uspořádané struktury, částice s poločíselným spinem, podléhající statistice Fermi – Diracově, pro něž platí Pauliho vylučovací princip, mohou spolu vytvářet atomy, molekuly, krystaly, živé buňky, a živé organismy. Zdálo by se tedy, že za veškerou rozmanitost přírody vděčíme pouze a jedině fermionům. Vystávala by pak otázka, k čemu jsou vlastně dobré bosony. V následujících kapitolách si ukážeme, že bosony jsou pro přírodu neméně důležitými, neboť jsou to právě ony, které zprostředkovávají vazebné síly mezi fermiony. Prostřednictvím bosonů spolu fermiony komunikují a drží vzájemně pohromadě. Zatímco Fermi – Diracova statistika a Pauliho princip jim pouze dovolují vytvářet vázané stavy fermionů, bosony jsou onou silou, která ty vázané stavy doopravdy zprostředkovává a udržuje.

Klasifikace částic

Na počátku 20. století byla známa jediná elementární částice a tou byl elektron. Na konci 20. století jich už fyzikové znali okolo 300. Již v 60. letech minulého století však byly znalosti o částicích a jejich interakcích poskytované velkými urychlovači dostatečné na to, aby se lidé mohli pokusit tuto stále méně přehlednou změť různých druhů částic nějak uspořádat.

Zatímco elementárních bosonů existuje v přírodě jen několik desítek druhů, fermionů jsou stovky a dělíme je dále do několika rodin.

Největší rodinu tvoří **Hadrony** (z řeckého slova hadros = silný), což jsou částice podléhající tzv. **silné interakci**, o níž budeme hovořit v kapitole o interakcích. Silná jaderná interakce je citlivá na další kvantový náboj zvaný **barva**.

Tab. 3.2

Kvarky	d	u	s	c	b	t
Klidová hmotnost [MeV]	~ 3	~ 3	~ 130	~ 1 300	~ 4 300	~ 173 000
Elektrický náboj [e]	-1/3	2/3	-1/3	2/3	-1/3	2/3
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Baryonové číslo	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
Doba života [s]	∞	∞	∞	∞	∞	∞

Druhou hlavní rodinu fermionů tvoří šestičlenná skupinka částic zvaných **leptony** – to jsou jediné fermiony nepodléhající silné interakci. Tvoří je **elektron**, **elektronové neutrino**, **mion** (těžký elektron) a **mionové neutrino**, a třetí dvojici **tauon** (supertěžký elektron) a **tauonové neutrino**.

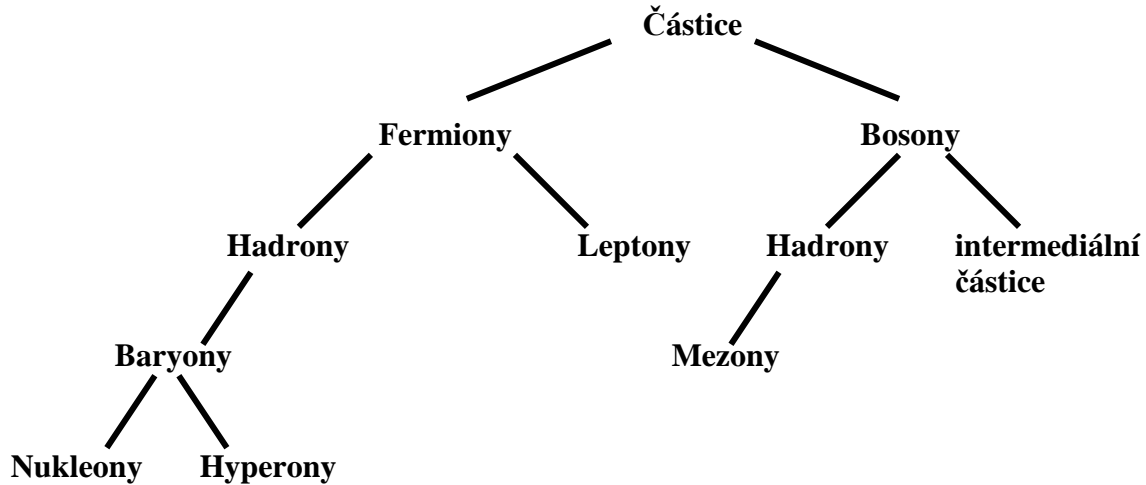
Tab. 3.3

Leptony	e	ν_e	μ	μ_e	τ	ν_τ
Klidová hmotnost [keV]	511	< 0.002	105 658	< 190	1777000	< 18200
Elektrický náboj [e]	-1	0	-1	0	-1	0
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Leptonové číslo	1_e	1_e	1_μ	1_μ	1_τ	1_τ
Doba života [s]	∞	∞	$2,2 \cdot 10^{-6}$	∞	$2,9 \cdot 10^{-13}$	∞

Velice početnou rodinu hadronů si dále rozdělíme na **Baryony** – částice látkotvorné, a **mezony** – hadrony s velice krátkou životností, které jsou tak trochu černými ovce v rodině hadronů, neboť jako jediné hadrony nenáleží mezi fermiony, alebrž mezi bosony (jejich spin je buď 1, nebo 0). Jak si povíme dál, je to způsobeno tím, že podobně jako třeba atomové jádro, nejsou mezony ani baryony elementárními hadrony, ale jsou složeny z dvojice ještě elementárnějších fermionických hadronů zvaných kvarky. Typická atomární látka vesmíru je však tvořena pouze dvěma baryony a to protonem a neutronem, které tak tvoří ještě samostatnou rodinu s výsostným postavením uvnitř rodiny baryonů, jež se nazývá **rodinou nukleonů** (nucleus = jádro). Zbylé baryony, které tvoří vůbec

nejpočetnější skupinu částic se nazývají **hyperony**, neboť obsahují nenulovou hodnotu dalšího kvantového čísla zvaného **hypernáboj Y** . Můžeme tak nyní všechny známé částice uspořádat do přehledného rodinného stromu:

Schéma 2



Lokální symetrie

Všechny známé zákony zachování ve fyzikálním světě jsou důsledkem symetrií přírody.



Emmy Noetherová (1882 – 1935)



Eugene Paul Wigner (1902 – 1995)

1) *Permutace stejných částic*

Záměna identických částic, diskutovaná v minulé kapitole, je jednou z mnoha možných operací symetrie a vede k zachování charakteru

vlnové funkce. Vlnová funkce může být vzhledem k takové záměně buď symetrická, nebo antisymetrická, přičemž v prvním případě se částice řídí Bose – Einsteinovou statistikou, ve druhém pak Fermi – Diracovou statistikou. Zachování typu statistiky (neboli zachování symetrie či antisymetrie vlnové funkce) znamená, že statické vlastnosti izolovaného systému nemůže změnit žádný proces, probíhající uvnitř. Systém řídicí se Bose – Einsteinovou statistikou tedy nemůže samovolně přejít k Fermi – Diracově statistice a naopak.

2) *Prostorová inverze*

Další významná třída operací symetrie se týká různých druhů **parity**. Tento pojem charakterizuje chování vlnové funkce vůči inverzi souřadnic. Nemění-li se při inverzi souřadnic znaménko vlnové funkce

$$\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z), \quad (3.360)$$

říkáme, že ψ má **sudou paritu**.

Pakliže se znaménko mění:

$$\psi(x, y, z) = -\psi(-x, -y, -z), \quad (3.361)$$

má ψ **lichou paritu**.

Obecně tedy platí

$$\psi(x, y, z) = (-1)^p \psi(-x, -y, -z) = \hat{\Pi} \psi(-x, -y, -z), \quad (3.362)$$

kde

$$p = \begin{cases} 2n \\ 2n-1 \end{cases}, n \in \mathbb{N}. \quad (3.363)$$

Podobně, jako pro operátor permutace \hat{P} , jsou tedy vlastní hodnoty operátoru parity $\hat{\Pi}$ opět ± 1 , přičemž kladná vlastní hodnota generuje sudou paritu, záporná lichou.

Bylo prokázáno, že parita izolovaného systému se při elektromagnetických i silných jaderných procesech probíhajících uvnitř systému zachovává.

Zákon zachování parity je důsledkem symetrie prostoru vzhledem inverzi, tj. nezávislosti fyzikálních zákonů na tom, zda přírodní procesy popisujeme v levotočivém či pravotočivém souřadném systému.

Pro některé částice však takováto symetrie neplatí. Neutrino má pouze levotočivý spin, antineutrino naopak pouze pravotočivý, takže mezi částicemi a jejich zrcadlovými obrazy existuje hluboký rozdíl. Z této asymetrie plyne, že slabé interakce, jichž se účastní právě neutrina, obecně nezachovávají paritu, což bylo experimentálně poprvé potvrzeno při rozpadu mezonu K^+ .

3) Prostorová translace

Vyšetřeme nyní stavovou funkci $\psi(x, z, z)$ volné částice. Translace o infinitesimální prostorový úsek ε ve směru osy x souvisí s transformací funkce $\psi(x, z, z)$ vztahem určeným Taylorovým rozvojem

$$\begin{aligned} \psi'(x, z, z) &= \psi(x - \varepsilon, z, z) = \\ &= \psi(x, z, z) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, z, z) + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, z, z) - \dots = \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{p}_x + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{p}_x \right)^2 - \dots \right] \psi(x, z, z). \end{aligned} \tag{3.364}$$



Brook Taylor (1685 – 1731)

Jako v předchozích dvou případech můžeme uvedenou transformaci vyjádřit působením tzv. **substitučního operátoru** \hat{O}_g na vlnovou funkci. Substituční operátory v Hilbertově prostoru jsou jednoznačně přiřazeny operátorům \hat{g} působícím v reálném fyzikálním prostoru, neboli platí

$$\mathbf{r}' = \mathbf{g}\mathbf{r} \rightarrow \hat{O}_g \psi(\hat{g}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \quad (3.365)$$

kde \mathbf{g} je maticová reprezentace operátoru \hat{g} . Působení operátoru \hat{O}_g v Hilbertově prostoru tedy anuluje působení operátoru \hat{g} v reálném prostoru. Jinými slovy, hodnota funkce $\psi' = \hat{O}_g \psi$ v novém bodě \mathbf{r}' je rovna hodnotě původní funkce ψ v původním bodě \mathbf{r} . S přihlédnutím k (3.365) tedy platí

$$\hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{g}^{-1}\mathbf{r}). \quad (3.366)$$

Jsou-li $\psi_1(\mathbf{r})$ a $\psi_2(\mathbf{r})$ dva vektory Hilbertova prostoru, pak z definice (3.366) vyplývá

$$\hat{O}_g [\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})] = \psi_1(\hat{g}^{-1}\mathbf{r})\psi_2(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) = [\hat{O}_g \psi_1(\mathbf{r})][\hat{O}_g \psi_2(\mathbf{r})]. \quad (3.367)$$

Pro obecný posun stavu o vektor $\mathbf{\epsilon}$ v libovolném směru tak z (3.364) plyne

$$\hat{O}_g(\boldsymbol{\varepsilon}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \hat{p}_x + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \hat{p}_x \right)^2 - \dots = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}) \right]. \quad (3.368)$$

Definujme generátor $\hat{G}(g)$ spojité transformace \hat{g} jako derivaci příslušného substitučního operátoru podle parametru i při nulových hodnotách všech parametrů

$$\hat{G}(g) = \left. \frac{\partial}{\partial i} \hat{O}_g(i) \right|_{i=0}. \quad (3.369)$$

Transformace \hat{g} , pro níž platí

$$\hat{H}(\hat{g}\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \quad (3.370)$$

(invariance hamiltoniánu vůči \hat{g}) se nazývá **operace symetrie**.

Z (3.370) a (3.367) pro takovou transformaci okamžitě plyne

$$\begin{aligned} \hat{O}_g \left[\hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right] &= \left[\hat{O}_g \hat{H}(\mathbf{r}) \right] \left[\hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) \right] = \\ &= H(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) \hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{O}_g \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.371)$$

Je-li tedy hamiltonián invariantní vůči transformaci souřadnic \hat{g} , potom komutuje s příslušným substitučním operátorem:

$$\left[\hat{O}_g, \hat{H} \right] = 0 \Leftrightarrow \hat{O}_g \hat{H} \hat{O}_g^{-1} = \hat{H}. \quad (3.372)$$

V případě spojité transformace (translace, rotace) lze \hat{O}_g vyjádřit ve tvaru

$$\hat{O}_g(\lambda) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\lambda \hat{G}) \right], \quad (3.373)$$

kde \hat{G} je generátor příslušné transformace, λ je reálný parametr. Derivováním vztahu (3.372) podle λ při $\lambda = 0$ dostaneme

$$\frac{d}{d\lambda} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}\right) \hat{H} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}\right) \right]_{\lambda=0} = \frac{d}{d\lambda} \hat{H} = 0, \quad (3.374)$$

neboť hamiltonián není funkcí parametru λ . Vypočteme-li derivaci na levé straně (3.374), máme

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \hat{H} \frac{i}{\hbar} \hat{G} e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} - \frac{i}{\hbar} \hat{G} e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \right) = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{G} - \hat{G} \hat{H}) = 0, \quad (3.375)$$

odkud dostáváme důležitý vztah

$$[\hat{H}, \hat{G}] = 0. \quad (3.376)$$

Odtud plyne, že operátor hybnosti \hat{p}_i je generátorem translací ve směru obecné osy i .

4) Časová translace

Transformovanou funkci $\psi'(t)$ při časovém posunu $t \rightarrow t + \tau$ definujeme zcela obdobně jako v případě translace:

$$\psi'(t) = \hat{U}(\tau) \psi(t) = \psi(t - \tau), \quad (3.377)$$

kde $\hat{U}(\tau)$ je tzv. **evoluční operátor**. Pro infinitesimální posun v čase zřejmě platí

$$\psi(t - \tau) = \left(1 - \tau \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \dots \right) \psi(x, z, z). \quad (3.378)$$

Analogickým postupem jako v případě prostorové translace okamžitě nalézáme řešení ve tvaru

$$\hat{U}(\tau) = \exp\left(-\tau \frac{\partial}{\partial t}\right) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau}. \quad (3.379)$$

Všimněme si, že platí

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} = \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} = \hat{H} \hat{U} \quad (3.380)$$

Právě odvozená rovnice se nazývá rovnice časového vývoje, či krátce **evoluční rovnice**. Zapůsobíme-li nyní touto operátorovou rovnicí na počáteční stav $\psi(t_0)$, provede evoluční operátor vývoj stavu do času t a výsledná rovnice pro $\psi(t)$ není ničím jiným, než nám dobře známou časovou Schrödingerovou rovnicí

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H} \psi(t). \quad (3.381)$$

5) Prostorová rotace

Podobně, pro rotaci $\hat{R}(\alpha, z)$ o kladně orientovaný úhel α okolo osy z můžeme pomocí (3.366) a s využitím ortonormality matice \mathbf{R} odvodit

$$\begin{aligned} \hat{O}_R(\alpha, z) \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{g}^{-1} \mathbf{r}) = \psi \left[\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right] = \\ &= \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z). \end{aligned} \quad (3.382)$$

Pravou stranu lze pro infinitesimální α opět rozvinout v Taylorovu řadu. Uvážíme-li, že v tomto případě platí $\sin \alpha \sim \alpha$, $\cos \alpha \sim 1$, a omezíme-li se pro jednoduchost pouze na lineární členy, dostáváme

$$\begin{aligned}
\hat{O}_R(\alpha, z)\psi(x, y, z) &\approx \psi(x + y\alpha, -x\alpha + y, z) = \\
&= \psi(x, y, z) + \alpha \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \quad (3.383) \\
&= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z \right) \psi(x, y, z).
\end{aligned}$$

Pro infinitesimální rotaci okolo obecné osy \mathbf{n} (jednotkový vektor ve směru zvolené osy) bude tedy podobně, jako v případě translací, platit

$$\hat{O}_R(\alpha, \mathbf{n}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}\right). \quad (3.384)$$

Generátor rotace $-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}$ kolem osy \mathbf{n} je určen průmětem impulsmomentu do této osy.

V případě rotační symetrie odpovídají jednotlivé generátory složkám impulsmomentu $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$. Protože tyto operátory spolu navzájem nekomutují, můžeme použít jen jeden z nich. Z rovnic

$$[\hat{H}, \hat{J}_x] = [\hat{H}, \hat{J}_y] = [\hat{H}, \hat{J}_z] = 0 \quad (3.385)$$

však plyne

$$[\hat{H}, \hat{J}^2] = 0, \quad (3.386)$$

takže $\hat{H}, \hat{J}_z, \hat{J}^2$ jsou komutující pozorovatelné veličiny.

6) Časová inverze

Definujme operátor komplexního sdružení

$$\hat{K}\psi = \psi^*, \quad (3.387)$$

kde ψ je libovolná funkce.

Nechť funkce $\psi(t)$ vyhovuje časové Schrödingerově rovnici (3.381). Provedeme-li v ní transformaci $t \rightarrow -t$ a působíme-li na ni zleva operátorem \hat{K} , dostáváme

$$\hat{H}^* \psi^*(-t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial(-t)} \psi^*(-t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(-t). \quad (3.388)$$

Zapůsobíme-li nyní na tuto rovnici evolučním operátorem \hat{U} , máme

$$\hat{H}\hat{U}\psi^*(-t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}\psi^*(-t), \quad (3.389)$$

neboť z unitarity \hat{U} ihned plyne

$$\hat{U}\hat{H}^*\hat{U}^{-1} = \hat{H} \Leftrightarrow \hat{U}\hat{H}^* = \hat{H}\hat{U}. \quad (3.390)$$

Porovnáním (3.388) a (3.389) zjišťujeme, že je-li $\psi(t)$ řešením Schrödingerovy rovnice, je jím rovněž i funkce

$$\psi'(t) = \hat{U}\psi^*(-t) = \hat{U}\hat{K}\psi(-t) = \hat{K}\psi(-t), \quad (3.391)$$

kde $\hat{K} = \hat{U}\hat{K}$ je tzv. **operátor inverze času**, $\psi'(t)$ je časově invertovaný stav $\psi(t)$.

Předpokládejme, že libovolný operátor $\hat{\Omega}$ lze vyjádřit ve tvaru

$$\hat{\Omega} = \hat{\Omega}_r + i\hat{\Omega}_i, \quad (3.392)$$

kde $\hat{\Omega}_r$ a $\hat{\Omega}_i$ jsou reálné operátory. Zřejmě platí

$$\hat{K}(\hat{\Omega})\hat{K}^{-1} = \hat{K}(\hat{\Omega}_r + i\hat{\Omega}_i)\hat{K}^{-1} = \hat{K}\hat{\Omega}_r\hat{K}^{-1} + \hat{K}i\hat{\Omega}_i\hat{K}^{-1} = \hat{\Omega}_r - i\hat{\Omega}_i = \hat{\Omega}^*. \quad (3.393)$$

Prozkoumejme nyní vliv působení operátoru časové inverze na různé fyzikální veličiny:

$$\begin{aligned}\hat{K}\hat{\mathbf{r}}K^{-1} &= \hat{\mathbf{r}}^* = \mathbf{r}, \\ \hat{K}\hat{\mathbf{p}}K^{-1} &= \hat{K}(-i\hbar\nabla)K^{-1} = (-i\hbar\nabla)^* = i\hbar\nabla = -\hat{\mathbf{p}}, \\ \hat{K}\hat{\mathbf{J}}K^{-1} &= \hat{K}(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})K^{-1} = (\hat{\mathbf{r}}\times\hat{K}\hat{\mathbf{p}}K^{-1}) = \hat{\mathbf{r}}\times(-\hat{\mathbf{p}}) = -(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\mathbf{J}}.\end{aligned}\tag{3.394}$$

Požadujeme přirozeně, aby poslední relace platila obecně pro všechny typy impulsmomentu, tedy též

$$\hat{K}\hat{\mathbf{S}}K^{-1} = -\hat{\mathbf{S}}.\tag{3.395}$$

Ve standardní bázi (3.162) je pouze složka σ_y ryze imaginární a máme

$$\begin{aligned}\hat{K}\hat{s}_x\hat{K}^{-1} &= \hat{s}_x, \\ \hat{K}\hat{s}_y\hat{K}^{-1} &= -\hat{s}_y, \\ \hat{K}\hat{s}_z\hat{K}^{-1} &= \hat{s}_z.\end{aligned}\tag{3.396}$$

Aby byla splněna rovnice (3.395), musí mít unitární transformace \hat{U} tyto vlastnosti:

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{s}_x\hat{U}^{-1} &= -\hat{s}_x, \\ \hat{U}\hat{s}_y\hat{U}^{-1} &= \hat{s}_y, \\ \hat{U}\hat{s}_z\hat{U}^{-1} &= -\hat{s}_z.\end{aligned}\tag{3.397}$$

Transformace (3.395) představuje obecně rotaci v prostoru spinových funkcí o úhel π kolem osy y . Příslušný rotační operátor \hat{R}_s má ve shodě s (3.384) tvar

$$\hat{R}_s = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y\right).\tag{3.398}$$

Provedeme-li transformaci $t \rightarrow -t$ v časové Schrödingerově rovnici (3.381) a následně ještě zapůsobíme zleva operátorem \hat{K} , dostáváme s přihlédnutím k (3.391) systém rovnic

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi'(t) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t), \\ \hat{K}\hat{H}\hat{K}^{-1}\psi'(t) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t),\end{aligned}\tag{ 3.399 }$$

ze kterého vyplývá, že nutnou a postačující podmínkou pro invarianci časově nezávislého hamiltoniánu vůči inverzi času je požadavek

$$\hat{K}\hat{H}\hat{K}^{-1} = \hat{H}\tag{ 3.400 }$$

neboli

$$[\hat{K}, \hat{H}] = 0.\tag{ 3.401 }$$

Tato podmínka je splněna pro systém v libovolném elektrickém poli, avšak za nepřítomnosti vnějšího magnetického pole \mathbf{B} .

Heisenbergova rovnice

Nechť libovolný N -částicový systém je popsán normovanou vlnovou funkcí $\Psi = \Psi(\mathbf{x}, t)$, kde $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ představuje soubor spinprostorových souřadnic všech částic. Provedeme-li v čase t sérii měření veličiny Ω reprezentované operátorem $\hat{\Omega}$, získáme hodnoty $\omega_1, \omega_2, \dots$. Střední hodnota veličiny Ω

$$\langle \hat{\Omega}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{\Omega} | \Psi(t) \rangle.\tag{ 3.402 }$$

Provedeme-li sérii podobných měření v čase $t + \Delta t$, dostaneme obecně jiné hodnoty $\omega'_1, \omega'_2, \dots$, přičemž

$$\langle \hat{\Omega}(t + \Delta t) \rangle = \langle \Psi(t + \Delta t) | \hat{\Omega} | \Psi(t + \Delta t) \rangle. \quad (3.403)$$

Pro časovou změnu střední hodnoty

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi(t + \Delta t) \rangle - \langle \Psi(t) \rangle}{\Delta t} \quad (3.404)$$

vypočteme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| \hat{\Omega} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \right\rangle \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (3.405)$$

Dosadíme-li za $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ z časové Schrödingerovy rovnice (3.381),

dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \middle| \hat{\Omega} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \right\rangle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi. \quad (3.406)$$

Vzhledem k hermiticitě hamiltoniánu můžeme psát

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \middle| \hat{\Omega} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \right\rangle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{\Omega} - \hat{\Omega} \hat{H} | \Psi \rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{\Omega}] | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.407)$$

takže

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{\Omega}] | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}] \right\rangle. \quad (3.408)$$

Časová derivace střední hodnoty operátoru je tedy střední hodnotou veličiny reprezentované tzv. **operátorem časové derivace** pozorovatelné veličiny $\hat{\Omega}$:

$$\dot{\hat{\Omega}} = \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}], \quad (3.409)$$

neboli

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \dot{\hat{\Omega}} \rangle = \langle \Psi | \dot{\hat{\Omega}} | \Psi \rangle. \quad (3.410)$$

Nezávisí-li $\hat{\Omega}$ explicitně na čase, dostáváme z (3.409) důležitý vztah

$$\dot{\hat{\Omega}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}], \quad (3.411)$$

který se nazývá **Heisenbergova rovnice** a její fyzikální obsah je totožný s obsahem Schrödingerovy rovnice.

Integrály pohybu a zákony zachování

Nezávisí-li hamiltonián systému ani generátor transformace explicitně na čase, pak z Heisenbergovy rovnice plyne $\frac{d}{dt} \langle \hat{G} \rangle = 0$ a příslušnou pozorovatelnou veličinu $\hat{\Omega}$ nazýváme **integrálem pohybu**. Podle (3.408) je to taková fyzikální veličina, jejíž operátor $\hat{\Omega}$ nezávisí explicitně na čase

$$\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} = 0 \quad (3.412)$$

a komutuje s hamiltoniánem

$$[\hat{H}, \hat{\Omega}] = 0. \quad (3.413)$$

Jak víme, dva komutující operátory mají společný systém vlastních vektorů. Je-li např. ψ vlastním vektorem \hat{H} s vlastní hodnotou E :

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3.414)$$

pak $\hat{\Omega}\psi$ je rovněž vlastním vektorem \hat{H} s touž vlastní hodnotou

$$\hat{H}(\hat{\Omega}\psi) = \hat{\Omega}(\hat{H}\psi) = \hat{\Omega}E\psi = E(\hat{\Omega}\psi). \quad (3.415)$$

Integrály pohybu tak závisí na kvantových číslech, která se v čase nemění a lze je tedy užít k označení odpovídajících stacionárních stavů.

Namísto časové Schrödingerovy rovnice můžeme řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \quad (3.416)$$

Její obecné řešení je možno psát ve tvaru

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{\frac{E_n t}{i\hbar}}, \quad (3.417)$$

kde c_n jsou rozvojové koeficienty. 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 $\psi_n(x)$

$$p_n = |c_n|^2, \quad (3.418)$$

jakož i kvantověmechanické střední hodnoty

$$\begin{aligned}\langle \hat{\Omega} \rangle &= \sum_n p_n g_n, \\ \langle \hat{H} \rangle &= \sum_n p_n E_n,\end{aligned}\tag{3.419}$$

jsou časově nezávislé.

Závěrem si provedme přehledný souhrn vybraných zákonů zachování coby důsledků různých symetrií přírody.

1) Homogenita prostoru

Homogenitou prostoru rozumíme translační invarianci uzavřeného fyzikálního systému. Ukázali jsme, že translační invariance systému, resp. jeho hamiltoniánu souvisí se zachováním celkového impulsu:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0,\tag{3.420}$$

který je proto integrálem pohybu.

2) Izotropie prostoru

Izotropie prostoru spočívá v ekvivalenci všech prostorových směrů. To znamená, že vlastnosti izolovaného systému se nemění při libovolné rotaci. Ukázali jsme, že rotační invariance souvisí se zákonem zachování celkového impulsmomentu:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}] = 0\tag{3.421}$$

který je tedy rovněž integrálem pohybu

3) Homogenita času

Homogenita času je projevem invariance uzavřeného systému vůči translaci v čase, tzn. explicitní nezávislosti hamiltoniánu systému na čase. Důsledkem této invariance je zachování energie:

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0, \quad (3.422)$$

která je opět integrálem pohybu.

4) *Prostorová inverze*

Jak již bylo řečeno dříve, je zákon zachování parity důsledkem symetrie prostoru vzhledem inverzi, tj. nezávislosti fyzikálních zákonů na tom, zda přírodní procesy popisujeme v levotočivém či pravotočivém souřadném systému. Hamiltonián libovolného uzavřeného systému, v němž působí elektromagnetické a silné jaderné interakce je invariantní vůči prostorové inverzi a tato invariance vede k zachování parity:

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0, \quad (3.423)$$

která je tudíž integrálem pohybu.

5) *Časová inverze*

Bylo ukázáno, že hamiltonián libovolného uzavřeného systému, v němž nepůsobí vnější magnetické pole, je invariantní vůči časové inverzi a tato invariance vede k zachování spinu:

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (3.424)$$

jenž je integrálem pohybu.

6) *Invariance vůči permutacím stejných částic*

Jak již dobře víme, záměna identických částic vede k zachování charakteru vlnové funkce. Invariance Hamiltoniánu systému stejných částic vůči libovolné permutaci těchto částic vede k zachování typu statistiky, jíž se uvažovaný systém řídí:

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (3.425)$$

Z (3.425) lze rovněž snadno odvodit vztahy

$$[\hat{H}, \hat{S}] = [\hat{H}, \hat{A}] = 0. \quad (3.426)$$

Permutace částic je tedy rovněž integrálem pohybu.

Štěpení energetických hladin při narušení symetrie

Doposud jsme se zabývali uzavřenými kvantově mechanickými systémy. Nalézá-li se však systém ve vnějším silovém poli, je jeho hamiltonián invariantní jednak vůči operacím grupy symetrie tohoto pole, a jednak vůči permutacím stejných částic.

Systém v kulově symetrickém poli vykazuje jak rotační invarianci, tak i invarianci vůči inverzi. U lineárních systémů, jako jsou např. dvouatomové molekuly, zůstává hamiltonián invariantní při rotaci kolem osy symetrie, takže se zachovává příslušná složka impulsmomentu.

V kvantové chemii se často předpokládá, že lze odseparovat pohyb elektronů a jader molekuly (Bornova – Oppenheimerova aproximace), takže elektrony se pohybují ve vnějším poli specifikovaném rovnovážnou konfigurací jader. Symetrie tohoto pole je určena bodovou grupou molekuly.

Např. spinová matice částice se spinem 1/2 vyhovuje rovnici (3.395) a zároveň splňuje vztah

$$\hat{K} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y\right)\hat{K} = -i\sigma_y\hat{K} \quad (3.427)$$

(operátory \hat{U} a \hat{R}_s se liší pouze fázovým faktorem, který nemá žádný fyzikální význam a lze jej tedy položit roven jedné).

Pro působení \hat{K} na elementární spinové funkce odtud plyne

$$\hat{K}\alpha = \beta, \quad \hat{K}\beta = \alpha, \quad (3.428)$$

neboli

$$\hat{K}|s, m_s\rangle = (-1)^{s-m_s} |s, -m_s\rangle. \quad (3.429)$$

Zobecnění na N -elektronový systém se provede snadno:

$$\hat{K} = \prod_{j=1}^N [-i\sigma_y(j)] \hat{k} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi S_y\right) \hat{k}, \quad (3.430)$$

kde S_y je y -ová složka operátoru celkového spinu. Pro působení \hat{K} na N -elektronové spinově adaptované funkce platí obdoba jednoelektronové rovnice (3.429):

$$\hat{K}|S, M_s\rangle = (-1)^{S-M_s} |S, -M_s\rangle. \quad (3.431)$$

jelikož $\hat{k}^2 = \hat{1}$ plyne z definice (3.430) důležitý vztah

$$K^2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{2N} = \left[\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right]^N = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^N = (-\mathbf{1})^N, \quad (3.432)$$

z něhož lze odvodit závěry o možné degeneraci energetických hladin ve stacionárních stavech systému.

Pro systém ve vnějším magnetickém poli \mathbf{B} obsahuje hamiltonián členy $\hat{\mathbf{L}}\mathbf{B}, \hat{\mathbf{S}}\mathbf{B}, \hat{\mathbf{J}}\mathbf{B}$ (viz (3.283)) v důsledku čehož \hat{K} a \hat{H} nekomutují.

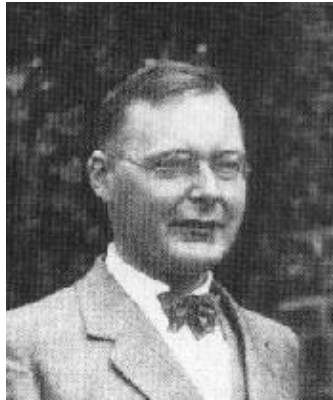
Popisuje-li funkce ψ stacionární stav s energií E , pak $\hat{K}\psi$ popisuje stav s touž energií. Liší-li se ψ a $\hat{K}\psi$ pouze fázovým faktorem, tj. je-li

$$\hat{K}\psi = c\psi, \quad (3.433)$$

kde $|c|=1$, jsou oba stavy totožné. Aplikujeme-li \hat{K} na obě strany (3.433), máme

$$\hat{K}^2\psi = \hat{K}c\psi = c^*c\psi = \psi. \quad (3.434)$$

Tato rovnost je však splněna pouze pro sudá N . Proto musí být v systému s poločíselným celkovým spinem (lichým počtem fermionů) stavy ψ a $\hat{K}\psi$ navzájem různé. V systému s poločíselným spinem, který je invariantní vůči inverzi času, jsou tedy všechny vlastní hodnoty hamiltoniánu alespoň dvakrát degenerovány.



Hendrik Anthony Kramers (1854 – 1952)

Tento závěr, známý jako **Kramersova věta**, souvisí velmi úzce se skutečností, že všechny částice s poločíselným spinem jsou popsány antisymetrickou vlnovou funkcí a jsou to tedy fermiony.

Příklad: Ve vnějším magnetickém poli orientovaném podél osy z platí dle (3.284)

$$\hat{H} = -\gamma\hbar B\hat{I}_z. \quad (3.435)$$

Z rovnice (3.411) okamžitě vidíme, že

$$\frac{d\hat{I}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{I}_x] = -\frac{i}{\hbar}\gamma\hbar B[\hat{I}_z, \hat{I}_x] = \gamma B\hat{I}_y \neq 0. \quad (3.436)$$

Za přítomnosti magnetického pole již tedy není jaderný spin integrálem pohybu. Obdobně se lze přesvědčit, že platí

$$\frac{d\hat{I}_y}{dt} = -\gamma B \hat{I}_x \neq 0 \quad (3.437)$$

a pouze

$$\frac{d\hat{I}_z}{dt} = 0. \quad (3.438)$$

Výsledek je možno zapsatve tvaru

$$\frac{d\hat{\mathbf{I}}}{dt} = \mathbf{I} \times \gamma \mathbf{B} \quad (3.439)$$

kde

$$\frac{d\hat{\mathbf{I}}}{dt} = \frac{d\hat{I}_x}{dt} \mathbf{e}_x + \frac{d\hat{I}_y}{dt} \mathbf{e}_y + \frac{d\hat{I}_z}{dt} \mathbf{e}_z. \quad (3.440)$$

Protože $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hbar \hat{\mathbf{I}}$, dostáváme

$$\frac{d\langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle}{dt} = \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle \times \gamma \mathbf{B} \quad (3.441)$$

ve shodě s klasickou pohybovou rovnicí pro gyromagnetickou částici ve vnějším magnetickém poli.

Princip korespondence

Ehrenfestovy rovnice

Operátor časové derivace (3.409) můžeme porovnat s **Poissonovou rovnicí klasické mechaniky**

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\}, \quad (3.442)$$

kde u je klasická veličina, H je Hamiltonova funkce,

$$\{u, v\} = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k} \frac{\partial u}{\partial p_k} \right) \quad (3.443)$$

je tzv. **Poissonova závorka** a q_k a p_k jsou zobecněné souřadnice a impulsy.



Siméon Denis Poisson (1781 – 1840)

Odtud je vidět, že klasické Poissonově závorce odpovídá v kvantové mechanice komutátor odpovídajících operátorů dělený $i\hbar$

$$\{u, v\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{u}, \hat{v}]. \quad (3.444)$$

Vzhledem k tomu, že operátory souřadnice a impulsu nezávisí explicitně na čase, budou operátory časové derivace pro tyto veličiny mít tvar

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}], \\ \hat{\mathbf{p}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}].\end{aligned}\tag{3.445}$$

Tyto operátorové rovnice jsou analogiemi Hamiltonových rovnic klasické mechaniky

$$\begin{aligned}\dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k} = \{q_k, H\}, \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \{p_k, H\}.\end{aligned}\tag{3.446}$$

Předpokládejme hamiltonián v obvyklém tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(x, y, z, t).\tag{3.447}$$

Z první rovnice (3.445) dostaneme

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}).\tag{3.448}$$

Použitím komutační relace (3.71)

$$\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\tag{3.449}$$

na pravé straně rovnice (3.448) postupně dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}} &= \frac{1}{2mi\hbar} ((i\hbar + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - i\hbar)) = \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} (i\hbar\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}i\hbar) = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}.\end{aligned}\tag{3.450}$$

Souvislost mezi operátory rychlosti a impulsu je tedy v kvantové mechanice stejná, jako mezi rychlostí a impulsem v mechanice klasické.



Paul Ehrenfest (1880 – 1933)

Podobně můžeme postupovat i v případě druhé rovnice (3.445). Dosazením za hamiltonián obdržíme

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{p}}\hat{V} + \hat{V}\hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar\nabla\hat{V} - i\hbar\hat{V}\nabla + i\hbar\hat{V}\nabla) = -\nabla\hat{V} = \hat{\mathbf{F}}, \quad (3.451)$$

kde $\hat{\mathbf{F}} = -\text{grad } V$ je tzv. **operátor síly**. Analogie s obyčejnou silou z klasické mechaniky, je více než zřejmá. Rovnice (3.451) proto představuje kvantový protějšek klasického Newtonova zákona. Kvantověmechanickým vystředováním rovnic (3.450) a (3.451) obdržíme **Ehrenfestovy rovnice**:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle}{dt} &= \langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{m}, \\ \frac{d\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{dt} &= \langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle-\nabla V\rangle = \langle\hat{\mathbf{F}}\rangle. \end{aligned} \quad (3.452)$$

Pro časové derivace kvantověmechanických středních hodnot operátorů souřadnice a impulsu platí tedy obdobné vztahy, jako v klasické fyzice.

Postupným použitím Ehrenfestových rovnic dále dostaneme

$$\frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{d \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt} = \frac{d \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt m} = \frac{\langle -\nabla V \rangle}{m} = \frac{\langle \hat{\mathbf{F}} \rangle}{m}, \quad (3.453)$$

neboli

$$m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle, \quad (3.454)$$

což je další kvantověmechanická obdoba 2. Newtonova zákona. Omezíme-li se nyní pro jednoduchost na jednorozměrný případ a uvážíme-li, že $\hat{x} = x$, $\hat{F}(x) = F(x)$, můžeme provést Taylorův rozvoj síly v rovnici (3.454) v okolí hodnoty $\langle x \rangle$

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \left. \frac{dF(x)}{dx} \right|_{x=\langle x \rangle} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 F(x)}{dx^2} \right|_{x=\langle x \rangle} (\Delta x)^2 + \dots \quad (3.455)$$

$$\text{kde } \Delta x = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}.$$

Druhý člen na pravé straně této rovnice je roven nule a členy vyšších řádů lze obvykle zanedbat. Z rovnic (3.454) a (3.455) tak dostáváme Newtonův zákon v obvyklé podobě známé z klasické mechaniky

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x), \quad (3.456)$$

kde $x = \langle x \rangle$.

Abychom mohli použít klasický popis a reprezentovat stavy systému body ve fázovém prostoru, je nutné, aby kvantověmechanické neurčitosti Δx či Δp objevující se v rovnicích typu (3.455) byly malé.

Zatímco Schrödingerova rovnice je lineární rovnicí pro ψ a platí pro ni princip superpozice, Newtonova pohybová rovnice pro $\langle x \rangle$ není obecně lineární. Lineární kvantová mechanika proto v sobě zahrnuje i nelineární mechaniku klasickou.

Střední hodnoty časově nezávislých operátorů, včetně střední hodnoty souřadnice $\langle \hat{x} \rangle$, nezávisí pro stacionární stavy na čase. Odtud vyplývá, že pohyb popsáný klasickou mechanikou s časově proměnnou hodnotou souřadnic nelze získat limitním přechodem ze stacionárních stavů kvantové mechaniky. Tento limitní přechod lze provést pouze pro nestacionární stavy.

Hamiltonova – Jacobiho rovnice



Carl Gustav Jacob Jacobi (1804 – 1851)

Vlnovou funkci částice (3.9) zobecníme na tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{is(\mathbf{r}, t)}{\hbar}}, \quad (3.457)$$

kde komplexní funkce $s(\mathbf{r}, t) = s_1 + is_2$.

Časovou Schrödingerovu rovnici s potenciální energií V vynásobíme zleva ψ^* a provedeme integraci přes souřadnice \mathbf{r} , přičemž využijeme hermicity operátoru impulsu. Pro jednoduchost se při tom opět omezíme na jednorozměrný případ:

$$i\hbar \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx = \frac{1}{2m} \int \left| -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|^2 dx + \int V |\psi|^2 dx. \quad (3.458)$$

Po dosazení vztahu (3.457) dostaneme

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial s_1}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + i \int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_1}{\partial x} \right|^2 e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \\ + \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|^2 e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \int V e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = 0. \end{aligned} \quad (3.459)$$

Druhý integrál v (3.459) je roven nule

$$\int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 dx = 0 \quad (3.460)$$

Dále budeme předpokládat, že hustota pravděpodobnosti

$$|\psi|^2 = e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} \quad (3.461)$$

je blízka nule všude, kromě bodu $x = \langle x \rangle$, kde nabývá svého maxima a kde platí

$$\left. \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|_{x=\langle x \rangle} = 0. \quad (3.462)$$

Nahradíme-li hustotu pravděpodobnosti δ - funkcí

$$|\psi|^2 = \delta(x - \langle x \rangle) \quad (3.463)$$

a použijeme-li předpoklad (3.462), z rovnic (3.459), (3.460) dostaneme

$$\frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial x} \right)^2 + V(\langle x \rangle, t) = 0, \quad (3.464)$$

což je kvantověmechanický ekvivalent Hamilton – Jacobiho rovnice klasické mechaniky, kde funkce s_1 hraje úlohu klasické akce S . Ze vztahu (3.461) vidíme, že nahrazení $|\psi|^2 \rightarrow \delta(x - \langle x \rangle)$ odpovídá provedení limity $\hbar \rightarrow 0$. To vyjadřuje tzv. **princip korespondence** podle něhož výsledky kvantové mechaniky přecházejí na výsledky klasické mechaniky pro $\hbar \rightarrow 0$ nebo v případě velkých kvantových čísel.

Můžeme to jednoduše ukázat tak, že vlnovou funkci (3.457) dosadíme do časové Schrödingerovy rovnice (3.381) a máme

$$\frac{\partial s(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial s(x, t)}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 s(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.465)$$

Předpokládáme-li $\hbar \rightarrow 0$, přechází tato rovnice opět v Hamilton – Jacobiho rovnici.

Viriálový teorém

Nechť $\hat{\Omega}$ je libovolný hermitovský operátor, který je funkcí souřadnic a impulsů částic systému. Uvažujme stacionární stav Ψ ($\partial \hat{H} / \partial t = 0$), který je vlastním vektorem \hat{H} , tj.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (3.466)$$

Z (3.410) a (3.411) vypývá

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{\Omega} - \hat{\Omega} \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \left[E \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle E \right] = 0. \quad (3.467)$$

Tato rovnost říká, že střední hodnoty časově nezávislých operátorů ve stacionárních stavech nezávisí na čase a označují se jako tzv.

hyperviriálový teorém.

Prozkoumejme nyní případ, kdy

$$\hat{\Omega} = \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}, \quad (3.468)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}),$$

kde součin $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}$ se nazývá **virial**.

Časovou derivací viriálu s uvažováním (3.467) dostáváme

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \left(\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{r}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} \right) = 0. \quad (3.469)$$

Dosažením Ehrenfestových teorémů do časové derivace viriálu (3.469) dostáváme

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} - \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right) = 0. \quad (3.470)$$

Pro N -částicové systémy můžeme vztahy (3.469) a (3.470) snadno zobecnit:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_i = \sum_{i=1}^N \left(\frac{d\hat{\mathbf{r}}_i}{dt} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{d\hat{\mathbf{p}}_i}{dt} \right) = 0, \quad (3.471)$$

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{m} - \hat{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = 0. \quad (3.472)$$

Podle Eulerova teorému, je-li $f(r_1, \dots, r_n)$ homogenní funkcí stupně s , potom

$$\sum_{i=1}^n r_i \frac{\partial f}{\partial r_i} = s f(r_1, \dots, r_n). \quad (3.473)$$

Nechť

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = R_{10}(\mathbf{r}) Y_{00} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} e^{-Z \frac{r}{a_0}} \quad (3.474)$$

je normovaná funkce, která je řešením pro atom vodíku s potenciální energií

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (3.475)$$

Z (3.475) vidíme, že potenciální energie $V(\mathbf{r})$ vyhovuje rovnici

$$\hat{V}(a\mathbf{r}) = a^{-1} \hat{V}(\mathbf{r}) \quad (3.476)$$

a je tedy homogenní funkcí stupně $s = -1$.

Podle (3.473) tedy platí

$$\sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \hat{V}}{\partial \mathbf{r}_i} = s \hat{V}. \quad (3.477)$$

První člen (3.472) je dvojnásobek kinetické energie elektronů, druhý člen vyjádříme pomocí Eulerova teorému (3.477). Pro každý z elektronů tak dostaneme

$$2\langle \hat{T} \rangle = \langle \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \hat{V}(\mathbf{r}) \rangle = s \langle \hat{V} \rangle, \quad (3.478)$$

což je kvantověmechanická obdoba tzv. **virialového teorému** známého i z klasické mechaniky.

Specielně pro případ coulombického pole ($s = -1$) máme

$$2\langle\hat{T}\rangle = -\langle\hat{V}\rangle. \quad (3.479)$$

Dle definice platí

$$E_n = \langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle, \quad (3.480)$$

takže máme

$$\begin{aligned} \langle\hat{T}\rangle &= -E_n = \frac{Z^2}{n^2}, \\ \langle\hat{V}\rangle &= 2E_n = -\frac{2Z^2}{n^2}. \end{aligned} \quad (3.481)$$

Energii atomu vodíku můžeme přibližně vyjádřit jako střední hodnotu hamiltoniánu

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \quad (3.482)$$

Pro střední hodnoty jednočásticových operátorů \hat{H} ($n = 1$) tak platí

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle &= Z^2, \\ \left\langle -\frac{2e^2}{r} \right\rangle &= -2Z^2. \end{aligned} \quad (3.483)$$

Např. střední hodnota kinetické a interakční energie jednoelektronového systému s jádrem v atomu H tak vychází

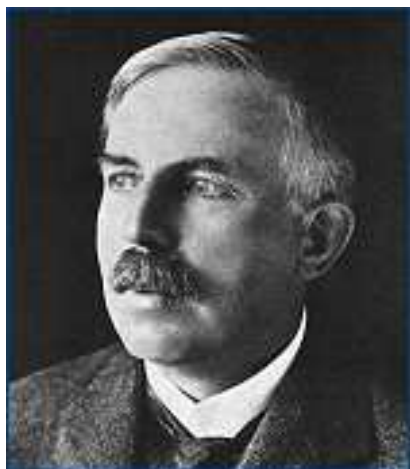
$$W_{k+ej}[Z] = \left(\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \left\langle -\frac{2e^2}{r} \right\rangle \right) = Z^2 - 2Z^2 [\text{Ry}]. \quad (3.484)$$

Protože v atomu vodíku je $Z = 1$, dostáváme dosazením do (3.484) energii

$$W_{k+ej} [Z] = -Z^2 = -1 \text{ Ry} = -13,6 \text{ eV} .$$

Atomové jádro

Základní údaje



Ernst Rutherford (1871 – 1937)



James Chadwick (1891 – 1974)

Tím, že protony a neutrony na sebe působí nejen elektromagneticky, ale i „silně“, se zásadně odlišují od elektronů, které zákonům silné interakce nepodléhají.

Proton můžeme pokládat za částici stabilní, neboť je známa dolní hranice jeho střední doby života, která je 10^{33} let, což je doba přesahující o mnoho řádů stáří vesmíru. Naproti tomu volný neutron nelze považovat za stabilní, neboť jeho střední doba života je pouhých 886 s. Rozdíl klidových hmotností neutronu a protonu, umožňuje neutronu, aby se rozpadnul na proton, elektron a antineutrino (viz tabulku elementárních částic). Neutrony silně vázané v atomových jádrech se nerozpadají, pokud jsou vázány slaběji, k jejich rozpadu může dojít. Základní parametry charakterizující proton a neutron jsou experimentálně určeny s vysokými přesnostmi a jsou uvedeny v tabulce 3.4.

Hmotnosti protonu a neutronu lze určit velmi přesně z rozboru jaderných reakcí a jejich magnetické momenty lze měřit stejnými metodami jako magnetické momenty jader.

Tab. 3.4 – Nejdůležitější vlastnosti nukleonů

		proton	neutron
Hmotnost	kg	$1,6726231(10) \cdot 10^{-27}$	$1,6749547(87) \cdot 10^{-27}$
	u	1,007276470(11)	1,008 665 220(60)
Klidová energie v MeV		938,27231(28)	939,56563(28)
Střední doba života		$> 10^{33}$ let	886(1) s
Spin v h		1/2	1/2
Parita		+ 1	+ 1
Elektrický náboj v C		$1,60217733(49) \cdot 10^{-19}$	0
Poměr magnetického momentu k jadernému magnetonu μ_N		2,792 847 386(63)	-1,91304275(45)
Izospin T		1/2	1/2
Komponenta T_z izospinu		+1/2	-1/2

Vlastní struktura či složení atomového jádra se vystihuje třemi čísly: **Atomové číslo Z** , které se někdy nazývá protonovým číslem, má tři ekvivalentní významy. Zaprvé udává pořadové číslo prvku v periodické soustavě, za druhé počet elektronů v obalu neutrálního atomu a za třetí, což je zde důležité, počet protonů v jádře atomu příslušného prvku.

Neutronové číslo N je počet neutronů v atomovém jádře.

Hmotnostní číslo A nebo nukleonové číslo je počet nukleonů v jádře. Tato tři čísla nejsou nezávislá, neboť platí

$$A = Z + N . \quad (3.485)$$

Jádra, případně látky, které jsou tvořeny jim příslušnými atomy, se podle konkrétní struktury jader označují specifickými termíny. Potřeba těchto termínů vyplývá z toho, že přirozená látka tvořená jedním chemickým prvkem může být složena z atomů, jejichž jádra se liší počtem neutronů.

Proto se látka, která se skládá z atomů, jejichž jádra mají stejné Z , N , a tedy i A , nazývá **nuklidem**. Nuklid se označuje symbolem A_ZX , kde X je chemická značka prvku s atomovým číslem Z a hmotnostním číslem A . Někdy se atomové Číslo u tohoto symbolu vynechává, protože udává tutéž informaci jako symbol X . Značka pro nuklid se beze změny používá i pro příslušné jádro.

Pro látky tvořené jedním chemickým prvkem je důležité jejich izotopické složení. **Izotop** je jeden nuklid z množiny nuklidů, které mají stejné Z , ale různé N . Dobře známé jsou např. izotopy vodíku 1_1H , 2_1H , 3_1H , tj. vodík, deuterium a tritium. V jaderné fyzice se kromě toho často setkáváme s termínem **izobar**, což je nuklid z množiny nuklidů, jejichž jádra mají stejné A , ale různá Z . Pro $A = 3$ existují dva izobary 3_1H a 3_2He (tritium a tralpium). Méně často se používá termínu **izoton**, což je nuklid z množiny nuklidů, které mají stejný počet neutronů, tj. stejné N , ale různé Z . Pro $N = 2$ známe izotony 3_1H , 4_2He , 5_3Li , 6_4Be .

Někdy se můžeme setkat i s termínem **izomer**, což je látka tvořená nuklidem, jehož jádra se nacházejí poměrně dlouho ve stejném vzbuzeném stavu. Izomer se označuje doplněním symbolu nuklidů písmenem m . Např. ${}^{234m}_{91}Pa$.

Konečně **radionuklidem** nazýváme takový nuklid, jehož jádra jsou nestabilní a rozpadají se.

Atomová, neutronová a hmotnostní čísla Z , N a A mají značný význam pro stavbu atomových jader. To je patrné z tabulky 3.5, v které je uveden počet stabilních nuklidů tvořených specifickými typy jader charakterizovaných čísly Z a N . Jsou to předně jádra sudo-sudá, se sudým počtem protonů a sudým počtem neutronů, která se označují jako jádra S-S, dále jádra sudo-lichá, tj. S-L se sudým Z a lichým N , lichosudá či L-S s lichým Z a sudým N a lichosudá či L-L se Z i N lichým.

Tab. 3.5 - Rozdělení stabilních nuklidů podle sudosti a lichosti atomového a neutronového čísla

Z	N	Počet stabilních nuklidů
sudé	sudé	165
sudé	liché	55
liché	sudé	50
liché	liché	4

K ostatním významným veličinám charakterizujícím atomové jádro patří: hmotnost M , náboj Ze , poloměr či lépe střední poloměr R , spin I , parita P , magnetický moment μ , elektrický kvadrupólový moment eQ a izotopický spin T . U nestabilních jader ještě poločas rozpadu $T_{1/2}$.

Hmotnost a vazbová energie jádra

Hmotnost jádra udáváme zpravidla jako jeho klidovou hmotnost. Její velikost vyjadřujeme obvykle s pomocí atomové hmotností jednotky u , která je definována jako 1/12 hmotnosti atomu nuklidů $^{12}_6\text{C}$. Platí, že

$$u = 1,6605402(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg.} \quad (3.486)$$

Důvod pro její zavedení spočívá v tom, že změření poměru hmotností atomů je jako měření relativní mnohem přesnější než přímé měření hmotnosti atomu. To je patrné i z tabulky 3.4, kde rozdíl v přesnosti hmotnosti protonu měřené přímo a relativně je větší než dva řády. Atomová hmotnostní jednotka u odpovídá podle zákona ekvivalence klidové energii uc^2 , která se vyjadřuje v jaderné fyzice v MeV:

$$uc^2 = 931,494\ 32(28) \text{ MeV.} \quad (3.487)$$

Hmotnost atomového jádra pro daný nuklid A_ZX označíme jako $M(A, Z)$. Tato hmotnost souvisí s hmotností atomu $m(^A_ZX)$ vztahem

$$m\left({}_Z^A X\right) = M(A, Z) + Zm_e - \frac{|W_a(A, Z)|}{c^2}, \quad (3.488)$$

kde $W_a(A, Z)$ je vazbová energie atomu a m_e hmotnost elektronu. První člen na pravé straně (3.488) je podstatně větší než druhé dva členy. Pro neveliká Z můžeme v (3.488) často poslední člen zanedbat. Vzhledem k tomu, že atomová jádra s $A > 1$ jsou vázanými systémy, je účelné zavést pojem **hmotnostního úbytku** $B(A, Z)$, což je rozdíl mezi klidovými hmotnostmi volných protonů a neutronů, z nichž je jádro vytvořeno a skutečnou hmotností $M(A, Z)$. Tedy veličina

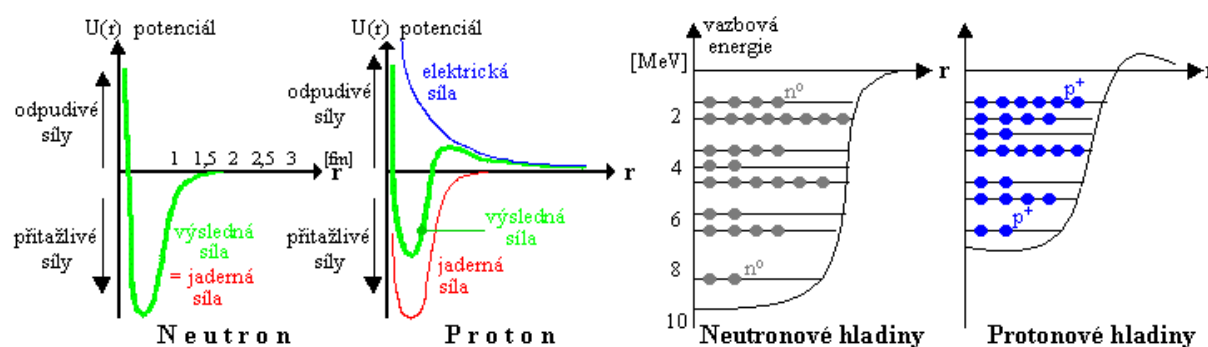
$$B(A, Z) = Zm_p + Nm_n - M(A, Z), \quad N = A - Z, \quad (3.489)$$

charakterizuje, jak silně jsou nukleony v jádře vázány. Energii, která se uvolní při vytvoření jádra z jednotlivých nukleonů, nazýváme **vazbovou energií atomového jádra**. Tato energie je podle zákona ekvivalence rovna

$$W(A, Z) = c^2 B(A, Z) \quad (3.490)$$

a je zřejmě definována jako kladná veličina.

Obr. 3.17



Vedle vazbové energie zavádíme ještě pojem **separační energie**, což je energie potřebná k oddělení určité částice nebo části jádra od daného jádra. Např. pro oddělení částice α , tj. jádra ${}_2^4\text{He}$ z daného jádra o hmotnosti $M(A, Z)$, je zapotřebí separační energie

$$S_{\alpha}(A, Z) = c^2 \{M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)\}. \quad (3.491)$$

Odtud ihned plyne, že nutnou podmínkou nestability jádra vůči rozpadu α je $S_{\alpha}(A, Z) < 0$. Lze se přesvědčit o tom, že pro známá jádra je $S_n(A, Z) > 0$ a $S_p(A, Z) > 0$, a to vylučuje možnost jejich neutronového a protonového rozpadu. Zdůrazněme, že rovnice typu (3.491) definuje separační energii pro základní stavy atomových jader a nikoliv pro stavy vzbuzené. U těch totiž může dojít k vyzáření protonů nebo neutronů, pokud je jejich excitační energie dostatečně vysoká. V současné době je známo asi 70 jader, která ve vysoce vzbuzeném stavu vysílají neutrony. Jsou to většinou jádra vznikající jako produkty štěpných reakcí. Je známo rovněž několik desítek jader, která v takovém vysoce vzbuzeném stavu vysílají protony. Jádra tohoto typu se produkují v jaderných reakcích při srážkách poměrně lehkých jader.

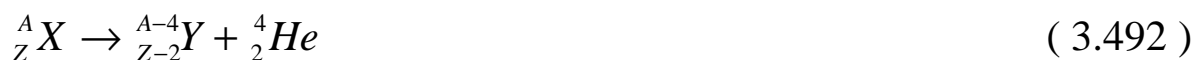
6. Radioaktivní procesy



Antonie Henri Bequerel (1852 – 1908)

a) Rozpad alfa

Spontánní rozpad atomového jádra, při kterém je vyzářena částice α se zapisuje schematicky jako



kde na levé straně je tzv. mateřské jádro X s daným počtem nukleonů a protonů, na pravé straně první člen reprezentuje tzv. dceřiné jádro a

druhý částici α Tento proces může probíhat pouze tehdy, je-li dovolen relativistickým zákonem zachování energie

$$E(A, Z) = E(A - 4, Z - 2) + E(4, 2), \quad (3.493)$$

a proto separační energie definovaná v rovnici (3.491) musí být záporná

$$S_\alpha(A, Z) = c^2 [M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)] < 0, \quad (3.494)$$

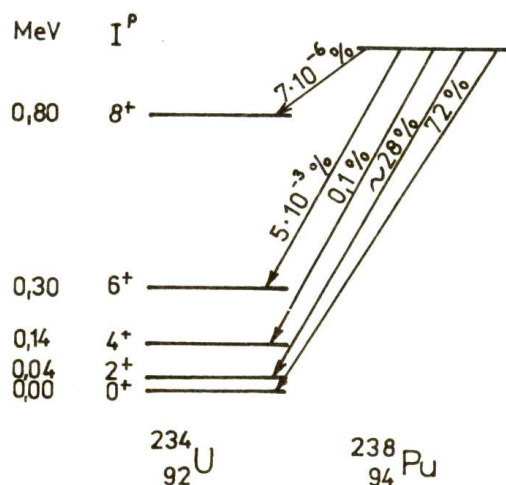
kde M jsou klidové hmotnosti zúčastněných jader.

Z experimentálně určených hmotností jader plyne, že jádra s hmotnostním číslem větším než 150 se jeví jako nestabilní vůči rozpadu α Jsou známy tři oblasti, v nichž dochází k vyzařování částic α jádru, tvoří je aktinidy, jádra v okolí izotopů olova a vzácné zeminy.

Energie E_k vyzářených částic α vykazuje jisté pravidelnosti. Pomalu a nikoliv monotónně roste s nukleonovým číslem A . U izotopů daného prvku klesá s rostoucím číslem A s výjimkou úzké oblasti u magického čísla $N = 126$.

Protože při rozpadu α se původní jádro rozpadá jen na dvě částice a poněvadž při tomto procesu je splněn zákon zachování energie (3.493) i zákon zachování hybnosti, jsou energie E obou vzniklých jader jednoznačně určeny. I z dalších dat je patrné, že energie částic α leží v intervalu (1 MeV, 10 MeV). Není ovšem nezbytné, aby dceřiné jádro vzniklo v základním stavu, a proto spektrum energií částic α není obecně reprezentováno jediným bodem, ale má *jemnou strukturu*, skládá se z několika ostrých hodnot energie.

Obr. 3.18



Na obr. 3.18 je energetický diagram i se schématem rozpadu α pro plutonium ${}^{238}_{94}\text{Pu}$. Je z něho vidět, že 72 % částic α má energii odpovídající přechodu ze základního stavu plutonia do základního stavu uranu ${}^{234}_{92}\text{U}$, přechody do vyšších energetických stavů uranu jsou méně pravděpodobné, jak ukazují větvící poměry uvedené na obrázku. Kinetická energie $E_k = E - m_\alpha c^2$ vyzářených částic α se dá měřit z jejich doletu R v daném prostředí. Mezi doletem R a kinetickou energií platí přibližný empirický vztah

$$R \approx k \cdot E_k^{3/2} \quad (3.495)$$

Výběrová pravidla pro rozpad α jsou velmi jednoduchá, protože částice α má spin nulový. Orbitální moment hybnosti l vyzářené částice α je omezen trojúhelníkovou nerovností

$$|I_i - I_f| \leq l \leq I_i + I_f, \quad (3.496)$$

kde I_i je spin mateřského jádra a I_f dceřiného jádra. Jestli parity výchozího jádra i a konečného jádra f jsou shodné, musí být parita l sudá, a jestli jsou opačné, musí být lichá ve shodě se zákonem zachování parity (viz str. 95).

Významnou charakteristikou rozpadu α jsou střední doby života τ

jader podléhajících tomuto rozpadu. Jsou sice pro daný typ nuklidu neměnné, avšak pro různá jádra leží v ohromném intervalu (10^{-7} s, 10^{25} s). Tabulka 3.6 uvádí několik ukázek. Poločas rozpadu $T_{1/2}$ a energie E_k částice α jsou v ní udány jen pro přechod ze základního stavu do základního.

Pro vztah mezi konstantou rozpadu λ a doletem R částice α je poměrně dlouho známo empirické pravidlo nalezené při studiu radioaktivních řad. Má tvar

$$\ln \lambda = A \ln R + B, \quad (3.497)$$

kde A , B jsou konstanty. Vzhledem k tomu, že známe empirický vztah mezi doletem R a energií, poskytuje relace (3.497) možnost odvodit empirickou relaci mezi energií vyzářené částice α a střední dobou života mateřského jádra.

Tab. 3.6 Příklady rozpadů α . E_k je kinetická energie vyzářovaných částic α

Jádro	Poločas rozpadu α [s]	E_k [MeV]	Větvicí poměr
^{212}Po	$3,04 \cdot 10^{-7}$	8,776	100 %
^{211}Po	0,52	7,434	99%
^{224}Ra	$3,14 \cdot 10^5$	5,681	95,1 %
^{241}Am	$1,48 \cdot 10^{10}$	5,532	0,34 %

Poněvadž přitažlivé síly mezi nukleony jsou krátkodosahové, je celková vazebná energie jádra přibližně úměrná jeho hmotovému číslu A , tj. počtu nukleonů v jádře. Odpudivé elektrostatické síly mezi protony však mají neomezený dosah a celková destruktivní energie v jádře je přibližně úměrná Z^2 . Jádra obsahující 210 nebo více nukleonů jsou tak velká, že krátkodosahové jaderné síly, jež drží tato jádra pohromadě, sotva stačí vyrovnat vzájemné odpuzování jejich protonů. Rozpad alfa nastává u těchto jader jako prostředek zvyšování jejich stability zmenšováním jejich velikosti.

Proč jsou však částice alfa emitovány vždy spíše než jednotlivé protony nebo jádra ^3_2He ? Odpověď vyplývá z veliké vazebné energie částice α . K úniku z jádra potřebuje částice kinetickou energii a hmota částice alfa je dostatečně menší než hmota nukleonů, z nichž se

skládá, aby zde taková energie byla k dispozici. Pro ilustraci můžeme ze známých hodnot každé částice a mateřských a dceřinných jader vypočítat kinetickou energii Q volňovanou při emisi různých částic těžkým jádrem. Tato energie je dána výrazem

$$Q = (m_i - m_f - m)c^2, \quad (3.498)$$

kde m_i je hmota původního jádra, m_f hmota konečného jádra a m hmota částice. Výsledkem je zjištění, že energeticky možná je *jedině* emise částice alfa; jiné druhy rozpadu by vyžadovaly dodání energie z vnějšího zdroje mimo jádro. Tak rozpad alfa ${}^{232}_{92}\text{U}$ je provázen uvolněním energie 5,4 MeV, jinak by bylo nutno nějak dodat 6,1 MeV z vnějšího zdroje, kdyby se měl emitovat proton, a 9,6 MeV v případě, že by se mělo emitovat jádro ${}^3_2\text{He}$. Pozorované energie rozpadu alfa jsou v souladu s odpovídajícími hodnotami předpovídanými na základě příslušných jaderných hmot.

Kinetická energie T_α emitované částice alfa není nikdy přesně rovna energii rozpadu Q , protože v důsledku zákona zachování hybnosti jádro při emisi částice alfa odskakuje s malou kinetickou energií. Snadno se ukáže, že jako důsledek zachování hybnosti a energie souvisí T_α s Q a s hmotovým číslem A původního jádra vztahem

$$T_\alpha \approx \frac{A-4}{A}Q. \quad (3.499)$$

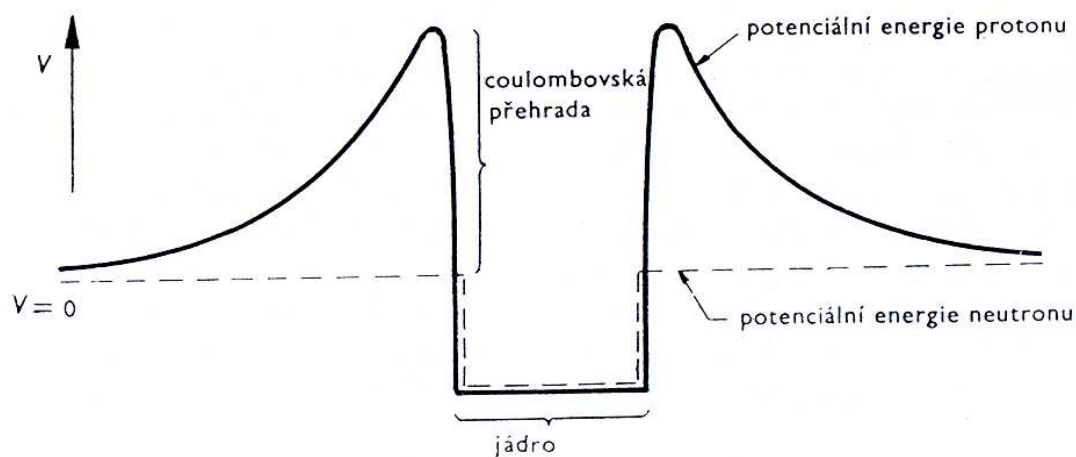
Hmotové číslo téměř všech zářičů alfa je vyšší než 210, a tak se většina rozpadové energie projevuje jako kinetická energie částice alfa. Například při rozpadu ${}^{222}_{86}\text{Rn}$ je $Q = 5,587$ MeV a $T_\alpha = 5,486$ MeV.

I když se těžké jádro v zásadě může zmenšit rozpadem alfa, zůstává zde problém, jak může ve skutečnosti částice alfa uniknout z jádra. Na obr. 3.19 je vynesena potenciální energie V částice alfa jako funkce vzdálenosti r od středu nějakého těžkého jádra. Výška potenciálové přehrady (potenciálového valu) je asi 25 MeV, což se rovná práci, kterou je třeba vykonat proti odpudivé elektrostatické síle

při přenesení částice alfa z nekonečna k jádru, těsně k hranici působnosti jeho přitažlivých sil. Můžeme tudíž částici alfa v takovém jádře uvažovat, jako by byla uvnitř krabice se stěnami, jejichž překonání vyžaduje energii 25 MeV. Částice alfa mají ale při rozpadu energie od 4 do 9 MeV v závislosti na daném konkrétním nuklidu - tzn. o 16 – 21 MeV méně, než je zapotřebí k úniku z jádra. Zatímco na základě klasických úvah je rozpad alfa nevysvětlitelný, poskytuje kvantová mechanika jednoduché vysvětlení. Teorie rozpadu alfa vyvinutá v roce 1928 Gamowem byla ve skutečnosti vítaným a zvláště překvapivým potvrzením kvantové mechaniky. Základní body této teorie jsou:

1. Částice alfa může samostatně existovat uvnitř těžkého jádra.
2. Taková částice se neustále pohybuje a je v jádře udržována potenciálovým valem, který ji obklopuje.
3. Existuje malá - ale nenulová - pravděpodobnost, že částice může projít překradou (i přes její výšku) pokaždé, když se s ní srazí.

Obr. 3.19



Potenciální energie protonu a neutronu v blízkosti jádra.

Pravděpodobnost rozpadu λ za jednotku času tak lze vyjádřit vztahem

$$\lambda = \nu P, \quad (3.500)$$

kde ν je počet nárazů částice alfa v jádře za vteřinu na potenciálovou

přehradu, která ji obklopuje, a P pravděpodobnost průchodu částice valem. Předpokládáme-li, že v libovolném okamžiku existuje v jádře jen jedna částice alfa jako taková a že se pohybuje kmitavým pohybem podél průměru jádra, je

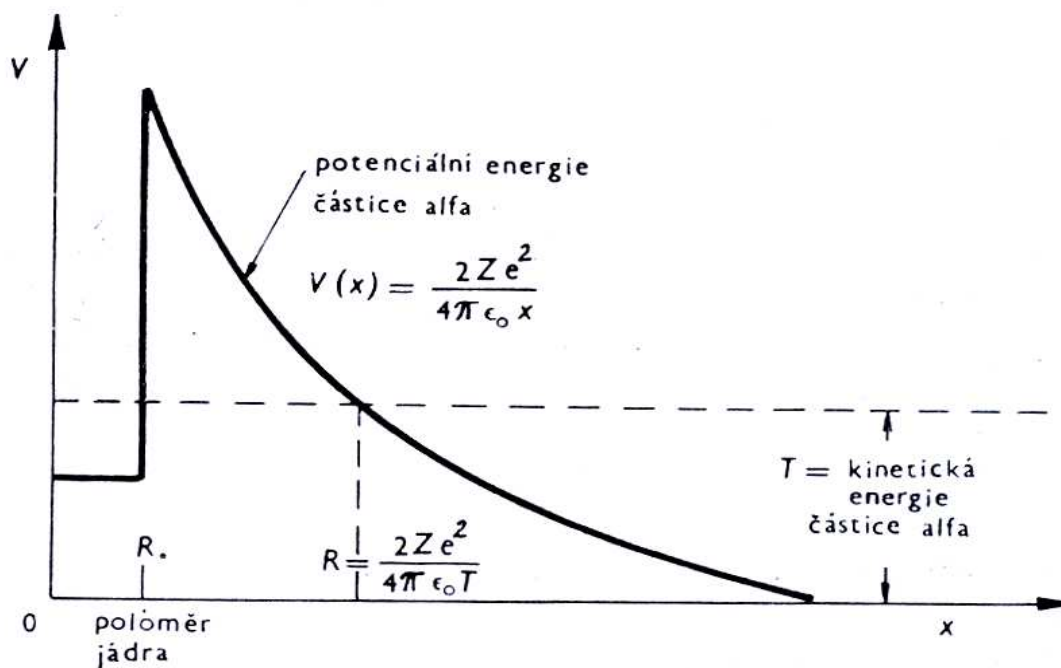
$$\nu = \frac{u}{2R}, \quad (3.501)$$

kde u je rychlost částice alfa v okamžiku, kdy opouští jádro, a R je poloměr jádra. Typické hodnoty u a R jsou přibližně $2 \cdot 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, resp. 10^{-14} m , takže

$$\nu \approx 10^{21} \text{ s}^{-1}. \quad (3.502)$$

Částice alfa naráží na stěny svého "vězení" 10^{21} krát za vteřinu, a přesto může čekat v průměru až 10^{10} let, než z některých jader unikne! Jelikož je $V > E$, předpovídá klasická fyzika pravděpodobnost průchodu $P = 0$.

Obr. 3.20



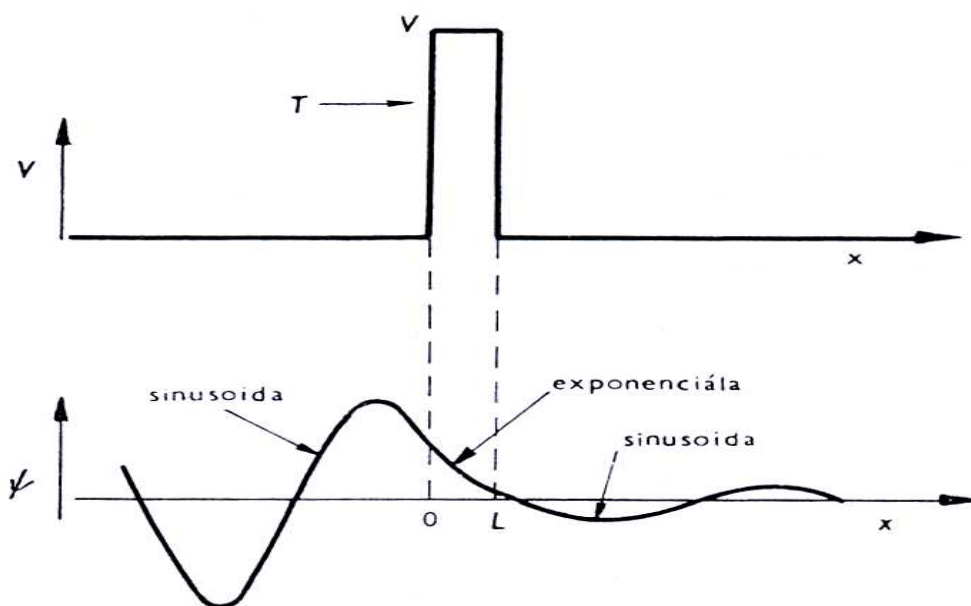
Potenciální energie částice alfa jako funkce její vzdálenosti od středu jádra.

V kvantové mechanice uvažujeme pohybující se částici alfa jako vlnu a výsledkem je malá, ale nenulová hodnota P . Tato překvapivá skutečnost dostala název **tunelový jev**.

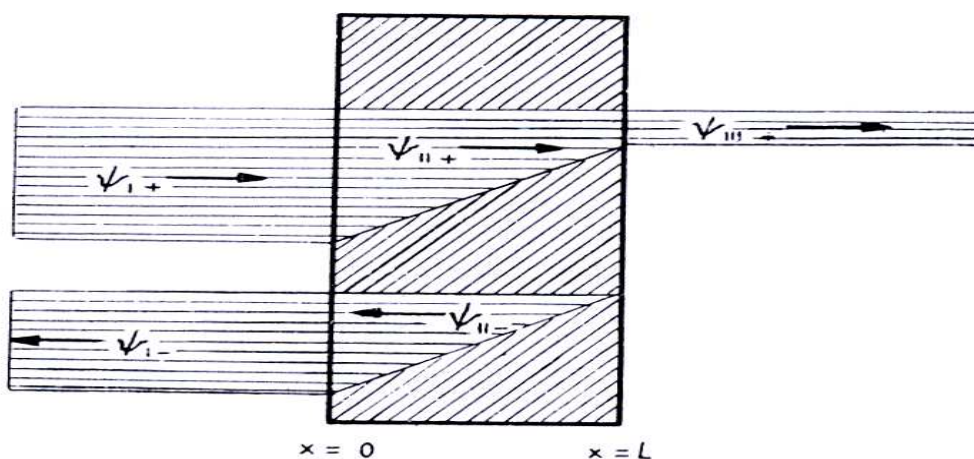
b) Tunelový jev

Uvažujme případ svazku částic s kinetickou energií T dopadající zleva na potenciálovou překradu o výšce V a šířce L jako na obr. 3.21.

Obr. 3.21



Svazek částic může „prosakovat“ konečnou překradou.



Schematická ilustrace průniku překradou.

Na obou stranách od překrady je $V = 0$, což znamená, že na částice tady nepůsobí žádné síly. V těchto oblastech Schrodingerova rovnice

pro částici zní

$$\frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} T \psi_I = 0, \quad (3.503)$$

a

$$\frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} T \psi_{III} = 0. \quad (3.504)$$



George Gamow (1904 – 1968)

Předpokládejme, že

$$\begin{aligned} \psi_I &= A \exp(iax) + B \exp(-iax), \\ \psi_{III} &= E \exp(iax) + F \exp(-iax) \end{aligned} \quad (3.505)$$

jsou řešení rovnice (3.503), resp. (3.504). Různé členy v těchto výrazech lze snadno interpretovat. Jak schematicky ukazuje obr. 3.21, je $A \exp(iax)$ vlna s amplitudou A , dopadající zleva na přehradu, tj.

$$\psi_{I+} = A \exp(iax). \quad (3.506)$$

Tato vlna odpovídá dopadajícímu svazku částic v tom smyslu, že $|\psi_{I+}|^2$ je jejich hustota pravděpodobnosti. Je-li u tzv. **grupová**

rychlost vlny, která odpovídá rychlosti částice, pak $|\psi_{I+}|^2 \cdot u$ je proud částic dopadajících na přehradu. V místě $x = 0$ dopadající vlna naráží na přehradu a částečně se odráží, takže

$$\psi_{I-} = B \exp(-iax) \quad (3.507)$$

představuje odraženou vlnu. Je tedy

$$\psi_I = \psi_{I+} + \psi_{I-} . \quad (3.508)$$

Na druhé straně do přehrady ($x > L$) se může vyskytovat jen vlna

$$\psi_{III+} = E \exp(iax) \quad (3.509)$$

šířící se ve směru $+x$, neboť podle předpokladu v oblasti III není nic, co by mohlo vlnu odrážet. Je tudíž

$$\psi_{III} = \psi_{III+} = E \exp(iax). \quad (3.510)$$

Dosazením ψ_I a ψ_{III} zpět do příslušných diferenciálních rovnic dostaneme

$$a = \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}} . \quad (3.511)$$

Je zřejmé, že pravděpodobnost průniku P částice přehradou je poměr

$$P = \frac{|\psi_{III}|^2}{|\psi_{I+}|^2} = \frac{EE^*}{AA^*} \quad (3.512)$$

mezi hustotou pravděpodobnosti výskytu procházejících a dopadajících částic.

Klasicky je $P = 0$, neboť klasická částice nemůže existovat uvnitř přehrady. Podívejme se, jaký je kvantověmechanický výsledek.

V oblasti II je Schrödingerova rovnice pro částici

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (T - V) \psi_{II} = 0. \quad (3.513)$$

Její řešení je

$$\psi_{II} = C \exp(-ibx) + D \exp(ibx), \quad (3.514)$$

kde

$$b = \sqrt{\frac{2m(T - V)}{\hbar^2}}. \quad (3.515)$$

Jelikož je $V > T$, je b imaginární a můžeme definovat nové vlnové číslo $b' \geq 0$ vztahem

$$b' = ib = \sqrt{\frac{2m(V - T)}{\hbar^2}}. \quad (3.516)$$

Máme tedy

$$\psi_{II} = C \exp(-b'x) + D \exp(b'x). \quad (3.517)$$

Člen

$$\psi_{II+} = C \exp(-b'x) \quad (3.518)$$

je exponenciálně klesající vlnová funkce, jež odpovídá neoscilujícímu vzruchu, který se šíří směrem doprava překradou. Uvnitř překrady se část vzruchu odrazí a

$$\psi_{II-} = D \exp(b'x) \quad (3.519)$$

je vlnová funkce, jež odpovídá odraženému vzruchu a exponenciálně

roste zprava doleva.

I když ψ_{II} nekmitá, a nepředstavuje tudíž pohybující se částici s kladnou kinetickou energií, není hustota pravděpodobnosti $|\psi_{II}|^2$ nula: existuje určitá pravděpodobnost výskytu částice v přehradě. Částice, která se neodrazí na druhém konci přehrady, zde vystupuje do oblasti III se stejnou kinetickou energií T , jakou měla původně, a její vlnová funkce bude ψ_{III} neboť částice pokračuje v nerušeném pohybu ve směru $+x$. V limitě nekonečně široké přehrady je $\psi_{III} = 0$, odkud plyne, že všechny dopadající částice se odrážejí. K odrazu však dochází *uvnitř* přehrady, nikoli na její levé krajní stěně, takže přehrada konečné tloušťky dovoluje průchod zlomku P počátečního svazku částic.

K výpočtu P musíme stanovit hraniční podmínky pro $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$.

Obr. 3.21 je schematickým znázorněním vlnové funkce v oblasti I, II a III, které nám může pomoci představit si hraniční podmínky. Jak jsme viděli v kap. 1, musí být jak ψ , tak její derivace všude spojitá. Podle obr. 3.21 tyto podmínky znamenají, že na každé stěně přehrady musí mít vlnové funkce vně i uvnitř nejenom stejnou hodnotu, ale i stejnou směrnici, takže se dokonale spojují. Na levé krajní stěně přehrady ($x = 0$) je tedy

$$\begin{aligned} \psi_I &= \psi_{II} , \\ \frac{\partial \psi_I}{\partial x} &= \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.520)$$

a na pravé krajní stěně ($x = L$)

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= \psi_{III} , \\ \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} &= \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x} , \end{aligned} \quad (3.521)$$

Dosazením $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ z (3.505), (3.517) a (3.510) do těchto vztahů dostaneme

$$\begin{aligned}
A + B &= C + D, \\
iaA - iaB &= -b'C + b'D, \\
C \exp(-b'L) + D \exp(b'L) &= E \exp(iaL), \\
-aC \exp(-b'L) + aD \exp(b'L) &= iaE \exp(iaL).
\end{aligned}
\tag{3.522}$$

Rovnice (3.522) lze snadno řešit. Dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{A}{E} &= \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4}i \left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(ia + b')L] + \\
&+ \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{4}i \left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(ia - b')L].
\end{aligned}
\tag{3.523}$$

Komplexně sdružená veličina, kterou potřebujeme k výpočtu pravděpodobnosti P je

$$\begin{aligned}
\frac{A^*}{E^*} &= \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{4}i \left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(-ia + b')L] + \\
&+ \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4}i \left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(-ia - b')L].
\end{aligned}
\tag{3.524}$$

Předpokládejme, že potenciálová překrada je vysoká vzhledem ke kinetické energii dopadající částice ($b' > a$) a že je rovněž dostatečně široká, aby ψ_{II} byla mezi $x = 0$ a $x = L$ hodně tlumena ($b' \gg 1$).

Můžeme pak aproximovat

$$\begin{aligned}
\left(\frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) &\approx \frac{b'}{a}, \\
\exp(b'L) &\gg \exp(-b'L).
\end{aligned}
\tag{3.525}$$

Vzorce (3.523) a (3.524) lze tedy aproximovat výrazy

$$\frac{A}{E} \approx \left(\frac{1}{2} + \frac{ib'}{4a} \right) \exp[(ia + b')L],$$

$$\frac{A^*}{E^*} \approx \left(\frac{1}{2} - \frac{ib'}{4a} \right) \exp[(-ia + b')L].$$
(3.526)

jejich vynásobením dostáváme

$$\frac{AA^*}{EE^*} = \left(\frac{1}{4} + \frac{b'^2}{16a^2} \right) \exp(2b'L),$$
(3.527)

takže pravděpodobnost průchodu je

$$P = \frac{EE^*}{AA^*} = \frac{16}{4 + \left(\frac{b'}{a} \right)^2} \exp(-2b'L).$$
(3.528)

Z definice a a b' plyne

$$\left(\frac{b'}{a} \right)^2 = \frac{V}{T} - 1,$$
(3.529)

je závislost koeficientu u exponenciely na T a V ve (3.528) zanedbatelná ve srovnání se závislostí exponenciely samé. Tento koeficient se navíc vždycky pohybuje zhruba mezi dvojkou a pětkou, takže můžeme přibližně psát

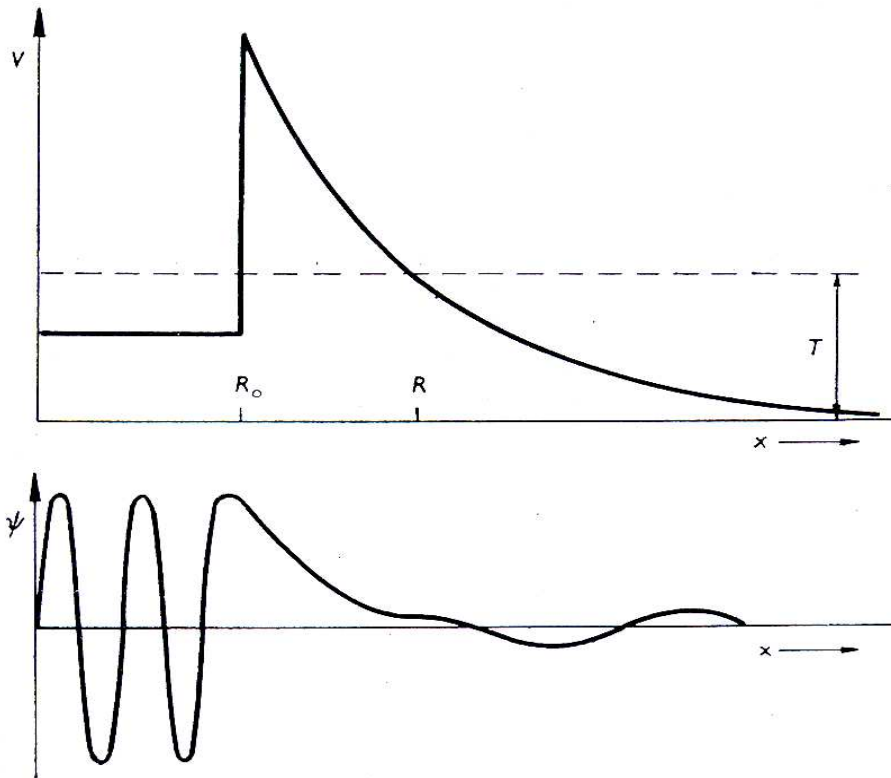
$$P \approx \exp(-2b'L),$$
(3.530)

neboli

$$\ln P \approx -2b'L,$$
(3.531)

je dobrou aproximací pravděpodobnosti průchodu.

Obr. 3.22



Rozpad alfa z hlediska vlnové mechaniky.

Vztah (3.531) byl odvozen pro pravoúhlou potenciálovou jámu, kdežto částice alfa uvnitř jádra naráží na potenciálový val $V(x)$ proměnné výšky. Vztah (3.531) musíme proto nahradit přesnějším vyjádřením

$$\ln P = -2 \int_0^L b'(x) dx = -2 \int_{R_0}^R b'(x) dx, \quad (3.532)$$

kde R_0 je poloměr jádra a R vzdálenost od jeho středu, v níž je $V = T$. Ve větší vzdálenosti než R je kinetická energie částice alfa kladná a částice se může volně pohybovat.

$$V(x) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} \quad (3.533)$$

je elektrostatičká potenciální energie částice alfa ve vzdálenosti x od středu jádra s nábojem Ze jádra ochuzeným o náboj $2e$ částice alfa. Máme tedy

$$b' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} - T \right)}, \quad (3.534)$$

a jelikož $T = V$ při $x = R$, je

$$b' = \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{R}{x} - 1 \right)^{1/2}. \quad (3.535)$$

Je tudíž

$$\begin{aligned} \ln P &= -2 \int_{R_0}^R b'(x) dx = -2 \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{R_0}^R \left(\frac{R}{x} - 1 \right)^{1/2} dx = \\ &= -2 \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} R \left[\arccos \left(\frac{R_0}{R} \right)^{1/2} - \left(\frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (3.536)$$

Jelikož je potenciálová přehrada poměrně široká, je $R \gg R_0$ a

$$\begin{aligned} \arccos \left(\frac{R_0}{R} \right)^{1/2} &\approx \frac{1}{2} \pi - \left(\frac{R_0}{R} \right)^{1/2}, \\ \left(1 - \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} &\approx 1. \end{aligned} \quad (3.537)$$

Výsledkem je

$$\ln P = -2 \left(\frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} R \left[\frac{1}{2} \pi - 2 \left(\frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \right]. \quad (3.538)$$

Dosazením z (3.534)

$$R = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T} \quad (3.539)$$

dostaneme

$$\ln P = \frac{4e}{\hbar} \left(\frac{m}{\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} (ZR_0)^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0} \left(\frac{m}{2} \right)^{1/2} ZT^{-1/2}. \quad (3.540)$$

Kde kinetická energie alfačástice T je vyjádřena v MeV, R_0 je ve fm (1fm = 10^{-15} m) a Z je atomové číslo jádra poté, co jej alfačástice opustila.

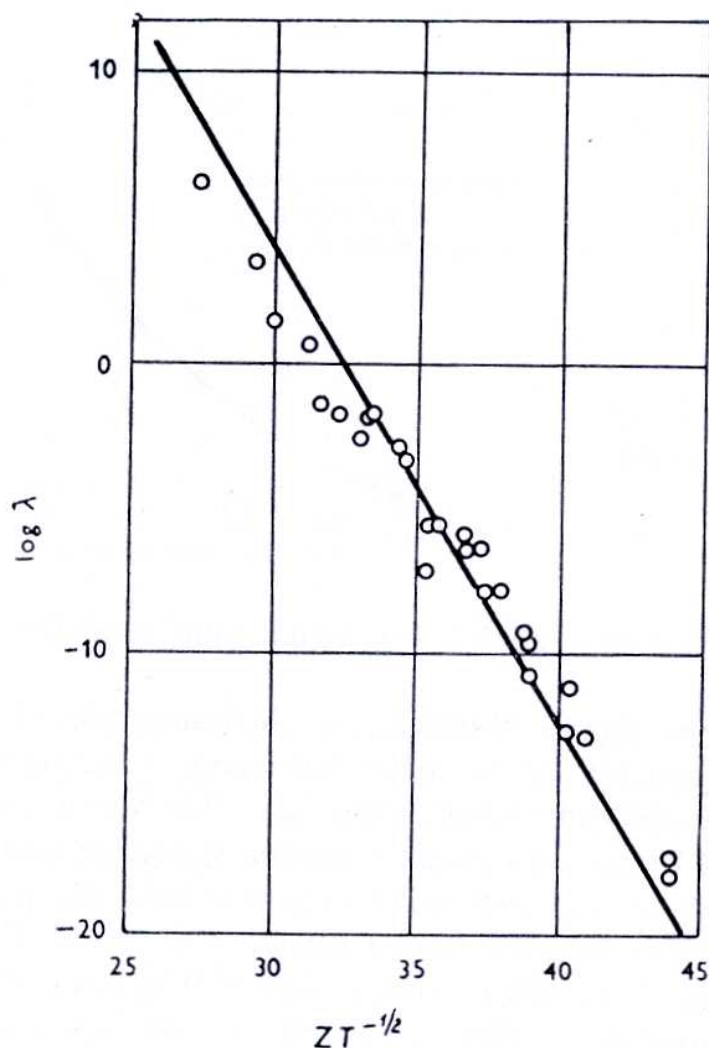
Pro rozpadovou konstantu λ , danou vtahem

$$\lambda = \nu P = \frac{u}{2R} P, \quad (3.541)$$

lze tedy psát

$$\ln \lambda = \ln \frac{u}{2R} + \frac{4e}{\hbar} \left(\frac{m}{\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} (ZR_0)^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0} \left(\frac{m}{2} \right)^{1/2} ZT^{-1/2}. \quad (3.542)$$

Na obr. 3.23 je vynesena závislost (3.542) pro řadu alfaradioaktivních nuklidů (přímka) ve srovnání s experimentálními daty (body).



Obr. 3.23. Experimentální ověření teorie rozpadu alfa.

Kvantověmechanický rozbor vyzařování částic alfa, který je v úplném souladu s experimentálními údaji, je významný ze dvou důvodů. Předně umožňuje pochopit velikou závislost poločasu rozpadu na energii rozpadu. Nejpomalejší rozpad má $^{232}_{90}\text{Th}$, jehož poločas je $1,3 \cdot 10^{10}$ let, a nejrychlejší rozpad $^{212}_{84}\text{Po}$ s poločasem $3,0 \cdot 10^{-7}$ s. Zatímco poločas rozpadu je u $^{232}_{90}\text{Th}$ 10^{24} krát větší než u $^{212}_{84}\text{Po}$, je energie rozpadu $^{232}_{90}\text{Th}$ (4,05 MeV) jen asi polovina hodnoty pro $^{212}_{84}\text{Po}$ (8,95 MeV) - to je chování předpovídané vztahem (3.542). Druhým významným přínosem teorie rozpadu alfa je vysvětlení tohoto jevu pomocí průniku potenciálového valu částic, která nemá dost energie, aby překradu překonala. V klasické fyzice k takovému průniku nemůže dojít: míč hozený proti Čínské zdi má klasicky

pravděpodobnost průchodu 0%. V kvantové mechanice není pravděpodobnost o mnoho větší než 0%, ale *není* identicky rovna 0.

c) Rozpad beta

Při výzkumu radioaktivity β se fyzika poprvé a bezprostředně seznámila s novým typem interakce – s interakcí slabou – která se výrazně liší od ostatních tří přírodních sil: interakce silné, elektromagnetické a gravitační. Klasický rozpad β , tj β^- probíhá podle schématu



Na levé straně je jádro s A nukleony a Z protony, ležící mimo linii stability vůči rozpadu β , na pravé straně máme jádro, které při rozpadu β^- vzniká. Má stejný počet nukleonů, ale protonové číslo je o jednotku větší ve srovnání s původním jádrem. Při rozpadu vzniká elektron e^- a elektronové antineutrino $\bar{\nu}$.

K rozpadu β může dojít jedině tehdy, probíhá-li v souladu s relativistickým zákonem zachování energie

$$E(A, Z) = E(A, Z + 1) + E_e + E_{\bar{\nu}} \quad (3.544)$$

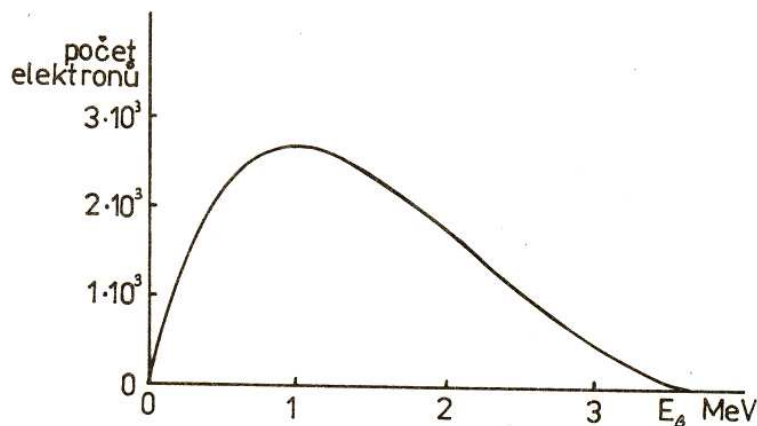
a proto separační energie

$$S_e(A, Z) = c^2 [M(A, Z + 1) + m_e + m_{\bar{\nu}} - M(A, Z)] \quad (3.545)$$

musí být záporná. Původně se relace (3.543) psala bez neutrina, neboť o jeho existenci se nevědělo. Pozorované spektrum vyzařovaných elektronů však neodpovídalo relativistickému zákonu zachování energie a hybnosti pro rozpad jádra na dvě částice.

V takovém případě bychom očekávali diskrétní spektrum energií elektronů. Experiment však dával zcela průkazně spojité spektrum energie elektronů od prakticky nulové kinetické energie elektronu, až do jeho maximální energie dovolené zákonem zachování.

Obr. 3.24

Spektrum kinetické energie E_β elektronů pro rozpad jádra $^{30}_{15}\text{P}$.

Na základě těchto experimentálních poznatků vyslovil Wolfgang Pauli v roce 1931 hypotézu, že rozpad β není rozpadem na dvě, alebrž tři částice, z nichž jedna je právě neutrino.

Pauli nejprve nazval novou částici neutron. Když však Enrico Fermi v roce 1932 dostal otázku, zda je to stejný neutron jako Chadwickův, odpověděl: „ne, Pauliho neutron je mnohem menší – je to takové neutrino“ (tj. „malý neutronek“). Slovo míněné původně jako žert se ujalo a tajemná částice získala úřední název. Fermi vydobyl neutrino novou vážnost v roce 1934, kdy vytvořil první teorii rozpadu β . Fermiho teorii získalo neutrino ve fyzice své pevné místo, avšak mnoho fyziků se smířilo s názorem, že je to pouhá berlička pro záchranu zákona zachování energie, kterou nikdy nikdo neuvidí. První výpočty totiž naznačovaly, že tyto částice mohou urazit v hmotném prostředí až desítky světelných let, aniž by s něčím zainteragovaly, což je pro lovce částic dosti nevábná perspektiva.

Na počátku 50. let se však dva američtí fyzikové Clyde Cowan a Fred Reines, kteří pracovali za války v Los Alamos, začali vážně zabývat myšlenkou detekovat neutrina vzniklá při pokusném jaderném výbuchu. Když se snažili vyvinout aparaturu, které by přežila explozi, uvědomili si, že neutrina vznikají rovněž v jaderném reaktoru, který je pro experimentální účely daleko vhodnější.



Clyde Lorrain Cowan (1919 - 1974)



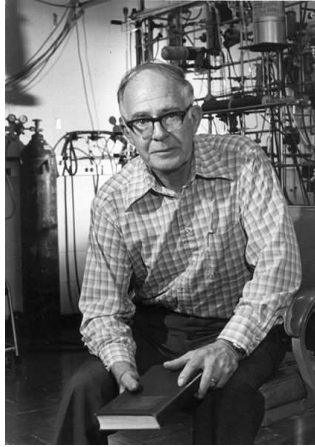
Frederick Reines (1918 - 1998)

V roce 1953 začali pracovat na projektu Poltergeist. Postavili před jaderný reaktor nádrže s deseti tunami roztoku kadmia a okolo nádrží rozmístili G – M počítače. Reaktor produkoval více než 10^{12} neutrin na mm^2 za sekundu. Tento obrovský počet nakonec vyvážil nepatrný účinný průřez interakcí neutrin s jádrem kadmia, takže detektor registroval v průměru 3 neutrina za hodinu.

Experimentální důkaz existence neutrina znamenal zásadní průlom v porozumění radioaktivitě β . Spojitost spektra energie elektronů emitovaných při β -rozpadu je nyní již lehce pochopitelná.

Je-li např. vyzářeno neutrino s maximální možnou energií, může elektron získat pouze svoji energii klidovou, a naopak při emisi elektronu s energií velmi blízkou maximální, ponese neutrino energii velmi blízkou nule. Všechny energie elektronu v uvedeném intervalu jsou tak dovoleny.

Původní Fermiho teorie předpokládala, že klidová energie neutrina je přesně nulová. Když však roku 1970 začal nositel nobelovy ceny za fyziku Raymond Davis na dně zlatého dolu Homestake v Jižní Dakotě (1,5 km pod povrchem) s pomocí obřího válcového detektoru naplněného 615 tunami perchloretylénu (látky používané v čistírnách oděvů) registrovat první přírodní neutrina vycházející z nitra Slunce, začalo postupně vycházet najevo, že s našimi představami o neutrinech není cosi v pořádku.



Raymond Davis (1914 – 2006)

Již v roce 1946, navrhl význačný italský fyzik Bruno Pontecorvo použít pro zachycení některých neutrin s vyšší energií (větší než 0,814 MeV) vznikajících v centru Slunce jádro chlóru, které se může po srážce s neutrinem přeměnit na radioaktivní jádro argonu.

Radioaktivní rozpad argonu pak lze zaznamenat. Odtud je patrné, proč byla celá nádrž umístěna hluboko pod zemí: je třeba odstínit kosmické záření, které by mohlo způsobovat stejný efekt.

V Davisově nádrži se nacházelo asi 10^{30} atomů chlóru, kterými každou sekundu pronikaly stovky bilionů (10^{14}) neutrin. Z tohoto obrovského počtu měl Davis zachytit pouze zhruba dvě neutrina za 3 dny. Přes důmyslnost metody byly výsledky pozorování ještě horší, než se očekávalo: Davisova aparatura zachycovala jen třetinu předpovězených neutrin. Pozdější zdokonalené experimenty jen potvrdily, že přes veškeré snahy jsme na zemi schopni registrovat skutečně pouhou třetinu počtu slunečních neutrin, který předpovídá stelární astrofyzika.

Obr. 3.25



Tento rozpor teorie s experimentem, známý jako sluneční, či neutrinový skandál, se dočkal překvapivého rozuzlení v červnu roku 1998. Tehdy oznámil mezinárodní tým fyziků pracujících v Japonsku na největším neutronovém detektoru světa, že během 537 dnů měření zachytili 4 700 neutrin sekundárního kosmického záření. To vzniká ve výškách 10 – 20 km nad povrchem země při srážkách částic primárního kosmického záření přicházejícího z vesmíru, s molekulami atmosféry. Při těchto srážkách vznikají spršky nejrůznějších částic včetně neutrin, které pak „prší“ z výšky na zem. Obří neutrinový detektor nazvaný Superkamiokande leží na dně dolu, 1700 m pod horou Ikena, nedaleko Tokia a je naplněn 50 000 m² vody. Specialisté z USA, Japonska, Německa a Polska, kteří tam pracovali, zjistili, že neutrina mají klidovou hmotnost, byť nepatrnou. Protože neutrina jsou kvantové objekty, mají vlnové vlastnosti, a protože existují 3 druhy neutrin (elektronové, mionové a tauonové) které se od sebe liší svojí hmotností, dochází ve směsném poli všech tří druhů neutrin k vzájemné interferenci jejich vlnových funkcí, což vede k oscilacím

efektivní hmoty neutrin. Tyto oscilace teoreticky předpověděl již v roce 1957 Bruno Pontecorvo.

Předpokládá se, že neutrina oscilují, tedy mění vůni. To je možné pouze pokud mají nenulovou hmotnost. Byla pozorována oscilace mezi ν_e a ν_μ pomocí detektoru Super Kamionande, která osvětlila proč detekujeme pouze zlomek z počtu slnečních neutrin, které bychom měli teoreticky najít.

Oscilace neutrin spočívá v tom, že při slabých interakcích vznikají tzv. vlastní stavy vůně ν_e , ν_μ a ν_τ , částice které pozorujeme jsou však lineární kombinací tzv. hmotnostních vlastních stavů. Mixování probíhá podle matice \mathbf{P}_{PMNS} která je nazvaná podle svých objevitelů Pontecorva, Makiho, Nakagawy a Sakaty:

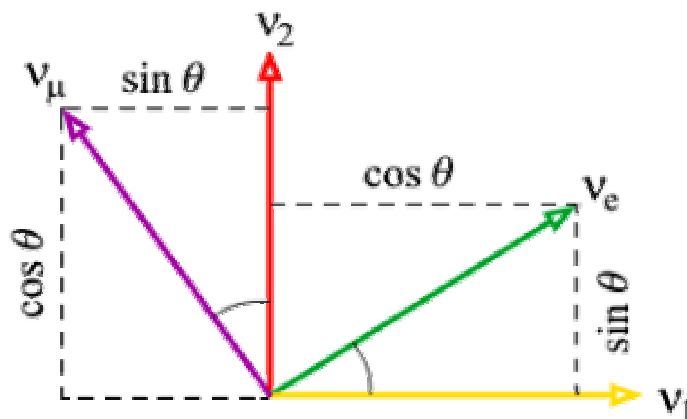
$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{\text{PMNS}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix} \quad (3.546)$$

Např. si pro jednoduchost můžeme představit 2 druhy neutrin (dvě vůně) ν_e, ν_μ a 2 vlastní stavy hmotnosti, ν_1, ν_2 které jsou navzájem propojené unitární maticí \mathbf{U} :

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \cdot \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} \quad (3.547)$$

Tedy když si nakreslíme názorný obrázek, ihned uvidíme že mixážní matice provádí v podstatě pootočení v rovině o úhel θ , tzv. mixážní úhel.

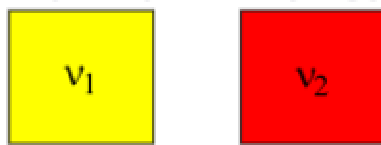
3.26



Takže stav neutrina se dá znázornit následujícím způsobem:

3.27

VLASTNÉ STAVY HMOTNOSTI



VLASTNÉ STAVY VÔNE



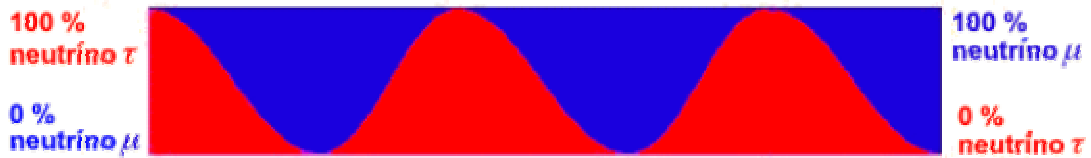
Vlastní stavy hmotnosti se však šíří jako vlny rozdílnými rychlostmi ve vakuu (3 hmotnosti neutrin) a tedy čistý stav původního neutrina se mění. Například z velkého počtu původních ν_e , jednoho z produktů termojaderné reakce v naší nejbližší hvězdě, se na Zemi detekují též ν_μ nebo ν_τ .

Neutrina oscilují mezi vůněmi podle rovnice, která sa dá jednoduše odvodit:

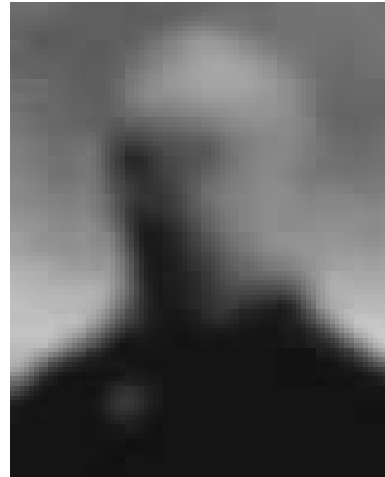
$$P_{\alpha \rightarrow \beta} = \sin^2(2\theta) \cdot \sin^2 \left(1,27 \times \frac{L(m_1^2 - m_2^2)}{E} \right), \quad (3.548)$$

kde $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ je pravděpodobnost oscilace mezi dvěma vůněmi, Δm^2 je rozdíl kvadrátů hmotností v eV^2 , L vzdálenost v km od zdroje, E energie neutrína v GeV. Znázornění oscilací je na následujícím obrázku, kde je modro-červenou barvou zobrazen časový vývoj složení neutrína.

3.28



Bruno Pontecorvo (1913 – 1993)



Ziro Maki (1931)



Masami Nakagawa (1958)

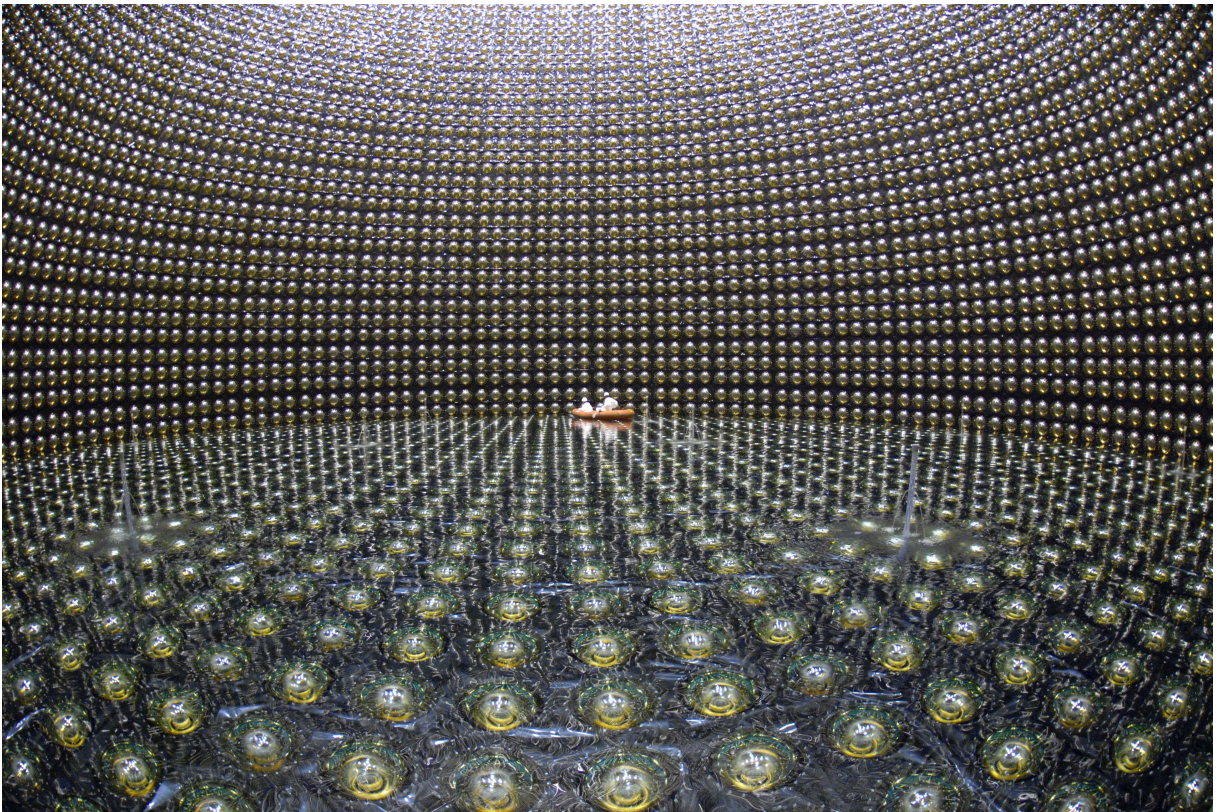
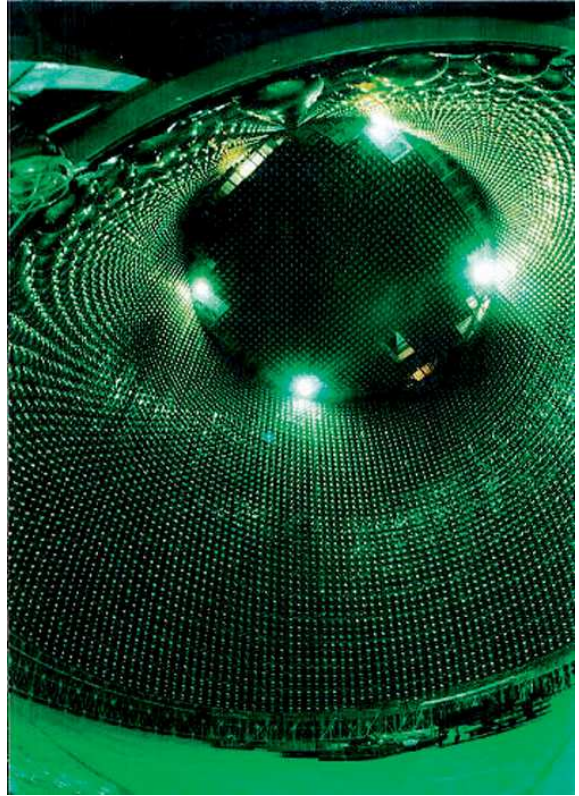
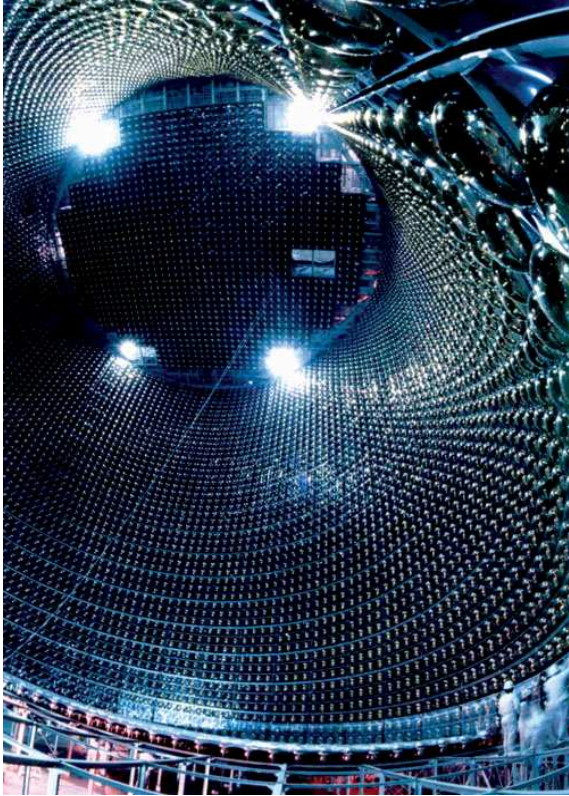


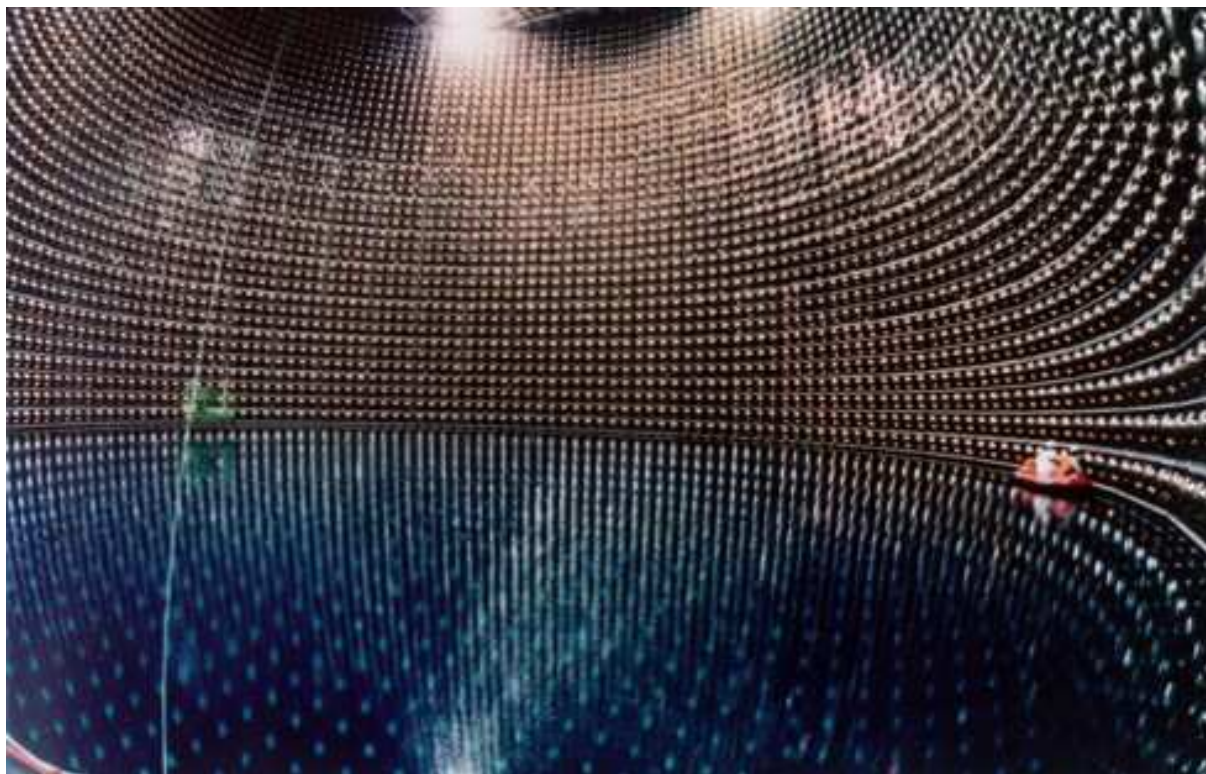
Shoichi Sakata (1911 – 1970)

Pod horou Ikena se podařilo detekovat nejen neutrina samotná, ale i směr ze kterého do detektoru přilétají. Zatímco neutrina letící přímo shora překonají vzdálenost pouze několika kilometrů, neutrina přicházející z opačné strany Zeměkoule urazí vzdálenost téměř 13 000 kilometrů. Zjistilo se, že z čím větší vzdálenosti neutrina přicházejí, tím jich efektivně interaguje méně. Tento rozdíl způsobují oscilace – při delším letu zasáhne detektor jiná část vlnového klubka vzájemně interferujících neutrin, která má menší efektivní hmotnost a menší diferenciální účinný průřez pro interakci neutrin s detektorem. Hmotnost neutrin je v současnosti předmětem rozsáhlých měření, která se provádějí pomocí detektorů rozmístěných v různé vzdálenosti od jaderného reaktoru a přesně proměřujících neutrinové oscilace,

3.29







Obr. 3.30 – Vyprázdněná nádrž obřího neutrinového detektoru Superkamioka, se stěnami pokrytými 13 000 výkonnými fotonásobiči.

Maximální energie vyzářených elektronů při β -rozpadu se pohybují v intervalu od 20 keV u ${}^3_1\text{H}$ až po 13,4 MeV u ${}^{12}_5\text{B}$. Rozpadu β podléhají jak izotopy velmi lehkých jader, tak i izotopy středně těžkých a nejtěžších jader. U těžších jader začíná s rostoucím Z převládat konkurenční rozpad α a jiné druhy rozpadu. Poločas rozpadu β daného nuklidu patří k jedné z jeho základních charakteristik. Z rozboru (3.543) se snadno přesvědčíme, že při něm platí nejen zákon zachování momentu hybnosti, ale také zákon zachování elektrického náboje.

V polovině třicátých let minulého století zjistili manželé I. Curieová a F. Joliot – Curie, že při ostřelování některých jader částicemi α vznikají jádra, která se rozpadají do té doby neznámým způsobem.



Frédéric Joliot-Curie (1900 – 1958),
Irene Joliot-Curie (1897 – 1956)

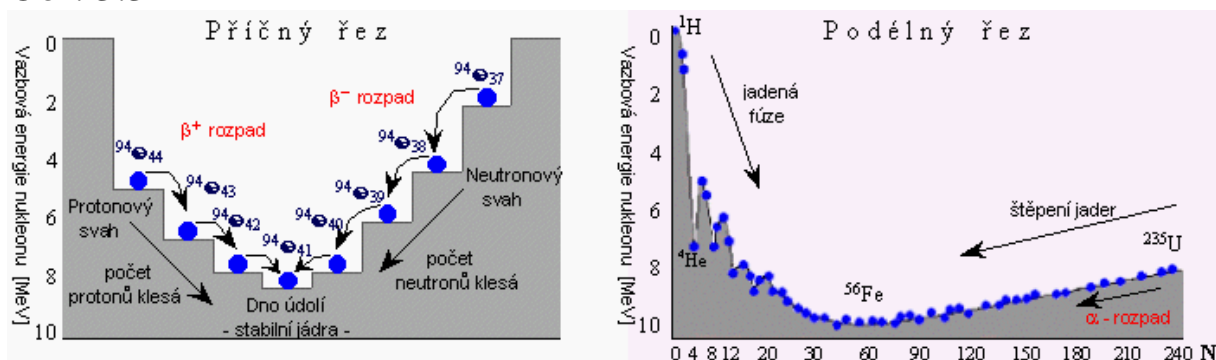
Jednalo se o proces, který je variantou rozpadu β , zvanou β^+ , a který probíhá na rozdíl od (3.543) podle schématu



Při rozpadu β^+ se počet nukleonů A jádra zachovává, ale počet protonů klesá o jednotku.

Současně s přechodem nového systému nukleonů do nižšího energetického stavu se vyzařuje dvojice leptonů – pozitron a elektronové neutrino. Interval energií pozitronů emitovaných z jádra v tomto typu radioaktivity je shodný s intervalem energií elektronů vyzářených při rozpadu β^- podle schématu (3.543). Podobně je tomu se středními dobami života jader vyzařujících pozitrony a neutrina. Jádra podléhající tomuto druhu rozpadu leží převážně pod linií stability.

Obr. 3.31



Třetím typem reakce, která náleží do této skupiny je proces zvaný **K-záchyt**. U těžších prvků, u nichž existuje jistá, ne zcela mizivá pravděpodobnost výskytu elektronu ze slupky K uvnitř jádra, může dojít k jeho zachycení jádrem, které je provázeno vyzářením neutrina. Schéma této reakce je



Oba dva procesy (3.549), (3.550) si mohou navzájem konkurovat. Probíhají v souladu s relativistickým zákonem zachování energie a jsou možné tehdy, pokud výsledné jádro bude mít nižší energetický stav než jádro původní.

Jedním ze zajímavých příkladů pro všechny 3 procesy (3.543), (3.549), (3.550) je licho – liché jádro bromu ${}^{80}_{35}\text{Br}$, které má poločas rozpadu 18 minut a používá všech tří možností, aby se změnilo na jádro sudo – sudé o nižším energetickém stavu:



Všechny tři uvedené procesy, které dnes zahrnujme do radioaktivity β mají společný základ v nestabilitě nukleonu. Neutron má klidovou energii větší, než proton. To mu dovoluje rozpadnout se podle schématu



kteřé je základem radioaktivity β^- .

Proton vázaný v jádře se může rozpadnout jen tehdy, nalézá-li se na dostatečně vysoké energetické hladině a poté přeskočí na některou volnou neutronovou hladinu, která leží níže. V takovém případě nastane děj

$$(p) \rightarrow (n) + e^+ + \nu, \quad (3.553)$$

kde závorky označují, že k uvedenému rozpadu může dojít pouze tehdy, jsou-li částice v závorkách vázané jádrem.

Za stejných podmínek může proton zachytit elektron ze slupky K a stát se neutronem:

$$(p) + e^- \rightarrow (n) + \nu. \quad (3.554)$$

V druhé polovině padesátých let vyslovili na základě poznatků z fyziky elementárních částic *T. D. Lee* a *C. N. Yang* a nazávisle na nich *L. D. Landau* pochybnosti o tom, že se při slabých interakcích zachovává parita. Rozhodující experiment, který tuto otázku vyjasnil, byl proveden pod vedením čínské fyzičky *C. S. Wu* v roce 1957 ve Spojených státech amerických. Idea experimentu je následující: Budeme mít beta radioaktivní jádra daného nuklidu orientovaná tak, aby jejich spiny byly „paralelní“ a budeme určovat počty elektronů vyzářených do různých prostorových úhlů. Mějme tedy orientované jádro se spinem \mathbf{I} a \mathbf{p} nechť je hybnost elektronu e^- vyzářeného do prostorového úhlu $\Delta\Omega$. S pomocí detektoru zaznameneáme počet elektronů vyzářených do vybraného prostorového úhlu. Provedme nyní inverzi souřadnic, tj. substituci

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}. \quad (3.555)$$

Při této transformaci se bude hybnost transformovat podle zákona

$$\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p} \quad (3.556)$$

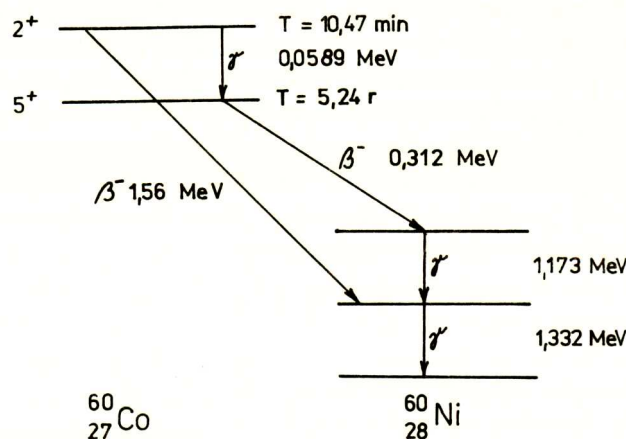
a spin vzhledem k tomu, že je to moment hybnosti (tzn. axiální vektor), podle zákona

$$\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{I} \quad (3.557)$$

Kdyby uvažovaný proces byl invariantní vůči prostorové inverzi (3.555), musel by zřejmě počet elektronů vyslaných s hybností p být stejný jako počet elektronů vyslaných s hybností $-p$. Výsledek

experimentu však jednoznačně prokázal, že počty elektronů vyslané v opačných směrech jsou různé. Toto zjištění bylo řadou nezávislých a také podstatně odlišných experimentů plně potvrzeno, a proto lze konstatovat, že při dějích probíhajících pod vlivem slabé interakce *se parita nezachovává*. Tento objev patří k jednomu z významných objevů jaderné fyziky.

Obr. 3.31



Pro pokus paní Wu bylo vybráno jádro nuklidu kobaltu ^{60}Co . Při teplotě $\sim 0,01\text{ K}$ byla jádra magnetickým polem zorientována. Kromě elektronů byla při pokusu detekována také vyzářená kvanta γ . Na obr. 3.31 je schéma rozpadu jádra kobaltu, v němž jsou uvedeny známé hodnoty energií vyzářených částic v MeV, poločasy rozpadu energetických stavů (hladin) a spin i parita energetických hladin. Z rozpadového schématu je patrné, že experiment a jeho vyhodnocení zdaleka nebyly jednoduché. Kromě toho obrázek demonstruje, že k rozpadu β nedochází pouze při přechodu ze základního stavu mateřského jádra do základního stavu dceřiného jádra, ale že se může jednat podobně jako u radioaktivity α i o přechody mezi vzbuzenými stavy nebo mezi vzbuzenými a základním stavy.

d) Rozpad gama a vnitřní konverze

Jak při rozpadu α , tak při rozpadu β jsme poznali, že jádro, které se v tomto procesu vytváří, nemusí vzniknout v základním stavu. Jádro je obecně vázaným systémem protonů a neutronů, a protože protony nesou kladný elementární náboj a obě částice, proton i neutron

interagují elektromagneticky, neboť neutron má magnetický moment, můžeme oprávněně očekávat, že u jádra budou pozorovatelné i spontánní radiační přechody. Jejich projevem je i zjištěná radioaktivita γ , ve skutečnosti vyzáření fotonů γ o relativně vysoké energii. Na obr. 3.31 jsou uvedeny vedle přechodů beta i radiační přechody mezi vzbuzenými stavy a mezi vzbuzeným stavem a stavem základním. Odtud plyne, že radiační přechody budou běžně doprovázet první dva radioaktivní rozpady.

Vyzařování kvant gama v uvažovaném ději nevede na rozdíl od předchozích rozpadů ani ke změně počtu neutronů, ani ke změně počtu protonů, tedy ani ke změně prvku, ani ke změně izotopického stavu. Energetické spektrum těchto fotonů je diskrétní, protože se jedná o přechody mezi diskrétními energetickými hladinami počátečního stavu jádra o energii E_i a konečného stavu jádra o energii E_f . Energie fotonu je určena Bohrovou podmínkou

$$\hbar\omega = E_i - E_f, \quad E_i > E_f. \quad (3.558)$$

Máme zde tedy plnou analogii k tomu, co se odehrává při radiačních přechodech v obalu atomu. Proto můžeme říci také naopak, že čárové spektrum záření gama svědčí o existenci diskrétního energetického spektra jádra. Na základě Heisenbergovy relace neurčitosti pro souřadnici a hybnost můžeme očekávat že hybnost, a tedy i energie $E = cp = \hbar\omega$ vznikajících fotonů při radiačních přechodech v jádře bude podstatně větší než energie fotonů vyzařovaných z atomového obalu. Tomu tak skutečně je a jejich energie leží převážně v intervalu (0,05 MeV, 10 MeV). Danému intervalu odpovídá interval vlnových délek λ příslušných vyzářeným fotonům ($2,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, $1,25 \cdot 10^{-13} \text{ m}$) a odtud plyne, že pro vlnové délky u fotonů γ platí podobné relace jako pro vlnové délky u fotonů vyzařovaných atomovým obalem

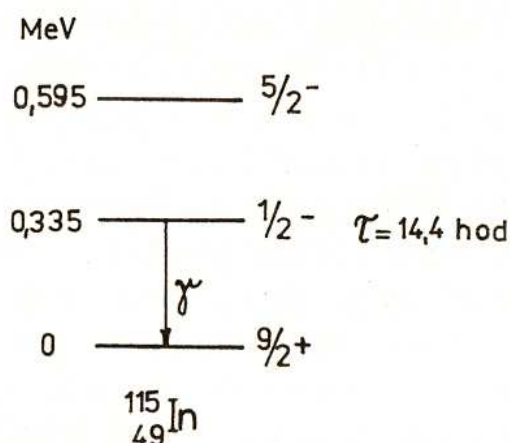
$$\lambda \gg R \quad (3.559)$$

kde nyní je R poloměrem jádra.

Střední doby života jader pro rozpad γ se nacházejí převážně v intervalu (10^{-7} s , 10^{-11} s) a to znamená, že ta jádra, která vznikla po rozpadu α nebo β v excitovaném stavu se zpravidla velmi rychle

dostanou do základního stavu radiačním přechodem. Pro tyto přechody platí podobně jako pro přechody v atomovém obalu řada výběrových pravidel. Pro jádra jsou však tato pravidla složitější, a proto je zde nebudeme explicitně uvádět. Možnosti některých přechodů jsou však výběrovými pravidly silně potlačeny a v takovém případě radiační přechod, který je dovolen z energetického hlediska, nastává s malou pravděpodobností. Jádro může potom poměrně dlouho setrvat v některém ze vzbuzených stavů, jeho stav se tak stává metastabilním a jádro v tomto stavu se nazývá *izomerem*. Jedním z typických příkladů izomerů je indium $^{115m}_{49}\text{In}$, jehož nejnižší energetické hladiny jsou na obrázku 3.32 uvedeny i se svými charakteristikami, spinem a paritou.

Obr. 3.32

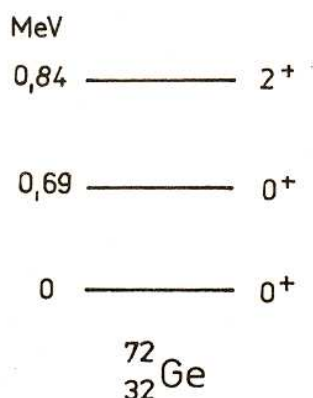
Nejnižší energetické hladiny izomeru $^{115m}_{49}\text{In}$ a nuklidu $^{115}_{49}\text{In}$.

Protože základní stav má spin a paritu rovné $9/2^+$ a poněvadž první excitovaný stav se od něho liší nevelkou energií 0,335 MeV a má spin a paritu rovné $1/2^-$, musí při naznačeném přechodu mezi oběma stavy dojít k velké změně momentu hybnosti (spinu) jádra a relativně malé změně energie. Proto je tento přechod velmi nepravděpodobný. Střední doba života izomeru ^{115}In ve stavu $1/2^-$ je 14,4 hodiny, což je veličina o mnoho řádů větší než v obvyklém případě radiačního přechodu γ . Oblasti izomerních jader se nacházejí před tzv. **magickými čísly** 50, 82 a 126 v jejich blízkém okolí, patří k nim např. rtuť $^{199}_{80}\text{Hg}$ s atomovým číslem $Z = 80 < 82$.

Nalézáme-li analogie mezi radiačními přechody v jádře a v atomovém obalu, je nezbytné také poukázat na to, že přechod jádra daného nuklidu ze vzbuzeného stavu do základního nemusí jít vždy cestou emise fotonu. U jader se setkáváme s jevem, který je svou povahou blízký fotoelektrickému jevu, nebo Augerovu jevu v atomovém obalu. U jader se jedná o tzv. **vnitřní konverzi**, nebo také elektronovou konverzi. Při elektromagnetické interakci excitovaného jádra s elektronem obalu může jádro předat elektronu celý přebytek své energie, a vyrazit tak elektron z atomu. Vzhledem k tomu, že tu jde opět o přechod jádra mezi energetickými stavy patřícími do diskrétního spektra, je energetické spektrum elektronů vyzářených při vnitřní konverzi čárové. Typický případ, v kterém nastává vnitřní konverze, je izotop germania $^{72}_{32}\text{Ge}$, jehož základní a první excitovaný stav mají stejný spin rovný nule a sudou paritu.

Zákon zachování momentu hybnosti nedovoluje, aby došlo mezi těmito stavy k radiačnímu přechodu, neboť foton má spin rovný jedné. Při deexcitaci, která se tu často označuje 0-0 přechod, předá jádro germania elektronu energii 0,69 MeV a ten nabude kinetické energie rovnající se této hodnotě zmenšené o vazbovou energii elektronu.

Obr. 3.33

Nejnižší energetické hladiny jádra $^{72}_{32}\text{Ge}$.

Je-li vzdálenost mezi hladinami daného nuklidu větší než $2m_e c^2$, kde m_e je klidová hmotnost elektronu, a není-li mezi těmito hladinami dovolen radiační přechod, může jádro přejít do nižšího energetického stavu i tak, že se v jeho elektromagnetickém poli vytvoří pár pozitron a elektron, který odnese příslušnou energii. Tento jev, který lze

pozorovat např. při deexcitaci kyslíku $^{16}_8\text{O}$, je nazýván **dvojnou konverzí**. U uvedeného jádra kyslíku je to opět 0-0 přechod, při kterém se snižuje energie jádra o 6,1 MeV. Na dvojnou konverzi se nepodílí elektronový obal. Obě formy konverzního děje popisuje velmi přesně a ve shodě s experimentem kvantová teorie pole.

e) Rozpadové řady

Známe dnes 264 *stabilních nuklidů*, zbývající nuklidy se samovolně rozpadají, tj. jsou radioaktivní, nebo se spontánně štěpí (je jich známo přes 3000). Radioaktivní procesy včetně štěpení probíhají tedy bez vnějšího zásahu. Jsou podmíněny možností přechodu daného nestabilního systému, jádra, do energeticky nižšího stavu, obecně nového systému. Každý ze tří klasických radioaktivních dějů je svou fyzikální podstatou odlišný. Při rozpadu α , který je svojí povahou velmi blízký štěpení, se zformuje v jádře a vyzáří z něho částice α čili jádro ^4He , rozpad β je podmíněn rozpadem neutronu a jeho přeměny na proton a konečně rozpad γ je přechodem jádra z vyššího energetického stavu do nižšího, který je spojený s vyzářením fotonu, je to tedy radiální proces čili elektromagnetický přechod. Štěpení jader je podobně jako rozpad α rozpadem jader přinejmenším na dvě obecně různá jádra.

Z předcházejícího výkladu víme, že existují i jiné typy radioaktivních rozpadů, např. vyzáření nukleonu z excitovaného stavu jader apod. Všechny tyto radioaktivní procesy podléhají stejnému statistickému zákonu rozpadu, kterému se později ještě věnujeme.

Podobně jako u vyzářování fotonů z atomového obalu se nemusí jednat pouze o přechody z vyššího energetického stavu do základního stavu atomu, ani u radioaktivních dějů nemusí jádra vznikající při rozpadu být již stabilními. Tak známe dokonce *radioaktivní řady*, které jsou poměrně dlouhé. Při rozpadu radionuklidu patřícího do radioaktivní řady vzniká obecně opět radionuklid. Dobře známé radioaktivní řady jsou: thoriová řada začínající nuklidem ^{232}Th , neptuniová řada počínající ^{237}Np , uranová začínající ^{238}U a aktiniová, na jejímž začátku stojí ^{235}U . Protože při rozpadu α klesá číslo A o 4 a při rozpadu β se A nemění, lze radioaktivní rozpad v dané řadě charakterizovat zákonem udávajícím velikost nukleonového čísla A

nuklidu v dané řadě

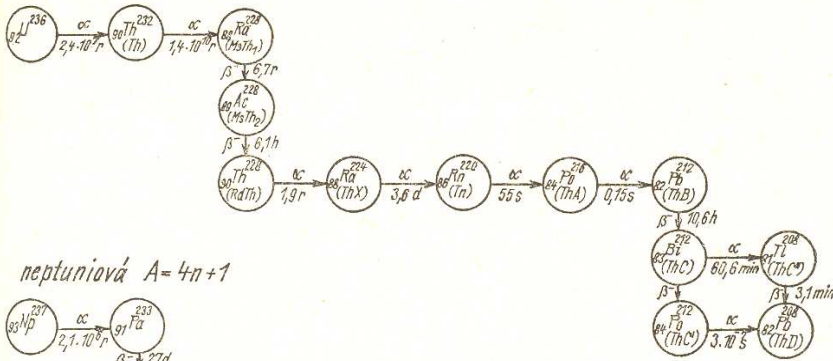
$$A = 4n + D, \quad n = \text{celé číslo}, \quad (3.560)$$

a $D = 0$ pro thoriovou, $D = 1$ pro neptuniovou, $D = 2$ pro uranovou, $D = 3$ pro aktiniovou řadu. Konečnými stabilními členy těchto řad je některý z izotopů olova ${}_{82}\text{Pb}$, u něhož je atomové číslo Z magickým, s výjimkou neptuniové řady, u níž je posledním nuklidem ${}^{209}\text{Bi}$, což je nejtěžší známý stabilní nuklid. Radioaktivní látky, případně radionuklidy, které nalézáme v přírodě, se nazývají často *přírozenými*, naopak radionuklidy vyrobené v jaderných reaktorech nebo s pomocí jaderných reakcí vyvolaných v terčiku po dopadu svazku urychlených částic nazýváme obyčejně *umělými* radionuklidy. Mezi radionuklidy prvního a druhého druhu není však ostrá dělicí čára a uvedená klasifikace je proto spíše konvencí.

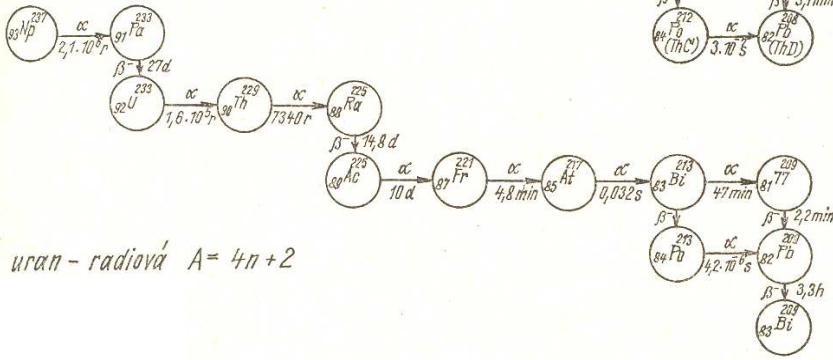
Jak je patrné z následujících tabulek, některé radionuklidy se mohou rozpadat několika různými způsoby. Tento poznatek se netýká jen radionuklidů, které jsou členy radioaktivních řad. Příslušný jev se nazývá *větvením* a relativní pravděpodobnosti různých způsobů rozpadu se nazývají *větvící poměry*. Např. u nuklidu ${}^{212}\text{Bi}$ se 64 % jader z daného výchozího množství mění rozpadem β na ${}^{212}\text{Po}$ a 36 % rozpadem α přechází na ${}^{208}\text{Tl}$. Proto jsou zde větvící poměry 64 % a 36 %.

Radioaktivní jádra charakterizujeme vedle obvyklých parametrů typem radioaktivního rozpadu, poločasem rozpadu, větvíci poměry a také energiemi vyzářených částic. K těmto datům přistupuje ještě aktivita A vzorku látky, jejíž jednotkou je *becquerel*, ($\text{Bq} = \text{počet rozpadů za sekundu}$), nesoucí jméno objevitele radioaktivity. Podíl aktivity A a hmotnosti látky obsahující radionuklid nazýváme měrnou aktivitou $a = A/m$ [$\text{Bq} \cdot \text{kg}^{-1}$]. Hovoříme tedy o měrné aktivitě radionuklidu nebo prvku či sloučeniny, roztoku apod.

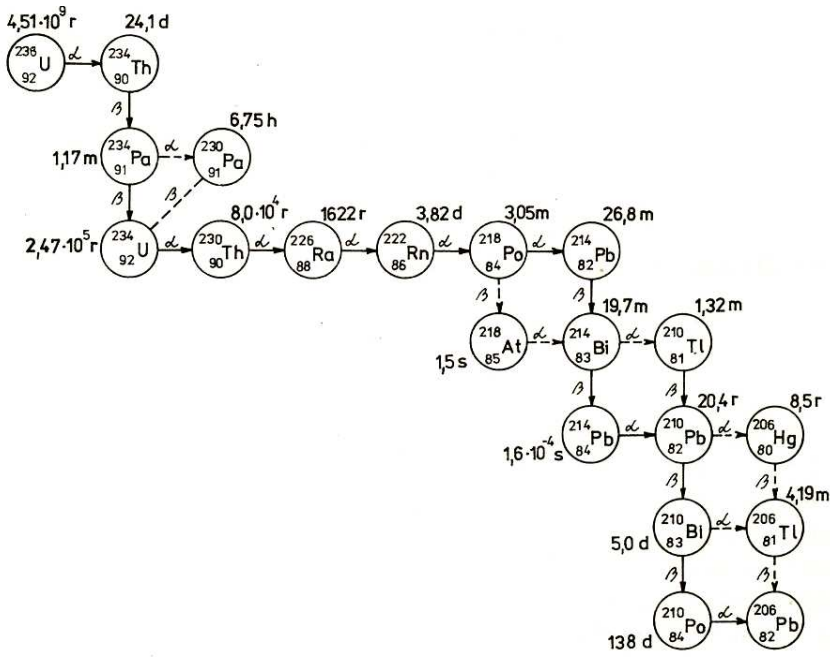
thoriová $A = 4n$



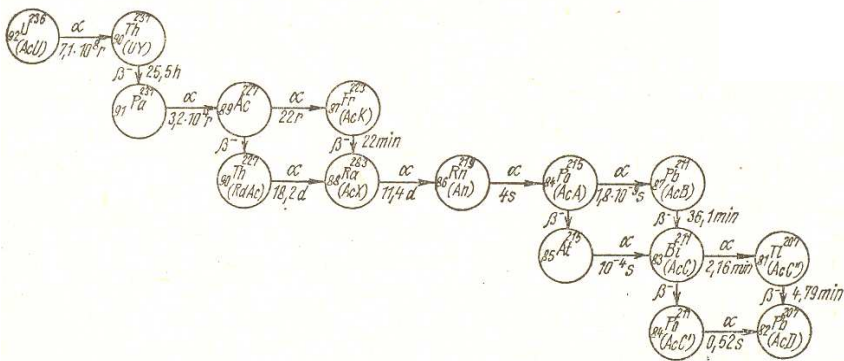
neptuniová $A = 4n + 1$



uran-radiová $A = 4n + 2$



aktiniová $A = 4n + 3$



Název	Značka	Poločas rozpadu	Rozpad
Uran – radiová řada			
Uran I	$^{238}_{92}\text{U}$ UI	$4,5 \cdot 10^9$ r	
Uran X ₁	$^{234}_{90}\text{Th}$ UX ₁	24,1 d	
Uran X ₂	$^{234}_{91}\text{Pa}$ UX ₂	1,14 min	
Uran II	$^{234}_{92}\text{U}$ U II	$2,3 \cdot 10^5$ r	
Ionium	$^{230}_{90}\text{Th}$ Io	$8,3 \cdot 10^4$ r	
Radium	$^{226}_{88}\text{Ra}$ Ra	1 590 r	
Radon	$^{222}_{86}\text{Rn}$ Rn	3,825 d	
Radium A	$^{218}_{84}\text{Po}$ RaA	3,05 min	
Radium B	$^{214}_{84}\text{Pb}$ RaB	26,8 min	
Radium C	$^{214}_{82}\text{Bi}$ RaC	19,7 min	
Radium C'	$^{214}_{84}\text{Po}$ RaC'	$1,5 \cdot 10^{-4}$ s	
Radium C''	$^{210}_{81}\text{Tl}$ RaC''	1,32 min	
Radium D	$^{210}_{82}\text{Pb}$ RaD	22,2 r	
Radium E	$^{210}_{83}\text{Bi}$ RaE	5,04 d	
Radium F	$^{210}_{84}\text{Po}$ RaF	139 d	
Radium G	$^{206}_{82}\text{Pb}$ RaG	∞	
Thoriová řada			
Thorium	$^{232}_{90}\text{Th}$ Th	$1,39 \cdot 10^{10}$ r	
Mezothorium I	$^{228}_{88}\text{Ra}$ Ms-Th I	6,7 r	
Mezothorium 2	$^{228}_{89}\text{Ac}$ Ms-Th 2	6,13 h	
Radiothorium	$^{228}_{90}\text{Th}$ Rd-Th	1,90 r	
Thorium X	$^{224}_{88}\text{Ra}$ ThX	3,64 d	
Thoron	$^{220}_{86}\text{Rn}$ Tn	54,5 s	
Thorium A	$^{216}_{84}\text{Po}$ ThA	0,158 s	
Thorium B	$^{212}_{82}\text{Pb}$ ThB	10,6 h	
Thorium C	$^{212}_{83}\text{Bi}$ ThC	60,5 min	
Thorium C'	$^{212}_{84}\text{Po}$ ThC'	$3 \cdot 10^{-7}$ s	
Thorium C''	$^{208}_{81}\text{Tl}$ ThC''	3,1 min	
Thorium D	$^{208}_{82}\text{Pb}$ ThD		

Název	Značka	Poločas rozpadu	Rozpad
Aktiniová řada			
Aktinouran	${}^{235}_{92}\text{U}$ AcU	$7,13 \cdot 10^8$ r	
Aktinium Y	${}^{231}_{90}\text{Th}$ UY	24,6 h	
Protaktinium	${}^{231}_{91}\text{Pa}$ Pa	$3,2 \cdot 10^4$ r	
Aktinium	${}^{227}_{89}\text{Ac}$ Ac	21,7 r	
Radioaktinium	${}^{227}_{90}\text{Th}$ RdAc	18,9 d	
Aktinium K	${}^{223}_{87}\text{Fr}$ AcK	21 min	
Aktinium X	${}^{223}_{88}\text{Ra}$ AcX	11,4 d	
Aktinon	${}^{219}_{86}\text{Rn}$ An	3,92 s	
Aktinium A	${}^{215}_{84}\text{Po}$ AcA	$1,83 \cdot 10^{-3}$ s	
Aktinium B	${}^{211}_{82}\text{Pb}$ AcB	36,1 min	
Aktinium C	${}^{211}_{83}\text{Bi}$ AcC	2,16 min	
Aktinium C'	${}^{211}_{84}\text{Po}$ AcC'	0,52 s	
Aktinium C''	${}^{207}_{81}\text{Tl}$ AcC''	4,76 min	
Aktinium D	${}^{207}_{82}\text{Pn}$ AcD	∞	
Neptuniová řada			
Plutonium	${}^{241}_{94}\text{Pu}$ Pu	10 r	
Americium	${}^{241}_{95}\text{Am}$ Am	500 r	
Neptunium	${}^{237}_{93}\text{Np}$ Np	$2,25 \cdot 10^6$ r	
Protaktinium	${}^{233}_{91}\text{Pa}$ Pa	27,4 d	
Uran	${}^{233}_{92}\text{U}$ U	$1,63 \cdot 10^5$ r	
Thorium	${}^{229}_{90}\text{Th}$ Th	$7 \cdot 10^3$ r	
Radium	${}^{225}_{88}\text{Ra}$ Ra	14,8 d	
Aktinium	${}^{225}_{89}\text{Ac}$ Ac	10 d	
Francium	${}^{221}_{87}\text{Fr}$ Fr	4,8 min	
Astat	${}^{217}_{85}\text{At}$ At	0,021 s	
Bismut	${}^{213}_{83}\text{Bi}$ Bi	47 min	
Polonium	${}^{213}_{84}\text{Po}$ Po	$4,2 \cdot 10^{-6}$ s	
Thallium	${}^{209}_{81}\text{Tl}$ Tl	2,20 min.	
Olovo	${}^{209}_{82}\text{Pb}$ Pb	3,3 h	
Bismut	${}^{209}_{83}\text{Bi}$ Bi	∞	

f) Rozpadový zákon

Položme si nyní otázku, jak se bude měnit **aktivita** A radionuklidového zářiče v průběhu času. V čase t_0 bude zářič obsahovat N_0 nestabilních jader. Časová změna počtu těchto nestabilních jader bude zjevně přímo úměrná tomuto počtu (čím více nestabilních jader zářič obsahuje, tím víc se jich za jednotku času rozpadne), což zapíšeme

$$A = \frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad (3.561)$$

kde znaménko minus na pravé straně rovnice zohledňuje, že počet nestabilních jader s časem klesá. Konstanta úměrnosti λ charakterizuje rychlost, s jakou tento počet klesá, tj. jak silně radionuklid v daném okamžiku září. Diferenciální rovnici (3.561) snadno vyřešíme metodou separace proměnných:

$$\int \frac{dN}{N} = -\lambda \int dt, \quad (3.562)$$

což po integraci dává

$$\ln N + \ln N_0 = -\lambda t + t_0, \quad (3.563)$$

kde integrační konstanta t_0 odpovídá času, do kterého klademe počet nestabilních jader roven N_0 . Definitivně tedy můžeme položit $t_0 = 0$. Po úpravě odtud dostáváme

$$N = N_0 \exp(-\lambda t), \quad (3.564)$$

což je známý **rozpadový zákon**.

Rozpadová konstanta λ je základní charakteristikou specifikující vlastnosti každého radionuklidu. Položme si nyní otázku, v jakém čase poklesne aktivita daného radionuklidového zářiče přesně na polovinu. Z (3.564) plyne okamžitě odpověď v podobě exponenciální rovnice

$$1 = 2 \exp(-\lambda T_{1/2}), \quad (3.565)$$

což po zlogaritmování dává

$$0 = \ln 2 - \lambda T_{1/2}, \quad (3.566)$$

čili

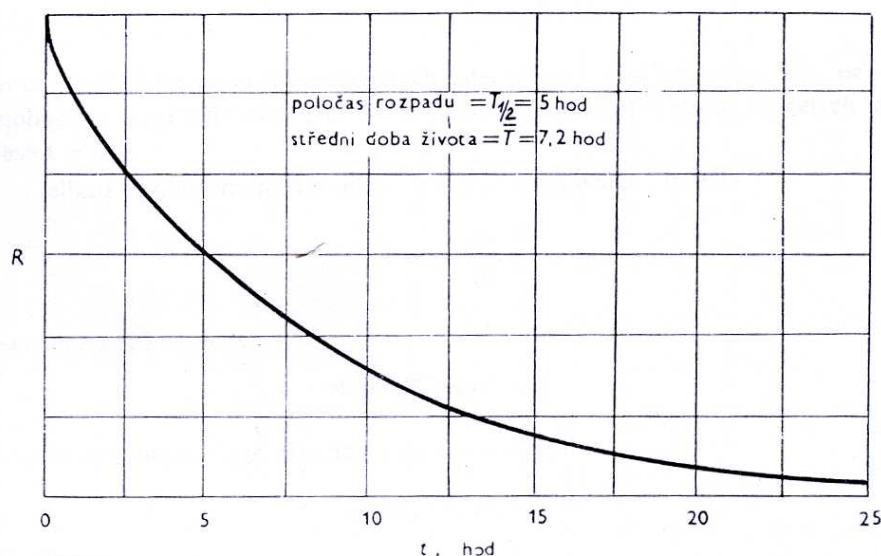
$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (3.567)$$

Konstantě $T_{1/2}$ odvozené z rozpadové konstanty λ vztahem (3.567), říkáme **poločas rozpadu** radionuklidu a je to další význačná charakteristika radionuklidvého zářiče.

Přepíšeme-li rozpadový zákon (3.564) s použitím poločasu rozpadu namísto rozpadové konstanty, obdržíme jeho alternativní vyjádření:

$$N = N_0 2^{-\frac{t}{T_{1/2}}}. \quad (3.568)$$

Obr. 3.34



Aktivita radioizotopu klesá exponenciálně s časem.

V praxi je však celá situace obvykle komplikována tím, že použitý radionuklid je členem nějaké rozpadové řady. Rozeberme si nyní

alespoň nejjednodušší případ radionuklidu R_1 , jehož rozpadem vzniká radionuklid R_2 , který se dále rozpadá na již stabilní nuklid. Potom pravděpodobné počty jader obou nuklidů $N_1(t)$ a $N_2(t)$ budou vyhovovat systému diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}\frac{dN_1}{dt} &= -\lambda_1 N_1, \\ \frac{dN_2}{dt} &= \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2,\end{aligned}\tag{3.569}$$

První rovnice systému se týká jednoho výchozího nuklidu R_1 a je shodná s výše diskutovaným případem. V druhé rovnici udává první člen na pravé straně přírůstek radionuklidu R_2 vznikajícího rozpadem nuklidu R_1 a druhý člen úbytek jader nuklidu R_2 způsobený jeho rozpadem. Známé řešení první rovnice

$$N_1(t) = N_1(0) \exp(-\lambda_1 t)\tag{3.570}$$

dosadíme do druhé

$$\frac{dN_2}{dt} + \lambda_2 N_2 = \lambda_1 N_1(0) \exp(-\lambda_1 t),\tag{3.571}$$

což je nehomogenní diferenciální rovnice prvního řádu. Položíme

$$N_2(t) = f(t) \exp(-\lambda_2 t).\tag{3.572}$$

Zřejmě musí platit $f(0) = N_2(0)$. Po dosazení za $N_2(t)$ do nehomogenní rovnice dostaneme jednoduchou rovnici pro $f(t)$, jejímž řešením je

$$f(t) = N_2(0) + \frac{\lambda_1 N_1(0)}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t} - 1 \right],\tag{3.573}$$

takže

$$N_2(t) = N_2(0) + \frac{\lambda_1 N_1(0)}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}). \quad (3.574)$$

Pro $N_2(0) = 0$ dosáhne pravděpodobný počet jader R_2 maximální hodnoty v čase t_m , který je dán podmínkou $\frac{dN_2}{dt} = 0$. Z uvedených vztahů nalezneme

$$t_m = \frac{\ln \frac{\lambda_2}{\lambda_1}}{\lambda_2 - \lambda_1}. \quad (3.575)$$

Z druhé rovnice (3.569) plyne, že v čase t_m bude

$$\lambda_1 N_1(t_m) = \lambda_2 N_2(t_m), \quad (3.576)$$

a proto aktivity nuklidů R_1 a R_2 jsou v čase t_m stejné.

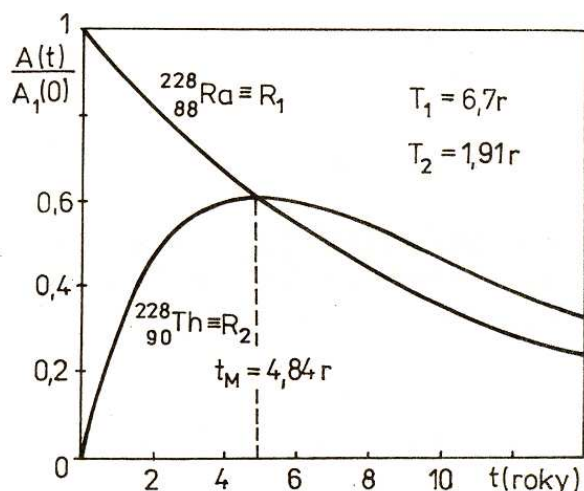
Prozkoumejme ještě, k jakým modifikacím rozpadového zákona (3.564) rovnice (3.574) s výchozím počtem jader $N_2(0) = 0$ vede. Předpokládejme nejprve, že $\lambda_1 > \lambda_2$, a zapišme rovnici (3.574) s pomocí aktivit

$$A_2(t) = A_1(0) \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} [1 - e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)t}] e^{-\lambda_2 t}. \quad (3.577)$$

Pro $t \geq \frac{5}{\lambda_1 - \lambda_2}$ je exponenciála v hranaté závorce prakticky

zanedbatelná vůči jedničce a časový vývoj aktivity se bude řídit prostým exponenciálním zákonem (3.564) s rozpadovou konstantou λ_2 (viz obr. 3.35)

Obr. 3.35



Obr. 11.3. Závislost relativní aktivity radionuklidů $R_1 = {}^{228}_{88}\text{Ra}$ a $R_2 = {}^{228}_{90}\text{Th}$ na čase. $T_1 > T_2$, a proto $\lambda_1 < \lambda_2$.

Pro $\lambda_1 < \lambda_2$ upravíme (3.574) na tvar

$$A_2(t) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[1 - e^{-(\lambda_2 - \lambda_1)t} \right] A_1(t). \quad (3.578)$$

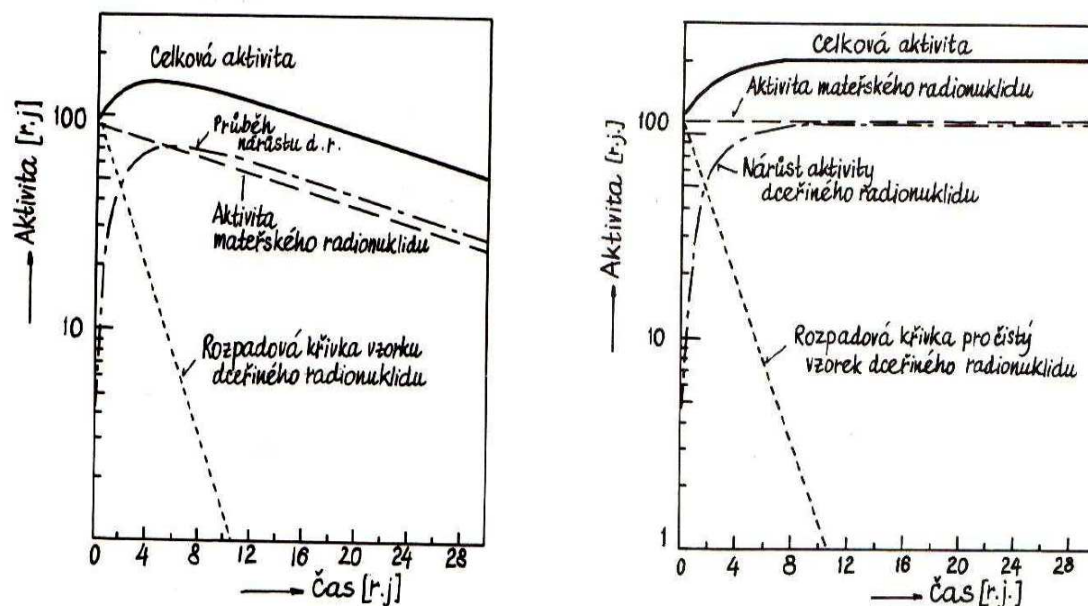
Pro časy $t \geq \frac{5}{\lambda_2 - \lambda_1} = \frac{5t_m}{\ln \frac{\lambda_2}{\lambda_1}}$ se bude $A_2(t)$ lišit od $A_1(t)$ pouze o

multiplikativní konstantu a budeme proto mít pro $A_2(t)$ exponenciální zákon (3.564) s rozpadovou konstantou λ_1 .

Odtud je již patrné, jak bychom postupovali v případech, kdy máme radioaktivní řadu obsahující více radionuklidů.

Následující dva obrázky ukazují průběh rozpadové křivky pro $\lambda_1 < \lambda_2$ a pro $\lambda_1 \ll \lambda_2$.

Obr. 3.36



g) Spin, izospin a parita jádra

Velikost spinu jádra charakterizujeme kvantovým číslem I . Kvadrát spinu je roven

$$I^2 = \hbar^2 I(I+1). \quad (3.579)$$

Je-li spin celočíselný, chová se jádro jako boson, je-li poločíselný, chová se jako fermion.

Průmět spinu do vybraného směru, např. do směru indukce vnějšího makroskopického magnetického pole, nabývá známých kvantových hodnot

$$I_z = M\hbar, \quad M = -I, -I+1, \dots, I-1, I, \quad (3.580)$$

kde číslo M se označuje často jako *magnetické kvantové číslo*. Spin jádra je určen složením spinu všech nukleonů a jejich orbitálních momentů hybnosti podle pravidel o skládání momentů hybnosti. Podobně jako v atomové fyzice i ve fyzice atomového jádra se nazývá samo kvantové číslo I spinem. Proto např. říkáme, že spin jádra musí být roven 0, 1, 2, ... jestli A je sudé, a musí být roven 1/2, 3/2, ... jestli

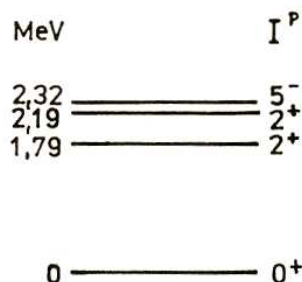
A je liché. Spin jádra chápeme jako jeho vlastní moment hybnosti v základním energetickém stavu jádra. Ale můžeme, a to je třeba vždy explicitně říci, charakterizovat vzbuzené stavy jádra jeho spinem. Ten může být buď shodný se spinem příslušným základnímu stavu, nebo se od něho odlišovat.

Z experimentu plyne, že základní stavy všech jader mají poměrně malé spiny. Nejvyšší hodnota $I = 6$ byla nalezena u jádra nuklidu ${}^{50}_{23}\text{V}$, spiny jader s lichým počtem nukleonů nepřevyšují $I = 9/2$. Všechna sudo-sudá jádra mají spin nulový. Uvedené údaje svědčí o tom, že se v jádre vytvářejí *dvojice protonů s opačnými projekcemi spinu a podobné dvojice neutronů*. Tato tendence vytváření dvojic je analogií vytváření dvojic elektronů v atomovém obalu podchyceném v Hundově pravidle.

Metody, jimiž se určují spiny jader, většinou využívají souvislosti mezi spinem jádra a jeho magnetickým momentem. Existují však také metody, které jsou na měření magnetických momentů nezávislé. Jedna z nich využívá rozboru rotačních spekter dvouatomových molekul, které mají shodná jádra.

Spiny vzbuzených stavů jader se určují s pomocí zákona zachování momentu hybnosti při analýze údajů plynoucích z rozpadů β , elektromagnetických přechodů a jaderných reakcí. Přitom se určuje i parita příslušného stavu. Tímto způsobem se dají rovněž určovat i spiny základního stavu atomového jádra.

Parita je podobně jako spin velmi důležitou charakteristikou jádra. Paritu jádra udáváme vždy v jeho základním stavu a nahlížíme na ni jako na vnitřní paritu. Experimentální výsledky ukazují, že parita sudo-sudých jader je kladná, u ostatních jader může být jak kladná, tak záporná. Např. parita jádra ${}^{17}_8\text{O}$ je $+1$, jádra ${}^{15}_7\text{N}$ je -1 . Ve fyzice atomového jádra paritu symbolizujeme obvykle jen znaménky $+$ a $-$, která píšeme jako horní index u spinu jádra nebo částice, tj. I^+ nebo I^- . Parita excitovaných stavů jádra může být shodná s paritou jádra v základním stavu, a v takovém případě mluvíme o excitovaných stavech s *normální paritou*, v opačném případě jde o excitované stavy s *nenormální paritou*. U většiny jader mají stavy s nenormální paritou vyšší energii než stavy s normální paritou. Mezi základním stavem a prvním stavem s nenormální paritou se obvykle nachází jeden nebo několik excitovaných stavů s normální paritou



Obr. 3.37: Spektrum nejnižších hladin jádra ^{90}Zr . Vlevo jsou uvedeny energie vzhledem k základnímu stavu, vpravo spin a parita.

Využijeme-li slupkového modelu, bude parita jádra určena vztahem

$$P = \prod_{i=1}^A (-1)^{l_i}, \quad (3.581)$$

kde l_i je kvantové číslo momentu hybnosti i -tého nukleonu. Vnitřní parita nukleonu není pro určení P podstatná, protože je rovna $+1$. Z tohoto vztahu např. ihned plyne, že pro jádro ${}^7_3\text{Li}$, které má dva protony a dva neutrony ve stavech s a zbylé nukleony ve stavech p , by měla být normální parita $P = -1$.

Plyne z něho však také, že jednočásticové excitované stavy s nenormální paritou by měly v tomto modelu vznikat při změnách l o liché číslo. Při určování parity jádra a jeho vzbuzených stavů se využívají poznatky ze stejných procesů, které pomáhají určovat spin vzbuzených jader. Při dějích, které jsou podmíněny jadernými a elektromagnetickými silami, tj. při jaderných reakcích, rozpadech α a při přechodech γ , se parita celého systému zachovává, tj. parita jeho počátečního stavu a koncového stavu je stejná. Při radioaktivním rozpadu β se sice parita nezachovává, ale z rychlosti děje (doby života) se dá usuzovat na to, zda došlo ke změně parity jádra a ke změně jeho spinu.

Jedním z důležitých důsledků existence parity stavů atomového jádra je např. to, že elektrický dipólový moment jádra musí být nulový. Vlnová funkce jádra nemůže změnit při inverzi souřadnic, na kterých závisí, svou absolutní hodnotu, neboť je to funkce pro dva systémy fermionů, pro každý z nichž platí Pauliho princip. Proto hustota

pravděpodobnosti pro rozložení náboje v jádře, která je úměrná kvadrátu absolutní hodnoty této vlnové funkce, se chová jako funkce sudá

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(-\mathbf{r}), \quad (3.582)$$

a tedy elektrický dipólový moment, který je dán integrálem

$$\mathbf{d} = e \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) dV, \quad (3.583)$$

je díky tomu, že integrand je lichou funkcí, roven nule! Z tohoto důvodu lze elektrické vlastnosti atomového jádra vedle jeho celkového náboje detailněji popsat až s pomocí *elektrického kvadrupólového momentu*.

Neméně hluboký význam jako spin a parita má pro jádro i jeho **izotopický spin** čili **izospin**. Nukleonům připisujeme izospin $T = 1$ a jeho projekci T_z , která je rovna $+1$ u protonu a -1 u neutronu. Z protonově neutronové stavby atomového jádra ihned plyne, že izospin jádra, který se určuje podle pravidel skládání momentů hybností, je rovný $T = 0, 1, 2, \dots$, jestli A je sudé, a rovný $T = n + 1, n = 0, 1, 2, \dots$, je-li A liché. Relativně široký interval možných hodnot n se dá omezit, využijeme-li představ slupkového modelu jádra. Přesto je daleko výhodnější a účelnější zjistit experimentálně, která z povolených hodnot celkového izospinu T se skutečně v daném jádře realizuje, a tím i určit, v kolika různých nábojových stavech s toutéž energií, paritou a spinem se může daná soustava nukleonů nacházet. Projekce celkového izospinu jádra T_z je bezprostředně dána jako součet projekcí izospinu jednotlivých nukleonů

$$T_z = Z - N. \quad (3.584)$$

Odtud se dá přímo určit jen dolní mez pro hodnotu celkového izospinu T . K jeho určení se musíme obrátit k dalším experimentálním údajům. Možnost klasifikovat izospinové stavy jader dala podnět k vyslovení hypotézy o *nábojové nezávislosti jaderných sil*. Podle ní sice jaderné síly závisejí na izospinu T , ale nikoliv na jeho složce T_z . K

analogickému závěru dospívá též teorie silných interakcí. Z hypotézy o nábojové nezávislosti jaderných sil dále plyne, že v procesech, které jsou jimi určeny, se jak izospin T , tak jeho složka T_z zachovává. Jinak řečeno, počáteční a koncový stav celého systému musí mít shodné T a T_z . To má velký význam pro experiment, jehož výsledky by se nedaly vysvětlit, kdyby neplatil *zákon zachování izospinu a jeho projekce*. Lze tedy považovat hypotézu nábojové nezávislosti jaderných sil za potvrzenou a brát ji jako empirický zákon.

Srovnajme např. nepružný rozptyl protonů na jádrech ${}^{10}_5B$ s nepružným rozptylem deutronů 2_1H na stejných jádrech. Izospin protonu je 1, deutronu 0, základní stav jádra ${}^{10}_5B$ má $T = 0$. U obou procesů zapíšeme hodnoty T a T_z a excitovaná jádra označíme hvězdičkou

$$\begin{aligned}
 & p + {}^{10}_5B \rightarrow p + {}^{10}_5B^* \\
 T: & 1 \quad 0 \quad 1 \quad 0; 2 & (3.585) \\
 T_z: & 1 + 0 = 1 + 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & d + {}^{10}_5B \rightarrow d + {}^{10}_5B^* \\
 T: & 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 & (3.586) \\
 T_z: & 0 + 0 = 0 + 0
 \end{aligned}$$

V relaci (3.585) je v počátečním stavu soustavy celkový izospin $T = 1$, v koncovém musí být podle zákona zachování izospinu celkový izospin $T = 1$ a to připouští pro jádro ${}^{10}_5B$ jak stav s $T = 0$, tak stav s $T = 2$ podle pravidel o skládání izospinu. V reakci (3.586) je však celkový izospin na počátku $T = 0$ a po reakci musí být rovněž $T = 0$, a to nepřipouští stav $T = 2$ u jádra ${}^{10}_5B^*$. Tento závěr je v dokonalém souladu s experimentem.

Zdůrazněme, že jsme tu jednali o procesech probíhajících pod vlivem jaderných sil. Půjde-li o reakce, které probíhají pod vlivem *elektromagnetické interakce*, potom se v nich bude zachovávat zřejmě celková projekce izospinu T_z , neboť se nebude měnit Z a N , ale *celkový izospin T se obecně zachovávat nebude*. Velmi dobře jsou

známé radiační přechody γ mezi stavy s různým T . Při radioaktivních dějích provázených slabou interakcí *se nezachovává ani T_z* , neboť se při nich mění neutron v proton, případně proton v neutron. Stejně je tomu při zachycení elektronu v jádře.

7) Skládání impulsmomentů



Rudolf Friedrich Alfred Clebsch (1833 – 1872) Paul Albert Gordan (1837 – 1912)

Mějmež 2 částice $|j_1, m_1\rangle$ a $|j_2, m_2\rangle$ s impulsmomenty \mathbf{J}_1 a \mathbf{J}_2 , takže

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle, & \hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle, \\ \hat{J}_{2z} |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle, & \hat{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.587)$$

Protože operátory si všímají pouze svých vlastních stavů a ostatní ignorují, můžeme (3.587) zapsat rovněž ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_{2z} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_2^2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.588)$$

Často je však potřeba nalézt celkový impulsmoment \mathbf{J} , který má obecně jiný systém vlastních stavů $|J, M\rangle$. Je tedy potřeba nalézt předpis pro vyjádření celkového vlastního stavu $|J, M\rangle$ pomocí

dílčích vlastních stavů $|j_1, m_1\rangle$ a $|j_2, m_2\rangle$ jednotlivých částic. Pro z -ovou komponentu celkového impulsmomentu $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ platí

$$\hat{J}_z |J, M\rangle = \hbar(m_1 + m_2)|J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle \quad (3.589)$$

a pro kvadrát celkového impulsmomentu $\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1\hat{\mathbf{J}}_2$

$$\hat{J}^2 |J, M\rangle = \hbar^2 J(J+1)|J, M\rangle. \quad (3.590)$$

Nechť dva nezávislé operátory impulsmomentů $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2, [\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0$ působí na Hilbertových prostorech $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, a jejich součet $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ působící na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Mezi impulsmomenty, resp. jejich složkami platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_1^2] &= [\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_2^2] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0, \\ [\hat{J}_{1z}, \mathbf{J}_1^2] &= [\hat{J}_{2z}, \mathbf{J}_2^2] = 0. \end{aligned} \quad (3.591)$$

To znamená, že na prostoru \mathcal{H} můžeme volit za ÚMP (úplnou množinu pozorovatelných) následující množiny operátorů se svými bázemi:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z &\rightarrow |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_1^2, J_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, J_{2z} &\rightarrow |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.592)$$

Stav s definovaným impulsmomentem systému lze tedy popsat dvojitým způsobem: buď vektorem

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (3.593)$$

nebo pomocí vlastních vektorů $|J, M\rangle$ operátorů (3.590) a (3.589) vektorem

$$|j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (3.594)$$

Analogicky k (3.588) platí:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_2^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j(j + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_3 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar M |j_1, j_2, J, M\rangle \end{aligned} \quad (3.595)$$

Hledejme takovou unitární transformaci, která umožňuje přechod od jedné reprezentace k druhé na Hilbertově prostoru \mathcal{H} tvořeném vektory $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$. Podmínka úplnosti zní

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2| = \hat{1} \quad (3.596)$$

nebo

$$\sum_{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle \langle j_1, j_2, J, M| = \hat{1}. \quad (3.597)$$

S použitím (3.596) má transformace mezi vektory (3.593) a (3.594) tvar

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \quad (3.598)$$

kde sumace přes m_1 probíhá od $-j_1$ do $+j_1$, součet přes m_2 od $-j_2$ do $+j_2$. Čísla $C(j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M)$ jsou **Clebsch – Gordanovy koeficienty**. Protože $m_1 = M - m_2$, stačí na pravé straně (3.598) sčítat při daném M pouze přes m_2 . Inverzní transformací k (3.598) je

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{J, M} C(J, M | j_1, j_2, m_1, m_2) |j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (3.599)$$

Určíme nyní spektrum operátorů $\hat{\mathbf{J}}^2$ a \hat{J}_z . Abychom zjistili, jakých hodnot nabývá kvantové číslo J (odpovídající pevným hodnotám j_1, j_2), určíme možné hodnoty $M = m_1 + m_2$. Okamžitě je zřejmé, že

$$M_{\max} = j_1 + j_2. \quad (3.600)$$

Vyskytuje se pouze jednou, a to když $m_1 = j_1, m_2 = j_2$. Odtud plyne, že nejvyšší hodnota J

$$J_{\max} = M_{\max} = j_1 + j_2, \quad (3.601)$$

jíž přísluší pouze jediný vlastní stav $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle$.

Druhá nejvyšší hodnota M je $M_{\max} - 1 = j_1 + j_2 - 1$ a lze ji realizovat dvojím způsobem: buď $m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1$, nebo $m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2$. Z příslušných vlastních vektorů

$$\begin{aligned} &|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle, \end{aligned} \quad (3.602)$$

Lze konstruovat dvě lineárně nezávislé kombinace. Jedna z nich odpovídá kvantovému číslu $J = j_1 + j_2 - 1$, druhá hodnotě $J = j_1 + j_2$. Podobně pro $M = j_1 + j_2 - 2$ budou existovat tři lineárně nezávislé kombinace utvořené z funkcí

$$\begin{aligned} &|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 2\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 2\rangle |j_2, j_2\rangle, \end{aligned} \quad (3.603)$$

jimž odpovídají hodnoty J rovné

$$J = \begin{matrix} \nearrow & j_1 + j_2 - 2 \\ \rightarrow & j_1 + j_2 - 1 \\ \searrow & j_1 + j_2 - 0 \end{matrix} \quad (3.604)$$

Tímto postupem zmenšování M vždy o jednotku, dojdeme nakonec k hodnotám, kdy buď $m_1 = -j_1$, nebo $m_2 = -j_2$. Proto nejmenší hodnota J bude rovna

$$J_{\min} = |j_1 - j_2| \quad (3.605)$$

a platí tedy nerovnost

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (3.606)$$

Každé hodnotě J přísluší $2J + 1$ hodnot M

$$M = J, J - 1, \dots, -J, \quad (3.607)$$

tudíž celkový počet stavů pro všechna možná J (čili dimenze prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$), bude roven

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (3.608)$$

V tabulce 3.7 je přehledný souhrn všech možných kombinací dosažitelných pro 2 částice s $l_1 = l_2$:

Tab. 3.7

M	Lineární kombinace	Výsledný stav	Poznámka
$l_1 + l_2$	$ l_1, l_1\rangle l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle$	$M = M_{\max}$
$l_1 + l_2 - 1$	$ l_1, l_1 - 1\rangle l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle$	$M = M_{\max}$
	$ l_1, l_1\rangle l_2, l_2 - 1\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$	
$l_1 + l_2 - 2$	$ l_1, l_1 - 2\rangle l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 2\rangle$	$M = M_{\max}$
	$ l_1, l_1 - 1\rangle l_2, l_2 - 1\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2\rangle$	
	$ l_1, l_1\rangle l_2, l_2 - 2\rangle$	$ l_1 + l_2 - 2, l_1 + l_2 - 2\rangle$	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$-(l_1 + l_2)$	$ l_1, -l_1\rangle l_2, -l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, -l_1 - l_2\rangle$	$M = M_{\min}$

Příklad:

Složme impulsmomenty $l_1 = 2, l_2 = 1$

Tab.3.8

m_1	2	2	1	2	1	0	1	0	-1	0	-1	-2	-1	-2	-2
m_2	1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	-1
M	3	2		1			0			-1			-2		-3
L	3	2, 3		1, 2, 3			1, 2, 3			1, 2, 3			2, 3		3

Explicitní výpočet $C - G$ koeficientů

Obecný postup výpočtu Clebsch – Gordanových koeficientů lze nastínit v následujících 4 krocích:

- 1) Sestrojíme vektor s nejvyšší vahou

$$|l_1, l_2, L\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle = |l_1, l_2\rangle |l_2, M_2\rangle. \quad (3.609)$$

- 2) Aplikujeme posunovací operátor \hat{L}_- , čímž nalezneme všechny vektory

$$|l_1, l_2, L\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle. \quad (3.610)$$

3) Vektory

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, L\rangle &= |l_1 + l_2 - 1, M\rangle = |l_1 + l_2 - 1\rangle, \\ |l_1, l_2, L\rangle &= |l_1 + l_2, M\rangle = |l_1 + l_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (3.611)$$

musí být navzájem ortogonální.

4) Postupně opakujeme aplikaci posunovacího operátoru \hat{L}_- a ortogonalizace, dokud nezískáme všechny možné vektory

$$|l_1, l_2, L, M\rangle. \quad (3.612)$$

Příklad:

Nalezněme C – G koeficienty pro skládání dvou impulsmomentů $l_1 = l_2 = 1$.

Řešení:

Začínáme s vektory s nejvyšší vahou, tzn. M_{\max} .

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle &= (\hat{L}_z^2 + \hat{L}_z + L_- L_+) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = (M^2 + M + 0) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = \\ &= \left[(l_1 + l_2)^2 + (l_1 + l_2) + 0 \right] |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = \\ &= (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = L(L + 1) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.613)$$

Zároveň víme, že

$$\hat{L}^2 |L, M\rangle = L(L + 1) |L, M\rangle. \quad (3.614)$$

Srovnáním (3.613) a (3.614) vidíme, že stavu $|l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle$ odpovídá stav

$$|L, M\rangle = |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle. \quad (3.615)$$

Budeme užívat zkrácený zápis

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, L, M\rangle &= |1, 1, L, M\rangle \rightarrow |LM\rangle, \\ |l_{12}, m_{12}\rangle &= |1, m_{12}\rangle \rightarrow |m_1\rangle. \end{aligned} \quad (3.616)$$

V našem případě tedy máme

$$|L, M\rangle = |2, 2\rangle = |1\rangle|1\rangle, \quad (3.617)$$

neboli

$$(1, 1, 1, 1|2, 2) = 1. \quad (3.618)$$

Platí

$$\hat{L}_\pm |L, M\rangle = \sqrt{L(L+1) - M(M \pm 1)} |L, M \pm 1\rangle \quad (3.619)$$

a podobně pro jednotlivé impulsmomenty $\hat{\mathbf{L}}_{1,2}$, přičemž $\hat{L}_\pm = \hat{L}_\pm^{(1)} + \hat{L}_\pm^{(2)}$. Aplikujeme tuto relaci na vektor $|2, 2\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |2, 2\rangle &= 2|2, 1\rangle, \\ \hat{L}_- |1\rangle|1\rangle &= \hat{L}_-^{(1)} |1\rangle|1\rangle + \hat{L}_-^{(2)} |1\rangle|1\rangle = \sqrt{2}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle). \end{aligned} \quad (3.620)$$

Srovnáním dostaneme

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle), \quad (3.621)$$

a tedy

$$(1,0,1,1|2,1) = (1,1,1,0|2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (3.622)$$

Jelikož musí zároveň platit $M = m_1 + m_2$, dostáváme

$$\begin{aligned} (1,1,1,1|2,1) &= (1,0,1,0|2,1) = (1,-1,1,0|2,1) = \\ &= (1,0,1,-1|2,1) = (1,-1,1,-1|2,1) = 0. \end{aligned} \quad (3.623)$$

Další aplikací posunovacího operátoru

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |2,1\rangle &= \sqrt{6} |2,0\rangle, \\ \hat{L}_- \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2} |-1\rangle |1\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle |-1\rangle) &= \\ = |-1\rangle |1\rangle + |0\rangle |0\rangle + |0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle, \end{aligned} \quad (3.624)$$

neboli

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|-1\rangle |1\rangle + 2|0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle), \quad (3.625)$$

takže

$$\begin{aligned} (1,-1,1,1|2,0) &= (1,1,1,-1|2,0) = \frac{1}{\sqrt{6}}, \\ (1,0,1,0|2,0) &= \frac{2}{\sqrt{6}}. \end{aligned} \quad (3.626)$$

Všechny ostatní C – G koeficienty s $l = 2$, $m = 0$ jsou nulové.

Další aplikací \hat{L}_- dostaneme

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|0\rangle), \quad (3.627)$$

$$|2, -2\rangle = |-1\rangle|-1\rangle,$$

a tedy

$$(1, 0, 1, -1|2, -1) = (1, -1, 1, 0|2, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.628)$$

$$(1, -1, 1, -1|2, -2) = 1.$$

Hledejme nyní vektor $|1, 1\rangle$. Tento vektor musí být ortogonální na $|2, 1\rangle$. Označíme-li

$$|1, 1\rangle = c_1|0\rangle|1\rangle + c_2|1\rangle|0\rangle, \quad (3.629)$$

musí být

$$\begin{aligned} \langle 2, 1|11\rangle &= 0, \\ \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}} &= 0. \end{aligned} \quad (3.630)$$

kde c_1, c_2 volíme reálné a

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (3.631)$$

Potom

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle) \quad (3.632)$$

a C – G koeficienty jsou

$$\begin{aligned} (1,1,1,0|1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,0,1,1|1,1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{3.633}$$

Aplikací \hat{L}_- dostaneme

$$\begin{aligned} |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|1\rangle), \\ |1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|0\rangle), \end{aligned} \tag{3.634}$$

odkud

$$\begin{aligned} (1,1,1,-1|1,0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,-1,1,1|1,0) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,0,1,-1|1,-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,-1,1,0|1,-1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{3.635}$$

Zbývá poslední stav

$$|0,0\rangle = d_1|1\rangle|-1\rangle + d_2|0\rangle|0\rangle + d_3|-1\rangle|1\rangle. \tag{3.636}$$

Z podmínek

$$\langle 2,0|0,0\rangle = \langle 1,0|0,0\rangle = 0 \tag{3.637}$$

dostáváme soustavu rovnic

$$\frac{d_1 + 2d_2 + d_3}{\sqrt{6}} = 0, \quad (3.638)$$

$$\frac{d_1 - d_3}{\sqrt{2}} = 0,$$

z které vyplývají vztahy

$$d_1 = d_3 = -d_2. \quad (3.639)$$

Volme

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle), \quad (3.640)$$

a tedy

$$(1,1,1,-1|0,0) = (1,-1,1,1|0,0) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (3.641)$$

$$(1,0,1,0|0,0) = -\frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Všechny Clebsch – Gordanovy koeficienty pro impulsmomenty $l_1 = l_2 = 1$ jsou přehledně shrnuty v tabulce 3.9.

Tab. 3.9

L		2	2	1	2	1	0	2	1	2
M		2	1	1	0	0	0	-1	-1	-2
m_1	m_2									
1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0
0	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0
1	-1	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
0	0	0	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}}$	0	$\frac{-1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
-1	1	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
0	-1	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
-1	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	0
-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	1

Skládání spinů

Z obecné teorie impulsmomentu vyplývají dvě možné konstrukce N -elektronových spinových funkcí odpovídající paralelnímu a antiparalelnímu skládání spinů.

$$\begin{aligned}
|N, S, M_s; k\rangle &= \left(\frac{S + M_s}{2S}\right)^{1/2} \left|N - 1, S - \frac{1}{2}, M_s - \frac{1}{2}\right\rangle \alpha(N) + \\
&= \left(\frac{S - M_s}{2S}\right)^{1/2} \left|N - 1, S - \frac{1}{2}, M_s + \frac{1}{2}\right\rangle \beta(N), \\
|N, S, M_s; k\rangle &= -\left(\frac{S - M_s + 1}{2S + 2}\right)^{1/2} \left|N - 1, S + \frac{1}{2}, M_s - \frac{1}{2}\right\rangle \alpha(N) + \\
&= \left(\frac{S + M_s + 1}{2S + 2}\right)^{1/2} \left|N - 1, S + \frac{1}{2}, M_s + \frac{1}{2}\right\rangle \beta(N),
\end{aligned} \tag{3.642}$$

kde k indexuje různé funkce odpovídající týmž hodnotám N, S, M_s . Odmocniny vystupující na pravé straně (3.642) jsou C – G koeficienty.

Z jednoelektronového stavu se $s = \frac{1}{2}$ můžeme tedy získat dva

dvouelektronové stavy s celkovým spinem $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$, nebo

$S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$. Podobně můžeme z dvouelektronových stavů odvodit

tříelektronové stavy se spinem $S = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$, $S = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$, nebo

$S = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$.

Obecně mohou nabývat kvantová čísla S a M_s hodnot

$$S = \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} - 2, \dots, \begin{cases} 0 & (N \text{ sudé}) \\ 1/2 & (N \text{ liché}) \end{cases} \tag{3.643}$$

$M_s = S, S - 1, \dots, -S$.

Protože hermitovské operátory \hat{S}^2 a \hat{S}_z spolu komutují, mají společný systém vlastních vektorů označených $|S, M_s\rangle$, přičemž

$$\begin{aligned} S^2 |S, M_s\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |S, M_s\rangle, \\ \hat{S}_z |S, M_s\rangle &= \hbar M_s |S, M_s\rangle. \end{aligned} \quad (3.644)$$

Pro posunovací operátory \hat{S}_+ a \hat{S}_- platí zcela v analogii s (3.619) rovnost

$$\hat{S}_\pm |S, M_s\rangle = \hbar \sqrt{(S \mp M_s)(S \pm M_s + 1)} |S, M_s \pm 1\rangle. \quad (3.645)$$

Z libovolné funkce $|N, S, M_s; k\rangle$ lze tedy pomocí posunovacích operátorů konstruovat s použitím (3.645) všechny ostatní funkce příslušející různým hodnotám M_s při pevných N, S, k .

V tabulce () uvádíme tvar ortonormálních spinových funkcí pro $N = 1$ až 4.

Příklad:

$$\hat{S}_- \left| 3, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hbar \left| 3, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hat{S}_- \frac{(\alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha)}{\sqrt{2}}. \quad (3.646)$$

Posunovací operátory pro spin jsou reprezentovány maticemi

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.647)$$

(viz též (3.165)), pro jejichž působení na spinové funkce α a β tak dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{s}_+\alpha &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, & \hat{s}_+\beta &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\alpha, \\ \hat{s}_-\alpha &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\beta, & \hat{s}_-\beta &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{0}.\end{aligned}\tag{3.648}$$

Máme tedy výsledek

$$\hat{S}_- \left| 3, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hbar \left| 3, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hat{S}_- \frac{(\alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha)}{\sqrt{2}} = \hbar \frac{(\alpha\beta\beta - \beta\alpha\beta)}{\sqrt{2}}.\tag{3.649}$$

Počet možných spinových stavů pro různá N, S je určen vztahem

$$d(N, S) = \binom{N}{\frac{N}{2} - S} - \binom{N}{\frac{N}{2} - S - 1} = \frac{(2S+1)N!}{\left(\frac{N}{2} + S + 1\right)! \left(\frac{N}{2} - S\right)!}.\tag{3.650}$$

Tab. 3.10 : Ortonormované N -elektronové spinové funkce pro $M_s = S$ a $N = 1 - 4$.

V tabulce je použita stručná notace, kdy např. namísto $[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]\alpha(3)$ píšeme $(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha$.

N	S	k	Funkce
1	1/2	1	α
2	1	1	$\alpha\alpha$
	0	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$
3	3/2	1	$\alpha\alpha\alpha$
	1/2	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha/\sqrt{2}$
		2	$(\beta\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha - 2\alpha\alpha\beta)/\sqrt{6}$
4	2	1	$\alpha\alpha\alpha\alpha$
	1	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha\alpha/\sqrt{2}$
	0	1	$(\beta\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha - 2\alpha\alpha\beta)\alpha/\sqrt{6}$
		2	$(\beta\alpha\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha\alpha + \alpha\alpha\beta\alpha - 3\alpha\alpha\alpha\beta)/\sqrt{12}$
		3	$(\alpha\beta - \beta\alpha)^2/2$
4		$(2\alpha\alpha\beta\beta + 2\beta\beta\alpha\alpha - \alpha\beta\alpha\beta - \beta\alpha\beta\alpha - \alpha\beta\beta\alpha - \beta\alpha\alpha\beta)/\sqrt{12}$	

Příklad:

Mějme 2 částice se spinem 1/2. Možná uspořádání jsou

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 1\rangle,$$

$$|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, -1\rangle,$$

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 0\rangle,$$

$$|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 0\rangle.$$

(3.651)

Z principu nerozlišitelnosti však nelze poslední 2 konfigurace uvažovat odděleně – fyzikální smysl má jediné jejich lineární kombinace, tj.

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |1,0\rangle, \quad (3.652)$$

která je výsledkem působení operátoru

$$\hat{L}_- |1,1\rangle = (\hat{L}_-^{(1)} + \hat{L}_-^{(2)}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (3.653)$$

Snížíme-li S o 1, dostaneme analogicky

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |0,0\rangle, \quad (3.654)$$

(3.652) a (3.654) jsou vzájemně ortogonální, první odpovídá symetrické vlnové funkci a tvoří triplet, druhá pak antisymetrické vlnové funkci a tvoří singlet.

Diracova identita

Uvažujme dva elektrony 1, 2 a skalární součin příslušných spinových operátorů

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = s_x(1)s_x(2) + s_y(1)s_y(2) + s_z(1)s_z(2) \quad (3.655)$$

definovaný na čtyřdimenzionálním prostoruspinových funkcí

$$\{\eta = \eta(\zeta_1, \zeta_2) \equiv \eta(1,2)\}. \quad (3.656)$$

Jako bázi tohoto prostoru volíme

$$\alpha(1)\alpha(2), \quad \alpha(1)\beta(2), \quad \beta(1)\alpha(2), \quad \beta(1)\beta(2). \quad (3.657)$$

Operátor $\hat{s}(1)\hat{s}(2)$ můžeme vyjádřit s použitím vztahů

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-), \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-) \quad (3.658)$$

ve tvaru

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = \frac{1}{2}[s_+(1)s_-(2) + s_-(1)s_+(2)] + s_z(1)s_z(2). \quad (3.659)$$

Tento operátor působí na dvouelektronové funkce (3.657) způsobem

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2)\eta(1,2) = \hbar^2 \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{12}^\zeta - \frac{1}{4} \right) \eta(1,2) \quad (3.660)$$

kde \hat{P}_{12}^ζ je operátor transpozice spinových proměnných ζ_1, ζ_2 .

Rozepsána do složek, vypadá formule (3.660) následovně:

$$\begin{aligned} \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\alpha(1)\alpha(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2\alpha(1)\alpha(2), \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\alpha(1)\beta(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2[2\beta(1)\alpha(2) - \alpha(1)\beta(2)], \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\beta(1)\alpha(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2[2\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\beta(1)\beta(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2\beta(1)\beta(2). \end{aligned} \quad (3.661)$$

Z (3.660) přímo plyne tzv. **Diracova identita**

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = \hbar^2 \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{12}^\zeta - \frac{1}{4} \right). \quad (3.662)$$

Ukažme si některé možnosti jejího využití: pro operátor \hat{S}^2 z Diracovy identity dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \sum_{i,j} \hat{s}(i)\hat{s}(j) = \sum_i \hat{s}(i)\hat{s}(i) + 2\sum_{i<j} \hat{s}(i)\hat{s}(j) = \\ &= \sum_i \hat{s}^2(i) + 2\hbar^2 \sum_{i<j} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{1}{4} \right) = \\ &= \frac{3}{4} N\hbar^2 + 2\hbar^2 \sum_{i<j} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{1}{4} \right) = \hbar^2 \left[\sum_{i<j} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{N(N-4)}{4} \right].\end{aligned}\quad (3.663)$$

Pro operátor \hat{S}^2 definujeme projektor

$$\hat{O}_s = \prod_{s' \neq s} \frac{S^2 - \hbar^2 S'(S'+1)}{\hbar^2 [S(S+1) - S'(S'+1)]} \quad (3.664)$$

kde S označuje vlastní hodnotu, které přísluší vlnová funkce, již hodláme vyprojektovat. Pro případ dvouelektronového systému. Možné hodnoty kvantového čísla S jsou, jak víme 0 (singletní stav) a 1 (triplexní stav). S použitím Diracovy identity pro $N = 2$ můžeme konstruovat projektory pro oba tyto stavy

$$\hat{O}_0 = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{12}^\zeta), \quad \hat{O}_1 = \frac{1}{2}(1 + \hat{P}_{12}^\zeta). \quad (3.665)$$

Působíme-li jimi na všechny funkce báze (3.657) dvouelektronových spinových funkcí, dostáváme čtyři nenulové funkce. Jejich normovaný tvar je

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], & S = M_S = 0, \\
& \alpha(1)\alpha(2), & S = 1, M_S = 1, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], & S = 1, M_S = 0, \\
& \beta(1)\beta(2), & S = 1, M_S = -1.
\end{aligned}
\tag{3.666}$$

Spinorbitální interakce



Friedrich Hermann Hund (1896 – 1997)



Alfred Landé (1888 – 1976)

I když různé elektrony ve složitém atomu navzájem interagují, lze mnoho z atomové struktury pochopit tak, že uvažujeme každý elektron zvlášť, jako kdyby byl v konstantním zprůměrovaném poli, kterým je elektrické pole jaderného náboje Ze , zmenšené o stínící efekt ostatních elektronů, které se nalézají blíže jádru. Všechny elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem n se nalézají zhruba ve stejné střední vzdálenosti od jádra. Tyto elektrony tudíž interagují v podstatě se stejným elektrickým polem a mají podobné energie. O souboru elektronů charakterizovaném stejným n hovoříme jako o atomové **slupce**. Jednotlivé slupky označujeme velkými písmeny podle schématu

$$\begin{array}{cccccc}
 n=1 & n=2 & n=3 & n=4 & n=5 & \dots \\
 K & L & M & N & O & \dots
 \end{array} \quad (3.667)$$

Energie elektronu v určité slupce jemně závisí rovněž na jeho orbitálním kvantovém čísle l , ačkoliv tato závislost je mnohem slabší, než je závislost na n . Ve složitých atomech se pro daný elektron mění stupeň odstínění celého náboje jádramezilehlými slupkami závislosti na rozdělení pravděpodobnosti výskytu tohoto elektronu. Je-li l velké, má toto rozdělení zhruba kruhové obrysy, kdežto při malém l jsou obrysy eliptické. Elektron s malým l se tedy spíše nalézá poblíž jádra, kde je jen slabě stíněn ostatními elektrony, což má za následek jeho nižší celkovou energii a tedy vyšší energii vazebnou. Energie elektronů v každé slupce podle toho roste přímo úměrně l .

Elektrony, které sdílejí ve slupce totéž kvantové číslo l , tvoří jednu **podslupku**. Každá podslupka je určena svým hlavním kvantovým číslem n , za nímž následuje písmeno charakterizující orbitální kvantové číslo l podslupky. Horní index pak označuje počet elektronů v dané podslupce. Např. elektronovou konfiguraci sodíku bychom zapsali

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \quad (3.338)$$

což znamená, že podslupky $1s$ ($n = 1, l = 0$) a $2s$ ($n = 2, l = 0$) obsahují po 2 elektronech, podslupka $2p$ ($n = 2, l = 1$) obsahuje šest elektronů a podslupka $3s$ ($n = 3, l = 0$) jeden elektron.

Všechny elektrony v jedné podslupce mají velmi blízkou energii, neboť závislost energie elektronu na m_l a m_s je již velmi slabá. Původ této závislosti vysvětluje tzv. **spinorbitální interakce**, o níž budeme hovořit v této kapitole.

a) Russelova – Saundersova vazba a jemná struktura

vzhledem k současnému kvantování **J**, **L** a **S** mohou mít tyto vektory jen zcela určité vzájemné orientace. V případě jednoelektronového atomu jsou možné jen dvě orientace – první odpovídá $j = l + s$, takže $J > L$, druhá pak $j = l - s$, takže $J < L$. Obrázek 3.38 znázorňuje oba způsoby, jimiž se mohou vektory **L** a **S** skládat na **J** při $l = 1$.



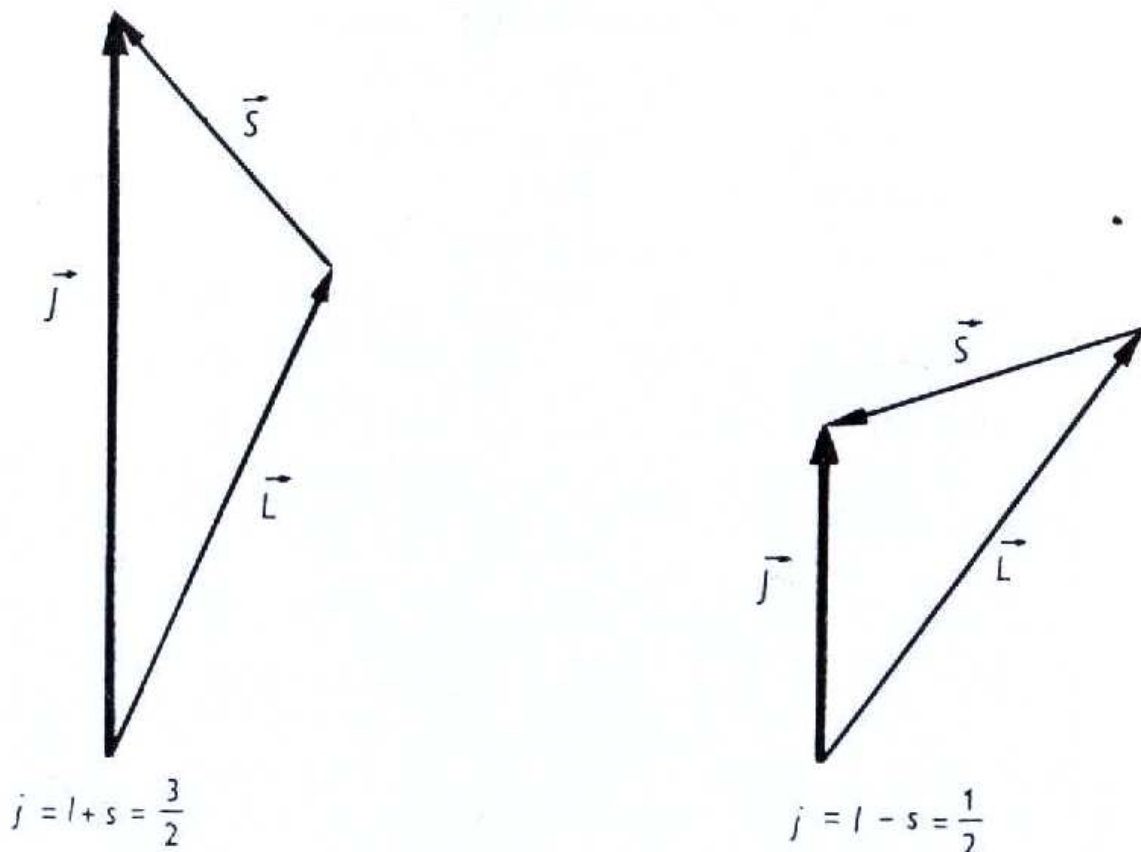
Henry Norris Russell, (1877 – 1957)



Frederick Albert Saunders (1875 – 1963)

Vektory orbitálního a spinového momentu hybnosti zřejmě nemohou být nikdy přesně paralelní či antiparalelní navzájem, ani s vektorem celkového impulsmomentu.

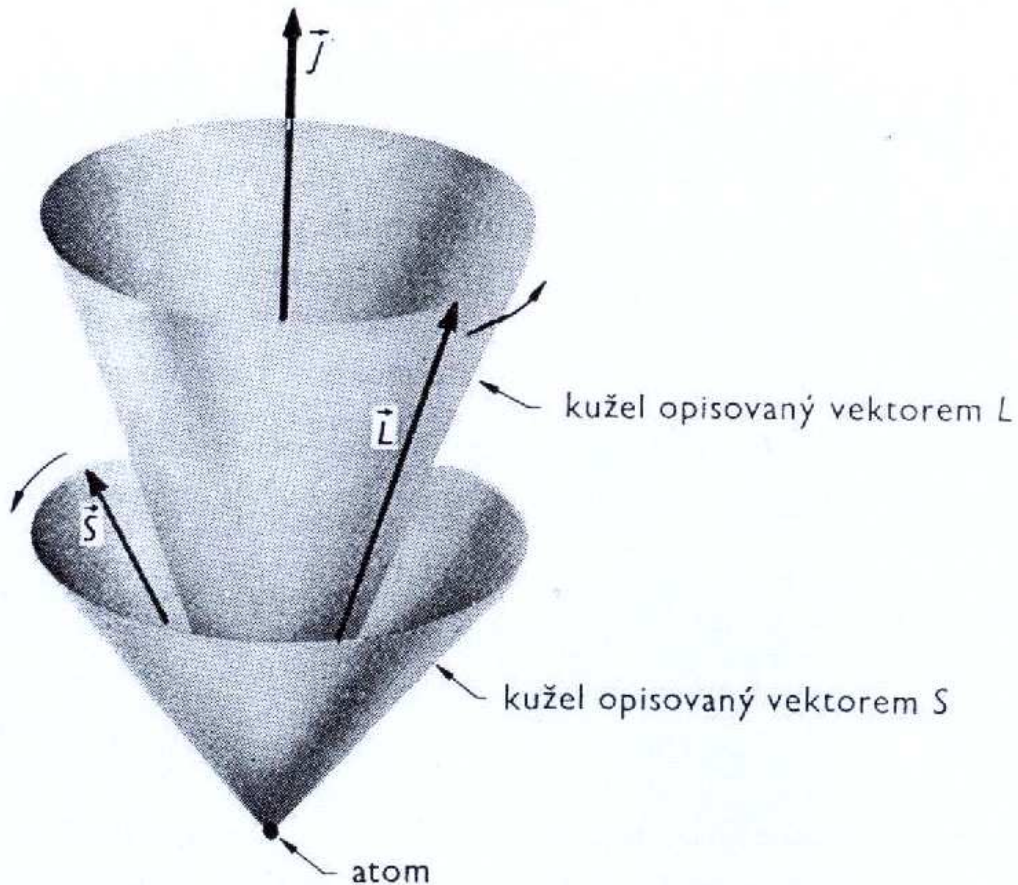
Obr. 3.38



Momenty \mathbf{L} a \mathbf{S} spolu interagují magneticky, následkem čehož na sebe působí magnetickými momenty. Bez přítomnosti vnějšího

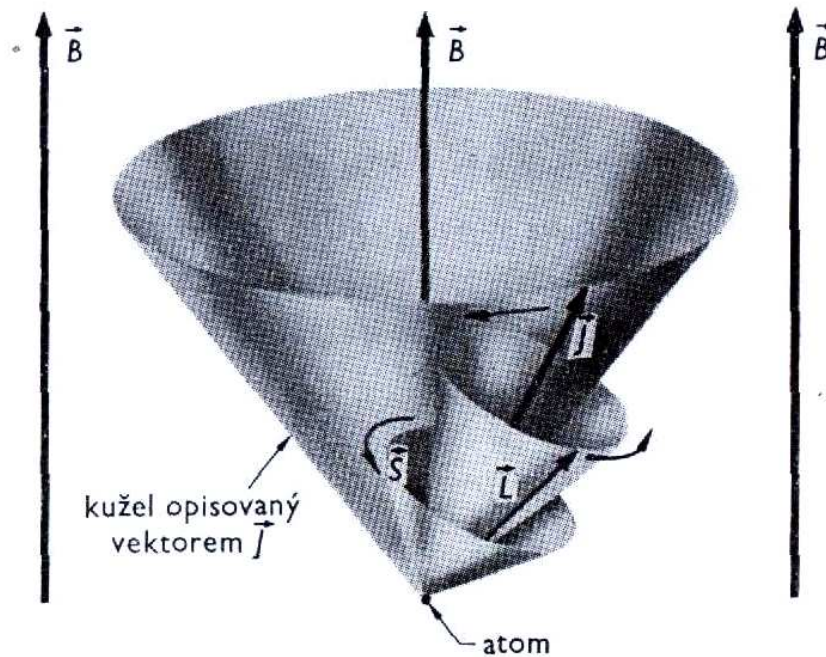
magnetického pole se zachovává celkový impulsmoment \mathbf{J} a účinek vnitřních momentů se může projevit pouze jako precese vektorů \mathbf{L} a \mathbf{S} kolem jejich výslednice \mathbf{J} .

Obr. 3.39



Za přítomnosti magnetického pole \mathbf{B} však \mathbf{J} vykonává precesi kolem vektoru \mathbf{B} , zatímco \mathbf{L} a \mathbf{S} pokračují v precesi okolo \mathbf{J} , jak je vidět na obrázku 3.40.

Obr. 3.40



Z obrázku 3.38 použitím kosinové věty plyne pro úhel mezi vektory \mathbf{L} a \mathbf{S} vztah

$$j(j+1) = l(l+1) + s(s+1) + 2\sqrt{l(l+1)s(s+1)} \cos \vartheta, \quad (3.669)$$

neboli

$$\cos \vartheta = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}}. \quad (3.670)$$

Ze vztahů (++) , (--) a z identity

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (3.671)$$

jednoduše plyne vztah mezi magnetickými momenty $\boldsymbol{\mu}^J$, $\boldsymbol{\mu}^L$ a $\boldsymbol{\mu}^S$

$$\boldsymbol{\mu}^J = \boldsymbol{\mu}^L + \boldsymbol{\mu}^S = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}). \quad (3.672)$$

Vztah pro magnetický moment atomu, v němž působí LS -vazba lze potom vyjádřit ve tvaru

$$\boldsymbol{\mu}^J = \frac{\mu_B g_J}{\hbar} \mathbf{J} \quad (3.673)$$

neboli, pro jeho velikost

$$\mu^J = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}, \quad (3.674)$$

kde g_J je tzv. **Landého faktor**, jež bude nyní naším úkolem určit. Vynásobíme proto rovnici (3.672) skalárně \mathbf{J} a s pomocí (3.673) obdržíme

$$g_J J^2 = [\mathbf{LJ} + 2\mathbf{SJ}]. \quad (3.675)$$

Protože

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 &= |\mathbf{J} - \mathbf{L}| = J^2 + L^2 - 2\mathbf{LJ}, \\ \mathbf{L}^2 &= |\mathbf{J} - \mathbf{S}| = J^2 + S^2 - 2\mathbf{SJ}, \end{aligned} \quad (3.676)$$

můžeme (3.675) přepsat do tvaru

$$g_J J^2 = \frac{1}{2} J^2 + \frac{1}{2} L^2 + \frac{1}{2} S^2 + J^2 + S^2 - L^2 = \frac{1}{2} (3J^2 + S^2 - L^2) \quad (3.677)$$

neboli

$$g_J = \frac{1}{2J^2} (3J^2 + S^2 - L^2) = 1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} = \frac{1}{2} \left(3 + \frac{S^2 - L^2}{J^2} \right). \quad (3.678)$$

Dosazením za velikost jednotlivých impulsmomentů tak dostáváme

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \frac{1}{2} \left(3 + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \right), \quad (3.679)$$

kde druhý člen v závorce může nabývat hodnot od -1 ($J = L$) do $+1$ ($J = S$). Landého faktor atomu tak nabývá hodnot z intervalu $\langle 1, 2 \rangle$.

Pro krajní případy nulového spinu resp. Nulového orbitálního momentu dostáváme normální ($g_J = 1$), resp. anomální ($g_J = 2$) hodnotu gyromagnetického poměru.

Právě možnost různých orientací vektoru \mathbf{J} vzhledem k \mathbf{B} dává vzniknout tzv. anomálnímu Zemanovu jevu, neboť různé vzájemné orientace znamenají i různé energie.

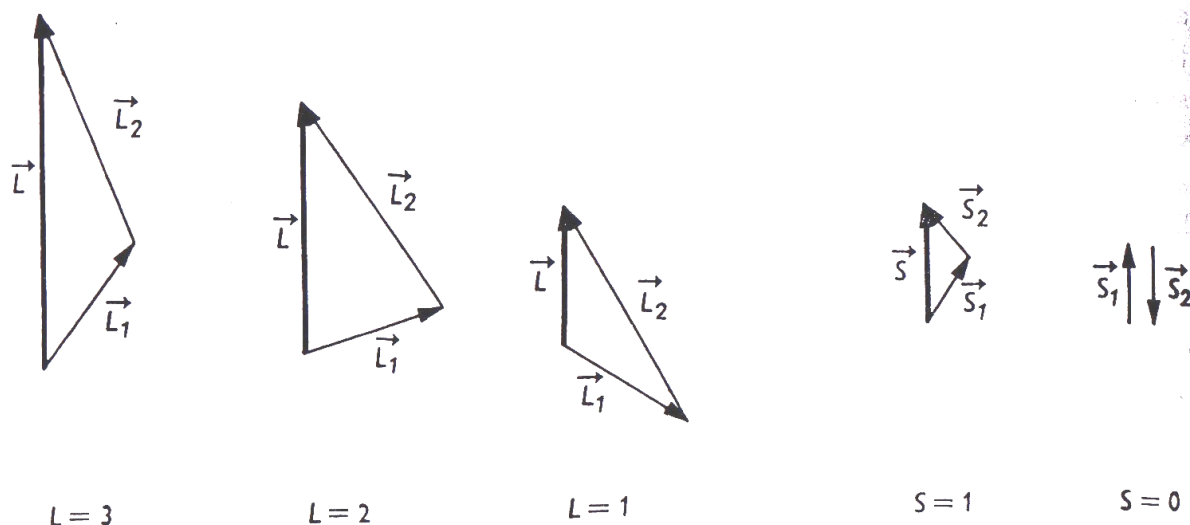
Přispívá-li k celkovému impulsmomentu \mathbf{J} atomu svými orbitálními a spinovými impulsmomenty více elektronů, je výslednice \mathbf{J} stále vektorovým součtem těchto impulsmomentů. Jelikož uvažované elektrony navzájem interagují, skládají se jejich jednotlivé impulsmomenty \mathbf{L}_i a \mathbf{S}_i na výsledný vektor \mathbf{J} vždy podle určitého schématu v závislosti na daných okolnostech.

S výjimkou nejtěžších atomů je obvyklé schéma takové, že orbitální impulsmomenty \mathbf{L}_i různých elektronů jsou elektrostaticky bspřázeny do jediné výslednice \mathbf{L} a obdobně spiny \mathbf{S}_i se nezávisle skládají do jiné jediné výslednice \mathbf{S} . Impulsmomenty \mathbf{L} a \mathbf{S} pak interagují magneticky přes spinorbitální vazbu a vytvářejí celkový impulsmoment $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Jako obvykle jsou L , S , J , L_z , S_z , J_z kvantované, s odpovídajícími kvantovými čísly L , S , J , M_L , M_S , M_J .

L a M_L jsou vždy celočíselné, kdežto ostatní kvantová čísla jsou celočíselná pouze je-li počet uvažovaných elektronů sudý. V ostatních případech jsou tato čísla poločíselná.

Jako příklad uvažujme dva elektrony, jeden s $l_1 = 1$ a druhý s $l_2 = 2$. Existují 3 možnosti, jak složit \mathbf{L}_1 a \mathbf{L}_2 na jediný vektor \mathbf{L} tak, aby byl kvantovaný jako $L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$, viz obrázek 3.41.

Obr. 3.41



Tyto možnosti odpovídají $L = 1, 2, 3$, neboť jsou možné všechny hodnoty L od $l_1 - l_2$ až do $l_1 + l_2$.

Spinové kvantové číslo je vždycky $s = 1/2$, takže pro součet $\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ existují 2 možnosti odpovídající $S = 0$ a $S = 1$.

Poznamenejme, že \mathbf{L}_1 a \mathbf{L}_2 nemohou být nikdy přesně rovnoběžné s \mathbf{L} , stejně, jako nemohou být \mathbf{S}_1 a \mathbf{S}_2 rovnoběžné s \mathbf{S} , vyjma případu, kdy se vektorový součet rovná nule.

Kvantové číslo J může tedy nabývat všech hodnot mezi $L - S$ a $L + S$, což v tomto případě znamená, že $J = 1, 2, 3, 4$.

Při výpočtu možných hodnot L , S a J pro mnohaelektronový atom je třeba mít vždy na paměti, že Pauliho princip omezuje soubor možných kvantových čísel elektronů. Kdybychom měli např. 2 elektrony $l_1 = l_2 = 1$ se stejným hlavním kvantovým číslem n , dostali bychom tyto možné hodnoty $L = 0, 1, 2$, $S = 0, 1$, $J = 0, 1, 2, 3$. Například stav s $L = 2$ a $S = 1$ a tedy hodnotou $J = 3$ však Pauliho princip vylučuje, neboť se jedná o stav s $n_1 = n_2$, $l_1 = l_2$, $s_1 = s_2$, kde oba elektrony mají navíc stejná orbitální i spinová magnetická kvantová čísla. Postupným výčtem všech dovolených stavů bychom zjistili, že Pauliho princip redukuje v tomto případě počet možných stavů z 36 na pouhých 15.

b) Hundova a Landého pravidla

1) Plně obsazené slupky a podslupky nepřispívají do celkových momentů hybnosti L a celkových spinů S .

2) *Vazba mezi různými L_i je při stejné multiplicitě určené celkovým spinem taková, že konfigurace s nejnižší energií je ta, která má L maximální.*

Tuto skutečnost snadno pochopíme, představíme-li si 2 elektrony na téže orbitalu. Jelikož se elektrony navzájem elektrostaticky odpuzují, budou se přirozeně snažit obíhat jádro ve stejném směru, což dává maximální L . Kdyby obíhaly v navzájem opačných směrech, tj. s minimálním L , mýjely by se oba elektrony častěji a systém by měl větší energii.

3) *Impulsmomenty S_i ekvivalentních elektronů, tj. elektronů se stejnou hodnotou kvantových čísel n a l , se vždy skládají do konfigurace základního stavu, v němž je S maximální.*

Původ třetího Hundova pravidla spočívá ve vzájemném odpuzování atomových elektronů. V důsledku tohoto odpuzování je energie atomu tím nižší, čím dále jsou od sebe jeho elektrony. Elektrony v jedné podslupce, jež mají souhlasně orientované spiny, musí mít různé hodnoty m_l a jsou tedy popsány vlnovými funkcemi s rozdílnou prostorovou distribucí. Elektrony s rovnoběžnými spiny jsou tudíž v prostoru více navzájem odděleny, než kdyby byly spárované. Toto uspořádání, které má menší energii je proto stabilnější.

4) *V normálním multipletu vede k nejnižší energii ta kombinace L a S , která dává nejnižší J .*

Normálním multipletem se míní takový stav, kterém je podslupka zaplněna méně než z poloviny. Čtvrté hundovo pravidlo vyplývá z existence L - S -vazby. Antiparalelní L a S , tj. stav s $J = L - S$, má nejnižší energii. Když je však podslupka téměř obsazena, máme tzv. **obrácený multiplet** nejnižše naopak leží stav $J = l + S$.

Je zřejmé, že stavy charakterizované ve slabé vazbě různými hodnotami kvantových čísel J , L , S budou mít odlišnou energii. Při stejných L a S je posunutí stavů úměrné $J(J + 1)$. Vzdálenost členů

multipletu jemné struktury s hodnotami kvantového čísla J a $J + 1$ bude dána

$$E_{J+1} - E_J = \frac{k}{2} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] = k(J+1), \quad (3.680)$$

kde k je konstanta. Vzdálenost dvou členů multipletu je tedy úměrná větší z hodnot čísla J , připsaných těmto stavům. Uvedená zákonitost se nazývá **Landého pravidlo**.

c) hyperjemná struktura

Ve vztažné soustavě elektronu se kolem klidného elektronu pohybuje atomové jádro, čímž v této soustavě vzniká magnetické pole působící na vlastní spinový magnetický moment μ_s elektronu. Elektron je ovlivňován podobně jako v případě Zeemanova efektu. Na rozdíl od Zeemanova efektu, který vyžaduje působení vnějšího magnetického pole, je spinorbitální interakce závislá pouze na vnitřních vlastnostech daného atomu.

Klasická teorie říká, že proudová smyčka protékaná proudem i , má ve svém středu magnetické pole o indukci

$$B = \frac{\mu_0 i}{2r}, \quad (3.681)$$

kde μ_0 je permitivita vakua. Orbitální elektron v atomu vodíku pozoruje, jak jej f -krát za sekundu obíhá proton s nábojem $+e$. Proto na elektron působí magnetické pole s indukcí

$$B = \frac{\mu_0 f e}{2r}. \quad (3.682)$$

Dostředivou silou, udržující elektron na dráze ve vzdálenosti r od jádra je elektrostatická síla, takže platí

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}, \quad (3.683)$$

odkud pro rychlost pohybu elektronu máme

$$v = \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}}. \quad (3.684)$$

Pro hledanou frekvenci f odtud plyne

$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{e}{2\pi\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}}. \quad (3.685)$$

Obvod kruhové dráhy o poloměru r je $2\pi r$, a tak podmínka pro stabilitu dráhy zní

$$n\lambda = 2\pi r, \quad (3.686)$$

kde n je hlavní kvantové číslo.

Dosazením vlnové délky elektronu za λ

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m_e}} \quad (3.687)$$

dává podmínku

$$\frac{nh}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m_e}} = 2\pi r, \quad (3.688)$$

odkud

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2}. \quad (3.689)$$

Dosažením do (3.685) dostáváme pro frekvenci pohybu elektronu v atomu vodíku vztah

$$f = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad (3.690)$$

Pro atom vodíku v základním stavu ($n = 1$) vychází přibližně $f \approx 6,5 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $r \approx 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, takže $B \approx 12,5 \text{ T}$. Magnetická energie takového elektronu je tedy rovna

$$U_m = \mu_B B \approx 10^{-22} \text{ J}. \quad (3.691)$$

Této energii odpovídá změna frekvence

$$\Delta f = \frac{U_m}{h} \approx 175 \text{ GHz}. \quad (3.692)$$

To je ovšem o 2 řády více, než skutečně pozorovaná frekvence hyperjemného štěpení hladin základního stavu atomu vodíku $f = 1,4204057518 \text{ GHz}$. Poloklasická Bohrova teorie atomu vodíku v tomto případě tedy selhává a je potřeba k celému problému přistoupit důsledněji kvantově.

Spinu jádra \mathbf{I} odpovídá magnetický moment $\boldsymbol{\mu}_I$, který je se spinem svázán obdobným vztahem (3.673) jako v případě elektronů

$$\boldsymbol{\mu}_I = \gamma \mathbf{I} = \frac{g \mu_N}{\hbar} \mathbf{I}, \quad (3.693)$$

kde g je Landého faktor pro jádro a μ_N je tzv. **jaderný magneton** zavedený vztahem

$$\mu_N = \mu_B \frac{m_e}{m_p} = \frac{e\hbar}{2m_p}. \quad (3.694)$$

Magnetický moment jádra je zdrojem poruchy, neboť interaguje s magnetickým polem tvořeným kolektivním proudem elektronů v obalu. Tato porucha štěpí dosud uvažovanou strukturu energetických hladin elektronů. Odpovídající magnetickou energii interakce mezi jádrem a magnetickým polem elektronů můžeme tedy zapsat jako

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu}^I \mathbf{B}, \quad (3.695)$$

kde \mathbf{B} je kolektivní magnetické pole buzené v místě jádra (v počátku) proudem generovaným spinovou magnetizací

$$\mathbf{j} = \nabla \times \mathbf{M} = \nabla \times -\mu_B \langle \boldsymbol{\sigma} | \boldsymbol{\psi} \rangle. \quad (3.696)$$

Vlnová funkce $\boldsymbol{\psi}$ je dvoukomponentová vlnová funkce Pauliho teorie Kvantověmechanická hustota proudu (3.696) budí v počátku magnetické pole , jehož střední hodnotu vypočteme pomocí Biotova – Savartova zákona

$$\langle \mathbf{B} \rangle = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})}{r^3} d^3 r. \quad (3.697)$$

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku vystupující v (3.696) je součinem s -funkce

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right), \quad (3.698)$$

kde a_B je Bohrov poloměr daný vztahem (3.231) při $n = 1$, a funkce η popisující spinový stav elektronu.

Proudovou hustotu (3.696) pak můžeme přepsat do tvaru

$$\mathbf{j} = -\mu_B \nabla \rho \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (3.699)$$

kde

$$\rho = \psi_{100}^2(\mathbf{r}). \quad (3.700)$$

Pro rozbití dvojného vektorového součinu v (3.697) použijeme identitu

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (3.701)$$

neboli

$$\mathbf{r} \times (\nabla \rho \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle) = \nabla \rho (\mathbf{r} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle) - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle (\mathbf{r} \cdot \nabla \rho). \quad (3.702)$$

Dosazením do (3.697) nacházíme

$$\langle \mathbf{B}_i \rangle = -\frac{\mu_0 \mu_B}{4\pi} \left(\int \frac{1}{r^3} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \sum_{j=1}^3 x_j \langle \sigma_j \rangle d^3 r - \int \frac{\langle \sigma_j \rangle}{r^3} \sum_{j=1}^3 x_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} d^3 r \right). \quad (3.703)$$

Vzhledem k tomu, že dle (3.698) nezávisí ψ_{100} na úhlech, je

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_j} = \frac{d\rho}{dr} \frac{x_j}{r} \quad (3.704)$$

a oba integrály v (3.703) jsou typu

$$I_{jk} = \int \frac{1}{r^4} \frac{d\rho}{dr} x_j x_k d^3 r.$$

Pro $j \neq k$ dá zjevně úhlová integrace nulu a ze symetrie dále plyne, že $I_{11} = I_{22} = I_{33} = I$. Je tedy

$$I = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 I_{ij} = \frac{1}{3} \int \frac{d\rho}{dr} \frac{\sum x_j^2}{r^4} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{d\rho}{dr} dr = -\frac{4\pi}{3} \rho(0), \quad (3.705)$$

neboť $\rho(\infty) = 0$.

Dosazením do (3.703) obdržíme

$$\langle \mathbf{B}_i \rangle = -\frac{\mu_0 \mu_B}{4\pi} (\langle \sigma_i \rangle I - \langle \sigma_i \rangle 3I) = -\frac{2}{3} \mu_0 \mu_B \rho(0) \langle \sigma_i \rangle \quad (3.706)$$

neboli operátorově

$$\hat{\mathbf{B}} = -\frac{2}{3} \mu_0 \mu_B \delta(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.707)$$

kde $\delta(\mathbf{r})$ je Diracova funkce.

Interakční hamiltonián má tedy podle (3.695) tvar

$$\hat{\mathbf{H}} = -\boldsymbol{\mu}' \hat{\mathbf{B}} = \frac{4}{3} \frac{\mu_0 \mu_B \mu_N}{\hbar^2} g \delta(\mathbf{r}) \mathbf{I} \mathbf{S} = \xi(\mathbf{r}) \mathbf{I} \mathbf{S} = \xi(\mathbf{r}) \mathbf{I} \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.708)$$

Matici poruchy (11.14) zdiagonalizujeme přechodem k celkovému impulsmomentu atomu

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J} \quad (3.709)$$

který je určen kvantovými čísly F a m_F

$$F^2 = \hbar^2 F(F+1), \quad F_z = \hbar m_F. \quad (3.710)$$

Umocněním definice (3.709) dostaneme

$$F^2 = (\mathbf{I} + \mathbf{J})(\mathbf{I} + \mathbf{J}) = \mathbf{I}^2 + \mathbf{J}^2 + 2\mathbf{I}\mathbf{J}, \quad (3.711)$$

odkud plyne identita

$$\mathbf{IJ} = \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{J}^2) = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]. \quad (3.712)$$

Pro námi uvažovanou interakci $\mathbf{I}\cdot\mathbf{S}$, se vztah (3.712) redukuje na tvar

$$\mathbf{IS} = \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)]. \quad (3.713)$$

Komposicí spinů $s = 1/2$ a $i = 1/2$ vznikne celkový spin $f = 1, 0$, přičemž triplexní stav je dán jako

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &= |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j, \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j), \\ |1,-1\rangle &= |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j \end{aligned} \quad (3.714)$$

a singletní stav jako

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j). \quad (3.715)$$

Pro celkovou energii tripletního a singletního stavu ze vztahů (3.708) a (3.713) dostáváme

$$E_t = \hbar^2 \langle \xi \rangle \frac{1}{2} \left[2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \frac{\langle \xi \rangle}{4} \hbar^2, \quad (3.716)$$

$$E_s = \hbar^2 \langle \xi \rangle \frac{1}{2} \left[0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = -\frac{3}{4} \langle \xi \rangle \hbar^2.$$

hledaná hodnota ΔE se tedy rovná

$$\Delta E = E_t - E_s = \langle \xi \rangle \hbar^2. \quad (3.717)$$

Při přechodu mezi hladinami E_t a E_s se vyzáří foton o frekvenci

$$\nu = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = \frac{\langle \xi \rangle \hbar}{2\pi} [\text{Hz}]. \quad (3.718)$$

Dosazením za $\langle \xi \rangle$ z (3.708) máme

$$\langle \xi \rangle = \frac{4}{3} \frac{\mu_0 \mu_B \mu_N}{\hbar^2} g \psi_{100}^2(0). \quad (3.719)$$

S uvážením, že pro jádro vodíku (proton) je $I = 1/2$ a experimentálně stanovená hodnota jeho jaderného magnetického momentu činí $\mu^I = 2,79$, nalézáme snadno s pomocí vztahu (3.693) hodnotu jaderného faktoru $g \approx 5,585$.

Odtud pro hledanou hodnotu hyperjemného štěpení nalézáme

$$\nu \approx 1,42 \text{ GHz} \quad (3.720)$$

ve vynikající shodě s experimentálně stanovenou hodnotou. Dalšího zpřesnění výsledku je možno dosáhnout jedině v rámci relativistické kvantové teorie při respektování konečného rozměru protonu i jeho vnitřní struktury, zahrnutí zpětného rázu při vyzáření fotonu, radiačních korekcí souvisejících s kvantovou teorií pole a dalších efektů.

Závěrem poznamenejme, že studovaný přechod se odehrává mezi stavy s různým spinem a nejde tedy o elektrické dipólové záření ale o magnetické dipólové záření. Rozpad má poločas 11 milionů let.

d) j-j-vazba

Elektrostatické síly, jež svazují všechna \mathbf{L}_i do jediného vektoru \mathbf{L} a všechna \mathbf{S}_i do jediného vektoru \mathbf{S} jsou u lehkých atomů větší než magnetické spinorbitální síly vytvářející vazbou \mathbf{L} a \mathbf{S} vektor \mathbf{J} a převládají i za přítomnosti nevelkého vnějšího magnetického pole. V těžkých atomech je však náboj jádra dostatečně velký, aby vytvářel

spinorbitální interakce co do velikosti srovnatelné s elektrostatickou interakcí mezi \mathbf{L}_i a \mathbf{S}_i . Schéma L - S -vazby se hroutí a v limitě, kdy L - S -vazba přestává úplně existovat, se celkové impulsmomenty \mathbf{J}_i jednotlivých elektronů skládají přímo do impulsmomentu \mathbf{J} celého atomu. Toto schéma se nazývá j - j -vazba, neboť každé \mathbf{J}_i je popsáno kvantovým číslem j . Platí tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i, \\ \mathbf{J} &= \sum_i \mathbf{J}_i. \end{aligned} \quad (3.721)$$

K označení celkových elektronových stavů stomu podle kvantového čísla L jeho celkového orbitálního impulsmomentu se používá stejná notace, jako u atomových poslupek, pouze za použití velkých písmen namísto malých:

$$\begin{array}{cccccccc} L=0 & L=1 & L=2 & L=3 & L=4 & L=5 & L=6 & \dots \\ S & P & D & F & G & H & I & \dots \end{array} \quad (3.722)$$

Horní index před písmenem (např. 2P) udává multiplicitu stavu, neboli počet různých možných orientací \mathbf{L} a \mathbf{S} a tedy počet různých možných hodnot J . V obvyklém případě, kdy $L > S$, je multiplicita rovna $2S + 1$, neboť J se pohybuje v rozmezí hodnot $L - S, \dots, 0, \dots, L + S$. Pro několik vybraných hodnot S je multiplicita stavů přehledně vysvětlena v tabulce 3.11.

Tab. 3.11

S	J	Multiplicita
0	L	1
1/2	$L + 1/2$	2
	$L - 1/2$	
1	$L + 1$	3
	L	
	$L - 1$	
\vdots	\vdots	\vdots

V konfiguraci, kde je naopak $S > L$ se zřejmě multiplicita rovná $2L + 1$.

Skupiny stavů takto označené písmenem s udanou multiplicitou se nazývají **termy**. Kvantové číslo J celkového impulsmomentu se pak píše coby dolní index za písmenem, takže např. dublet P tři poloviny (${}^2P_{3/2}$) odpovídá elektronové konfiguraci, kde $S = 1/2$, $L = 1$, $J = 3/2$. Pochází-li impulsmoment atomu od jediného vnějšího elektronu, uvádí se obvykle hlavní kvantové číslo n tohoto elektronu před takovým označením. Např. Základní stav atomu sodíku se píše $3^2S_{1/2}$, neboť obsahuje elektron s $n = 3$, $l = 0$, $s = 1/2$ a tedy $j = 1/2$ vně uzavřených slupek $n = 1$ a $n = 2$. Kvůli důslednosti se píše v tomto označení horní index 2 jako dublet, ačkoliv zde J může nabývat jen jediné hodnoty, neboť $L = 0$ (viz tab. 3.11).

Wignerův – Eckartův teorém



Eugene Paul Wigner (1902 – 1995)



Carl Henry Eckart (1902 – 1973)

Maticové elementy sférického tenzorového operátoru v bázi vlastních hodnot impulsmomentu jsou úměrné impulsmomentu s konstantou úměrnosti rovnou C-G-koeficientům.

$$\begin{aligned}
\langle J, J | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle &= C_{kqjm}^{JM} \frac{\langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle}{\sqrt{2J+1}} = \\
&= (-1)^{-j+k-M} \begin{pmatrix} j & k & J \\ m & q & -M \end{pmatrix} \langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle =, \quad (3.723) \\
&= (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & j \\ -M & q & m \end{pmatrix} \langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle.
\end{aligned}$$

kde $\hat{\mathbf{T}}_q^k$ je rank k sférického tenzoru $\hat{\mathbf{T}}^k$, kde výrazy nahrazující na pravé straně (3.723) C-G-koeficienty, se nazývají **Wignerovy 3j permutační symboly**

$$C_{m_1 m_2}^J = (j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M) = (-1)^{-j_1+j_2-M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \quad (3.724)$$

Wignerův – Eckartův teorém říká, že působením sférického tenzorového operátoru k -tého řádu na vlastní stav impulsmomentu je totéž, jako přičtení stavu s impulsmomentem k k původnímu stavu. Maticový element sférického tenzorového operátoru je úměrný C-G-koeficientu odpovídajícímu uvažovanému složenému impulsmomentu.

Uvažujme např. vlastní hodnotu polohy $\langle n, J, M | \hat{x} | n, j, m \rangle$. Tento maticový element vlastní hodnoty karteziánského operátoru ve sféricky symetrické bázi vlastních hodnot atomu vodíku představuje netriviální problém, který se zjednoduší právě použitím Wignerova – Eckartova teorému.

Víme, že x je komponentou vektoru \mathbf{r} . Vektor je tenzorem 1. řádu, takže x je lineární kombinací $\hat{\mathbf{T}}_q^1$ pro $q = -1, 0, 1$. Skutečně lze ukázat, že

$$x = \frac{\hat{\mathbf{T}}_{-1}^1 - \hat{\mathbf{T}}_1^1}{\sqrt{2}}, \quad (3.725)$$

kde jsme definovali sférický tenzor $\hat{\mathbf{T}}_0^1 = z$ a

$$\hat{\mathbf{T}}_{\pm 1}^1 = \mp \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}}. \quad (3.726)$$

Tedy

$$\langle n, J, M | x | n, j, m \rangle = \left(C_{jm11}^{JM} - C_{jm1(-1)}^{JM} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \langle n, J | \hat{\mathbf{T}}^1 | n, j \rangle. \quad (3.727)$$

Pro složky $\hat{\mathbf{T}}_i^k$ libovolného tenzorového operátoru $\hat{\mathbf{T}}^k$, kde $k = 0, 1, \dots$, $q = -k, \dots, k$ platí

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{T}}_q^k] &= \hbar k \hat{\mathbf{T}}_q^k, \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{\mathbf{T}}_q^k] &= \hbar \alpha^{\pm}(k, q) \hat{\mathbf{T}}_{q\pm 1}^k, \end{aligned} \quad (3.728)$$

kde

$$\alpha^{\pm}(k, q) \equiv \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}. \quad (3.729)$$

Máme tedy

$$\langle J, M | \hat{J}_z \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k \hat{J}_z | j, m \rangle = \hbar q \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle, \quad (3.730)$$

a

$$\begin{aligned} &\langle J, M | \hat{J}_{\pm} \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k \hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \\ &= \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_{q\pm 1}^k | j, m \rangle = \\ &= \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \mp 1)} \langle J, M \mp 1 | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \\ &- \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \pm 1 \rangle. \end{aligned} \quad (3.731)$$

Přímým dosazením do (3.728) se lze snadno přesvědčit, že

$$\begin{aligned} T_{-1}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{T}_x - i\hat{T}_y), \\ T_0^1 &= \hat{V}_x, \\ T_1^1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{T}_x + i\hat{T}_y). \end{aligned} \quad (3.732)$$

Z (3.723) dále plyne důležitý vztah

$$\langle J, M | \hat{\mathbf{T}} | j, m \rangle = \left\langle J, M \left| \frac{\hat{\mathbf{J}}(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{T}})}{\hat{\mathbf{J}}^2} \right| j, m \right\rangle. \quad (3.733)$$

Jako ilustraci jeho využití řešme následující úlohu. Uvažujme sstém složený ze dvou podsystémů. Máme určit střední hodnotu výsledků měření třetí komponenty impulsmomentu prvního podsystému provedených ve společném vlastním stavu kvadrátů impulsmomentů obou podsystémů a třetí komponenty a kvadrátu impulsmomentu celého systému.

Tato střední hodnota je podle (3.733) dána maticovým elementem

$$\langle j_1, j_2, J, M | \hat{\mathbf{J}}_z^{(1)} | j_1, j_2, J, M \rangle = \left\langle j_1, j_2, J, M \left| \frac{\hat{J}_z(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{J}}_1)}{\hat{\mathbf{J}}^2} \right| j_1, j_2, J, M \right\rangle. \quad (3.734)$$

Protože platí

$$\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{J}}_1 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{J}}_1^2 - \hat{\mathbf{J}}_2^2), \quad (3.735)$$

nalzáme pro hledanou střední hodnotu řešení

$$\langle j_1, j_2, J, M | \hat{J}_z^{(1)} | j_1, j_2, J, M \rangle = \frac{J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2J(J+1)}. \quad (3.736)$$

Docházíme tak k závěru, že diagonální maticové elementy tenzorového operátoru prvního řádu jsou úměrné impulsmomentu s konstantou úměrnosti g_J (Landého faktor).

Příklad: kvadrupólový moment jádra

Není-li rozložení jaderného náboje sféricky symetrické, závisí elektrostatická energie jádra na orientaci jádra vzhledem k elektrostatickému poli s potenciálem $\varphi(\mathbf{r})$. Pro energii interakce jádra s polem dostáváme

$$W = \int \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) dV, \quad (3.737)$$

kde $\rho(\mathbf{r})$ je hustota náboje. Provedeme rozvoj pole $\varphi(\mathbf{r})$ podle $\mathbf{r} = (0,0,0)$:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(0) + \sum_i \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_{r=0} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{r=0} x_i x_j + \dots, \quad (3.738)$$

pak první člen určuje energii bodového náboje, druhý člen energii elektrického dipólu. Jelikož ale vlnové funkce jader ve stacionárním stavu mají lichou paritu, vychází v tomto případě energie

$$W = \int x_i \rho(\mathbf{r}) dV = 0. \quad (3.739)$$

Třetí člen je první, který závisí na orientaci jádra vzhledem k φ . Jedná se o kvadrupólovou interakci, jejíž energie je

$$W_Q = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{r=0} \int x_i x_j \rho(\mathbf{r}) dV. \quad (3.740)$$

Označme

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.741)$$

a definujme **tenzor kvadrupólového momentu**

$$Q_{ij} = \int (3x_i x_j - \delta_{ij} r^2) \rho(\mathbf{r}) dV \quad (3.742)$$

odkud pro interakční energii kvadrupólové interakce máme

$$\begin{aligned} W_Q &= \frac{1}{6} \sum_{i,j} V_{ij} Q_{ij} + \frac{1}{6} \sum_{i,j} \left(V_{ij} \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 \delta_{ij} dV \right) = \\ &= \frac{1}{6} \left(\sum_{i,j} V_{ij} Q_{ij} + \sum_i V_{ii} \right) \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 dV, \end{aligned} \quad (3.743)$$

kde výraz $\int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 dV$ nezávisí na orientaci, takže dále budeme

pracovat pouze s částí, která na orientaci závisí.

Tenzor kvadrupólového momentu je rotačně symetrický tenzor 2. řádu s nulovou stopou. V systému jeho hlavních os platí

$$Q_{11} = Q_{22} = -\frac{1}{2} Q_{33}. \quad (3.744)$$

V_{ij} je symetrický tenzor, který lze diagonalizovat s nulovou stopou:

$$V'_{ij} = V_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \text{Tr } \mathbf{V} \Rightarrow \sum_i V'_{ii} = 0. \quad (3.745)$$

Naším cílem bude zapsat W_Q pomocí operátorů jaderného spinu.

Zavedem tenzorový operátor kvadrupólového momentu

$$\hat{Q}_{ij} = e \sum_k \left[\frac{3}{2} (\hat{x}_i^k \hat{x}_j^k + \hat{x}_j^k \hat{x}_i^k) - \delta_{ij} r_k^2 \right] \quad (3.746)$$

a tenzorový operátor jaderného spinu

$$\hat{S}_{ij} = \left[\frac{3}{2} (\hat{I}_i \hat{I}_j + \hat{I}_j \hat{I}_i) - \delta_{ij} |\hat{I}|^2 \right]. \quad (3.747)$$

Na základě analogie komutačních relací mezi \hat{x}_i a \hat{I}_i s \hat{I}_j :

	$T_m^2(\hat{\mathbf{I}})$	$T_m^2(\hat{\mathbf{r}})$
T_2^2	$(\hat{I}^+)^2$	$(x + iy)^2$
T_1^2	$-(\hat{I}_z I^+ + I^+ I_z)$	$-2\hat{z}(\hat{x} + i\hat{y})$
T_0^2	$\sqrt{\frac{3}{2}}(3\hat{I}_z - \hat{I}^2)$	$\sqrt{\frac{3}{2}}(3\hat{z} - \hat{z}^2)$
T_{-1}^2	$\hat{I}_z I^- + I^- I_z$	$2\hat{z}(\hat{x} - i\hat{y})$
T_{-2}^2	$(\hat{I}^-)^2$	$(x - iy)^2$

$$\begin{aligned} [\hat{I}_x, \hat{y}] &= i\hat{z}, \\ [\hat{I}_x, \hat{I}_y] &= i\hat{I}_z, \end{aligned} \quad (3.748)$$

z Wignerova – Eckartova teorému plyne, že operátory \hat{Q}_{ij} a \hat{S}_{ij} se dají sestavit z $T_m^2(\hat{\mathbf{I}})$ a $T_m^2(\hat{\mathbf{r}})$ analogickými kombinacemi. Maticové operátory $\hat{\mathbf{Q}}$ a $\hat{\mathbf{S}}$ mají pro dané I navzájem úměrné maticové elementy mezi stavy s různými m_I :

$$\langle I, m_I | \hat{Q}_{ij} | I, m'_I \rangle = C \langle I, m_I | \hat{S}_{ij} | I, m'_I \rangle, \quad (3.749)$$

kde C-G-koefficienty C nezávisí na m_I, m'_I .
Namísto (3.743) tedy můžeme psát

$$W_Q = \frac{1}{6} C \sum V_{ij} S_{ij}. \quad (3.750)$$

Označme

$$eQ = \langle I, I | \hat{Q}_{zz} | I, I \rangle = \int \rho(\mathbf{r}) (3z^2 - r^2) dV. \quad (3.751)$$

Z Wignerova – Eckartova teorému pak plyne

$$eQ = \langle I, I | 3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 | I, I \rangle = C (3I_z^2 - I(I+1)) = CI(2I-1) \quad (3.752)$$

a tedy

$$C = \frac{eQ}{I(2I-1)}. \quad (3.753)$$

Pro hamiltonián kvadrupólové interakce tak dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{W}_Q &= \frac{eQ}{6I(2I-1)} (\text{Tr } \mathbf{VS}) = \\ &= \frac{eQ}{6I(2I-1)} (V_{xx} (2I_x^2 - I^2) + V_{yy} (2I_y^2 - I^2) + V_{zz} (2I_z^2 - I^2)). \end{aligned} \quad (3.754)$$

Zavedeme parametr asymetrie

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (3.755)$$

odkud plyne

$$V_{xx} = \eta V_{zz} + V_{yy} = \frac{1}{2}(\eta - 1)V_{zz}, \quad (3.756)$$

$$V_{yy} = -(\eta V_{zz} - V_{xx}) = -\frac{1}{2}(\eta + 1)V_{zz},$$

coby důsledek nulové stopy. Výsledný hamiltonián kvadrupólové interakce zapsaný pomocí operátorů jaderného spinu má tedy tvar

$$\hat{W}_Q = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)}(3I_z^2 - I^2 + \eta(I_x^2 + I_y^2)). \quad (3.757)$$

Struktura víceelektronových atomů

Vylučovací princip vymezuje zcela určitou hranici pro počet elektronů, jež mohou obsadit danou podslupku. Podslupka je charakterizována určitým hlavním kvantovým číslem n a orbitálním kvantovým číslem l , kde

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.758)$$

Pro každé l existuje $2l + 1$ různých hodnot magnetického kvantového čísla $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ a dvě možné hodnoty spinového

kvantového čísla $m_s = \left(\pm \frac{1}{2}\right)$ pro každé m_l . Každá podslupka tedy

může obsahovat nejvýše $2(2l + 1)$ elektronů a každá slupka maximálně

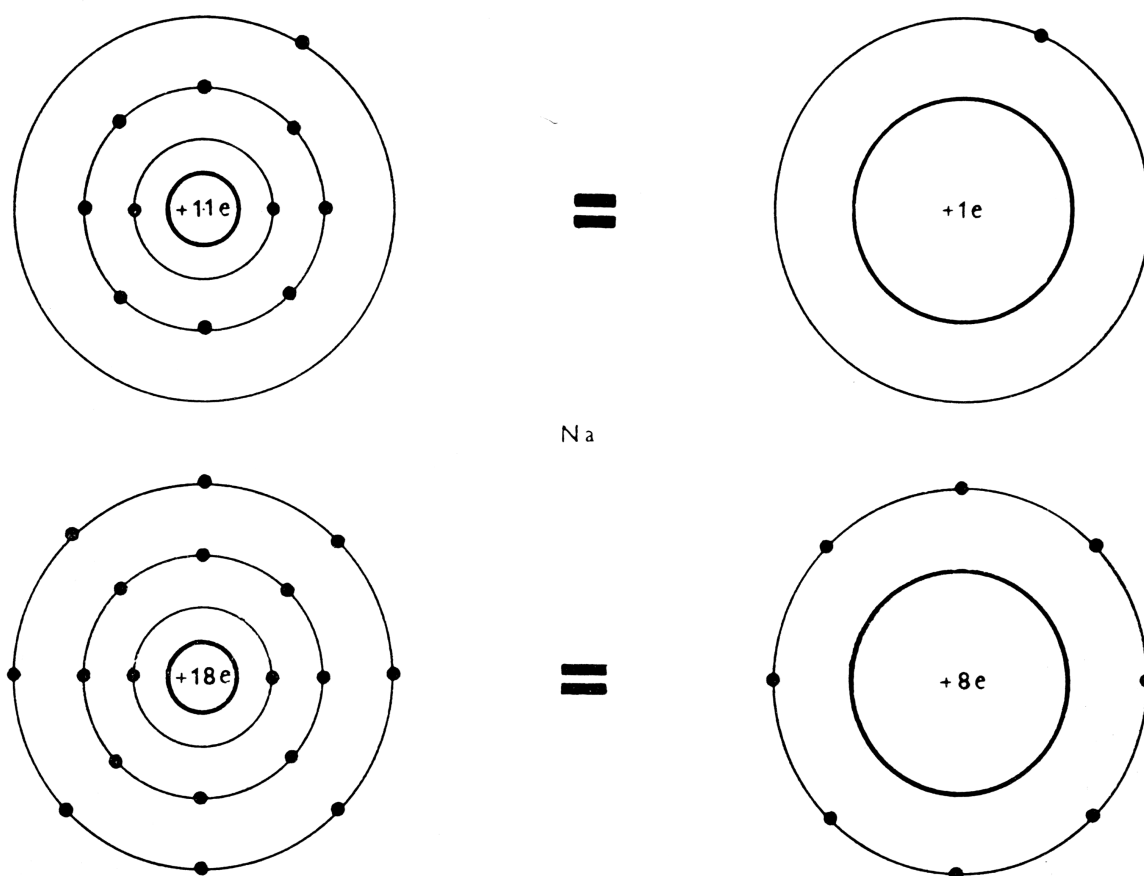
$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) &= 2[1+3+5+\dots+2(n-1)+1] = \\ &= 2[1+3+5+\dots+(2n-1)] = 2 \frac{n}{2} [1+(2n-1)] = 2n^2 \end{aligned}$$

(3.759)

elektronů. Atomová slupka či podslupka, která je zcela zaplněna elektrony, se nazývá **uzavřená**. Celkový orbitální a spinový impulsmoment elektronů v uzavřené podslupce je roven nule a rozdělení jejich efektivního náboje je symetrické. Elektrony v uzavřené slupce neutrálního atomu jsou velmi silně vázané, protože kladný náboj jádra daleko převyšuje záporný náboj vnitřních stínících elektronů (obr. 3.42). Jelikož atom obsahující pouze uzavřené slupky nemá žádný dipólový moment, nepřitahuje jiné elektrony a jeho vlastní elektrony nelze snadno odtrhnout. Od takových atomů lze očekávat, že budou chemicky inertní.

Naopak atomy s jedním elektronem ve valenční slupce tento elektron často ztrácejí, neboť je poměrně daleko od jádra, jehož celkový náboj vnitřní elektrony odstiňují na pouhý efektivní náboj $+e$. K takovým atomům patří vodík, a alkalické kovy. Proto mají tyto prvky valenci $+1$.

Obr. 3.42



Atomy, jimž ve vnějších slupkách chybí k uzavřenosti jeden elektron se snaží získat tento elektron přitažlivou silou svého nedokonale odstíněného jaderného náboje, což vysvětluje chemické vlastnosti halogenů.

Tímto způsobem lze vždy objasnit vzájemnou podobnost prvků v grupách periodické soustavy prvků.

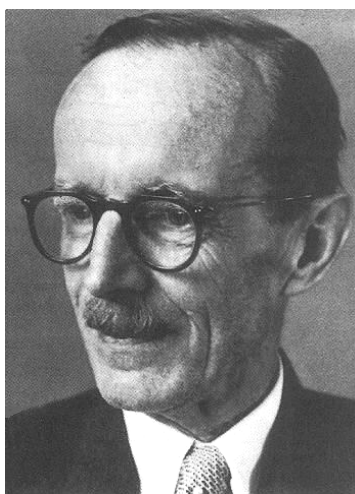
Původ přechodových prvků spočívá v silnější vazbě elektronů s oproti elektronům d a f , která se projevuje u složitých atomů. Prvně se tento efekt vyskytuje u draslíku, jehož poslední vnější elektron je v podstavu $4s$ namísto očekávaného $3d$. Rozdíl ve vazebné energii mezi elektrony $3d$ a $4s$ není příliš velký, jak je vidět u konfigurací chromu a mědi. U obou těchto prvků se objevuje další elektron $3d$ na účet neobsazeného místa v podslupce $4s$.

Výstavbový princip a Madelungova pravidla

Výstavbový princip říká, že orbitaly s nižší energií se zaplňují elektrony dříve než orbitaly s energií vyšší.

V základním stavu atomu tedy elektrony obsazují jednotlivé slupky a podslupky tak, aby měly co nejnižší energii.

Elektronový pár se stejnou orientací spinů obou elektronů má mírně menší energii, než elektronový pár s opačnou orientací spinů. Protože v jednom orbitalu mohou být pouze elektrony s opačným spinem, dochází nejprve k obsazení identických orbitalů (se stejným n a l) jedním elektronem a poté teprve dochází k párování elektronů.

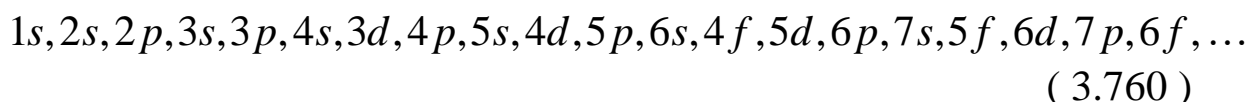


Erwin Madelung (1881 – 1972)

Pro obsazování orbitalů elektrony je tedy rozhodující součet hlavního kvantového čísla n a vedlejšího kvantového čísla l a pak teprve velikost hlavního kvantového čísla n , tzn.

- přednostně se obsadí orbital, u něhož je součet $n + l$ menší
- z orbitalů se stejným součtem $n + l$, se jako první zaplní ten, jehož hlavní kvantové číslo n je menší

elektronové podslupky (orbitaly) se tedy zaplňují v následujícím pořadí:



Na základě této posloupnosti lze snadno pochopit výraznou podobnost v chemických vlastnostech lathanidů a aktinidů. Všechny lathanidy mají stejnou konfiguraci $5s^2, 5p^6, 6s^2$, ale neúplné podslupky $4f$. Přibývání elektronů v této podslupce nemá prakticky žádný vliv na chemické vlastnosti lathanidů, které jsou určovány vnějšími elektrony. Podobně všechny aktinidy mají konfiguraci $6s^2, 6p^6, 7s^2$ a liší se jen počtem svých elektronů $5f$ a $6d$.

Výjimky:

Energie d orbitalu, který je zcela nebo z poloviny zaplněný, je nižší než energie nejbližšího s orbitalu. Proto v případě d^4 a d^9 prvků dochází k přeskoku jednoho elektronu z s orbitalu do orbitalu d . Např. elektronová konfigurace chromu je $[\text{Ar}] 4s^1 3d^5$, nikoliv $[\text{Ar}] 4s^2 3d^4$.

	K			L			N			M				O					P						Q						
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h	7s	7p	7d	7f	7g	7h	7i			
H	1																														
He	2																														
Li	2	1																													
Be	2	2																													
B	2	2	1																												
C	2	2	2																												
N	2	2	3																												
O	2	2	4																												
F	2	2	5																												
Ne	2	2	6																												
Na	2	2	6	1																											
Mg	2	2	6	2																											
Al	2	2	6	2	1																										
Si	2	2	6	2	2																										
P	2	2	6	2	3																										
S	2	2	6	2	4																										
Cl	2	2	6	2	5																										
Ar	2	2	6	2	6																										
K	2	2	6	2	6		1																								
Ca	2	2	6	2	6		2																								
Sc	2	2	6	2	6	1	2																								
Ti	2	2	6	2	6	2	2																								
V	2	2	6	2	6	3	2																								
Cr	2	2	6	2	6	5	1																								
Mn	2	2	6	2	6	5	2																								
Fe	2	2	6	2	6	6	2																								
Co	2	2	6	2	6	7	2																								
Ni	2	2	6	2	6	8	2																								
Cu	2	2	6	2	6	10	1																								
Zn	2	2	6	2	6	10	2																								
Ga	2	2	6	2	6	10	2	1																							
Ge	2	2	6	2	6	10	2	2																							
As	2	2	6	2	6	10	2	3																							
Se	2	2	6	2	6	10	2	4																							
Br	2	2	6	2	6	10	2	5																							
Kr	2	2	6	2	6	10	2	6																							
Rb	2	2	6	2	6	10	2	6		1																					

115	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10				2	3					
116	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10				2	4					
117	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10				2	5					
118	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10				2	6					
119	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	1			2	6					
120	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	2			2	6					
121	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	3			2	6					
122	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	4			2	6					
123	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	5			2	6					
124	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	6			2	6					
125	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	7			2	6					
126	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	8			2	6					

Parita atomu

V klasické fyzice se pojem parity nezavádí z prostého důvodu – pohybové zákony klasické fyziky jsou invariantní vůči inverzi souřadnic, takže pojem parity ztrácí smysl.

Jinak je tomu ve fyzice kvantové. Jak již dobře víme, vlnové funkce popisující stav elektronu v atomu vodíku a jemu podobných systémech zapisujeme obvykle ve sférických souřadnicích (3.166). Transformační vztahy pro inverzi, které mají v kartézských souřadnicích známý tvar

$$x' = -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z, \quad (3.761)$$

jsou ve sférických souřadnicích vyjádřeny jako

$$r' = r, \quad \vartheta' = \pi - \vartheta, \quad \varphi' = \pi + \varphi. \quad (3.762)$$

Funkce vodíkového typu mají obecný tvar (3.218). Po transformaci (3.762) se tyto funkce mění na

$$\psi_{nlm}(r', \vartheta', \varphi') = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\pi - \vartheta) e^{im(\varphi + \pi)}. \quad (3.763)$$

Odtud plyne, že transformace vlnové funkce ψ_{nlm} je určena pouze transformací kulové funkce. Obecně platí

$$\begin{aligned}\Theta_{lm}(\pi - \vartheta) &= (-1)^{l-m} \Theta_{lm}(\vartheta), \\ e^{im(\varphi+\pi)} &= (-1)^m e^{im\varphi},\end{aligned}\tag{3.764}$$

takže (3.763) můžeme přepsat do tvaru

$$\psi_{nlm}(r', \vartheta', \varphi') = (-1)^l R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} = (-1)^l \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi).\tag{3.765}$$

Parita vlnové funkce $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$ tedy závisí pouze na kvantovém čísle l a je sudá resp. lichá v závislosti na tom, je-li l sudé resp. liché. Uvažujme nyní systém dvou neinteragujících elektronů v jednoelektronové aproximaci atomového obalu, popsany vlnovou funkcí

$$\psi(1,2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(r_2, \vartheta_2, \varphi_2).\tag{3.766}$$

Při transformaci (3.761) se bude tato vlnová funkce chovat jako

$$\psi(1,2) \rightarrow (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \psi(1,2) = (-1)^{l_1+l_2} \psi(1,2).\tag{3.767}$$

Při skládání systému se tedy parity mezi sebou násobí. V daném případě bude parita systému (3.767) buď sudá, bude-li $l_1 + l_2$ sudé, nebo lichá, je-li $l_1 + l_2$ liché.

Obecně platí, že parita systému složeného z navzájem neinteragujících podsystemů je dána součinem parit vlnových funkcí daných podsystemů

$$\hat{\Pi} = \prod_{i=1}^n (-1)^{l_i}.\tag{3.768}$$

Veličiny typu $(-1)^l$ můžeme pokládat za vlastní hodnoty operátoru parity (3.768).

Parita stavu nebo termu se ve spektroskopii běžně používá a připisuje se jako pravý horní index ke spektroskopickému symbolu stavu, např.

${}^3P_2^-$ znamená stav s lichou paritou, ${}^3S_1^+$ stav se sudou paritou.

Atomová spektra

Výběrová pravidla

Má-li dojít k zářivému přechodu mezi dvěma stavy atomu, požadujeme nenulovost střední hodnoty polohy elektronu, neboli integrálu

$$I \sim \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx, \quad (3.769)$$

kde I je intenzita emitovaného záření. Přechody, pro něž je tento integrál konečný a nenulový, se nazývají **dovolené přechody**. Naopak přechody, pro něž je (3.769) nulový nazýváme **zakázané přechody**. V případě vodíkového atomu je k udání počátečního a konečného stavu zářivého přechodu zapotřebí tří kvantových čísel a integrovat se musí přes celý prostor

$$I \sim \bar{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q \psi_{n',l',m_l}^* \psi_{n,l,m} dV, \quad (3.770)$$

kde čárkovaná kvantová čísla odpovídají počátečnímu stavu, nečárkovaná konečnému stavu a souřadnice q odpovídá jedné ze souřadnic x, y, z .

Příslušné záření odpovídá vyzařování dipólu orientovaného podél osy q . Protože vlnové funkce atomu vodíku známe, můžeme vypočítat (3.769) pro všechna q i pro všechny dvojice stavů lišících se v jednom či více kvantových číslech. Máme tedy

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'} dV = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r \sin \vartheta \cos \varphi \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \\
&= \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^* R_{n',l'} dr \int_0^{\pi} \sin^2 \vartheta \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l',m'_l} d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} \cos \varphi d\varphi.
\end{aligned} \tag{3.771}$$

Protože

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \tag{3.772}$$

a normovaná azimutální část vlnové funkce je dána vztahem (3.182), můžeme poslední integrál v (3.771) vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} \cos \varphi d\varphi = \\
&= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-i\varphi(m_l - m'_l + 1)] + \exp[-i\varphi(m_l - m'_l - 1)] d\varphi,
\end{aligned} \tag{3.773}$$

kde výrazy $(m_l - m'_l + 1)$ a $(m_l - m'_l - 1)$ mohou být rovny pouze $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Protože platí

$$\exp(-ik\varphi) = \cos(k\varphi) - i \sin(k\varphi) \tag{3.774}$$

je

$$\int_0^{2\pi} \exp(-ik\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos(k\varphi) d\varphi - i \int_0^{2\pi} \sin(k\varphi) d\varphi = 0 \quad \forall k \neq 0. \tag{3.775}$$

Pokud tedy není

$$(m_l - m'_l + 1) = 0 \vee (m_l - m'_l - 1) = 0, \quad (3.776)$$

což je totéž jako

$$\Delta m_l = m_l - m'_l = \pm 1, \quad (3.777)$$

nemohou nastat žádné přechody.

Totožné výběrové pravidlo bychom dostali výpočtem (3.770) pro $q = y$.

Pro $q = z$ dostaneme

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} z \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'_l} dV = \\ &= \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^* R_{n',l'} dr \int_0^{\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l',m'_l} d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi. \end{aligned} \quad (3.778)$$

Třetí integrál je

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-i\varphi(m_l - m'_l)] d\varphi \quad (3.779)$$

a vzhledem k (3.775) se rovná nule pokud není $m_l = m'_l$, neboli

$$\Delta m_l = 0.$$

Úplné výběrové pravidlo pro m_l ve vodíkovém atomu tedy zní

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (3.780)$$

Ačkoliv jsme si toto pravidlo ověřili jen pro atom vodíku, platí ve skutečnosti ve všech atomech pro přechody zahrnující přeskok jediného elektronu z vnější slupky.

Podíváme-li se dále na obrázky 3.10, 3.12, vidíme, že přechod ze stavu $2p$ do stavu $1s$ znamená přechod od jednoho rozdělení hustoty pravděpodobnosti k jinému. Naopak přechod ze stavu $2s$ do stavu $1s$ se odehrává mezi stejnými distribucemi pravděpodobnosti a můžeme jej přirovnat k radiálnímu pulzování elektronového oblaku atomu. Kmity tohoto druhu (kmitání monopólu), jak víme z předešlé kapitoly, nevedou k vyzařování elektromagnetických vln. Aniž bychom zde prováděli explicitní kvantově mechanický výpočet výběrových pravidel pro Δl , vede nás tato poloklasická analogie ke správnému názoru, že

$$\Delta l = \pm 1. \quad (3.781)$$

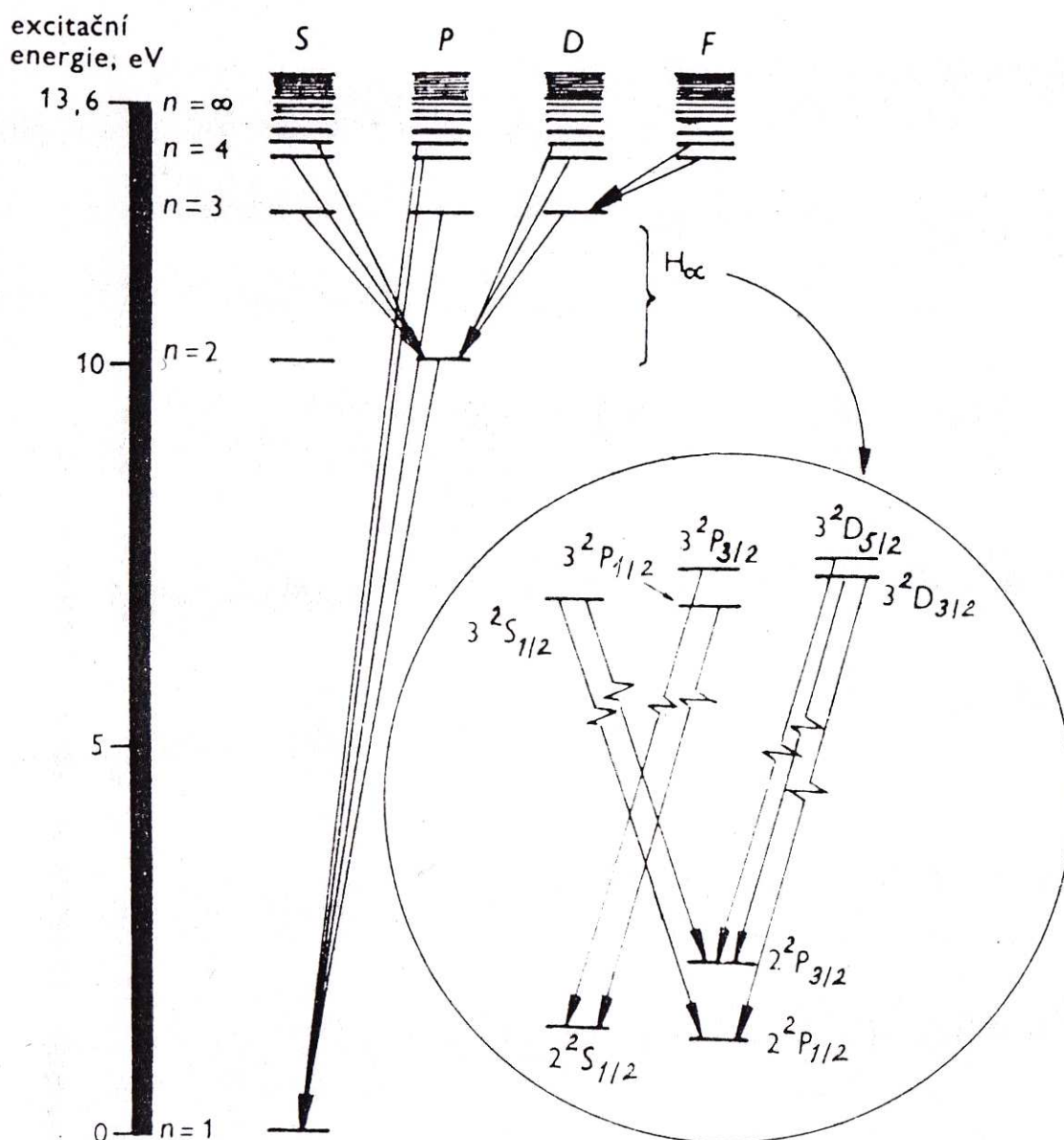
Jednoelektronová spektra

Obrázek 3.43 ukazuje různé stavy atomu vodíku klasifikované hlavním kvantovým číslem n a orbitálním kvantovým číslem l . Energeticky rozdělené jsou nejenom všechny podstavy s tímž n , a různým l , ale stavy se stejným n a l , ale různým j . Tento poslední efekt je nejvýraznější pro stavy s malým n a l a byl poprvé objeven jako posunutí stavu $2^2S_{1/2}$ vůči stavu $2^2P_{1/2}$ (tzv. Lambův posun). Různé vlivy tak způsobují rozštěpení spektrální čáry H_α na osm blízkých komponent.



Willis Eugene Lamb (1913 – 2008)

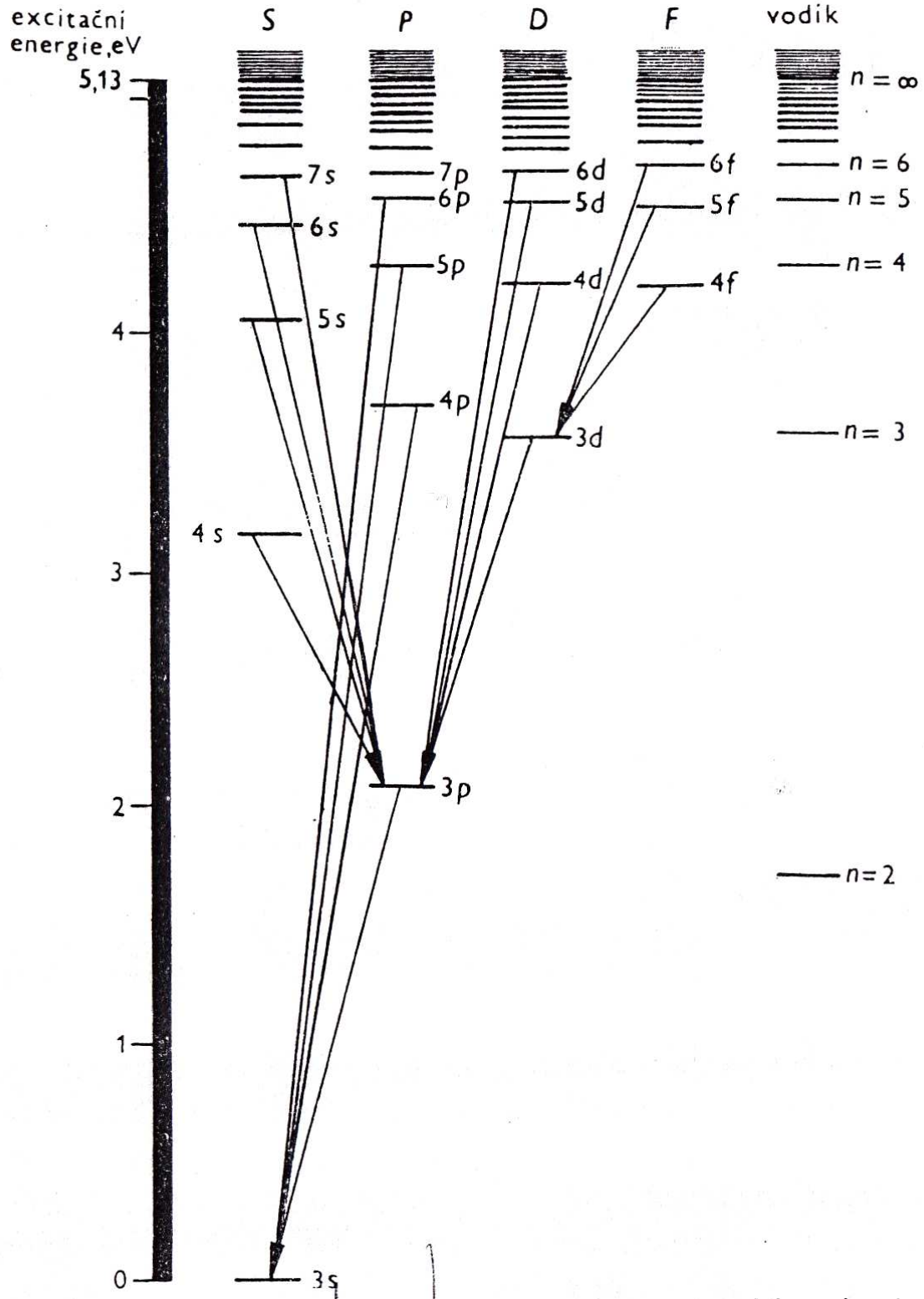
Obr. 3.43



Atom sodíku má vně uzavřených slupek jeden elektron 3s a předpokládáme-li, že 10 vnitřních elektronů úplně odstiňuje náboj $+10e$ z celkového náboje jádra, působí na vnější elektron efektivní náboj $+e$ stejně, jako v atomu vodíku. V první aproximaci tedy očekáváme stejné energetické hladiny jako u vodíku, pouze s tím rozdílem, že v důsledku Pauliho principu odpovídá nejnižší hladina odpovídá $n = 3$ u sodíku namísto $n = 1$ u vodíku. Na obr. 3.44 je diagram energetických hladin sodíku, kde skutečně pozorujeme shodu pro stavy s nejvyšším l . K pochopení příčin nesouladu při nižších

hodnotách l si stačí uvědomit, že čím menší je hodnota l pro dané n , tím pravděpodobněji se elektron může vyskytovat blíže jádra.

Obr. 3.44



Díky podobnosti chování vlnových funkcí sodíku a vodíku lze očekávat, že vnější elektron v atomu sodíku bude pronikat mezi vnitřní elektrony uzavřených slupek s největší pravděpodobností, bude-li ve stavu s , s menší pravděpodobností, bude-li ve stavu p , ještě méně pravděpodobně, bude-li ve stavu d , atd. Čím méně je přítom vnější elektron stíněný od úplného náboje jádra, tím větší střední síla na něj působí a tím větší je absolutní hodnota jeho celkové energie. Ta je však záporná, takže s rostoucí silou dále klesá. Z toho důvodu jsou stavy s malým l v sodíku posunuty směrem dolů. Ve srovnání s ekvivalentními stavy u vodíku.

Dvouelektronová spektra

Ve vodíku i v sodíku vytváří energetické hladiny vždy jeden jediný elektron. Avšak v základním stavu helia jsou dva elektrony $1s$ a je zajímavé vyšetřovat vliv LS -vazby na vlastnosti a chování atomu helia. Výběrová pravidla pro dovolené přechody při LS -vazbě mají tvar

$$\Delta L = 0, \pm 1,$$

$$\Delta J = 0, \pm 1,$$

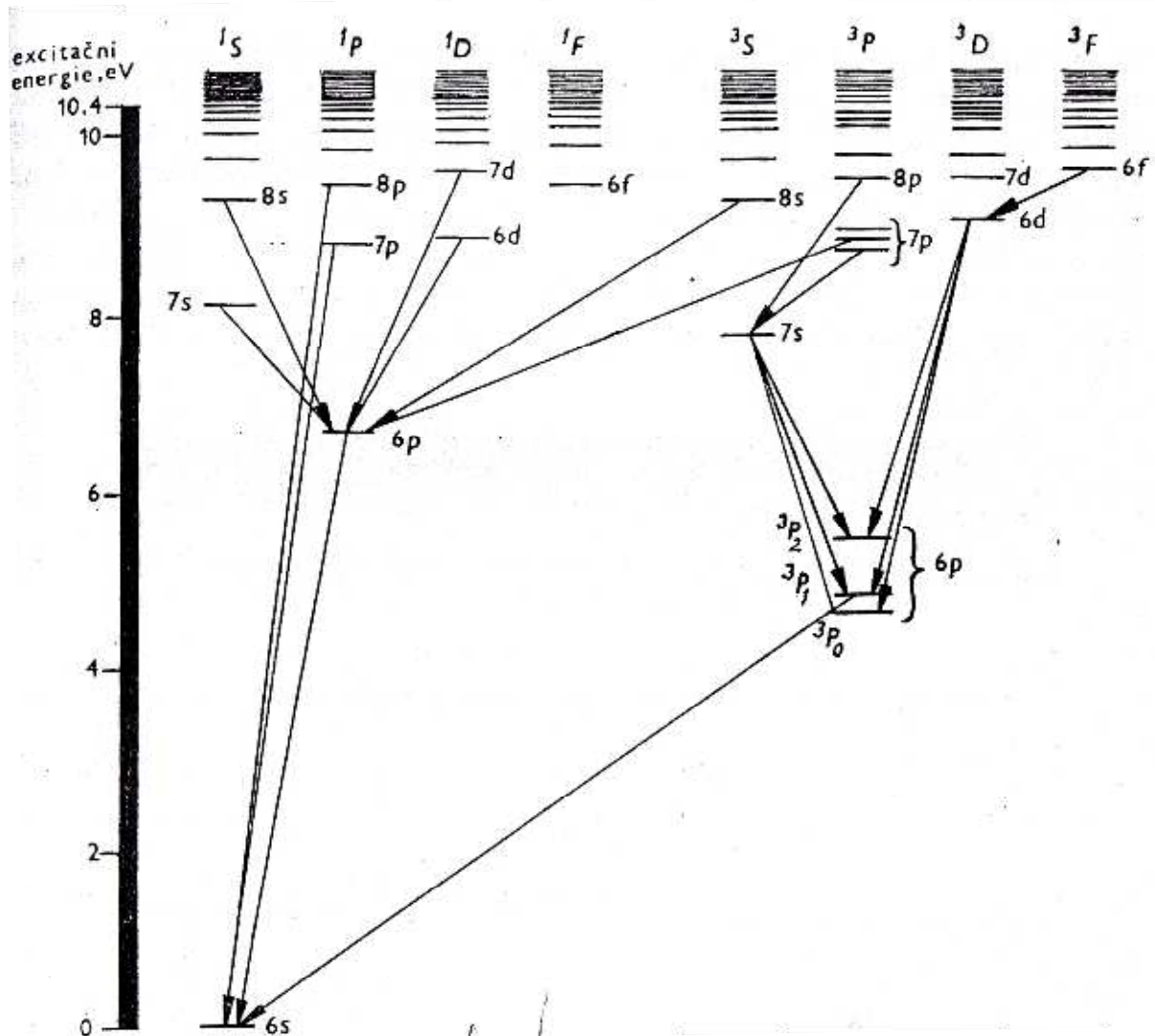
$$\Delta S = 0.$$

Diagram energetických hladin helia je na obr. 3.45. Různé hladiny představují konfigurace, v nichž jeden elektron je ve svém základním stavu a druhý ve stavu excitovaném. Protože jsou však impulsmomenty obou elektronů spřažené, je vhodné uvažovat hladiny charakterizující celý atom. Na rozdíl od jednoelektronových spekter zde existuje rozdělení na singletní a triplexní stavy. Vzhledem ke spinovému zákazu navíc nemohou nastat žádné dovolené přechody mezi singletními a triplexními stavy a spektrum helia vzniká z přechodů jen uvnitř těchto systémů stavů. Heliové atomy v singletních stavech tvoří *parhelium* a heliové atomy v triplexních stavech tvoří *ortohelium*. Atom ortohelia může ztratit svou excitační energii při srážce a přeměnit se na parhelium, atom parahelia může při

uzavřených slupek. Ionizační energie helia je vůbec nejvyšší ze všech prvků a činí 24,6 eV.

Posledním studovaným diagramem, je diagram energetických hladin rtuti, která má 2 valenční elektrony vně uzavřených slupek o 78 elektronech.

Obr. 3.46



Protože je atom hélia tak těžký, projevuje se zde zhroucení LS -vazby mezi impulsmomenty a to porušením výběrového pravidla $\Delta S = 0$. Příkladem je přechod $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ vytvářející silou čáru o vlnové délce 2537 nm v ultrafialové oblasti. Pravděpodobnost přechodu je velmi vysoká, neboť tři stavy 3P_1 jsou nejnižší z tripletního systému a v excitované rtuťové páře mají tudíž tendenci být hustě obsazeny.

Přechody ${}^3P_0 \rightarrow {}^1S_0$ a ${}^3P_2 \rightarrow {}^1S_0$ porušují pravidlo o zakázaných přechodech $\Delta J = 0, \pm 1$, stejně jako spinový zákaz $\Delta S = 0$, a výskyt těchto přechodů je tak mnohem méně pravděpodobný. Stavy 3P_0 a 3P_2 jsou tedy metastabilní a za nepřítomnosti srážek může atom setrvat v každém z nich relativně dlouhou dobu. Silná spinorbitální interakce ve rtuti, má mimo částečného zhroucení LS -vazby, na svědomí rovněž i velkou vzdálenost mezi sousedními komponentami tripletů 3P .

Struktura jádra

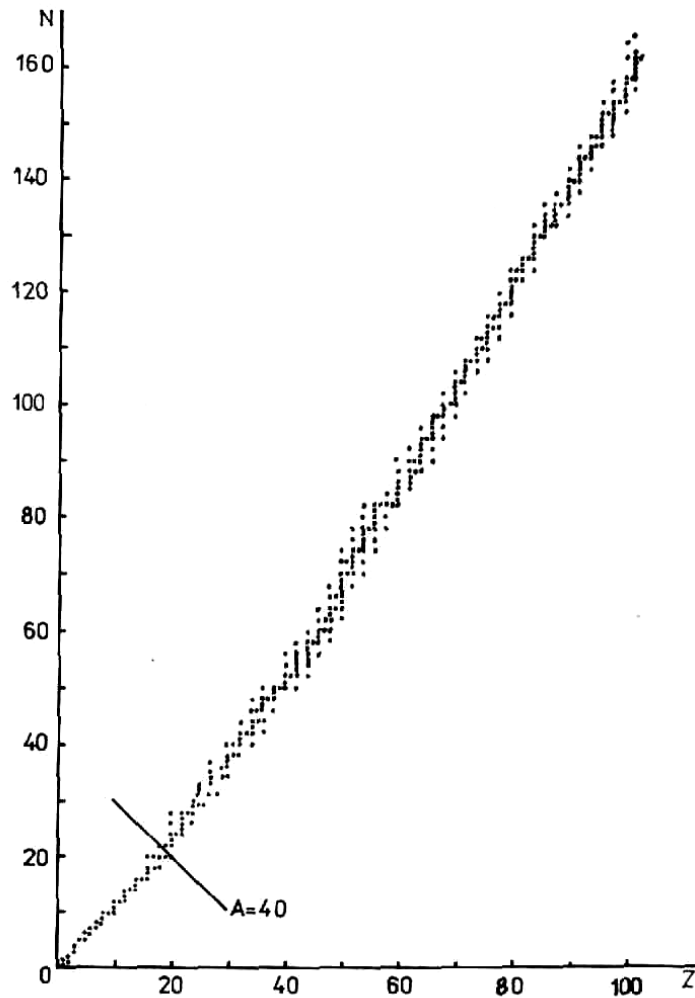
Známé hmotnosti jader asi 3 000 nuklidů lze roztrdit na základě toho, co již víme. Vybereme z těchto nuklidů nejdříve ty, které jsou stabilní vůči rozpadu β , budou to tedy zcela stabilní nuklidy a nestabilní nuklidy nepodléhající radioaktivnímu rozpadu β . Takových nuklidů je asi 350. Ke každému z nich přiřadíme bod v rovině (Z, N) a obdržíme tím v této rovině pás zvaný *linie stability* β (obr. 3.47a).

Jádra ležící nad linií stability, tj. ta, která mají při pevném Z vyšší N , se samovolně rozpadají typem β^- , vysílají při rozpadu elektron a antineutrino. Pod linií stability se nalézají jádra, která jsou nestabilní vůči rozpadu β^+ , při němž je z jádra vyslán pozitron a neutrino. Tato jádra jsou také nestabilní vůči tzv. záchytu elektronu.

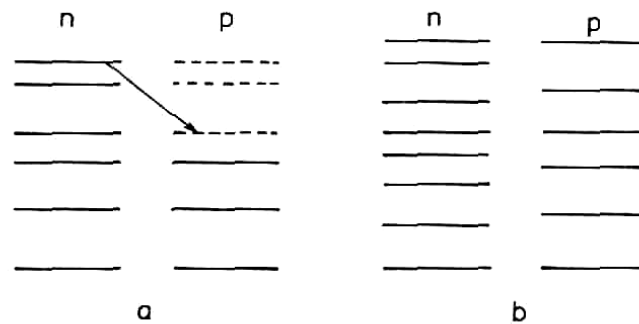
Z obr. 3.47a. je patrné, že jádra ležící na linii stability pro $A \leq 40$ se soustřeďují v okolí přímky $N = Z$. To je lehce pochopitelné, vyjdeme-li z Pauliho principu. V jádrech, kde je přebytek nukleonů jednoho druhu, např. neutronů, musí tyto částice obsazovat díky Pauliho principu vyšší energetické hladiny (viz obr. 3.47b). Rozpad β^- umožňuje neutronu změnit projekci svého izospinu, stát se protonem a přejít do *nižšího* energetického stavu. Proto jsou nejstabilnějšími jádry pro

$A < 40$ jádra s přibližně stejným počtem protonů a neutronů. Pro $A > 40$ je již $N > Z$ a převaha neutronů s růstem A se zvětšuje. To je způsobeno coulombickým odpuzováním protonů, které posunuje jejich energetické stavy k *vyšším* hodnotám (obr. 3.47b).

Obr. 3.47a, 3.47b

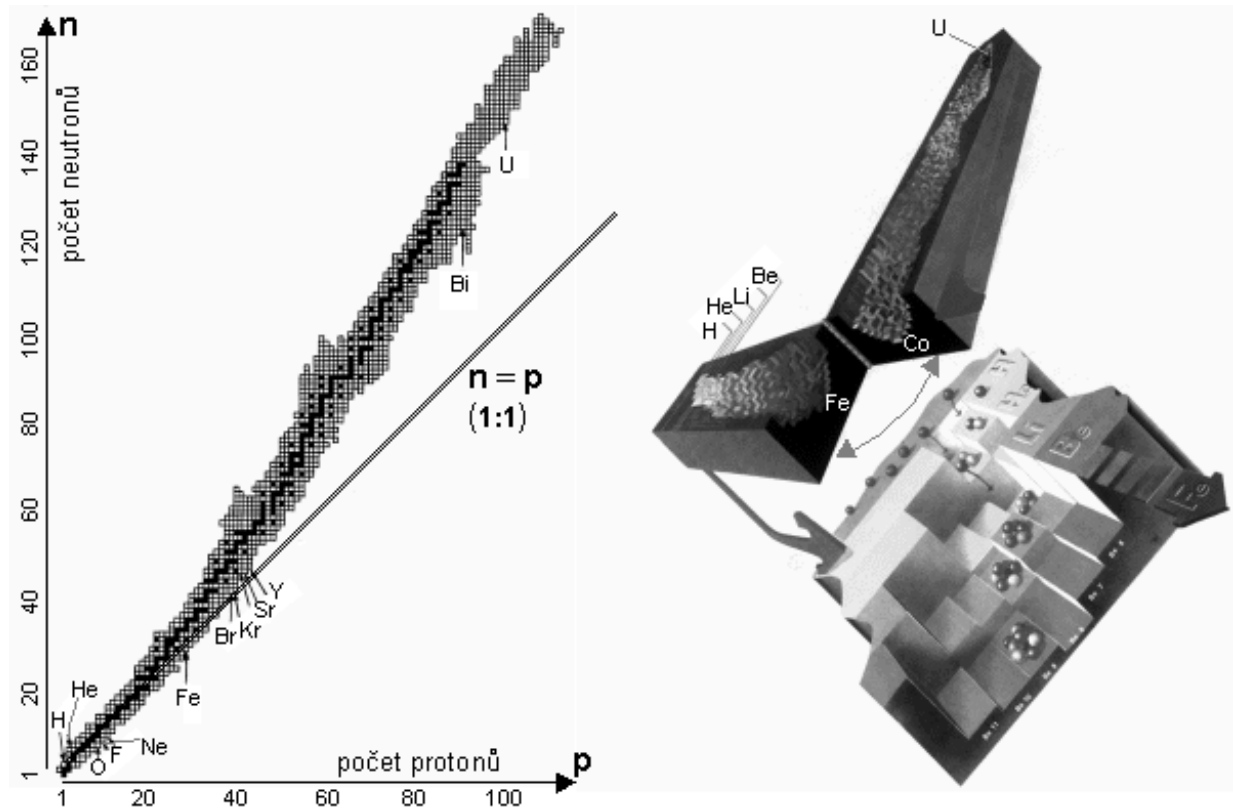


Poloha stabilních jader vůči rozpadu β je označena tečkami v rovině (Z, N) . Tečky definují linii (pás) stability. Z – atomové číslo, N – neutronové číslo.



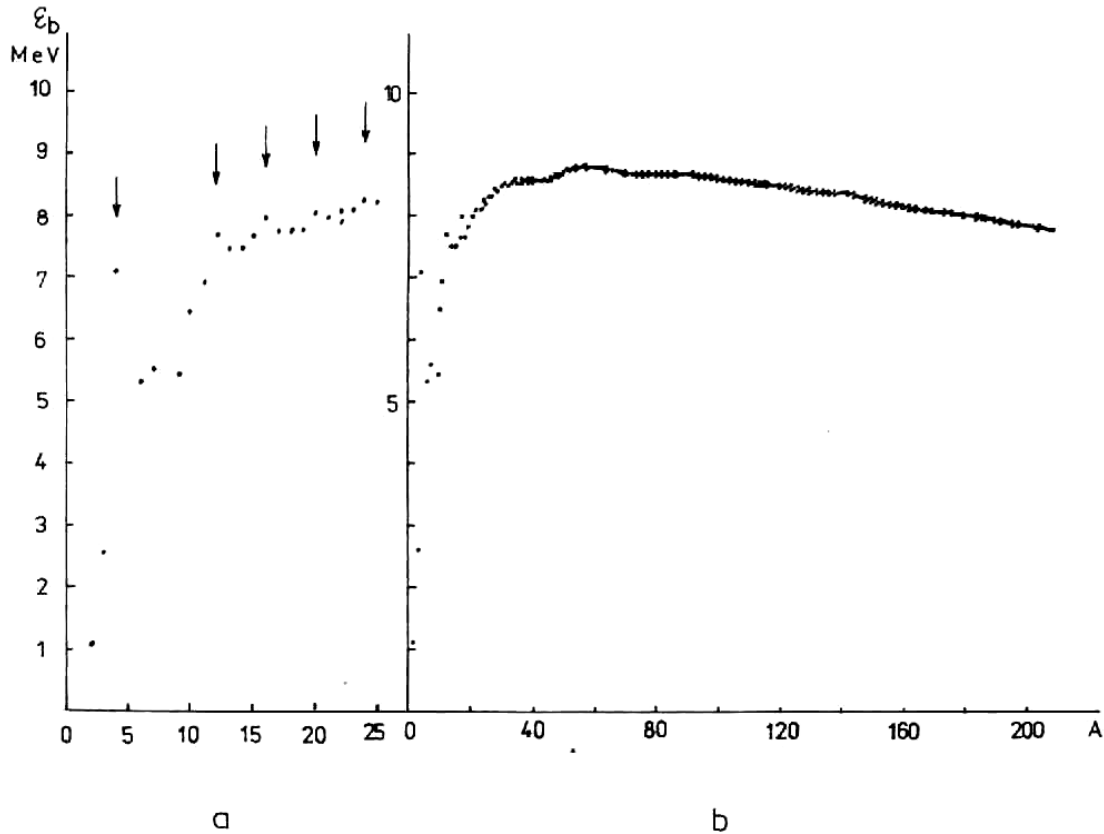
Plnou čarou jsou označeny obsazené hladiny, přerušovanou neobsazené; n – neutron, p – proton, a – jádro s nadbytkem neutronů prodělává rozpad, b – posuv hladin protonů vyvolaný coulombickým polem.

Obr. 3 48



Vyšetřme ještě závislost *nukleonové vazbové energie*, tj. $\varepsilon_b(A)$, na čísle A pro jádra ležící na linii stability. Na obr. 3.49 je tato závislost vynesena a jsou z ní patrné tyto skutečnosti:

1. $\varepsilon_b(A)$ rychle roste pro $A \leq 16$,
2. $\varepsilon_b(A)$ má výrazná maxima pro $A = 4, 12, 16, 20, 24$, což ukazuje na význam zobecněného Pauliho principu pro nukleony a z toho plynoucí stability jader, která mají celkový počet nukleonů $A = n\alpha$ pro neveliká $n = 1, 3, 4, \dots$; α zde reprezentuje 4 nukleony částice alfa.



Obr. 3.49. Vazbová energie $s_b(A, Z)$ stabilních jader připadajících na jeden nukleon jako funkce nukleonového čísla. Šipky označují jadra s $A = na$.

3. $\epsilon_b(A)$ je přibližně konstantní, leží v intervalu (7,4 MeV; 8,8 MeV) pro všechna jadra s $A > 16$. To znamená, že pro ně je vazbová energie jádra

$$W(A, Z) \approx A. \quad (3.782)$$

Odtud soudíme, že nukleon může interagovat jen s omezeným počtem nukleonů. Kdyby tomu bylo totiž při interakci nukleonů stejně jako v systému podrobeném např. gravitační interakci, kde každý objekt interaguje s každým, musela by vazbová energie záviset na počtu různých dvojic nukleonů a nemělo by platit (3.782). Říkáme tedy, že u jaderných sil působících mezi nukleony se projevuje **nasycení**. Při malém A energie $\epsilon_b(A)$ rychle stoupá, nasycení ještě nenastalo, záhy však, tj. pro $A \approx 16$, k nasycení dochází.

4. Energie $\epsilon_b(A)$ klesá z maximální hodnoty 8,8 MeV při $A = 60$ prakticky monotónně až na energii 7,4 MeV při $A = 238$. Tento pokles je projevem vzájemného elektrostatického odpuzování protonů.

5. Existence maxima $\varepsilon_b(A)$ při $A = 60$, což je nuklid ${}^{60}_{28}\text{Ni}$, je důležitým rozhraním. Z jeho polohy plyne, že jadernou energii lze uvolnit buď při syntéze, spojení lehkých jader pokud jejich $A < 60$, anebo při dělení těžkých jader na lehčí, přičemž jejich hmotnosti číslo A musí být větší než 60.

Závislost hmotnosti či vazbové energie jader na číslech A a Z lze vystihnout matematicky různými formulemi, z nichž nejznámější je Weizsäckerova – Fermiho. Ta se obvykle vyvozuje v rámci jednoho z elementárních modelů jader, jímž je tzv. **kapkový model**. Jádru se v něm považuje za kapku těžko stlačitelné kapaliny. Tato představa vede bezprostředně k úměrnosti mezi objemem jádra a počtem nukleonů, které se v něm nacházejí. Poloměr jádra by měl proto být dán vztahem

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (3.783)$$

v němž konstantu r_0 určíme na základě srovnání vypočtených výsledků s experimentálními daty. Optimální hodnota r_0 se pohybuje kolem $1,4 \cdot 10^{-15}$ m. Uvedeme přímo současnou formuli pro vazbovou energii jádra definovaného čísly A a Z

$$W(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(A - 2Z)}{A} + \frac{\delta(A, Z)}{A^{3/4}}, \quad (3.784)$$

kde příslušné parametry mají hodnoty

$$a_v = 15,75 \text{ MeV}, a_s = 17,80 \text{ MeV}, a_c = 0,71 \text{ MeV}, a_a = 23,70 \text{ MeV},$$

$$\delta(A, Z) = \begin{array}{ll} 34 \text{ MeV} & \text{pro jádra S-S} \\ 0 & \text{pro } A \text{ liché} \\ -34 \text{ MeV} & \text{pro jádra L-L} \end{array} \quad (3.785)$$

Vezmeme-li v úvahu relaci (3.783) mezi poloměrem jádra R a hmotnostním číslem A , vidíme, že první člen ve formuli (3.784) je objemová energie jádra, která je podstatná pro vytvoření kapky, druhý člen je úměrný povrchu jádra a vystihuje skutečnost, že nukleony na

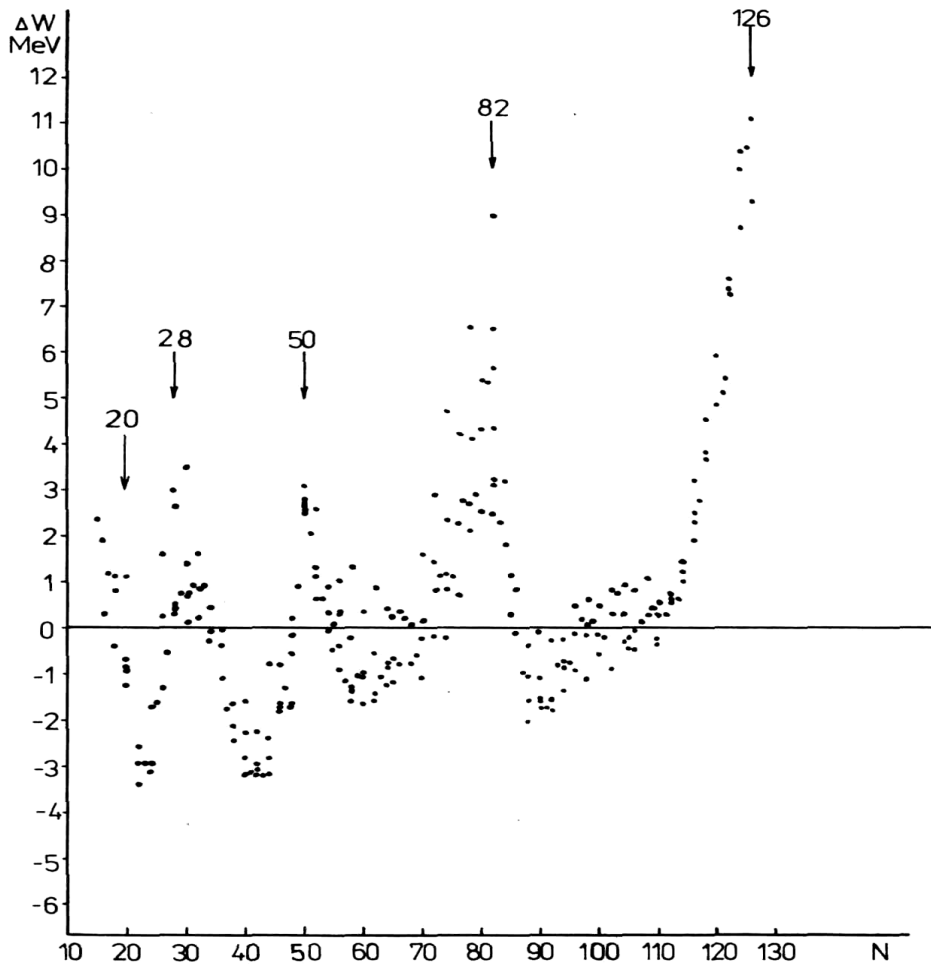
povrchu jsou méně vázané, neboť interagují s menším počtem nukleonů než nukleony uvnitř kapky, třetí člen reprezentuje elektrostatické odpuzování protonů, čtvrtý člen je fenomenologický a vystihuje skutečnost, že stabilní nuklidy leží na linii stability, tj. že přibližně platí $N = Z$. Poslední příspěvek se rovněž nedá dobře objasnit v rámci kapkového modelu, neboť souvisí zejména se spinovými, ale také s izospinovými stavy systému nukleonů.

Odchylka hodnoty vazbové energie ΔW vypočtená podle formule (3.784) od experimentální nepřesahuje 20 MeV. Na obr. 3.50 je tato odchylka vynesena v závislosti na neutronovém čísle N . Maxima odpovídají silně vázaným jádrům s tzv. *magickým počtem neutronů* 28, 50, 82, 126.

Existenci posledních dvou členů ve formuli (3.784) a též i magických čísel lze fyzikálně odůvodnit v jiném elementárním modelu jádra, označovaném jako *slupkový*. Řada experimentálních údajů nasvědčuje tomu, že nukleony se v podstatě seskupují do „*slupek*“ podobných těm, které známe z atomového obalu.

Energetické stavy nukleonů v dané slupce se od sebe liší obecně málo ve srovnání s rozdílem energií mezi slupkami. Ve slupkovém modelu jádra se uvažuje o neutronech a protonech jako o rozlišitelných objektech, které nezávisle zaplňují protonové slupky a neutronové slupky. Zaplnění dané slupky má v jádře podobný význam jako zaplnění elektronové slupky v obalu atomu, přispívá k vysoké vazbové energii jádra. Z experimentálních dat plyne, že k zaplnění slupek dochází tehdy, když počty protonů nebo neutronů dosahují *magických čísel* 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. První dvě magická čísla lze snadno reprodukovat ve vhodném slupkovém modelu a jsou shodná s počtem elektronů zaplňujících slupky s a p pro $n = 1, 2$ v obalu atomů. Vhodnou volbou potenciální jámy, v níž se protony a neutrony nezávisle na sobě pohybují, lze ve slupkovém modelu dospět i k dalším magickým číslům. Jak víme, budou přitom hrát důležitou roli i spiny protonů a neutronů. Slupkový model vede tedy jednak přímo k tomu, že by mělo být $Z = N$ a jednak s ohledem na *párování antiparalelních spinů* protonů nebo neutronů také k tomu, že jádra S-S budou mít větší vazbovou energii než jádra S-L nebo L-S a ta opět vyšší než jádra L-L. Tak lze vysvětlit i přítomnost opravy (3.785) k vazbové energii jádra.

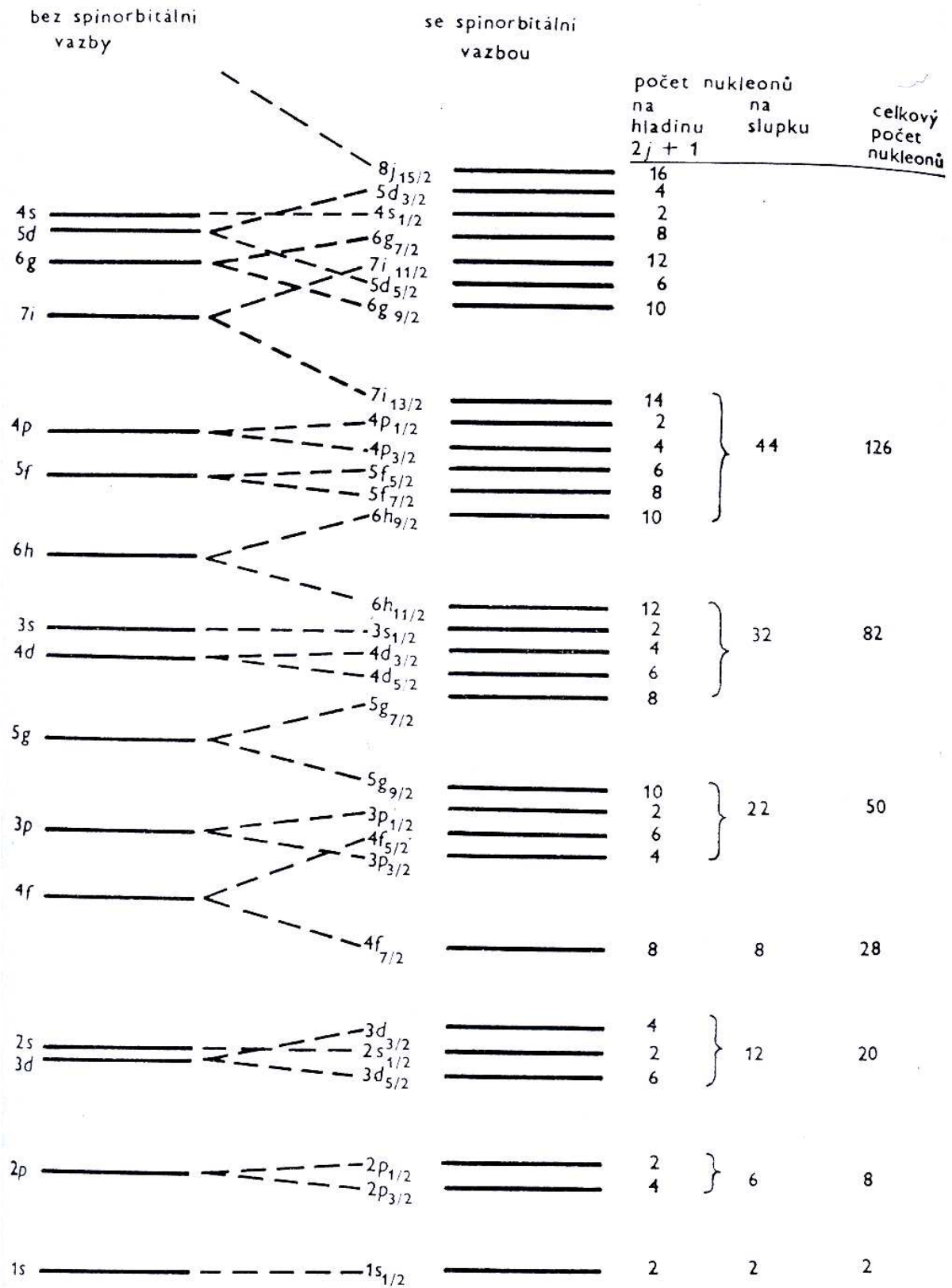
Obr. 3.50



Odchylka ΔW vazbové energie jádra vypočtená podle Weizsäckerovy formule od experimentální hodnoty v závislosti na neutronovém čísle N .

Vraťme se na závěr tohoto paragrafu ještě ke srovnání experimentálních hodnot vazbových energií *zrcadlových jader*, což jsou jádra, která mají navzájem vyměněná protonová a neutronová čísla Z a N . Takovou dvojicí jsou např. ${}^{10}_4\text{Be}$ a ${}^{10}_6\text{C}$. Z tohoto srovnání vyplývá důležitý závěr. Odečteme-li totiž od vazbových energií zrcadlových jader příspěvek coulombické energie, obdržíme shodné hodnoty. To znamená, že jaderné síly mezi dvěma nukleony jsou stejné. Tato vlastnost jaderných sil svědčí o tom, že jaderné síly jsou nábojově nezávislé, nebo jinými slovy řečeno: jaderné síly nerozeznávají elektrický náboj nukleonů.

Obr. 3.51



r. 22.6 Posloupnost energetických hladin nukleonu podle slupkového modelu (není v patřičném měřítku).

Obecnější modely jádra

Elementární modely, jimiž jsme se zabývali v této kapitole, jsou sice užitečné, neboť podávají fyzikálně podloženou představu o stavbě jádra a umožňují kvantitativně anebo alespoň kvalitativně určit některé jejich vlastnosti. K některým přesnějším studiím však nejsou dost dobré, např. k tomu, aby se určil systém excitovaných hladin nebo chování jádra v jaderných reakcích. Jen v některých případech lze nalezené jednonukleonové funkce ve slupkovém modelu jádra použít jako východiska k přesnějšímu teoretickému popisu jádra. Proto bylo vytvořeno více modelů, které jsou vhodnější ke kvantitativnímu vystižení skutečnosti a které poskytují lepší možnosti předpovědět některé vlastnosti jádra nebo průběh jaderných reakcí apod. Z relativně široké třídy těchto modelů nejdůležitější místo zastávají tzv. **zobecněný model**, který je určen k popisu a výkladu vlastností daného jádra, a **optický model**, který je užitečný při popisu jaderných reakcí. Podrobnější rozbor těchto modelů leží mimo rámec této publikace. Omezíme se proto jen na nástin výchozích myšlenek obou modelů.

Zobecněný model na rozdíl od jednočásticových modelů, nepotlačuje zcela přímou interakci mezi nukleony, ale bere ji v úvahu. Přímá interakce mezi nukleony je zodpovědná za to, že se jádro chová také jako celek a jako kolektiv odpovídá na vnější zásah. Projevy jádra jako stmelěného systému vystoupily zřejmě při štěpení jader, u gigantické rezonance a v široké aplikaci Weizsackerovy formule, vycházející z kapkového modelu jádra, objevují se ale i jinde. Proto se v zobecněném modelu rozděluje jádro na dva podsystémy. Všechny nukleony ve vnitřních slupkách, které dohromady vytvářejí sudo-sudé jádro, jsou kolektivním podsystémem a zbývající vnější nukleony tvoří podsystém podobný tomu, který známe ze slupkového modelu. Kolektivní podsystém lze pokládat v duchu kapkového modelu za kapku nestlačitelné avšak kvantové kapaliny, která je schopna kvantových oscilací různého typu. V poli tohoto podsystému se potom pohybují v nejjednodušším případě jeden nebo dva nukleony tak, jakoby byly nezávislé. Energetické spektrum tohoto jádra je v základním stavu v zásadě totožné se spektrem nevzbuzeného jednočásticového modelu. Spektrum vzbuzených stavů se však liší od

spektra jednočásticového modelu. Kolektivní podsystem se může excitovat jednak stejně jako jádro u modelu nezávislých částic, jednak jako kapka kvantové kapaliny. Vnější nukleony se excitují stejně jako v modelu nezávislých částic. Energetické spektrum bude nyní bohatší o *kolektivní excitace*. Při kolektivních excitacích se může měnit také moment hybnosti tohoto podsystemu. Zobecněný model popisuje dobře spektra, spiny a parity hladin, neboť u jader se skutečně projevují kolektivní excitace. Například u nuklidu stříbra $^{107}_{47}\text{Ag}$ je jeden vnější proton ve stavu $2p_{1/2}$ a zbytek tvoří sudo-sudý kolektivní podsystem. Jádro v základním stavu přísluší spin a parita $1/2^-$. Ve spektru vzbuzeného jádra se jasně projevují kolektivní excitace, které vedou ke stavu se spinem a paritou jádra $3/2^-$ a $5/2^-$. Dalším prvkem rozšiřujícím možnosti zobecněného modelu je představa, že se dá v souladu s experimentálními daty považovat některý z příslušných kolektivních podsystemů za „jádro“, které není sféricky symetrické, ale má jen axiální symetrii. I tyto modely se osvědčují při studiu jader, která jsou axiálně symetrická a nazývají se proto *jádry deformovanými*.

Optický model atomového jádra, který je častěji nazýván optickým modelem jaderných reakcí, vychází z fenomenologického popisu jaderných reakcí. Připomeňme, že reakce nějaké částice, např. neutronu s jádrem boru



musí jít jednak kanálem elastického rozptylu, který je identický se vstupním kanálem a může jít a také jde obecně jinými kanály, např. zachycením neutronu v jádře boru. Dojde-li k této reakci, zmizí z původního stavu, z původního svazku neutron. Jinými slovy, při všech dějích, pro něž je nenulový účinný průřez reakce σ_r , z původního kanálu, kanálu pro elastický rozptyl, ubývají částice. Tuto skutečnost lze fenomenologicky popsat v kvantové mechanice tak, že potenciální energie v příslušném hamiltoniánu pro Schrödingerovu rovnici bude komplexní. S komplexním indexem lomu se setkáváme např. při průchodu světla kovy v optice. Proto uvažovaný model nese název optický. S pomocí komplexního optického potenciálu se velmi úspěšně reprodukuje experimentální diferenciální účinné průřezy pro

elastický rozptyl v oblasti energií nalétávajících částic do 100 MeV, podobně se dobře určují účinné průřezy pro tento rozptyl a totální účinné průřezy. To znamená, že výpočet podává též vyhovující informace o účinném průřezu reakce.

Typický pro optický model je obrázek 3.52, na němž je srovnán výsledek výpočtu s naměřenými hodnotami diferenciálního účinného průřezu pro elastický rozptyl částice α s energií 40 MeV na titanu. Diferenciální účinný průřez se mění v intervalu úhlu rozptylu S od 20° do 80° o tři řády a vykazuje charakteristická „difrakční“ maxima, jejichž poloha, výška a do značné míry i tvar jsou dobře reprodukovány.

Obr. 3.52

