

Ján Pišút – Ladislav Gomolčák – Vladimír Černý

**ÚVOD
DO KVANTOVEJ MECHANIKY**

Bratislava 2008

Učebnica vznikla postupne z prednášok autorov na Matematicko-fyzikálnej fakulte UK v Bratislave. Predstavuje úvodný kurz kvantovej mechaniky, preto používa bežné označenia a štandardné postupy. Obsah učebnice zodpovedá približne dvojsemestrovému úvodnému štúdiu pre poslucháčov fyziky.

Určená je predovšetkým poslucháčom fyziky univerzitného, ale aj technického štúdia.

Autori: JÁN PIŠÚT,
LADISLAV GOMOLČÁK
VLADIMÍR ČERNÝ

Názov: Úvod do kvantovej mechaniky

Lektor: Václav VOTRUBA

Vydavateľ: Knižničné a edičné centrum FMFI UK
Grafická úprava: Peter Kohaut

Rok vydania: 2008
Miesto vydania: Bratislava
Vydanie
v elektronickom tvare: prvé
Počet strán: 376

Internetová adresa: http://www.fmph.uniba.sk/index.php?id=el_st_m

ISBN 978-80-89186-33-4

OBSAH

Predhovor k vydaniu po 25 rokoch	7
Predhovor	8
1 Elementárna kvantová mechanika	11
1.1 Úvodná poznámka	11
1.2 Predmet kvantovej mechaniky	11
1.3 Kvantovanie energie ako empirický fakt	11
1.4 Typické hodnoty veličín v atómovej fyzike	14
1.5 Kvantové vlastnosti žiarenia	17
1.6 Vlnové vlastnosti častíc	18
1.7 Kvantové stavy elektrónu viazaného na úsečku	19
1.8 Spin a magnetický moment elektrónu	22
1.9 Spin elektrónu a Pauliho princíp	24
1.10 Plyn voľných elektrónov	25
1.11 Interpretácia vlnovej funkcie. Vlnová funkcia a stav častice	27
1.12 Princíp superpozície	30
1.13 Vzťah neurčitosti	32
1.14 Vlnové funkcie a meranie fyzikálnych veličín	36
1.15 Zhrnutie	42
1.16 Príklady a problémy	44
2 Základy vlnovej mechaniky	45
2.1 Úvod. Pojem stavu v kvantovej mechanike	45
2.2 Vlnové funkcie voľnej častice	46
2.3 Vlnové balíky. Grupová rýchlosť de Broglieho vln a princíp korešpondencie	49
2.4 Časový vývoj stavu. Schrödingerova rovnica	52
2.5 Stacionárne stavy	54
2.6 Častica viazaná na úsečku	55
2.7 Stredné hodnoty fyzikálnych veličín	57
2.8 Stredné hodnoty veličín závisiacich od súradnice	58
2.9 Veličiny závislé od hybnosti	59
2.10 Operátory	63
2.11 Priradenie operátorov fyzikálnym veličinám	63
2.12 Operátory energie a momentu hybnosti, princíp korešpondencie	65
2.13 Hermitovské operátory, vlastné funkcie, vlastné hodnoty	67
2.14 Fyzikálne veličiny – všeobecný formalizmus	70
2.15 Zmena stavu pri meraní	73
2.16 Vlastné funkcie komutujúcich operátorov	75
2.17 Vzťah neurčitosti	78
2.18 Zhrnutie	83
2.19 Príklady a problémy	84
3 Vlastnosti riešení Schrödingerovej rovnice	86
3.1 Úvod	86
3.2 Rovnica kontinuity	86
3.3 Časová závislosť stredných hodnôt	88
3.4 Ehrenfestove vety	90
3.5 Stacionárne stavy	91
3.6 Príklady a problémy	93
4 Jednoduché sústavy	94
4.1 Úvod	94
4.2 Viazané a rozptylové stavy	94
4.3 Niektoré vlastnosti riešení bezčasovej Schrödingerovej rovnice	95
4.4 Jednorozmerná potenciálová jama	97
4.5 Nekonečne hlboká potenciálová jama	101
4.6 Lineárny harmonický oscilátor	102
4.7 Tunelový jav. Prechod častice cez bariéru	104

4.8	Trojrozmerný harmonický oscilátor. Metóda separácie premenných	108
4.9	Vlastné hodnoty a vlastné funkcie operátorov momentu hybnosti	109
4.10	Separácia premenných v sférických súradniciach	112
4.11	Atóm vodíka	115
4.12	Korekcia na pohyb jadra	120
4.13	Zhrnutie	121
4.14	Príklady a problémy	123
5	Spin. Sústavy s dvoma hladinami	125
5.1	Úvod	125
5.2	Stavy spinu	125
5.3	Operátory pôsobiace na spinové stavy a ich základné vlastnosti	127
5.4	Pauliho matice	130
5.5	Vlnové funkcie častice so spinom	134
5.6	Spin elektrónu v magnetickom poli	135
5.7	Sústavy s dvoma hladinami	137
5.8	Ďalšie vlastnosti matíc typu 2×2. Unitárne transformácie. Diagonalizácia	139
5.9	Sústavy s N hladinami. Vlastnosti hermitovských matíc typu $N \times N$	142
5.10	Zhrnutie	145
5.11	Príklady a problémy	146
6	Približné metódy výpočtu energií a vlnových funkcií viazaných stavov	147
6.1	Úvod	147
6.2	Stacionárna poruchová metóda. Prvé priblíženie v nedegenerovanom prípade	148
6.3	Stacionárna poruchová metóda. Druhé priblíženie k energii	149
6.4	Stacionárna poruchová metóda pre degenerované hladiny	151
6.5	Variačná metóda	153
6.6	Príklady a problémy	156
7	Poruchová metóda pre rozptylové stavy. Rozptyl častíc na statickom silovom poli	158
7.1	Úvod	158
7.2	Fyzikálna formulácia rozptylového problému	158
7.3	Diracova delta-funkcia	160
7.4	Integrovanie v komplexnej rovine	167
7.5	Greenova funkcia operátora $\nabla^2 + q^2$	168
7.6	Bornovo priblíženie pre rozptyl častice na potenciáli	172
7.7	Rutherfordova formula	174
7.8	Formfaktor	176
7.9	Príklady a problémy	178
8	Častica v elektromagnetickom poli	179
8.1	Úvod	179
8.2	Bezspinová častica v elektromagnetickom poli	179
8.3	Častica so spinom 1/2 v magnetickom poli. Pauliho rovnica	182
8.4	Kanonický formalizmus pre pohyb klasickej častice v elektromagnetickom poli	183
8.5	Kanonické kvantovanie	186
8.6	Bezspinová častica v elektromagnetickom poli. Kvantovomechanický opis pri kanonickom kvantovaní	187
8.7	Kalibračná invariantnosť	189
8.8	Príklady a problémy	190
9	Nestacionárna poruchová metóda	192
9.1	Úvod	192
9.2	Formalizmus nestacionárnej poruchovej metódy	192
9.3	Prechody pod vplyvom periodickej poruchy	194
9.4	Stimulovaná emisia a absorpcia	197
9.5	Vzťah neurčitosti pre energiu a čas	202
9.6	Bornovo priblíženie pre rozptyl častice na potenciáli	203
9.7	Príklady a problémy	205

10	Matematický formalizmus kvantovej mechaniky	206
10.1	Úvod	206
10.2	Hilbertov priestor	207
10.3	Matematický formalizmus kvantovej mechaniky	212
10.4	Teória reprezentácií	216
10.5	Prípad spojitého spektra	218
10.6	x-reprezentácia a p-reprezentácia	222
10.7	Harmonický oscilátor v energetickej reprezentácii	225
10.8	Opis časového vývoja	229
10.9	Matica hustoty	232
10.10	Zhrnutie	236
10.11	Príklady a problémy	237
11	Moment hybnosti. Rotácie	239
11.1	Úvod	239
11.2	Súvis momentu hybnosti s rotáciami	239
11.3	Moment hybnosti – všeobecný prípad	242
11.4	Skladanie momentov hybnosti. Clebschove-Gordanove koeficienty	247
11.5	Tenzorové operátory. Wignerova-Eckartova veta	253
11.6	Zhrnutie	255
11.7	Príklady a problémy	256
12	Atóm vodíka v statickom elektrickom a magnetickom poli. Jemná štruktúra spektrálnych čiar	257
12.1	Úvod	257
12.2	Kvalitatívna diskusia Starkovho javu	257
12.3	Starkov jav	260
12.4	Kvalitatívna diskusia spinovo-orbitálnej väzby	262
12.5	Spinovo-orbitálna väzba a relativistické korekcie	264
12.6	Jemná štruktúra spektrálnych čiar	265
12.7	Zeemanov jav	267
12.8	Príklady a problémy	269
13	Symetrie a zákony zachovania	270
13.1	Transformácie a symetrie	270
13.2	Grupy transformácií a ich reprezentácie	272
13.3	Lieove grupy	277
13.4	Translácie v čase a v priestore. Zachovanie energie a hybnosti	278
13.5	Priestorová a časová inverzia	280
13.6	Zhrnutie	286
13.7	Príklady a problémy	287
14	Elektromagnetické pole ako sústava oscilátorov	288
14.1	Úvod	288
14.2	Pozdĺžne kmity tyče. Klasický opis	288
14.3	Kmity tyče ako sústava oscilátorov	291
14.4	Elektromagnetické pole ako sústava oscilátorov	296
14.5	Planckov zákon pre žiarenie čierneho telesa	300
14.6	Planckov zákon a Einsteinove vzťahy pre absorpciu a emisiu žiarenia	301
14.7	Kvalitatívna diskusia vzťahu pre spontánnu emisiu	303
14.8	Príklady a problémy	304
15	Sústavy identických častíc	306
15.1	Úvod	306
15.2	Vlnová funkcia sústavy identických častíc	307
15.3	Symetrické a antisymetrické vlnové funkcie	308
15.4	Vlnová funkcia dvoch elektrónov. Klasifikácia hladín v atóme He. Výmenná interakcia	310
15.5	Opis n-časticových stavov pomocou obsadzovacích čísel. Kreačné a anihilačné operátory	313
15.6	Sekundárne kvantovanie	321
15.7	Príklady a problémy	325

16 Zrážky častíc	327
16.1 Úvod	327
16.2 Rozklad amplitúdy rozptylu do parciálnych vln	330
16.3 Rozptyl identických častíc	334
16.4 Rozptyl elektrónu na atóme	336
16.5 Opis rozptylu pomocou propagátora	338
16.6 Zhrnutie	345
16.7 Príklady a problémy	346
17 Gnozeologické otázky kvantovej mechaniky	348
17.1 Úvod	348
17.2 Bohrove názory. Kodanská interpretácia	349
17.3 Paradox Einsteina, Podolského a Rosena	352
17.4 Skryté parametre. Bellove nerovnosti	359
17.5 Paradox Schrödingerovej mačky	362
17.6 Problém merania	363
Dodatok A Niektoré špeciálne funkcie matematickej fyziky	367
A1 Eulerova gama funkcia	367
A2 Hermitove polynómy	367
A3 Legendreove polynómy a pridružené Legendreove funkcie	368
A4 Laguerreove polynómy	369
A5 Cylindrické funkcie	370
A6 Sférické Besselove funkcie	371
Dodatok B Fyzikálne konštanty	372
Literatúra	373
Register	374

Predhovor k vydaniu po 25 rokoch

Nové vydanie učebnice autorov vždy poteší, aj vtedy ak nie je nové obsahom ale len formou. Druhé vydanie učebnice „Úvod do kvantovej mechaniky“ (tzv. „Zelená knižka“) vyšlo v roku 1983 vo vydavateľstve ALFA Bratislava. Učebnica sa odvtedy používala na Matematicko-fyzikálnej fakulte Univerzity Komenského a po premenovaní na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského. Dnes je jednou z odporúčaných kníh k úvodnej prednáške nášho priateľa Tomáša Blažeka.

Elektronické vydanie tejto učebnice existuje už niekoľko rokov vďaka práci Petra Kohauta. Bolo dostupné na stránke FMFI UK, ale stránky sa časom prerábajú a v nedávnej minulosti sa tam už jednoducho nájsť nedalo. Dá sa k nemu doklikať cez Google, ktorý si to raz stiahol a už si to na svojich počítačoch nechal. Nové elektronické vydanie vzniká vďaka Ester Prešnajderovej a bude „oficiálne“. Bude teda riadne registrované a opravíme tam všetky chyby, ktoré sa nám podarí nájsť. Čitateľovi, ktorý by si chcel kópiu vytlačiť odporúčame, aby sa skôr pokúsil o získanie pôvodného tlačeneho vydania z roku 1983 za cenu blízku pôvodnej. Pred časom nás pán Sergej Troščák upozornil na to, že po zániku vydavateľstva ALFA sa zvyšné výtlačky tejto učebnice dostali do skladu vydavateľstva Univerzity Komenského a niekoľko ich tam ešte stále je. Ak má čitateľ o učebnicu záujem odporúčame mu, aby napísal doc. Tomášovi Blažekovi (blazek@fmph.uniba.sk) a zistil si, či ešte niečo neostalo.

Ako autorom nám neprichodí, aby sme túto učebnicu hodnotili. Predsa však si neodpustíme niekoľko poznámok. V uplynulých 25 rokoch sa vybralo na doktorandské štúdium do zahraničia viacero absolventov teoretickej fyziky. Na cestu si pribalili aj niekoľko svojich vysokoškolských učebníc. Potešilo nás, že niekoľkí z nich si so sebou vzali aj „Zelenú knižku“. V úvode z roku 1983 píšeme o tom, že učebnica bola úmyselne koncipovaná tak, aby sa základy kvantovej fyziky vysvetľovali postupne na troch úrovniach (intuitívne De Broglieho vlny, Schrödingerova vlnová mechanika a formalizmus Hilbertovho priestoru). Toto sa v podstate osvedčilo a zdá sa, že pomohlo objasniť základné pojmy kvantovej mechaniky.

Na druhej strane je ihneď vidno, že knižka zostarla. Ako ilustrácie sú v nej len čiernobiele perovky, zatiaľ čo v moderných učebniciach a populárnych knihách nachádzame krásne farebné obrázky. Učebnica trocha zostarla aj obsahom. Základné myšlienky kvantovej mechaniky sa síce nezmenili, ale medzitým boli vykonané mnohé krásne experimenty. Napríklad z oblasti „entanglovaných“ (zapletených) stavov, s ktorými sa v učebnici stretávame pri Bellových nerovnostiach, z oblasti nanotechnológií, manipulácie s jednotlivými atómami, Boseho-Einsteinova kondenzácia, myšlienky a experimenty k procesu merania a viaceré ďalšie.

Zostarli aj jednoduché precvičovacie úlohy. Nepokúsili sme sa ich nahradiť vhodnejšími, pretože čitateľ si ich môže nájsť v Zbierke úloh z kvantovej mechaniky (J. Pišút, V. Černý, P. Prešnajder, ALFA Bratislava, 1985), ktorá sa tiež objavuje v oficiálnej elektronickej verzii.

Na záver by sme chceli ešte raz poďakovať Ester Prešnajderovej a Petrovi Kohautovi, bez ktorých by sa toto oficiálne elektronické vydanie Zelené knižky neobjavilo na webe.

Budeme vďační za všetky pripomienky a návrhy k učebnici. Možno ich poslať na adresu pisut@fmph.uniba.sk alebo cerny@fmph.uniba.sk.

Autori

PREDHOVOR

Táto učebnica vznikla rozsiahlym prepracovaním prvého vydania. Jej súčasný tvar odráža naše skúsenosti získané počas prednášok a cvičení na Prírodovedeckej a na Matematicko-fyzikálnej fakulte (od jej založenia r. 1980) Univerzity Komenského v Bratislave. Obsahovo približne zodpovedá dvojsemestrovému kurzu kvantovej mechaniky pre poslucháčov fyzikálnych špecializácií. Úvodné kapitoly sme sa však snažili spracovať tak, aby boli užitočné i pre prípravu budúcich učiteľov fyziky.

Pozmenené usporiadanie materiálu vychádza zo skúsenosti, ktorá ukazuje, že študenti si osvojujú ťažšie fyzikálnu podstatu teórie ako jej náročný matematický aparát. Tomu, kto sa s kvantovou mechanikou zoznamuje prvý raz, sa ľahko môžu fyzikálne základy stratiť v záplave formálneho aparátu. Podstatné myšlienky sme sa preto usilovali zdôrazniť, a to i za tú cenu, že sa v učebnici napokon základy kvantovej mechaniky vysvetľujú postupne na troch úrovniach.

Po prvý raz hneď v prvej kapitole o elementárnej kvantovej mechanike („Kindergartenquantenmechanik“). Jej zaradenie do vysokoškolskej učebnice môže byť diskutabilné. Domnievame sa však, že je užitočné, a to i pre budúcich špecialistov na teoretickú fyziku, ktorých brilantné ovládanie aparátu zvädza k formálnym operáciám so symbolmi, bez toho, aby mali jasnú predstavu o ich fyzikálnom význame. Napriek formálnej jednoduchosti úvodnej časti učebnice by čitateľ mal rátať s tým, že pri prvom čítaní mu v nej nebude všetko jasné a mal by sa k nej vrátiť ešte raz neskôr – zhruba po prečítaní prvej polovice učebnice.

V súčasnosti sa veľa hovorí o prestavbe vyučovania fyziky na stredných školách a očakáva sa, že do nových gymnaziálnych učebníc budú zaradené i základy kvantovej mechaniky, samozrejme, na zodpovedajúcej úrovni. Predpokladáme, že prvá kapitola obsahuje približne nevyhnutné minimum hlbšie zvládnutých poznatkov pre učiteľa, ktorý by mal podľa nových osnov vyučovať. Isteže, učiteľ sa musí oboznámiť aj s formálnym aparátom, aby mal potrebný širší pohľad, ale materiál prvej kapitoly by mal ovládať naozaj do hĺbky.

Druhý raz sa základy kvantovej mechaniky preberajú v druhej až deviatej kapitole, v rámci vlnovej mechaniky. Pomocou jej aparátu sa riešia jednoduché úlohy, študuje sa poruchová metóda pre výpočet korekcií k viazaným stavom a skúmajú sa prechody medzi stacionárnymi stavmi spôsobené poruchou závislou od času.

Tretí raz sa základné myšlienky kvantovej mechaniky vysvetľujú v desiatej kapitole, kde je stav sústavy chápaný ako lúč v Hilbertovom priestore a kde je tiež zavedený všeobecný formalizmus kvantovej mechaniky daný týmto chápaním stavu.

Tri spomínané spôsoby výkladu odpovedajú v istom zmysle trom poschodiam jedinej budovy. Na vyššom poschodí môžeme riešiť viac problémov a môžeme aj zabudnúť na to, ako sme sa naň dostali. Ale často je užitočné vrátiť sa na nižšie poschodie, kde jednoduchšie postupy pomáhajú pri fyzikálnom chápaní problému. Jednotlivé poschodia sa líšia v podstate opisom stavu sústavy. Na prvom je to intuitívne chápaná de Broglieho vlna, na druhom vlnová funkcia aj s pravdepodobnostnou interpretáciou a na treťom vektor v Hilbertovom priestore. Podobne sa mení aj opis fyzikálnych veličín. Až najvyššie poschodie poskytuje jednotný a ucelený obraz, napríklad až na ňom vidno jasne, že spin elektrónu a stavy jednej alebo viacerých častíc sú opisované z jediného hľadiska.

Ostatná časť učebnice obsahuje opis sústav identických častíc, sekundárne kvantovanie a opis elektromagnetického poľa ako sústavy oscilátorov. Takto sa dá snáď najjednoduchšie prísť k Planckovmu zákonu pre žiarenie v dutinách zahriatych telies a bez neho by učebnica kvantovej mechaniky bola neúplná. Záverečná kapitola je venovaná otázkam interpretácie a problému merania.

Po metodologickej stránke sme knižku chápali ako úvodnú učebnicu a preto sme zväčša dávali prednosť názornosti a prístupnosti výkladu pred matematickou presnosťou. Pri mnohých tvrdeniach matematického charakteru napríklad neuvádzame obmedzujúce podmienky, za ktorých tvrdenie platí a pod. Inde na podobné nedôslednosti upozorníme iba v poznámke pod čiarou. Tým, pravda, netvrdíme, že v texte

sa nevyskytujú i „nechcené“ chyby, spôsobené našou nevedomosťou alebo nepozornosťou. Za upozornenia na ne budeme čitateľom vďační.

Podobne sme sa nemohli snažiť ani o úplnosť spracovania problematiky. Výber materiálu je určite subjektívny. Z rozsahových dôvodov sme vynechali i niektoré partie, ktoré by v úvodnej učebnici azda mali byť. Máme tu na mysli najmä Feynmanov prístup pomocou integrálov po trajektóriách, základné metódy kvantovej chémie, fyziky tuhých látok atď. Snáď najviac nám je ľúto za pôvodne zamýšľanou kapitolou o histórii kvantovej mechaniky. Predpokladáme teda, že čitateľ sa pri hlbšom a úplnejšom štúdiu kvantovej mechaniky obráti i k ďalším učebniciam a monografiám.

Učebnica je zostavovaná podobne ako prednáška a preto sme upustili od výkladu pomocného materiálu v dodatkoch. Usilujeme sa tiež v texte implicitne „odpovedať“ na niektoré z otázok, ktoré študenti často kladú na prednáškach a cvičeniach. Jazyk je preto niekedy viac „hovorový“ ako „monografický“.

Pre tých, ktorí by s knihou pracovali samostatne sa žiada poznamenať, že je normálne, keď niektoré veci ostanú pri prvom čítaní nejasné. Niekedy je užitočné vrátiť sa k nim neskôr, po prečítaní ďalších častí. Kvantová mechanika sa dá totiž ťažko usporiadať do „lineárneho reťazca“ myšlienok.

Za kapitolami, ktoré obsahujú viacero nových myšlienok nasleduje stručné zhrnutie a na precvičenie sme za jednotlivé kapitoly zaradili zopár úloh a problémov.

Vzhľadom na to, že jednotlivé články sú relatívne uzavreté, číslujeme vzťahy v každom článku osve. Systém odkazov na jednotlivé rovnice je potom nasledujúci: rovnica (8) znamená ôsmu rovnicu daného článku, symbol (1.8) znamená ôsmu rovnicu prvého článku danej kapitoly a napokon (2.1.8) označuje ôsmu rovnicu prvého článku druhej kapitoly.

Je nám ľúto, že na práci pri druhom vydaní sa už nemohol zúčastniť náš zosnulý priateľ a spolupracovník Ladislav Gomolčák. Vzhľadom na rozsah prepracovania učebnice sa na príprave tohto vydania zúčastnil i Vladimír Černý, ktorý sa na prvom vydaní priamo nepodieľal.

Autori sú zvlášť vďační akademikovi Václavovi Votrubovi za lektúru tejto učebnice. Jeho podrobný a rozsiahly posudok obsahoval nielen upozornenia na početné nepresnosti a chyby v pôvodnej verzii rukopisu, ale často aj premyslené návrhy na ich odstránenie. Jeho pripomienky podstatne ovplyvnili konečnú verziu rukopisu na viacerých miestach (spomeňme aspoň spôsob výkladu matice hustoty, diskretných symetrií a gnozeologických otázok kvantovej mechaniky). Aj keď starostlivá lektúra profesora Votrubu uchránila čitateľa od najhoršieho, v učebnici asi ostalo viacero nepresností. Za ne, práve tak ako za koncepciu učebnice vcelku i za prístup k jednotlivým témam nesú zodpovednosť výlučne autori.

Za upozornenia na viaceré nedopatrenia v rukopise a za cenné a užitočné diskusie sme ďalej vďační Petrovi Lichardovi, Vladovi Balekovi, Petrovi Prešnajderovi a Štefanovi Olejníkovi i viacerým študentom z tých, ktorým sme podľa predbežnej verzie rukopisu prednášali.

Svojim manželkám ďakujeme za trepezlivosť a vedúcej redakcie teoretickej literatúry vo vydavateľstve Alfa Anne Známovej a jej dievčatám z redakcie za porozumenie s ťažkosťami života autorov.

Bratislava 1982

Vladimír Černý a Ján Pišút

1 ELEMENTÁRNA KVANTOVÁ MECHANIKA

1.1 ÚVODNÁ POZNÁMKA

Kvantová mechanika je teória štruktúry atómov, ich vzájomných interakcií, interakcií atómov so žiarením a mnohých ďalších javov, pri ktorých je štruktúra látok na atomárnej úrovni rozhodujúca. Pre všetky tieto javy sú typické vzdialenosti 10^{-10} m, prenosi energie 10^{-19} J a momenty hybností 10^{-34} Js, ktoré sú oveľa menšie ako hodnoty obdobných fyzikálnych veličín, známych z každodennej skúsenosti. Nie je teda prekvapujúce, že kvantová mechanika používa iný pojmový aparát a zákonitosti iného typu ako klasická fyzika.

V tejto kapitole sa budeme zaoberať kvalitatívnou diskusiou základných experimentálnych faktov, ktoré viedli ku vzniku kvantovej mechaniky a budeme si všimáť vplyv týchto faktov pri vzniku pojmovej štruktúry kvantovej teórie. Diskusia bude matematicky veľmi elementárna, pretože v tejto kapitole by sme chceli prezentovať fyzikálne myšlienky v tej najjednoduchšej forme.

1.2 PREDMET KVANTOVEJ MECHANIKY

Základné myšlienky kvantovej teórie vznikli pri snahe pochopiť experimentálne údaje, ktoré klasická fyzika nebola schopná vysvetliť ani len kvalitatívne. V týchto experimentoch sa skúmala interakcia žiarenia a častíc s atómami, atómové spektrá a niektoré ďalšie javy bezprostredne súvisiace so štruktúrou atómov a molekúl a s ich usporiadaním v zložitejších sústavách. Na pôde týchto problémov vznikla kvantová mechanika a vyrástla v novú, logicky konzistentnú a ucelenú teóriu, dokonale opisujúcu experimentálne fakty atómovej fyziky. Podstatnú úlohu pri zrode kvantovej mechaniky zohrali poznatky o kvantových vlastnostiach žiarenia vystihnuté v pojme fotónu. Tento pojem¹ zaviedol v r. 1905 Albert Einstein v teórii fotoelektrického javu a podnetom pre vznik tohto pojmu bola Planckova teória (1900) spektra žiarenia vysielaného zahriatymi telesami (tepelné žiarenie).

V nasledujúcom si všimneme tie skutočnosti, ktoré prinútili fyziku začiatkom 20. storočia hľadať novú teóriu javov vo svete atómov a potom v článku 1.4 sa budeme zaoberať typickými veličinami atómovej fyziky.

1.3 KVANTOVANIE ENERGIE AKO EMPIRICKÝ FAKT

Nová fyzikálna teória nevzniká sama od seba, ale väčšinou – a v prípade kvantovej mechaniky to tak bolo – pod vplyvom nových experimentálnych výsledkov. Proces nie je priamočiary, ale je to vlastne prelínanie dvoch procesov – experimenty stimulujú vznik nových teoretických myšlienok a tieto zas naznačujú zameranie nových experimentov, overujúcich teoretické myšlienky a poskytujúcich nové údaje. Trvá istú dobu, kým sa tento vývojový proces uzatvorí a „teória je hotová“. V prípade kvantovej mechaniky sa tento proces zavŕšil koncom dvadsiatych rokov.

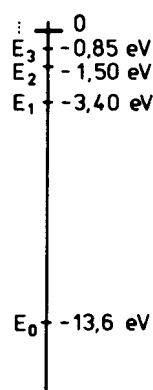
V tejto úvodnej učebnici budeme postupovať induktívne, ale nebudeme sledovať podrobne komplikovaný historický vývoj, ani nebudeme podrobne rozoberať jednotlivé experimenty.² Pod experimentálnymi faktami budeme mať na mysli skôr niektoré črty zhrňujúce výsledky viacerých experimentov.

¹ Einstein používal termín svetelné resp. energetické kvantum. Einsteinove svetelné kvantá nazval prvý raz fotónmi A. H. Compton r. 1923.

² Mimochodom, podrobná diskusia niektorých z týchto experimentov je vynikajúcou náplňou pre študentské krúžky, a podobne vhodnými témami sú i niektoré momenty z histórie vzniku kvantovej teórie. V učebnici však pre ne, bohužiaľ, niet dostatok miesta.

Jednou z najzávažnejších skutočností, ktorá je zabudovaná do základov kvantovej teórie, je experimentálny fakt existencie diskretných energetických hladín atómov. Tento fakt je podstatne odlišný od toho, čo by sme očakávali v klasickej fyzike.

Experimentálne je jednoznačne ukázané, že možné hodnoty energie atómu tvoria diskretnú množinu. Hovoríme, že energia atómov je kvantovaná. Ako príklad uvádzame možné hodnoty energie atómu vodíka na obr. 1.1. Pri znázorňovaní možných hodnôt energie je zvykom orientovať os, na ktorú vynášame energiu zvisle; možné hodnoty energie potom nazývame energetickými hladinami a hovoríme o „vyšších“ či „nižších“ hladinách. Ako je dobre známe, energia sústavy je určená až na aditívnu konštantu a pri určovaní energie atómu vodíka je zvykom voliť túto konštantu tak, aby energia sústavy protón – elektrón, ktoré sú oba v pokoji a veľmi ďaleko (∞) od seba, bola rovná nule. Ak z takejto začiatočnej situácie vznikne viazaný stav (atóm vodíka), príslušná väzbová energia sa uvoľní, napríklad v podobe žiarenia. Energia sústavy tým poklesne a v našej konvencii bude záporná. Stav, ktorému na obrázku odpovedá najnižšia energia³ ($-13,6$ eV) nazývame základným stavom atómu vodíka, stavy s vyššou energiou nazývame excitovanými stavmi.



Obr. 1.1

Ak atómu vodíka v základnom stave dodáme energiu väčšiu ako $13,6$ eV, môžeme atóm ionizovať, t. j. oddeliť elektrón od protónu. Túto energiu nazývame ionizačnou energiou atómu vodíka. Ak sa atóm nachádza v stave s energiou $E_2 = -3,4$ eV, potom na oddelenie elektrónu od protónu potrebujeme atómu dodať energiu väčšiu ako $3,4$ eV atď.

To, že energia atómu vodíka môže nadobúdať iba určité diskkrétne hodnoty je v ostrom rozpore s predstavou atómu ako planetárnej sústavy správajúcej sa podľa zákonov klasickej mechaniky.

Celková energia sústavy častíc pohybujúcich sa podľa zákonov klasickej (Newtonovej) mechaniky je daná súčtom kinetickej a potenciálnej energie

$$E = \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 + \sum_{i>k} V(r_{ik})$$

kde m_i sú hmotnosti a \mathbf{v}_i rýchlosti jednotlivých častíc, $r_{ik} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|$ je vzdialenosť i -tej a k -tej častice a $V(r_{ik})$ je potenciálna energia vzájomného pôsobenia týchto dvoch častíc. Pohyb častíc je určený Newtonovými zákonmi a začiatočnými podmienkami. Energia sústavy sa časom nemení a závisí len od začiatočných podmienok. Spojitej zmene začiatočných podmienok odpovedá spojitá zmena energie sústavy.

Diskrétnosť energie atómov sa prejavuje v čiarovom charaktere atómových spektier. V spektrách sa objavujú len určité diskkrétne hodnoty frekvencií (a teda aj vlnových dĺžok) žiarenia. Čiarový charakter atómových spektier interpretoval Niels Bohr r. 1913 na základe nasledujúcich dvoch postulátov:

1. Atóm sa môže nachádzať iba v určitých diskretných stavoch, ktorým prislúchajú diskkrétne hodnoty energií.

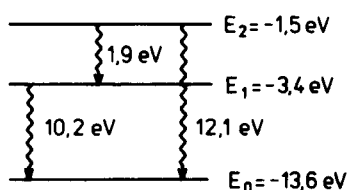
³ Jeden eV je energia, ktorú získa častica s elementárnym nábojom, ak je urýchlená rozdielom potenciálov 1 V;
 $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

2. Pri prechode atómu zo stavu s energiou E_m do stavu s nižšou energiou E_n sa vyžiari jediné kvantum energie žiarenia – fotón – s energiou rovnou $E_m - E_n$ a frekvenciou ν danou vzťahom

$$E_m - E_n = 2\pi\hbar\nu$$

kde \hbar je Planckova konštanta.

Tieto postuláty obsahujú jednak predpoklad o existencii diskretných viazaných stavov a jednak predpoklad o tom, že rozdiel energie je odnesený jediným fotónom, ktorého energia je daná vzťahom používaným Planckom pri analýze žiarenia vysielaného zahriatymi telesami a Einsteinom pri analýze fotoelektrického javu. Zo spektra preto ľahko možno určiť energetické rozdiely hladín atómu (obr. 1.2). Obidva Bohrove postuláty si zachovali svoju platnosť a vošli do základov kvantovej teórie. Okrem nich Bohr zaviedol ešte tretí postulát umožňujúci vypočítať hodnoty energie atómu vodíka. Podľa tohto postulátu sa elektrón v atóme vodíka smel pohybovať iba po tých klasických kruhových trajektóriách, pri ktorých je moment hybnosti elektrónu rovný celočíselnému násobku Planckovej konštanty \hbar . Na dráhach povolených týmto postulátom mal elektrón udelenú výnimku v tom, že nemusel vyžarovať podľa zákonov klasickej elektrodynamiky⁴.

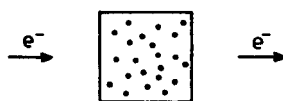


Obr. 1.2

Tretí postulát sa nepodarilo úspešne použiť už pri výpočte spektra druhého najľahšieho prvku – hélia. Kvantovanie momentu hybnosti sa neskôr stalo jednou z podstatných črt kvantovej mechaniky, ale jeho vysvetlenie je dnes podstatne iné ako v Bohrovom modeli.

Vcelku možno povedať, že Bohrov model atómu vodíka zohral veľmi vážnu úlohu v období pred vznikom súčasnej kvantovej mechaniky. Jeho ťažkosti – ako sa neskôr ukázalo – vyplývali v podstate z toho, že v treťom postuláte sa predpokladalo, že elektrón v atóme sa pohybuje po klasickej trajektórii. Ukázalo sa – a hlboký rozpor medzi existenciou diskretných energetických hladín a princípmi klasickej fyziky to aj naznačuje – že elektrón (a najmä jeho kvantové stavy) treba chápať spôsobom podstatne odlišným od pojmovej štruktúry klasickej fyziky.

Od spektroskopie nezávislým potvrdením existencie diskretnosti možných energií atómov sú *Franckove a Hertzove pokusy* (1913).



Obr. 1.3

Zjednodušená základná myšlienka jedného z pokusov je znázornená na obr. 1.3. Zväzok elektrónov známej energie E prechádza cez zriedený plyn. Po prechode plynom budú mať niektoré elektróny energiu E , iné E' , ďalšie E'' atď. Podstatné je to, že zmena energie elektrónu je diskretná. Vysvetlenie je jednoduché: pri prechode zväzku elektrónov plynom dochádza k zrážkam elektrónov s atómami plynu. Pokiaľ sa pri týchto zrážkach nemení stav atómu, nebude sa meniť ani energia elektrónov.⁵ Ak sa však atóm pri zrážke excituje a prejde do stavu s vyššou energiou, potom elektrón stráca práve toľko

⁴ Podľa zákonov elektrodynamiky každý náboj pohybujúci sa s nenulovým zrýchlením vyžaruje elektromagnetické vlny a stráca energiu. Dá sa odhadnúť, že elektrón pohybujúci sa po kruhovej dráhe v atóme vodíka by musel v dôsledku vyžarovania energie spadnúť do jadra za menej ako 10^{-5} s.

⁵ Toto je dôsledkom zákonov zachovania energie a hybnosti pri zrážke a toho, že elektrón je omnoho (rádovo $1 : 10^4$) ľahší ako atóm. Známym príkladom z denného života je zrážka stolnotenisovej loptičky a ťažkej kovovej gule. Hybnosť loptičky sa pri zrážke zmení, ale nezmení sa absolútna hodnota jej rýchlosti a teda ani jej kinetická energia.

energie, koľko treba na excitáciu atómu do príslušného vyššieho stavu. Rozdiely energií elektrónov ($E - E'$, $E - E''$ atď.), potom priamo udávajú rozdiely energií medzi excitovanými stavmi a základným stavom. Hodnoty namerané vo Franckových a Hertzových pokusoch boli opäť diskkrétne a rovnaké ako hodnoty získané zo spektier atómov.

1.4 TYPICKÉ HODNOTY VELIČÍN V ATÓMOVEJ FYZIKE

V tomto článku si pripomenieme niekoľko faktov známych z atómovej fyziky a uvedieme typické hodnoty jej základných veličín. Poznanie týchto veličín je potrebné pre spojenie matematického formalizmu kvantovej mechaniky s predstavou o fyzikálnej skutočnosti.

Pri riešení praktických problémov treba vždy najprv oddeliť to podstatné od menej podstatného a pri tom tiež potrebujeme poznať aspoň rádové hodnoty jednotlivých veličín.

Typické rozmery atómov a molekúl sú rádovo 10^{-10} až 10^{-9} m. Hrubý odhad možno získať aj veľmi primitívne, napríklad z hrúbky olejovej vrstvy na vodnej hladine ak predpokladáme, že táto je vytvorená jedinou vrstvou molekúl. Benjamín Franklin (1706 – 1790) si všimol, že 5 cm^3 oleja sa roztečie na hladine na plochu 0,2 hektára. Výška olejovej vrstvy je takto $2,5 \cdot 10^{-9}$ m, čo dáva rozumný odhad veľkosti molekuly⁶.

S rozmerom molekúl bezprostredne súvisí Avogadrova konštanta ($N_A = 6,022 \cdot 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$). Naozaj, ak poznáme rozmer molekuly, vieme odhadnúť i objem pripadajúci na jednu molekulu a vieme odhadnúť aj počet molekúl v istom makroskopickom objeme, napr. v objeme, ktorý zaberá 1 kmol látky. Pre vodu je kilomól 18 kg a príslušný objem je $18 \text{ l} = 18 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$. Ak lineárny rozmer molekuly vody je $x \cdot 10^{-10}$ m, potom v jednom kilomóle je

$$N_A = \frac{18 \cdot 10^{-3}}{(x \cdot 10^{-10})^3} \approx \frac{18}{x^3} \cdot 10^{27} \text{ molekúl}$$

Očakávame, že x je zhruba niekoľko jednotiek, a preto takto získaný odhad, hoci mimoriadne hrubý, nie je zlý.

Typické hodnoty energetických zmien, ku ktorým dochádza pri chemických reakciách sú rádovo 1 eV na jednu molekulu. Skutočne, každodenná skúsenosť hovorí, že spálením 1 kg uhlia sa získa okolo $2 \cdot 10^7$ J tepla, na jednu reakciu $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ teda pripadá (počítame pre 12 kg, t. j. jeden kilomól čistého uhlíka)

$$E = \frac{12 \cdot 2 \cdot 10^7}{6 \cdot 10^{26}} \text{ J} \approx 2 \text{ eV}$$

Takéto hodnoty energie sú konzistentné s informáciou o rozmeroch atómu. Skutočne, skúsme odhadnúť v akej vzdialenosti od jadra treba očakávať výskyt elektrónu v atóme vodíka ak ionizačná energia je 13,6 eV.

Pripomeňme si najprv jeden vzťah známy z klasickej fyziky. Predstavme si ľahkú klasickú časticu s nábojom $-e$ a hmotnosťou m pohybujúcu sa po kružnici o polomere r v Coulombovom poli budenou ťažkou časticou s nábojom e , nachádzajúcou sa v začiatku súradnicovej sústavy. Hmotnosť častice násobená dostredivým zrýchlením musí byť rovná elektrostatickej príťažlivej sile⁷

$$\frac{mv^2}{r} = K \frac{e^2}{r^2}, \quad K \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

⁶ V skutočnosti sú molekuly oleja dosť dlhé reťazce, ktoré stoja kolmo na hladinu vody a uvedené číslo udáva dĺžku molekuly oleja. Typické rozmery jednoduchých molekúl sú preto o čosi menšie.

⁷ V Rutherfordovom modeli atómu i v súčasnej kvantovej mechanike je potenciálna energia interakcie jadra a elektrónu čisto coulombovská (pokiaľ zanedbávame relativistické korekcie a interakciu magnetických momentov častíc). V staršom Thomsonovom modeli bola interakcia medzi elektrónom a kladným nábojom atómu podstatne zložitejšia, pretože kladný náboj nebol bodový, ale bol rozdelený spojité po celom objeme atómu.

Po násobení oboch strán faktorom $r/2$ dostaneme

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{K}{2} \cdot \frac{e^2}{r} \equiv -\frac{1}{2} E_{\text{pot}}$$

a pre celkovú energiu máme

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2} \frac{Ke^2}{r}$$

Pre energiu E' potrebnú na vytrhnutie takejto klasickej častice z daného viazaného stavu takto máme $E' = Ke^2/2r$.

Elektrón nie je klasickou časticou a jeho pohyb v atóme nemôžeme považovať za klasický pohyb po určitej trajektórii. Predsa však očakávame, že pre ionizačnú energiu atómu vodíka E_{ion} bude platiť

$$E_{\text{ion}} \approx \frac{1}{2} \cdot \frac{Ke^2}{r} \quad (2)$$

kde r je veličina s rozmerom dĺžky, rádovo rovná rozmeru atómu vodíka. Ak sem dosadíme $E_{\text{ion}} = 13,6 \text{ eV}$, $K = 9 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ dostaneme rádový odhad rozmeru atómu vodíka

$$r \approx \frac{Ke^2}{2E_{\text{ion}}} = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Pokúsime sa teraz odhadnúť typické rýchlosti elektrónu v atóme vodíka, pretože tento odhad potrebujeme prinajmenšom na to, aby sme vedeli, či pohyb elektrónu musíme uvažovať ako relativistický (a to by sme museli, keby typické rýchlosti boli takého rádu ako je rýchlosť svetla), alebo či nám stačí nerelativistické priblíženie. Na základe (1) a (2) očakávame, že rádovú veľkosť rýchlosti elektrónu v atóme vodíka možno odhadnúť zo vzťahu

$$E_{\text{kin}} = mv^2/2 \approx E_{\text{ion}}$$

Pre rádovú veľkosť rýchlosti odtiaľ dostávame

$$v \approx 2 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1} \ll c = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

Rýchlosti elektrónu sú teda o dva rády menšie ako rýchlosť svetla a pohyb elektrónu v atóme vodíka možno v dobrom priblížení považovať za nerelativistický. Relativistické efekty ale nie sú celkom zanedbateľné a už pri výpočte jemnej štruktúry spektrálnych čiar treba brať do úvahy aspoň prvé relativistické korekcie.

Odhadnime ešte typickú veľkosť momentu hybnosti elektrónu v atóme. V klasickej mechanike je moment hybnosti určený vzťahom $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, takže pre veľkosť momentu hybnosti platí $L \approx mvr$. Možno teda očakávať, že v atómovej fyzike bude typická hodnota veličiny L daná odhadom

$$L \approx mvr$$

kde m je hmotnosť elektrónu, r je typický rozmer atómu a v je typická rýchlosť elektrónu v atóme. Ak sem dosadíme, máme hodnotu

$$L \approx 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 2 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1} \approx 10^{-34} \text{ Js}$$

Rádová zhoda tejto veličiny s Planckovou konštantou

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1,034 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

je isto nápadná.

Poznámka

Pozrime sa teraz na základné veličiny atómovej fyziky z trocha iného hľadiska. Predpokladáme, že v atóme bude mať dôležitú úlohu coulombovská interakcia, do ktorej vstupuje elementárny náboj

v kombinácii Ke^2 (kde $K = 1/(4\pi\epsilon_0)$), ďalej bude dôležitá veľkosť hmotnosti elektrónu m_e a ak je dynamika sústavy kvantová, objaví sa v teórii určite Planckova konštanta \hbar . Rozmery týchto veličín sú po rade

$$\begin{aligned}[\hbar] &= \text{Js} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-1} \\ [Ke^2] &= \text{Nm}^2 = \text{kg m}^3 \text{s}^{-2} \\ [m_e] &= \text{kg}\end{aligned}$$

Pozrime sa teraz na to, ako môžeme pomocou týchto troch veličín skonštruovať veličiny s rozmerom dĺžky, rýchlosti, energie a momentu hybnosti. Postup si ukážeme na prípade dĺžky. Označme veličinu dĺžky ako a_1 a zapíšeme

$$a_1 = (\hbar)^\alpha (Ke^2)^\beta (m_e)^\gamma$$

Koeficienty α , β , γ určíme z toho, aby rozmery výrazov na ľavej a na pravej strane boli rovnaké. Rozmer veličiny na ľavej strane je m , ale zapíšeme ho ako $\text{m}^1 \text{kg}^0 \text{s}^0$. Pravú stranu rozpíšeme podrobnejšie a máme

$$\begin{aligned}\text{m}^1 \text{kg}^0 \text{s}^0 &= (\text{kg m}^2 \text{s}^{-1})^\alpha (\text{kg m}^3 \text{s}^{-2})^\beta (\text{kg})^\gamma = \\ &= (\text{kg})^{\alpha+\beta+\gamma} \text{m}^{2\alpha+3\beta} \text{s}^{-\alpha-2\beta}\end{aligned}$$

Porovnaním rozmerov na oboch stranách dostaneme podmienky

$$\begin{aligned}1 &= 2\alpha + 3\beta \\ 0 &= \alpha + \beta + \gamma \\ 0 &= \alpha + 2\beta\end{aligned}$$

Riešením týchto troch rovníc je $\alpha = 2$, $\beta = \gamma = -1$ a dostávame

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{m_e Ke^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Táto veličina, nazývaná Bohrovým polomerom (atómu vodíka) je najjednoduchšou veličinou s rozmerom dĺžky, ktorú môžeme skonštruovať z veličín \hbar , m_e , Ke^2 a možno teda očakávať, že a_1 bude typická dĺžka v atómovej fyzike. Podobne môžeme skonštruovať typickú rýchlosť v_1 a energiu E_1 . Dostaneme tak

$$\begin{aligned}v_1 &= \frac{Ke^2}{\hbar} = \frac{1}{137} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \\ E_1 &= \frac{1}{2} \frac{m_e (Ke^2)^2}{\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}\end{aligned}$$

Vo vzťahu pre energiu sme tu do výrazu pridali faktor $1/2$, aby číselná hodnota E , nebola dvojnásobkom (ale priamo rovná) energii väzby v základnom stave atómu vodíka⁸.

Predchádzajúca jednoduchá rozmerová analýza naznačuje, že v atómovej fyzike budú mať fyzikálne veličiny rozmeru dĺžky, rýchlosti a energie veľkosť rádovo rovnú a_1 , v_1 , E_1 . Myslené je to tak, že pri jednoduchej teórii „šítej na mieru“ daného okruhu problémov je prirodzené dostať vo výsledkoch číselné faktory typu $1/4$, 2 , $\pi/2$ a pod., ale je menej prirodzené prísť pre niektorú z veličín k výsledku typu $1,74192632 \cdot 10^{11}$. Ak je kvantová teória „šitá na mieru“ problémov atómovej fyziky, potom naozaj očakávame, že veličiny charakterizujúce štruktúru atómu, ktoré majú rozmery dĺžky, rýchlosti, energie a momentu hybnosti sú rádovo rovné a_1 , v_1 , E_1 , \hbar . Pri riešení kvantovomechanických problémov je preto spravidla užitočné prejsť k bezrozmerným premenným, čo prakticky znamená, že dĺžku meriame v jednotkách a_1 , energiu v jednotkách E_1 atď. Toto je fyzikálny obsah viet typu „pomocou substitúcie...“

⁸ Podobné rozmerové úvahy použil Bohr vo svojej prvej práci o atóme vodíka v r. 1913.

prejdeme k bezrozmerným premenným⁹, s ktorými sa ešte viackrát stretne pri riešení Schrödingerovej rovnice. Výsledok získaný predchádzajúcou jednoduchou rozmerovou analýzou možno zhrnúť takto: najjednoduchšie veličiny s rozmermi dĺžky, rýchlosti, energie a momentu hybnosti skonštruované z veličín \hbar , Ke^2 , m_e majú veľkosti typické pre veľkosti základných veličín atómovej fyziky. O tom, že tento fakt je netriviálny sa najjednoduchšie presvedčíme tým, že skúsime niečo čo „nepracuje“. Predstavme si napríklad, že by sme chceli „vyrobiť“ *nekvantovú relativistickú* teóriu štruktúry atómu. Potom by základnými veličinami boli m_e , Ke^2 a rýchlosť svetla c (pretože teória by bola nekvantová, Planckova konštanta by nehrala podstatnú úlohu). V tejto situácii by sme pre jednoduchú veličinu s rozmerom energie získali výraz $m_e c^2 = 0,511 \cdot 10^6$ eV, pre veličinu s rozmerom dĺžky $Ke^2/m_e c^2 = 2,818 \cdot 10^{-15}$ m, pre rýchlosť, prirodzene, $c = 3 \cdot 10^8$ ms⁻¹ a pre moment hybnosti Ke^2/c , čo je približne 137-krát menšie ako Planckova konštanta \hbar .

„Prirodzené veličiny“ takejto nekvantovej relativistickej teórie by nemali nič spoločné so základnými veličinami atómovej fyziky.

1.5 KVANTOVÉ VLASTNOSTI ŽIARENIA

Elementárne kvantové vlastnosti žiarenia sú dnes dobre známe už zo stredoškolskej fyziky a nebudeme sa preto touto témou zaoberať podrobnejšie. Spomenieme iba (ako to ukazuje napríklad analýza fotoelektrického javu), že žiarenie si možno predstaviť ako prúd kvánt žiarenia – fotónov, pričom každý fotón má energiu $E = \hbar\omega$, kde ω je kruhová frekvencia žiarenia a \hbar je Planckova konštanta. Žiarenie okrem energie prenáša i hybnosť. Experimentálnym dôsledkom tejto skutočnosti je napríklad svetelný tlak (prvý raz zmeraný Lebedevom). Fotónu preto pripisujeme energiu i hybnosť

$$E = \hbar\omega \quad p = \hbar \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1)$$

kde λ je vlnová dĺžka žiarenia. Vzťah medzi hybnosťou a vlnovou dĺžkou je azda menej známy ako vzťah medzi energiou a kruhovou frekvenciou, preto pridáme aspoň jednoduchý argument zo špeciálnej teórie relativity. Podľa nej pre časticu s pokojovou hmotnosťou m_0 , energiou E a hybnosťou p platí

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

Ak fotónu priradíme $m_0 = 0$, dostaneme

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar}{c} \cdot 2\pi \frac{1}{T} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}$$

a to je práve druhá časť vzťahu (1). Určitú hybnosť (t. j. veľkosť i smer) môžeme priradiť iba fotónom *rovinnej* harmonickej svetelnej vlny. Predpokladajme, že táto rovinná vlna má kruhovú frekvenciu ω , vlnovú dĺžku λ a šíri sa v smere určenom jednotkovým vektorom \mathbf{n} . Rovinnej vlne priradíme vlnový vektor¹⁰ v tvare $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{n}$. Pre energiu a hybnosť fotónu tejto rovinnnej vlny potom platí

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2)$$

Pre oboznámenie sa s typickými hodnotami energií fotónov je užitočné zrátať si ako cvičenie energie fotónov príslušné k jednotlivým typom elektromagnetických vln. Ako príklad uveďme, že viditeľnému svetlu odpovedajú fotóny s energiami zhruba od 1,5 eV (červená oblasť) po 3,5 eV (fialová oblasť). Je teda zrejmé, že na ionizáciu atómu vodíka zo základného stavu (-13,6 eV) treba použiť už ultrafialové žiarenie a že viditeľnému svetlu budú odpovedať prechody z 3., 4., ... hladiny na 2. hladinu (Balmerova séria).

⁹ V atómovej fyzike je vhodné (a vo svetovej literatúre je to aj zvykom) vyjadrovať dĺžky, rýchlosti, energie a momenty hybnosti v prirodzených a „atómom na mieru šitých“ jednotkách a_1 , v_1 , E_1 , \hbar .

¹⁰ Absolútnu hodnotu vlnového vektora $k = |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ nazývame vlnčtom.

1.6 VLNOVÉ VLASTNOSTI ČASTÍC

Jedným z rozhodujúcich momentov pri vzniku súčasnej kvantovej mechaniky bola de Broglieho hypotéza (1924) o vlnových vlastnostiach častíc. Podľa nej častice s energiou E a hybnosťou \mathbf{p} priradíme rovinnú vlnu, charakterizovanú kruhovou frekvenciou ω a vlnovým vektorom \mathbf{k} , pričom

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E \quad \mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p}$$

Tieto vzťahy sú formálne analogické vzťahom (5.2) platným pre fotóny rovinatej elektromagnetickej vlny. Vzťahy (1) platia iba pre voľnú časticu. Ak sa častica pohybuje v silovom poli (napríklad elektrón v atóme vodíka), priradenie vlny k tomuto pohybu častice je oveľa komplikovanejšie a analýza tejto otázky (spolu s tým ako treba interpretovať toto priradenie vlny častici) tvorí podstatnú časť náplne našej knihy. K tejto problematike sa ešte vrátíme viac ráz, no na úvod nám zatiaľ stačí prípad voľnej častice.

Pozrime sa najprv na niekoľko bezprostredných dôsledkov de Broglieho hypotézy. Pri hľadaní prejavov predpokladanej vlnovej povahy častíc musíme hľadať typické vlastnosti vln ako sú interferencia a difrakcia. Keby sme sa totiž hlbšie zamysleli nad tým, čo to je „vlna“ z hľadiska klasickej fyziky, prišli by sme asi k tomu, že je to niečo schopné interferencie (difrakcia je jej špeciálnym prípadom). Najprv si však musíme urobiť konkrétnejšiu predstavu o typických vlnových dĺžkach elektrónov. Napríklad elektrón urýchlený napätím $U = 10$ kV získa kinetickú energiu

$$\frac{1}{2m_e} p^2 = eU$$

a podľa vzťahu (1) mu teda prislúcha vlna s vlnovou dĺžkou

$$\lambda = 2\pi\hbar \sqrt{\frac{1}{2m_e eU}} \approx 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

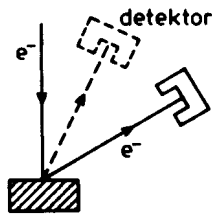
Tu vidno dôvod, prečo sa pri elektrónovom lúči v obrazovke televízora (čo je približne situácia odpovedajúca takto urýchleným elektrónom) nemôžu prejavovať vlnové vlastnosti elektrónov. Rozmery elektród v obrazovkách sú totiž rádovo podstatne väčšie ako nájdená vlnová dĺžka. Pre elektróny urýchlené napätiami niekoľko sto voltov máme vlnové dĺžky elektrónov v oblasti 10^{-10} m a pre takéto elektróny príroda poskytuje priestorové štruktúry tej istej veľičiny – kryštály, v ktorých sú medziatómové vzdialenosti tiež rádovo 10^{-10} m. Ak necháme elektrónový lúč dopadať na vhodný monokryštál, lúč sa rozptýli (*obr. 1.4*). Podľa klasickej fyziky by sme očakávali málo pravidelnosti v smeroch rozptýlených elektrónov. Ako však ukázali pokusy *Davissona a Germera* (1927) intenzita rozptýleného zväzku závisí veľmi silne od smeru. V krivke uvádzajúcej závislosť intenzity rozptýleného zväzku od uhla rozptylu sa pozorovali výrazné maximá a minimá a ich poloha navyše závisela od energie dopadajúceho zväzku.¹¹

De Broglieho hypotéza prirodzene vysvetľuje pozorované zákonitosti v intenzitách rozptýlených elektrónov ako dôsledok interferencie de Broglieho vln odrazených od jednotlivých atómov v kryštáli. V uhlovom rozložení rozptýlených elektrónov je potom prirodzené očakávať typické interferenčné maximá a minimá. Interferenčný obraz závisí aj od dĺžky vln. Táto zas podľa vzťahu $\lambda = 2\pi\hbar/p$ závisí od hybnosti, a teda od energie dopadajúcich elektrónov, a preto je aj poloha pozorovaných maxim a minim závislá od energie primárneho elektrónového zväzku.

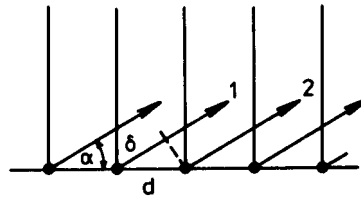
Matematický opis interferencie de Broglieho vln odrazených od monokryštálu je pomerne komplikovaný. Dobrým priblížením k situácii v experimentoch *Davissona a Germera* je uvažovať rozptyl de Broglieho vlny na povrchovej vrstve atómov. Pre rovinnú vlnu dopadajúcu kolmo na rovinu atómov je táto zjednodušená situácia znázornená na *obr. 1.5*. Dráhový rozdiel lúčov 1 a 2 (pozri *obr. 1.5*) je $\delta = d \cos \alpha$. Interferenčné maximá de Broglieho vln očakávame v smeroch, pre ktoré platí

$$d \cos \alpha = n\lambda \quad (2)$$

¹¹ Odporúčame čitateľovi oboznámiť sa podrobnejšie aspoň s niektorými z klasickej experimentov, ktoré tu uvádzame iba v náznakoch. Podrobnosti možno nájsť napríklad v knižke Trigg, G.: Rešajúščeje experimenty v súčasnej fyzike. Mir, Moskva 1974 (preklad z anglického originálu).



Obr. 1.4



Obr. 1.5

Experimenty Davissona a Germera ukázali, že elektróny sa od povrchu monokryštálu odrážajú najčastejšie v smeroch daných podmienkou (2). Na to, aby sme odtiaľ mohli usúdiť, že experiment potvrdzuje de Broglieho hypotézu, musíme ešte postulovať istú koreláciu medzi intenzitou de Broglieho vlny a výskytom elektrónu. V kvalitatívnej formulácii tento postulát hovorí, že elektróny sa budú často vyskytovať v miestach, kde je intenzita de Broglieho vlny veľká a zriedkavo v miestach, kde je táto intenzita malá. K podrobnejšej diskusii tejto korelácie sa vrátíme v článku 1.11.

Ak poznáme vzdialenosť atómov v monokryštáli (napríklad z röntgenoštruktúrnej analýzy použitého kryštálu), potom porovnaním experimentálnych výsledkov pre polohy maxim možno podľa vzťahu (2) určiť vlnovú dĺžku λ a menením energie dopadajúceho zväzku môžeme určiť aj závislosť λ od energie. Pokusy Davissona a Germera tak umožňujú priamo testovať správnosť de Broglieho vzťahov. Výsledky týchto a mnohých ďalších experimentov študujúcich vlnové vlastnosti častíc boli vždy vo veľmi dobrej zhode s predpoveďami vyplývajúcimi z de Broglieho vzťahov.

1.7 KVANTOVÉ STAVY ELEKTRÓNU VIAZANÉHO NA ÚSEČKU

Teraz sa vrátíme k problému kvantových energetických hladín a pokúsime sa naznačiť, v čom spočíva nádej vysvetliť príčinu kvantovania energie pomocou hypotézy o vlnovej povahe častíc. Naša argumentácia bude – ako ostatne v celej tejto kapitole – iba kvalitatívna. Zodpovedajúci rigorózný aparát budeme systematickejšie používať až v nasledujúcej kapitole.

Predovšetkým si treba uvedomiť, že ak existuje vzťah medzi energiou častice a frekvenciou vlny, ktorá prislúcha k tejto častici, potom vysvetliť kvantovanie energie znamená nájsť dôvod pre to, že existujú iba diskrétné možné hodnoty frekvencie vlnenia odpovedajúceho stavu častice.

Existencia určitých diskrétnych frekvencií je však pre vlnové procesy typická. Stačí si spomenúť na to, že hudobné nástroje (napríklad struna určitej dĺžky) vydávajú tóny, ktorých výška (frekvencia) je pre daný nástroj charakteristická.

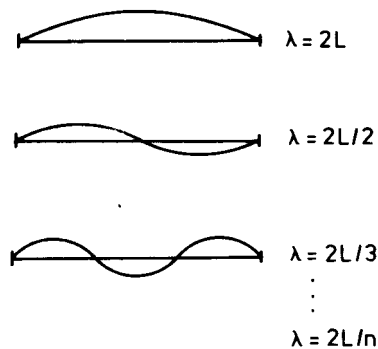
Túto myšlienku si ukážeme podrobnejšie na konkrétnom prípade elektrónu viazaného na úsečku a budeme uvažovať analógiu medzi stavmi takéhoto elektrónu a stojatými vlnami na strune určitej dĺžky. Príklad elektrónu viazaného na úsečku nie je celkom akademický. V prírode existujú dlhé lineárne organické molekuly, v ktorých sa niektoré elektróny môžu pohybovať viac-menej voľne. Ak budeme skúmať energetické hladiny elektrónu, ktorý sa môže pohybovať iba v jednom smere po úsečke dĺžky L , nebude to problém veľmi vzdialený od praktického problému hladín elektrónu v lineárnej molekule.

Mechanicou analógiou de Broglieho vln prislúchajúcich takémuto elektrónu je vlnenie šíriace sa v strune o dĺžke L . Struna môže v princípe vykonávať veľmi komplikované kmity v závislosti od toho, ako ju na začiatku vychýlime z rovnovážnej polohy. Niektoré z kmitov struny sú však zvlášť významné; sú to *čisté harmonické tóny*, pri ktorých sa na strune vytvára stojatá vlna. Takýto harmonický kmit má stacionárny charakter – keby sme zanedbali straty energie a pozreli sa na kmitajúcu strunu po istom čase, videli by sme stále ten istý typ pohybu. Termín „stacionárny“ sa tu používa v tom istom zmysle ako v iných častiach fyziky – pohyb je stacionárny ak sa jeho charakter s časom nemení. Stacionárne kmity struny – stojaté vlny – majú i ďalšiu významnú vlastnosť. Ľubovoľný iný pohyb struny možno vyjadriť ako superpozíciu viacerých stojatých vln s rôznymi vlnovými dĺžkami a frekvenciami. *Stojaté vlny* predstavujú jediný druh pohybu struny, ktorého časová závislosť je charakterizovaná *jedinou hodnotou frekvencie*. Ostatné druhy pohybu nemajú frekvenciu striktno definovanú (keďže v príslušnej superpozícii sa vyskytujú aspoň dve rôzne frekvencie). Hovoríme tiež, že ich frekvencia je neurčitá, má istú neurčitosť. V prípade de Broglieho vln istá hodnota frekvencie znamená istú hodnotu energie.

Ak sa teda zaujímate o také kvantové stavy elektrónu, v ktorých je jeho energia striktno určená, prichádzame intuitívne k analógii

$$\boxed{\text{Kvantové stavy elektrónu s istou energiou}} \leftrightarrow \boxed{\text{Harmonické kmity de Broglieho vln (stojaté vlny)}} \quad (1)$$

Otázku kvantovomechanického analógu pohybov struny s neurčitou frekvenciou nechajme zatiaľ stranou a venujme sa bližšej analýze analógie (1). Na príklade elektrónu viazaného na úsečku si ukážeme, že vzťah (1) skutočne predstavuje kľúč k pochopeniu kvantovania energie.



Obr. 1.6

Ako vidno z obr. 1.6 harmonické kmity (stojaté vlny) na úsečke dĺžky L môžu mať iba vlnové dĺžky

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

Teraz potrebujeme vzťah medzi energiou a vlnovou dĺžkou pre stojatú vlnu. Budeme postupovať tak, že si pripomenieme tento vzťah pre postupnú de Broglieho vlnu a potom ho – trochu nekriticky a bez hlbšieho zdôvodnenia – použijeme i pre stojatú vlnu. Výsledok, ktorý takto dostaneme je správny, ale jeho zdôvodnenie možno získať až pomocou formalizmu kvantovej mechaniky, s ktorým sa stretáme v nasledujúcej kapitole. Postupnej vlne prislúcha podľa de Broglieho vzťahu hybnosť

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

a energia

$$E = E(\lambda) = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda} \right)^2$$

Ak tento vzťah použijeme i pre stojatú vlnu a dĺžky stojatých vln zoberieme zo vzťahu (2), dostaneme

$$E_n = E(\lambda_n) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Podľa (1) potom predpokladáme, že energiou elektrónu viazaného na úsečku dĺžky L môže byť len niektorá z diskretných hodnôt (3). Na základe analógie s kmitmi struny potom očakávame, že kvantovomechanické stavy elektrónu, v ktorých je jeho energia striktno určená a rovná niektorej s hodnôt E_n , budú mať tiež stacionárny charakter. To je tiež dôvod, prečo sa v praxi najčastejšie stretávame práve s takýmito stavmi.

Poznamenajme, že hoci naša úvaha bola založená na analógii s kmitajúcou strunou, a teda ju možno považovať nanajvýš za kvalitatívnu, vzťah (3) je v skutočnosti celkom presný a dostaneme ho znova riešením príslušnej Schrödingerovej rovnice v článku 2.6.

Preto, aby sme mohli posúdiť, či nás analógia (1) privádza „na správnu stopu“ pri hľadaní príčin vzniku diskretných energetických hladín je dôležité nielen to, že vzťah (3) naozaj dáva diskkrétne hodnoty, ale aj to, že aj numericky dostávame očakávané hodnoty.

Uvažujme nejaký organický uhl'ovodíkový reťazec. Vzďialenosť medzi susednými atómami uhl'íka v takom reťazci je približne $1,5 \cdot 10^{-10}$ m a pre reťazec z N atómov uhl'íka, bude dĺžka molekuly L približne $L = N \cdot 1,5 \cdot 10^{-10}$ m. Po dosadení do (3) máme

$$E_n = \frac{10 \text{ eV}}{N^2} n^2$$

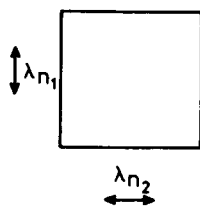
pre energetické hladiny elektrónu pohybujúceho sa pozdĺž reťazca¹².

Dostali sme teda energie v elektrónvoltovej oblasti. To ukazuje, že sme na správnej ceste.

Ako zovšeobecnenie skúmanej úlohy všimnime si teraz (čiastočne akademický) príklad elektrónu viazaného na dvojrozmernú oblasť tvaru štvorca. Mechanickou analógiou elektrónovej vlny budú teraz kmity štvorcovej membrány. V takejto membráne sa môžu šíriť dve navzájom nezávislé vlnenia v dvoch navzájom kolmých smeroch (obr. 1.7). Aby vznikli harmonické stacionárne kmity musia byť splnené dve nezávislé podmienky:

$$\lambda_{n_1} = \frac{2L}{n_1}, \quad n_1 = 1, 2, \dots$$

$$\lambda_{n_2} = \frac{2L}{n_2}, \quad n_2 = 1, 2, \dots$$



Obr. 1.7

Podľa klasickej mechaniky je kinetická energia častice viazanej na rovinu x, y daná vzťahom $E = (p_x^2 + p_y^2)/2m$. Vidíme, že celková energia je súčtom kinetických energií pohybov v smere jednotlivých súradnicových osí.

Ak toto pravidlo teraz použijeme a zapíšeme celkovú energiu ako súčet energií stojateho kmitu „v smere“ osi x a stojateho kmitu „v smere“ osi y , dostaneme

$$E(n_1, n_2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad (4)$$

takže energetická hladina je daná jednoznačne dvoma prirodzenými číslami n_1, n_2 . Tieto čísla charakterizujú typ harmonického kmitu klasickej membrány a očakávame, že budú tiež jednoznačne charakterizovať príslušný stacionárny kvantový stav elektrónu. Nazývame ich preto kvantovými číslami.

Všimnime si zaujímavú skutočnosť. Stavom líšiacim sa zámenou $n_1 \leftrightarrow n_2$, napríklad stavu $(n_1, n_2) = (3, 4)$ a stavu $(n_1, n_2) = (4, 3)$ odpovedá v analógii iný pohyb membrány, ale podľa vzťahu (4) majú tieto stavy rovnakú energiu. Pojem energetická hladina a pojem stav sústavy teda nie sú ekvivalentné. Niekedy sa stáva – ako v našom prípade – že istej energetickej hladine odpovedá viacero rôznych stavov sústavy. Vtedy hovoríme o *degenerácii* energetických hladín. V uvažovanom prípade elektrónu viazaného na štvorcovú oblasť budú degenerované všetky hladiny s energiou danou vzťahom (4) pri $n_1 \neq n_2$; hladiny s energiou $E(n_1, n_2)$ pri $n_1 = n_2$ nebudú degenerované.

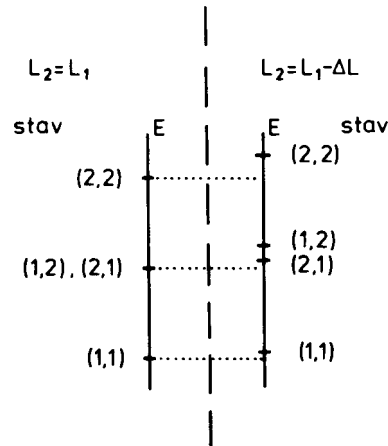
¹² Poznamenajme, že pri dostatočne dlhom reťazci frekvencie fotónov vyžarovaných, resp. pohlcovaných pri prechodoch medzi energetickými hladinami, spadajú do oblastí viditeľného svetla. To je dôvod, prečo niektoré dlhé lineárne organické molekuly sú dobrými farbivami. Takéto molekuly hrajú podstatnú úlohu i v mechanizme videnia, bližšie pozri napr. v známych Feynmanových prednáškach [17], časť 2, kap. 36.

V našom prípade príčinou degenerácie hladín je symetria problému, menovite to, že sme uvažovali dvojrozmernú oblasť tvaru štvorca. Keby sme namiesto štvorcovej oblasti uvažovali obdĺžnikovú oblasť so stranami L_1, L_2 , pričom $L_1 \neq L_2$, potom by sme (podobne ako vyššie) prišli ku vzťahu

$$E(n_1, n_2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} \right)$$

a stavy líšiacie sa zámenou $n_1 \leftrightarrow n_2$ už nebudú mať rovnakú energiu.

K narušeniu symetrie dochádza niekedy v dôsledku pôsobenia vonkajších síl. Ak máme pôvodne symetrický štvorec s $L_1 = L_2 = L$ a tento jednostranne stlačíme na $L_1 = L, L_2 = L - \Delta L$ prejaví sa to tým, že sa pôvodne degenerované hladiny rozštiepia (obr. 1.8). S podobnou situáciou sa ešte stretneme viackrát.



Obr. 1.8

1.8 SPIN A MAGNETICKÝ MOMENT ELEKTRÓNU

Z klasickej fyziky je známe, že magnetický moment a moment hybnosti nabitej častice pohybujúcej sa po uzavretej dráhe spolu úzko súvisia. Uvažujme, ako najjednoduchší prípad, časticu s hmotnosťou m a nábojom q pohybujúcu sa rovnomerne po kruhovej dráhe s polomerom r . Moment hybnosti častice má smer kolmý na rovinu pohybu a jeho veľkosť je $L = mvr$.

Podľa teórie elektromagnetického poľa je magnetický moment slučky s plochou S , obtekanej prúdom I daný vzťahom $\mu = IS$ a má tiež smer kolmý na rovinu slučky. Časticu pohybujúcu sa po kružnici si môžeme predstaviť ako slučku, okolo ktorej tečie prúd rovný náboju prenesenému istým miestom na slučke za jednotku času. Takto máme

$$I = q \frac{v}{2\pi r}$$

Plocha slučky je $S = \pi r^2$ a pre magnetický moment máme

$$\mu = IS = \frac{1}{2} vqr = \frac{q}{2m} mvr = \frac{q}{2m} L$$

Odtiaľ vyplýva vzťah medzi magnetickým momentom a momentom hybnosti

$$\mu = \frac{q}{2m} \mathbf{L}$$

Tento vzťah sme odvodili len v najjednoduchšej situácii. V skutočnosti je jeho oblasť platnosti oveľa širšia.

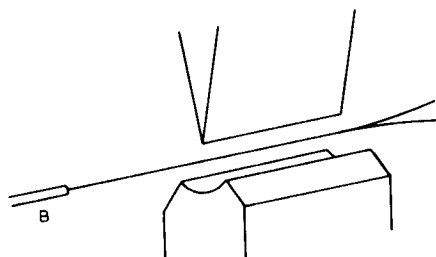
Pri analýze atómových spektier postuloval Pauli r. 1925 existenciu nového kvantového čísla spojeného s elektrónom. Toto kvantové číslo malo súvisieť len s vlastným („vnútorným“) stavom elektrónu a nie s orbitálnym pohybom elektrónu v atóme. Vzápätí Goudsmit a Uhlenbeck interpretovali nové kvantové číslo elektrónu ako jeho vlastný (či vnútorný) moment hybnosti nazývaný spin. So spinom súvisí aj vlastný magnetický moment elektrónu. Podľa hypotézy Goudsmita a Uhlenbecka priemet spinu elektrónu na určitú os môže nadobúdať iba dve hodnoty a to $\pm\hbar/2$. Klasický argument spomínaný na začiatku tohto článku vedie k predpokladu, že priemet vlastného magnetického momentu elektrónu na určitú os môže tiež nadobúdať iba dve hodnoty. Poznamenajme ešte, že hypotéza Goudsmita a Uhlenbecka bola formulovaná ešte pred vznikom kvantovej mechaniky (v tom istom 1925 roku). Kvantová mechanika potom vysvetlila štruktúru atómov a vtedy sa ukázalo, že presvedčivým dôkazom vlastného magnetického momentu elektrónu sú výsledky *pokusy Sterna a Gerlacha* uskutočneného už skôr (1921).

V týchto experimentoch prechádzal zväzok atómov s jediným valenčným elektrónom (zväzok atómov striebra) cez silne nehomogénne magnetické pole v usporiadaní, ktorého princíp je znázornený na obr. 1.9. Pólové nástavce magnetu majú taký tvar, aby medzi nimi vzniklo silne nehomogénne pole. Atómy s jediným elektrónom na valenčnej sfére majú vykompenzované magnetické momenty všetkých ostatných elektrónov a vonkajšie silne nehomogénne pole interaguje iba s magnetickým momentom jediného elektrónu.

Silu, ktorá pôsobí v nehomogénnom magnetickom poli na časticu s magnetickým momentom μ určíme takto: Energia častice vo vonkajšom poli je $W = -\mu \cdot \mathbf{B}$. Sila pôsobiaca na časticu je $\mathbf{F} = -\text{grad } W$. Ak je \mathbf{B} rovnobežné s osou z , potom sila bude mať zložku iba v smere osi z a pre jej veľkosť máme

$$F = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

kde μ_z je priemet magnetického momentu častice do osi z . Pôsobením tejto sily sa zväzok častíc vychýli z pôvodného smeru a zmeraním výchylky možno určiť μ_z .



Obr. 1.9

Podstatným výsledkom experimentov tohto typu, v ktorých sa meralo μ_z bolo zistenie, že μ_z môže nadobúdať iba dve hodnoty, a to

$$\mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2m}$$

Pretože spinový moment hybnosti s_z nadobúda iba dve hodnoty $s_z = \pm\hbar/2$, vzťah medzi priemetom magnetického momentu a momentu hybnosti elektrónu na určitú os je

$$\mu_z = -\frac{e}{m} s_z \quad (3)$$

čo sa líši faktorom 2 od klasického vzťahu (1). Gyromagnetický pomer μ_z/s_z bol meraný aj v experimentoch Einsteina a de Haasa (1915), ale interpretácia výsledkov tu bola pomerne zložitá a v prvých štúdiách sa objavili aj experimentálne chyby. Presná hodnota gyromagnetického pomeru bola touto metódou získaná až neskôr v prácach Becka (1919), Avidssona (1920) a Stewarta (1918). Úplné a presvedčivé vysvetlenie týchto výsledkov, potvrdzujúce vzťah (3) bolo dosiahnuté ešte o niekoľko rokov

neskôr, po vysvetlení povahy feromagnetického stavu. Veľmi pekne napísaný a v mnohom poučný prehľad o experimentoch typu Einsteina a De Haasa možno nájsť v knižke Frenkela a Javelova¹³.

Teoretické vysvetlenie „anomálneho“ gyromagnetického pomeru elektrónu (chýbajúca dvojka v (3)) priniesla až Diracova relativistická rovnica elektrónu (1928). Presné merania však ukázali, že rovnicu (3) treba zmeniť na

$$\mu_z = -\frac{e}{m} \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right) s_z$$

kde $\alpha = Ke^2/\hbar c \approx 1/137$ je konštanta jemnej štruktúry. Vysvetlenie tejto korekcie je jedným z najväčších úspechov kvantovej elektrodynamiky (Schwinger, 1948). Bodky v predchádzajúcom vzťahu označujú korekcie vyšších rádov.

Napokon ešte dve poznámky:

1. Často používané formulácie ako „uvažujme elektrón prechádzajúci Sternovým a Gerlachovým prístrojom...“ treba chápať len ako skrátený opis reálnej situácie, alebo ako myšlienkový experiment. Pokus Sterna a Gerlacha sa prakticky nedá uskutočniť so zväzkom voľných elektrónov. Na nabitú časticu v magnetickom poli pôsobí Lorentzova sila a táto je väčšia (a je málo pod kontrolou pre silnú nehomogenitu poľa) ako interakcia magnetického momentu elektrónu s nehomogénnym poľom.

2. Pokusy o klasické vysvetlenie spinu elektrónu (modely vrtiacej sa guľôčky) nepriniesli pozitívne výsledky a prevažná väčšina fyzikov je dnes presvedčená o tom, že spin je kvantovomechanická veličina, ktorú nemožno vysvetliť klasickou fyzikou.

1.9 SPIN ELEKTRÓNU A PAULIHO PRINCÍP

Doteraz, pri výpočtoch kvantových stacionárnych stavov elektrónu viazaného na úsečke, sme síce hovorili o elektróne, ale v skutočnosti sme spin elektrónu neuvažovali. Pri výpočte energetických hladín spin ani nebolo potrebné uvažovať, ale musíme ho zobrať do úvahy pri „číslovaní“ kvantových stavov a pri argumentoch súvisiacich s Pauliho princípom určujúcim pravidlá pre obsadzovanie stavov vo viacelektrónových sústavách. Existencia spinu vedie k tomu, že elektrón môže existovať v dvoch rôznych spinových stavoch, ktoré môžeme označovať symbolmi \uparrow a \downarrow . Pritom \uparrow odpovedá hodnote $s_z = +\hbar/2$ a \downarrow hodnote $-\hbar/2$. Doterajšie tvrdenia o energetických hladinách musíme teraz spresniť, pretože každá z uvažovaných energetických hladín je (navyše k tomu, čo sme už uviedli) ešte dvojnásobne degenerovaná podľa toho, či spin je v stave \uparrow alebo \downarrow . Tak napríklad základnej hladine elektrónu viazaného na štvorec odpovedajú dva stavy (\uparrow a \downarrow), hladine s energiou

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (1^2 + 2^2)$$

odpovedajú v označení (n_1, n_2, s_z) štyri stavy $(1, 2, \uparrow)$, $(1, 2, \downarrow)$, $(2, 1, \uparrow)$ a $(2, 1, \downarrow)$. Na jednoznačné určenie stavu elektrónu takto potrebujeme určiť tri údaje: n_1, n_2 a spinový stav.

Poznať degeneráciu energetických hladín elektrónov je dôležité pri skúmaní viacelektrónových sústav. Ak totiž zanedbávame interakciu elektrónov, potom pre poznanie možných stavov sústavy stačí overiť možné stavy jediného elektrónu. Stav celej sústavy potom určíme tak, že udáme tie (jednoelektrónové) stavy, ktoré sú obsadené. Pre elektróny však platí *Pauliho princíp*: V určitom (jednoelektrónovom) stave mnohoelektrónovej sústavy sa môže nachádzať najviac jeden elektrón sústavy. Pauliho princíp má hlboké zdôvodnenie v rámci kvantovej teórie poľa (Pauli 1941), ktorá ďaleko presahuje rámec tejto knihy, ale možno ho tiež chápať tak, ako bol objavený (Pauli 1925), t. j. ako zovšeobecnenie radu experimentálnych zákonitostí z oblasti atómových spektier.

Aby sme si všimli dôsledky Pauliho princípu, uvažujme sústavu piatich elektrónov viazaných na štvorec. Naivne by sme očakávali, že sústava skladajúca sa z piatich častíc má stav s najnižšou energiou (t. j. základný stav) taký, že všetkých päť častíc je v najnižšom jednočasticovom stave, teda v našom

¹³ Frenkel, V. J. – Javelov, D. J.: Einstein – izobretateľ. Nauka, Moskva, 1982.

prípade by všetky elektróny mali byť v stave $(n_1, n_2) = (1, 1)$. To však protirečí Pauliho princípu. Ľahko prídeme na to, ako bude vyzerat' správny základný stav. Päť elektrónov obsadí napríklad stavy

$$(1, 1, \uparrow), (1, 1, \downarrow), (2, 1, \uparrow), (2, 1, \downarrow), (1, 2, \uparrow)$$

Energia základného stavu bude

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} [2(1^2 + 1^2) + 2(2^2 + 1^2) + (1^2 + 2^2)]$$

Zatiaľ čo naivne by sme očakávali

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} [5(1^2 + 1^2)]$$

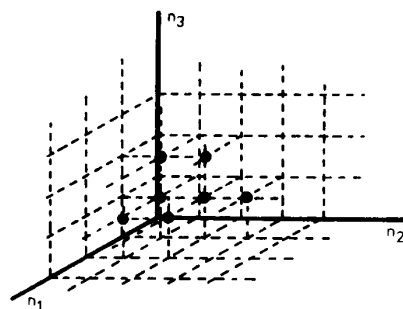
Dôsledky Pauliho princípu sme tu sledovali na veľmi jednoduchom prípade elektrónu viazaného na štvorec. Pauliho princíp „pracuje“ celkom rovnakým spôsobom aj v komplikovanejších sústavách, napríklad v atómov s viacerými elektrónmi. Jediný rozdiel je v tom, že jedoelektrónové kvantové stacionárne stavy označujeme štvoricou kvantových čísel (n, l, m, s_z) namiesto tu uvažovaného (n_1, n_2, s_z) .

1.10 PLYN VOĽNÝCH ELEKTRÓNŮV

V praxi sa často stretávame so sústavou mnohých voľných elektrónov viazaných na ohraničenú oblasť priestoru. Typickým príkladom sú vodivostné elektróny v kove, ktoré sa môžu pohybovať po celej vzorke kovu. V istom kvalitatívnom priblížení ich môžeme považovať za voľné a navzájom neinteragujúce. Príslušné energetické hladiny takejto sústavy voľných elektrónov viazaných na kocku s objemom $V = L^3$ ľahko nájdeme zovšeobecnením úvah z článkov 1.7 a 1.9. Energetické hladiny budú určené troma nezávislými kvantovými číslami n_1, n_2, n_3 (všetky z nich sú prirodzené $n_i = 1, 2, 3, \dots$ atď').

$$E(n_1, n_2, n_3) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (1)$$

a jednotlivé kvantové stacionárne stavy sú dané troma číslami n_1, n_2, n_3 a spinovým číslom s_z . Ak systém obsahuje N_e elektrónov, potom v základnom stave bude podľa Pauliho princípu obsadených práve N_e jedoelektrónových stacionárnych stavov (n_1, n_2, n_3, s_z) s najnižšími energiami a to tak, že v každom takom stave bude práve jeden elektrón. Má zmysel položiť si otázku, aká najvyššia jedoelektrónová hladina bude obsadená v základnom stave mnohoelektrónovej sústavy. Energia tejto hladiny sa označuje E_F a nazýva sa Fermiho energiou, alebo Fermiho hladinou. Energia E_F je zrejme taká, že počet možných jedoelektrónových stacionárnych stavov s energiou menšou alebo rovnou ako E_F je práve rovný počtu elektrónov v sústave. V základnom stave mnohoelektrónovej sústavy sú takto obsadené všetky stavy s energiou menšou alebo rovnou ako E_F a všetky stavy s energiou väčšou ako E_F sú voľné.



Obr. 1.10

Počet možných jedoelektrónových stacionárnych stavov s energiou menšou ako určitá hodnota E nájdeme pomocou jednoduchej geometrickej úvahy. Všetky možné stavy sú znázornené na obr. 1.10. Vo fiktívnom (abstraktnom) priestore, v ktorom znázorňujeme možné jedoelektrónové stavy bodmi so súradnicami (n_1, n_2, n_3) odpovedajú každému takémuto bodu dva možné stavy $(n_1, n_2, n_3 \uparrow)$ a $(n_1, n_2, n_3 \downarrow)$.

Príslušná hodnota energie týchto stavov je

$$E(n_1, n_2, n_3) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

kde $n^2 = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ má jednoduchý geometrický význam. Je to druhá mocnina vzdialenosti od začiatku násobená faktorom $(\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2)$. Najprv teda potrebujeme nájsť počet bodov (n_1, n_2, n_3) , ktoré majú celočíselné kladné súradnice a ležia vnútri gule o polomere n . Podľa obr. 1.10 je zrejmé, že jeden takýto bod je spoločný ôsmim susedným elementárnym kockám o jednotkovom objeme. Každá kocka má ale osem vrcholov, takže jeden bod typu (n_1, n_2, n_3) pripadá na jednu kocku o jednotkovom objeme. Vnútri gule s polomerom n je preto $(4/3)\pi n^3$ bodov s celočíselnými súradnicami. Podľa vzťahu (1) Fermiho energie odpovedá guľová plocha o polomere

$$n_F = \frac{L}{\pi \hbar} (2mE_F)^{1/2}$$

Kvantové čísla n_1, n_2, n_3 musia byť kladné, preto musíme uvažovať iba osminu takejto gule. Bodu so súradnicami (n_1, n_2, n_3) ale odpovedajú dva stavy líšiace sa priemetom spinu na určitú os, takže celkový počet jednoelektrónových stacionárnych stavov s energiou menšou ako E_F bude

$$N_e = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n_F^3 = \frac{\pi}{3} \frac{L^3}{\pi^3 \hbar^3} (2mE_F)^{3/2}$$

Pre Fermiho energiu takto dostaneme

$$E_F = \frac{1}{2m} (3\pi^2 \hbar^3 \rho)^{2/3} \quad (2)$$

kde $\rho = N_e/L^3$ udáva hustotu elektrónov. Aby sme si urobili predstavu o typických hodnotách Fermiho energie predstavme si kov, ktorého atómy majú mriežkovú vzdialenosť d a každý atóm prispieva jedným elektrónom k vodivostným elektrónom v kove. V prípade kubickej mriežky $\rho = (1/d)^3$ a toto môžeme prepísať do tvaru vhodnejšieho pre numerický výpočet:

$$\rho = \left(\frac{a_1}{d}\right)^3 \left(\frac{1}{a_1}\right)^3 = \left(\frac{a_1}{d}\right)^3 \left(\frac{mKe^2}{\hbar^2}\right)^3$$

kde sme dosadili za a_1 výraz \hbar^2/mKe^2 . Po dosadení tohto výrazu do (13) dostaneme

$$E_F = (3\pi^2)^{2/3} \left[\frac{mK^2 e^4}{2\hbar^2} \right] \left(\frac{a_1}{d}\right)^2$$

kde člen v hranatej zátvorke je práve typická energia v atómovej fyzike 13,6 eV. V prípade kovu s $d \approx 2,5 \cdot 10^{-10}$ m by sme takto dostali $(a_1/d) \approx 1/5$ a pre E_F by vyšla hodnota¹⁴ okolo 5 eV.

Tento odhad sme robili snáď trochu príliš podrobne, ale chceli sme ním jednak prísť k rádovému odhadu Fermiho energie a jednak sme chceli poukázať na to, že pri odhadovaní jednotlivých veličín je nanajvýš užitočné vyjadriť najprv všetko pomocou typických veličín atómovej fyziky a až potom sa zaujímať o numerické hodnoty. Takýto postup umožňuje pochopiť výsledok oveľa hlbšie ako pri mechanickom dosadení. Výsledok (3) by napríklad bolo užitočné porovnať s energiou základného stavu elektrónu v kocke o dĺžke hrany d a zamyslieť sa nad tým, prečo dostaneme podobný výsledok. To už ale ponecháme čitateľovi. Poznamenajme ešte, že tento jednoduchý model je iba hrubým priblížením k skutočnosti, ktorá je o čosi komplikovanejšia a v presnejších modeloch vodivostných elektrónov v kove treba brať do úvahy, že elektróny nie sú voľné, ale pohybujú sa v poli kladne nabitých iónov, nachádzajúcich sa v uzloch kryštalickej mriežky. Podrobnosti o tom možno nájsť v úvodných učebniciach fyziky tuhých látok. Tu sme chceli iba ukázať, že i jednoduché kvantovomechanické modely sú užitočné ako kvalitatívne rozumné priblíženia skutočnosti.

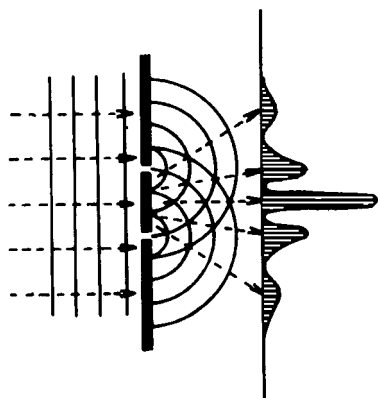
¹⁴ Pre kovový sodík určíme d rýchlo zo známej hustoty. Je známe, že 1 cm³ kovového Na₂₃¹¹ má hmotnosť 0,97 g. Odtiaľ zistíme (pomocou Avogadrovej konštanty), že na jeden atóm pripadá objem d^3 , kde $d = 3,5 \cdot 10^{-10}$ m. Preto v prípade kovového Na máme v tomto jednoduchom modeli voľných elektrónov $E_F = 2,5$ eV.

1.11 INTERPRETÁCIA VLNOVEJ FUNKCIE. VLNOVÁ FUNKCIA A STAV ČASTICE

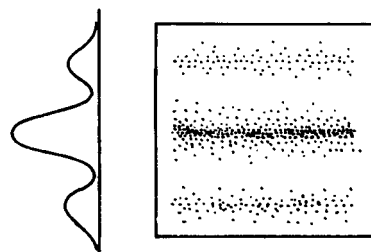
Doteraz sme ukázali, že elementárnymi metódami možno riešiť niektoré jednoduché kvantovomechanické problémy. Vychádzali sme pritom z predpokladu, že stacionárnym kvantovým stavom odpovedajú harmonické kmity (stojaté vlny) de Broglieho vln s kruhovou frekvenciou $\omega_n = E_n/\hbar$, kde E_n je energia príslušného stavu. Z diskusie Davissonovho a Germerovho experimentu vieme zatiaľ iba to, že elektróny sa často vyskytujú tam, kde je intenzita de Broglieho vlny veľká a zriedkavo v miestach, kde je táto intenzita malá. Pred analýzou ďalších otázok sa už musíme s fyzikálnym významom de Broglieho vln zaoberať podrobnejšie.

Podstatu problému si vysvetlíme pomocou myšlienkového experimentu, ktorý zovšeobecňuje výsledky mnohých reálnych experimentov. Predstavme si rovnobežný zväzok elektrónov dopadajúcich na tienidlo s dvoma štrbinami¹⁵ (obr. 1.11). Na fotografickej platni umiestnenej za tienidlom vznikne interferenčný obraz – striedanie svetlých a tmavých prúžkov. Ak by sme sa však na tento obraz pozreli podrobnejšie, videli by sme, že sa skladá z jednotlivých malých škvŕniok (obr. 1.12). V princípe by sme mohli zoslabiť zväzok dopadajúcich elektrónov natoľko, že by sa v sústave v istom čase nachádzal vždy iba jeden elektrón. Po vyvolaní platne by sme sa presvedčili o tom, že každý elektrón skutočne vytvorí na platni jedinú škvŕnu, ale videli by sme i to, že celkový interferenčný obraz vznikajúci dopadom mnohých elektrónov je rovnaký ako predtým. Výsledky by sa dali zhrnúť takto:

1. Zväzok elektrónov prechádzajúcich cez dvojštrbinu vyvolá presne taký interferenčný obraz, aký by sme očakávali od rovinatej vlny s vlnovou dĺžkou $\lambda = 2\pi\hbar/p$
2. Interferenčný obraz nezávisí od intenzity dopadajúceho zväzku, a preto nie je dôsledkom vzájomnej interakcie elektrónov zväzku.
3. Každý elektrón vyvolá „bodové“ sčernenie fotografickej platne a interferenčný obraz je súčtom sčernení spôsobených jednotlivými elektrónmi.



Obr. 1.11



Obr. 1.12

Interpretácia fyzikálneho významu de Broglieho vln musí byť taká, aby neprotirečila žiadnemu z týchto faktov.

Historicky prvou bola interpretácia, považujúca de Broglieho vlny za vlnenie „hmotnostného poľa“ (Schrödinger). Elektrón sa tu považoval za vlnový balík¹⁶ hmotnostného poľa. Reálnosť hmotnostných vln sa chápala v klasickom zmysle a interpretácia sa stretla s vážnymi ťažkosťami. Hypotéza síce vysvetľuje vznik interferenčného obrazu, ale ťažko ju možno uviesť do súladu s tým, že každý elektrón vyvoláva „bodové“ sčernenie. Vlnový balík de Broglieho vln v interferenčnom pokuse má totiž rozmery

¹⁵ Klasický myšlienkový „dvojštrbinový experiment“ sotva možno rozobrať lepšie, ako to urobil Feynman [17], časť 2, kap. 37. Odporúčame čitateľovi prečítať si Feynmanov originálny výklad a oceniť tak krásu fyziky samej ako aj Feynmanovo pedagogické majstrovstvo.

¹⁶ Interferenciou rovinných vln môže vzniknúť výsledné vlnenie, ktoré je lokalizované v malej oblasti priestoru. Takýto typ vlnenia nazývame vlnovým balíkom a budeme o ňom ešte hovoriť podrobnejšie.

celého interferenčného obrazu a jednotlivý elektrón by mal spôsobiť nie bodové sčernenie, ale celý (hoci slabý) interferenčný obraz.¹⁷

Tomu, že elektróny prechádzajúce sústavou jeden po druhom dopadajú (v istom zmysle náhodne) na rôzne miesta fotoplatne tak, že celkovo vzniká interferenčný obraz, odpovedá *Bornova pravdepodobnostná interpretácia*. De Broglieho vlna $\psi(\mathbf{r}, t)$, ktorú v ďalšom už budeme nazývať vlnovou funkciou, sa interpretuje ako miera pravdepodobnosti pre to, že elektrón nájdeme v čase t v okolí bodu \mathbf{r} . Presnejšie: Pravdepodobnosť nájsť časticu v čase t v elemente objemu $dV = d^3\mathbf{r}$ v mieste s polohovým vektorom \mathbf{r} je daná výrazom $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$, pričom $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ zrejme označuje hustotu pravdepodobnosti.¹⁸

Bornova interpretácia nenaráža na žiadne ťažkosti pri výklade interferenčných pokusov, obsiahne vznik interferenčného obrazu i lokalizáciu elektrónu. Uvádza však do fyziky pravdepodobnostný element cudzí klasickej mechanike a v tom spočíva aj koncepčná odlišnosť kvantovej a klasickej teórie. Pre túto črtu bola Bornova interpretácia často predmetom ostrej kritiky, no zdá sa, že čas a prax potvrdili správnosť a plodnosť tejto – dnes všeobecne prijatej – interpretácie.

Ukážeme si teraz dva konkrétne príklady vlnových funkcií. Uvažujme najprv základný stav elektrónu viazaného na úsečku dĺžky L . Zaujímajme sa o tvar vlnovej funkcie – jej závislosť od súradnice x – v určitom zvolenom okamihu, napríklad $t = 0$. Podľa analógie s mechanickými kmitmi struny, ktorú sme podrobne diskutovali v článku 1.7 základnému stavu odpovedá stojatá vlna s dvoma uzlami na koncoch struny a s kmitňou uprostred. Očakávame teda, že vlnová funkcia bude mať tvar

$$\begin{aligned}\psi_1(x, t = 0) &= A \sin(\pi x/L) \quad \text{pre } 0 \leq x \leq L \\ \psi_1(x, t = 0) &= 0 \quad \text{pre } x < 0 \quad \text{resp. } x > L\end{aligned}\tag{1}$$

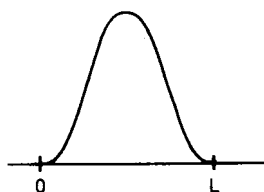
Fakt, že elektrón sa nemôže nachádzať mimo úsečky sme vo vzťahu (1) vyjadrili explicitne tým, že vlnová funkcia je mimo úsečky $(0, L)$ nulová, a teda podľa Bornovej interpretácie tomu odpovedá nulová pravdepodobnosť nájsť elektrón mimo tejto úsečky.

Musíme tiež ale žiadať, aby pravdepodobnosť nájsť elektrón vnútri úsečky bola rovná jednej – lebo elektrón sa tam s istotou nachádza. Musí teda platiť

$$\int_0^L |\psi_1(x, t = 0)|^2 dx = 1\tag{2}$$

S podmienkou typu (2) sa budeme často stretávať a budeme ju nazývať *podmienkou normovanosti* a o vlnovej funkcii, ktorá ju spĺňa budeme hovoriť, že je normovaná. V našom prípade bude vlnová funkcia normovaná ak pre dosiaľ neurčenú konštantu A platí $|A| = \sqrt{2/L}$. Zvoľme pre určitosť $A = \sqrt{2/L}$. Hustota pravdepodobnosti nájsť elektrón v okolí bodu x na úsečke je potom podľa Bornovej interpretácie

$$|\psi_1(x, t = 0)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2(\pi x/L)\tag{3}$$



Obr. 1. 13

a je znázornená na obr. 1.13. Vzťah (3) umožňuje predpovedať pravdepodobnosť akéhokoľvek výsledku merania súradnice elektrónu, ktorý sa nachádza v základnom stave. Tak napríklad pravdepodobnosť, že elektrón nájdeme v prvej tretine úsečky bude

$$\int_0^{L/3} |\psi_1(x, t = 0)|^2 dx = 1/3 - \sqrt{3}/(4\pi)\tag{4}$$

¹⁷ Ďalšou ťažkosťou tejto interpretácie je i rozplývame vlnových balíkov (budeme o ňom hovoriť ešte podrobnejšie v článku 2.3), ktoré možno dať ťažko do súhlasu s malými rozmermi elektrónu.

¹⁸ O motivácii tohto predpokladu poznamenajme, že napríklad sčernenie fotoplatne pri dopade svetelnej vlny je úmerné jej intenzite, ktorá je daná druhou mocninou amplitúdy vlnenia. Pretože vlnová funkcia nezodpovedá nejakému reálnemu hmotnému vlneniu, nenazývame $\psi(\mathbf{r}, t)$ amplitúdou vlny ale amplitúdou pravdepodobnosti.

Zaujímajme sa teraz o časovú závislosť vlnovej funkcie. Pýtame sa ako bude v čase $t \neq 0$ vyzeráť vlnová funkcia, ktorá v čase $t = 0$ má tvar (1). Podľa intuitívnych argumentov z článku 1.7 očakávame nejakú harmonickú závislosť od času, s frekvenciou odpovedajúcou energii základného stavu, teda

$$\omega_1 = E_1/\hbar = \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2} \quad (5)$$

V naivnej analógii s mechanickými kmitmi struny by sme predpokladali závislosť

$$\psi_1(x, t) = A \cos(\omega_1 t) \sin(\pi x/L) \quad (6)$$

Vzťah (6) ale nemôže byť konzistentný s Bornovou pravdepodobnostnou interpretáciou: napríklad v čase $t = \pi/(2\omega_1)$ by vlnová funkcia bola identicky rovná nule. To by znamenalo nulovú pravdepodobnosť nájsť elektrón na úsečke, preto hypotézu (6) musíme odmietnuť. V obore reálnych funkcií by sa nám nepodarilo nájsť vlnovú funkciu konzistentnú so všetkými fyzikálnymi požiadavkami. Ak však pripustíme komplexné vlnové funkcie, potom ako prijateľnú hypotézu možno vziať

$$\psi_1(x, t) = \sqrt{2/L} e^{-i\omega_1 t} \sin(\pi x/L) \quad (7)$$

Funkcia (7) je normovaná v každom čase podľa vzťahu (2), je „monochromatická“ (t. j. časová závislosť je určená jedinou frekvenciou), čo znamená, že energia elektrónu je striktno určená. Navyše vlnová funkcia (7) vyhovuje i intuitívnej predstave o stacionárnosti základného stavu: hustota pravdepodobnosti $|\psi_1(x, t)|^2$ nezávisí od času a je rovná (3). Obdobné úvahy by sme mohli použiť i pri diskusii excitovaných stavov. Ako výsledok uveďme teda všeobecne, že vlnové funkcie stacionárnych stavov častice viazanej na úsečku sú

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \sqrt{2/L} \exp(-i\omega_n t) \sin(k_n x) & \text{pre } 0 \leq x \leq L \\ \psi_n(x, t) &= 0 & \text{pre } x < 0 \text{ resp. } x > L \end{aligned} \quad (8)$$

kde

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar n^2}{2mL^2}, \quad k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Intuitívnu argumentáciou sme teda prišli k záveru, že Bornova pravdepodobnostná interpretácia vyžaduje, aby vlnové funkcie boli vo všeobecnosti komplexné. Naše argumenty, samozrejme, nemohli mať presvedčivosť deduktívneho postupu. Pri deduktívnom spôsobe výstavby formalizmu kvantovej mechaniky (presnejšie vlnovej mechaniky) predstavuje požiadavka komplexnosti vlnových funkcií jeden z jej dôležitých postulátov.

Ako druhý príklad teraz uvažujme voľnú časticu v jednorozmernom prípade. Ak hybnosť a energia elektrónu sú p a $E = p^2/(2m)$ potom – podľa de Broglieho vzťahov – príslušná vlnová funkcia má mať tvar postupnej rovinatej vlny s vlnovou dĺžkou a frekvenciou danou vzťahmi podľa (6.1)

$$\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p, \quad \omega = E/\hbar = p^2/(2m\hbar)$$

Energia častice v uvažovanom stave je presne určená. V prípade elektrónu viazaného na úsečku stavy s presne určenou energiou mali dôležitú vlastnosť: boli stacionárne, príslušná hustota pravdepodobnosti v x -priestore nezávisela od času. Ak predpokladáme, že to je všeobecná vlastnosť stavov s presne určenou energiou, potom musíme aj hľadanú rovinnú vlnu vyjadriť tak, aby jej prislúchajúca hustota pravdepodobnosti nezávisela od času. Nemôžeme teda voliť reálnu vlnovú funkciu napríklad $C \sin(kx - \omega t)$. Požiadavke stacionárnosti vyhovuje komplexná rovinná vlna

$$\psi(x, t) = C e^{-i\omega t} e^{ikx} \quad (10)$$

Poznamenajme, že vlnová funkcia je definovaná na celej priamke x , ale nemôže pri žiadnej voľbe konštanty C spĺňať podmienku normovanosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x, t)|^2 dx = 1$$

Neskoršie si ukážeme, že tento fakt nepredstavuje podstatnú ale len formálnu komplikáciu. Nateraz nám stačí, že stacionárnym stavom voľnej častice odpovedajú vlnové funkcie typu (10).

V našich doterajších úvahách sme sa zaoberali len stacionárnymi stavmi kvantovomechanických sústav. Odpovedala im určitá energia a vlnová funkcia, ktorú sme im prirad'ovali, mala časovú závislosť danú vzťahom typu

$$\psi(x, t) = \exp(-iEt/\hbar)\Phi(x) \quad (11)$$

kde $\Phi(x)$ už nezávisela od času.

Stacionárne stavy však nie sú jediné možné stavy sústavy. So stavmi všeobecnejšieho typu sa oboznámime v nasledujúcom článku. Aj všeobecným stavom budeme prirad'ovať vlnové funkcie a vysvetľovať ich v zmysle Bornovej pravdepodobnostnej interpretácie.

Upozorníme však na to, že tak ako v klasickej mechanike aj v kvantovej mechanike pojem „stav sústavy“ sa týka určitého zvoleného okamihu. V klasickej mechanike napríklad stav jednej častice v čase t_0 je určený jej polohou $\mathbf{r}(t_0)$ a hybnosťou $\mathbf{p}(t_0)$. Ak zadáme polohu a hybnosť častice ako funkciu času, zadávame tým vlastne postupnosť stavov, ktorými častica prechádza. Pojem stav v kvantovej mechanike nemáme zatiaľ presne definovaný, používame ho iba intuitívne. Ak ale hovoríme, že stavu je priradená nejaká vlnová funkcia, potom pri starostlivejšej formulácii by sme mali hovoriť, že stavu častice v okamihu t_0 je priradená vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ (t. j. funkcia súradníc definovaná v okamihu t_0). Ak sústava behom časového vývoja prechádza rôznymi stavmi, potom týmto stavom sú v jednotlivých okamihoch priradené rôzne vlnové funkcie, čo môžeme vyjadriť ako časovú závislosť vlnovej funkcie $\psi(\mathbf{r}, t)$. Na miestach kde by mohlo prísť k nedorozumeniu, budeme preto $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ nazývať presnejšie stavovou vlnovou funkciou a $\psi(\mathbf{r}, t)$ časovou závislosťou vlnovej funkcie. Tam, kde bude význam zrejmý z kontextu, budeme v oboch prípadoch hovoriť jednoducho o vlnovej funkcii.

1.12 PRINCÍP SUPERPOZÍCIE

Pri diskusii odrazu elektrónov od kryštálu v článku 1.6 i pri diskusii dvojštrbinového experimentu v článku 1.11 sme už hovorili o tom, že de Broglieho vlny interferujú rovnako, ako by interferovali klasické vlny s tou istou vlnovou dĺžkou. Pri formálnejšom opise by sme interferenciu v dvojštrbinovom experimente opísali takto. Uvažujme nejaký bod na fotografickej doske, jeho polohu označme \mathbf{r} . Predstavme si, že pri pokuse zakryjeme štrbinu „1“. Nech v tomto usporiadaní stavu častice v nejakom čase t_0 odpovedá vlnová funkcia $\psi_1(\mathbf{r}, t_0)$. Ak by sme naopak zakryli štrbinu „2“, príslušnému stavu v čase t_0 by odpovedala vlnová funkcia $\psi_2(\mathbf{r}, t_0)$. Ak sú obidve štrbiny pri pokuse otvorené, potom fakt, že sa na fotoplatni objaví interferenčný obrazec, ukazuje, že v tomto prípade stavu častice v okamihu t_0 musí byť priradená vlnová funkcia¹⁹

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_1(\mathbf{r}, t_0) + \psi_2(\mathbf{r}, t_0)$$

Mohli by sme si predstaviť aj situáciu, v ktorej sú štrbiny čiastočne priepustné. Odpovedajúca vlnová funkcia by v tomto prípade bola

$$c_1\psi_1(\mathbf{r}, t_0) + c_2\psi_2(\mathbf{r}, t_0)$$

Tvrdenia tohto druhu nie sú pre klasické vlnenie ničím zvláštnym. De Broglieho vlny – vlnové funkcie – však nie sú nejakým hmotným vlnením. Sú to matematické objekty priradené v zmysle Bornovej pravdepodobnostnej interpretácie stavom kvantovomechanickej sústavy. Ak teda vlnové funkcie možno vo vyššie uvedenom zmysle „skladať“, potom to znamená, že množina všetkých možných stavov danej sústavy musí spĺňať nejaké podmienky. Konkrétne to znamená, že ak v okamihu t_0 je prípustný nejaký stav sústavy, ktorému je priradená vlnová funkcia $\psi_1(x, t_0)$ a iný stav, ktorému je priradená vlnová funkcia $\psi_2(x, t_0)$, potom – v princípe – musí byť možný aj taký stav sústavy, ktorému by bola priradená superpozícia týchto dvoch vlnových funkcií (c_1 a c_2 sú nejaké komplexné čísla):

$$c_1\psi_1(x, t_0) + c_2\psi_2(x, t_0)$$

Vsuvku „v princípe“ sme použili preto, že jedna vec je teoretická možnosť existencie nejakého stavu, a druhá vec je jeho praktická experimentálna príprava.

¹⁹ Pre zjednodušenie úvahy si nebudeme všímať otázku normovanosti výslednej vlnovej funkcie.

Práve sformulované tvrdenie o vlastnostiach možných stavov kvantovomechanickej sústavy sa nazýva princípom superpozície. Je to jeden z hlavných postulátov kvantovej mechaniky.

Uved'me si na jeho ilustráciu niekoľko príkladov.

Uvažujme elektrón viazaný na úsečku $(0, L)$. Stacionárne stavy tohto systému sú istotne možnými stavmi v určitom okamihu (pre určitosť voľme $t = 0$) a prislúchajú im podľa (11.8) vlnové funkcie

$$\psi(x) = \sqrt{2/L} \sin(\pi n x/L), \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Podľa princípu superpozície potom musia byť možné aj stavy, ktorým by boli priradené vlnové funkcie typu

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad (2)$$

kde c_n sú ľubovoľné komplexné čísla, viazané iba tým, že funkcia (2) musí spĺňať normovaciu podmienku (11.2). Musí teda platiť

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_0^L \sum_m (c_m \psi_m(x))^* \sum_n (c_n \psi_n(x)) dx = \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \int_0^L \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \end{aligned}$$

Ako sa možno presvedčiť explicitným výpočtom, funkcie (1) spĺňajú vzťah

$$\int_0^L \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (3)$$

kde δ_{mn} je Kroneckerov symbol

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{pre } n \neq m \\ 1 & \text{pre } n = m \end{cases} \quad (4)$$

So vzťahom typu (3) sa budeme často stretávať. Budeme ho nazývať *podmienkou ortonormovanosti* systému funkcií (1).

S využitím (3) dostaneme pre koeficienty c_n jednoduchú podmienku

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (5)$$

Z teórie Fourierových radov je známe, že funkcie (1) tvoria *úplný systém funkcií*, a to v nasledovnom zmysle: ľubovoľnú dostatočne hladkú funkciu na úsečke $(0, L)$, ktorá spĺňa podmienky

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad (6)$$

možno vyjadriť v tvare (2) ako superpozíciu vlnových funkcií príslušných stacionárnym stavom. Znamená to potom, že ku každej normovanej funkcii spĺňajúcej podmienky (6) musí existovať možný stav elektrónu na úsečke $(0, L)$, ktorému je takáto vlnová funkcia priradená. Množina možných stavov teda musí byť značne bohatá.

Pozrime sa teraz na fyzikálny význam stavov, ktorým sú priradené vlnové funkcie (2). Stacionárne stavy sú význačné tým, že im odpovedá určitá hodnota energie sústavy. Ak v superpozícii (2) sú nenulové aspoň dva koeficienty c_n , potom predpokladáme, že stav, ktorému je priradená vlnová funkcia (2) nebude mať určitú hodnotu energie, hovoríme o neurčitosti energie takého stavu. V našej mechanickej analógii s kmitajúcou strunou takýmto stavom odpovedajú kmity struny, ktoré sú superpozíciou stojatých vln, ktorým prislúchajú rôzne vlnové dĺžky a frekvencie. O takýchto kmitoch struny sme v článku 1.7 hovorili, že ich frekvencia je neurčitá. Podľa de Broglieho hypotézy o súvise energie a frekvencie má teda stav, ktorému prislúcha vlnová funkcia (2) neurčitú energiu. Experimentálny význam tohto tvrdenia si priblížime v článku 1.14.

Ako druhý príklad na ilustráciu princípu superpozície uvažujeme voľnú časticu v jednorozmernom prípade. Stacionárnym stavom v tomto prípade prislúcha nielen určitá hodnota energie ale aj hybnosti

a vlnové funkcie, ktoré im napr. v čase $t = 0$ prislúchajú, podľa (11.10) sú

$$\psi_k(x) = C \exp(ikx), \quad k = p/\hbar \quad (7)$$

Pretože k môže nadobúdať všetky hodnoty z intervalu $(-\infty, \infty)$ môžeme vytvoriť i „spojitú superpozíciu“

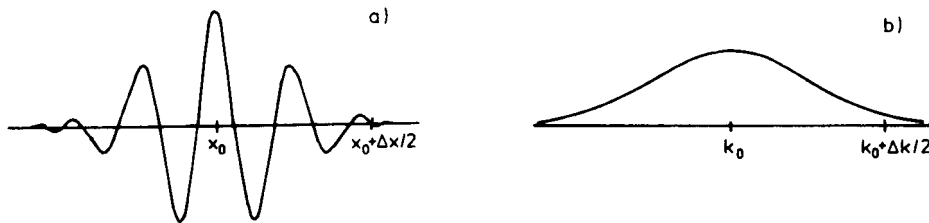
$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \exp(ikx) dk \quad (8)$$

Funkcia $c(k)$ vo vzťahu (8) hrá takú istú úlohu ako koeficienty c_n vo vzťahu (2). Podľa teórie Fourierových integrálov funkcie (7) tvoria úplný systém: ľubovoľnú funkciu²⁰ $\psi(x)$ môžeme písať v tvare (8). Podľa princípu superpozície musí existovať stav voľnej častice, ktorému odpovedá vlnová funkcia (8).

Na záver pripojme ešte poznámku o význame princípu superpozície pre formálnu štruktúru kvantovej mechaniky. Až budeme uvažovať nad tým, akou matematickou konštrukciou opísať súbor možných stavov sústavy, potom z princípu superpozície usúdime, že s matematickými objektmi, ktorými budeme opisovať jednotlivé stavy sa musia dať vykonávať nejaké lineárne operácie „skladania“ zodpovedajúce vzťahu (2).

1.13 VZŤAH NEURČITOSTI

V klasickej mechanike je stav častice v istom okamihu daný jej polohou a rýchlosťou, alebo, čo je to isté, jej polohou a hybnosťou. Ukážeme si teraz, že v tomto bode sa kvantová mechanika od klasickej podstatne líši: neexistuje totiž kvantovomechanický stav častice, v ktorom by bola súčasne určená aj poloha aj hybnosť tejto častice. Presnejšia matematická formulácia tohto tvrdenia je obsiahnutá v *Heisenbergovom vzťahu neurčitosti*. Formálne odvodenie tohto vzťahu si ukážeme až v nasledujúcej kapitole, tu sa obmedzíme len na kvalitatívnu diskusiu a uvedieme niekoľko ilustrácií. Ukážeme si, že neexistuje vlnová funkcia, o ktorej by sme mohli predpokladať, že by bola priradená takému stavu, v ktorom je poloha i hybnosť častice súčasne určená. Usúdime z toho potom, že takýto stav vôbec neexistuje.



Obr. 1.14

Uvažujme voľnú časticu v jednorozmernom prípade. Vieme už, že stavu v ktorom je striktné určená hybnosť častice odpovedá rovinná vlna typu $\exp(ikx)$. Príslušná hustota pravdepodobnosti $|\exp(ikx)|^2$ je však konštantná na celej priamke x . To istočne neodpovedá stavu, v ktorom je poloha častice presne určená. Môžeme sa však pokúsiť na základe princípu superpozície skonštruovať vlnovú funkciu

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \exp(ikx) dk \quad (1)$$

takú aby príslušná hustota pravdepodobnosti $|\psi(x)|^2$ bola od nuly rôzna len v nejakom malom intervale dĺžky Δx . Hodnota Δx potom zrejme reprezentuje neurčitosť polohy častice v stave, ktorému je priradená vlnová funkcia (1). Vlnové funkcie, ktoré sú v uvedenom zmysle lokalizované do nejakej malej priestorovej oblasti sa niekedy nazývajú vlnovými balíkmi. Príklad²¹ takého vlnového balíka je na obr. 1.14a.

²⁰ Funkcia $\psi(x)$ musí v skutočnosti spĺňať niektoré podmienky, aby sa dala vyjadriť v tvare (8). Ich presnejšou formuláciou sa tu nebudeme zaoberať. Vzťah (8) je zovšeobecnením rozkladov známych z teórie Fourierových radov. Tam sa ukazuje, že „každú“ funkciu danú na intervale dĺžky L môžeme rozložiť do radu funkcií $\sin(2\pi nx/L)$, $\cos(2\pi nx/L)$, kde $n = 1, 2, 3, \dots$ V limite $L \rightarrow \infty$ prechádzajú Fourierove rady na integrály typu (8).

²¹ S konkrétnym príkladom vlnového balíka sa stretne v článku 2.3. Obrázky 1.14a, b zodpovedajú príkladu tam uvedenému.

Na obrázku je znázornená len reálna časť vlnovej funkcie, predpokladáme však, že aj jej imaginárna časť je nenulová len v úzkom intervale dĺžky Δx . Reálna časť funkcie $c(k)$, odpovedajúca balíku z obr. 1.14a je znázornená na obr. 1.14b. Vidíme, že funkcia $c(k)$ je nenulová v istom intervale k -priestoru o dĺžke Δk . Znamená to, že vlnochet prislúchajúci vlnovej funkcii (1) nie je presne určený, hodnota Δk reprezentuje mieru jeho neurčitosti. Podľa de Broglieho hypotézy o súvise vlnochtu a hybnosti ($k = p/\hbar$) potom usudzujeme, že v stave, ktorému odpovedá vlnová funkcia (1) nie je hybnosť častice presne určená, jej neurčitost' je $\Delta p = \Delta k/\hbar$. Ak by sa nám podarilo skonštruovať vlnovú funkciu, pre ktorú by neurčitosti Δx aj Δk mohli byť ľubovoľne malé, potom by sme mohli povedať, že takáto vlnová funkcia prislúcha stavu s určenou polohou aj hybnosťou častice.

Podrobná analýza rozkladov vlnových balíkov do rovinných vln však ukazuje, že rozmer balíka v x -priestore (daný veličinou Δx) a rozmer balíka v k -priestore (daný veličinou Δk) sú viazané podmienkou

$$\Delta x \Delta k \geq \hbar/2 \quad (2)$$

Neurčitosti polohy a hybnosti častice v stave, ktorému prislúcha vlnová funkcia (1), sú potom viazané podmienkou

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (3)$$

Neurčitosti Δx a Δk teda nemôžu byť súčasne ľubovoľne malé. Usudzujeme z toho, že stav častice, v ktorom by bola súčasne určená jej poloha i hybnosť, neexistuje.

Ukážeme si teraz kvalitatívne prečo platí vzťah (2). Ak si vlnový balík s rozmerom Δx predstavíme ako superpozíciu rovinných vln s rôznymi vlnovými dĺžkami λ , potom vidíme, že superpozícia musí byť taká, aby sa vlny mimo intervalu $(x_0 - \Delta x/2, x_0 + \Delta x/2)$ interferenciou zrušili. Ak to má byť možné, potom v balíku musia byť vlny s dĺžkami λ, λ' takými, aby tieto vlny boli v protifáze pri okraji balíka (v bode $x_0 + \Delta x/2$), ak v jeho strede (v bode x_0) sú vo fáze. Ak teda na interval $\Delta x/2$ pripadá n vln s dĺžkou λ , potom naň bude pripadať $(n + 1/2)$ vln λ' . Takto máme podmienky (obr. 1.15)

$$\frac{\Delta x/2}{\lambda} = n, \quad \frac{\Delta x/2}{\lambda'} = n + 1/2$$



Obr. 1.15

Odčítaním oboch rovníc a násobením 4π máme

$$\Delta x \left(\frac{2\pi}{\lambda'} - \frac{2\pi}{\lambda} \right) = 2\pi$$

Výrazy $2\pi/\lambda', 2\pi/\lambda$ sú práve vlnochty uvažovaných vln, takže máme

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi \quad (4)$$

kde $\Delta k = k' - k = 2\pi/\lambda' - 2\pi/\lambda$. Výraz Δk nám ukazuje zhruba rozsah intervalu vlnových vektorov potrebných na vytvorenie vlnového balíka s rozmerom Δx . Situáciu možno trochu „zlepšiť“ tým, že by sme čo najvhodnejšie zvolili tvar vlnového balíka. Ale ani tak by sa nám nepodarilo znížiť hranicu súčinu $\Delta x \Delta k$ pod hodnotu $1/2$.

Nerovnosť (3) nazývaná tiež *vzťahom neurčitosti* má v kvantovej mechanike zásadný význam. Ukazuje, že pojem stav sústavy bude treba v kvantovej mechanike chápať podstatne odlišne od jeho významu v klasickej mechanike. Ukazuje tiež, že bude treba modifikovať klasicke predstavy o tom, čo sú to fyzikálne veličiny a ich hodnoty v danom stave. K týmto problémom sa neskôr vrátíme a prediskutujeme ich podrobnejšie. Teraz si len ukážme, že vzťah neurčitosti (3) je naozaj splnený v prípadoch, s ktorými sme sa doteraz zaoberali a kde už poznáme príslušné vlnové funkcie.

Uvažujme opäť elektrón viazaný na úsečku. Vlnovú funkciu (11.8) prislúchajúcu n -tému stacionárnemu stavu v čase $t = 0$ zapíšeme v tvare (využijeme vzťah $\alpha = (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})/(2i)$)

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= -i/\sqrt{2L}[\exp(ik_n x) - \exp(-ik_n x)] \quad \text{pre } 0 \leq x \leq L \\ \psi_n(x) &= 0 \quad \text{pre } x < 0 \quad \text{resp. } x > L\end{aligned}\quad (5)$$

Na prvý pohľad by sa mohlo zdať, že vlnovú funkciu už máme vyjadrenú ako superpozíciu rovinných vln typu (1). Nie je to však pravda. Vo vzťahu (1) vystupujú rovinné vlny definované na celej osi x , zatiaľ čo vlny vystupujúce vo vzťahu (5) sú nenulové len pre $0 < x < L$. Ak by sme vlnovú funkciu (5) vyjadrili naozaj v tvare (1) bola by príslušná funkcia $c(k)$ nenulová v celom intervale $(-\infty, \infty)$. Ak však uvažujeme iba prípad veľkých hodnôt n , bude na intervale $(0, L)$ uložených mnoho vln, vlnová dĺžka bude preto pomerne dobre definovaná. V rozklade (1) budú preto veľké koeficienty $c(k)$ iba v okolí hodnôt $k = k_n$, $k = -k_n$. Neurčitosť Δk môžeme potom približne odhadnúť ako $\Delta k = k_n - (-k_n) = 2k_n$. Neurčitosť polohy je približne $\Delta x = L$. Dostaneme tak²²

$$\Delta x \Delta k = L 2k_n = L(2\pi n/L) = 2\pi n \quad (6)$$

Vzťah neurčitosti je teda splnený. Argument, ktorý sme použili platí len pre veľké n . Neurčitosti Δx , Δk však možno jednoducho odhadnúť i pre základný stav.

Pre klasickú časticu platí

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Energiu základného stavu elektrónu viazaného na úsečku dĺžky L poznáme, podľa článku 1.7 platí

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Podľa (7) a (8) môžeme očakávať, že v základnom stave elektrónu viazaného na úsečku budú mať rozhodujúcu úlohu hybnosti dané vzťahom

$$p^2 \approx 2mE_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2} \quad (9)$$

Dôležitý interval v priestore hybnosti potom bude

$$\begin{aligned}(-\sqrt{p^2}, \sqrt{p^2}), \quad \text{t. j.} \quad \left(-\frac{\pi \hbar}{L}, \frac{\pi \hbar}{L}\right) \quad \text{preto} \\ \Delta p \sim \frac{2\pi}{L} \hbar\end{aligned}\quad (10)$$

Odtiaľ opäť máme

$$\Delta x \Delta k \approx 2\pi \hbar \quad (11)$$

a vzťah neurčitosti (4) je splnený.

Poznamenajme hneď, že túto úvahu by sme mohli aj obrátiť a pokúsiť sa rádovo odhadnúť energiu elektrónu viazaného na úsečku zo vzťahu neurčitosti. Argument by vyzeral asi takto. Vieme, že pre elektrón viazaný na úsečku platí vzťah neurčitosti (11) (na pravej strane je neistý faktor rádovo rovný 1, ale to nás teraz netrápi). Preto budú v základnom stave dôležité hybnosti z intervalu $(-\Delta p, \Delta p)$, kde Δp je dané vzťahom (10). Pre typické hybnosti potom platí $p^2 \approx \pi^2 \hbar^2 / L^2$ a pomocou (7) pridáme k odhadu energie základného stavu (8).

Vzťah neurčitosti je jednou z najhlbších myšlienok kvantovej mechaniky a aby sme si vytvorili istý kvalitatívny názor ako tento princíp „pracuje“, prediskutujeme tu niekoľko veľmi jednoduchých príkladov.

²² Presnejšiu definíciu ako aj korektný výpočet neurčitostí Δx a Δk si uvedieme v nasledujúcej kapitole.

Najprv sa vrátíme k základnému stavu elektrónu viazanému na úsečku dĺžky L . Energiu takéhoto stavu môžeme písať v tvare

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Hneď vidno, že energia sa zväčšuje, keď zmeňujeme L . Na „stlačenie“ elektrónovej vlnovej funkcie treba teda konať prácu. Dôvod na to je jednoduchý. Ak zmeňujeme rozmer vlnového balíka, zmeňujeme aj dĺžky rovinných vln, ktoré sa zúčastňujú na vytvorení balíka. Zmeňovanie vlnovej dĺžky ale znamená zväčšenie kinetickej energie. Kvantový stav (vrátane stavu s najnižšou energiou) nemožno teda chápať ako niečo statického, ale ako dynamický stav, ktorý má svoju kinetickú energiu. Čím sú rozmery sústavy menšie, tým je kinetická energia väčšia. Kvantový stav sa takto „bráni stláčaniu“. V tomto tkvie napokon príčina stabilnosti atomárnych sústav.

Aby sme to videli na realistickejšom príklade, všimnime si bližšie základný stav lineárneho harmonického oscilátora.

Celková energia oscilátora je daná ako súčet kinetickej a potenciálnej energie

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

kde sme vo výraze pre potenciálnu energiu $kx^2/2$ už nahradili konštantu k výrazom $m\omega^2$. Pri kvantovo-mechanickom riešení problému bude základnému stavu odpovedať istá stojatá vlna, ale na rozdiel od prípadu častice viazanej na úsečku už vlna nebude mať jednoduchý tvar typu $\sin(kx)$. Zatiaľ sa nebudeme zaujímať o podrobnosti tvaru tejto stojatej vlny, budeme iba predpokladať, že je lokalizovaná v oblasti s dĺžkou $\Delta x = L$ a že neurčitosť v hybnosti je $\Delta p = P$. Podľa vzťahu neurčitosti očakávame

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar/2$$

a teda

$$P \sim \frac{\hbar}{2L}$$

Ak chceme odhadnúť hodnotu energie základného stavu, dosadíme do výrazu pre energiu oscilátora za p hodnotu hybnosti typickej pre tento stav, t. j. $p \sim \hbar/2L$ a za x dosadíme typickú hodnotu súradnice, t. j. L . Takto dostaneme

$$E \sim \frac{\hbar^2}{8mL^2} + \frac{m\omega^2}{2}L^2 \quad (12)$$

kde prvý člen odpovedá kinetickej energii (ale vďaka vzťahu neurčitosti sme ho mohli vyjadriť pomocou typických rozmerov vlnovej funkcie) a druhý člen odpovedá potenciálnej energii. Energia základného stavu je najmenšia energia, ktorú pri rešpektovaní princípu neurčitosti môže sústava nadobudnúť. Možno preto očakávať, že to bude minimálna hodnota pravej strany v (12). Hodnota L v tomto minime bude charakterizovať rozmery vlnovej funkcie základného stavu.

Lahko zistíme, že výraz (12) nadobúda minimálnu hodnotu pre

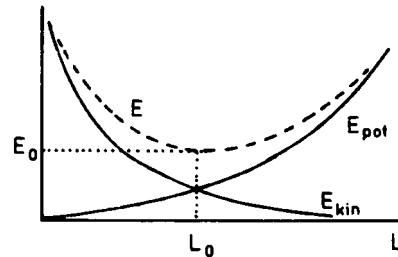
$$L = \sqrt{\hbar/2m\omega}$$

a príslušná energia je

$$E = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Zhodou okolností sme dostali presný výsledok, ako sa o tom ešte presvedčíme presným riešením neskôr v článku 4.6. Náš postup v skutočnosti nemohol zaručiť viac ako veľmi približný odhad výsledku a to, že dal celkom presný výsledok, je dielom (trocha regulovanej) náhody. Vráťme sa ešte na chvíľu ku vzťahu (12). (Pozri tiež obr. 1.16.) Prvý člen odpovedá kinetickej a druhý potenciálnej energii. S rastúcim L

potenciálna energia rastie. Z hľadiska potenciálnej energie je výhodné, aby vlnová funkcia bola lokalizovaná v čo najmenšej oblasti okolo začiatku. Intuitívne je to zrejmé, lebo je to lokalizácia okolo klasickej rovnovážnej polohy $x = 0$. Prvý člen vo vzťahu (12) odpovedá kinetickej energii, jeho hodnota rastie pri zmenšujúcom sa L . To je prejav vzťahu neurčitosti. Ak chceme stav viac lokalizovať (t. j. zmenšiť $\Delta x = 2L$), môžeme to urobiť iba za cenu zvýšenia neurčitosti $\Delta p = 2P$ a teda za cenu zvýšenia kinetickej energie častice. Vlnová funkcia sa „bráni“ proti stláčaniu. Tu vidíme ešte raz príčinu toho, prečo základný kvantovomechanický stav neodpovedá klasickej predstave o častici v pokoji v rovnovážnej polohe.



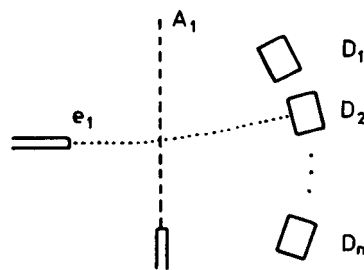
Obr. 1.16

Z podobných príčin elektróny v atóme „nespadnú“ na jadro – vzťah neurčitosti rieši problém stability atómov, ktorý klasická fyzika nevedela vysvetliť. Elektrón v jadre by bol silne lokalizovaný a na takéto stlačenie atómu by bolo treba vynaložiť prácu, ktorá by bola oveľa väčšia ako príslušný pokles potenciálnej energie.

Odporúčame čitateľovi, aby sa ako cvičenie pokúsil zo vzťahu neurčitosti odhadnúť energiu základného stavu atómu vodíka a polomer atómu vodíka v tomto stave.

1.14 VLNOVÉ FUNKCIE A MERANIE FYZIKÁLNYCH VELIČÍN

V našej doterajšej diskusii sme na viacerých miestach narazili na formulácie typu „stav, v ktorom daná veličina nie je presne určená“, „má neurčitost“ a pod. Aby sme si priblížili, čo sa za takýmito formuláciami skrýva, musíme sa aspoň kvalitatívne oboznámiť s problematikou merania fyzikálnych veličín na kvantovo-mechanických objektoch. Začneme s myšlienkovým experimentom na *meranie energie atómu*, znázornenom na obr. 1.17.



Obr. 1.17

Na obr. 1.17 sa zdola nahor pohybuje veľmi pomaly riedky zväzok atómov, označený ako A_1 a zľava doprava sa pohybuje zväzok elektrónov, označený ako e_1 . Na začiatku predpokladajme, že všetky elektróny majú energiu ε a všetky atómy sú v základnom stave s energiou E_1 . V oblasti, kde sa zväzky pretínajú, dochádza k interakcii, a rozptýlený elektrón je zachytený jedným z detektorov D_i , pričom detektor zmeria (presne) energiu ε' rozptýleného elektrónu. Lahko môžeme povedať, čo sa stane, pretože experiment je vlastne variáciou na Franckove a Hertzove experimenty, o ktorých sme už hovorili v článku 1.3. Rozptýlený elektrón nebude mať ľubovoľnú energiu, ale iba jednu z hodnôt

$$\varepsilon'_2, \varepsilon'_3, \varepsilon'_4, \varepsilon'_5, \dots \quad (1)$$

daných vzťahom

$$\varepsilon - \varepsilon'_n = E_n - E_1 \quad (2)$$

kde na ľavej strane máme energiu, ktorú elektrón stratil a na pravej strane máme energiu, ktorú atóm získal prechodom zo základného stavu do excitovaného stavu s energiou E_n .

Predstavme si teraz, že zopakujeme celý experiment, ale s *tým rozdielom*, že všetky atómy vo zväzku budú už *pred interakciou* v excitovanom stave s energiou E_2 . Rozptýlené elektróny môžu mať potom len jednu z energií

$$\varepsilon''_3, \varepsilon''_4, \varepsilon''_5, \dots \quad (3)$$

spĺňajúci vzťah

$$\varepsilon - \varepsilon''_n = E_n - E_2 \quad (4)$$

Potiaľ by bolo všetko v poriadku a nič prekvapujúceho sa nestalo. Ale stane sa hneď. V prvom prípade každý z atómov zväzku bol v stave s prislúchajúcou vlnovou funkciou $\psi_1(r)$ v druhom prípade bol každý z atómov v stave s vlnovou funkciou $\psi_2(r)$. Podľa princípu superpozície môže byť atóm aj v stave, ktorému prislúcha vlnová funkcia

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (5)$$

pričom koeficienty c_1, c_2 spĺňujú podmienku analogickú k (12.4)

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (6)$$

Predstavme si teda, že máme prístroj, ktorým pripravíme atómy v stave s vlnovou funkciou (5) a necháme do experimentu vstupovať zväzok atómov, v ktorom sú *všetky* atómy v tomto stave. Zaujímame sa teraz o to, aké budú energie rozptýlených elektrónov určené detektormi D_i . Výsledky všetkých podobných experimentov ukazujú, že energie týchto elektrónov budú patriť buď do množiny (1) alebo do množiny (3). Ak energia rozptýleného elektrónu patrí do skupiny (1), potom interpretujeme výsledok tak, že sme pri meraní našli atóm v základnom stave (lebo len tak sa podľa (2) objaví energia zo skupiny (1)) a ak energia patrí do skupiny (3), potom hovoríme, že sme pri meraní našli atóm v excitovanom stave.

Predstavme si ďalej, že detektor je zhotovený tak, že keď nájde energiu elektrónu zo skupiny (1), ukáže na displeji veľkú číslicu 1 (alebo vypíše slovami „našiel som atóm v základnom stave“) a v druhom prípade ukáže na displeji číslo 2 (alebo napíše „našiel som elektrón v stave 2“). Toto číslo tiež vytlačí na pásku.

Experimentátor po čase príde k prístroju, vyberie z neho pásku a nájde na nej postupnosť čísel, napríklad²³

$$1, 2, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 1, 1, \dots$$

Všimne si hneď, že čísla nemajú žiadnu deterministickú pravidelnosť, a po hlbšej analýze zistí, že na každom mieste sa objavuje náhodne buď 1 alebo 2, pričom pravdepodobnosti P_1, P_2 výskytu čísel 1, 2 sú dané vzťahmi

$$P_1 = |c_1|^2, \quad P_2 = |c_2|^2$$

Vďaka normovacej podmienke (6) platí

$$P_1 + P_2 = 1 \quad (7)$$

tak ako to pre pravdepodobnosti musí byť. Zdôraznime ešte raz, že každý z atómov sa nachádzal pred meraním energie v stave $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ a v tomto stave atóm nemá určitú hodnotu energie. Čísla $P_1 = |c_1|^2, P_2 = |c_2|^2$ udávajú pravdepodobnosti toho, že v tomto stave pri meraní energie nájdeme hodnoty E_1, E_2 .

²³ Aby nedošlo k nedorozumeniu: tu „oznamujeme“ čitateľovi nové fakty, teda fakty, ktoré nevyplývajú (ale ani neprotirečia) z toho, čo sme zatiaľ o kvantovej mechanike povedali. Túto novú informáciu musíme chápať ako „experimentálny výsledok“.

Opis tohto myšlienkového experimentu bol snád' trocha zdĺhavý, ale chceli sme ukázať, že tvrdenia kvantovej mechaniky sa vždy týkajú konkrétnych experimentálnych situácií. Jeho nevýhodou je snád' i to, že meranie energie je tu nepriame, s priamym experimentom podobného typu sa stretneme, keď budeme hovoriť o meraní polarizácie fotónu a o meraní spinu.

Predchádzajúci myšlienkový experiment by sme mohli zovšeobecniť aj na situáciu, keď všetky atómy dopadajúceho zväzku sú v stave opísanom superpozíciou

$$\psi = \sum c_n \psi_n \quad (12)$$

kde ψ_n je stav s presnou hodnotou energie E_n . Koefficienty c_n musia spĺňať podmienku

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

Zovšeobecnením výsledku získaného v prípade superpozície dvoch stavov (t. j. stavu $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$) prideme k predpokladu (plne potvrdenému analogickými experimentmi), že pri meraní energie atómu môžeme namerať iba hodnoty E_1, E_2, E_3, \dots a pritom pravdepodobnosť namerať E_i je

$$P_i = |c_i|^2 \quad (13)$$

Tento vzťah je aj najprirodzenejším výrazom pre pravdepodobnosť namerať E_i . Ak totiž vieme, že výsledky merania sú len isté pravdepodobnosti P_i , potom je prirodzené očakávať, že tieto P_i sú funkciami koefficientov c_k vystupujúcich v (12): $P_i = P_i(c_1, \dots, c_N)$. Tieto funkcie by ale na základe intuitívnych argumentov mali spĺňať takéto podmienky:

a) $\sum P_i = 1$

b) ak ψ_i nevystupuje v (12), t. j. ak c_i je nulové, potom príslušné P_i je tiež nulové.

Výber pravdepodobnosti P_i v tvare (13) je určite najjednoduchšou možnosťou ako tieto požiadavky splniť a experiment túto možnosť plne potvrdzuje.

Fakty, na ktoré sme tu narazili sa istotne javia také prekvapivé, že nezaškodí ilustrovať ich na iných experimentálnych situáciách.

Príklad, ktorý veľmi silne ukazuje nevyhnutnosť interpretácie v už uvedenom zmysle je príklad *merania polarizácie fotónu*. Tento problém, pravdu povediac, nepatrí do nerelativistickej kvantovej mechaniky, lebo fotón sa pohybuje rýchlosťou svetla a je ultrarelativistickým objektom. Pri meraní polarizácie však jeho rýchlosť nehrá podstatnú úlohu a toto meranie je opísané kvantovou mechanikou. Výhodou merania polarizácie je to, že proces má dobre známy klasický analóg – meranie polarizácie klasických elektromagnetických vln. Pripomenieme si preto najprv klasický prípad.²⁴

Ak sa svetelný lúč pohybuje v smere osi x a dopadá na polarizátor – nikol, potom za nikolom máme lineárne polarizované svetlo. Rovina jeho polarizácie je daná smerom hlavného rezu nikolu. Lineárnu polarizáciu môžeme opísať vektorom \mathbf{e} , ktorý je kolmý na smer šírenia sa lúča a leží v rovine polarizácie. Predstavme si teraz, že tento lúč postupuje ďalej a dopadne na ďalší nikol, ktorý prepúšťa len svetlo polarizované lineárne v smere vektora \mathbf{e}_1 a úplne pohlcuje²⁵ žiarenie polarizované v smere \mathbf{e}_2 , kolmom na \mathbf{e}_1 . Situácia je znázornená na *obr. 1.18*. Nech I označuje intenzitu svetla polarizovaného v smere \mathbf{e} pred prechodom nikolom a I' označuje intenzitu svetla polarizovaného v smere \mathbf{e}_1 po prechode nikolom.

Podľa klasickej optiky môžeme prechod svetla cez tento nikol charakterizovať troma skutočnosťami

- svetlo, ktoré prešlo nikolom má polarizáciu \mathbf{e}_1 ,
- frekvencia svetla sa pri prechode cez nikol nemení,
- intenzita svetla prejdeho nikolom je

$$I' = I \cos^2 \alpha$$

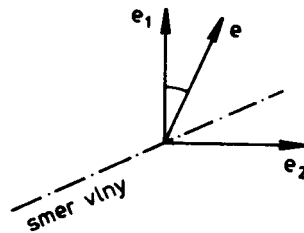
kde I je intenzita dopadajúceho svetla a α je uhol medzi lineárnou polarizáciou \mathbf{e} dopadajúceho svetla a polarizáciou \mathbf{e}_1 vychádzajúceho svetla.

²⁴ Podrobnosti možno nájsť napríklad v učebnici A. Štrba, Všeobecná fyzika 3, Optika. ALFA, Bratislava 1979, str. 216.

²⁵ Opis práce polarizátora je v skutočnosti komplikovanejší. Dopadajúci lúč sa rozloží vnútri nikolu na dva lúče, ktoré sa šíria trochu odlišnými smermi. Prvý, polarizovaný v smere hlavného rezu pokračuje rovno, druhý vďaka vtipnej konštrukcii nikolu sa úplne odráža od rozhrania (nikol je zlepený z dvoch častí), vychádza značne odchylený od pôvodného smeru a zväčša je pohltý v okolí.

Skúsme teraz kvantovomechanicky opísať prechod lineárne polarizovaného svetla nikolom tak, aby tento opis bol konzistentný s výsledkami získanými v klasickej optike.

Najprv si všimneme poučenie vyplývajúce z bodu b). V kvantovej fyzike totiž kruhová frekvencia fotónu súvisí s jeho energiou vzťahom $E = \hbar\omega$ a to, že ω sa pri prechode nikolom nemení nám hovorí, že fotón buď prejde nikolom „celý“, alebo sa „celý“ pohltí. Bod c) vraví, že intenzita je daná vzťahom $I' = I \cos^2 \alpha$. Intenzita je ale úmerná celkovej energii prenášanej žiarením, a teda celkovému počtu fotónov, ktoré prejdú polarizátorom za sekundu. Prichádzame teda k záveru, že pravdepodobnosť prechodu fotónu je rovná $\cos^2 \alpha$ a pravdepodobnosť jeho pohltienia je $\sin^2 \alpha$. Všimnime si ale dôležitú skutočnosť. Všetky fotóny, ktoré prešli prvým polarizujúcim nikolom, majú rovnakú polarizáciu danú vektorom \mathbf{e} a sú všetky v rovnakom stave. Určiť pravdepodobnosť prechodu je jednoduché.



Obr. 1.18

Podľa obr. 1.18 môžeme rozložiť vektor polarizácie dopadajúcej vlny takto

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 \cos \alpha + \mathbf{e}_2 \sin \alpha$$

Ak označíme amplitúdu dopadajúcej vlny A , potom túto dopadajúcu vlnu môžeme písať ako

$$[A\mathbf{e}e^{i(kx - \omega t)} = \cos \alpha [A\mathbf{e}_1 e^{i(kx - \omega t)}] + \sin \alpha [A\mathbf{e}_2 e^{i(kx - \omega t)}]$$

Ak výrazy v hranatých zátvorkách označíme po rade ψ , ψ_1 , ψ_2 , máme

$$\psi = \cos \alpha \psi_1 + \sin \alpha \psi_2$$

Všetky výrazy ψ , ψ_1 , ψ_2 sú pritom rovnako normalizované. Ostatný vzťah je zrejme rovnaký ako pri opise merania energie atómu v predchádzajúcom príklade.

Ak nikol pracuje ako merací prístroj, potom pri dopadajúcom fotóne s polarizáciou \mathbf{e} nájde s pravdepodobnosťou $P_1 = \cos^2 \alpha$ a fotón v stave „ ψ_1 “ (t. j. fotón má polarizáciu \mathbf{e}_1 a prejde nikolom) a s pravdepodobnosťou $P_2 = \sin^2 \alpha$ v stave „ ψ_2 “ (t. j. fotón má polarizáciu \mathbf{e}_2 a je pohltený v okolí prístroja).

Všimnime si teraz kvantovomechanický význam faktu uvedeného v bode a), čiže svetlo po prechode druhým nikolom je polarizované v smere \mathbf{e}_1 . Znamená to, že všetky fotóny vychádzajúce z nikolu majú polarizáciu \mathbf{e}_1 , a teda sú v stave, ktorý sme označili ako ψ_1 . Preto sa pri interakcii s nikolom musel zmeniť ich kvantovomechanický stav. Pred vstupom do nikolu boli totiž všetky v stave „ ψ “.

Aký bude nový stav po meraní, to nám tiež naznačuje náš príklad. Stav „ ψ_1 “ fotónov je význačný tým, že keby sme zopakovali predchádzajúce meranie, čo znamená pridali tretí nikol orientovaný rovnako ako druhý, potom týmto nikolom prejdú všetky fotóny. Znamená to, že u všetkých (s určitosťou) nameriame polarizáciu v smere \mathbf{e}_1 . Vo všeobecnom prípade meraním sa zmení stav meraného objektu tak, že opakovaným meraním už s určitosťou nameriame tú istú hodnotu meranej veličiny ako pri prvom meraní.²⁶

Ako ďalší príklad na súvis vlnovej funkcie a výsledkov merania si všimneme meranie priemetu spinu na určitý smer, napríklad na os z . Takéto meranie sa prevádza, v princípe v Sternovom-Gerlachovom prístroji, spomínanom v článku 1.8. Ak máme merať priemet spinu do osi z , potom volíme smer nehomogenity magnetického poľa v smere tejto osi. Predstavme si najprv, že do prístroja vchádza zväzok elektrónov²⁷, z ktorých každý má priemet spinu do osi z rovný $+\hbar/2$ a magnetický moment $\mu = -e\hbar/2m$.

²⁶ Kvôli presnosti dodajme, že opakované meranie musí prebehnúť v krátkom čase po prvom meraní. Bližšie vysvetlenie podáme neskôr.

²⁷ Takto formulovaný problém je idealizáciou reálnej situácie. Pozri poznámku na konci článku 1.8.

Znamienko dB/dz nech je také, aby sa tento zväzok vychýlil smerom hore. Ak za prístroj umiestnime fotografickú platňu, potom sa na nej po prechode zväzku prístrojom objaví sčernenie nad miestom, do ktorého by dopadol zväzok pri neprítomnosti magnetického poľa. Stav elektrónu so spinom $+\hbar/2$ označíme ako ψ_+ . Ak na sústavu dopadá zväzok elektrónov, v ktorom každý má spin $-\hbar/2$, potom sa každý z elektrónov vychýli smerom dolu a na fotoplatni sa objaví sčernenie pod miestom, do ktorého by dopadol nevychýlený zväzok. Stav elektrónu so spinom „dolu“ označíme ako ψ_- . Predstavme si teraz, že na sústavu dopadá zväzok elektrónov, z ktorých každý je v spinovom stave²⁸

$$\psi = \alpha_+ \psi_+ + \alpha_- \psi_- \quad (14)$$

Pýtame sa teraz na to, čo sa objaví na fotoplatni postavenej za Sternovým-Gerlachovým prístrojom. Výsledky jednoznačne ukazujú na to, že jednotlivé elektróny budú zas vychyľované buď smerom hore, alebo dolu a pritom veľkosť výchylky bude rovnaká ako v predchádzajúcich prípadoch. Neobjavia sa žiadne prípady akejsi „medzivýchylky“. Elektrón je vychýlený buď „naplno“ hore (ako by mal priemet spinu na os z rovnú $+\hbar/2$), alebo „naplno“ dolu. Keby sme registrovali postupnosť výchyliek, pri označení $+ za „hore“ a - za „dolu“ dostali by sme niečo ako$

$$+, -, -, +, -, -, +, +, +, -, -, -, +, \dots$$

Analýzou postupnosti by sme zistili, že výchylky jednotlivých elektrónov sú náhodné čísla regulované iba tým, že v každom jednotlivom zameraní sú pravdepodobnosti nájsť spin „hore“ resp. „dolu“ dané vzťahmi

$$p_+ = |\alpha_+|^2, \quad P_- = |\alpha_-|^2 \quad (15)$$

Vidíme zase, že Sternov-Gerlachov prístroj má ako možné výsledky merania iba diskkrétne hodnoty spinu a pravdepodobnosti ich nájdania v stave ψ danom rovnicou (14) sú dané kvadrátmi absolútnych hodnôt koeficientov stojacich pred stavmi s presnou hodnotou priemetu spinu.

Príklady, ktoré sme preberali, naznačujú určitú jednotnú schému opisu merania v kvantovej mechanike. Majme prístroj, zhotovený tak, aby meral veličinu A a meraný objekt, ktorý sa nachádza v stave, ktorému je priradená vlnová funkcia ψ . Predpokladajme, že túto vlnovú funkciu môžeme vyjadriť ako superpozíciu

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad (16)$$

kde ψ_n sú vlnové funkcie prislúchajúce stavom, v ktorých veličina A nadobúda určitú hodnotu A_n . Potom stav, ktorému prislúcha vlnová funkcia (16) nemá určitú hodnotu veličiny A . Výsledkom jej merania môže byť len hodnota rovná niektorej z hodnôt A_n , a to s pravdepodobnosťou

$$P_n = |c_n|^2 \quad (17)$$

Ak v konkrétnom prípade nameriame (náhodne) hodnotu A_i , potom po meraní sa meraná sústava bude nachádzať v novom (zmenenom) stave ψ_i .

Túto formuláciu ešte neskôr spresníme najmä z matematickej stránky, ale fyzika ostane taká ako tu. V súčasnej kvantovej mechanike je tvrdenie tohto obsahu jedným zo základných postulátov. V tejto úvodnej kapitole sme však chceli ukázať ako toto tvrdenie súvisí s niektorými realistickými fyzikálnymi situáciami.

Napokon sa ešte vrátíme k otázke merania polohy častice v kvantovej mechanike. Pri analýze dvojštrbinového experimentu v článku 1.11 sme totiž prišli k záveru, že pravdepodobnosť nájsť časticu v istom elemente Δs plochy fotografickej platne je úmerná výrazu $|\psi(x, y, z)|^2 \Delta s$, teda $|\psi|^2$ udáva hustotu pravdepodobnosti výskytu častice. Na prvý pohľad by sa snáď mohlo zdať, že tento spôsob určovania pravdepodobnosti výsledkov merania je iný ako je všeobecná schéma opísaná rovnicami (16) a (17). Ukážeme

²⁸Výraz (14) budenie zatiaľ chápať len symbolicky, ako označenie stavu. Formálne matematický význam získa až v 5. kapitole, kde si tiež ukážeme, že koeficienty α_+ , α_- musia opäť spĺňať normovaciu podmienku $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$. Experimentálne možno zväzok elektrónov z ktorých každý je v stave (14) pripraviť tak, že elektróny necháme prejsť vhodne natočeným Sternovým-Gerlachovým prístrojom, v ktorom jeden z dvoch zväzkov na jeho výstupe bude pohltý hrubou vrstvou nejakej látky. Podrobnosti opäť uvedieme v 5. kapitole.

si však, že sú to fyzikálne rovnaké schémy a že funkcia $\psi(x, y, z)$ má pri meraní polohy takú istú úlohu ako koeficienty c_n vystupujúce vo výraze (15) pri meraní veličiny A . Predstavme si pre určitost', že fotografická platňa na obr. 1.11 je kolmá na os x a pretína ju v bode x_0 . Vlnová funkcia častice v oblasti platne je teda $\psi(x_0, y, z)$.

Podľa už opísanej všeobecnej schémy musíme najprv nájsť vlnové funkcie, ktoré odpovedajú častici lokalizovanej v okolí istého bodu platne. Pre názornosť si predstavme, že celá platňa je rozdelená na štvorčeky, z ktorých každý má plochu Δ približne rovnú ploche zrnka fotografickej emulzie. Stred určitého štvorčeka má súradnice (y_i, z_k) , pričom súradnicu x nevypisujeme, lebo všetky štvorčeky ležia v rovine $x = x_0$. Tento štvorček nazveme štvorčekom (i, k) a zavedieme funkciu

$$\varphi_{ik}(y, z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta}} & \text{ak } y, z \text{ ležia v štvorčeku } (i, k) \\ 0 & \text{ak } y, z \text{ neležia v štvorčeku } (i, k) \end{cases}$$

Zrejme platí

$$\int |\varphi_{ik}(y, z)|^2 dx dz = 1$$

kde integrujeme cez celú plochu fotografickej platne. Ak je častica v stave opísanom vlnovou funkciou $\varphi_{ik}(y, z)$, potom je pravdepodobnosť nájsť časticu v štvorčeku (i, k) jednotková a pravdepodobnosť nájsť ju mimo tohto štvorčeka je nulová. Funkcie $\varphi_{ik}(y, z)$ teda odpovedajú prakticky (z hľadiska experimentu) lokalizovaným časticiam. Pretože vlnová funkcia častice po prechode dvoma štrbinami a práve pri dopade na platňu sa mení len veľmi málo od vzdialenosti odpovedajúcej strane našich štvorčekov, môžeme vo vynikajúcom priblížení napísať

$$\psi(x_0, y, z) = \sum_{ik} \sqrt{\Delta} \psi(x_0, y_i, z_k) \varphi_{ik}(y, z)$$

Všimnime si teraz, že $\sqrt{\Delta} \psi(x_0, y_i, z_k)$ sú čísla a môžeme ich označiť ako c_{ik} .

Takže máme

$$\psi(x_0, y, z) = \sum_{ik} c_{ik} \varphi_{ik}(y, z)$$

$$c_{ik} = \sqrt{\Delta} \psi(x_0, y_i, z_k)$$

Takto zapísané $\psi(x_0, y, z)$ má už tvar (15) a podľa všeobecnej schémy je pravdepodobnosť toho, že časticu nájdeme v štvorčeku (i, k) daná výrazom

$$P_{ik} = |c_{ik}|^2 = \Delta |\psi(x_0, y_i, z_k)|^2 \quad (19)$$

Tento vzťah je ale to isté, ako by sme dostali rovno z Bornovej štatistickej interpretácie. Táto je totiž daná výrazom

$$P_{ik} = \int_{S_{ik}} |\psi(x_0, y, z)|^2 dS \approx |\psi(x_0, y, z)|^2 \Delta \quad (20)$$

kde integrujeme cez plochu S_{ik} štvorčeka (i, k) a pri vyjadrení integrálu posledným členom na pravej strane rovnice (20) sme využili to, že vlnová funkcia $\psi(x_0, y, z)$ sa len veľmi málo mení na vzdialenosti rádo vo rovnej dĺžke hrany štvorčeka.

K výsledku (19) takto môžeme dospieť buď priamo z pravdepodobnostnej interpretácie, alebo trochu zdĺhavejšie spôsobom, ktorým sme prišli k rovnici (19). Tento zdĺhavejší postup je však poučný, lebo ukazuje, že meranie polohy je iba špeciálnym prípadom merania fyzikálnej veličiny a snáď ešte viac tým, že ukazuje fyzikálnu interpretáciu $\psi(x, y, z)$ ako sústavy koeficientov pri vlnových funkciách odpovedajúcich lokalizovanej častici.

Poznámka

Opis kvantových stavov, priradenie vlnových funkcií stavom sústavy a najmä súvislosť vlnových funkcií a výsledkov merania fyzikálnych veličín sú veci, ktoré sa priečia klasickému chápaniu fyzikálnej reality. Pri štúdiu týchto vecí sa nám duša akosi prirodzene bráni proti takejto zmene v základnom

postoji a snaží sa predsa len pozerat' na jednotlivé otázky klasicky. Takýto postup je v zásade chybný. Na ilustráciu si pripomeňme situáciu v špeciálnej teórii relativity. Empirický fakt absolútnosti rýchlosti svetla sa protiví klasickému nerelativistickému názoru, ale je to empirický fakt, treba ho brať ako taký a nájsť konzistentnú teóriu. Presne toto urobil Einstein, keď ukázal, že absolútnosť rýchlosti svetla spolu s princípom relativity vedú nevyhnutne k relativnosti súčasnosti a napokon k celej špeciálnej teórii relativity. Na kvantovú mechaniku sa treba pozerat' rovnako. Je to teória, ktorá vyrástla z analýzy empirických faktov, a tie už samy o sebe protirečia klasickej fyzike. Nie je preto podivné, že celá teória, ktorá z týchto faktov vznikla, protirečí v mnohom duchu Newtonovej mechaniky. Pri štúdiu kvantovej mechaniky treba teda rozmýšľať viac o tom, ako súvisia empirické fakty s interpretáciou, než o tom, v čom je kvantová mechanika iná ako klasická. Vážnou metodologickou, či filozofickou chybou je neujasnenie si situácie do tej miery, že čitateľ bez analýzy považuje rozdiely medzi klasickou a kvantovou mechanikou buď za chyby, alebo prinajmenšom záhady tej druhej. Kvantová teória je krásna a široká, ale ako každá fyzikálna teória má prostý pôvod – vyrástla z analýzy experimentálnych faktov a zo snahy nájsť jednotný a konzistentný výklad týchto faktov pomocou niekoľkých všeobecne platných zákonov. A treba ju brať ako takú.

1.15 ZHRNUTIE

Táto kapitola bola úvodom do niektorých myšlienok, z ktorých vyrástla kvantová mechanika. Nepredstavuje úplný pohľad ani úplnú logickú schému a väčšinu pojmov, s ktorými sme sa tu stretli, bude potrebné v ďalšom prehliť a „prečistiť“. Predsa však je nutná pre prvé oboznámenie sa s javmi v atómovej fyzike a so zákonitosťami tejto oblasti.

Tak ako väčšina „veľkých“ fyzikálnych teórií aj kvantová mechanika vznikla syntézou poznatkov získaných analýzou mnohých experimentálnych výsledkov. Rozhodujúcu úlohu zohrali tieto skutočnosti:

- Kvantovanie energie atomárnych sústav je experimentálne potvrdenou skutočnosťou. Toto treba chápať ako empiricky získaný fakt, napriek tomu, že to protirečí predstavám klasickej mechaniky.

- Kvantové vlastnosti žiarenia boli objavené v Planckovej analýze žiarenia zahriatych telies (dutín) a potvrdené a prehĺbené v Einsteinovej analýze fotoelektrického javu a v Comptonovom jave. Monochromatická vlna s kruhovou frekvenciou ω má energiu, ktorá je celočíselným násobkom $\hbar\omega$, kde \hbar je Planckova konštanta.

- Vlnové vlastnosti častíc boli predpovedané de Brogliom a potvrdené neskôr experimentálne v plnom rozsahu. K častici s hybnosťou p prislúcha de Brogliho vlna s dĺžkou vlny

$$\lambda = 2\pi\hbar/p$$

Vlnové vlastnosti častíc sa ukázali byť kľúčom k vysvetleniu existencie kvantových stavov s určitými hodnotami energie (stacionárne stavy). Podstatným bolo pritom intuitívne motivované stotožnenie takýchto kvantových stavov a stojatých de Brogliho vln (harmonických kmitov de Brogliho vln).

Kvantovanie energie stacionárnych stavov bolo ilustrované na prípade elektrónu viazaného na úsečku, kde logika argumentu mala zhruba túto schému:

Kvantový stav s určitou energiou sme stotožnili so stojatou de Brogliho vlnou. Stojatá vlna môže mať len diskkrétne hodnoty vlnovej dĺžky λ_n , a preto jej odpovedajú len určité hodnoty energie.

Vlnové vlastnosti častíc spolu so vzťahom $p = 2\pi\hbar/\lambda$ vedú priamo k vzťahu neurčitosti. Ak totiž vytvoríme superpozíciu rovinných vln vlnový balík lokalizovaný v oblasti Δx , potom potrebujeme použiť vlny z istého intervalu $\Delta\lambda$, ktorému podľa vzťahu $p = 2\pi\hbar/\lambda$ odpovedá istý interval hybností Δp . Medzi Δp a Δx platí vzťah

$$\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar/2$$

Vzťah neurčitosti vedie k tomu, že rozmery vlnového balíka možno zmenšiť iba za cenu zväčšenia neurčitosti Δp . Tým vstupujú do hry veľké hybnosti a energia balíka rastie. Toto zabraňuje sťahovaniu vlnových balíkov a vedie k vzniku stabilných atomárnych sústav.

V kvantovej mechanike, podobne ako pri mnohých vlnových procesoch platí princíp superpozície: Ak stavy, ktorým sú priradené vlnové funkcie ψ_1, ψ_2 sú možnými stavmi sústavy, potom aj stav, ktorému je priradená vlnová funkcia $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, kde c_1, c_2 sú čísla, je tiež možným stavom sústavy.

Centrálny význam v kvantovej mechanike má pojem stavu sústavy. Tento sme sa zatiaľ nesnažili podrobnejšie špecifikovať. V tejto kapitole sme len intuitívne stotožnili každý stav s istou de Broglieho vlnou.

Zatiaľ sme nič nehovorili o tom, aké matematické objekty priradujeme fyzikálnym veličinám. K tomuto pridáme už v nasledujúcich dvoch kapitolách.

Ako vyplynulo z analýzy dvojštrbinového experimentu vlnová funkcia je objektom celkom inej povahy ako sú veci známe z klasickej fyziky. Podľa štatistickej interpretácie je vlnová funkcia $\psi(x)$ amplitúdou pravdepodobnosti, t. j. $|\psi(x)|^2 \Delta x$ je pravdepodobnosťou nájdenia častice v intervale $(x, x + \Delta x)$ v experimente, v ktorom meriame polohu častice.

Toto tvrdenie je len špeciálnym prípadom všeobecnej schémy pre experimentálne predpovede kvantovej teórie. Podľa nej platí nasledujúce tvrdenie: ak ψ_1, ψ_2, \dots sú vlnové funkcie stavov, v ktorých má fyzikálna veličina E určité hodnoty E_1, E_2, \dots , potom výsledkom merania veličiny E v stave, ktorému prislúcha vlnová funkcia

$$\Phi = \sum c_i \psi_i$$

môžu byť iba hodnoty E_1, E_2, \dots pričom každé meranie dá práve jednu z týchto hodnôt. Pravdepodobnosť namerania určitého E_i je rovná (pri normalizovanom stave Φ) druhej mocnine absolútnej hodnoty c_i :

$$P_i = |c_i|^2$$

Tabuľka 1.1

Náboj elektrónu	$e = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Hmotnosť elektrónu	$m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Hmotnosť protónu	$m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Planckova konštanta	$\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Bohrov polomer (dĺžka)	$a_1 = \frac{\hbar^2}{mKe^2} = 0,5292 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Rydberg (energia)	$E_1 = \frac{mK^2 e^4}{2\hbar^2} = 13,606 \text{ eV} = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
Magnetický moment (Bohrov magneton)	$\frac{e\hbar}{2m} = 0,9274 \cdot 10^{-23} \text{ JT}^{-1}$
Typická intenzita el. poľa v atóme	$\frac{Ke}{a_1^2} = 5,15 \cdot 10^{11} \text{ Vm}^{-1}$
Typická intenzita magnetického poľa *	$\frac{\mu}{2} \frac{I}{a_1} = \frac{\mu}{2} \frac{1}{a_1} \frac{eE_1}{2\pi\hbar} = 6,3 \text{ T}$
Typická kruhová frekvencia	$\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$
Typický čas	$t_1 = \frac{2\pi}{\omega_1} = 3,03 \cdot 10^{-16} \text{ s}$
Typická rýchlosť	$v_1 = a_1 \omega_1 = 1,09 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$

* Odhadnuté nasledovne. Pole B buďené v strede kruhovej slučky o polomere a_1 obtekanej prúdom I je $B = (\mu/2)I/a_1$, kde $\mu = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ SI}$, za a_1 zoberieme Bohrov polomer, I vyjadríme ako súčin náboja elektrónu a typickej atómovej frekvencie $\nu_1 = E_1/2\pi\hbar$.

Táto schéma pracuje – ako sme ukázali na príkladoch s meraním spinu a polarizácie fotónu – aj v tých prípadoch, keď stav neopisujeme vlnovou funkciou, ale veličinou iného typu, napríklad polarizačným vektorom v prípade prechodu fotónu polarizátorom.

Pre kvalitatívnu orientáciu v javoch z oblasti atómovej fyziky je nevyhnutná predstava o typických hodnotách jednotlivých veličín. Môžeme ju získať dvoma spôsobmi vedúcimi k rovnakým výsledkom. V prvom z nich vychádzame z kvalitatívnej predstavy o štruktúre atomárnych sústav, v druhej sa opierame o rozmerovú analýzu. Oba prístupy vedú k rovnakým výsledkom, lebo v oboch používame ako základné veličiny e (náboj elektrónu vystupujúci vo vzťahoch súvisiacich s Coulombovým zákonom v kombinácii $Ke^2 = [1/(4\pi\epsilon_0)]e^2$), hmotnosť elektrónu m a Planckovu konštantu \hbar . Rýchlosť svetla tu nevystupuje, pretože problémy sú nerelativistické. Výsledkom je *tabuľka 1.1*.

1.16 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Kryštál NaCl má pravidelnú kubickú štruktúru, v ktorej sa striedajú atómy Na s atómami Cl. Odhadnite vzdialenosť medzi atómom Na a susedným atómom Cl, ak viete, že hustota kryštalického NaCl je $2,16 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ a že molekulová váha NaCl je 58,5.
- Na to, aby sme 1 mól molekúl H_2 rozštiepili na atomárny vodík, potrebujeme zhruba 433 kJ. Aká je energia väzby jednej molekuly H_2 ?
- Akú energiu (v eV) má kvantum elektromagnetického žiarenia pre
 - rádiovlny s frekvenciou 10^6 Hz ,
 - svetlo s frekvenciou $0,6 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$,
 - röntgenovské žiarenie s frekvenciou $= 3 \cdot 10^{18} \text{ Hz}$?
 Určite vlnové dĺžky žiarenia v uvedených prípadoch.
- Za tmavej noci. uprostred veľkej lúky svieti žiarovka s výkonom 2 W. Odhadnite počet fotónov, ktorý vám za 1 s padne do oka ak ste od žiarovky vzdialený 1 km.
- Elektrón aj fotón majú energiu $E = 100 \text{ eV}$. Porovnajme príslušné dĺžky vln.
- Pri akej energii bude mať a) elektrón, b) fotón vlnovú dĺžku rádovo rovnú rozmerom atómu?
- Akú energiu musí mať elektrón, ak chceme analýzou rozptylu elektrónov na jadrách (idea je podobná ako pri Rutherfordovom experimente) študovať štruktúru ľahkých jadier?
- Rovnoběžný zväzok elektrónov urýchlených napätím V prechádza otvorom v tienidle. Priemer otvoru je $d = 10^{-6} \text{ m}$. Za tienidlom vo vzdialenosti $l = 1 \text{ m}$ je fotografická platňa. Pre aké hodnoty napätia U možno opísať sčernenie platne pomocou klasickej mechaniky?
- Zo skúsenosti vieme, že u sodíka dochádza k fotoelektrickému javu len vtedy, ak naň dopadá žiarenie s vlnovou dĺžkou menšou ako $\lambda_0 = 539 \text{ nm}$. Vypočítajte výstupnú prácu pre Na! Akú rýchlosť majú elektróny vyletujúce zo sodíkovej elektródy, ak ju osvetlíme modrým svetlom ortuťovej výbojky ($\lambda = 436 \text{ nm}$)?
- Medenú guľôčku, dostatočne vzdialenú od iných telies, osvetlíme monochromatickým svetlom s vlnovou dĺžkou $\lambda = 0,2 \mu\text{m}$. Na aký maximálny potenciál sa guľôčka nabije v dôsledku straty fotoelektrónov? Výstupná práca pre meď je 4,74 eV.
- Pri rozptyle žiarenia na voľnom alebo slabovo viazanom elektróne sa mení vlnová dĺžka žiarenia (Comptonov jav). Ak vlnová dĺžka dopadajúceho žiarenia je λ , potom vlnová dĺžka rozptýleného svetla závisí od uhla rozptylu ϑ a je daná vzťahom

$$\lambda' - \lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\vartheta}{2}$$

kde m je hmotnosť elektrónu. Opíšte rozptyl žiarenia na elektróne ako zrážku fotónu a elektrónu a odvodte tento vzťah zo zákonov zachovania energie a hybnosti.

- Dlhá organická molekula má uhlíkový reťazec so striedavými dvojitými a jednoduchými väzbami medzi atómami uhlíka. Dĺžka molekuly je zhruba $n \cdot 1,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, kde n je počet zretázených uhlíkov a $1,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ je priemerná dĺžka jednej väzby. V molekule je n tzv. π elektrónov, ktoré v istom priblížení môžeme považovať za voľne sa pohybujúce po molekule. Opíšte energetické spektrum molekuly a zistite, aká musí byť molekula dlhá, ak má byť žiarenie emitované pri prechode z prvého excitovaného stavu do základného stavu v oblasti viditeľného svetla. (Poznámka: takéto látky môžu byť dobrými farbivami.)
- Elektrón je viazaný na úsečku dĺžky L a nachádza sa v základnom stave. Zapište energiu tohto stavu ako funkciu L a vyjadrite silu, ktorou pôsobí elektrón na steny, ktoré ho udržiavajú na úsečke L .
- Odhadnite tlak, ktorým pôsobí elektrón uzavretý v kocke o hrane L na steny kocky. Možno odtiaľto rádovo odhadnúť koeficient stlačiteľnosti tuhých látok?
- Atóm Fe^{55} kmitá s frekvenciou 10^{13} Hz okolo uzla v kryštalickej mriežke. Pohyb možno v rozumnej aproximácii opísať lineárnym harmonickým oscilátorom. Odhadnite pomocou princípu neurčitosti „amplitúdu“ kmitov pre základný stav takého oscilátora a porovnajte ju s typickou vzdialenosťou dvoch uzlov mriežky (asi 0,2 nm). Čo by sa stalo, keby amplitúda kmitov bola porovnateľná s touto vzdialenosťou? Porozmýšľajte o tom, aká by bola situácia v prípade kryštalického hélia.
- Odhadnite energiu základného stavu atómu vodíka zo vzťahu neurčitosti.
- Prediskutujte difrakciu elektrónovej vlny na jednej štrbine šírky d a ukážte, že difrakčný obraz odpovedá neurčitosti v hybnosti elektrónu rádovo \hbar/d (v smere rovnobežnom s rovinou tienidla a kolmom na štrbinu).
- Atóm vodíka sa nachádza v základnom stave. Ukážte, že pri pokuse merať trajektóriu elektrónu nevyhnutne narušíme tento stav. Uvážte, že pri takomto meraní by sme určite museli merať polohu elektrónu s neurčitosťou $\Delta x \lesssim a_1$ kde a_1 je Bohrov polomer $a_1 = \hbar^2 4\pi\epsilon_0 / me^2$. Odhadnite príslušnú neurčitosť v hybnosti a tým spôsobenú neurčitosť v energii.
- Na hranol dopadajú fotóny s vlnovou funkciou

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t)$$

kde $\psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t)$ sú rovinné vlny, odpovedajúce vlnovej dĺžke λ . Za hranolom je fotoplatňa. Určite pomer intenzity sčernenia fotoplatne na dvoch miestach, odpovedajúcich dvom vlnovým dĺžkam λ_1 a λ_2 . (Ide o miesta na platni, ktoré by sčerneli, keby dopadajúce svetlo bolo monochromatické s vlnovou dĺžkou λ_1 resp. λ_2).

2 ZÁKLADY VLNOVEJ MECHANIKY

2.1 ÚVOD. POJEM STAVU V KVANTOVEJ MECHANIKE

Úplný nadpis tejto kapitoly by vlastne mal byť „Základy vlnovej mechaniky jedinej bezspinovej častice v silovom poli“. Vzhľadom na to, že kvantová mechanika je univerzálnou teóriou javov v oblasti atómovej fyziky, je to téma pomerne úzka, ale umožňuje postupné budovanie matematického aparátu teórie i jeho fyzikálnej interpretácie. V predchádzajúcej kapitole sme sa síce zaoberali s jednoduchými kvantovými systémami, ale výklad bol založený na intuitívnych argumentoch a na analógiách. V tejto kapitole bude výklad o čosi systematickejší a viac pozornosti budeme venovať rozvoju formalizmu.

Základnou myšlienkou, z ktorej budeme vychádzať je to, že stav častice v určitom okamihu t_0 je úplne charakterizovaný stavovou vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t_0)$. Časová závislosť vlnovej funkcie $\psi(\mathbf{r}, t)$ bude potom udávať časový vývoj stavu.

Už v predchádzajúcej kapitole sme sa – na intuitívnej úrovni – zaoberali súvisom stavu kvantovomechanickej sústavy a vlnovej funkcie. Keď teraz predpokladáme, že stav častice je *úplne* charakterizovaný vlnovou funkciou, znamená to, že tieto dva pojmy vlastne stotožňujeme, že „zadať stav“ znamená to isté, čo „zadať vlnovú funkciu“, tak, ako v klasickej mechanike „zadať stav“ znamenalo „zadať polohu a hybnosť častice“.²⁹

Aby takéto chápanie pojmu stav malo aj praktický význam, musíme si ukázať ako na základe znalosti vlnovej funkcie možno predpovedať (v pravdepodobnostnom zmysle) výsledok merania ľubovoľnej fyzikálnej veličiny v danom okamihu. Budeme tiež musieť nájsť pre vlnové funkcie príslušnú pohybovú rovnicu, aby bolo možné na základe známej vlnovej funkcie v danom okamihu predpovedať, aká bude vlnová funkcia – a teda stav systému – v budúcnosti.

Skôr však, ako sa začneme zaoberať s takýmito otázkami, všimneme si na príklade voľnej častice niektoré súvislosti medzi tým, ako chápeme stav v kvantovej mechanike a ako ho chápeme v klasickej mechanike. Intuitívne je jasné, že súvislosť tu musí byť, inak by sme rýchlo prišli k vážnym problémom. Vieme totiž, že klasická fyzika je veľmi dobrou teóriou pre pohyb „častíc“ s hmotnosťou okolo 10^{-3} kg alebo väčšou. V skutočnosti vieme i to, že je to dobrá teória pre opis pohybu častíc i s oveľa menšími hmotnosťami. Na druhej strane vieme, že pre pohyb elektrónov s hmotnosťou $9 \cdot 10^{-31}$ kg už platí kvantová mechanika. Ak si teraz predstavíme, že po rebríčku hmotnosti postupujeme postupne dolu, pýtame sa na to, kedy, t. j. pri ktorej hmotnosti prestane platiť klasická mechanika a začne platiť kvantová mechanika. Akosi ťažko uveriť, že by existovala takáto striktná hranica, nad ktorou by platila jedna teória a pod ňou druhá teória, úplne iná. V skutočnosti je tento prechod plynulý, klasická mechanika sa stáva so zmenšovaním sa hmotností a rozmerov čoraz horším a horším priblížením ku skutočnosti a začína platiť kvantová mechanika. Naopak, ak začneme z oblasti platnosti kvantovej mechaniky a postupujeme „smerom ku klasickej“, vidíme, že klasická mechanika sa postupne stáva lepším a lepším priblížením a i opis stavov sústavy postupne prechádza od kvantovomechanického ku klasickému. Túto skutočnosť, ktorá je špeciálnym prípadom Bohrovho princípu korešpondencie, si podrobnejšie všimneme na začiatku tejto kapitoly. Potom sa budeme zaoberať Schrödingerovou rovnicou a neskôr sa budeme venovať tomu, ako v kvantovej mechanike opisujeme fyzikálne veličiny.

²⁹ Odporúčame čitateľovi oboznámiť sa s článkom W. Heisenberga, O vývoji pojmu stavu v histórii kvantovej teórie, publikovanom v českom preklade v Čs. čas. fyz., ročník A 25, rok 1975, str. 397.

2.2 VLNOVÉ FUNKCIE VOĽNEJ ČASTICE

Častici, ktorá sa pohybuje voľne (nenachádza sa v silovom poli) a má určitú hybnosť \mathbf{p} , je podľa de Broglieho hypotézy priradená vlnová funkcia $A \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t)$, kde $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, $\omega = E/\hbar = \mathbf{p}^2/(2m\hbar)$. V určitom čase t_0 je stav častice charakterizovaný vlnovou funkciou

$$\Phi_p(\mathbf{r}) = C \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar) \quad (1)$$

kde C je komplexná konštanta (v predchádzajúcom označení $C = A \exp(-i\omega t_0)$). Časová závislosť stavu voľnej častice je charakterizovaná vlnovou funkciou

$$\Phi_p(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (2)$$

Čistá rovinná vlna (1) opisujúca stav voľnej častice s hybnosťou \mathbf{p} v celom (nekonečnom) priestore spĺňa $|\Phi|^2 = |C|^2$ a preto nemožno vybrať C tak, aby platilo

$$\int |\Phi_p(\mathbf{r})|^2 dV = 1 \quad (3)$$

t. j. tak, aby vlnová funkcia bola normovaná na jednotku v celom objeme.³⁰ Túto formálnu ťažkosť možno obísť dvoma spôsobmi. Pri prvom z nich pracujeme s nekonečným objemom a vlnové funkcie potom normalizujeme tak, ako je to obvyklé v teórii Fourierových integrálov, t. j. používame funkcie

$$(2\pi\hbar)^{-3/2} [\exp i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar] \quad (4)$$

ktoré sú, ako fyzici vravia, „normované na δ -funkciu“. Takéto funkcie budeme tiež neskôr používať, ale predtým sa s δ -funkciami budeme musieť oboznámiť.

Druhá možnosť je jednoduchšia a spočíva v normovaní „na konečný objem“. Fyzikálne je jasné, že keby sme si predstavili svet ako konečný a uzavretý v kocke s hranou, povedzme 10^{10} svetelných rokov, nezmenilo by to nič na správaní sa elektrónu v atóme vodíka, alebo na vlastnostiach iných atomárnych objektov, ktorých rozmery sú rádovo 10^{-10} m. Stavové vlnové funkcie voľných častíc môžeme teda písať ako

$$\Phi_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (5)$$

kde $V = L^3$ je náš „normovací objem“ (kocka s hranou L).

Vo výraze (5) hodnota hybnosti \mathbf{p} sa môže meniť spojito a dostávame tak „spojito nekonečnú“ množinu možných stavov, líšiacich sa hodnotou \mathbf{p} . Nie všetky z týchto stavov sú však lineárne nezávislé,³¹ niektoré z nich môžeme dostať ako lineárne kombinácie ostatných a možnosť vytvárania stavov lineárnymi kombináciami je daná už princípom superpozície. Pýtame sa preto na to, ako by sme mohli dostať systém lineárne nezávislých stavov typu (5). Odpoveď na túto otázku je známa z teórie Fourierových radov. Stačí vybrať iba tie hodnoty p_x, p_y, p_z , pre ktoré je funkcia $\Phi_p(\mathbf{r})$ periodická v každej z premenlivých x, y, z na intervale $(0, L)$. Napríklad pre premennú x to značí

$$e^{ip_x x/\hbar} = e^{ip_x(x+L)/\hbar}$$

Odtiaľ dostávame podmienku

$$p_x L/\hbar = 2\pi n_1 \quad n_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6a)$$

³⁰ Nemožnosť normovania súvisí s tým, že stav (1) je iba istou idealizáciou a nemožno ho experimentálne pripraviť. Každá elektrónová vlna totiž v istom čase niekde vzniká a je preto lokalizovaná v každom čase v istej konečnej priestorovej oblasti (hoci obrovskej, ale konečnej). Skutočne realizovateľné sú iba vlnové balíky. Ale rovinná vlna je tak užitočnou idealizáciou, že by nebolo rozumné sa jej zrieknuť kvôli formálnym ťažkostiam.

³¹ Naša terminológia nie je presná. Pojem lineárnej závislosti býva obvykle vyhradený pre konečné lineárne kombinácie. My tu pripúšťame i superpozície nekonečného počtu funkcií. Navyše by sa žiadalo precizovať definičné obory funkcií, o ktorých hovoríme a zmysel konvergencie príslušných radov. Vyhybame sa tu týmto (z hľadiska matematiky podstatným) otázkam, lebo v danej situácii pre pochopenie fyzikálnej podstaty nie sú nevyhnutné.

a podobne pre ostatné dve zložky hybnosti

$$p_2 L / \hbar = 2\pi n_2 \quad n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6b)$$

$$p_3 L / \hbar = 2\pi n_3 \quad n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6c)$$

Už sme použili označenie

$$p_x \equiv p_1, \quad p_y \equiv p_2, \quad p_z \equiv p_3$$

ktoré podobne ako

$$x \equiv x_1, \quad y \equiv x_2, \quad z \equiv x_3$$

budeme často používať v ďalšom.

Aby sme sa vyhli stálemu písaniu symbolu \hbar v menovateli exponentu v (5) je užitočné používať radšej vlnový vektor a kruhovú frekvenciu

$$\omega \equiv \omega(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p})/\hbar; \quad k_i = p_i/\hbar \quad i = 1, 2, 3$$

a písať stavové vlnové funkcie reprezentujúce systém stavov (5) v tvare

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Phi_{k_1, k_2, k_3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (7a)$$

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7b)$$

Stavové vlnové funkcie typu (7) príslušné k rôznym hodnotám (k_1, k_2, k_3) sú nielen lineárne nezávislé, ale ak trojica (k_1, k_2, k_3) prebieha všetky hodnoty (7b), tvoria aj úplný systém v zmysle teórie Fourierových radov; t. j. každú funkciu $f(x, y, z)$ možno vnútri nášho normalizačného objemu rozvinúť do radu

$$f(x, y, z) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

kde sčítujeme cez všetky $\mathbf{k}(k_1, k_2, k_3)$ prípustné podmienkou (7).

Koeficienty $c_{\mathbf{k}}$ vystupujúce v rovnici (8) ľahko určíme, ak si všimneme, že vlnové funkcie $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ spĺňajú podmienku

$$\int_V \Phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dV = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (9)$$

kde na pravej strane máme *Kroneckerov symbol*, ktorý je rovný jednej ak $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ a rovný nule ak $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$.

Takto stačí rovnicu (8) násobiť vlnovou funkciou $\Phi_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r})$ a preintegrovať cez normalizačný objem V . Ak môžeme zameniť poradie sumy a integrálu (a to budeme predpokladať), dostaneme

$$\int_V \Phi_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) dV = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \int_V \Phi_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dV$$

Integrál na pravej strane je ale rovný Kroneckerovmu symbolu $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$, to znamená, že je nulový pri všetkých \mathbf{k} , s výnimkou jedného jediného prípadu $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ a vtedy je integrál rovný jednej. Celá pravá strana sa teda rovná $c_{\mathbf{q}}$, a máme konečný výsledok

$$c_{\mathbf{q}} = \int_V \Phi_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) dV \quad (10)$$

ktorý ukazuje postup ako určiť koeficienty v rozklade (8) pri známej funkcii $f(\mathbf{r})$.

Postup, ktorý sme tu použili, sa v kvantovej mechanike používa tak často, že si zasluhuje niekoľko poznámok.

1. Rozklad funkcie $f(\mathbf{r})$ do radu (8) nie je viazaný na špeciálny tvar funkcií (7), ale môžeme ho použiť vždy, ak máme istý úplný systém funkcií $\{\Phi_n\}$. Možnosť rozkladu (8) je vlastne vyjadrením

pojmu úplnosti systému $\{\Phi_n\}$. Koeficient c_n v takomto rozklade možno určiť pomocou rovnice typu (10), ak súbor funkcií $\{\Phi_n\}$ je ortonormovaný, t. j. ak platí

$$\int \Phi_n^* \Phi_m dV = \delta_{nm}$$

kde na pravej strane je Kroneckerov symbol rovný 1 pre $n = m$ a rovný nule pre $n \neq m$

2. Stav povolený podmienkou (7b) si môžeme znázorniť bodmi v abstraktnom k -priestore. Je to trojrozmerný priestor, v ktorom na jednotlivé osi vynášame zložky vektora \mathbf{k} , na prvú os k_1 na druhú k_2 a na tretiu k_3 . Predstavme si teraz, že celý \mathbf{k} -priestor je zaplnený kockami s dĺžkou hrany $2\pi/L$. Vlnové funkcie povolené podmienkou (7b) sú práve tie, pri ktorých hodnoty vektora \mathbf{k} (zakreslené v \mathbf{k} -priestore) splývajú s vrcholom niektorej kocky. Kocka má 8 vrcholov a každý vrchol je spoločný 8 kockám. Na jednu kocku s hranou $2\pi/L$ pripadá preto práve jedna „povolená“ hodnota \mathbf{k} . Pre veľa aplikácií je užitočné zaviesť pojem hustoty povolených hodnôt \mathbf{k} v \mathbf{k} -priestore. Táto hustota je rovná počtu „povolených“ vektorov \mathbf{k} pripadajúcich na objemovú jednotku v \mathbf{k} -priestore. Pretože na objem $(2\pi/L)^3$ pripadá práve jedno „povolené“ \mathbf{k} , dostaneme pre túto hustotu označenú symbolom $\rho(\mathbf{k})$ výraz

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (12)$$

Niekedy sa stáva, že z fyzikálneho postavenia problému je zrejmé, že koeficienty $c_{\mathbf{k}}$ v rovnici typu (8) sú pomaly sa meniacimi funkciami vektora \mathbf{k} . Vtedy je užitočné prejsť od sumy v (8) k integrálu. Pretože na jednotkový objem pripadá $\rho(\mathbf{k})$ povolených vektorov \mathbf{k} , bude mať prepis rovnice (8) tvar

$$f(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{k}) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} \quad (13)$$

kde $c(\mathbf{k})$ je pomaly sa meniacia hladká funkcia premennej \mathbf{k} , ktorá v „povolených“ bodoch \mathbf{k} -priestoru nadobúda hodnotu $c_{\mathbf{k}}$. Pre dostatočne veľký normovací objem V je takéto nahradenie sumy integrálom prakticky vždy dobrým priblížením.

Po dosadení za $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a $\rho(\mathbf{k})$ môžeme rovnicu (13) prepísať (zatiaľ bez zrejmejšieho účelu) ako

$$f(\mathbf{r}) = \int \left[c(\mathbf{k}) \frac{V}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{V}} \right] \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{k}$$

Ak výraz v hranatej zátvorke označíme ako $a(\mathbf{k})$ máme³²

$$f(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{k}) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{k} \quad (14)$$

3. Normovací objem V , ktorý sme vyššie používali je značne ľubovoľný. Žiadali sme len to, aby bol obrovský v porovnaní s rozmermi atomárnych sústav. Na základe intuície možno očakávať, že fyzikálne výsledky získané pri rôznych voľbách veľkosti V od tohto V nebudú závisieť. Ukazuje sa, že je to skutočne tak a v ďalších článkoch sa ešte stretne s ilustráciami tohto tvrdenia.

– Výber rovinných vln „normovaných na objem V “ tak, ako sme ho uviedli, sa môže zdať trochu ľubovoľný. Prišli sme k nemu tak, že sme hľadali systém funkcií: a) typu rovinných vln; b) normovaných na jednotku v konečnom objeme V ; c) lineárne nezávislých. Tieto funkcie totiž opisujú súbor fyzikálnych stavov a na základe princípu superpozície vieme, že lineárnou kombináciou vlnových funkcií dostávame vlnovú funkciu prislúchajúcu určitému možnému stavu. Ako súbor „bázických“ stavov sústavy potom prirodzene musíme vybrať súbor lineárne nezávislých vlnových funkcií. Toto by sme už mohli urobiť rôznymi spôsobmi, ale všetky by boli ekvivalentné v tom zmysle, že „bázické“ funkcie nového systému by boli lineárnymi kombináciami systému (7). Systém (7) používame preto, že je pre praktické použitie najvhodnejší.

³² Poznamenajme, že vzťah (14) je formálne podobný rozkladu do rovinných vln „normovaných na δ -funkciu“, o ktorom budeme hovoriť neskôr.

– Toto vlastne nie je poznámka, ale „rada do života“³³ pre čitateľov, ktorí dočítali až sem, ale doteraz sa s teóriou Fourierových radov a integrálov podrobnejšie nestretli. Pre ďalšie čítanie tejto knihy a pochopenie jej fyzikálneho obsahu tých niekoľko pomerne povrchných poznámok, ktoré sme uviedli, je dostačujúce. Ak si čitateľ predchádzajúce trochu premyslí, môže čítať ďalej. Dokonca sa mu môže stať, že s takýmito znalosťami vystačí i v iných praktických fyzikálnych aplikáciách. Môže to však ľahko zviest' na podcenenie rigorózneho matematiky, a to by sme rozhodne nechceli. Sú situácie, keď podrobná a presná znalosť je rozhodujúca. Rozhodne si treba nájsť niekedy čas a aspoň raz v živote si prečítať niečo z matematickej literatúry o Fourierových radoch.³⁴

2.3 VLNOVÉ BALÍKY, GRUPOVÁ RÝCHLOSŤ DE BROGLIEHO VLŇ A PRINCÍP KOREŠPONDENCIE

Časový vývoj stavu častice opisujeme v kvantovej mechanike vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t)$. Tento opis nemá zdanlivo nič spoločné s opisom častíc v klasickej mechanike. V tomto článku ukážeme, že istý vzťah medzi klasickým a kvantovým opisom predsa len existuje a že isté typy vlnových procesov sú v určitom zmysle príbuzné pohybu klasických častíc po trajektóriách. Najprv si však pripomenieme niekoľko pojmov súvisiacich s matematickým opisom vlnových javov.

Rovinnú vlnu šíriacu sa v smere vlnového vektora \mathbf{k} zapisujeme v tvare

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = C e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

kde C je vo všeobecnosti komplexné číslo. *Vlnoplocha* nazývame plochu, na ktorej na fáza konštantnú hodnotu, teda

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{konšt}$$

Fázová rýchlosť je definovaná ako rýchlosť, ktorou sa posúva v priestore daná vlnoplocha. Ak máme pre jednoduchosť rovinnú vlnu pohybujúcu sa v smere x , potom rovnica vlnoplochy je $kx - \omega t = \text{konšt}$ a pre fázovú rýchlosť máme

$$v_f = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} \quad (1)$$

Rovinné vlny sú idealizáciou skutočných vlnových procesov. Reálne vlny sú vždy lokalizované v istej oblasti priestoru a ich trvanie v čase je tiež obmedzené. Ak je priestorová oblasť, v ktorej je vlnenie nenulovo malé, hovoríme o vlnovom balíku. Každý takýto vlnový balík však možno zapísať ako superpozíciu (lineárnu kombináciu) rovinných vlŇ.³⁵ Zaujímame sa teraz o to, ako sa takýto vlnový balík pohybuje. Najprv uvedieme jednoduchý argument pre reálne klasické vlny a potom prediskutujeme realistickejší prípad skladania komplexných de Broglieho vlŇ. Predstavme si teda superpozíciu dvoch vlŇ, ktorých vlnové vektory a kruhové frekvencie sa len o málo odlišujú a amplitúdy sú rovnaké.

$$U_1(x, t) = A \sin [(k - \Delta k)x - (\omega - \Delta \omega)t]$$

$$U_2(x, t) = A \sin [(k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t]$$

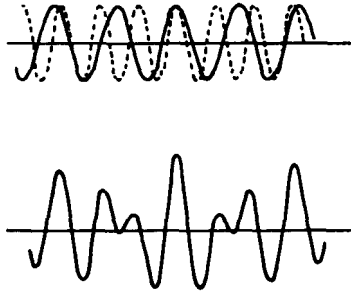
Ak použijeme známy vzťah $\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta) = 2 \sin \alpha \cos \beta$, po úprave dostaneme

$$U_1 + U_2 = 2 \sin (kx - \omega t) \cos (\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$$

³³ Vášeň dávať rady do života je choroba, ktorej sa pedagóg, najmä v stredných a vyšších rokoch ťažko vyhne. Nech nám čitateľ túto chorobu z povolania prepáči.

³⁴ Môže to byť napríklad kniha G. J. Šilov: Matematická analýza, Alfa, Bratislava 1974. Táto kniha je pre fyzika užitočná nielen kvôli Fourierovým radom.

³⁵ Toto tvrdenie po matematickej stránke vyplýva z úplnosti sústavy rovinných vlŇ a v tomto kontexte sme o ňom už hovorili v predchádzajúcom článku.



Obr. 2.1

Prvý člen na pravej strane je približne pôvodná vlna, druhý je modulačný faktor, ktorý vedie k vzniku výrazných miním a maxím vlnenia, znázornených na obr. 2.1. Rýchlosť šírenia sa týchto maxím, z ktorých každé vlastne odpovedá vlnovému balíku, je daná členom $\cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$ a poloha maxima je daná rovnicou

$$\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t = 0$$

Odtiaľ máme pre rýchlosť šírenia sa maxima, nazývanú tiež grupovou rýchlosťou

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$$

Pre malé Δk píšeme

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Teraz uvedieme realistickejší príklad. Uvažujme superpozíciu rovinných vln, šíriacich sa v smere osi x

$$\Phi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (4)$$

závislosť $\omega(k)$ vyberieme takú, aká prislúcha voľnej častici (2.2), t. j.

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (5)$$

a $c(k)$ zvolíme napríklad v tvare

$$c(k) = A \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2\kappa^2}\right) \quad (6)$$

Uvažujme teda príklad superpozície rovinných vln, ktorých vlnové vektory sú gaussovsky „rozmazané“ v okolí hodnoty k_0 s neurčitou $\Delta k \approx \kappa$.

Po dosadení (5) a (6) do (4) a substitúcií $k - k_0 = q$ dostaneme

$$\Phi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-q^2 \left(\frac{1}{2\kappa^2} + \frac{i\hbar t}{2m}\right) + iq \left(x - \frac{k_0 \hbar}{m} t\right)\right] dq$$

keď sme označili $\omega_0 = \omega(k_0)$.

Využitím známeho Laplaceovho integrálu dostaneme

$$\Phi(x, t) = \left\{ A \left[\frac{2\pi\kappa^2 m}{m + i\hbar\kappa^2 t} \right]^{1/2} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{2\left(\frac{1}{\kappa^2} + \frac{i\hbar t}{m}\right)}\right] \right\} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

Výraz (7) (ako aj celý náš príklad) je trochu technicky komplikovaný, ale veľmi poučný. Vo vzťahu (7) totiž ľahko rozpoznáme exponenciálny fázový faktor $\exp[i(k_0x - \omega_0t)]$ predstavujúci rovinnú vlnu, avšak modulovanú (komplexným) amplitúdovým faktorom – výrazom v zložených zátvorkách. Aby sme si urobili lepšiu predstavu o charaktere vlnového balíka, ktorý výraz (7) predstavuje, uvedomme si, že pre posúdenie pravdepodobnosti výskytu častice je rozhodujúca absolútna hodnota vlnovej funkcie

$$|\Phi(x,t)| = |A| \cdot \left[\frac{4\pi^2 \kappa^4 m^2}{m^2 + \hbar^2 \kappa^4 t^2} \right]^{1/4} \left\{ \exp \frac{-\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\frac{2}{\kappa^2} + 2\left(\frac{\hbar t \kappa}{m}\right)^2} \right\} \quad (7')$$

Hlavným činiteľom, ktorý určuje tvar vlnového balíka je zrejme exponenciálny výraz vo vzťahu (7'). Je zrejmé, že poloha maxima vlnového balíka je daná vzťahom

$$x - \frac{\hbar k_0}{m} t = 0 \quad \Rightarrow \quad x = \frac{\hbar k_0}{m} t \quad (8)$$

Teda vlnový balík (jeho maximum) sa pohybuje rýchlosťou

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (9)$$

čo odpovedá vzťahu (3), ak doň dosadíme z (5)

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

Z predchádzajúceho je zrejmé, že k časticiam klasickej fyziky majú najbližšie lokalizované vlnové balíky a princíp korešpondencie žiada, aby v klasickej limite opis pomocou takýchto balíkov prešiel na opis blízky k opisu pohybu častíc pomocou klasických trajektórií. Takto sme intuitívne vedení k priradeniu

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{častica v klasickej} \\ \text{mechanike} \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{vlnový balík} \\ \text{de Broglieho vln} \end{array} \right\}$$

V takom prípade ale rýchlosť častice v klasickej mechanike musí byť rovná rýchlosti pohybu maxima vlnového balíka, teda

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{rýchlosť častice} \\ \text{v klasickej mechanike} \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{grupová rýchlosť} \\ \text{de Broglieho vln} \end{array} \right\}$$

Zo vzťahu (9) je hneď zrejmé, že takéto priradenie je možné. Platí totiž

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

Výraz p_0/m je však práve rýchlosť klasickej častice s hybnosťou p_0 .

Analógia medzi vlnovými balíkmi a časticami klasickej fyziky má však svoje ohraničenia. Jedno z nich vidno napríklad z *rozplývania* sa vlnových balíkov. Túto vlastnosť vidno aj zo vzťahu (7'). Je zrejmé, že tam uvedená amplitúda pre x rozdielne od hodnoty (8) rýchlo klesá k nule. Rýchlosť tohto poklesu je v prevažnej miere daná menovateľom v exponenciálnom faktore vo výraze (7'). Rozmer vlnového balíka teda možno ľahko odhadnúť a dostaneme

$$(\Delta x)^2 \approx \frac{1}{\kappa^2} + \frac{\hbar^2 \kappa^2 t^2}{m^2}$$

Vidíme, že rozmer balíka s časom neustále rastie.

Nebudeme sa tu snažiť o podrobnejšiu matematickú analýzu tohto javu, ale uvedieme iba fyziku, ktorá je za ním. Predstavme si, že v čase $t_0 = 0$ máme vlnový balík s „rozmerom“ $(\Delta x)_0$. Podľa vzťahu neurčitosti budú mať de Broglieho vlny, ktorých superpozíciou bol balík vyrobený, hybnosti v intervale $\Delta p \sim \hbar/(\Delta x)_0$. Príslušné rýchlosti $v = p/m$ budú mať takto neurčitost'

$$\Delta v \sim \frac{\Delta p}{m} \sim \frac{\hbar}{m(\Delta x)_0}$$

Tieto neurčitosti v rýchlosti povedú k zväčšovaniu „rozmerov“ balíka s rastúcim časom, pričom dodatočné rozplynutie bude približne

$$(\Delta x)' \sim \Delta v \cdot t \sim \frac{\hbar t}{m(\Delta x)_0}$$

Presnejšia analýza by nám ukázala, že správny vzťah pre skladanie pôvodného a dodatočného rozmazania je

$$(\Delta x)^2 = (\Delta x)_0^2 + (\Delta x)'^2$$

Výraz (10) má skutočne presne takúto štruktúru.

Rozplývajúce vlnové balíky znemožňujú chápať vlnové funkcie priradené stavom častíc ako hmotnostné vlny v pôvodnom Schrödingerovom zmysle. Po dostatočne dlhom čase sa totiž vlnový balík rozplynie do veľkých rozmerov, prestane byť lokalizovaný a nemožno ho stotožniť so samotnou časticou.

2.4 ČASOVÝ VÝVOJ STAVU. SCHRÖDINGEROVA ROVNICA

Schrödingerova rovnica (ďalej zväčša len SchR) je základným pohybovým zákonom kvantovej mechaniky. Ak poznáme stav sústavy v čase t_0 , daný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ Schrödingerova rovnica vedie k jednoznačnému stavu $\psi(\mathbf{r}, t)$ pre ľubovoľné $t > t_0$. Jej úloha v schéme kvantovej mechaniky je teda analogická s úlohou Newtonových pohybových rovníc v klasickej mechanike.

Pre jednu časticu nachádzajúcu sa v silovom poli s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ má SchR tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

kde Δ je Laplaceov operátor

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Vzhľadom na t je to diferenciálna rovnica prvého rádu a zadaním začiatočného stavu $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ je jej riešenie dané jednoznačne. SchR takto určuje časový vývoj stavu sústavy. Na zdôraznenie tejto skutočnosti ju budeme nazývať niekedy časovou Schrödingerovou rovnicou.

Táto rovnica je základným zákonom kvantovej mechaniky. Nemôžeme ju preto odvodiť z klasickej fyziky práve tak, ako nemožno odvodiť Newtonove zákony z výsledkov prednewtonovskej fyziky. Základné zákony novej teórie treba vždy v istom zmysle „uhádnuť“. Aby sme túto skutočnosť zdôraznili uviedli sme tvar SchR rovno, bez predbežného komentára. Pravda, vždy možno uviesť dôvody, ktoré autora novej teórie, v tomto prípade E. Schrödingera, viedli (r. 1926) k danej formulácii zákona. Reprodukovanie pôvodného Schrödingerovho heuristického postupu³⁶ by však zabralo priveľa miesta. Uvedieme tu preto iba niekoľko argumentov, ktoré by mohli urobiť SchR prijateľnejšou.

Začneme tým, že nájdeme rovnicu, ktorú spĺňa vlnová funkcia voľnej častice

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)} \quad (2)$$

kde A je konštanta a $E \equiv E(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$.

³⁶ Archimedes po objavení svojho zákona bežal vrah nahý ulicami Syrakúz volajúc „Heuréka“ (našiel som). Heuristický postup je postup pre nachádzanie niečoho nového.

Derivovaním tohto $\psi(\mathbf{r}, t)$ podľa času dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = AE(\mathbf{p})e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} = E(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

Vďaka vzťahu medzi energiou a hybnosťou môžeme pravú stranu tiež prepísať a máme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi$$

Ak sa ale pozrieme na $\psi(\mathbf{r}, t)$ dané rovnicou (2) vidíme, že hybnosti môžeme dostať z exponentu pred vlnovú funkciu aj tak, že budeme derivovať ψ podľa súradníc. Skutočne, ak derivujeme $\psi(\mathbf{r}, t)$ podľa súradnice x a výsledok násobíme faktorom (\hbar/i) , dostaneme

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}_x \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

Keby sme to isté urobili ešte raz, dostaneme

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}_x^2 \psi(\mathbf{r}, t)$$

Ak urobíme to isté aj s ostatnými súradnicami, ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \equiv \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 \psi$$

kde Δ na ľavej strane je Laplaceov operátor. Na pravej strane (6) máme ale to isté čo na pravej strane (4) a vidíme, že pre rovinnú vlnu platí

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t)$$

Koeficienty v tejto rovnici nezávisia od hybnosti a energie danej rovinnéj vlny a preto tejto rovnici vyhovuje každá rovinná vlna tvaru (2) za predpokladu, že vzťah medzi energiou a hybnosťou je taký, ako má byť, t. j. $E = \mathbf{p}^2/2m$. Rovnica je lineárna a preto ju spolu s každými dvoma riešeniami spĺňa aj ľubovoľná lineárna kombinácia týchto riešení. Odtiaľto prideme hneď k záveru, že rovnicu (7) spĺňa ľubovoľná kombinácia rovinných de Broglieho vln a teda i všetky vlnové balíky. Porovnaním (7) a (1) vidíme, že (7) je SchR pre prípad nulovej potenciálnej energie $V(\mathbf{r})$. Podstatným pre získanie tejto rovnice bol vzťah $E = \mathbf{p}^2/2m$ platný pre energiu voľnej častice. Pre časticu nachádzajúcu sa v silovom poli s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ možno očakávať, že pre získanie správnej rovnice bude treba v niektorej z predchádzajúcich urobiť zámenu výrazu odpovedajúceho kinetickej energii na výraz odpovedajúci celkovej energii. V rovnici (7) máme na pravej strane výraz $-(\hbar^2/2m)\Delta$, ktorý podľa (6) skutočne odpovedá kinetickej energii. Ak v (7) urobíme na pravej strane zámenu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r})$$

a aplikujeme pravú stranu na ψ , dostaneme práve SchR (1).

Tomuto formálnemu argumentu možno pridať istý fyzikálny zmysel ak si predstavíme pohyb častice v poli s veľmi pomaly sa meniacou potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ ($V(\mathbf{r})$ sa mení len veľmi málo na vzdialenosti približne rovnej vlnovej dĺžke de Broglieho vlny). Ak sa $V(\mathbf{r})$ mení len pomaly znamená to, že sily pôsobiace na časticu sú malé (sila je rovná $-\text{grad } V(\mathbf{r})$) a možno očakávať, že vlnová funkcia bude približne vyzeráť ako

$$\psi \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{r} - Et)\right\} \quad (8)$$

pričom $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ závisí od polohy tak, že platí

$$\frac{[\mathbf{p}(\mathbf{r})]^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E = \text{konšt} \quad (9)$$

Pri derivovaní pravej strany v (8) podľa súradníc môžeme zanedbať derivácie $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ podľa x, y, z , pretože sa $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ mení s polohou len veľmi pomaly a vzhľadom na (9) bude vlnová funkcia (8) spĺňať SchR (1).

Pripomeňme ešte raz, že tieto argumenty nemali byť a ani neboli „dôkazom“ Schrödingerovej rovnice. Ich účel bol skôr pedagogický; argumenty mali urobiť SchR prijateľnou a trochu objasniť jej zmysel. V teórii ale SchR vystupuje ako postulát, ktorého správnosť sa dokazuje súhlasom teórie s experimentom.

Na záver článku ešte upozorníme čitateľa na niekoľko postupov, s ktorými sme sa tu stretli, a s ktorými sa stretneme ešte veľakrát v ďalšom. V rovnici (5) vidíme, že pôsobením výrazu $(\hbar/i)\partial/\partial x$ na rovinnú vlnu dostávame zas tú istú rovinnú vlnu, ale násobenú hodnotou p_x . Výraz $(\hbar/i)\partial/\partial x$ je špeciálnym prípadom operátora, t. j. predpisu, ktorým istej funkcii $f(x)$ priradíme funkciu $g(x)$, v našom prípade

$$f(x) \rightarrow g(x); \quad g(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

Operátor $(\hbar/i)\partial/\partial x$ zrejme súvisí s x -ovou komponentou hybnosti častice, lebo z rovinatej vlny v zmysle rovnice (5) „vylúpne“ práve hodnotu p_x . Podobne operátor $-(\hbar^2/2m)\Delta$ „vylúpne“ z rovinatej vlny kinetickú energiu častice, tak ako to vidieť z rovnice (6). V ďalšom uvidíme, že toto je v kvantovej mechanike všeobecným javom a každej fyzikálnej veličine je priradený istý operátor, ktorý pracuje podobne ako pracujú tie dva, čo sme práve spomínali v súvislosti s rovnicami (5) a (6).

2.5 STACIONÁRNE STAVY

Z kvalitatívnych úvah v kapitole 1 sme prišli k tomu, že diskretným kvantovým stavom s určitými hodnotami energie odpovedajú stojaté vlny (harmonické kmity) de Broglieho vln. Takéto stavy boli charakterizované tým, že ich časový vývoj bol daný jedinou frekvenciou ω , stojatá vlna mala tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

a energia stavu bola daná vzťahom $E = \hbar\omega$. Takéto stavy sa nazývajú aj stacionárnymi stavmi. Ak vlnová funkcia (1) má opisovať časový vývoj stavu, potom musí vyhovovať časovej SchR. To zrejme nebude možné pre ľubovoľnú funkciu $\Phi(\mathbf{r})$.

Pokúsme sa teraz nájsť podmienky, ktoré musí spĺňať funkcia $\Phi(\mathbf{r})$, aby výraz typu (1) bol riešením SchR (4.1). Po dosadení (1) do (4.1), dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r})] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r})$$

Ak na ľavej strane vykonáme naznačenú deriváciu a obe strany vykrátíme faktorom $\exp(-i\omega t)$ dostaneme podmienku

$$\hbar\omega \Phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r})$$

Vzhľadom na to, že $\hbar\omega$ je práve energia stacionárneho stavu, máme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Argument by sme mohli obrátiť nasledovne: Ak existuje číslo E a funkcia $\Phi(\mathbf{r})$ také, že je splnená podmienka (2) a ak $\Phi(\mathbf{r})$ spĺňa štandardné podmienky pre to, aby mohla reprezentovať stav uvažovanej

sústavy³⁷, potom funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ daná výrazom (1) je riešením časovej SchR a opisuje časový vývoj stacionárneho stavu sústavy.

Podmienka (2) sa niekedy nazýva bezčasovou Schrödingerovou rovnicou. Názov ale nie je veľmi šťastne zvolený, pretože ľahko vedie k zámene dvoch principiálne odlišných rovníc: Schrödingerovej rovnice (4.1), čo je pohybová rovnica, ktorú musí spĺňať každá vlnová funkcia reprezentujúca časový vývoj stavu sústavy a bezčasovej Schrödingerovej rovnice (2), čo je podmienka stacionárnosti stavov. Nebezpečie zámény je tým väčšie, že v hovorovej reči sa aj o bezčasovej Schrödingerovej rovnici zväčša hovorí iba ako o Schrödingerovej rovnici.

Zatiaľ sme bezčasovú Schrödingerovu rovnicu chápali trocha v pasívnom zmysle – ako kontrolu stacionárnosti uvažovaného stavu.

V praxi ju ale používame v aktívnom zmysle a určujeme pomocou nej možné stacionárne stavy danej sústavy a možné hodnoty energie týchto stavov. Ukazuje sa totiž, že rovnica (2) má fyzikálne prijateľné riešenia iba pri istých hodnotách parametra E . Tieto hodnoty sú často diskkrétne a vtedy určujú možné hodnoty energie (diskrétnych) kvantových stavov sústavy. Pod riešením bezčasovej SchR (2) rozumieme: a) nájdenie možných hodnôt energie, b) nájdenie príslušných riešení. Takto sa v kvantovej mechanike určujú hodnoty energie stacionárnych stavov nielen pre jednoduché sústavy ako lineárny harmonický oscilátor a atóm vodíka, ale i pre oveľa komplikovanejšie sústavy.

2.6 ČASTICA VIAZANÁ NA ÚSEČKU

Teraz si na veľmi jednoduchom príklade ukážeme ako bezčasová SchR vedie k určeniu hodnôt energie a vlnových funkcií stacionárnych stavov. Budeme sa zaoberať prípadom elektrónu, ktorý sa môže pohybovať iba v jednom smere a je viazaný na úsečku $0 \leq x \leq L$. Túto situáciu si môžeme predstaviť realistejšie ako elektrón pohybujúci sa v poli potenciálu $V(x)$, pričom $V(x) = 0$ vnútri uvažovanej úsečky a mimo nej $V(x)$ nadobúda veľmi vysokú hodnotu V_0 . Neskôr sa podrobnejšou analýzou presvedčíme o tom, že táto situácia vedie k tomu, že elektrón nemôže preniknúť mimo úsečky a jeho vlnová funkcia je teda mimo uvažovanej úsečky nulová. Ak vlnová funkcia má byť spojitá (podrobnejšiu diskusiu tejto požiadavky zatiaľ odložíme), potom musí byť nulová aj v okrajových bodoch úsečky.

Stavová vlnová funkcia stacionárneho stavu musí spĺňať vnútri úsečky bezčasovú Schrödingerovu rovnicu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = E\Phi(x)$$

a podľa predchádzajúceho aj okrajové podmienky

$$\Phi(0) = 0 \tag{2a}$$

$$\Phi(L) = 0 \tag{2b}$$

Pre $E > 0$ (čo odpovedá fyzikálnej požiadavke kladenej na energiu voľnej častice) môžeme rovnicu (1) prepísať do tvaru

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\alpha^2\Phi(x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3}$$

Všeobecným riešením (3) je funkcia

$$\Phi(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x)$$

Okrajová podmienka (2a) je splnená len pri $B = 0$ a máme

$$\Phi(x) = A \sin(\alpha x) \tag{4}$$

³⁷ Tieto podmienky sú fyzikálnej povahy a závisia do istej miery od toho, aký systém skúmame. Je to napríklad normovateľnosť vlnovej funkcie, jej jednoznačnosť a pod. S takýmito podmienkami sa stretne ešte v ďalšom pri diskusii riešení SchR v konkrétnych fyzikálnych situáciách.

Ak toto riešenie dosadíme do (2b), máme podmienku

$$\Phi(L) = A \sin(\alpha L) = 0 \quad (5)$$

Keby platilo $A = 0$, máme triviálne riešenie $\Phi(x) = 0$, ktoré neopisuje žiadny stav. Fyzikálne prijateľné riešenia dostaneme teda len pre určité hodnoty parametra α , menovite pre tie, pre ktoré

$$\alpha = \alpha_n, \quad \alpha_n L = n\pi, \quad n \text{ celé} \quad (6)$$

Parameter α je ale zviazaný s energiou vzťahom (3). Ak toto vyjadrenie α pomocou E dosadíme do (6), prideme k tomu, že (6) je splnené len pre hodnoty E_n dané podmienkou

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (7a)$$

a ku každej hodnote E_n máme podľa (4) stavovú vlnovú funkciu stacionárneho stavu

$$\Phi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right), \quad \text{pre } 0 \leq x \leq L$$

$$\Phi_n(x) = 0 \quad \text{pre } x \text{ mimo úsečky } (0, L)$$

Konštantu A určujeme z normovacej podmienky

$$\int_0^L |\Phi_n(x)|^2 dx = 1$$

ktorá fyzikálne odpovedá tomu, že pravdepodobnosť pre nájdenie častice na úsečke $(0, L)$ je rovná jednej. Riešením tejto podmienky je napríklad

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

a takto prichádzame k sústave stavových vlnových funkcií³⁸

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (7b)$$

Hodnoty energie k nim príslušné sú dané vzťahom (7a). Časová závislosť stacionárnych stavov potom bude

$$\psi_n(x, t) = \exp(-iE_n t/\hbar) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \quad (8)$$

Výsledky, ktoré sme tu dostali riešením bezčasovej SchR sú presne rovnaké ako tie, ktoré sme na základe analógie kvantových stavov s určitou energiou a harmonických kmitov klasických strún „uhádli“ už v predchádzajúcej kapitole.

Je užitočné všimnúť si podrobnejšie „mechanizmus kvantovania“. Samotná bezčasová SchR (3) má riešenie pri ľubovoľnej hodnote energie. Isté diskrétné hodnoty energie sú tu vlastne vybrané spoluprácou okrajových podmienok (2a) a (2b). S analógiami tejto jednoduchej situácie sa ešte stretneme neskôr pri zložitejších sústavách.

³⁸ V rovnici (7b) už uvažujeme iba kladné hodnoty n . Zmena $n \rightarrow -n$ by totiž len zmenila znamienko vlnovej funkcie a to je pri stacionárnom stave ekvivalentné len zmene fázy $\exp(-i\omega t) \rightarrow \exp(-i\omega t + i\pi)$ čo z fyzikálnych dôvodov odpovedá tomu istému stavu. Takisto zámena $A \rightarrow Ae^{i\beta}$ pri reálnom β mení len fázu, ale nemení fyzikálny stav.

2.7 STREDNÉ HODNOTY FYZIKÁLNYCH VELIČÍN

Poznanie stavu sústavy umožňuje predpovedať pravdepodobnosti výsledkov merania fyzikálnych veličín. Úplná predpoveď výsledkov merania určitej fyzikálnej veličiny K v stave ψ obsahuje:

- súbor hodnôt $\{K_n\}$, ktoré môžu byť výsledkom merania veličiny K ,
- súbor pravdepodobností $\{P_n\}$, kde P_n je pravdepodobnosť namerať v stave ψ hodnotu K_n .

Pretože meranie vo všeobecnosti mení stav sústavy, musíme uvedenú predpoveď verifikovať meraním veličiny K buď na viacerých sústavách, ktoré sú všetky pred meraním v stave ψ , alebo musíme jedinú študovanú sústavu pred každým meraním uviesť do stavu ψ .

Často sa ale stáva, že nepotrebujeme úplnú informáciu o výsledkoch merania danej veličiny a stačí nám poznať jej strednú hodnotu, prípadne i strednú kvadratickú odchýlku. V tomto článku sa budeme zaoberať tým, ako takéto veličiny môžeme vypočítať pri danom stave a fyzikálnej veličine K . Najprv si pripomenieme niekoľko pojmov známych z teórie pravdepodobností a štatistiky.

Predpokladajme, že veličina K môže nadobúdať hodnoty K_i , $i = 1, \dots, n$, a v stave ψ ich nadobúda s pravdepodobnosťami p_i .

Strednú hodnotu veličiny K , označenú symbolom \bar{K} , potom definujeme vzťahom

$$\bar{K} = \sum_{i=1}^n K_i p_i \quad (1)$$

Stredná hodnota veličiny v danom stave je prirodzene definovaná ako stredná hodnota výsledkov meraní tejto veličiny na veľkom súbore identických sústav nachádzajúcich sa v uvažovanom stave.

Jednotlivé výsledky meraní budú viac alebo menej rozptýlené okolo strednej hodnoty \bar{K} . Užitočnou mierou takéhoto rozptylu je stredná kvadratická odchýlka definovaná vzťahom

$$\overline{(\Delta K)^2} = \sum_{i=1}^n (K_i - \bar{K})^2 p_i \quad (2)$$

Ak rozložíme výraz $(K_i - \bar{K})^2$ a využijeme definíciu \bar{K} , dostaneme vyjadrenie užitočnejšie pre praktické použitie

$$\overline{(\Delta K)^2} = \overline{K^2} - \bar{K}^2 \quad (3)$$

kde $\overline{K^2}$ je definované ako

$$\overline{K^2} = \sum_{i=1}^n K_i^2 p_i \quad (4)$$

Ak pre skúmaný stav ψ veličina K môže nadobúdať iba jednu hodnotu³⁹ K_1 , potom $\bar{K} = K_1$ a $\overline{(\Delta K)^2} = 0$. Hovoríme tiež, že v tomto stave nadobúda veličina K ostrú hodnotu.

Príkladom na takúto situáciu sú stacionárne stavy, v ktorých má energia ostrú hodnotu. Častejšie sa však stretávame so situáciou, kde $\overline{(\Delta K)^2} > 0$. Stredná kvadratická odchýlka predstavuje mieru neurčitosti veličiny K v danom stave. V kvantovej mechanike sa často stretávame so situáciami, keď skúmaná veličina môže v danom stave nadobúdať hodnoty spojito rozložené na nejakom intervale. Ak túto veličinu označíme ako k a zavedieme hustotu pravdepodobnosti $p(k)$, potom jednoduchým zovšeobecnením vzťahov (1) a (2) dostaneme

$$\bar{k} = \int k p(k) dk \quad (5)$$

$$\overline{(\Delta k)^2} = \int (k - \bar{k})^2 p(k) dk \quad (6)$$

Pritom $p(k)dk$ je pravdepodobnosť pre nájdenie hodnoty k z intervalu $(k, k + dk)$.

³⁹ Vtedy sa $p_1 = 1$ a všetky ostatné p_i sú rovné nule.

Pre mnohé aplikácie postačí, ak poznáme iba stredné hodnoty a stredné kvadratické odchýlky niektorých veličín v uvažovanom stave a na základe tejto informácie si vieme vytvoriť dostatočnú predstavu o skúmanom stave. V nasledujúcich článkoch budeme preto systematickejšie študovať výpočty stredných hodnôt a stredných kvadratických odchýlok fyzikálnych veličín v stavoch daných stavovými vlnovými funkciami.

Predtým ale uvedieme jednoduché príklady súvisiace s časticou viazanou na úsečku. Predstavme si najprv, že elektrón viazaný na úsečku $\langle 0, L \rangle$ je v základnom stave opísanom stavovou vlnovou funkciou

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

Jeho energia je vtedy presne E_1 , takže platí

$$\begin{aligned} \bar{E} &= E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \\ \overline{(\Delta E)^2} &= 0 \end{aligned}$$

Hustota pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu v okolí bodu x v intervale $\langle 0, L \rangle$ je

$$p(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right)$$

a podľa vzťahov (5) a (6) integrovaním per partes nájdeme

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_0^L x \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx = \frac{L}{2} \\ \overline{x^2} &= \int_0^L x^2 \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right) \end{aligned}$$

odtiaľ podľa (3)

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = L^2 \cdot \frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2} \quad (8)$$

2.8 STREDNÉ HODNOTY VELIČÍN ZÁVISIACICH OD SÚRADNICE

V tomto a v nasledujúcom článku sa naučíme vypočítať stredné hodnoty veličín v stave, ktorého časová závislosť je opísaná vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t)$.

V klasickej mechanike jedinej častice vo vonkajšom silovom poli môžeme každú fyzikálnu veličinu vyjadriť pomocou súradnice \mathbf{r} a hybnosti \mathbf{p} . Ako príklad uveďme energiu

$$E = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r})$$

alebo moment hybnosti

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Najjednoduchší príklad predstavujú veličiny závislé iba od súradnice; takou veličinou je napríklad potenciálna energia $V(\mathbf{r})$, samotná poloha častice \mathbf{r} , alebo jej druhá mocnina \mathbf{r}^2 atď.

Výpočet stredných hodnôt takýchto veličín v kvantovej mechanike nie je problémom, pretože už vieme, že $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ je hustotou pravdepodobnosti pre nájdenie častice v okolí bodu \mathbf{r} (v čase t). Ak máme klasickú veličinu F závislú od súradnice častice vzťahom $F = F(\mathbf{r})$, potom prirodzene predpokladáme, že v kvantovom prípade strednú hodnotu F vypočítame zo vzťahu

$$\overline{F(t)} = \int F(\mathbf{r}) \cdot |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \equiv \int \psi^*(\mathbf{r}, t) F(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

Vo všeobecnosti bude stredná hodnota \overline{F} závislá od času, vďaka tomu, že $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ obsahuje časovú závislosť.

Špeciálnym prípadom je samotný polohový vektor častice \mathbf{r} . Stredná hodnota polohy častice je daná vzťahom

$$\overline{\mathbf{r}(t)} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (2)$$

Fyzikálne je $\overline{\mathbf{r}(t)}$ kvantovomechanickým analógom klasickej trajektórie častice a určuje časovú závislosť polohy „stredú“ vlnového balíka.

2.9 VELIČINY ZÁVISLÉ OD HYBNOSTI

Zadanie stavovej vlnovej funkcie úplne určuje stav sústavy a preto vlnová funkcia musí obsahovať i informáciu o hybnosti častice a o veličinách závislých od hybnosti. Pravda, „zakódovanie“ tejto informácie do vlnovej funkcie nie je také jednoduché ako v prípade veličín závislých iba od súradnice.

Ak máme (v normalizácii na konečný objem podľa článku 2.2) časticu v určitom čase v stave opísanom stavovou vlnovou funkciou (2.5)

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (1)$$

ktorá odpovedá de Broglieho vlne s hybnosťou \mathbf{p} , potom je zrejmé, že pri meraní hybnosti v tomto stave nameriame určite hybnosť \mathbf{p} . Predstavme si teraz, že máme časticu v stave

$$\psi(\mathbf{r}) = c_1 \Phi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{r}) + c_2 \Phi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

kde pri splnení normovacej podmienky

$$\int_V \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV$$

vďaka ortogonalnosti a normovanosti (pozri článok 2.2) funkcií $\Phi_{\mathbf{p}_1}$, $\Phi_{\mathbf{p}_2}$ platí

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (3)$$

Pýtame sa teraz na to, aké hodnoty hybnosti môžeme namerať v stave (2), ak urobíme experiment, v ktorom meriame hybnosť. Intuitívne sa zdá, že v stave (2), ktorý je superpozíciou de Broglieho vln s hybnosťami \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 môžeme namerať iba tieto hodnoty hybnosti. Tento názor je potvrdený aj diskusiou procesu merania v článku 1.14.

Podľa tejto diskusie je tiež zrejmé, že musíme predpokladať, že pravdepodobnosti P_1 a P_2 namerať hodnoty \mathbf{p}_1 , resp. \mathbf{p}_2 sú dané vzťahom

$$P_1 = |c_1|^2, \quad P_2 = |c_2|^2 \quad (4)$$

pričom vďaka platnosti vzťahu (3) je splnená dôležitá vlastnosť pravdepodobností

$$P_1 + P_2 = 1 \quad (5)$$

Celá schéma kvantovej mechaniky ukazuje, že predpoklad (4) je správny a jeho zovšeobecnenie (stretneme sa s ním neskôr) patrí k základným postulátom kvantovej mechaniky.

Teraz je už zrejmé, k čomu povedie meranie hybnosti v stave, ktorý je všeobecnou superpozíciou rovinných vln

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}} \Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

kde sčítujeme iba cez hodnoty \mathbf{p} povolené podmienkou (2.6). Vďaka ortonormovanosti systému $\Phi_{\mathbf{p}}$ normovanosť $\psi(\mathbf{r})$ zase žiada

$$\sum_{\mathbf{p}} |c_{\mathbf{p}}|^2 = 1 \quad (7)$$

Zovšeobecnením (4) pridáme k tomu, že v stave (6) nameriame jednotlivé hodnoty hybnosti s pravdepodobnosťami

$$P_p = |c_p|^2 \quad (8)$$

Strednú hodnotu hybnosti potom počítame štandardným postupom

$$\bar{p} = \sum_p p P_p = \sum_p p |c_p|^2 \quad (9)$$

Vďaka tomu, že rovinné vlny (1) tvoria úplný systém, možno ľubovoľnú funkciu písať v tvare superpozície (6) a teda pre ľubovoľný stav sústavy môžeme takýmto postupom získať úplnú informáciu o meraní hybnosti.

Pre výpočet v realistickej situácii by však táto schéma bola trochu príliš zdĺhavá, pretože vlnovú funkciu $\psi(\mathbf{r})$ nemáme od začiatku danú ako superpozíciu (6) de Broglieho vln. V princípe to nie je problém, lebo (podľa článku 2.2) môžeme koeficienty c_p vypočítať podľa vzťahu

$$c_p = \int_V \Phi_p^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV \quad (10)$$

Zdĺhavosť procedúry je v tom, že pri výpočte p musíme podľa predchádzajúceho a) z daného $\psi(\mathbf{r})$ spočítať podľa (10) koeficienty c_p ; b) podľa (8) určiť pravdepodobnosti P_p ; c) podľa (9) spočítať \bar{p} .

Našťastie celá schéma sa dá podstatne zjednodušiť a \bar{p} môžeme dostať rovno podľa vzťahu

$$\bar{p} = \int_V \psi^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi(\mathbf{r}) dV \quad (11)$$

Podme sa o tom presvedčiť. Do (11) dosadíme rozvoj funkcie $\psi(\mathbf{r})$ zapísaný v (6) a máme

$$\bar{p} = \int_V \left\{ \sum_p c_p^* \Phi_p^* \right\} \frac{\hbar}{i} \nabla \left\{ \sum_k c_k \Phi_k \right\} dV$$

Celý trik je v tom, že operátor $(\hbar/i)\nabla$ „vylúpne“ z každej de Broglieho vlny príslušnú hybnosť, lebo, ako sa ľahko presvedčíme

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Phi_k(\mathbf{r}) = \mathbf{k} \Phi_k(\mathbf{r})$$

Ak toto dosadíme do (12) a prehodíme poradie súm a integrálov, dostaneme

$$\bar{p} = \sum_p \sum_k c_p c_k \mathbf{k} \int \Phi_p^* \Phi_k dV \quad (13)$$

Ako sme už spomínali v článku 2.2 funkcie Φ_p spĺňajú podmienku

$$\int \Phi_p^* \Phi_k dV = \delta_{p,k} \quad (14)$$

kde δ je Kroneckerov symbol. Po dosadení (14) do (13) z dvojnej sumy vypadnú všetky členy s $\mathbf{k} \neq \mathbf{p}$ a ostane nám

$$\bar{p} = \sum_p c_p c_p \mathbf{p} = \sum_p \mathbf{p} |c_p|^2$$

a to je presne vzťah (9).

Celkom analogicky možno prísť i k vzťahom pre výpočet stredných hodnôt vyšších mocnín hybností.

Čitateľ sa napríklad ľahko presvedčí o tom, že

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Phi_p(\mathbf{r}) = (p_x)^n \Phi_p(\mathbf{r})$$

a tento výsledok spolu s postupom medzi rovnicami (11) až (15) vedie rýchlo k tomu, že

$$\int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi dV = \sum_{\mathbf{p}} (p_x)^n |c_{\mathbf{p}}|^2$$

Pravá strana v tomto vzťahu je ale práve rovná $\overline{(p_x)^n}$. Takto máme

$$\overline{(p_x)^n} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi dV \quad (16)$$

V špeciálnom prípade $n = 2$ dostaneme

$$\overline{(p_x)^2} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi dV = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi dV \quad (16')$$

Strednú kvadratickú odchýlku x -ovej komponenty hybnosti potom môžeme spočítať podľa vzťahu

$$(\Delta p_x)^2 = \overline{(p_x)^2} - \bar{p}_x^2 \quad (17)$$

Všimnime si ešte, že podľa predchádzajúceho článku sme pre strednú hodnotu súradnice mali vzťah

$$\bar{x} = \int \psi^* x \psi dV \quad (18)$$

Výrazy (11) a (18) majú už na prvý pohľad rovnakú štruktúru a podobnú štruktúru majú i ostatné výrazy pre stredné hodnoty, ktoré sme uvádzali vyššie. Skôr, než urobíme zovšeobecnenie tejto štruktúry na výpočet strednej hodnoty ľubovoľnej veličiny je však potrebné zaviesť pojem operátora.

Na záver tohto článku ešte splatíme dva dlhy čitateľovi.

V článku 2.2 sme hovorili, že odpovede na fyzikálne dobre postavené otázky nezávisia od veľkosti normovacieho objemu V . Uvedme teraz typický príklad na to, ako objem V vypadne z konečných výsledkov. Nech $\psi(\mathbf{r})$ je stavová vlnová funkcia opisujúca stav sústavy v určitom čase t_0 . Zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou nameriame hybnosť častice v intervale I , kde

$$\begin{aligned} I: \quad & p_1 \leq p_x \leq p_1 + \Delta_1 \\ & p_2 \leq p_y \leq p_2 + \Delta_2 \\ & p_3 \leq p_z \leq p_3 + \Delta_3 \end{aligned} \quad (19)$$

pričom Δ_i sú podstatne väčšie ako „vzdialenosť medzi susednými stavmi hybnosti“, t. j. (podľa 2.6)

$$\Delta \gg \frac{2\pi\hbar}{L}$$

Toto je dobre postavená otázka. Keby sme sa ale pýtali na to, s akou pravdepodobnosťou nameriame danú hodnotu hybnosti, mali by sme príklad na fyzikálne zle postavenú otázku (matematicky je otázka korektná). Dôvod je v tom, že pri veľkom normovacom objeme V sú stavy povolené podmienkou (2.6) tak tesne pri sebe, že žiadny detektor neodlíši dva „susedné“ stavy. Pravdepodobnosť nájsť stav s danou presnou hodnotou hybnosti je podľa (10) a (1)

$$P_{\mathbf{p}} = |c_{\mathbf{p}}|^2 \left| \frac{1}{\sqrt{V}} \int e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) dV \right|^2$$

V tejto pravdepodobnosti sa teda objaví faktor $1/V$, ktorý závisí od veľkosti normovacieho objemu. Pravdepodobnosť nájsť časticu v intervale I danom rovnicou (19) je rovná súčtu výrazov $|c_{\mathbf{p}}|^2$ pre všetky \mathbf{p} z intervalu I . Počet stavov dovolených podmienkou (2.6) je ale úmerný normovaciemu objemu V ; tento počet je totiž úmerný hustote povolených stavov danej rovnicou (2.12). Z výrazu pre pravdepodobnosť nájsť časticu v istom intervale I teda normalizačný objem vypadne.

Druhým dlhom je diskusia o hybnosti častice viazanej na úsečku, ktorú sme v článku 1.13 urobili iba kvalitatívne. Ak sa častica nachádza v stave

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n x}{L}, & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x > 0 \end{cases} \quad (20)$$

potom pravdepodobnosť namerať určitú hybnosť p je daná vzťahom

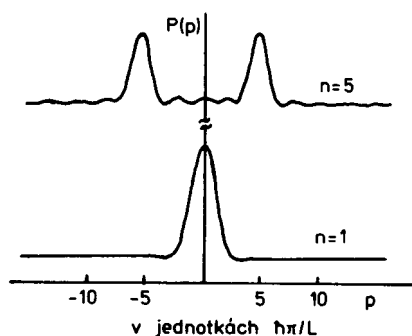
$$P(p) = |c(p)|^2 \quad \text{kde} \quad c_p = \int_{-A/2}^{A/2} \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx$$

kde A je „normovací objem“. Predpokladáme $A \gg L$. Integrál ľahko vypočítame a dostaneme

$$c(p) = \frac{\hbar}{\sqrt{2LA}} \left\{ \frac{1}{p - p_n} [e^{-iL(p-p_n)/\hbar} - 1] - \frac{1}{p + p_n} [e^{-iL(p+p_n)/\hbar} - 1] \right\}$$

kde sme označili $p_n = \pi \hbar n / L$.

Graf funkcie $|c(p)|^2$ pre $n = 1$ a $n = 5$ je na obr. 2.2. Výpočet je poučný preto,⁴⁰ lebo ukazuje, že hoci energia častice je kvantovaná, hybnosť kvantovaná nie je. Len pre dostatočne veľké hodnoty n sú v rozdelení pravdepodobnosti výrazné maximá v okolí bodov $p = \pm p_n$.



Obr. 2.2

V diskusii v článku 1.13 sme v skutočnosti potrebovali iba neurčitost' Δp_x . Pre stav (20) ju ľahko zrátame. Pre strednú hodnotu p_x podľa (11) a (20) máme

$$\bar{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 0$$

a pre $\overline{p_x^2}$ dostaneme podľa (16')

$$\overline{p_x^2} = -\hbar^2 \frac{2}{L} \int \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{L^2}$$

Strednú kvadratickú odchýlku potom nájdeme podľa (17)

$$(\Delta p_x)^2 = \overline{p_x^2} - \bar{p}_x^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{L^2}$$

⁴⁰ Podrobnejšiu diskusiu možno nájsť v príspevku A. Lacinu, Poznámka k analógii „stacionární kvantový stav – stojatá vlna na struně“, v materiáloch konferencie Pedagogicko-fyzikální problematika kvantové fyziky, Luhačovice, 12. – 14. 5. 1981, red. M. Černohorský, Brno 1981. Pozri aj diskusiu v časopise *European Journal of Physics* (EJP): A. Lacina, *EJP* 6 (1986) 171 a V. Černý, J. Pišút, P. Prešnajder, *EJP* 7 (1986) 134.

a pre neurčitosť v hybnosti definovanú ako

$$\Delta p = \sqrt{(\Delta p_x)^2}$$

máme

$$\Delta p = \frac{\hbar \pi x}{L}$$

a toto spolu so vzťahom (7.8) vedie k presnejšiemu odhadu súčinu neurčitostí $\Delta p \cdot \Delta x$ pre časticu viazanú na úsečku v základnom stave.

2.10 OPERÁTORY

V tomto článku zavedieme pojem operátora, ktorý hrá centrálnu úlohu vo formalizme kvantovej mechaniky.

Definícia: Nech D_1 a D_2 sú dve množiny funkcií. Predpis, ktorým každej funkcii z množiny D_1 priradíme funkciu z množiny D_2 , nazývame operátorom.

Príklad 1. Nech D je množina funkcií definovaných na intervale $(0, 1)$. Definujme operátor násobenia konštantou c tak, že každej funkcii priradíme jej c -násobok: $f(x) \rightarrow cf(x)$.

Príklad 2. Nech D je množina funkcií, ktoré sú definované na $(0, 1)$ a majú v každom bode tohto intervalu prvú deriváciu. Potom môžeme zaviesť operátor, ktorý každej funkcii $f(x) \in D$ priradí jej deriváciu

$$f(x) \rightarrow \frac{df(x)}{dx}$$

Operátory spravidla budeme označovať groteskovými písmenami, čiže A, B, a , a α pod. Ak A je operátor definovaný na množine funkcií D , a ak $f \in D$, tak symbol Af označuje funkciu, ktorú operátor A priraduje funkcii f . Často používaný symbol $Af(x)$ znamená hodnotu funkcie Af v bode x , a nie pôsobenie operátora A na číslo $f(x)$.

Ďalej bude obor definície operátora zvyčajne zrejmý z kontextu. Vtedy ho spravidla nebudeme explicitne uvádzať.

V kvantovej mechanike sa najčastejšie stretávajú s lineárnymi operátormi.

Definícia: Operátor A , definovaný na množine funkcií D , nazývame lineárnym, ak pre ľubovoľné dve funkcie $f_1, f_2 \in D$ a pre ľubovoľné dve komplexné čísla a_1, a_2 platí:

$$A(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 A f_1 + a_2 A f_2$$

Obidva operátory uvedené v predchádzajúcich príkladoch boli lineárnymi operátormi. *Súčin dvoch operátorov* je definovaný nasledovne. Nech funkcia f_1 patrí do oboru definície operátora A a nech funkcia $f_2 = A f_1$ patrí do oboru definície operátora B . Operátor $C = BA$ je potom zobrazenie $f_1 \rightarrow f_3 \equiv C f_1$, kde $C f_1 = B(A f_1)$. Celkom analogicky definujeme mocninu operátora.

2.11 PRIRADENIE OPERÁTOROV FYZIKÁLNÝM VELIČINÁM

Výrazy pre stredné hodnoty súradnice (8.2), hybnosti (9.11) a pre ďalšie veličiny, ktoré sme už vyššie spomínali, sú konštruované podľa formálne podobného predpisu. Vo všetkých prípadoch mal výraz pre strednú hodnotu \bar{A} veličiny A v stave $\psi(\mathbf{r})$ tvar

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r}) A \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (1)$$

kde A bol určitý operátor súvisiaci s veličinou A . Pozrime sa na túto schému podrobnejšie.

Súradnici x priradíme operátor x , ktorý zavádzame ako jednoduché násobenie súradnicou. Ak $f(x)$ je funkcia súradnice x , potom platí:

$$x f(x) = x f(x) \quad (2)$$

Zložke hybnosti p_x priradíme operátor

$$\mathbf{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \mathbf{p}_x f = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \quad (3)$$

Mocninám hybnosti p_x, p_y, p_z priradíme mocniny operátorov

$$(\mathbf{p}_x)^n f = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n f = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \quad \text{a pod.}$$

Podobne mocninám x priradíme operátory násobenia príslušnou mocninou, napríklad

$$\mathbf{x}^n f(x) = x^n f(x)$$

Vzťahy pre stredné hodnoty zložiek hybnosti a pre súradnice (v určitom stave) potom píšeme v tvare

$$\begin{aligned} \overline{p_x} &= \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{p}_x \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \\ \overline{x} &= \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{x} \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (4)$$

Vidíme, že výrazy majú štruktúru typu (1) a môžeme očakávať, že (1) je všeobecný typ vzťahu pre výpočet stredných hodnôt fyzikálnych veličín. Postup, ktorý sme použili v predchádzajúcich článkoch by sme mohli rozšíriť aj na veličiny ako $x p_y$ a pod. a tiež by sme prišli k vzťahu typu (1). Ako všeobecne platné tvrdenie by sme tento spôsob výpočtu strednej hodnoty museli postulovať, pričom postulát by mal zhruba nasledujúci tvar:

V kvantovej mechanike je každej fyzikálnej veličine A priradený istý operátor \mathbf{A} tak, že v stave ψ je stredná hodnota \overline{A} daná vzťahom (1).

Tento postulát je povahy skôr matematickej ako fyzikálnej a nehovorí nám nič o tom, čo si v kvantovej mechanike máme (alebo môžeme) pod fyzikálnou veličinou predstavovať. Pozrime sa preto na tento problém podrobnejšie a začnime tým, ako situácia vyzerá v klasickej fyzike. Stav častice je v klasickej fyzike daný jej polohovým vektorom \mathbf{r} a hybnosťou \mathbf{p} . Mechanické veličiny sú funkciami \mathbf{r} a \mathbf{p} , a preto zadanie stavu tu určuje aj hodnoty všetkých fyzikálnych veličín. Ak v istom „stave“ meriame povedzme hybnosť dostaneme vždy ten istý výsledok a keď meriame (stále v danom stave) súradnicu, vždy dostaneme tú istú hodnotu \mathbf{r} (danú zadaním klasického stavu).

V kvantovej mechanike je situácia podstatne odlišná. Zadaním stavu, t. j. zadaním vlnovej funkcie určujeme len možnosti výsledkov rôznych meraní. Ak sa napríklad rozhodneme, že budeme merať, povedzme, hybnosť v danom stave ψ , potom to znamená, že postupne pripravíme veľa sústav – pričom každá je v stave ψ – a u každej z nich meriame hybnosť. Ako výsledok dostaneme rad čísel – výsledkov merania hybnosti.

$$\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots, \mathbf{p}_n, \dots \quad (5)$$

Ak sa rozhodneme pre meranie súradnice, postavíme celkom iný experiment, v ktorom ako výsledky merania dostaneme rad nameraných hodnôt súradnice, t. j. niečo ako

$$x_1, x_2, \dots, x_n, \dots \quad (6)$$

Stredná hodnota hybnosti \mathbf{p} je strednou hodnotou čísel v postupnosti (5) a stredná hodnota súradnice x je strednou hodnotou čísel v rade (6). Vidieť takto, že x a p , a tým aj operátory \mathbf{x} a \mathbf{p}_x vystupujúce v (4) odpovedajú iným fyzikálnym situáciám. Operátor \mathbf{x} odpovedá experimentu, v ktorom meriame súradnicu a \mathbf{p}_x experimentu na meranie hybnosti.

Operátory priradené fyzikálnym veličinám nie sú teda spojené so stavom sústavy, ale s procesom, v ktorom danú fyzikálnu veličinu meriame. Ak si chceme urobiť istú predstavu o fyzikálnej veličine v kvantovej mechanike, môžeme si predstaviť istý prístroj, ktorým túto veličinu meriame. Na prvý pohľad by sa mohlo zdať divné, že fyzikálna veličina tak tesne súvisí s meracím prístrojom a mohlo by sa tiež zdať, že sa týmto do interpretácie vnáša subjektívny element. Ale nie je to pravda. Výsledky pre \overline{x} , $(\Delta x)^2$ a pod. nezávisia od toho, či súradnicu meriame sčernením na fotografickej platni, Geigerovým-Müllero-vým počítačom, mikroskopom, drôtovou komorou alebo iným spôsobom. Meraniu súradnice všetkými týmito spôsobmi je priradený ten istý operátor \mathbf{x} . Možno teda povedať, že tento operátor je priradený

interakcii atomárneho objektu so všetkými makroskopickými prístrojmi, ktoré vedú k lokalizácii častice.⁴¹

Podobne operátor priradený istej veličine F je priradený všetkým interakciám atomárneho objektu s makroskopickým objektom, ktoré vedú k určitej hodnote veličiny F . Zdôraznime ešte raz, že tu je podstatný rozdiel medzi kvantovou a klasickou fyzikou, v ktorej sú fyzikálne veličiny jednoznačne dané stavom a to bez ohľadu na akékoľvek interakcie sústavy s inými objektmi.

Správnosť výberu operátora priradeného k istej veličine je závažnou otázkou a neexistuje na ňu univerzálny návod. V konečnom dôsledku tento operátor treba „uhádnuť“. V niektorých prípadoch je však toto „háďanie“ veľmi jednoduché. Ak napríklad hľadáme operátor priradený veličine, ktorá má klasický analóg, potom podľa princípu korešpondencie očakávame, že vyjadrenie tohto operátora pomocou operátorov súradnice a hybností bude rovnaké ako vyjadrenie príslušnej klasickej veličiny pomocou súradnice a hybnosti platné v klasickej mechanike. V nasledujúcom článku si ukážeme príklady takéhoto postupu.

Doteraz sme nehovorili o tom, ako môžeme pri danej fyzikálnej veličine K a danej sústave nájsť hodnoty K_i , ktoré môžeme pri meraní K nájsť. S touto otázkou sa budeme zaoberať podrobnejšie v článku 2.14. Zdôraznime ale už na tomto mieste, že súbor K_i nezávisí od stavu sústavy, ale je určený samotnou veličinou K a sústavou, na ktorej K meriame.

2.12 OPERÁTORY ENERGIE A MOMENTU HYBNOSTI, PRINCÍP KOREŠPONDENCIE

Operátor energie (Hamiltonov operátor). V klasickej mechanike sa celková energia (označujeme ju H) častice rovná súčtu kinetickej a potenciálnej energie

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\mathbf{r})$$

kde \mathbf{p} je hybnosť, m hmotnosť a \mathbf{r} polohový vektor častice. Operátor energie H (Hamiltonov operátor alebo hamiltonián) dostaneme tak, že p_x, p_y, p_z nahradíme príslušnými operátormi

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2) + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Operátor príslušný k funkcii $V(\mathbf{r})$ sa redukuje podobne ako v rovnicach (8.1) a (10.2) na jednoduché násobenie funkciiou $V(\mathbf{r})$.

Operátor momentu hybnosti. V klasickej mechanike je moment hybnosti definovaný vzťahom $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Táto vektorová rovnica predstavuje tri rovnice

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x$$

Operátor momentu hybnosti dostaneme opäť nahradením súradníc a zložiek hybnosti operátormi. Dostaneme

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= zp_x - xp_z = i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= xp_y - yp_x = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

⁴¹ Absolútne stotožnenie meracieho prístroja s operátorom nie je možné už i preto, že každý operátor musí pôsobiť na určité premenné a tieto premenné sa musia vyskytovať vo vlnových funkciiach priradených stavom, o ktoré sa zaujímate. Preto je snáď vhodnejšie priradovať operátor typu interakcie ako priamo meraciemu prístroju. Napríklad Sternov a Gerlachov prístroj (článok 1.8) meria spin elektrónu, ale práve tak môže merať aj hodnoty magnetických momentov iného pôvodu.

Operátor druhej mocniny momentu hybnosti je definovaný vzťahom

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3)$$

Pomocou trochu zdĺhavých ale štandardných úprav (ktoré prenechávame čitateľovi ako cvičenie) možno operátory L_x , L_y , L_z a L^2 vyjadriť v sférických súradniciach r , ϑ , φ zviazaných s x , y , z vzťahmi

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, & y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, & z &= r \cos \vartheta \\ r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, & \vartheta &= \arccos \frac{z}{r}, & \varphi &= \arctg \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (4)$$

Konečné vzorce sú

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Podobným spôsobom možno nájsť operátory príslušné k ďalším veličinám, ktoré majú klasický analóg. Tento postup však nie je vždy jednoznačný. Ak sa vo vyjadrení klasickej veličiny vyskytuje súčin xp_x alebo yp_y a pod., potom nevieme, či príslušný operátor bude xp_x alebo $p_x x$. Súčin klasickej veličiny je totiž komutatívny $xp_x = p_x x$, zatiaľ čo súčin dvoch operátorov v kvantovej mechanike vo všeobecnosti komutatívny nie je. Ľahko sa o tom presvedčíme na príklade operátorov x a p_x . Pôsobením operátora xp_x na ľubovoľnú funkciu $f(x)$ dostaneme

$$xp_x f(x) = -i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \quad (7)$$

zatiaľ čo pôsobením operátora $p_x x$ na tú istú funkciu dostaneme funkciu

$$p_x x f(x) = p_x (x f(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x f) = -i\hbar f - i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \quad (8)$$

Pravé strany v rovniciach (7) a (8) sú rôzne. Vidíme teda, že pôsobenie operátora $xp_x - p_x x$ na funkciu f dá výsledok

$$(xp_x - p_x x)f = -i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} - \left(-i\hbar f - i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \right) = i\hbar f \quad (9)$$

Keďže tento vzťah platí pre ľubovoľnú funkciu f (a dva operátory A , B sa rovnajú, ak pre ľubovoľné f platí $Af = Bf$), môžeme (9) zapísať ako operátorovú rovnosť

$$xp_x - p_x x = i\hbar \quad (10)$$

Operátorové výrazy tohto typu sú natoľko dôležité, že je pre ne zavedené zvláštne označenie

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (11)$$

Operátor $[A, B]$ nazývame komutátorom operátorov A , B .

Vráťme sa teraz k problému priradenia „správneho“ operátora klasickejmu súčinu xp_x . Pretože operátory x , p , nekomutujú, je rozdiel, či klasickej výraz xp_x nahradíme operátorom xp_x , alebo $p_x x$, alebo $(xp_x + p_x x)/2$ atď. Univerzálny predpis neexistuje, ale najčastejšie vedie k cieľu posledná z troch spomínaných možností. Táto nejednoznačnosť nie je „chybou“ kvantovej mechaniky, ukazuje len obmedzenie použiteľnosti princípu korešpondencie.

V istom zmysle sa toto obmedzenie vzťahuje i na operátor momentu hybnosti. V rovnicach (2) sa síce nekomutujúce operátory na pravých stranách nevyskytujú, takže vyjadrenia pre L_x , L_y , L_z v (2) dostaneme jednoznačne z princípu korešpondencie. Problém je v tom, že napr. pre elektrón predstavuje *orbitálny moment hybnosti daný* rovnicami (2) iba časť celkového momentu hybnosti. Aby sme dostali operátor celkového momentu hybnosti, musíme k (2) ešte pridať *spinový moment hybnosti* a jeho vyjadrenie nemožno získať z princípu korešpondencie.

2.13 HERMITOVSKÉ OPERÁTORY, VLASTNÉ FUNKCIE, VLASTNÉ HODNOTY

Videli sme, že operátory budú mať jednu z hlavných úloh vo formalizme kvantovej mechaniky. Uvedieme preto niekoľko definícií a viet matematického charakteru, ktoré budeme potrebovať pri ďalšom budovaní formalizmu. Pritom si budeme všimáť najmä tzv. hermitovské operátory, lebo práve tieto sú priradené fyzikálnym veličinám.

Lineárny operátor A definovaný na množine funkcií D nazývame lineárnym hermitovským operátorom, ak pre ľubovoľnú funkciu $\Phi(x) \in D$ platí

$$\left[\int \Phi^*(x) A \Phi(x) dx \right]^* = \int \Phi^*(x) A \Phi(x) dx \quad (1a)$$

Túto definíciu možno pomocou výrazov pre stredné hodnoty preformulovať nasledovne:

Operátor A je lineárny hermitovský operátor, ak všetky jeho stredné hodnoty sú reálne čísla.

Stredné hodnoty fyzikálnych veličín musia byť v rozumnej teórii reálnymi číslami, a preto musíme požadovať, aby každý operátor priradený reálnej fyzikálnej veličine bol hermitovským operátorom. Z definície (1a) vyplýva dôležitá vlastnosť hermitovských operátorov. Nech ψ_1 a ψ_2 sú dve ľubovoľné funkcie z oboru definície hermitovského operátora A .

Potom platí:

$$\int \psi_1^* A \psi_2 dx = \int (A \psi_1)^* \psi_2 dx \quad (1b)$$

Tento vzťah dostaneme priamo z rovnice (1a), ak za Φ raz dosadíme $(\psi_1 + \psi_2)$ a raz $(\psi_1 + i\psi_2)$. Pre výrazy typu $\int \psi_1^* A \psi_1 dx$ použijeme priamo rovnicu (1a) a vytvoríme vhodné lineárne kombinácie získaných rovníc.

Nech A je operátor definovaný na množine funkcií D . Ak operátor A^+ je definovaný na tej istej množine funkcií, a ak pre všetky $\psi_1, \psi_2 \in D$ platí:

$$\int (A^+ \psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* A \psi_2 dx \quad (1c)$$

tak hovoríme, že A^+ je operátor hermitovsky združený k operátoru A . Operátor hermitovsky združený s daným budeme označovať križikom, tak ako v (1c). Na základe vzťahu (1c) sa dá ľahko dokázať, že $(A^+)^+ = A$ a že $(AB)^+ = B^+ A^+$.

Z porovnania (1c) a (1b) vidno, že operátor A je hermitovský, ak platí $A = A^+$.

Na ilustráciu teraz ukážeme, že operátor hybnosti je hermitovským operátorom na množine vlnových balíkov $\Phi(\mathbf{r})$, ktoré dosť rýchlo klesajú k nule pre $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Pre zjednodušenie uvažujeme len operátor p_x a jednorozmerný vlnový balík $\Phi(x)$. Podľa (1a) máme dokázať platnosť rovnice

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) p_x \Phi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} [p_x \Phi(x)]^* \Phi(x) dx$$

alebo po dosadení $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right]^* \Phi(x) dx$$

Tento výsledok však vyplýva priamo z integrovania per partes, ak pod „dosť rýchlym“ poklesom

$\Phi(x)$ pre $|x| \rightarrow \infty$ rozumieme splnenie podmienky

$$\Phi^*(x) \Phi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } |x| \rightarrow \infty$$

Podobne s využitím vzťahu

$$\Phi^* \nabla^2 \Phi - (\nabla^2 \Phi)^* \Phi = \nabla \cdot [\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*]$$

Gaussovej vety a predpokladu o dostatočne rýchlo poklese $\Phi(\mathbf{r})$ a $\nabla \Phi(\mathbf{r})$ pre $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ možno ukázať, že Hamiltonov operátor $H = (-\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ je hermitovským operátorom. Tak isto sa dá ľahko ukázať, že zložky operátora momentu hybnosti L_x , L_y , a L_z sú hermitovské operátory.

Pri zisťovaní toho, či daný operátor je hermitovský, je často užitočné nasledujúce tvrdenie.

Nech operátory A , B sú hermitovské a definované na množine funkcií D . Nech $A\Phi \in D$, $B\Phi \in D$ pre každé $\Phi \in D$ a nech napokon operátory A , B komutujú, t. j. nech pre každé $\Phi \in D$ platí vzťah $A[B\Phi] = B[A\Phi]$. Potom operátor $C = AB$ je hermitovským operátorom.

Pri dôkaze stačí verifikovať platnosť rovnice

$$\int (C\Phi_2)^* \Phi_1 d^3r = \int \Phi_2^* C\Phi_1 d^3r$$

pre ľubovoľné $\Phi_1, \Phi_2 \in D$. Túto rovnicu získame nasledovne:

$$\begin{aligned} \int \Phi_2^* C\Phi_1 d^3r &= \int \Phi_2^* A[B\Phi_1] d^3r = \int (A\Phi_2)^* B\Phi_1 d^3r = \\ &= \int [B(A\Phi_2)]^* \Phi_1 d^3r = \int (C\Phi_2)^* \Phi_1 d^3r \end{aligned}$$

kde sme využili hermitovosť a komutatívnosť operátorov A , B . Teraz zavedieme dôležité pojmy *vlastnej hodnoty* a *vlastnej funkcie* operátora.

Nech A je operátor definovaný na množine funkcií D . Ak funkcia $f(x) \in D$ spĺňa rovnicu

$$A f(x) = A f(x) \quad (2a)$$

kde A je číslo, hovoríme, že $f(x)$ je vlastnou funkciou a A vlastnou hodnotou operátora A . Operátor A môže mať viacero vlastných funkcií; ak ich je konečný počet (alebo spočítateľne veľa), jednotlivé vlastné funkcie odlišujeme indexom a píšeme

$$A f_n(x) = A_n f_n(x) \quad (2b)$$

Ak vlastné hodnoty operátora A nadobúdajú všetky hodnoty z istého intervalu, tak namiesto (2b) píšeme

$$A f_\alpha(x) = A(\alpha) f_\alpha(x) \quad (2c)$$

Množinu vlastných hodnôt operátora nazývame jeho spektrom. V prípade opísanom rovnicou (2b) hovoríme o diskretnom, v prípade (2c) o spojitom spektre. Ak jednej vlastnej hodnote patrí viacero vlastných funkcií, hovoríme, že príslušná vlastná hodnota je degenerovaná alebo stručne hovoríme o degenerácii.

Príklad: Vlastnými funkciami operátora p_x sú de Broglieho vlny $\psi_q(x) = \exp(iqx/\hbar)$. Ak využijeme definíciu operátora p_x , dostaneme:

$$p_x \psi_q(x) = q \psi_q(x) \quad (3)$$

Použitý zápis odpovedá rovnici (2c), v ktorej platí $A(\alpha) = \alpha$. Platí dôležité tvrdenie:

*Vlastné hodnoty hermitovského operátora, príslušné k normovateľným vlastným funkciám, sú reálne čísla.*⁴²

Dôkaz: Nech A je hermitovský operátor, $f(x)$ normovateľná vlastná funkcia a A príslušná vlastná hodnota. Podľa (1a) sú stredné hodnoty hermitovského operátora reálne čísla. Teda

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) A f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) A f(x) dx = A \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$$

je reálne číslo. Ak funkcia $f(x)$ je normovateľná, integrál vystupujúci na pravej strane poslednej rovnice je konečný a kladný, takže vlastná hodnota A bude reálnym číslom.

⁴² Niekedy sa vlastnými funkciami nazývajú len normovateľné riešenia rovnice (2a).

Dôležitá vlastnosť vlastných funkcií hermitovského operátora je daná nasledujúcim tvrdením.
Vlastné funkcie, príslušné k rôznym vlastným hodnotám hermitovského operátora, sú navzájom ortogonálne.

Dôkaz: Nech A je hermitovský operátor, a nech podľa predpokladu platí:

$$\begin{aligned} A\varphi_n(x) &= A_n\varphi_n(x) \\ A\varphi_k(x) &= A_k\varphi_k(x) \quad A_k \neq A_n \end{aligned}$$

Násobme prvú rovnicu funkciou $\varphi_k^*(x)$, druhú funkciou $\varphi_n^*(x)$ a integrujme získané rovnice cez obor definície vlastných funkcií. Dostaneme:

$$\begin{aligned} \int \varphi_k^*(x)A\varphi_n(x) dx &= A \int \varphi_k^*(x)\varphi_n(x) dx \\ \int \varphi_n^*(x)A\varphi_k(x) dx &= A \int \varphi_n^*(x)\varphi_k(x) dx \end{aligned} \quad (4)$$

K druhej z týchto rovníc nájdeme rovnicu komplexne združenú. Využijeme (1b) a reálnosť A_k . Dostaneme

$$\int \varphi_k^*(x)A\varphi_n(x) dx = A_k \int \varphi_k^*(x)\varphi_n(x) dx$$

Odčítaním tohto vzťahu od prvej rovnice (4) dostaneme výsledok

$$(A_k - A_n) \int \varphi_k^*(x)\varphi_n(x) dx = 0$$

ktorý dokazuje vetu.

Rovnica $A\varphi_n(x) = A_n\varphi_n(x)$ je lineárnou homogénnou rovnicou. Teda spolu s funkciou $\varphi_n(x)$ bude vlastnou funkciou operátora A aj funkcia $c\varphi_n(x)$ (c je ľubovoľná konštanta). Túto vlastnosť možno využiť na to, aby vlastné funkcie boli normované na jednotku.

Ak je istá vlastná hodnota degenerovaná, teda ak vlastnej hodnote A_s patria dve lineárne nezávislé funkcie $\varphi_s^{(1)}(x)$ a $\varphi_s^{(2)}(x)$:

$$\begin{aligned} A\varphi_s^{(1)}(x) &= A_s\varphi_s^{(1)}(x) \\ A\varphi_s^{(2)}(x) &= A_s\varphi_s^{(2)}(x) \end{aligned}$$

potom funkcie $\varphi_s^{(1)}(x)$ a $\varphi_s^{(2)}(x)$ nemusia byť podľa predchádzajúceho navzájom ortogonálne. Možno však zostrojiť také lineárne kombinácie⁴³

$$\begin{aligned} \varphi_{s1} &= c_{11}\varphi_s^{(1)} \\ \varphi_{s2} &= c_{21}\varphi_s^{(1)} + c_{22}\varphi_s^{(2)} \end{aligned} \quad (5)$$

že funkcie φ_{s1} a φ_{s2} budú normované a navzájom ortogonálne. Nájdienie vhodných koeficientov c_{11} , c_{21} , c_{22} prenechávame čitateľovi ako cvičenie.

To isté možno urobiť, ak vlastná hodnota je N -násobne degenerovaná, t. j. ak vlastnej hodnote A , patrí N lineárne nezávislých funkcií.

Keď zhrnieme predchádzajúce výsledky, môžeme povedať: Vlastné funkcie hermitovského operátora A určené rovnicou $A\varphi_n = A_n\varphi_n$ tvoria ortonormovaný systém. Spĺňajú vzťahy

$$\int \varphi_k^*(x)\varphi_n(x) dx = \delta_{nk} \quad (6)$$

kde δ_{nk} je Kroneckerov symbol. Ak vlastné hodnoty sú degenerované, tak rovnica (6) platí pre ortogonalizované funkcie, pričom rôznym ortogonalizovaným funkciám priradíme rôzne indexy n .

Predpokladá sa, že systémy vlastných funkcií príslušné k operátorom priradeným dôležitým fyzikálnym veličinám (energii, momentu hybnosti a pod.) tvoria úplné systémy, teda ľubovoľnú funkciu $\Phi(x)$ možno rozložiť do radu pomocou vlastných funkcií takéhoto operátora.⁴⁴

⁴³ Napríklad Schmidtovým ortogonalizačným postupom.

⁴⁴ Pre niektoré jednoduché systémy možno tvrdenie dokázať. Všeobecne však treba úplnosť systému vlastných funkcií predpokladať alebo postulovať.

Inými slovami: pre „ľubovoľnú“ funkciu platí:

$$\Phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad (7)$$

kde $f_n(x)$ spĺňajú podmienku (6) a vyhovujú rovnici (2b). Koefficienty c_n v tomto rozklade určíme jednoducho, ak využijeme ortonormovanosť⁴⁵ systému funkcií f_n . Násobíme rovnicu (7) funkciou f_m a integrujeme cez celý priestor. Dostaneme

$$\begin{aligned} \int f_m^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} &= \int f_m^*(\mathbf{r}) \left[\sum_n c_n f_n(\mathbf{r}) \right] d^3\mathbf{r} = \\ &= \sum_n c_n \int f_m^*(\mathbf{r})f_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m \end{aligned}$$

pričom sme využili ortonormovanosť sústavy $\{f_n\}$:

$$\int f_m^*(\mathbf{r})f_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{mn} \quad (8)$$

a predpokladali sme, že môžeme zameniť poradie sumy a integrálu. Dostali sme teda vyjadrenie

$$c_m = \int f_m^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (9)$$

Predchádzajúce vzťahy sme písali pre prípad diskrétného spektra operátora A . Pre spojité spektrum existujú podobné vzťahy, ale prídeme k nim až neskôr.

2.14 FYZIKÁLNE VELIČINY – VŠEOBECNÝ FORMALIZMUS

Teraz už môžeme prediskutovať podrobnejšie základné myšlienky kvantovej mechaniky týkajúce sa fyzikálnych veličín a ich merania. Budeme sa teda zaoberať tým, ako je v stavovej vlnovej funkcii $\psi(\mathbf{r})$ priradenej stavu sústavy v istom čase t_0 a v operátore A priradenom istej fyzikálnej veličine A zakódovaná informácia o výsledkoch merania tejto veličiny v danom stave.

Ak nám postačí neúplná informácia pozostávajúca v zadaní strednej hodnoty veličiny A a prípadne aj strednej kvadratickej odchýlky, postup je jednoduchý. Strednú hodnotu veličiny A v stave $\psi(\mathbf{r})$ určíme zo vzťahu⁴⁶

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r})A\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

a stredná kvadratická odchýlka bude

$$(\Delta A)^2 = \int \psi^*(\mathbf{r})(A - \bar{A})^2\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (2)$$

Niekedy však potrebujeme poznať úplnú predpoveď pozostávajúcu

- zo zadaní všetkých možných hodnôt A_n , ktoré môžu byť výsledkom jednotlivých meraní veličiny A ,
- zo zadaní pravdepodobností P_n pre nájdenie hodnoty A_n pri meraní A v stave $\psi(\mathbf{r})$.

Túto úlohu sme už riešili v článku 2.9 pre špeciálny prípad merania hybnosti častice. Všeobecná metóda je celkom analogická postupu použitému v článku 2.9 a podstatne využíva vlastné funkcie operátora A a ich fyzikálnu interpretáciu, ktorú si zaraz všimneme bližšie.

Predpokladajme, pre jednoduchosť, že operátor A má diskrétné spektrum, jeho vlastné funkcie označíme ako Φ_n a príslušné vlastné hodnoty ako A_n . Platí teda

$$A\Phi_n = A_n\Phi_n \quad (3)$$

⁴⁵ Systém funkcií nazývame ortonormovaným, ak sú splnené vzťahy (6).

⁴⁶ Takýto stav budeme nazývať aj vlastným stavom operátora A , alebo vlastným stavom veličiny A .

Stredná hodnota veličiny A v stave Φ_n je

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{A} \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) A_n \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= A_n \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = A_n\end{aligned}\quad (4)$$

Pritom sme použili vzťah (3) a normovanosť funkcie $\Phi_n(\mathbf{r})$.

Stredná hodnota veličiny A v stave opísanom vlastnou funkciou⁴⁶ Φ_n je teda rovná príslušnej vlastnej hodnote. Vypočítajme ešte strednú kvadratickú odchýlku veličiny A v jej vlastnom stave Φ_n .

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) (\mathbf{A} - \bar{A})^2 \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) (\mathbf{A} - A_n) (\mathbf{A} - A_n) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}\end{aligned}\quad (5)$$

Pretože \mathbf{A} je hermitovský a vlastná hodnota A_n je reálne číslo, bude aj $(\mathbf{A} - A_n)$ hermitovským operátorom a ostatný vzťah môžeme prepísať do tvaru

$$\overline{(\Delta A)^2} = \int [(\mathbf{A} - A_n)\Phi_n(\mathbf{r})]^* [(\mathbf{A} - A_n)^2\Phi_n(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} = 0$$

kde sme využili napokon rovnicu (3).

Stredná kvadratická odchýlka veličiny A v jej vlastnom stave Φ_n je teda nulová, a to značí, že pri meraní A v jej vlastnom stave Φ_n nájdeme s určitosťou vlastnú hodnotu A_n .

Tvrdenie platí i obrátene. Ak v nejakom stave Φ_α má veličina A „ostrú“ hodnotu A_α (t. j. pri meraní nájdeme s určitosťou hodnotu A_α), potom stav Φ_α je vlastným stavom operátora A s vlastnou hodnotou A_α . Dôkaz je jednoduchý.

Ak v stave Φ_α pri každom meraní veličiny A nameriame hodnotu A_α , platí

$$\bar{A} = A_\alpha, \quad \overline{A^2} = A_\alpha^2$$

Odtiaľ máme

$$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2 = 0$$

Podľa predchádzajúceho

$$0 = \overline{(\Delta A)^2} = \int |(\mathbf{A} - \bar{A})\Phi_\alpha|^2 d^3\mathbf{r} = \int |(\mathbf{A} - A_\alpha)\Phi_\alpha|^2 d^3\mathbf{r}$$

Preto musí platiť $(\mathbf{A} - A_\alpha)\Phi_\alpha = 0$, t. j.

$$\mathbf{A}\Phi_\alpha = A_\alpha\Phi_\alpha$$

Ostatná rovnica hovorí, že $A_\alpha(\mathbf{r})$ je vlastnou funkciou operátora \mathbf{A} a A_α je príslušnou vlastnou hodnotou.

Vlastné hodnoty A_α operátora \mathbf{A} priradeného k fyzikálnej veličine A sú teda určite možnými výsledkami merania tejto fyzikálnej veličiny, lebo sme našli stavy, v ktorých určite tieto hodnoty nameriame. Skúsenosť však ukazuje, že sú to jediné možné výsledky merania veličiny A , a to bez ohľadu na to, v akom stave sa meraná sústava nachádza. Ilustrujme to na jednoduchom príklade. Vždy, keď sa merala energia atómu vodíka, našla sa jedna z hodnôt energií odpovedajúcich stacionárnym stavom. Podľa článku 2.5 sú ale stacionárne stavy opísané vlnovými funkciami (5.1), v ktorých vlnová funkcia $\Phi(\mathbf{r})$ je riešením rovnice (5.2), t. j.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r})\quad (6)$$

Výraz na ľavej strane je však podľa predchádzajúceho článku operátorom energie – hamiltoniánom H , takže (6) môžeme prepísať ako

$$H\Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r})\quad (7)$$

Vlnové funkcie stacionárnych stavov sú takto vlastnými funkciami operátora energie a energie stacionárnych stavov sú vlastnými hodnotami operátora energie. Pri meraní energie môžeme, ako ukazuje experiment, nájsť len tie hodnoty E_n , pre ktoré má (7) riešenie, t. j.

$$H\Phi_n(\mathbf{r}) = E_n\Phi_n(\mathbf{r}) \quad (8)$$

K podobným záverom vedú aj poznatky získané z meraní iných fyzikálnych veličín.

Vo všeobecnosti toto tvrdenie zavádzame ako jeden zo základných postulátov kvantovej mechaniky:

Pri meraní fyzikálnej veličiny A , opísanej operátorom \mathbf{A} , môžeme ako výsledok jednotlivého merania získať len jednu z vlastných hodnôt operátora \mathbf{A} .

Existuje aj teoretický argument, ktorý ukazuje, že pri meraní určitej veličiny A môžeme namerať len jednu z vlastných hodnôt A_n . Predpokladajme, že sústava (napríklad atóm vodíka) je v čase t_0 v stave $\Phi(\mathbf{r}, t_0)$ a pri meraní veličiny A (napríklad energie) v tomto čase nájdeme hodnotu A' . Ak meranie veličiny opakujeme po veľmi krátkom čase δt , potom je rozumné predpokladať, že musíme namerať opäť tú istú hodnotu A' . Toto ale znamená,⁴⁷ že tesne pred druhým meraním musela byť sústava v stave Φ' , ktorý je vlastným stavom operátora \mathbf{A} (len v takýchto stavoch nameriame s istotou určitú hodnotu veličiny A). Hodnota A' , ktorú sme našli pri opakovanom meraní, je preto jednou z vlastných hodnôt operátora \mathbf{A} . Pretože opakované meranie dalo rovnakú hodnotu ako prvé meranie, museli sme už pri ňom nájsť jednu z vlastných hodnôt operátora \mathbf{A} .

Poznamenajme ešte, že: **1.** Pri meraní zachovávaajúcej sa veličiny, napr. energie, nemusí byť časový úsek δt veľmi malý. **2.** Pri diskusii sme predpokladali, že prístroj použitý pri meraní veličiny A je dostatočne presný – jeho rozlišovacia schopnosť je dostatočná na rozlíšenie dvoch susedných vlastných hodnôt.

Týmto je vyriešená prvá časť otázky – vieme aké hodnoty fyzikálnej veličiny môžeme nájsť pri jednotlivých meraniach. Ostáva nám ešte odpovedať na druhú z otázok – ak meriame veličinu A v stave $\psi(\mathbf{r})$, s akou pravdepodobnosťou nameriame hodnotu A_n .

Odpoveď na túto otázku v špeciálnom prípade merania hybnosti sme našli už v článku 2.9, tu len zopakujeme tamojšiu diskusiu vo všeobecnejšom formalizme.

Využijeme to, že vlastné funkcie $\Phi_n(\mathbf{r})$ operátora \mathbf{A} tvoria úplný systém a rozložíme vlnovú funkciu $\psi(\mathbf{r})$ do systému $\{\Phi_n\}$

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Ak žiadame, aby funkcia $\psi(\mathbf{r})$ bola normovaná na jednotku a využijeme ortonormovanosť systému $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$, t. j.

$$\int \Phi_n^*(\mathbf{r})\Phi_m(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{mn} \quad (11)$$

dostaneme

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (12)$$

Tento výsledok naznačuje (pozri tiež diskusiu v článku 2.9), že výrazy $|c_n|^2$ možno interpretovať ako pravdepodobnosti P_n namerania hodnôt A_n . Ak je to pravdou, potom stredná hodnota veličiny A v stave $\psi(\mathbf{r})$ musí byť daná vzťahom

$$\bar{A} = \sum_n A_n P_n = \sum_n A_n |c_n|^2 \quad (13)$$

Na výpočet strednej hodnoty však máme už predpis (1), takže ak je naše stotožnenie $P_n = |c_n|^2$ správne, potom predpis (1) musí viesť tiež k výsledku (13). Pozrime sa na to bližšie. Ak do vzťahu (1) dosadíme rozklad (10), máme

$$\bar{A} = \int \left\{ \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \right\}^* \mathbf{A} \left\{ \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{r}) \right\} d^3\mathbf{r}$$

⁴⁷ Pripomeňme, že meranie vo všeobecnosti môže viesť k zmene stavu meranej sústavy. Podrobnejšie pozri v nasledujúcom článku.

Teraz prehodíme poradie súčtov a integrálov a využijeme to, že $\mathbf{A}\Phi_i = A_i\Phi_i$, čím dostaneme

$$\bar{A} = \sum_n \sum_i c_n^* c_i A_i \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

Ak využijeme ešte (10), pridáme k

$$\bar{A} = \sum_n \sum_i c_n^* c_i A_i \delta_{in} = \sum_n c_n^* c_n A_n = \sum_n |c_n|^2 A_n$$

a to je presne vzťah (13). Vidíme teda, že priradenie $P_n = |c_n|^2$ je konzistentné s výpočtom strednej hodnoty pomocou vzťahu (1). Podobne by sme sa mohli presvedčiť o tom, že toto priradenie je konzistentné so vzťahom (2) pre výpočet strednej kvadratickej odchýlky.

Predchádzajúcimi argumentmi sme chceli urobiť priradenie $P_n = |c_n|^2$ prijateľným. V rámci všeobecnej formulácie kvantovej teórie patrí k jej základným postulátom. Sformulujme ho preto ešte raz.

Ak v stave $\psi(\mathbf{r})$ meriame veličinu A , potom pravdepodobnosť, že nameriame vlastnú hodnotu A_n je daná výrazom

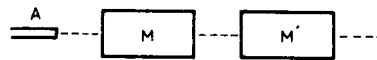
$$P_n = |c_n|^2$$

kde c_n je koeficient v rozklade $\psi(\mathbf{r})$ do ortonormovaného systému vlastných funkcií operátora \mathbf{A}

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{r})$$

2.15 ZMENA STAVU PRI MERANÍ

Predstavme si idealizovaný myšlienkový experiment znázornený na obr. 2.3, ktorý zhŕňa a zjednodušuje veľa reálnych experimentov.⁴⁸



Obr. 2.3

Riedky zväzok atómov z A dopadá na merací prístroj M . Predpokladáme, že všetky atómy vo zväzku sa nachádzajú v stave ψ , ktorý je superpozíciou dvoch stacionárnych stavov Φ_1, Φ_2 s energiami E_1, E_2 :

$$\psi = c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 \quad (1)$$

Z normovanosti funkcie ψ vyplýva, že $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ a výrazy $P_1 = |c_1|^2, P_2 = |c_2|^2$ sú pravdepodobnosti pre nájdenie hodnôt E_1, E_2 pri meraní energie. Prístroj M je konštruovaný tak, aby zmeral energiu atómu a prepustil atóm ďalej k prístroju M' , ktorý tiež meria energiu atómu. Výsledky merania energie sa zapisujú na magnetickú pásku v tvare (E_a, E_b) , kde E_a je hodnota nameraná prístrojom M , E_b to isté pre prístroj M' . Keby sme si potom prečítali pásku, našli by sme niečo takéhoto

$$(E_1, E_1), (E_2, E_2), (E_2, E_2), (E_1, E_1), (E_2, E_2), (E_1, E_1), (E_1, E_1), \dots$$

pričom pravdepodobnosti dvojíc (E_i, E_i) by boli úmerné $|c_i|^2$. Vyskytovali by sa teda len dvojice, v ktorých obidva prístroje namerali rovnakú energiu a nenašli by sme žiadne záznamy typu E_1, E_2 alebo E_2, E_1 . Toto na prvý pohľad nie je prekvapujúce a zdá sa nám prirodzené, že prístroj M' nameria rovnakú energiu ako prístroj M . Ak sa ale pýtame na to, v akom stave je atóm po meraní energie v prístroji M , prideme nutne k záveru:

Ak prístroj M nameria energiu E_1 , potom M' nameria vždy energiu E_1 a teda, pred meraním v M' bol atóm v stave Φ_1 . Podobne prideme k tomu, že ak prístroj M' našiel energiu E_2 , atóm sa nutne dostal do stavu Φ_2 a prístroj M' potom nutne našiel tiež energiu E_2 . Schematicky to môžeme znázorniť takto

⁴⁸ Tento myšlienkový experiment je podrobnou ilustráciou všeobecného argumentu uvedeného v predchádzajúcom článku za tvrdením 14.9.

$$c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 \begin{cases} \xrightarrow{E_1} \Phi_1 \\ \xrightarrow{E_2} \Phi_2 \end{cases} \quad (2)$$

kde šípka znázorňuje zmenu stavu pri meraní.

Odporúčame (naliehavo) čitateľovi, aby si z tohto hľadiska premyslel meranie spinu elektrónu v experimente s prístrojom typu Sterna a Gerlacha a meranie polarizácie fotónu pomocou polarizátorov (pozri diskusiu v článku 1.14).

Po tomto maximálne zjednodušenom príklade môžeme prejsť k všeobecnejšej formulácii problému a povedať rovno, čo o ňom hovorí kvantová mechanika. Predstavme si, že v stave $\psi(\mathbf{r})$ meriame fyzikálnu veličinu A , reprezentovanú operátorom A . Podľa toho, čo sme hovorili v predchádzajúcom článku, môžeme namerať iba jednu z vlastných hodnôt A_i operátora A :

$$A\Phi_i(\mathbf{r}) = A_i\Phi_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

a pravdepodobnosť P_i nájsť túto hodnotu sa rovná $|c_i|^2$, kde c_i je koeficient v rozvoji

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Pýtame sa teraz na to, v akom stave bude sústava tesne po tom, ako sme namerali istú hodnotu A_n . Kvantová mechanika postuluje, že ihneď po meraní bude sústava v stave opísanom vlastnou funkciou $\Phi_n(\mathbf{r})$ príslušnou k nameranej vlastnej hodnote A_n . Tento postulát je motivovaný mnohými experimentmi podobnými tej zjednodušenej situácii, ktorú sme diskutovali vyššie. Jeden skutočný experiment však zohral pri rozvoji interpretácie kvantovej mechaniky významnú úlohu, a preto ho tu aspoň stručne spomenieme. Je to problém vysvetlenia toho, ako vzniká „dráha“ nabitej častice v hmlovej komore. Predstavme si, že vo Wilsonovej hmlovej komore je rádioaktívne jadro, ktoré sa rozpadá a emituje elektrón. Tento elektrón je opísaný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t)$, ktorá odpovedá vlnovému balíku šíriacemu sa na všetky strany, podobne ako by sa pohyboval povrch nafukovaného gumeného balónika.⁴⁹ Pohybujúci sa elektrón ionizuje však atómy a tieto hrajú v komore úlohu kondenzačných centier. Predpokladajme, že jadro sa rozpadlo práve vtedy, keď bola komora „citlivá“ a vtedy môžeme vidieť dráhu elektrónu ako viac-menej priamu čiaru, skladajúcu sa z mnohých kvapôčok, ktoré sa vytvorili na kondenzačných centrách. Vzniká prirodzene otázka, ktorá trápila zakladateľov kvantovej mechaniky, ako je možné, že zo začiatočnej sférickej vlny vznikne priama stopa častice. Vysvetlenie je v zmene vlnovej funkcie stavu pri meraní. Začiatočná sférická vlnová funkcia vedie k istej pravdepodobnosti pre vytvorenie kondenzačných centier z jednotlivých atómov plynu. Hneď ako takéto centrum vznikne, dochádza k zmene stavu elektrónu. Pôvodnú sféricкую vlnu si totiž môžeme predstaviť ako superpozíciu vlnových balíkov šíriacich sa v rôznych smeroch. Keď elektrón vytvoril kondenzačné centrum v smere jednotkového vektora \mathbf{n} , potom sa pôvodný stav zmenil na vlnový balík šíriaci sa v tomto smere a vytvárajúci „dráhu“ častice. Prítom každé vytvorenie kvapôčky je vlastne meraním polohy častice a pri každom takomto meraní dochádza k zmene stavu.⁵⁰

Vráťme sa teraz k diskusii všeobecného prípadu. Ak pri meraní fyzikálnej veličiny A , opísanej operátorom A , nájdeme vlastnú hodnotu A_n , vieme, že ihneď po meraní je sústava vo vlastnom stave $\Phi_n(\mathbf{r})$. Keby sme na tomto stave vykonali opäť meranie veličiny A (a keby časový rozdiel oboch meraní bol taký malý, aby sa stav pri vývoji opísanom SchR nezmenil) dostali by sme ako výsledok opäť hodnotu A_n .

Z diskusie v tomto článku je zrejmé, že v rámci kvantovej mechaniky existujú dva rôzne typy zmien stavu:

a) zmeny stavu dané vlastnou dynamikou atomárneho objektu a jeho interakciou s inými takýmito objektami, alebo so žiarením. Takéto zmeny sú opísané Schrödingerovou rovnicou;

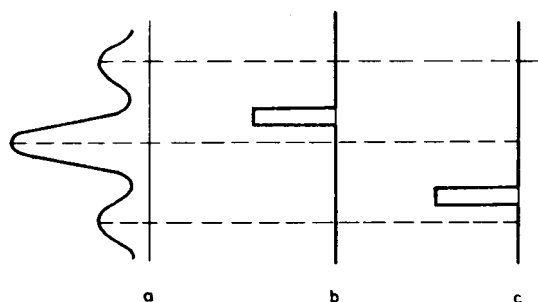
⁴⁹ Nebudeme sa tu snažiť opísať takúto vlnovú funkciu podrobnejšie, ani nebudeme vysvetľovať, prečo je vlnová funkcia takouto sférickou vlnou.

⁵⁰ Stručný komentár k tomuto problému a jeho závažnosti v rozvoji interpretácie kvantovej mechaniky nájde čitateľ v článku W. Heisenberga, citovanom v článku 2.1, podrobnejšia diskusia je vo vynikajúco napísanej klasickej knihe Heisenberg, W.: The Physical Principles of the Quantum Theory, Chicago, 1930.

b) zmeny stavu, ku ktorým dochádza pri meraní, t. j. pri interakcii kvantomechanického objektu s klasickým (makroskopickým) meracím prístrojom. Prítom nastáva zmena stavu, t. j. prechod systému „skokom“ do nového stavu, ktorý je vlastným stavom operátora priradeného meranej fyzikálnej veličine.

Základy takéhoto rozlíšenia dvoch typov interakcií a dvoch typov zmien vlnovej funkcie sú už implicitne obsiahnuté v Bornovej pravdepodobnostnej interpretácii vlnovej funkcie. Zmenu vlnového balíka pri meraní sme už vlastne opisali pri diskusii dvojštrbinového experimentu v článku 1.11. Keď elektrón prechádza cez experimentálne zariadenie, príslušná funkcia $|\Phi(\mathbf{r})|^2$ má tvar znázornený na obr. 2.4a. Skutočné sčernenie odpovedajúce jedinému elektrónu bude oveľa „bodovejšie“ a vlnová funkcia elektrónu po interakcii s fotonpláňou bude silne lokalizovaná, ako je to znázornené na obr. 2.4b, resp. pre iný elektrón na obr. 2.4c.

Nezaoberali sme sa zatiaľ otázkou, či postulovanie zmien stavu je skutočne nevyhnutné, t. j. či zmena stavu pri meraní nie je dôsledkom Schrödingerovej rovnice použitej pre sústavu atomárny objekt plus makroskopický merací prístroj. K tejto problematike sa vrátíme v poslednej kapitole.



Obr. 2.4

Pripojme nakoniec ešte jednu poznámku. Z toho, čo sme doteraz o meraní v kvantovej mechanike povedali, je zrejmé, že problém typu „Zistite (meraním), v akom stave sa nachádza daná sústava“ je neriešiteľný. Meranie ľubovoľnej veličiny stav vo všeobecnosti mení, preto, hoci vieme povedať, v akom stave je sústava po meraní⁵¹, o stave pred meraním sa dozvieme menej. Jedine azda to, že koeficient v rozvoji typu (4) zodpovedajúci zistenej hodnote veličiny bol nenulový. Ak je k dispozícii len jediná sústava, potom niet inej možnosti zistiť jej stav ako presledovať „históriu vzniku“ tohto stavu až k poslednej interakcii tejto sústavy s makroskopickým objektom, t. j. k poslednému meraniu. Tesne po tomto meraní je stav známy a jeho ďalší vývoj určíme pomocou Schrödingerovej rovnice.

Iná situácia je, keď máme k dispozícii veľký súbor identických sústav, o ktorých vieme, že sa všetky nachádzajú v rovnakom (hoci neznámom) stave. Zmeraním vhodných veličín na takomto súbore sústav možno ich stav pred meraním určiť.

2.16 VLASTNÉ FUNKCIE KOMUTUJÚCICH OPERÁTOROV

V tomto článku sa budeme zaoberať otázkou, nakoľko je stav sústavy určený zadaním vlastnej hodnoty istého operátora. Z fyzikálneho hľadiska by sme otázku formulovali takto: máme určitú sústavu, ktorá sa nachádza v nám neznámom stave. Ak zmeriame na nej veličinu F a nájdeme vlastnú hodnotu F_n , poznáme už presne stav sústavy po takomto meraní?

Uvedme najprv niekoľko príkladov.

– Uvažujme elektrón viazaný na úsečku o dĺžke L . Pri meraní energie sme našli hodnotu

$$E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} 3^2$$

⁵¹ Podrobnejšie pozri nasledujúci článok.

Aký bude stav po meraní? Vzhľadom na to, že sústava nie je degenerovaná vieme, že stav po meraní je daný vlnovou funkciou

$$\psi_3(x) = e^{i\alpha} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{3\pi x}{L}$$

kde α je reálne číslo a $\exp(i\alpha)$ je fázový faktor, ktorý nemá fyzikálny význam.⁵² Až na nepodstatný fázový faktor je teda $\psi_3(x)$ dané jednoznačne zadaním hodnoty E_3 .

– Predstavme si teraz časticu pohybujúcu sa voľne v celom priestore a predpokladajme, že poznáme presne aj hodnotu zložky jej hybnosti p_1 . Pýtame sa zas na to, či táto informácia stačí na jednoznačné určenie vlnovej funkcie. Odpoveď je záporná, pretože každá funkcia typu

$$e^{ip_1x/\hbar} \varphi(y, z)$$

je vlastnou funkciou operátora p_x , príslušnou k vlastnej hodnote p_1 . Vidno hneď, že na to, aby sme vlnovú funkciu zadali jednoznačne, musíme zadať súčasne vlastné hodnoty p_1, p_2, p_3 troch operátorov p_x, p_y, p_z . Vtedy vlnová funkcia musí mať tvar

$$A \exp \{i(p_1x + p_2y + p_3z)/\hbar\}$$

kde A je konštanta.

Môžeme si tiež všimnúť, že operátory, ktorých vlastné hodnoty súčasne zadávame, t. j. p_x, p_y, p_z navzájom komutujú. Pretože tieto operátory navzájom komutujú a súčasné zadanie ich vlastných hodnôt jednoznačne určuje vlnovú funkciu, nazývame ich *úplným systémom komutujúcich operátorov*. Prirodzene sa môžeme pýtať na to, či by mohol byť takýto úplný systém tvorený aj operátormi, ktoré nekomutujú (ukazuje sa, že to nie je možné). Takýmto otázkam je venovaný zvyšok tohto článku. Diskusia bude už robená všeobecnejšie, ale čitateľ si pri nej môže predstaviť predchádzajúce jednoduché príklady ako ilustrácie.

Na začiatok uvedieme niekoľko tvrdení povahy skôr matematickej. Predovšetkým platí tvrdenie:

Ak operátory A, B komutujú, t. j. $[A, B] = 0$, a ich spektrá sú nedegenerované, potom každá vlastná funkcia operátora A je aj vlastnou funkciou operátora B a naopak.

Skutočne: označme vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátorov A, B takto:

$$A\psi_n = A_n\psi_n \quad B\Phi_n = B_n\Phi_n$$

Podľa predpokladu $[A, B] = 0$, teda aj

$$AB\Phi_n = BA\Phi_n$$

Využijeme teraz to, že Φ_n je vlastnou funkciou operátora B a dostaneme

$$B(A\Phi_n) = A(B\Phi_n) = B_n(A\Phi_n) \quad (1)$$

Funkcia $A\Phi_n$ je takto vlastnou funkciou operátora B , príslušnou k vlastnej hodnote B_n . Podľa predpokladu je však táto vlastná funkcia zadaná (až na multiplikatívny faktor) jednoznačne (nedegenerované vlastné hodnoty). Musí preto existovať číslo α_n , také, že platí:

$$A\Phi_n = \alpha_n\Phi_n \quad (2)$$

Potom je však α_n jednou z vlastných hodnôt operátora A a príslušná vlastná funkcia je jednoznačne určená. Pri vhodnom výbere číslovania vlastných hodnôt a vlastných funkcií operátora A môžeme docieľiť to, že $\alpha_n = A_n$ a $\Phi_n = \psi_n$.

Predstavme si teraz, že vlastná hodnota B_n je N -krát degenerovaná, existuje teda N lineárne nezávislých funkcií Φ_{nk} , $k = 1, 2, 3, \dots, N$ takých, že platí:

$$B\Phi_{nk} = B_n\Phi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N$$

⁵² Fyzikálny význam v kvantovej mechanike majú stredné hodnoty fyzikálnych veličín, t. j. výrazy typu $\bar{A} = \int \psi^* A \psi dx$ a druhé mocniny absolútnych hodnôt koeficientov v rozklade vlnových funkcií, t. j. výrazy $|c_n|^2$ v rozklade $\psi = \sum c_n \varphi_n$, kde φ_n je sústava vlastných funkcií istého operátora. Ani \bar{A} ani $|c_n|^2$ sa nemenia pri zámene $\psi \rightarrow \psi \exp(i\alpha)$.

ináč všetky predpoklady zostali nezmenené. Ak budeme postupovať rovnako ako v predchádzajúcom prípade, dostaneme rovnicu

$$\mathbf{B}(\mathbf{A}\Phi_{nk}) = B_n(\mathbf{A}\Phi_{nk}), \quad k = 1, 2, 3, \dots, N$$

z ktorej teraz vyplýva:

$$\mathbf{A}\Phi_{nk} = \sum_{j=1}^N c_{kj} \Phi_{nj}$$

Pre hermitovský operátor \mathbf{A} možno dokázať⁵³, že existuje práve N lineárnych kombinácií funkcií Φ_{nk} , $k = 1, 2, \dots, N$

$$\chi_{nk} = \sum_{j=1}^N d_{jk} \Phi_{nj}$$

takých, že bude platiť

$$\mathbf{A}\chi_{nk} = A_{nk}\chi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (3)$$

čiže χ_{nk} budú vlastnými funkciami operátora \mathbf{A} . Ľahko sa možno presvedčiť tiež o tom, že χ_{nk} sú vlastnými funkciami operátora \mathbf{B} , príslušnými k vlastnej hodnote B_n

$$\mathbf{B}\chi_{nk} = B_n\chi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (4)$$

S týmto spresnením možno aj v prípade degenerovaných spektier povedať, že komutujúce operátory majú spoločné vlastné funkcie.

Pre úplnosť uvedieme ešte obrátené tvrdenie, ktoré si čitateľ môže dokázať sám ako cvičenie. Platí:

Ak dva operátory \mathbf{A} , \mathbf{B} majú spoločné všetky vlastné funkcie a ak tieto tvoria úplný systém, potom operátory \mathbf{A} , \mathbf{B} komutujú.

Vráťme sa teraz k problematike merania a zmeny stavu sústavy pri meraní. Skúmame prípad, keď zmeriame najprv veličinu A a vzápätí za tým vykonáme meranie veličiny B . Predpokladáme pritom, že operátory \mathbf{A} , \mathbf{B} komutujú a majú diskkrétne, nedegenerované spektrum. Ak sme pri prvom meraní našli hodnotu A_i , vieme, že sústava je po meraní vo vlastnom stave ψ_i , operátora \mathbf{A} . Podľa predchádzajúceho je tento stav zároveň vlastným stavom operátora \mathbf{B} a pri meraní B nájdeme určite hodnotu B_n , ale stav sústavy už nezmeníme. Prípad degenerovaných spektier je komplikovanejší. Nech sa pred meraním sústava nachádza v neznámom stave ψ . Pri meraní veličiny A dostaneme zas jednu z vlastných hodnôt operátora \mathbf{A} , napríklad A_i . Nech je táto hodnota N -krát degenerovaná. Pri meraní nastane zmena stavu, ale vzhľadom na to, že vlastnej hodnote A_i odpovedá viacero vlastných funkcií Φ_{ik} s $k = 1, 2, \dots, N$ nepoznáme stav ani po meraní presne; vieme iba to, že môže byť iba lineárnou kombináciou stavov Φ_{ik} (s fixovaným i). Pre všetky tieto Φ_{ik} totiž platí

$$\mathbf{A}\Phi_{ik} = A_i\Phi_{ik}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (5)$$

a bude to platiť aj pre ich ľubovoľnú lineárnu kombináciu, teda

$$\mathbf{A}\left(\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}\right) = A_i\left(\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}\right) \quad (6)$$

Ako sme už ukázali, je možné vybrať funkcie Φ_{ik} tak, aby boli vlastnými funkciami operátora \mathbf{B} , t. j. aby platilo⁵⁴

$$\mathbf{B}\Phi_{ik} = B_{ik}\Phi_{ik}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (7)$$

⁵³ Ide vlastne o diagonalizáciu hermitovskej matice typu $N \times N$. Na tomto mieste sa uvedeným tvrdením nebudeme bližšie zaoberať, stane sa zrejším až preberieme všeobecný formalizmus kvantovej mechaniky.

⁵⁴ Predpokladáme stále, že \mathbf{A} , \mathbf{B} komutujú a používame tvrdenia dokázané už vyššie v tomto článku.

Ak predpokladáme, že tieto hodnoty B_{ik} sú (pri danom i a meniacom sa k) navzájom rôzne, potom pri meraní B v stave $\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}$ nájdeme jednu z vlastných hodnôt B_{ij} a lineárna kombinácia $\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}$ meraní zmení na stav Φ_{ij} . Súčasným zadaním dvoch vlastných hodnôt A_i a B_{ij} takto jednoznačne špecifikujeme stav.

Ak by sa medzi hodnotami $B_{ij}, j = 1, 2, \dots, N$ vyskytovali niektoré, ktoré by neboli navzájom rôzne, potom by stav ešte nebol jednoznačne určený a na jeho jednoznačné určenie by sme potrebovali nájsť ďalší operátor C , ktorý by komutoval s A aj s B , a zopakovať predchádzajúcu procedúru.

Takto postupujeme prípadne aj ďalej až prideme k takej sústave navzájom komutujúcich operátorov A, B, C, D, \dots, G , že súčasné zadanie vlastných hodnôt všetkých týchto operátorov už určuje jednoznačne ich spoločnú vlastnú funkciu. Takúto sústavu operátorov nazývame úplnou sústavou komutujúcich operátorov. To, že operátory navzájom komutujú je podstatné, lebo ináč by podľa predchádzajúcich matematických tvrdení nemohli mať spoločné všetky vlastné funkcie a meranie ďalšieho by vo všeobecnosti nespresnilo informáciu získanú v predchádzajúcich, ale „vyviedlo“ by stav von z množiny, do ktorej sa už predchádzajúcimi meraniami dostal.

Vidíme teda, že súčasné zadanie vlastných hodnôt úplnej sústavy komutujúcich operátorov charakterizuje stav sústavy práve tak, ako priame zadanie stavu pomocou vlnovej funkcie. Toto tvrdenie je podstatné pri výstavbe všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky.

2.17 VZŤAH NEURČITOSTI

V predchádzajúcom článku sme videli, že komutujúce operátory majú spoločný systém vlastných funkcií. Ak sa sústava nachádza v stave opísanom takouto vlastnou funkciou, potom obidve veličiny v ňom majú „ostré“ hodnoty (rovné príslušným vlastným hodnotám). Pre nekomutujúce operátory a im prislúchajúce veličiny je situácia iná. Ako príklad tu prediskutujeme podrobne súradnicu a priemernosť hybnosti na príslušnú os.

Komutačné vzťahy medzi operátormi súradníc a hybnosti nájdeme ľahko.

V označení

$$\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \equiv (p_1, p_2, p_3)$$

platí

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= 0 \\ [p_i, p_j] &= 0 \\ [x_i, p_j] &= i\hbar \delta_{ij} \end{aligned} \quad (1)$$

Ukážeme si teraz, že dôsledkom komutačných vzťahov (1) sú vzťahy neurčitosti pre dvojice veličín (x_i, p_i) . Ako sme už na kvalitatívnej úrovni diskutovali v 1. kapitole, tieto vzťahy podstatným spôsobom obmedzujú možnosť súčasného zadania súradnice a príslušnej hybnosti častice. Komutačný vzťah

$$[x, p_x] = i\hbar \quad (1')$$

totiž ukazuje, že operátory x a p_x nemajú spoločnú žiadnu vlastnú funkciu. Naozaj, ak by existovala funkcia Φ taká, že by platilo

$$x\Phi = x\Phi ; \quad p_x\Phi = p_x\Phi$$

potom by platilo tiež

$$[x, p_x]\Phi = [xp_x - p_x x]\Phi = (xp_x - p_x x)\Phi = 0$$

čo je v spore so vzťahom (1), podľa ktorého musí platiť

$$[x, p_x]\Phi = i\hbar\Phi \neq 0$$

Pristúpme teraz k formálnemu odvodeniu vzťahu neurčitosti. Nech je teda stav častice daný stavovou vlnovou funkciou $\Phi(x)$. Pre jednoduchosť uvažujeme iba jednorozmerný prípad a nevypisujeme časovú premennú, lebo všetky úvahy sa týkajú jediného času t_0 .

Vlnová funkcia $\Phi(x)$ reprezentuje istý vlnový balík. Ak vyberieme súradnicovú sústavu tak, aby jej začiatok splýval so stredom vlnového balíka a tak, aby sa sústava pohybovala spolu s týmto stredom, potom v tejto sústave bude platiť

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)x\Phi(x) dx = 0 \quad (2)$$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Phi(x) dx = 0$$

V ďalšom budeme predpokladať, že tieto dve podmienky sú splnené. Predpokladáme ďalej, že vlnová funkcia je normovaná

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)\Phi(x) dx = 1 \quad (3)$$

a stredné kvadratické odchýlky

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)x^2\Phi(x) dx \quad (4)$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\Phi(x) dx \quad (5)$$

sú konečné. Vzhľadom na (4) vlnová funkcia $\Phi(x)$ musí preto dosť rýchlo klesať pre $|x| \rightarrow \infty$; musí platiť

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^3 |\Phi(x)|^2 = 0 \quad (6)$$

Utvorme teraz čisto formálne pre ľubovoľné reálne ξ výraz

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \xi x \Phi(x) + \frac{d\Phi(x)}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \quad (7)$$

ktorý musí byť evidentne nezáporný. Integrál $I(\xi)$ možno okamžite zapísať v tvare

$$I(\xi) = \xi^2 A - \xi B + C = 0 \quad (8)$$

kde

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Phi(x)|^2 dx = \overline{(\Delta x)^2} \quad (9)$$

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Phi^*}{dx} \frac{d\Phi}{dx} dx, \quad -B = \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\frac{d\Phi^*}{dx} \Phi + \Phi^* \frac{d\Phi}{dx} \right) dx$$

Upravíme teraz výraz B . Vidno, že

$$-B = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} (\Phi^* \Phi) dx$$

Po integrovaní per partes dostaneme

$$-B = -\int_{-\infty}^{\infty} (\Phi^* \Phi) dx + [x\Phi^* \Phi]_{-\infty}^{\infty} \quad (10)$$

V dôsledku rovnice (6) sa druhý člen v (10) rovná nule, a teda $B = 1$. Podobne integrujeme per partes vo výraze C a dostaneme

$$C = \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{\hbar^2} \quad (11)$$

Podľa definície (7) výrazu $I(\xi)$ nemôže byť diskriminant výrazu (8) kladný. Preto

$$B^2 - 4AC \leq 0$$

ak sem dosadíme za A, B, C výrazy, ktoré sme práve našli, dostaneme:

$$\overline{(\Delta x)^2 (\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (12)$$

Nerovnosť (12) je známa ako *Heisenbergov vzťah neurčitosti*, ktorý mal významnú úlohu v rozvoji kvantovej mechaniky. Postup, ktorý sme pri jeho odvodení použili, pochádza od H. Weyla.

Z odvodenia nerovnosti (12) vidno, že rovnosť ľavej a pravej strany môže nastať len pre prípad vlnového balíka, ktorý spĺňa podmienku

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} + \xi x \Phi(x) = 0 \quad (13)$$

kde ξ ; je konštanta. Riešením tejto diferenciálnej rovnice je funkcia⁵⁵

$$\Phi(x) = C \exp(-x^2 \xi / 2) \quad (14)$$

čiže podmienka (13) je splnená len pre balíky takého typu.

Vzťah neurčitosti (12) je priamym dôsledkom základných postulátov kvantovej mechaniky týkajúcich sa popisu stavu sústavy pomocou vlnovej funkcie, interpretácie tejto funkcie ako hustoty pravdepodobnosti a predpisu pre pravdepodobnosti namerania určitých hodnôt hybnosti.

Je síce pravdou, že na prvý pohľad by sa nám mohlo zdať – a to sa zdá takmer každému pri zoznamovaní sa s kvantovou mechanikou – že „v skutočnosti“ je elektrón preda len bodovou časticou a „v skutočnosti“ má preda len istú hodnotu hybnosti a že teda „v princípe“ musí existovať experiment, ktorý by zmeral súradnicu a hybnosť elektrónu presnejšie ako je obmedzenie zadané vzťahom (12). Chyba v takomto argumente je v tom, že termín „v skutočnosti“ chápeme ako skutočnosť klasickej fyziky. Ale takáto „skutočnosť“ by nevedla – ako sme diskutovali podrobne v prvej kapitole – k vzniku kvantových stacionárnych stavov v atómoch, nevysvetlila by spektrá atómov ani experimenty Davissona a Germera, ani dvojštrbinové experimenty, ani prechod fotónov polarizátormi. V atómovej fyzike skutočnosť nie je „skutočnosťou“ klasickej mechaniky. A ak raz opisujeme stav elektrónu pomocou vlnovej funkcie a ak túto interpretujeme pravdepodobnostne, potom sa vzťahu neurčitosti nevyhneme.

Vzťah neurčitosti teda nie je ani tak zakotvený v technických podrobnostiach konštrukcie meracích prístrojov, ale je dôsledkom základných predstáv kvantovej mechaniky, menovite spôsobu, akým kvantová mechanika opisuje stavy sústavy.

Ak by sme sa teda chceli vyhnúť vzťahu neurčitosti, museli by sme začať hlbšie a zmeniť už kvantovomechanický opis stavov pomocou vlnových funkcií. Takéto pokusy sa už robili, spravidla sa pri nich opis stavu pomocou vlnovej funkcie považuje za neúplný a zavádzajú sa „skryté parametre“. Tieto teórie však nič užitočného nedali: veľmi prácne a neprirodzene reprodujú niektoré jednoduché výsledky kvantovej mechaniky, majú svoje vnútorné ťažkosti, menovite nelokálnosť interakcie⁵⁶ a všade tam, kde sa dalo očakávať, že ich predpovede sa budú odlišovať od kvantovej mechaniky, experiment potvrdil kvantovú mechaniku. O teóriách so skrytými parametrami sa ešte zmienime podrobnejšie v kapitole venovanej procesu merania a otázkam interpretácie. Prikláňame sa preto k názoru, že vzťah neurčitosti nie je dôsledkom iba spôsobu opisu stavu v kvantovej mechanike, ale že je „schovaný“ vo fyzikálnom stave samotnom.

Najhlbšiu analýzu otázok súvisiacich so vzťahom neurčitosti previedli Niels Bohr a Werner Heisenberg a výslednú analýzu pochádzajúcu od Bohra tu uvedieme trochu podrobnejšie.

Stanovisko Nielsa Bohra. Bohrova, dnes všeobecne uznávaná, interpretácia vzťahu neurčitosti je založená na princípe komplementarity. Pri jeho formulovaní Bohr vychádzal z analýzy možnosti pojmovej štruktúry fyzikálnej teórie. Podľa jeho názoru spôsob, akým je daný experiment postavený a získané

⁵⁵ Vlnové balíky typu (14) nazývame aj minimálnymi či minimalizujúcimi vlnovými balíkmi.

⁵⁶ V teórii sa skrytými parametrami elektrón v dvojštrbinovom experimente prechádza „v skutočnosti“ iba cez jednu štrbinu. Na to, aby sa „dozvedel“, že aj druhá je otvorená a správal sa podľa toho (vytvoril interferenčný obraz), potrebuje nelokálne interakcie.

experimentálne výsledky musia byť opísané jazykom, ktorý umožňuje nedvojzmyselnú interpretáciu a reprodukovateľnosť výsledkov. Takýmto jazykom je práve jazyk klasickej fyziky. Na druhej strane je však pojmový aparát klasickej fyziky získaný zo skúsenosti s makroskopickými predmetmi, a preto nemôžeme očakávať, že tento jazyk sa hodí aj na opis javov z oblasti atómovej fyziky. Preto nemôžeme vylúčiť možnosť, že pojmy klasickej fyziky ako je súradnica, hybnosť a pod., bude možné aplikovať vo fyzike atómu len s určitými obmedzeniami. Heisenbergov vzťah neurčitosti sa potom chápe ako obmedzenie súčasnej použiteľnosti pojmov klasickej fyziky v oblasti atómovej fyziky. Vo svojich prednáškach o kvantovej teórii⁵⁷ Bohr neformuloval princíp komplementarity vo forme matematickej vety – takáto formulácia je nakoniec vylúčená samotným charakterom tohto princípu. Princíp komplementarity je totiž skôr princípom z teórie poznania ako princípom výlučne fyzikálnym a – chápaný všeobecne – hovorí o aplikovateľnosti pojmov istej teórie v rámci teórie, ktorá je jej ďalším vývojovým štádiom. Pokusy aplikovať princíp komplementarity v nefyzikálnych oblastiach možno tiež nájsť v citovaných Bohrových prácach.

Pokus o zúženie formuláciu princípu komplementarity by vyzeral asi nasledovne:

Ak daný systém v rámci klasickej fyziky možno úplne opísať pomocou dvojice veličín napr. súradnice a hybnosti, potom na úplný opis toho istého systému v rámci kvantovej mechaniky možno použiť tú istú dvojicu premenných, ale každá z nich je presnejšie určená len za cenu zvýšenia nepresnosti druhej. Obidve premenné sa takto dopĺňajú (komplementarita) pri opise sústavy, ale ich použitia v zmysle klasickej fyziky sa navzájom vylučujú.

Pretože pojmy súradnice a hybnosti nemožno v klasickom zmysle použiť na opísanie pohybu častice v oblasti kvantovej fyziky, nemožno tu používať ani pojem trajektórie.

Pod trajektóriou v klasickej fyzike rozumieme závislosť polohového vektora \mathbf{r} od času t . Ak však poznáme funkciu $\mathbf{r}(t)$, môžeme v každom čase t vypočítať aj hybnosť častice

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

Pojem trajektórie v klasickom zmysle predpokladá, že častica môže mať súčasne presne danú aj súradnicu, aj hybnosť, čo v kvantovej teórii nie je možné⁵⁸

Konzistentnosť vzťahu neurčitosti s experimentom. Vzťah neurčitosti bol odvodený z predpokladu, že častica je opísaná vlnovým balíkom, a že hodnoty súradnice a hybnosti a stredné kvadratické odchýlky od týchto stredných hodnôt sú dané vzťahmi (2), (4) a (5). Keby bolo experimentálne možné zmerať súčasne súradnicu a hybnosť presnejšie, než predpisuje vzťah neurčitosti, svedčilo by to pre mechanistickú interpretáciu princípu neurčitosti a zároveň by to dokazovalo, že kvantová mechanika nemôže byť úplnou teóriou. V sérii myšlienkových experimentov (podľa nemeckého originálu sa dnes všeobecne nazývajú „Gedankenexperimentami“) Heisenberg a Bohr⁵⁹ ukázali, že pri dôslednej aplikácii zákonov kvantovej mechaniky nemožno súradnicu a hybnosť merať súčasne presnejšie, ako predpisuje vzťah neurčitosti.

Na ukážku takých Gedankenexperimentov uvedieme Heisenbergov príklad na meranie polohy častice mikroskopom. Usporiadanie experimentu je znázornené na obr. 2.5, kde pre jednoduchosť je celý mikroskop reprezentovaný šošovkou S , elektrón je pre názornosť (hoci nesprávne) znázornený bodom e v osi mikroskopu a svetlo, ktorým elektrón pozorujeme, je naznačené prerušovanou čiarou. Nech svetlo, ktorým elektrón pozorujeme má vlnovú dĺžku λ . Podľa zákonov vlnovej optiky je rozlišovacia schopnosť mikroskopu daná vzťahom⁶⁰

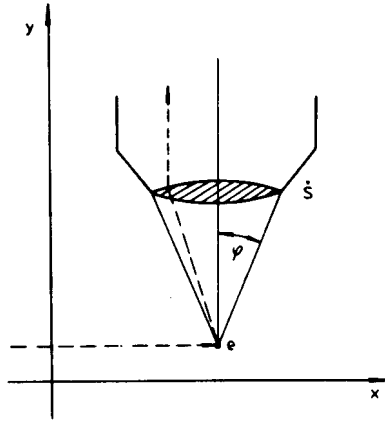
$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varphi} \quad (15)$$

⁵⁷ Bohr, N.: Atomtheorie und Naturbeschreibung. Berlin 1931 Bohr, N.: Atomphysik und menschliche Erkenntnis, I., II. Braunschweig 1964, 1966. Podrobnú diskusiu Bohrových myšlienok možno nájsť aj v kap. 6, 7, 8, 22 a 23 Bohmovej učebnice (4).

⁵⁸ Ako sme videli, použitie pojmu trajektórie v klasickom zmysle vedie rýchlo k ťažkostiam pri interpretácii interferenčných pokusov (napr. v dvojštrbinovom experimente).

⁵⁹ Heisenberg, W.: The Physical Principles of the Quantum Theory. Chicago 1930. Bohrov článok v knihe A. Einstein – Philosopher Scientist. New York 1951, s. 201-241.

⁶⁰ Tento vzťah je prirodzený, mikroskop nemôže mať lepšiu rozlišovaciu schopnosť ako je dĺžka vlny použitého svetla, a zmenšením uhla φ (pozri obr. 2.5) strácame informáciu o tom, odkiaľ prišlo svetlo, ktoré dopadlo do mikroskopu.



Obr. 2.5

Nepresnosť hybnosti elektrónu bude spôsobená nepresnosťou v určení hybnosti odovzdanej elektrónu rozptýleným svetlom. Ak zanedbáme zmenu vlnovej dĺžky svetla, uvážime, že pri meraní sa nepozoruje miesto šošovky, ktorým prechádza rozptýlený fotón, a ak podľa fotónovej hypotézy predpokladáme, že hybnosť fotónu s dĺžkou vlny λ je

$$|\mathbf{p}| = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

dostaneme pre nepresnosť odovzdanej hybnosti v smere osi x vzťah

$$\Delta p_x \sim |\mathbf{p}| \sin \varphi = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \varphi$$

Odtiaľ

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim 2\pi\hbar \tag{16}$$

čo je v súlade s Heisenbergovým vzťahom neurčitostí. Niekedy sa tomuto Gedankenexperimentu vyčíta, že je nerealistický, pretože jeden fotón nestačí na vytvorenie zobrazenia. Na argumente sa však nič nezmení, ak prístroj registruje len prípady, keď elektrón rozptýli dva fotóny dopadajúceho svetla. V konečnom výsledku sa len zmení (zväčší) numerický faktor (2π) na pravej strane v (16). Podstatné pre Heisenbergovu diskusiu merania polohy častice mikroskopom je to, že

1. svetlo použité pri meraní má vlastností, typické pre kvantovú teóriu. Monochromatickému svetlu s vlnovou dĺžkou zodpovedá „roj fotónov“ s hybnosťou $|\mathbf{p}|=2\pi\hbar/\lambda$;

2. pokus je postavený tak, že „trajektória“ rozptýleného svetla vnútri mikroskopu nie je sama meraná ďalším experimentálnym zariadením.

Bod 1 ukazuje, že kvantová teória je vnútorne konzistentná len vtedy, ak je aplikovaná dôsledne. V uvažovanom príklade sa môžeme rýchlo dostať do rozporu so vzťahom neurčitosti, keď budeme považovať svetlo použité pri meraní polohy za vlnový proces v rámci klasickej fyziky. Vtedy sa totiž odovzdaná hybnosť dá ľubovoľne zmenšiť (zoslabením intenzity svetla). Bod 2 sa často interpretoval ako prítomnosť „principiálne nekontrolovateľného kvanta“ v procese merania, čo poskytovalo dôvod k ťažkostiam filozofického charakteru, pretože „principiálna nekontrolovateľnosť“ interakcie je typicky agnosticistický termín.⁶¹ Použitie termínu „nekontrolovateľné kvantum“ v uvažovanom prípade však predpokladá, že aj počas merania môžeme považovať meraný elektrón za izolovanú sústavu a chápať ho stále „ako taký“, a že podobne meraciu sústavu môžeme chápať ako izolovanú sústavu. Navyše, ak chceme byť presní, v uvedenej situácii pojem „trajektórie fotónu“ nemôžeme vôbec použiť. Pri interakcii vedúcej k meraniu polohy treba elektrón, mikroskop, zdroj svetla a prípadne fotografickú platňu, ktorou registrujeme výsledok pozorovania polohy elektrónu, chápať ako jedinú sústavu. Termín

⁶¹ Agnosticizmus – idealistický smer vo filozofii, ktorý tvrdí, že veci sú poznateľné len po určitú hranicu.

„nekontrolovateľné kvantum“ je najskôr obrazným opisom procesu merania, založenom na použití názorných, ale nie celkom korektné aplikovaných pojmov.

Vráťme sa naspäť k meraniu polohy elektrónu. Ak pri meraní použijeme svetlo s veľmi krátkou vlnovou dĺžkou, dostaneme ako výsledok merania veľmi malé hodnoty Δx , ale veľké rozmazanie (veľké Δp_x) v určení hybnosti elektrónu. Elektrón by sa javil v takýchto meraniach ako pomerne lokalizovaný objekt. Pri meraní polohy pomocou svetla s veľkou vlnovou dĺžkou by sme naopak dostávali veľké hodnoty Δx a elektrón by vyzeral ako priestorovo rozmazaný objekt s pomerne dobre definovanou hybnosťou.⁶²

Z uvedeného vidno, že elektrón sa správa rôzne v rôznych interakciách, a že tvrdenie o elektróne „ako takom“ (bez špecifikácie interakcie elektrónu s okolím) môžu ľahko viesť k chybným záverom. Toto platí špeciálne o často diskutovanej otázke, či elektrón je vlna alebo častica. V niektorých experimentoch (napr. interferencia) elektrón výrazne prejavuje vlnové vlastnosti, v iných (meranie polohy svetlom s krátkou vlnovou dĺžkou) sa správa ako lokalizovaný objekt – častica. Vzťah neurčitosti v tomto kontexte tvrdí, že v rámci kvantovej mechaniky nie je možný taký experiment, v ktorom by sa elektrón správal ako vlna s vlnovou dĺžkou určenou s chybou menšou ako $\Delta\lambda$ (čiže s hybnosťou s chybou menšou ako $\Delta p \sim \left| \frac{\partial p}{\partial \lambda} \right| \Delta\lambda$) a zároveň ako lokalizovaná častica s nepresnosťou v určení polohy menšou ako Δx . Táto nepresnosť je určená vzťahom $\Delta x \Delta p \sim \hbar/2$.

V klasickej fyzike bolo možné predstaviť si sústavu interagujúcich objektov v podstate tak ako hodinový stroj. Každú súčiastku možno vybrať, študovať nezávisle od ostatných a opísať ju „ako takú“. Po vložení do stroja súčiastka zostáva zo začiatku taká, ako bola pred vložením, neskôr sa interakciou s ostatnými súčiastkami síce môže meniť, ale stále si zachováva svoju individualitu, pretože zmeny prebiehajú spojit.

V kvantovej mechanike dve sústavy, ktoré vstúpia do interakcie, stávajú sa časťou jednej zloženej sústavy a o ich individualite má zmysel hovoriť len v tom priblížení, v akom platí klasická fyzika.

Napokon si dovoľíme ako poznámku dať čitateľovi „radu do života“. Filozofické otázky kvantovej mechaniky sú veľmi pekná a zaujímavá vec. V minulosti sa o nich viedli búrlivé diskusie, ale ako to už pri búrlivých diskusiách býva, nie všetci účastníci diskutovali so znalosťou veci. Ak sa fyzik na takejto diskusii zúčastňuje alebo ak sa chce o takéto veci hlbšie zaujímať, musí poznať kvantovú mechaniku skutočne veľmi dôkladne. Odporúčame preto čitateľovi, aby sa k týmto otázkam vrátil až po „treťom“ čítaní (a to nielen tejto, ale aj ďalších učebníc), potom, keď bude mať prečítané a premyslené práce citované v tomto článku a práce citované ďalej v kapitole venovanej meraniu a interpretácii kvantovej mechaniky a až potom, keď bude poznať „remeslo“.

2.18 ZHRNUTIE

V tejto kapitole sme sa zoznámili so všetkými základnými postulátmi kvantovej mechaniky vo formalizme vlnových funkcií. Zopakujeme tu stručne základné myšlienky na prípade jednoduchšej sústavy – častice v silovom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$.

1. Stavú fyzikálnej sústavy v určitom čase t_0 je priradená stavová vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t_0)$.
2. Pravdepodobnostná interpretácia stavovej vlnovej funkcie: $|\psi(\mathbf{r}, t_0)|^2$ je hustota pravdepodobnosti v \mathbf{r} -priestore.
3. Znalosť stavovej vlnovej funkcie $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ v istom čase t_0 umožňuje predpovedať stav sústavy $\psi(\mathbf{r}, t)$ v ľubovoľnom neskoršom čase t . Pohybovou rovnicou je Schrödingerova rovnica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$$

Vlnová funkcia v čase $t = t_0$ vystupuje v príslušnom riešení ako začiatočná podmienka.

⁶² Heisenbergov mikroskop nie je najjednoduchšou ilustráciou vzťahu neurčitosti. Jednoduchším príkladom je prechod častice cez štrbinu. Príklad pochádza tiež od Heisenberga [28] a možno sa s ním oboznámiť aj v Bornovej učebnici [3] alebo – spolu s viacerými ďalšími príkladmi – v Zbierke úloh [30].

4. Fyzikálnej veličine A je priradený hermitovský operátor \mathbf{A} . Strednú hodnotu a strednú kvadratickú odchýlku veličiny A v čase t_0 určíme zo vzťahu

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t_0) \mathbf{A} \psi(\mathbf{r}, t_0) dV$$

$$\overline{(\Delta A)^2} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t_0) (\mathbf{A} - \bar{A})^2 \psi(\mathbf{r}, t_0) dV$$

5. Významnú úlohu pre meranie veličiny A majú stavy, ktorých stavové vlnové funkcie sú vlastnými stavmi operátora \mathbf{A} :

$$\mathbf{A}\Phi_n = A_n\Phi_n \quad (\text{predpokladáme diskkrétne spektrum})$$

Stavy Φ_n spravidla tvoria úplný ortonormovaný systém, t. j.

$$\int \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_m(\mathbf{r}) dV = \delta_{nm}$$

a ľubovoľnú funkciu $\psi(\mathbf{r})$ možno rozvinúť do radu

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

Fyzikálna interpretácia: pri meraní veličiny A v stave $\psi(\mathbf{r})$ môže byť výsledkom merania len niektorá z hodnôt A_n , a to s pravdepodobnosťou

$$P_n = |c_n|^2$$

6. Meranie v kvantovej mechanike predstavuje vo všeobecnosti podstatný zásah do sústavy. Stav sústavy sa pri meraní vo všeobecnosti zmení. Po meraní veličiny A , pri ktorom sa získala hodnota A_i , sa sústava bude nachádzať vo vlastnom stave (prípadne v niektorom z vlastných stavov – pri degenerovanom spektre) operátora \mathbf{A} prislúchajúcom hodnote A_i .

7. V prípade degenerovaných spektier zmeranie jednej veličiny neurčuje jednoznačne stav sústavy po tomto meraní. Stav bude ale určený jednoznačne, ak zmeriame všetky veličiny patriace do niektorého súboru, ktorému v priestore operátorov prislúcha úplný systém komutujúcich operátorov.

8. Opis stavu pomocou vlnovej funkcie a pravdepodobnostná interpretácia tejto funkcie vedú priamo k vzťahu neurčitostí. Podľa neho je stredná kvadratická odchýlka súradnice Δx a hybnosti Δp viazaná vzťahom $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$. Analýza myšlienkových (i reálnych) experimentov ukazuje, že vzťah neurčitosti je konzistentný s experimentálnymi možnosťami povolenými kvantovými zákonitosťami.

2.19 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Rovinná monochromatická vlna dopadá na tienidlo. V tienidle je otvor, ktorý sa otvorí na dobu τ . Nájdite rozloženie kruhových frekvencií vo vlnovom balíku prepustenom uzáverom. Uvážte potom prípad s energiou elektrónov $E = 400$ eV a s uzáverom otvoreným na čas $\tau = 10^{-8}$ s. Ako sa bude meniť s časom dĺžka balíka prepusteného uzáverom?
2. Častica s hmotnosťou m sa pohybuje v poli potenciálu $m\omega^2 x^2/2$ (lineárny harmonický oscilátor). Vlnová funkcia základného stavu je

$$\psi_0(x) = (\pi x_0^2)^{-1/4} \exp(-x^2/2x_0^2), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Energia základného stavu je $E_0 = \hbar\omega/2$. Nájdite maximálnu vzdialenosť častice s touto energiou od rovnovážnej polohy, povolenú klasickou mechanikou. S akou pravdepodobnosťou nájdeme časticu za touto vzdialenosťou podľa kvantovej mechaniky? Pri riešení budete potrebovať

$$\int_1^\infty \exp(-x^2) dx \doteq 0,16\sqrt{2\pi}$$

3. Elektrón je viazaný na úsečku dlhú L a opísaný vlnovou funkciou $Ax(x-L)$. Nájdite normalizačnú konštantu A . Aké hodnoty energie môžeme namerať v tomto stave (pri meraní energie)? S akými pravdepodobnosťami nájdeme jednotlivé hodnoty E_n ?
4. Elektrón v základnom stave atómu vodíka je opísaný vlnovou funkciou

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp(-r/a), \quad \text{kde } a = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$$

- a) Nájdiť strednú vzdialenosť elektrónu od jadra.
 b) Nájdiť strednú potenciálnu energiu elektrónu v tomto stave. Porovnaj s hodnotou potenciálnej energie v strednej vzdialenosti.
 c) Ukážte, že stredný elektrostatický potenciál budený atómom vodíka je

$$\Phi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) e^{-2r/a}$$

- d) Nájdiť stredné hodnoty x^2 a p_x^2 v základnom stave atómu vodíka a vysvetlite výsledok z hľadiska vzťahu neurčitosti.
 5. Nech $\mathbf{p} = -i\hbar \mathbf{d}/dx$. Nájdiť komutátory $[\mathbf{x}, \mathbf{p}^n]$ a $[\mathbf{x}^n, \mathbf{p}]$.
 6. Nájdiť komutačné vzťahy operátorov momentu hybnosti $L_1 = L_x, L_2 = L_y, L_3 = L_z$ s operátormi $p_1 = p_x, p_2 = p_y, p_3 = p_z$ a s operátormi $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$.
 7. Ukážte, že operátor $\hat{\lambda} = \hat{L}\hat{p} \equiv L_1p_1 + L_2p_2 + L_3p_3$ komutuje s operátormi p_x, p_y, p_z .
 8. Nájdiť také lineárne kombinácie funkcií $f_1(x) = x, f_2(x) = x^2$, ktoré budú ortonormálne na intervale $(0, 1)$.
 9. Operátor \mathbf{P} nech je definovaný vzťahom

$$\mathbf{P}\psi(\mathbf{r}) = -\psi(-\mathbf{r})$$

- Nájdiť jeho vlastné hodnoty. Ukážte, že vlastné funkcie prislúchajúce k rôznym vlastným hodnotám sú ortogonálne.
 10. Ukážte, že $\exp(-x^2/2)$ je vlastnou funkciou operátora $(-d^2/dx^2 + x^2)$ príslušnou k vlastnej hodnote $\lambda_0 = 1$. Podobne ukážte, že $x \exp(-x^2/2)$ je vlastnou funkciou toho istého operátora a nájdite vlastnú hodnotu. Ukážte, že tieto dve funkcie sú ortogonálne na intervale $-\infty < x < \infty$ a zdôvodnite výsledok všeobecným tvrdením.
 11. Nech \mathbf{A} je hermitovský operátor a nech $\mathbf{B} = \mathbf{A}^2 = \mathbf{A}\mathbf{A}$. Dokážte, že stredná hodnota operátora \mathbf{B} v ľubovoľnom stave je nezáporná a že všetky vlastné hodnoty operátora \mathbf{B} sú nezáporné.
 12. Stav častice je opísaný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r})$. Naznačte spôsob, ktorým by ste počítali pravdepodobnosť toho, že z -ová súradnicu častice nájdeme v intervale (z_1, z_2) a y -ovú zložku hybnosti v intervale (p_{y1}, p_{y2}) pri súčasnom meraní súradnice z a hybnosti p_y .

3 VLASTNOSTI RIEŠENÍ SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICE

3.1 ÚVOD

V tejto kapitole si všimneme podrobnejšie niektoré všeobecné vlastnosti riešení časovej Schrödingerovej rovnice pre jedinú časticu v silovom poli opísanom potenciálnou energiou. Postupne sa budeme zaoberať s rovnicou kontinuity, s časovou závislosťou stredných hodnôt fyzikálnych veličín a s Ehrenfestovými vetami, ktoré ukazujú súvislosť medzi kvantovým a klasickým opisom pohybu častice v silovom poli. Napokon sa ešte raz pozrieme na stacionárne stavy a ukážeme, ako pomocou nich možno formálne opísať časový vývoj ľubovoľného stavu.

3.2 ROVNICA KONTINUITY

Ak poznáme stav, t. j. vlnovú funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ uvažovanej sústavy v istom okamihu t_0 , potom vieme pomocou Schrödingerovej rovnice predpovedať, v akom stave sa bude sústava nachádzať v ľubovoľnom neskoršom okamihu t . Stav v čase t je daný riešením rovnice.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

so začiatočnou podmienkou

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (1')$$

Teraz si ukážeme, že riešenia rovnice (1), bez ohľadu na presný tvar začiatočnej podmienky, spĺňajú istý vzťah, ktorý je formálne úplne rovnaký ako rovnica kontinuity v hydrodynamike. Postupovať budeme čisto formálne. Rovnica komplexne združená k (1) je

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

Násobme (1) funkciou ψ^* a (2) funkciou ψ a odpočítajme druhú rovnicu od prvej. Pri úprave využijeme vzťah

$$\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* = \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

známy z vektorovej analýzy. Dostávame

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (3)$$

Výraz $\psi^* \psi$, ktorý má význam hustoty pravdepodobnosti výskytu častice v okolí bodu \mathbf{r} v čase t označíme $\rho(\mathbf{r}, t)$. Ďalej zavedieme označenie

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \quad (4)$$

a rovnicu (3) môžeme prepísať do tvaru

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (5)$$

Rovnica (5) má analogický tvar ako rovnica kontinuity v hydrodynamike, nazývame ju tiež rovnicou kontinuity. Ako bude zrejme z ďalšieho výkladu, fyzikálny zmysel tejto rovnice je analogický jej významu v hydrodynamike.

Ak stav sústavy v čase t_0 bol daný normovanou stavovou vlnovou funkciou $\Phi(\mathbf{r})$

$$\int \Phi^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = 1 \quad (6)$$

potom je prirodzené požadovať, aby pri časovom vývoji stavu bola celková pravdepodobnosť výskytu častice v celom priestore v každom čase t rovná jednej.

Riešenia SchR dané začiatočnou podmienkou (2) by teda mali spĺňať podmienku

$$\int \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = 1 \quad (7)$$

ktorá vyjadruje trvalú existenciu častice.

Riešenia SchR túto podmienku skutočne spĺňajú. Možno to jednoducho ukázať pomocou rovnice kontinuity.

Ak existuje integrál (7), potom hodnota výrazu $\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$ klesá pre $r \rightarrow \infty$ rýchlejšie ako r^{-3} . Predpokladajme ďalej, že aj výrazy typu $\psi^*(\partial\psi/\partial x)\psi$ klesajú pri $r \rightarrow \infty$ rýchlejšie ako r^{-3} . Potom z rovnice kontinuity vyplýva

$$\frac{d}{dx} \int_V \rho(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = - \int_S \mathbf{j}(\mathbf{r},t) \cdot d\mathbf{S}$$

kde \mathbf{S} je plocha, ohraničujúca objem V . V limite $V \rightarrow \infty$ plošný integrál v dôsledku vyslovených predpokladov konverguje k nule. Dostaneme teda (pri integrovaní cez celý priestor)

$$\frac{d}{dx} \int_V \rho(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = 0 \quad (8)$$

Integrál v (7) je nezávislý na čase, a pretože spĺňa začiatočnú podmienku (6), je vzťah (7) splnený. Platnosť podmienky (7) je v skutočnosti veľmi dôležitá. Ukazuje konzistentnosť SchR ako rovnice určujúcej časový vývoj stavov s pravdepodobnostnou interpretáciou vlnovej funkcie; podmienka (8) je vlastne zákonom zachovania celkovej pravdepodobnosti. Rovnica kontinuity má význam zákona zachovania pravdepodobnosti v diferenciálnom tvare.

Na záver článku urobíme ešte tri poznámky k rovnici kontinuity.

1. Je užitočné si všimnúť, že rovnica kontinuity (5) platí nezávisle od tvaru potenciálu za predpokladu, že potenciál je reálny. Pre komplexný potenciál $V = \text{Re } V + i\text{Im } V$ dostaneme po podobných úpravách ako pri odvodení (5) rovnicu kontinuity v modifikovanom tvare

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho(\mathbf{r},t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \rho(\mathbf{r},t) \frac{2\text{Im } V}{\hbar} \quad (9)$$

kde $\rho = \psi^*\psi$ a \mathbf{j} je dané rovnicou (4). Ak potenciál V má nenulovú imaginárnu časť, tak pravá strana (9) ukazuje, že v miestach, kde je $\text{Im } V > 0$, vznikajú nové častice. Podobne v miestach, kde $\text{Im } V < 0$ sú častice pohlcované. Tento druhý prípad sa používa pri fenomenologickom opise rozptylu častíc na jadrách, keď jadro pohlcuje dopadajúce častice. Po pohltení vznikajú komplikované jadrové reakcie, ale dopadajúca častica sa už nemusí objaviť; z hľadiska pružného rozptylu je vtedy „stratená“.

2. Rovnicu (8) možno odvodiť aj bez detailných predpokladov o operátore H . Pre jej platnosť stačí, aby operátor H bol hermitovský. Skutočne, zapíšme SchR v tvare

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (10)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (H\psi)^* \quad (11)$$

Násobme (10) ψ^* a (11) zase ψ a odpočítajme druhú od prvej. Po integrovaní cez celý priestor dostaneme:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^*\psi d^3\mathbf{r} = \frac{1}{i\hbar} \int [\psi^*H\psi - (H\psi)^*\psi] d^3\mathbf{r}$$

a pre hermitovský operátor H sa pravá strana rovná nule.

3. Ak vlnová funkcia ψ opisuje časticu s nábojom e , zavádzame hustotu náboja $\rho'(\mathbf{r}, t)$ a hustotu prúdu náboja $\mathbf{j}'(\mathbf{r}, t)$ vzťahmi

$$\rho'(\mathbf{r}, t) = e\rho(\mathbf{r}, t) = e|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

$$\mathbf{j}'(\mathbf{r}, t) = e\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

Pre tieto veličiny platí tiež rovnica kontinuity

$$\frac{\partial\rho'}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j}' = 0$$

ktorá vyjadruje zákon zachovania elektrického náboja.

3.3 ČASOVÁ ZÁVISLOSŤ STREDNÝCH HODNÔT

Stredná hodnota veličiny F , ktorej je priradený operátor F je v stave opísanom v čase t vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t)$ daná vzťahom

$$\bar{F}(t) = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)F\psi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

kde sme explicitne zapísali fakt, že stredná hodnota veličiny F bude vo všeobecnosti závisieť od času.

V niektorých prípadoch môže byť užitočné vedieť vypočítať pre daný stav $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ priamo deriváciu funkcie $\bar{F}(t)$ podľa času bez toho, aby sme najprv počítali funkciu $\bar{F}(t)$. Ak operátor F nezávisí explicitne od času, dostaneme postupne po využití SchR:

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = \int \left[\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t}F\psi(\mathbf{r}, t) + \psi^*(\mathbf{r}, t)F\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] d^3\mathbf{r}$$

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left\{ \frac{1}{i\hbar}[FH - HF] \right\} \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

Označme operátor v poslednom integráli⁶³

$$\dot{F} = \frac{1}{i\hbar}[F, H] = \frac{1}{i\hbar}(FH - HF) \quad (2)$$

V označení podľa (2) máme

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\dot{F}\psi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} \quad (3)$$

Poznamenajme, že použité označenie je z hľadiska princípu korešpondencie veľmi prirodzené. V klasickej príhode časová derivácia veličiny F má opäť význam nejakej fyzikálnej veličiny G . Ako príklad uveďme prípad jednej častice a veličiny \mathbf{r} (poloha častice). Časová derivácia má význam rýchlosti \mathbf{v} častice.

Ak poznáme operátor F príslušný veličine F a hľadáme, aký operátor prislúcha klasickej veličine \dot{F} , potom je z hľadiska princípu korešpondencie prirodzené priradiť veličine \dot{F} taký operátor F , aby platil vzťah

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = \bar{\dot{F}}$$

resp. s explicitným vypísaním definície stredných hodnôt

$$\frac{d}{dt} \int \psi^*(\mathbf{r}, t)F\psi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\dot{F}\psi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} \quad (4)$$

⁶³ Zdôraznime tu, že \dot{F} je operátor priradený časovej derivácii veličiny F a nie derivácia operátora F .

Definícia operátora \dot{F} pomocou vzťahu (2) zabezpečuje splnenie vzťahu (4), požadovaného princípom korešpondencie.

Napríklad pre operátor priradený k časovej derivácii súradnice máme podľa vzťahu (2)

$$\dot{x} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] \quad (5a)$$

a podobne pre operátor priradený k časovej derivácii x -súradnice hybnosti máme

$$\dot{p}_x = \frac{1}{i\hbar} [p_x, H] \quad (5b)$$

Tým sme sa ale dostali do zaujímavej situácie v otázke vzťahu klasickej a kvantovej mechaniky. Ak totiž v klasickej mechanike opisujeme pohyb jedinej častice v silovom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ a ak za premenné charakterizujúce klasický stav častice vyberieme \mathbf{r} a \mathbf{p} , potom máme klasické pohybové rovnice

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} p_x \quad (6a)$$

$$\frac{dp_x}{dt} = F_x = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x} \quad (6b)$$

Pýtame sa, prirodzene, na to, aký je súvis pohybových rovníc (6) a vzťahov (5) platných pre operátory v kvantovej mechanike.⁶⁴ Ako uvidíme v nasledujúcom článku, tento súvis je veľmi tesný a vzťahy (5), ako sa ukáže, budú vlastne prepisom klasických vzťahov (6) do jazyka operátorov. Fyzikálne má toto tvrdenie, pre náš jednoduchý príklad častice v silovom poli, jasnú fyzikálnu interpretáciu obsiahnutú v *Ehrenfestových vetách* (článok 3.4).

V niektorých prípadoch môže operátor F závisieť explicitne od času. Po minimálnych modifikáciách predchádzajúceho postupu dostaneme v tomto prípade

$$\dot{F} = \frac{1}{i\hbar} [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (7)$$

Ak sa v klasickej mechanike pri pohybe sústavy nemení hodnota určitej veličiny, potom túto veličinu nazývame integrálom pohybu. V kvantovej mechanike je definícia analogická: ak sa *stredná hodnota* veličiny F nemení pri časovom vývoji ľubovoľného stavu sústavy, potom veličinu F nazývame integrálom pohybu. Vzhľadom na rovnicu (3) je podmienkou pre to, aby veličina F bola integrálom pohybu splnenie vzťahu

$$\dot{F} = 0$$

Ak sa obmedzíme iba na také veličiny, ktorých operátory F nezávisia explicitne od času, potom veličina F je integrálom pohybu práve vtedy, ak platí

$$[F, H] = 0$$

teda keď operátor F priradený tejto veličine komutuje s hamiltoniánom H .

Poznámka: Rovnica (7) pripomína pohybovú rovnicu klasickej mechaniky, zapísanú pomocou Poissonových zátvoriek. Ak je sústava v klasickej mechanike opísaná zovšeobecnenými súradnicami $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ a príslušnými kanonicky združenými hybnosťami $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$, tak pre časovú zmenu ľubovoľnej fyzikálnej veličiny $F = F(q, p, t)$ platí:⁶⁵

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

⁶⁴ Súvis medzi vzťahmi (5) a (6) musíme overiť i preto, lebo môže vzniknúť napríklad otázka typu ako „správne“ definovať povedzme operátor rýchlosti častice. V našom doterajšom výklade sme používali metódu, pri ktorej najprv vyjadríme klasickú veličinu (rýchlosť) pomocou klasických veličín súradnice a hybnosti a potom v tomto vyjadrení nahradíme x a p príslušnými operátormi (porovnaj čl. 2.12). Takémuto postupu odpovedá definícia operátora rýchlosti podľa odpovedajúceho vzťahu (6a). Vzťah (5a) predstavuje alternatívnu definíciu. Ako uvidíme v nasledujúcom článku, obe definície sú ekvivalentné.

⁶⁵ Pozri napr. Landau, L. D. – Lifšic, E. M.: *Mechanika*. Moskva 1965.

kde

$$\{F, H\} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right)$$

Pri prechode od klasickej mechaniky k mechanike kvantovej treba zameniť klasickú Poissonovu zátvorku za komutátor operátorov podľa vzťahu

$$\{F, H\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [F, H]$$

Táto analógia nie je len formálna, ale predstavuje asi najhlbší súvis medzi klasickou a kvantovou mechanikou.⁶⁶

3.4 EHRENFESTOVE VETY

V klasickej mechanike platia pre jednu časticu, ktorá sa pohybuje vo vonkajšom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$, Newtonove rovnice

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (1a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (1b)$$

Ehrenfestove vety tvrdia, že v kvantovej mechanike platia rovnice (1) pre stredné hodnoty príslušných veličín

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{r}} = \frac{\bar{\mathbf{p}}}{m} \quad (2a)$$

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{p}} = -\overline{\nabla V(\mathbf{r})} \quad (2b)$$

Dokážeme teraz rovnicu (2a) pre súradnicu x . Podľa predchádzajúceho článku platí:

$$\frac{d}{dt} \bar{x} = \frac{1}{i\hbar} \overline{[\mathbf{x}H - H\mathbf{x}]} \quad (3)$$

Výraz v hranatej zátvorke je operátor. Aby sme ho upravili na prehľadnejší tvar, aplikujeme ho na ľubovoľnú funkciu $\varphi(\mathbf{r})$. Za H dosadíme známy výraz

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

a využijeme jednoduché vzťahy

$$\begin{aligned} xV(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})x &= 0 \\ x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 (x\varphi)}{\partial y^2} &= x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 (x\varphi)}{\partial z^2} = 0 \\ x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 (x\varphi)}{\partial x^2} &= -2 \frac{\partial \varphi}{\partial x} \end{aligned}$$

Dostaneme:

$$(\mathbf{x}H - H\mathbf{x})\varphi(x) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m} \mathbf{p}_x \varphi(x)$$

Pretože táto rovnica platí pre každú funkciu $\varphi(\mathbf{r})$, môžeme ju prepísať v operátorovom tvare ako

$$\frac{1}{i\hbar} (\mathbf{x}H - H\mathbf{x})\varphi(x) = \frac{\mathbf{p}_x}{m}$$

⁶⁶ Na podrobnejšie štúdium odporúčame IV. kap. Diracovej monografie [14].

Po dosadení (4) do (3) dostaneme rovnicu (2a) pre zložky x . Pri dokazovaní rovnice (2b) postupujeme analogicky.

Vyjdeme zo vzťahu (vyplývajúceho z článku 3.3)

$$\frac{d}{dt}(\bar{p}_x) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_x \mathbf{H} - \mathbf{H} \mathbf{p}_x] \quad (5)$$

Operátor v hranatej zátvorke aplikujeme potom na funkciu $\varphi(\mathbf{r})$ a postupne dostaneme:

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_x \mathbf{H} - \mathbf{H} \mathbf{p}_x] \varphi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_x V(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \mathbf{p}_x] \varphi(\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} [V(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})] + V(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x} \varphi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Odtiaľ vyplýva:

$$\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_x \mathbf{H} - \mathbf{H} \mathbf{p}_x] = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x}$$

a po dosadení do (5) dostaneme rovnicu (2b) pre p_x , čo sme chceli dokázať. Odvodenie vzťahov (2a) a (2b) pre zostávajúce zložky $\bar{\mathbf{r}}$ a $\bar{\mathbf{p}}$ je úplne identické s predchádzajúcim postupom a nebudeme ho uvádzať.

Fyzikálny význam Ehrenfestových viet je v nasledujúcom. Pre stredné hodnoty

$$\begin{aligned} \bar{x}(t) &= \int \varphi^*(\mathbf{r}, t) x \varphi(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} \\ \bar{p}_x(t) &= \int \varphi^*(\mathbf{r}, t) p_x \varphi(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} \end{aligned}$$

platia rovnice (2a) a (2b). Prvá z nich vraví, že časová zmena $\bar{x}(t)$ je rovná strednej hodnote hybnosti častice $\bar{p}_x(t)$ delenej m , čo odpovedá strednej hodnote rýchlosti. Pre časovú deriváciu strednej hodnoty hybnosti dostaneme podľa (2b)

$$\frac{d}{dt} \bar{p}_x(t) = \int \varphi^*(\mathbf{r}, t) (-\nabla V(\mathbf{r})) \varphi(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} \quad (7)$$

kde na pravej strane máme hodnotu x – zložky sily pôsobiacej na časticu. Takto Ehrenfestove vety ukazujú, že stredné hodnoty fyzikálnych veličín v kvantovej mechanike spĺňajú vzťahy, ktoré v klasickom prípade spĺňajú samotné fyzikálne veličiny. Tu vidíme dôvod, prečo naše jednoduché numerické (a zväčša iba rádové) odhady veličín v atómovej fyzike, ktoré sme robili v prvej kapitole, boli pomerne úspešné, hoci sme nepoužívali úplný kvantovomechanický aparát.⁶⁷

Pri Ehrenfestových vetách si ešte treba uvedomiť, že vzťahy ako (7) vravia iba o tom, ako sa správajú stredné hodnoty fyzikálnych veličín a nehovoria o tom, ako sa mení s časom tvar vlnového balíka priradeného stavu častice.

3.5 STACIONÁRNE STAVY

Spomedzi všetkých stavov sústavy význačné miesto z hľadiska časového vývoja zaujímajú vlastné stavy operátora energie⁶⁸ H . Označme vlnové funkcie prislúchajúce vlastným stavom H ako $\Phi_n(\mathbf{r})$. Platí teda (predpokladáme diskkrétne spektrum):

$$H \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Hľadáme teraz riešenia SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\mathbf{r}, t) = H \psi_n(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

ktoré spĺňajú začiatočné podmienky

$$\psi_n(\mathbf{r}, t = 0) = \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (3)$$

⁶⁷ Hlbší pohľad na súvis medzi kvantovou a klasickou mechanikou vidno z kváziklasického priblíženia k pohybovým rovniciam kvantovej mechaniky. Pozri napr. Davydov A. S.: Kvantová mechanika, SPN, Praha 1978.

⁶⁸ Predpokladáme, že H nezávisí explicitne od času.

Funkcia $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ je vzhľadom na premennú t riešením lineárnej diferenciálnej rovnice (2) prvého rádu. Preto je rovnicou (1) a začiatočnou podmienkou (3) určená jednoznačne. Ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \Phi_n(\mathbf{r})$$

je hľadaným riešením. Vidíme, že časová závislosť stacionárneho stavu (vlastného stavu H) je veľmi jednoduchá a pritom taká, že počas časového vývoja stacionárny stav ostáva vlastným stavom H prislúchajúcim tej istej hodnote E_n ako v čase $t = 0$. Skutočne, v každom čase t je splnený vzťah

$$H\psi_n(\mathbf{r}, t) = E_n\psi_n(\mathbf{r}, t)$$

Teda energia sústavy opísanej vlnovou funkciou $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ má stále „ostrú“ hodnotu rovnú E_n .

Platí aj opačné tvrdenie. Ak nejaký stav $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ má jednoduchú časovú závislosť danú vzťahom

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\mathbf{r})$$

a zároveň je riešením Schrödingerovej rovnice (2), potom $\Phi(\mathbf{r})$ je vlastným stavom hamiltoniánu. Skutočne, vlnová funkcia musí spĺňať SchR:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\mathbf{r}, t) &= H\psi_n(\mathbf{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\mathbf{r})) &= H(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\mathbf{r})) \\ Ee^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\mathbf{r}) &= H(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\mathbf{r})) \\ E\Phi(\mathbf{r}, t) &= H\Phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

teda $\Phi(\mathbf{r})$ je skutočne vlastným stavom Hamiltoniánu.⁶⁹

Pomocou stacionárnych stavov možno ľahko (formálne) nájsť časový vývoj ľubovoľného stavu, t. j. nájsť riešenie SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\mathbf{r}, t) = H\psi_n(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

spĺňajúce ľubovoľnú okrajovú podmienku

$$\psi_n(\mathbf{r}, t_0 = 0) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Ak predpokladáme, že stacionárne stavy $\Phi_n(\mathbf{r})$ tvoria úplný systém stavov, potom funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ môžeme rozložiť do radu

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (6)$$

kde koeficienty c_n sú dané vzťahom

$$c_n = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (7)$$

Časový vývoj stavu $\Phi(\mathbf{r})$ potom nájdeme pomocou princípu superpozície. Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že funkcia

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (8)$$

je hľadaným (pritom jednoznačným) riešením rovnice (4) so začiatočnou podmienkou (5).

⁶⁹ Tu vidíme dôvod, prečo sa nám v prvej kapitole podarilo nájsť možné diskkrétne hladiny sústav pomocou mechanickej analógie s harmonickými kmitmi, ktorých časová závislosť bola daná jedinou frekvenciou ω a bola tvaru $\exp(-i\omega t)$.

Pomocou rovníc (7) a (8) môžeme dostať ešte jedno veľmi dôležité vyjadrenie funkcie $\psi(\mathbf{r}, t)$ opisujúcej stavu sústavy v čase t pomocou stavu $\psi_n(\mathbf{r}, t_0 = 0) = \Phi(\mathbf{r})$. Ak do (8) dosadíme koeficienty c_n vyjadrené pomocou (7), dostaneme

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = i \int G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \psi_n(\mathbf{r}', t_0) d^3 \mathbf{r}' \quad (9)$$

kde sme označili

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{i} \sum_{n=0}^N \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n(t-t')/\hbar} \Theta(t-t') \quad (10)$$

Postupom medzi rovnicami (5) a (8) sme dokázali vzťahy (9), (10) pre špeciálny prípad $t_0 = 0$, ale zovšeobecnenie na situáciu, v ktorej je začiatková podmienka daná vzťahom $\psi_n(\mathbf{r}, t_0) = \Phi(\mathbf{r})$ pre $t_0 \neq 0$, nepredstavuje ťažkosti a prenecháme ho čitateľovi. Na pravej strane v rovnicach (9) a (10) sa objavuje faktor i , ktorý sa navzájom kompenzuje, jeho prítomnosť je len otázkou konvencie. Vo vzťahu (10) sa okrem toho, čo získame dosadením zo vzťahu (8) vyskytuje faktor $\Theta(t-t')$, čo je tzv. Θ -funkcia definovaná vzťahom

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{pre } t > t' \\ 0 & \text{pre } t \leq t' \end{cases} \quad (11)$$

Význam zavedenia Θ -funkcie do vzťahu (10) bude zrejmý až neskôr.

Fyzikálny význam (9) je zaujímavý. Ak si totiž predstavíme, že v čase t_0 je stav opísaný vlnovou funkciou lokalizovanou veľmi silne v okolí bodu \mathbf{r}_0 ; potom v čase t bude stav častice opísaný vlnovou funkciou $iG(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$. Takto je $iG(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ vlnou, ktorá vznikla z „bodového zdroja“ v čase t_0 v mieste \mathbf{r}_0 . Integrál v (9) nám hovorí, že vlnová funkcia v čase t je superpozíciou príspevkov od jednotlivých „bodových zdrojov“ v čase t_0 . V istom zmysle je vzťah (9) vyjadrením kvantovomechanického analógu Huygensovho princípu, známeho z optiky a všeobecne z teórie šírenia vlnových procesov. Výraz $iG(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ sa nazýva propagátorom, alebo Greenovou funkciou a jeho relativistické zovšeobecnenia hrajú veľmi dôležitú úlohu v kvantovej teórii polí, vo fyzike elementárnych častíc i v teórii tuhých látok. V tejto učebnici sa s propagátormi $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ ešte stretne v 16. kapitole.

3.6 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite hustotu prúdu pravdepodobnosti pre rovinnú vlnu normovanú na konečný objem.
2. Ukážte, že v stacionárnom stave je stredná hodnota veličiny reprezentovanej operátorom nezávislým explicitne od času, konštantná (t. j. nezávislá od času).
3. Častica sa pohybuje v poli opísanom potenciálom $V(\mathbf{r})$. V stacionárnom stave je časová derivácia strednej hodnoty ľubovoľnej, od času explicitne nezávislej veličiny nulová. Využite

$$\frac{d}{dt} \overline{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})} = 0 \quad (1)$$

a odvodte odtiaľ vzťah

$$2\bar{T} = \overline{(\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r}))} \quad (2)$$

kde \bar{T} označuje strednú hodnotu kinetickej energie častice. Ako môžeme prepísať (2), ak $V(\mathbf{r}) = Cr^n$?

4. Ukážte, že ak vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$, ktorá je riešením SchR, je vlastnou funkciou operátora \mathbf{A} v čase $t = t_0$ a operátor \mathbf{A} nezávisí explicitne od času a komutuje s hamiltoniánom, potom je $\psi(\mathbf{r}, t)$ vlastnou funkciou operátora \mathbf{A} v ľubovoľnom čase a príslušná vlastná hodnota sa s časom nemení.

4 JEDNODUCHÉ SÚSTAVY

4.1 ÚVOD

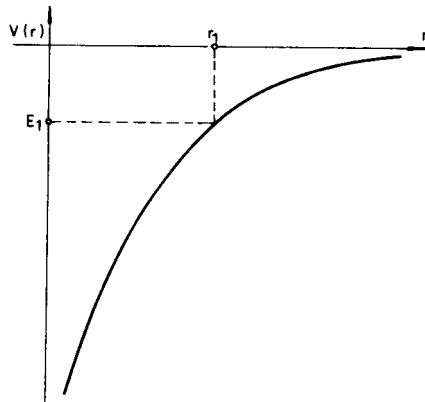
V predchádzajúcich kapitolách sme videli, že spomedzi možných stavov fyzikálnej sústavy majú význačnú úlohu vlastné stavy operátora energie. V tejto kapitole sa preto budeme zaoberať riešeniami bezčasovej Schrödingerovej rovnice pre niekoľko jednoduchých jednočasticových sústav. Niektoré z týchto sústav sú samé osebe veľmi dôležité (napr. atóm vodíka či lineárny harmonický oscilátor), iné sú užitočným priblížením úloh, ktoré sa vyskytujú v praxi (častica v potenciálovej jame, prechod cez pravouhlú bariéru). Všetky tieto príklady budú slúžiť ako ilustrácia „remesla“, t. j. metód a techník používaných pri riešení zložitejších problémov. Znalosť „remesla“ je veľmi dôležitá, pretože fyzik predsa len trochu „myslí rukou“ práve tak, ako maliar, či sochár a bez praktickej skúsenosti s riešením úloh a problémov sotva možno skutočne rozumieť fyzikálnej teórii.

4.2 VIAZANÉ A ROZPTYLOVÉ STAVY

Riešenia bezčasovej SchR

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

môžeme rozdeliť do dvoch skupín. Prvá z nich odpovedá viazaným, druhá *rozptylovým stavom*.



Obr. 4.1

Tento rozdiel vystupuje aj v klasickej mechanike. Uvažujme napríklad klasický pohyb telesa v silovom poli s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ (obr. 4.1). (Názorne si môžeme predstaviť napríklad pohyb telies v centrálnom gravitačnom poli Slnka). Potenciálna energia je všade záporná a pre $r \rightarrow \infty$ máme $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$. Pre viazané stavy, alebo ako sa v klasickej mechanike hovorí, pre finitný pohyb, je celková energia E telesa záporná $E < 0$. Takéto teleso sa pri svojom pohybe nemôže vzdialiť od začiatku do ľubovoľnej vzdialenosti. V každom bode dráhy telesa totiž platí

$$E = E_{\text{kin}} + V(\mathbf{r}) < 0$$

a teleso sa nemôže dostať do tých oblastí v priestore, ktoré by zodpovedali zápornej kinetickej energii. Na obr. 4.1 je znázornená vzdialenosť r_1 , za ktorú sa teleso s energiou $E_1 < 0$ už nemôže dostať. V prípade rozptylového stavu, v klasickej mechanike častejšie nazývanom infinitným pohybom, je celková energia

$E > 0$, t. j. väčšia ako hodnota $V(\mathbf{r})$ pre $r \rightarrow \infty$. Takéto teleso sa môže vzdialiť ľubovoľne ďaleko od silového centra.

V kvantovej mechanike nemožno použiť predchádzajúcu argumentáciu bez zmeny, pretože pojem trajektórie sa nedá aplikovať na kvantovomechanický pohyb častíc. Napriek tomu i v kvantovej mechanike ostáva kvalitatívny rozdiel medzi viazanými a rozptylovými stavmi. Viazanými stavmi v kvantovej mechanike nazývame riešenia bezčasovej SchR (1), zodpovedajúce energii $E < V(r \rightarrow \infty)$, rozptylovými stavmi nazývame riešenia zodpovedajúce $E > V(r \rightarrow \infty)$.

Na základe analógie s klasickým prípadom očakávame, že stacionárny viazaný stav v určitom zmysle zodpovedá finitnému pohybu, preto pre takýto stav možno požadovať splnenie normovacej podmienky

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = 1 \quad (2)$$

ktorá hovorí, že pravdepodobnosť nájsť časticu kdekoľvek v priestore sa rovná jednej.

Viazané stavy okrem (definičnej) podmienky $E < V(r \rightarrow \infty)$ spĺňajú i ďalšiu podmienku

$$E > \min V(\mathbf{r}) \quad (3)$$

Energia viazaného stavu je teda vždy väčšia ako minimum potenciálnej energie. Tvrdenie dokážeme ľahko. Nech $\psi(\mathbf{r}, t)$ je normované riešenie SchR

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

Násobme túto rovnicu funkciou $\psi^*(\mathbf{r})$ a integrujme cez celý priestor. Pri úprave prvého člena využijeme to, že $\hat{\mathbf{p}}$ je hermitovský operátor a dostaneme

$$\frac{1}{2m} \int \{ |\mathbf{p}_x \psi|^2 + |\mathbf{p}_y \psi|^2 + |\mathbf{p}_z \psi|^2 \} d^3\mathbf{r} + \int \psi^* V(\mathbf{r}) \psi d^3\mathbf{r} = E$$

keď sme zobrali do úvahy normovanosť funkcie ψ . Prvý člen na ľavej strane je zrejme kladný, druhý je väčší ako minimum potenciálnej energie $V(\mathbf{r})$. Odtiaľ vyplýva vzťah (3).

Pri opise rozptylových stavov sa stretáme s obdobnými ťažkosťami ako v prípade vlnovej funkcie voľnej častice, ktorý sme diskutovali v článku 2.2. Aj tu môžeme postupovať dvoma spôsobmi. Pri prvom spôsobe sa obmedzíme na veľký, no konečný, objem priestoru a rozptylové stavy hľadáme ako superpozície rovinných vln, normovaných na konečný objem (2.2.5).

Pri druhom spôsobe pracujeme s nekonečným objemom, potom ale rozptylovým stavom zodpovedajú obvyklým spôsobom nenormovateľné vlnové funkcie. Znamená to, že takéto vlastné funkcie operátora energie nezodpovedajú realizovateľným stavom. Stacionárne rozptylové stavy nezodpovedajú teda možným stavom reálnej fyzikálnej sústavy. Napriek tomu je užitočné po formálnej stránke skúmať ich vlastnosti, pretože reálne rozptylové stavy (vlnové balíky) možno vyjadriť ako ich superpozíciu. Často možno pomocou jednoduchého formalizmu stacionárnych stavov nájsť intuitívnym spôsobom riešenie nejakého dynamického problému, ktorý by sme pri rigoróznom postupe museli riešiť pomerne komplikovane vo formalizme vlnových balíkov pomocou časovej Schrödingerovej rovnice. S takýmto prípadom sa stretáme v tejto kapitole pri diskusii o tunelovom jave a neskôr v teórii rozptylu.

4.3 NIEKTORÉ VLASTNOSTI RIEŠENÍ BEZČASOVEJ SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICE

Potenciálna energia v reálne postavenej fyzikálnej úlohe je vždy spojitou funkciou priestorových súradníc. Často však pre zjednodušenie matematickej stránky úlohy je užitočné aproximovať potenciál nespojitou funkciou. Ako príklad možno uviesť potenciál jadrových síl, ktoré sú veľké v oblasti rádovo 10^{-15} m, a potom rýchlo klesajú k nule. Na obr. 4.2 je znázornený schematický priebeh takejto potenciálnej energie (spojitá čiara) aj s nespojitou aproximáciou (prerušovaná čiara). Podobne možno v prvom priblížení považovať potenciálnu energiu elektrónu viazaného v kove za nespojitú. Pre elektrón vnútri kovu potenciálna energia má konštantnú hodnotu V_1 a mimo kovu tiež konštantnú hodnotu V_2 .

V tomto článku sa budeme zaoberať s nasledujúcimi otázkami:

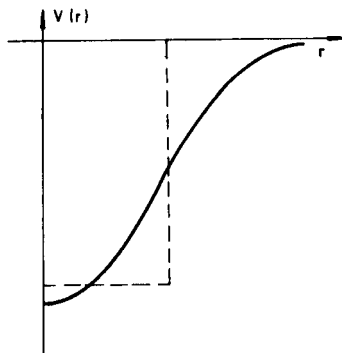
- ako sa správa riešenie jednorozmernej bezčasovej SchR v okolí bodu, kde je potenciálna energia nespojitá?
- ak $\psi(x)$ je riešením jednorozmernej bezčasovej SchR, aké podmienky pre $\psi(x)$ pri $x \rightarrow \pm\infty$ vyplývajú z požiadavky

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (1)$$

- ak $\psi(\mathbf{r})$ je riešením trojrozmernej bezčasovej SchR, aké podmienky pre správanie $\psi(\mathbf{r})$ pri $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ a pri $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$ vyplývajú z požiadavky

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \quad (2)$$

(integrujeme cez celý priestor)?



Obr. 4.2

Začneme teda s tým, ako sa správa riešenie jednorozmernej bezčasovej SchR v okolí bodu, kde je potenciálna energia nespojitá.

Jednorozmernú bezčasovú SchR

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

možno prepísať na tvar

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) \quad (4)$$

Ak $V(x)$ je spojitou funkciou, tak podľa rovnice (4) existuje pre každé x konečná druhá derivácia $\psi''(x)$. Preto $\psi'(x)$ a $V(x)$ budú spojité v každom bode skúmaného intervalu. Ak potenciál $V(x)$ má nespojitosť v bode x_0 (pozri bod *a* na obr. 4.3) potom by bolo potrebné presnejšie špecifikovať⁷⁰) ako chápeme rovnicu (4) v bode nespojitosti potenciálnej energie. Fyzikálne však máme na mysli zhruba toto: Potenciálnu energiu $V(x)$ si predstavíme ako limitu postupností $V_n(x)$ dostatočne hladkých funkcií a hľadanú funkciu $\psi(x)$ ako limitu postupností riešení $\psi_n(x)$ príslušných k jednotlivým $V_n(x)$. Naznačíme teraz, ako by sa postupovalo pri dôkaze toho, že $\psi(x)$ je spojitá i so svojou prvou deriváciou v prípade, že $V(x)$ je v okolí bodu x_0 ohraničená a teda aj skok $V(x)$ je konečný. Integráciou rovnice (4) dostaneme pre funkciu $\psi_n(x)$

$$\psi'_n(x_0 + \varepsilon) - \psi'_n(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [V(x) - E]\psi_n(x) dx \quad (5)$$

Ak $\psi(x)$ je ohraničená, potom vo výraze (5) môžeme urobiť najprv limitu $n \rightarrow \infty$, potom limitu

⁷⁰ Ak rovnicu (4) chápeme v zmysle zovšeobecnených funkcií a derivácií, potom dôkaz spojitosti $\psi'(x)$ je jednoduchý. Ak by $\psi'(x)$ mala v bode x_0 nespojitosť, potom na ľavej strane rovnice (4) by bola singularita typu δ -funkcie, kým pravá strana takúto singularitu nemá.

$\varepsilon \rightarrow 0$. Na pravej strane dostaneme nulu, preto $\psi'(x)$ musí byť v bode x_0 spojitá. Tým skôr bude spojitá aj funkcia $\psi(x)$.

Uvedený argument neplatí, ak skok $V(x)$ v bode x_0 je nekonečne veľký. Vtedy $\psi(x)$ v bode x_0 nemusí byť spojitá, ale dá sa ukázať, že $\psi(x)$ zostane spojitou.

Budeme preto vždy požadovať, aby pri nespojitom $V(x)$ v prípade konečného „skoku“ v bode x_0 bola spojitá samotná vlnová funkcia $\psi(x)$ aj jej prvá derivácia $\psi'(x)$. Pri nekonečnom „skoku“ budeme žiadať len spojitosť vlnovej funkcie.

Podmienka normovateľnosti (1) kladie určité obmedzenia na správanie vlnovej funkcie v oblastiach $x \rightarrow \infty$, $x \rightarrow -\infty$. Ak žiadame, aby integrál v rovnici (1) konvergoval, tak, ako sa možno ľahko presvedčiť, $\psi(x)$ musí spĺňať podmienku

$$x|\psi(x)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |x| \rightarrow \pm\infty \quad (6)$$

V trojrozmernom prípade normovacia podmienka (2) vyžaduje

$$r^3|\psi(r)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |r| \rightarrow \infty \quad (7a)$$

$$r^3|\psi(r)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |r| \rightarrow 0 \quad (7b)$$

4.4 JEDNOROZMERNÁ POTENCIÁLOVÁ JAMA

Budeme hľadať stacionárne stavy častice pohybujúcej sa v poli s potenciálnou energiou

$$V(x) \begin{cases} 0 & \text{pre} \quad |x| > a \\ -V_0 < 0 & \text{pre} \quad |x| \leq a \end{cases} \quad (1)$$

Ak sa zaujíname o viazané stavy, musíme riešiť SchR, ktorá má tvar

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

pričom hodnoty energie spĺňajú nerovnosti (článok 4.2)

$$E < V(x \rightarrow \pm\infty) = 0 \quad (3)$$

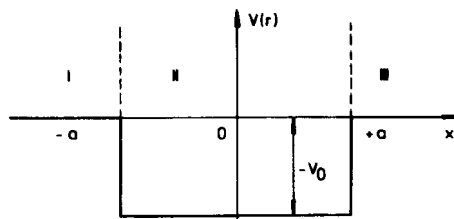
$$E > -V_0 = \min V(x) \quad (4)$$

Podľa článku 4.3 požadujeme pri riešení rovnice (2) s potenciálnou energiou (1) spojitosť $\psi(x)$ a $d\psi/dx$ v celom intervale $(-\infty, +\infty)$. Rozdelíme tento interval na tri časti: $(-\infty, -a)$, $(-a, a)$, $(a, +\infty)$ a očísľujeme ich postupne ako I, II a III. Intervaly spolu s tvarom $V(x)$ sú vyznačené na obr. 4.3. V oblastiach I a III má SchR tvar

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta^2\psi(x) = 0, \quad \beta^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E > 0 \quad (5)$$

v oblasti II:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha^2\psi(x) = 0, \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E) > 0 \quad (6)$$



Obr. 4.3

Riešenia týchto rovníc sú :

$$\psi_I(x) = D e^{\beta x} + D' e^{-\beta x}$$

$$\psi_{II}(x) = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x \quad (7)$$

$$\psi_{III}(x) = C e^{-\beta x} + C' e^{\beta x}$$

Funkcia $\psi_{III}(x)$ musí reprezentovať normovateľné riešenie SchR v oblasti (a, ∞) . Ak $C' \neq 0$, tak $\psi_{III}(x) \rightarrow \infty$ pre $x \rightarrow \infty$ a riešenie nemožno normovať (príslušný integrál by divergoval). Preto musíme žiadať, aby sa $C' = 0$. Z toho istého dôvodu $D' = 0$. Položme teda $C' = D' = 0$.

Z podmienok spojitosti vlnovej funkcie $\psi(x)$ a jej prvej derivácie $d\psi/dx$ v bodoch $x = -a$ a $x = a$ možno odvodiť dve dvojice rovníc

$$2A \sin \alpha a = (C - D) e^{-\beta a} \quad (8)$$

$$2\alpha A \cos \alpha a = -\beta(C - D) e^{-\beta a} \quad (8')$$

$$2B \cos \alpha a = (C + D) e^{-\beta a} \quad (9)$$

$$2\alpha B \sin \alpha a = \beta(C + D) e^{-\beta a} \quad (9')$$

Z posledných rovníc vidieť, že existujú dva typy riešení:

1. Keď $A = 0$ a $C = D$. Rovnice (8) a (8') sú splnené identicky a rovnice (9) a (9') možno splniť len vtedy, ak platí:

$$a \operatorname{tg} \alpha a = \beta \quad (10)$$

2. Keď $B = 0$ a $C = -D$; rovnice (9) a (9') sú splnené identicky a rovnice (8) a (8') možno splniť len vtedy, ak platí:

$$a \operatorname{cotg} \alpha a = -\beta \quad (11)$$

Všimnime si najprv riešenie typu 1, t. j. pokúsme sa vyriešiť rovnicu (10). Ide zrejme o transcendentnú rovnicu, ktorá sa najjednoduchšie rieši graficky. Položme:

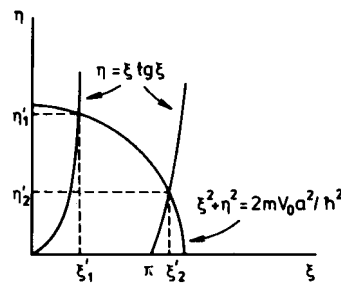
$$\xi = \alpha a, \quad \eta = \beta a \quad (12)$$

Z vyjadrení α a β v rovniciach (5) a (6) vyplýva

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \equiv R^2 \quad (12')$$

a z rovnice (10) dostaneme:

$$\xi \operatorname{tg} \xi = \eta \quad (13)$$



Obr. 4.4

Na obr. 4.4 sú znázornené krivky určené rovnicami (12') a (13). Sústava kriviek (13) je pevná a nezávisí od parametrov potenciálnej energie V_0 , a . Polomer kružnice (12') je daný parametrami potenciálnej energie

$$R^2 = \frac{V_0}{\hbar^2} \frac{2ma^2}{2ma^2} \quad (14)$$

Každému priesečníku kružnice (12') so sústavou kriviek (14) odpovedá určité riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice (2). V situácii znázornenej na obr. 4.4 máme dve riešenia typu 1, odpovedajúce priesečníkom (ξ'_1, η_1) , (ξ'_2, η_2) . Diskrétnym hodnotám η_n odpovedajú podľa (5) a (12) diskkrétne hodnoty E_n

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta_n^2 \quad (15)$$

Len pri týchto hodnotách energie má bezčasová Schrödingerova rovnica (2) riešenie. K diskrétnym hodnotám energie by sme prišli aj pri podrobnejšom overovaní riešení typu 2 (toto prenecháme čitateľovi).⁷¹

Pri pohľade na výsledky riešení typu 1 vznikajú hneď dve fyzikálne otázky: a) Prečo je mierou počtu viazaných stavov práve parameter R ? b) Prečo pri každej, teda aj krátkej (malé a) a plynkej (malé V_0) potenciálovej jame typu (1) existuje aspoň jeden viazaný stav? Začneme s prvou otázkou. Odpoveď na ňu je naznačená už tvarom, v ktorom sme zapísali R^2 v (14). V čitateli máme veľkosť potenciálnej energie, v menovateli máme kinetickú energiu častice, ktorej vlnová funkcia má neurčitost' v polohe rovnú rádové rozmeru jamy. Skutočne, ak položíme $x^2 \approx a^2$, máme zo vzťahu neurčitosti $p^2 \approx (p - \bar{p})^2 \approx (\Delta p)^2 \approx \hbar^2/a^2$ a príslušná kinetická energia sa rovná menovateli v (14).

Parameter R^2 takto udáva pomer potenciálnej a kinetickej energie častice, ktorej vlnová funkcia je veľká práve v „jame“. Ak je R^2 malé, potenciálová jama viaže časticu slabo, ak je R^2 veľké, bude častica viazaná silnejšie a môže vzniknúť viac viazaných stavov.

Prejdime teraz ku kvalitatívnej odpovedi na otázku (b). Uvažujme vlnovú funkciu $\psi(x)$, ktorá je veľká v intervale $(-L, L)$ a malá mimo neho. Vnútri tohto intervalu, vďaka podmienke normovania vlnovej funkcie, platí $|\psi(x)|^2 \approx 1/(2L)$. Stredná hodnota potenciálnej energie v takomto stave je

$$E_{\text{pot}}(L) \approx \int |\psi(x)|^2 V(x) dx \approx -V_0 \frac{a}{L} \quad \text{pre } L > a \quad (16)$$

$$\approx -V_0 \quad \text{pre } L \leq a$$

Stredná hodnota kinetickej energie bude podľa vzťahu neurčitosti

$$E_{\text{kin}}(L) \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

a pre celkovú energiu máme

$$E(L) \approx -V_0 \frac{a}{L} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{pre } L > a \quad (17a)$$

$$\approx -V_0 \frac{a}{L} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{pre } L \leq a \quad (17b)$$

Pre dostatočne veľké L je pravá strana v (17a) záporná a pre dostatočne malé L je pravá strana v (17b) určite kladná. Funkcia $E(L)$ má preto minimum pri nejakej hodnote $L = L_0$ a pri tomto minime je $E(L_0) < 0$.

Pravá strana (17a) má minimum pri

$$L = L_0 = \frac{\hbar^2}{mV_0 a} = \frac{2}{R} a$$

a ľahko sa presvedčíme o tom, že pri malom R je to skutočné minimum funkcie $E(L)$. Príslušná hodnota energie pri $L = L_0$ je

$$E(L_0) = -R^2 V_0 \quad (18)$$

kde R^2 je dané vzťahom (14). Tento výsledok je teda kvalitatívnym a rádovým odhadom energie základného stavu pre jednorozmernú potenciálovú jamu.

⁷¹ Podrobnejšiu analýzu viazaných stavov na potenciálovej jame (1) možno nájsť v učebnici Formánek J.: Úvod do kvantové teorie, časť I, Academia, Praha 1983.

Porovnajme teraz kvalitatívny odhad (18) s tým, čo by sme dostali z presného riešenia pri $R \ll 1$. Pre toto presné riešenie platia rovnice (12') a (13). Z (12') a z obr. 4.4 vidno, že pri malom R budú aj ξ , η malé. Pre $\xi \ll 1$ platí $\text{tg } \xi \approx \xi$ a namiesto (13) máme $\eta \approx \xi^2$. Ak toto dosadíme do (12'), dostaneme $\xi^2 + \xi^4 = R^2$. Pri malom ξ odiaľ plynie $\xi^2 \approx \eta \approx R^2$ a po dosadení do (15) nájdeme pre základný stav

$$E_1 \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\eta^2 = -\frac{\hbar^2}{ma^2}R^4$$

Po malej úprave dostaneme

$$E_1 = -V_0 R^2$$

Čo je identické so vzťahom (18), získaným kvalitatívnym odhadom.

Kvalitatívna analýza jasne ukazuje, prečo vzniká viazaný stav aj na plytkej a krátkej jame. Ak postupne zväčšujeme rozmer L vlnovej funkcie $\psi(x)$, potom stredná hodnota potenciálnej energie (prvý člen na pravej strane (17a)) klesá ako L^{-1} zatiaľ čo kinetická energia klesá ako L^{-2} . Pri istej hodnote L musí byť celková energia záporná. Tieto skutočnosti vyplývajú zo vzťahu neurčitosti a pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie.

Všimnime si, že riešenia typu 1 spĺňajú podmienku $\psi(x) = \psi(-x)$ a riešenia typu 2 podmienku $\psi(x) = -\psi(-x)$. V prvom prípade hovoríme o riešeniach s kladnou, v druhom so zápornou priestorovou paritou. Existencia riešení s určitou paritou je dôsledkom symetrie potenciálnej energie $V(x)$, pre ktorú platí $V(x) = V(-x)$. S otázkami symetrie riešení SchR sa budeme ešte zaoberať ďalej.

Typické rozdiely medzi kvantovou a klasickou mechanikou pri opise viazaných stavov. Podľa zákonov klasickej mechaniky by sa častica s energiou $E < 0$ nemohla dostať von z potenciálovej jamy na obr. 4.3. V kvantovej mechanike pravdepodobnosť výskytu častice aj v týchto „klasicky zakázaných“ oblastiach je konečná. „Presakovanie“ do oblasti, kde $V(x) > E$, je typickým kvantovomechanickým javom a má mnohé vážne dôsledky (tunelový jav). V uvažovanom prípade potenciálovej jamy vlnová funkcia v oblasti $|x| > a$ klesá exponenciálne k nule:

$$\psi(x) \sim e^{-\beta|x|}, \quad \beta = (-2mE/\hbar^2)^{1/2} \quad (19)$$

Celkom analogickým postupom sa možno presvedčiť o tom, že pre potenciál

$$\begin{aligned} \bar{V}(x) &= 0 & \text{pre } |x| < a \\ \bar{V}(x) &= V_0 & \text{pre } |x| > a \end{aligned} \quad (20)$$

sa v oblasti $|x| > a$ budú riešenia správať ako

$$\psi(x) \sim e^{-\gamma|x|}, \quad \gamma = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \quad (21)$$

Mechanizmus kvantovania

Po matematickej stránke je jednorozmerná jama naozaj jednoduchý problém, ale aj tu by sa mohlo stať, že matematika trocha zatemní základný mechanizmus, ktorým prichádzame k diskretným stacionárnym stavom a tým i ku kvantovaniu energie. Pozrime sa na tento problém ešte raz a predstavme si, že sme ho skúsili riešiť veľmi hlúpu metódou na počítači (aj hlúpe metódy môžu byť poučné). Metóda by spočívala v nasledujúcom. Zvolili by sme si určitú hodnotu energie E z intervalu $-V_0 < E < 0$ a spočítali by sme podľa (5) príslušnú hodnotu parametra β . Teraz by sme sa pozreli na tvar riešenie v oblasti I, daný vzťahom (7) a položili by sme $D' = 0$, aby sme v oblasti I, t. j. pre $x < -a$ mali normovateľnú vlnovú funkciu. Takto by sme v oblasti I mali riešenie

$$\psi_1(x) \sim De^{\beta x} \quad (22)$$

a pre začiatok by sme mohli položiť $D = 1$ s tým, že po skončení výpočtu by sme celú funkciu násobili ešte konštantnou vybranou tak, aby riešenie $\psi(x)$ bolo správne normované. S týmto riešením by sme

postupovali od x ďaleko naľavo na číselnej osi smerom k bodu $x = -a$. Tam by sme riešenie (22) „zošili“ s oscilujúcim riešením

$$\psi_{II}(x) = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x \quad (23)$$

pričom zo spojitosti $\psi(x)$, $\psi'(x)$ v bode $x = -a$ by sme určili hodnoty A , B (parameter a je daný vzťahom (6)). Počítač by postupoval ďalej doprava, až by prišiel k bodu $x = a$, kde by zas „zošil“ (23) s výrazom typu

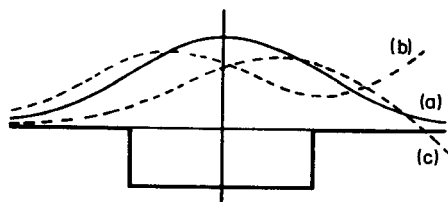
$$\psi_{III}(x) = C e^{-\beta x} + C' e^{\beta x} \quad (24)$$

Podstatné je tu to, že parametre C , C' závisia (pri $D = 1$) iba od energie a sú jednoznačne určené „zošivacími“ podmienkami. Pri náhodne zvolenom E , s ktorým počítame, je nanajvýš pravdepodobné, že dostaneme $C \neq 0$, $C' \neq 0$, ale to znamená, že získané riešenie nie je možné normovať, lebo časť $C' \exp(\beta x)$ v (24) exponenciálne „vybuchuje“ pre $x \rightarrow \infty$. Postupne by sme mohli vybrať iné hodnoty E , zopakovať celý postup znova a dúfať, že niekedy „trafíme“ do správnej hodnoty E , pri ktorej bude $C' = 0$, a dostaneme normovateľné riešenie bezčasovej SchR.

Dva neúspešné (b, c) a jeden úspešný pokus (a) sú znázornené na obr. 4.5. Vidno teda, že výber stacionárnych stavov je daný sčasti samotnou Schrödingerovou rovnicou a sčasti podmienkami

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow 0 && \text{pre } x \rightarrow -\infty \\ \psi(x) &\rightarrow 0 && \text{pre } x \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (25)$$

ktoré zaisťujú normovateľnosť funkcie. Keby sme nepožadovali splnenie (25), mala by bezčasová Schrödingerova rovnica (2) riešenie pri ľubovoľnej hodnote parametru E . Takéto riešenia by však určite nezodpovedali častici viazanej vnútri jamy, čo vidno najjednoduchšie z toho, ak si nakreslíme hustotu pravdepodobnosti $|\psi(x)|^2$ pre riešenie odpovedajúce (b), (c) na obr. 4.5. Navyše, z takýchto riešení sa ani superpozíciou nedá vytvoriť normovateľný vlnový balík, čím sa odlišujú napríklad od riešení zodpovedajúcich rozptylovým stavom, ktoré samotné tiež nie sú normovateľné, ale superpozíciou môžu vytvoriť realistický vlnový balík.



Obr. 4.5

Príklady, s ktorými sa stretne v nasledujúcich článkoch, sú síce zložitejšie, ale túto vlastnosť majú spoločnú s jednorozmernou jamou. V prípade jamy existovali dva „nebezpečné body“⁷² a síce $x \rightarrow \infty$, $x \rightarrow -\infty$. Nebezpečné boli preto, že v ich okolí existuje jedno „dobré“ riešenie typu $\exp\{-\beta|x|\}$ a jedno „zlé“ riešenie typu $\exp\{\beta|x|\}$. Ak má mať výsledná funkcia $\psi(x)$ fyzikálny zmysel, potom koeficienty pred zlým riešením v oboch „nebezpečných“ bodoch musia byť nulové. Tieto podmienky sú práve tým, čo vyberá len diskretnú množinu stacionárnych stavov, teda tým, čo „kvantuje“ energiu.

4.5 NEKONEČNE HLBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JAMA

V tejto učebnici sme sa už dvakrát zaoberali s prípadom častice v nekonečne hlbkej potenciálovej jame, prvýkrát pri kvalitatívnej diskusii stacionárnych stavov v kap. 1 a druhýkrát v článku 2.6. V článku 2.6 sme riešili bezčasovú SchR pre voľnú časticu na intervale $0 \leq x \leq L$ a ako okrajové podmienky pre riešenia sme žiadali $\psi(x) = \psi(L) = 0$. Teraz nebudeme tento príklad riešiť znova, ale všimneme si iba pôvod týchto okrajových podmienok.

⁷² V ďalších článkoch sa „nebezpečné“ body nazývajú singulárnymi bodmi.

Nekonečne hlbokú potenciálovú jamu môžeme chápať ako užitočné priblíženie pre energie a vlnové funkcie stacionárnych stavov nachádzajúcich sa „blízko dna“ jamy. Presnejšie to môžeme sformulovať takto. Predstavme si časticu pohybujúcu sa po priamke v poli síl opísaných potenciálnou energiou

$$V(x) = V_0 \quad \text{pre } x < 0 \quad (\text{I})$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pre } 0 \leq x \leq L \quad (\text{II})$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pre } x > L \quad (\text{III})$$

Podobne ako v predchádzajúcom článku sa ľahko presvedčíme o tom, že vlnové funkcie stacionárnych stavov v oblasti (I) a (III) majú tvar

$$\psi_{\text{I}}(x) = D \exp \{-\beta|x|\}$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = C \exp \{-\beta|x|\}$$

kde

$$\beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right]^{1/2}$$

Ak V_0 je veľmi veľké, potom $\psi_{\text{I}}(x)$ a $\psi_{\text{III}}(x)$ veľmi rýchlo klesajú s tým, ako sa vzdiaľujeme od jamy. V limite $V_0 \rightarrow \infty$ prichádzame k situácii, keď

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } x \text{ mimo jamy}$$

Z hľadiska pohybu častice vnútri jamy to ale znamená, že

$$\psi_{\text{I}}(x) \rightarrow 0 \quad \psi_{\text{III}}(L) \rightarrow 0$$

a toto sú okrajové podmienky, ktoré sme používali v článku 2.6.

Nie je prekvapujúce, že tieto podmienky vedú ku kvantovaniu energie, lebo sú to vlastne dôsledky okrajových podmienok, ktoré sme používali v prípade konečnej jamy, po limite $V_0 \rightarrow \infty$.

Vlastné hodnoty operátora energie a vlnové funkcie príslušné k týmto hodnotám boli už uvedené v článku 2.6 a tu ich nebudeme opakovat'.

4.6 LINEÁRNY HARMONICKÝ OSCILÁTOR

Matematický opis lineárneho harmonického oscilátora je pomerne jednoduchý a oblasť aplikácií neobyčajne široká. Pri lineárnom harmonickom oscilátore je sila F priamo úmerná výchylke x a má opačný smer. Platí $F = -kx$. Pretože $F = -dV/dx$, potenciálna energia $V(x)$ je daná výrazom $V(x) = kx^2/2$. Konštantu k je užitočné zapísať v tvare $m\omega_0^2$, kde m je hmotnosť a ω_0 je (vlastná) kruhová frekvencia oscilátora. Ak takéto $V(x)$ dosadíme do bezčasovej SchR, dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

Pretože $\min V(x) = 0$, rovnica (1) bude mať len riešenia s $E > 0$. Pre $x \rightarrow +\infty$ platí $V(x) \rightarrow \infty$ a všetky riešenia (1) budú mať charakter viazaných stavov. Preto budeme v ďalšom považovať za fyzikálne prijateľné len normovateľné riešenia, ktoré zrejme musia spĺňať podmienku

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0 \quad (2)$$

Namiesto premennej x je užitočné zaviesť bezrozmernú premennú

$$\xi = \frac{x}{x_0} \quad x_0 = \left[\frac{\hbar}{m\omega_0} \right]^{1/2}$$

v ktorej (1) nadobudne tvar

$$\psi''(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad \lambda = 2E/(\hbar\omega_0) \quad (4)$$

Diferenciálna rovnica (4) patrí k typu, ktorý sa často vyskytuje v úlohách matematickej fyziky. Ide o lineárnu homogénnu diferenciálnu rovnicu druhého rádu s premennými koeficientmi.

Pre rovnice tohto typu existuje postup riešenia, spočívajúci v podstate v tom, že najprv hľadáme tvar riešenia v okolí *singulárnych bodov*.⁷³ Túto časť riešenia možno oddeliť v multiplikatívnom tvare a zvyšnú časť riešenia hľadáme v tvare mocninového radu premennej x (alebo $(x - a)$, kde a je vhodne zvolená konštanta). Koeficienty pri jednotlivých mocninách daného mocninového radu určíme priamo z diferenciálnej rovnice. Skúmame najprv riešenie rovnice (4) pre veľké ξ . Nebudeme hľadať presné riešenie, ale len asymptotické riešenie. Pri tomto riešení sa zaujíname len o hlavný člen skutočného riešenia, čiže napr. v okolí bodu $\xi = \infty$ zanedbáme $1/\xi$ voči 1, ξ voči ξ^2 a pod. V tomto zmysle môžeme pre veľké ξ zanedbať λ voči ξ^2 a prepísať rovnicu (4) na tvar

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) = 0 \quad (5)$$

Asymptotickým riešením rovnice (5) je funkcia

$$\psi(\xi) = c_1 e^{-\xi^2/2} + c_2 e^{+\xi^2/2} \quad (6)$$

Skutočne, po dosadení do (5) dostaneme

$$\psi''(\xi) = \xi^2(c_1 e^{-\xi^2/2} + c_2 e^{+\xi^2/2}) + (c_2 e^{+\xi^2/2} - c_1 e^{-\xi^2/2}) \quad (7)$$

Druhý člen vpravo je pre veľké ξ zanedbateľný v predtým uvedenom zmysle voči prvému, a tak (6) je asymptotickým riešením rovnice (5). V dôsledku (2) musíme v rovnici (6) položiť $c_2 = 0$. Podľa naznačenej schémy riešenia oddelíme asymptotické riešenie $\exp(-\xi^2/2)$ a hľadáme (tentokrát už presné) riešenie rovnice (4) v tvare

$$\psi(\xi) = \nu(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \nu(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

Po dosadení (8) do (4) dostaneme pre $\nu(\xi)$ diferenciálnu rovnicu

$$\nu''(\xi) - 2\xi \nu'(\xi) + (\lambda - 1) \nu(\xi) = 0 \quad (9)$$

Ak teraz dosadíme rozvoj pre $\nu(\xi)$ do rovnice (9) a porovnáme koeficienty pri jednotlivých mocninách ξ , dostaneme rekurentný vzťah

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (10)$$

Podľa (10) rad pre $\nu(\xi)$ môže patriť do jedného z troch (a len týchto) typov:

1. $a_0 \neq 0$, $a_1 = 0$, $\lambda = 2k + 1$, k je prirodzené a párne. V tomto prípade $\nu(\xi)$ je polynóm stupňa k , obsahujúci len párne mocniny ξ .

2. $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$, $\lambda = 2k + 1$, k je prirodzené a nepárne, $\nu(\xi)$ je opäť polynóm stupňa k , ktorý obsahuje len nepárne mocniny ξ .

3. Rad pre $\nu(\xi)$ obsahuje nekonečne mnoho nenulových koeficientov a_n . Na konci tejto časti ukážeme, že riešenia takéhoto typu sú neprípustné, lebo nespĺňajú normovacia podmienku.

Všimnime si bližšie hodnoty energie, ktoré zodpovedajú fyzikálne prípustným riešeniam 1. a 2. typu. V oboch prípadoch platí:

$$\lambda = 2k + 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Podľa (4) dostaneme odtiaľ prípustné hodnoty energie pre lineárny harmonický oscilátor

$$E_k = \hbar \omega \left(k + \frac{1}{2} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

⁷³ Tento postup je len o trochu komplikovanejší ako ten, ktorý sme používali v predchádzajúcom článku. Singulárne body sú „nebezpečné body“, teda také, v okolí ktorých môžeme dostať nenormovateľné tvary riešenia. Ako bude vidno hneď v rovnici (6), aj tu existujú v okolí singulárnych bodov dva typy riešení a podmienka normovateľnosti vyžaduje, aby koeficient pri „zlom“ riešení bol nulový ($c_2 = 0$).

Vlnové funkcie príslušné k týmto hodnotám energie môžeme priamo skonštruovať z rovnice (8) a z rekurentných vzťahov (10). Tieto riešenia majú tvar

$$\psi_k(\xi) = N_k H_k(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

kde $H_k(\xi)$ sú polynómy k -teho stupňa, pri párnom k obsahujú H_k iba párne mocniny ξ a pri nepárnom k iba nepárne mocniny. Konštanta N_k v (12) je určená normovacou podmienkou

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_k(x)|^2 dx = 1 \quad (13)$$

Napríklad pre riešenie odpovedajúce základnému stavu ($k = 0$) zvolíme $a_0 = 1$. Je to riešenie typu 1, teda $a_1 = 0$ a z rekurentného vzťahu (10) potom dostaneme $a_i = 0$ pre $i \geq 2$. Vlnová funkcia základného stavu má teda tvar

$$\psi_0(\xi) = C e^{-\xi^2/2}$$

kde C je normalizačná konštanta.

Prvému excitovanému stavu ($k = 1$) odpovedá riešenie typu 2, $a_0 = 0$, $a_1 = 1$ (napríklad), $a_i = 0$ pre $i \geq 2$ a dostaneme

$$\psi_1(\xi) = C' \cdot \xi \cdot e^{-\xi^2/2}$$

kde C' je opäť normalizačná konštanta.

Lahko možno ukázať, že (pri vhodnej voľbe normovania) polynómy $H_k(\xi)$ sú totožné s *Hermitovými polynómami*, ktorých vlastností sú v matematike dobre známe; najzákladnejšia informácia o nich je uvedená v dodatku A2. S využitím vzťahu (A2.4) by sme mohli určiť i všeobecný tvar normovacej konštanty N_k a dostali by sme

$$\psi_k(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

kde $\xi = x \sqrt{\frac{m\omega_0}{\pi}}$.

Pravda, normovacou podmienkou (13) je konštanta N_k určená až na fázový faktor typu $e^{i\alpha}$. Takýto faktor nemá fyzikálny význam, naša konvencia (14) odpovedá N_k reálnemu kladnému.

Vráťme sa teraz naspäť k riešeniam 3. typu. Ako sme už spomínali, tieto riešenia treba zamietnuť, pretože nespĺňajú normovacuú podmienku. Ak totiž rad pre $\nu(\xi)$ má nekonečný počet členov, tak $\nu(\xi) \rightarrow \exp(\xi^2)$ pre $\xi \rightarrow \infty$ a funkcia $\psi(\xi)$ určená rovnicou (8) sa zrejme nedá normovať. Bez podrobného dôkazu uvedieme len jednoduchý argument, ktorý robí tvrdenie prijateľným. Taylorov rozvoj funkcie $\exp(\xi^2)$ je:

$$e^{\xi^2/2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\xi^2)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^{2k}}{k!} = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ párne}}}^{\infty} b_k \xi^k$$

kde $b_k = 1/(k/2)!$

Pre veľké k platí

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} \rightarrow \frac{2}{k}$$

a to je ten istý pomer, aký majú pre veľké k koeficienty rozvoja $\nu(\xi)$ (pozri rovnicu (10)).

4.7 TUNELOVÝ JAV. PRECHOD ČASTICE CEZ BARIÉRU

V článku 4.4 sme už videli, že pri pohybe v jednorozmernej jame v oblasti, kde je potenciálna energia V väčšia ako celková energia častice, vlnová funkcia klesá exponenciálne ako $\exp\{-\gamma|x|\}$, $\gamma^2 = (2m/\hbar^2)(V - E)$. Takto, v istom zmysle častica „presakuje“ do oblasti, ktorá je pre ňu podľa klasickej mechaniky

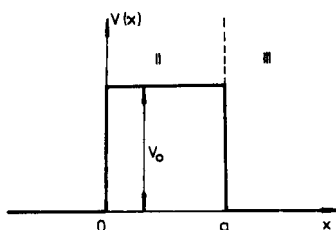
zakázaná. Toto „presakovanie“ má viaceré významné dôsledky. Ukazuje sa totiž, že častica dopadajúca na potenciálovú bariéru vyššiu ako je energia častice, môže touto bariérou s istou pravdepodobnosťou prejsť.

Teraz si ukážeme na veľmi jednoduchom príklade ako k tomu dochádza.

Sledujme pohyb častice v poli potenciálnej energie $V(x)$, znázornenej na obr. 4.6.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pre } x < 0, \quad x > a \\ V_0 > 0 & \text{pre } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (1)$$

Budeme sa zaujímať o takúto fyzikálnu situáciu: Nech zľava smerom k bariére sa pohybuje častica s energiou $0 < E < V_0$. V klasickej mechanike by sa takáto častica musela po náraze na bariéru odraziť naspäť. V kvantovej mechanike však s nenulovou pravdepodobnosťou prejde bariérou a bude sa pohybovať (opäť s energiou E) v oblasti III (obr. 4.6) smerom od bariéry. Našou úlohou je nájsť príslušnú pravdepodobnosť prechodu.



Obr. 4.6

Už podľa formulácie úlohy vidno, že ide o dynamický nestacionárny problém, ktorý by sme mali riešiť pomocou časovej SchR. Postup by bol nasledovný. Zvolili by sme v nejakom čase t_0 vhodnú vlnovú funkciu (normovaný vlnový balík) reprezentujúci časticu dostatočne lokalizovanú v oblasti I, pohybujúcu sa smerom k bariére. Potom by sme riešili časovú SchR s takouto vlnovou funkciou ako začiatočnou podmienkou. Získali by sme tak tvar vlnovej funkcie ψ (dostatočne) neskoršom čase t a vypočítali by sme pomocou tejto vlnovej funkcie pravdepodobnosť nájsť v čase t časticu v oblasti III (za bariérou).

Opísaný postup je pomerne komplikovaný, možno však dúfať, že už preskúmanie stacionárneho problému – t. j. bezčasovej SchR – naznačí správnu odpoveď. Realistický vlnový balík totiž možno vyjadriť ako superpozíciu stacionárnych vlnových funkcií. Pri skúmaní sa stačí obmedziť na také stacionárne riešenia, o ktorých je možné očakávať, že v spomínanej superpozícii budú vystupovať. Kvalitatívne možno ľahko „uhádnuť“, aké riešenia to asi budú. Z tvaru potenciálnej energie $V(x)$ vidno, že v oblastiach ďaleko od bariéry budú mať riešenia tvar riešení pre voľnú časticu – budú to teda rovinné vlny. (Z charakteru $V(x)$ je zrejmé, že ide o rozptyľové stavy.) Z fyzikálneho hľadiska je zrejmé, že v superpozícii vytvárajúcej hľadaný vlnový balík budú vystupovať len také stacionárne riešenia, ktoré v oblasti III (obr. 4.6) budú mať charakter rovinných vln šíriacich sa v smere kladnej osi x – teda v smere od bariéry. Intuitívne je totiž zrejmé, že v relevantných riešeniach nevystupuje nič, čo má charakter vln dopadajúcich na bariéru sprava.

Budeme sa zaujímať o riešenia odpovedajúce energii E z intervalu $0 < E < V_0$ (pre takéto hodnoty energie totiž klasická častica nemôže bariérou prejsť). Riešenia bezčasovej SchR

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

majú potom v intervaloch I, II a III nasledujúci tvar

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & k &= p/\hbar = [2mE/\hbar]^2 \\ \psi_{\text{II}}(x) &= Fe^{-\alpha x} + Ge^{\alpha x}, & \alpha &= [2m(V_0 - E)/\hbar]^2 \\ \psi_{\text{III}}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{aligned} \quad (3)$$

Ostáva urobiť štandardnú procedúru – „zošit“ riešenia na hraniciach oblastí I, II a III. Pripomeňme si však, že náš problém nie je nájsť všetky riešenia rovnice (2), ale len také riešenia, ktoré majú v oblasti III charakter vlny šíriacej sa v smere od bariéry. Vo vyjadrení ψ_{III} vo vzťahu (3) tieto vlny zodpovedajú členu Ce^{ikx} kým člen De^{-ikx} reprezentuje vlny dopadajúce na bariéru sprava. Táto interpretácia je zrejماً totiž už z porovnania s tvarom de Broglieho rovinných vln pre voľné častice (2.2.1). Vlna typu e^{ikx} zodpovedá častici s priemetom hybnosti na os x rovným $+\hbar k$, vlna typu e^{-ikx} zodpovedá priemetu hybnosti $-\hbar k$, a teda častici pohybujúcej sa sprava doľava.

Pre našu úlohu sú teda relevantné iba také riešenia, ktoré majú v oblasti III tvar

$$\psi_{III}(x) = Ce^{ikx} \quad (4)$$

teda pre ktoré $D = 0$. Môžeme očakávať, že riešenia, ktoré majú takýto tvar, by vhodnou superpozíciou vytvorili vlnu s charakterom vlnového balíka, zodpovedajúceho formulácii našej úlohy.

Koeficient C nechajme zadal ľubovoľný. Z požiadavky spojitosti riešenia a jeho prvej derivácie v bodoch $x = 0$ a $x = a$ potom ľahko dostaneme pre koeficienty A, B, F, G podmienky

$$A + B = F + G, \quad Fe^{-\alpha a} + Ge^{\alpha a} = Ce^{ika} \quad (5)$$

$$ik(A - B) = \alpha(G - F), \quad Ge^{\alpha a} - Fe^{-\alpha a} = ikCe^{ika} \quad (5a)$$

Z rovníc (5) už možno ľahko vyjadriť štyri z koeficientov A, B, C, F, G pomocou jedného z nich, napríklad pomocou A , ktorý bude vystupovať ako multiplikatívny faktor. SchR je lineárna homogénna rovnica, preto takýto ľubovoľný multiplikatívny parameter v riešení je prirodzený. Na jeho určenie nemôžeme využiť normovaciu podmienku, ako je to obvyklé v prípade viazaných stavov. Naše riešenie má charakter rozptylového stavu. Preto, ako sme už viackrát hovorili, sa nedá normovať obvyklým spôsobom.

Teraz by sme sa mohli pokúsiť pomocou nájdených riešení skonštruovať vlnový balík zodpovedajúci zadaniu úlohy a nájsť hľadajú pravdepodobnosť prechodu. S trochou intuície však odpoveď už vidno priamo z charakteru nájdených stacionárnych riešení. V spomínanej superpozícii by totiž zrejme členy typu Ae^{ikx} prispievali do balíka reprezentujúceho dopadajúcu časticu, členy typu Ce^{ikx} časticu prejdenu bariérou. Členy typu Be^{-ikx} ktoré majú charakter vlny šíriacej sa oblasti I v smere zápornej osi x , budú prispievať do balíka reprezentujúceho časticu odrazenú od bariéry.

O tejto interpretácii svedčí aj výraz pre hustotu prúdu pravdepodobnosti. Ak $\psi_I(x)$ dané rovnicou (3) dosadíme do (3.2.4) dostaneme

$$j_x = \frac{\hbar}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad \frac{\hbar}{m} = v$$

kde v je rýchlosť častice.

Možno teda očakávať, že v zmysle pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie veličiny

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

budú mať význam pravdepodobnosti prechodu resp. pravdepodobnosti odrazu častice od bariéry. Po dosadení výrazov pre C a B získaných z rovníc (5), dostaneme

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)}}, \quad R = 1 - T \quad (6)$$

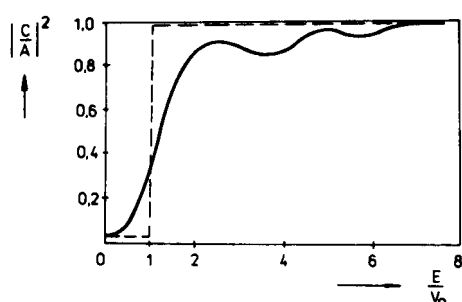
Podobne možno vypočítať aj koeficient prechodu a odrazu pre $E > V_0$. Výsledok je (pozri napr. [8])

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \beta a}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1}, \quad \beta = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \quad (7)$$

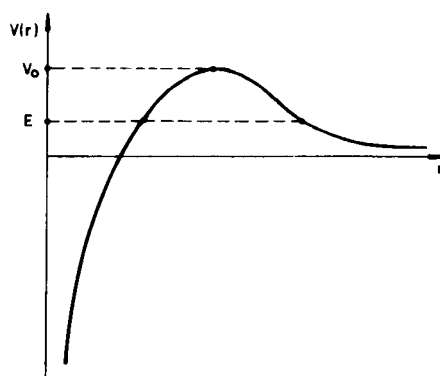
Závislosť koeficientu T od pomeru E/V_0 je na obr. 4.7, kde sme prerušovanou čiarou naznačili aj koeficient prechodu častice podľa klasickej mechaniky.

Vidíme, že podľa nej v prípade, ak $E < V_0$, častica nemôže preniknúť cez bariéru, v prípade $E > V_0$ prenikne vždy. Dôležitý je najmä priebeh kvantovomechanickej krivky pre $E < V_0$. Pretože klasická častica sa v tomto prípade nemôže dostať cez bariéru, dá sa obrazne povedať, že podľa kvantovej mechaniky existujú akési „tunely“, ktorými častica predsa len prenikne. Preto sa jav nazýva tunelovým javom.

Prvýkrát tento efekt použil G. Gamow na objasnenie energetických spektier a pravdepodobností α rozpadu jadier. Častica α je pomerne stabilný útvar a možno sa domnievať, že v istom zmysle existuje v jadre už predtým, než z neho pri rozpade vyletí. Existujú isté odhady potenciálu, ktorým pôsobí jadro na α časticu. Znázorníme schematicky tento potenciál ako funkciu vzdialenosti r od stredu jadra na obr. 4.8. Energie častíc α opúšťajúcich jadro, boli však často značne menšie ako maximum $V(r)$, označené V_0 . Z klasického hľadiska nebolo možné efekt vysvetliť. Gamow v roku 1928 ukázal, že podľa kvantovej mechaniky častice môžu preniknúť cez potenciálovú bariéru a kvalitatívne vysvetlil energetické spektrum častíc α pri rozpade jadier.



Obr. 4.7



Obr. 4.8

Tunelový efekt sa prejavuje často aj v polovodičoch, kde môžu na styku dvoch materiálov vzniknúť komplikované potenciálové bariéry. Podrobnosti nebudeme rozoberať, spomenieme len názov „tunelová dióda“, ktorý už sám poukazuje na súvislosť s tunelovým javom.

V predchádzajúcom sme skúmali podrobne prechod častice cez potenciálovú bariéru toho najjednoduchšieho typu. Uvedme teraz ešte len veľmi intuitívny argument pre správanie sa vlnovej funkcie pod bariérou vo všeobecnejšom prípade bariéry komplikovanejšieho tvaru.

Kvôli tomu sa vrátíme k diskusii článku 4.4 a pripomenieme si, že pre časticu v oblasti s $E < V$ vlnová funkcia klesá ako

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{1/2} x\right\}$$

Na úseku dlhom Δx sa takto amplitúda vlnovej funkcie zmenší o

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{1/2} \Delta x\right\}$$

Toto platí iba pri konštantnom potenciáli. Ak sa ale potenciál mení veľmi pomaly (ale stále platí $E < V_0$), potom očakávanie, že s rastúcim x by vlnová funkcia klesala takto

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x_1) - E)\right]^{1/2} \Delta x_1\right\} \exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x_2) - E)\right]^{1/2} \Delta x_2\right\} \dots \quad (8)$$

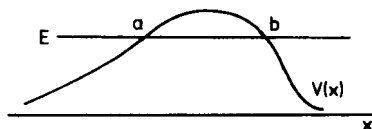
kde x_1, x_2, \dots , sú body v strede intervalov $\Delta x_1, \Delta x_2, \dots$ na ktoré sme rozdelili podbariérovú oblasť. Pretože platí

$$\prod_i \exp(-\alpha_i) = \exp\left\{\sum_i \alpha_i\right\}$$

môžeme súčin v (8) zapísať aj ako

$$\exp\left\{-\int_a^b\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\right]^{1/2}dx\right\} \quad (9)$$

kde a, b sú krajné body podbariérovej oblasti, t. j. oblasti, kde $V(x) > E$.



Obr. 4.9

Očakávame teda, že výraz (9) bude aspoň hrubým kvalitatívnym priblížením pre zoslabenie amplitúdy vlnovej funkcie pri bariére typu $V(x)$ na obr. 4.9.

Podrobnejšia analýza, ktorú tu však nebudeme robiť, ukazuje, že (9) je síce užitočným, ale často len veľmi hrubým priblížením.

4.8 TROJROZMERNÝ HARMONICKÝ OSCILÁTOR. METÓDA SEPARÁCIE PREMENNÝCH

Úlohy, ktoré vedú k riešeniu jednorozmernej SchR majú značne obmedzenú oblasť použitia. Častejšie sa stretávame s trojrozmernými úlohami. V mnohých a pre aplikácie najdôležitejších úlohách možno často previesť riešenie trojrozmernej úlohy na riešenie troch jednorozmerných úloh. Namiesto pokusu o všeobecný výklad si ukážeme túto metódu, tzv. metódu separácie premenných na jednoduchom príklade trojrozmerného harmonického oscilátora.

Jednorozmerný harmonický oscilátor je opísaný potenciálnou energiou $V(x) = m\omega_0^2x^2/2$. Prirodzeným zovšeobecnením tohto $V(x)$ na trojrozmerný prípad je

$$V(x, y, z) = \frac{m}{2}(\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2) \quad (1)$$

ktorý nazývame všeobecne potenciálom trojrozmerného anizotropného oscilátora. Ak platí $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$, tak hovoríme o izotropnom harmonickom oscilátore. SchR pre pohyb častice v poli potenciálnej energie (1) bude:

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z) + \\ &+\frac{m}{2}(\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (2)$$

Hľadáme riešenie v „separovanom tvare“ (odtiaľ názov metódy)

$$\psi(x, y, z) = A(x)D(y, z) \quad (3)$$

Ak (3) dosadíme do (2) a výsledok delíme súčinom $A(x)D(y, z)$ po jednoduchej úprave dostaneme:

$$\begin{aligned} E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{A(x)} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} - \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{D(y, z)} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) D(y, z) + \frac{m}{2} (\omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \end{aligned} \quad (4)$$

Podarilo sa nám rozdeliť rovnicu tak, že ľavá strana v (4) závisí len od premennej x a pravá strana len od y a z . Odtiaľ však vyplýva, že tak ľavá, ako aj pravá strana v (4) sú konštantné. Označme túto konštantu E_1 a zapíšme dve takto získané rovnice v tvare

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 A(x) = (E - E_1) A(x) \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) D(y, z) + \frac{m}{2} (\omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) D(y, z) = E_1 D(y, z) \quad (6)$$

Riešenie (6) môžeme opäť hľadať v tvare $D(y, z) = B(y)C(z)$ a po zavedení vhodných konštant E_1, E_2, E_3 nakoniec dostaneme riešenie rovnice (2) v separovanom tvare

$$\psi(x, y, z) = A(x) B(y) C(z) \quad (7)$$

kde funkcie A, B, C vyhovujú rovniciam

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 A(x) = E_1 A(x) \quad (8a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 B(y)}{dy^2} + \frac{m}{2} \omega_2^2 y^2 B(y) = E_2 B(y) \quad (8b)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 C(z)}{dz^2} + \frac{m}{2} \omega_3^2 z^2 C(z) = E_3 C(z) \quad (8c)$$

pričom

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \quad (8d)$$

Riešenie rovníc (8a, 8b, 8c) však poznáme z článku 4.6. Sú to riešenia diferenciálnej rovnice pre harmonický oscilátor. Každé z riešení závisí od prirodzeného čísla n a má tvar daný rovnicou (6.15). Riešenie rovnice (2) možno teda zapísať v tvare

$$\psi(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z) \quad (9)$$

Príslušné hodnoty energie sú:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \left[\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (10)$$

Ostáva nám ešte zistiť, či okrem nájdených riešení (v separovanom tvare) neexistujú aj iné riešenia bezčasovej SchR. Riešenia (9) však tvoria úplný systém funkcií, preto žiadne ďalšie nezávislé riešenia už neexistujú, a teda aj vzťah (10) udáva všetky vlastné hodnoty operátora energie.

Trojrozmerný anizotropný oscilátor, s ktorým sme sa zaoberali, nemá veľa užitočných aplikácií, ale metódu separácie premenných na ňom možno demonštrovať bez veľkého počítania. Oveľa častejšie sa však používa metóda separácie premenných v iných, než karteziánskych súradnicových systémoch, predovšetkým vo sférických súradniciach.

4.9 VLASTNÉ HODNOTY A VLASTNÉ FUNKCIE OPERÁTOROV MOMENTU HYBNOSTI

V ďalšom sa budeme zaoberať riešeniami SchR v trojrozmernom prípade so sféricky symetrickým potenciálom. Pri tom budeme používať metódu separácie premenných vo sférických súradniciach. Prv než prideme k týmto otázkam, je užitočné preskúmať vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátorov momentu hybnosti. Ukáže sa totiž, že tieto vlastné funkcie budú udávať uhlovú závislosť riešení zapísaných v separovanom tvare $R(r) Y(\vartheta, \varphi)$, kde $Y(\vartheta, \varphi)$ sú vlastné funkcie operátorov momentu hybnosti.

Podľa vzťahov (2.12.2) sú jednotlivým zložkám momentu hybnosti priradené operátory

$$\begin{aligned}L_x &= y \cdot p_z - p_z \cdot y \\L_y &= z \cdot p_x - p_x \cdot z \\L_z &= x \cdot p_y - p_y \cdot x\end{aligned}\tag{1}$$

Ak si uvedomíme, že podľa (2.12.5) tieto operátory pri vyjadrení vo sférických súradniciach r, ϑ, φ pôsobia len na uhlové premenné ϑ a φ , potom je zrejmé, že pri hľadaní ich vlastných funkcií sa stačí obmedziť na funkcie závislé len od týchto premenných typu $\psi(\vartheta, \varphi)$.

Ak skonštruujeme ešte operátor druhej mocniny momentu hybnosti

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2\tag{2}$$

potom po jednoduchých výpočtoch, ktoré prenechávame čitateľovi, možno zo vzťahov (1) a (2) odvodiť komutačné vzťahy

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\[L_z, L_x] &= i\hbar L_y \\[L^2, L_x] &= [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0\end{aligned}\tag{3}$$

Z komutačných vzťahov (3) je zrejmé, že z operátorov L_x, L_y, L_z, L^2 možno vybrať najviac dva, ktoré navzájom komutujú. Nech sú to napríklad operátory L^2 a L_z . Podľa diskusie v článku 2.16 je potom zrejmé, že sa možno pokúsiť nájsť spoločný systém vlastných funkcií týchto dvoch operátorov.

V sférických súradniciach podľa (2.12.5, 6) platí

$$\begin{aligned}L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\L^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]\end{aligned}\tag{4}$$

Budeme teda hľadať vlastné funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ spĺňajúce vzťahy

$$\begin{aligned}L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= m\hbar Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\end{aligned}\tag{5}$$

kde m, l sú zatiaľ ľubovoľné reálne čísla.⁷⁴

Riešenie rovníc (5) budeme hľadať opäť v separovanom tvare

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

keď sme na pravej strane závislosť od l, m explicitne nevypisovali. Po dosadení do (5) dostaneme rovnice

$$\frac{d}{d\varphi} \Phi = im\Phi\tag{6}$$

$$\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta = 0\tag{7}$$

Riešenie rovnice (6) má tvar

$$\Phi = C e^{im\varphi}\tag{8}$$

⁷⁴ Poznamenajme, že vzťahy (5) sú obvyklé vzťahy platné pre vlastné funkcie, ibaže príslušné vlastné hodnoty sú zapísané v nezvyklom tvare. Treba si uvedomiť, že ľubovoľné kladné číslo možno zapísať napr. v tvare $\hbar^2 l(l+1)$, kde l je vhodné reálne číslo. Nezvyklý tvar bude v ďalšom užitočný.

Funkcia $\Phi(\varphi)$ však musí byť taká, aby platilo

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \quad (9)$$

lebo fyzikálne dva body, ktorých súradnica φ sa líši o 2π sú totožné (rotácia o 2π). Z podmienky (9) a vzťahu (8) je zrejmé, že pre vlastné hodnoty musí platiť:

$$m \text{ je celé číslo} \quad (10)$$

Ostáva teda riešiť rovnicu (7) s obmedzením sa na celé čísla m a nájsť funkcie $\Theta(\vartheta)$ ako aj vlastné hodnoty $l(l+1)$. Neuvedieme si tu detailne celý postup, len naznačíme spôsob riešenia.

V rovnici (7) je užitočné urobiť substitúciu $x = \cos \vartheta$. Po jednoduchých úpravách dostaneme

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta = 0$$

Hľadáme regulárne riešenie tejto rovnice na intervale $(-1, 1)$ (čo odpovedá $\vartheta \in (0, \pi)$). Postupom v zásade podobným ako pri harmonickom oscilátore⁷⁵ by sme zistili, že fyzikálne prijateľné riešenie existuje iba v prípade, že l je celé nezáporné číslo, pričom platí

$$l \geq |m| \quad (12)$$

V takomto prípade má potom riešenie tvar

$$\Theta = (1-x^2)^{|m|/2} \bar{\Theta}(x)$$

kde $\bar{\Theta}(x)$ je polynóm stupňa $l - |m|$. Riešenia rovnice (11) tohto typu sú dobre známe, sú to pridružené Legendrove funkcie $P_l^{|m|}(x)$. Ich definícia a niektoré vlastnosti sú uvedené v dodatku A3.

Zrekapitulujeme získané výsledky:

Vlastné funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ operátorov L^2 a L_z spĺňajúce vzťahy (5) zodpovedajú hodnotám

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad \text{a } m \text{ celé} \quad (13)$$

a sú dané vzťahom

$$Y_{lm} = C_{lm} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (14)$$

kde $P_l^{|m|}$ sú pridružené Legendrove funkcie.

Vlastné hodnoty operátorov L^2 a L_z zodpovedajúce spoločným vlastným funkciám teda sú

$$\hbar^2 l(l+1), \quad l \text{ celé} \quad (15)$$

a

$$\hbar m, \quad m \in \langle -l, l \rangle, m \text{ celé} \quad (16)$$

Normovací koeficient volíme konvenčne tak, aby funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ boli normované na guľovej ploche jednotkového polomeru, t. j. aby platilo

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm}^* Y_{lm} = 1$$

V obvyklej fázovej konvencii potom platí:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (17)$$

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad \text{pre } -m < 0 \quad (18)$$

⁷⁵ Odfaktorizovanie riešenia v okolí singulárnych bodov 1 a -1 a následné hľadanie riešenia v tvare mocninového radu.

Táto pomerne komplikovaná fázová konvencia je motivovaná požiadavkou, aby

$$Y_{l0}(0, 0) \text{ bolo reálne a kladné} \quad (19)$$

a aby bol splnený dôležitý⁷⁶ rekurentný vzťah

$$L_{\pm} Y_{lm} = \hbar[l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_{l, m \pm 1} \quad (20)$$

kde L_+ a L_- sú operátory definované vzťahom

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (21)$$

Uvedieme ešte bez dôkazov niekoľko ďalších vlastností funkcií $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, ktorým sa tiež hovorí sférické funkcie.

1. Sférické funkcie tvoria na jednotkovej guľi úplný systém ortonormovaných funkcií. Vzťah ortonormovanosti je

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (22)$$

Vzhľadom na úplnosť tohto systému môžeme každú regulárnu funkciu definovanú na jednotkovej guľi rozvinúť do radu podľa sférických funkcií. Z toho tiež vyplýva, že žiadne ďalšie nezávislé vlastné funkcie operátorov L^2 a L_z už neexistujú.⁷⁷

2. Parita sférických funkcií je $(-1)^l$, to znamená, že platí

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (23)$$

3.

$$Y_{lm} = (-1)^l Y_{l, -m}^* \quad (24)$$

4. Niekoľko najnižších sférických funkcií

$$\begin{aligned} Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{20}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \\ Y_{11}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, & Y_{21}(\vartheta, \varphi) &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, & Y_{22}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \end{aligned} \quad (25)$$

Funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ pre $l \leq 2$ a pre $m < 0$ možno získať z predchádzajúcich pomocou vzťahu (24).

Poznamenajme na záver, že tento článok bol pomerne technický, hoci sme nezachádzali do detailov. Hlbší fyzikálny pohľad na túto problematiku bude možné získať v kapitole venovanej všeobecnému formalizmu momentu hybnosti. Niektoré výsledky, ktoré sme tu získali pomerne namáhavo – ako napríklad vlastné hodnoty (15), (16) – tam dostaneme veľmi rýchlo a navyše oveľa názornejšie.

4.10 SEPARÁCIA PREMENNÝCH V SFÉRICKÝCH SÚRADNICIACH

Sférické súradnice r, ϑ, φ sú viazané s karteziánskymi x, y, z známymi vzťahmi

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned}$$

⁷⁶ Dôležitosť tohto vzťahu bude zrejmá až v kapitole 11.

⁷⁷ A priori totiž nemusí byť pravdou, že metódou separácie premenných nájdeme všetky vlastné funkcie.

ktoré možno ľahko obrátiť na

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

$$\vartheta = \arccos(z/r)$$

$$\varphi = \arctg(y/x)$$

pričom derivácie v jedných premenných možno previesť na derivácie v druhých podľa vzťahov typu

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

a pod.

Laplaceov operátor

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

môžeme previesť do sférických súradníc buď ťažkopádny a namáhavým spôsobom pomocou predchádzajúcich vzťahov, alebo jednoduchšie pomocou *Lamého*⁷⁸ *koeficientov*. Obidvomi spôsobmi prideme k nasledujúcemu vyjadreniu

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

kde

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

Schrödingerova rovnica pre sféricky symetrický potenciál potom bude:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) + V(r) \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (3)$$

Hľadáme jej riešenie v „separovanom“ tvare

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y(\vartheta, \varphi) \quad (4)$$

Keď budeme postupovať podobne ako v článku 4.9, pre R a Y dostaneme⁷⁹

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (5)$$

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y(\vartheta, \varphi) + \lambda Y(\vartheta, \varphi) = 0 \quad (6)$$

Ak porovnáme rovnicu (2) so vzťahom (9.7), vidíme že platí

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2$$

a preto môžeme (6) prepísať aj v tvare

$$L^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi) \quad (7)$$

Vidíme, že funkcie $Y(\vartheta, \varphi)$, ktoré sú riešením (7), budú sférickými funkciami $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ a že λ v rovnici (7) môže nadobúdať len hodnoty

$$l = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (7')$$

⁷⁸ Pozri napr. Stratton, J. A.: Teorie elektromagnetického pole. Praha, SNTL 1961.

⁷⁹ Postupujeme tak, že (4) dosadíme do (3), výsledok predelíme súčinom $R(r) Y(\vartheta, \varphi)$ a po malej úprave sa nám podarí rovnicu zapísať tak, aby ľavá strana závisela iba od r a pravá iba od premenných ϑ, φ . Preto sa obe strany musia rovnať konštante A , ktorá nezávisí ani od r ani od ϑ a φ .

Po dosadení zo (7) do (5) dostaneme:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (8)$$

Rovnica (8) sa nazýva radiálnou (Schrödingerovou) rovnicou alebo presnejšie rovnicou pre radiálnu vlnovú funkciu $R(r)$. Rovnica pre $Y(\vartheta, \varphi)$ vôbec nezávisí od hodnoty E , ani od tvaru potenciálnej energie $V(r)$. Ak poznáme vlastnosti sférických funkcií $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, tak ich môžeme použiť pre každý sférický symetrický potenciál. Pri danom $V(r)$ stačí vyriešiť rovnicu (8), z ktorej určujeme aj povolené hodnoty energie (kvantové hladiny sústavy).

Príčina takejto univerzálnosti spočíva v tom, že v prípade sféricky symetrického potenciálu hamiltonián komutuje s operátormi momentu hybnosti, teda že platí (ako sa možno presvedčiť jednoduchým výpočtom):

$$[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = [H, L^2] = 0$$

Spolu s hamiltoniánom teda máme (podľa predchádzajúceho článku) trojicu komutujúcich operátorov

$$H, L^2, L_z$$

Možno preto nájsť sústavu vlnových funkcií, ktoré budú súčasne vlastnými funkciami všetkých troch operátorov H, L^2, L_z . Z predchádzajúceho je zrejmé, že metóda, ktorá vedie k takémuto systému vlastných funkcií, je práve separácia premenných vo sférických súradniciach. Predtým, ako pristúpime k riešeniu rovnice (8) pre konkrétne prípady $V(r)$, si ešte všimneme význam člena $l(l+1)/r^2$ v radiálnej rovnici a odvodíme niektoré podmienky pre radiálnu funkciu $R(r)$, vyplývajúce z normovacej podmienky.

Fyzikálny význam člena $l(l+1)/r^2$ v radiálnej rovnici. Rovnicu (8) možno tiež zapísať v tvare

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) R(r) = 0$$

kde

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (9)$$

Posledný člen v rovnici (9) možno formálne interpretovať ako potenciálnu energiu príslušnú „odstredivej“ sile. V klasickej mechanike je odstredivá sila (pre jednoduchosť uvažujeme pohyb po kruhovej dráhe) daná ako $F = mv^2/r = L^2/mr^3$, kde $L = rp = mvr$ je moment hybnosti. Ak zavedieme potenciál $V_{od}(r)$ pomocou vzťahu $F = -V_{od}(r)/dr$, dostaneme:

$$V_{od}(r) = \frac{L^2}{2mr^2}$$

Druhý člen na pravej strane rovnice (9) má práve tento tvar, len namiesto klasickej veličiny L^2 stojí vlastná hodnota operátora L^2 , teda podľa (9.5) výraz $\hbar^2 l(l+1)$.

Podmienky normovania pre radiálnu vlnovú funkciu $R(r)$. Ak zapíšeme riešenie SchR v tvare (4) s tým, že za $Y(\vartheta, \varphi)$ dosadíme $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, môžeme normovacia podmienku zapísať v tvare

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^* Y_{lm} = 1 \quad (11)$$

Sférické funkcie spĺňajú podmienku (9.22) a normovacia podmienka pre radiálne funkcie bude

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (12)$$

Podobne ako v (3.4) dostaneme pre priebeh funkcie $R(r)$ v okolí bodov $r \rightarrow 0$ a $r \rightarrow \infty$ ohraničenia

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{3/2} R(r) = 0 \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^{3/2} R(r) = 0 \quad (13)$$

Rovnice (13) boli odvodené len z podmienky normovania, nezávisia teda vôbec od tvaru potenciálnej energie $V(r)$. Väčšina $V(r)$, vyskytujúcich sa v praktických aplikáciách, avšak spĺňa podmienku $r^2 V(r) \rightarrow 0$ pre $r \rightarrow 0$ a pre takéto potenciály možno správanie sa radiálnej funkcie v okolí začiatku preskúmať bližšie. V rovnici (8) možno v malom okolí bodu $r = 0$ zanedbať člen $[E - V(r)]$ voči $l(l+1)/r^2$ a rovnica prejde na tvar

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \quad (14)$$

Hľadáme jej riešenie v tvare

$$R(r) = r^n (a_0 + a_1 r + \dots), \quad a_0 \neq 0 \quad (15)$$

Ak dosadíme (15) do (14) a porovnáme koeficienty pri najnižšej mocnine r , dostaneme podmienku: $n(n+1) - l(l+1) = 0$. Posledná kvadratická rovnica má dve riešenia:

$$n = l \quad n = -(l+1) \quad (16)$$

Pre $l \geq 1$ podmienka (13) vylučuje možnosť $n = -(l+1)$ a pre tieto hodnoty máme

$$R(r) \sim r^l \quad \text{pre } r \rightarrow 0 \quad (17)$$

Podmienka (13) však nemôže vylúčiť jednu z možností (16) pre $l = 0$. Prípád $R(r) \sim r^{-1}$ však možno vylúčiť nasledujúcou úvahou (pozri [2], VIII. kap.): pre $l = 0$ platí $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$, a preto $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_0(r)Y_{00}$ sa správa pre malé r ako $1/r$. V SchR

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

má potom v dôsledku rovnice

$$-\nabla^2(r^{-1}) = 4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (18)$$

prvý člen singularitu typu δ -funkcie, zatiaľ čo druhé dva členy ju nemajú.⁸⁰ Pre potenciály, pre ktoré $r^2 V(r) \rightarrow 0$ pre $r \rightarrow 0$ platí teda (17) pre všetky l .

4.11 ATÓM VODÍKA

Atóm vodíka je sústava dosť jednoduchá na to, aby sa dala matematicky zvládnuť a dostatočne bohatá v tom zmysle, že obsahuje podstatné črty kvantovo-mechanického opisu. E. Fermi raz vraj poznamenal, že teória elementárnych častíc by už bola v oveľa pokročilejšom štádiu, keby v tejto oblasti fyziky existoval „atóm vodíka“.

V prvom priblížení možno považovať protón v jadre atómu vodíka za nehybný a umiestnený v začiatku súradnicovej sústavy.⁸¹ Potenciálna energia elektrónu v poli protónu je

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e'^2}{r} \quad (1)$$

kde sme zaviedli označenie

$$e'^2 \equiv e^2/4\pi\epsilon_0$$

Pre radiálnu vlnovú funkciu dostávame potom z (10.8) rovnicu

⁸⁰ Predchádzajúca rovnica je dobre známa z elektrostatiky. Pre bodový náboj v začiatku súradnicovej sústavy bude hustota náboja $\rho(r)$ úmerná $\delta(r)$. Potenciál budený týmto nábojom je $1/r$. Stačí teraz dosadiť takéto $\rho(r)$ a $\rho(r)$ do rovnice $\nabla^2\varphi = -4\pi\rho$. S tým, že bodovému náboju odpovedá $\rho(r) \sim \delta(r)$, kde $\delta(r)$ je Diracova δ -funkcia, sa ešte zoznámime podrobnejšie neskôr. Prosíme čitateľa, aby tvrdeniu pred (18) uveril aj bez zatiaľ zrozumiteľného argumentu.

⁸¹ Hmotnosť protónu je približne 1840-krát väčšia ako hmotnosť elektrónu. Korekciami na pohyb protónu sa budeme zaoberať v nasledujúcom článku.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e'^2}{r} \right) R - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \quad (2)$$

V tejto časti sa budeme zaoberať len s viazanými stavmi, ktoré vďaka tomu, že $V(r) \rightarrow 0$ pre $r \rightarrow \infty$ budú mať záporné energie. Zavedieme bezrozmernú premennú

$$\rho = ar, \quad a = [-8mE/\hbar^2]^{1/2} \quad (3)$$

a rovnicu (2) môžeme prepísať na tvar

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\beta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (4)$$

kde

$$\beta = \left(-\frac{me'^4}{2E\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (4')$$

Singulárnymi bodmi rovnice (4) sú $\rho \rightarrow \infty$ a $\rho = 0$. Preskúmame najprv správanie sa $R(\rho)$ v okolí prvého z nich. Ak pre veľké ρ zachováme v (4) len dominantné členy, dostaneme asymptotický tvar rovnice (4):

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0 \quad (5)$$

Pri úprave sme rozpísali derivácie v (4) a zanedbali člen obsahujúci faktor $1/\rho$. Všeobecné riešenie (5) je

$$R(\rho) = C_1 e^{-\rho/2} + C_2 e^{\rho/2}$$

Aby $R(\rho)$ bolo normovateľné, musí sa $C_2 = 0$. Navyše, podľa (10.17) platí:

$$R(\rho) \sim \rho^l \quad \text{pre } \rho \rightarrow 0, l = 0, 1, 2, \dots$$

Riešenie rovnice (4) hľadáme preto v tvare

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L(\rho), \quad L(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \quad a_0 \neq 0 \quad (6)$$

Ak dosadíme (6) do (4), dostaneme pre $L(\rho)$ diferenciálnu rovnicu

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho] \frac{dL}{d\rho} + (\beta - l - 1)L = 0 \quad (7)$$

Po dosadení mocninového radu pre $L(\rho)$ do (7) dostaneme rekurentný vzťah medzi koeficientmi c_k

$$c_{k+1} = \frac{k+l+1-\beta}{(k+1)(k+2l+2)} c_k$$

Z rovnice (8) okamžite vidieť, že pre β rôzne od celého kladného čísla bude $c_{k+1}/c_k \rightarrow 1/k$ pre $k \rightarrow \infty$. Taký istý pomer koeficientov má aj rozvoj

$$e^\rho = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \rho^k$$

Ak teda rad pre $L(\rho)$ obsahuje nekonečný počet členov, tak pre $\rho \rightarrow \infty$ $L(\rho) \rightarrow \exp(\rho)$ a radiálna vlnová funkcia $R(\rho)$ v tomto prípade nie je normovateľná.⁸² Fyzikálne prijateľné riešenia dostaneme vtedy, ak rad pre $L(\rho)$ sa redukuje na polynóm konečného stupňa. To sa stane len pre $\beta = n_r + l + 1$, kde

⁸² Tu sa opakuje podobná situácia ako pri lineárnom harmonickom oscilátore. Ak rad neodtrháme, potom výraz $L(\rho)e^{-\rho/2}$ konverguje pre $\rho \rightarrow \infty$ zas k „zlému“ riešeniu $\exp(\rho/2)$.

nezáporné celé číslo n_r určuje stupeň polynómu $L(\rho)$. Číslo n_r nazývame radiálnym kvantovým číslom. To, že pre β sú dovolené len určité diskkrétne hodnoty $\beta = n$, implikuje podľa (4') aj kvantovanie energie, ktorá môže nadobúdať len hodnoty

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \quad n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Tento výsledok je totožný so vzorcom, ktorý odvodil N. Bohr už v rámci „starej“ kvantovej teórie. Ak za β dosadíme do rovnice (7), zistíme, že polynómy $L(\rho)$ spĺňajú diferenciálnu rovnicu

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + [2(l+1) + 1 - \rho] \frac{d}{d\rho} + (n-l-1) \right\} L(\rho) = 0$$

Takéto polynómy možno pomocou rekurentných vzťahov (8) ľahko skonštruovať, v matematike sú dobre známe a volajú sa Laguerrove polynómy. Niektoré ich vlastnosti sú zhrnuté v dodatku A4.

V konvencii označenia podľa (A4.2) majú riešenia rovnice (10) tvar

$$L(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

a riešenia úplnej SchR sú

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

kde⁸³

$$\rho = r \cdot \frac{2}{na_1}, \quad a_1 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \quad (12)$$

Veličina a_1 sa nazýva Bohrov polomer.

Podľa toho čo sme už uviedli, kvantové čísla n, l, m môžu nadobúdať hodnoty

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (13) \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned}$$

Vo vzťahu (11) je N_{nl} normovacou konštantou. S využitím vlastností Laguerrových polynómov a sférických funkcií by sa ľahko dalo ukázať, že normované vlnové funkcie dostaneme pre

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \cdot a_1^{-3/2} \quad (14)$$

Výraz

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \quad (15)$$

je (v terminológii podľa predchádzajúceho odstavca) radiálnou vlnovou funkciou, normovanou podľa (10.12). Niekoľko najnižších radiálnych funkcií vypíšeme explicitne.

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= (1/a_1)^{3/2} \cdot 2e^{-r/a_1} \\ R_{20}(r) &= (1/2a_1)^{3/2} (2 - r/a_1) e^{-r/2a_1} \\ R_{21}(r) &= (1/2a_1)^{3/2} \frac{r}{a_1 \sqrt{3}} e^{-r/2a_1} \end{aligned} \quad (16)$$

⁸³ Dosadili sme do (3) zo vzťahu (9).

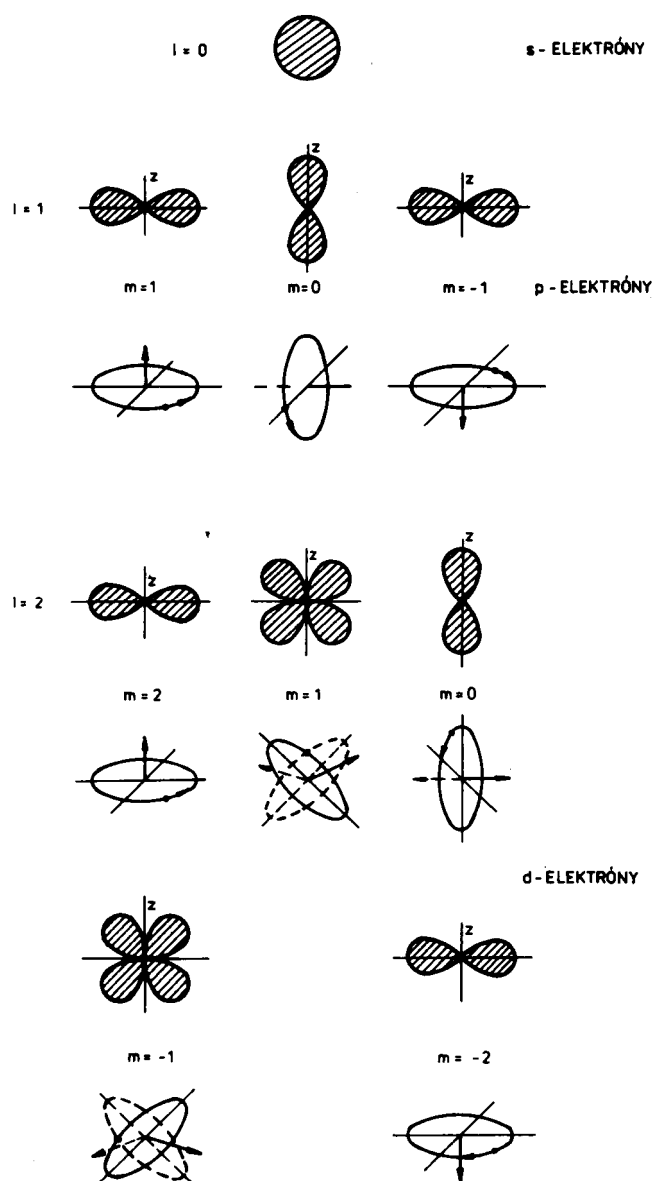
Pre viaceré aplikácie je užitočné poznať stredné hodnoty mocnín r počítané podľa vzťahu

$$\overline{r^k} = \int r^k \psi_{nlm}^*(r, \vartheta, \varphi) \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

Jednoduchými ale zdĺhavými výpočtami možno ukázať, že platí

$$\begin{aligned} \overline{r} &= \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_1 \\ \overline{r^2} &= \frac{1}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]n^2 a_1^2 \\ \frac{\overline{1}}{r} &= \frac{1}{n^2 a_1} \\ \frac{\overline{1}}{r^2} &= \frac{2}{(2l+1)n^3 a_1^2} \end{aligned} \tag{17}$$

Hustoty pravdepodobností pre niektoré stavy atómu vodíka sú znázornené na obr. 4.10.



Obr. 4.10 Druhé mocniny absolútnych hodnôt vlnových funkcií elektrónov v s , p a d stavoch. Párne riadky naznačujú klasické analógie a treba ich chápať ako pomôcku na zapamätanie.

Zrekapitulujme:

Vlnové funkcie $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$ sú súčasne vlastnými funkciami troch operátorov H , L^2 a L_z . Pritom platí:

$$\begin{aligned} H\psi_{nlm} &= E_n\psi_{nlm} & E_n &= -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2} \\ L^2\psi_{nlm} &= \hbar^2l(l+1)\psi_{nlm} \\ L_z\psi_{nlm} &= \hbar m\psi_{nlm} \end{aligned} \quad (18)$$

Zadanie troch čísiel n, l, m jednoznačne určuje funkciu ψ_{nlm} . Ako vidno z rovníc (18), hlavné kvantové číslo n určuje energiu. Číslo l nazývame orbitálnym kvantovým číslom, určuje vlastné hodnoty operátora druhej mocniny momentu hybnosti – teda absolútnu veľkosť momentu hybnosti. Číslo m , ktoré určuje priemet momentu hybnosti do smeru osi z , nazývame magnetickým kvantovým číslom. Ak sa totiž atóm nachádza vo vonkajšom magnetickom poli, a ak vyberieme os z v smere tohto vonkajšieho póla, tak kvantové číslo m bude určovať interakciu elektrónu na danej hladine s vonkajším poľom.

Pauliho nerelativistickú teóriu spinu, aplikovanú na atóm vodíka, opíšeme neskôr.

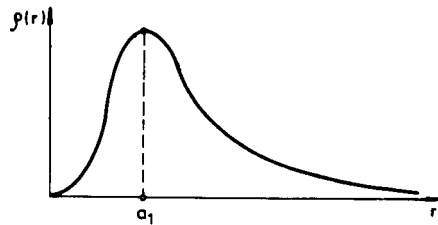
Súvis medzi „starou“ a „novou“ kvantovou teóriou je ilustrovaný nasledujúcim príkladom. V Bohrovom modeli atómu vodíka sa elektrón v stave s najnižšou energiou pohybuje po kruhovej dráhe s polomerom a_1 . V „novej“ kvantovej mechanike je tento stav elektrónu opísaný vlnovou funkciou

$$\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = Y_{00}(\vartheta, \varphi) \quad R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (a_1)^{-3/2} \cdot 2e^{-r/a_1}$$

Pri integrovaní vo sférických súradniciach objemový element je $dV = 4\pi r^2 dr$ (presnejšie: objemový element, integrovaný cez uhlové premenné ϑ a φ). Súčin

$$\bar{\rho} = 4\pi r^2 |\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = 4r^2 a_1^{-3} e^{-2r/a_1} \quad (19)$$

interpretujeme ako hustotu pravdepodobnosti pre výskyt elektrónu vo vzdialenosti r od začiatku súradnicovej sústavy. Graficky je závislosť $\bar{\rho}(r)$ znázornená na obr. 4.11. Z obrázka, práve tak ako z analytického tvaru (19) vidno, že $\bar{\rho}(r)$ dosahuje maximum práve pre $r = a_1$.



Obr. 4.11

Degenerácia hladín energie. Ak k jednej a tej istej hodnote energie prislúcha niekoľko rôznych vlnových funkcií, hovoríme o degenerácii hladín energie. Typickým príkladom pre degeneráciu sú riešenia SchR pre atóm vodíka. Vlnová funkcia $\psi(r)$ je jednoznačne určená troma celými číslami: n, l, m . Hodnoty n, l, m sú viazané nerovnosťami

$$|m| \leq l, \quad 0 \leq l \leq n - 1 \quad (20)$$

Energia prislúchajúca danej vlnovej funkcii je však určená podľa (18) len hlavným kvantovým číslom n . Ku každej hodnote energie prislúcha teda toľko vlnových funkcií ψ_{nlm} , koľko celých čísiel spĺňa nerovnosti (20) pri pevnom n . Ku každému l možno nájsť $2l + 1$ čísiel m , spĺňajúcich (20); povolené hodnoty m sú $m = -l, -l + 1, \dots, l$. Podľa druhej nerovnosti (20) k danému n môžeme teda nájsť

$$N_n = 1 + 3 + \dots + 2n - 1 = n^2 \quad (21)$$

rôznych dvojíc l, m .

Vo všeobecnom prípade centrálne symetrického poľa bude každá energetická hladina $(2l + 1)$ -krát degenerovaná. Tvrdenie vyplýva z tvaru rovnice pre radiálnu časť vlnovej funkcie (10.8), ktorá závisí len od l a od radiálneho kvantového čísla n_r , ktoré sa zavádza v priebehu riešenia. Pretože hodnota energie vystupuje len v rovnici pre $R(r)$ a nie v rovnici pre $Y(\vartheta, \varphi)$, E nezávisí od magnetického kvantového čísla m . Ku každej dvojici n_r, l možno však nájsť $2l + 1$ hodnôt m , a teda riešenia budú $(2l + 1)$ -krát degenerované. Neskôr ešte ukážeme, že degenerácia úzko súvisí s vlastnosťami symetrie $V(r)$ a Laplaceovho operátora. Tak napr. $(2l + 1)$ -násobná degenerácia v sféricky symetrickom poli je práve dôsledkom sférickej symetrie. Operátor energie pre coulombovský potenciál, úmerný $1/r$, má špeciálne vlastnosti symetrie,⁸⁴ ktoré spôsobujú n^2 -násobnú degeneráciu. Pri viacelektrónových atónoch sa elektróny pohybujú v strednom poli jadra a ostatných elektrónov, potenciál už nie je presne coulombovský a n^2 -násobná degenerácia sa stráca.

Poznamenajme ešte na záver, že teóriu atómu vodíka možno priamo aplikovať na ióny podobné vodíku (ktoré obsahujú jediný elektrón) ako He^+ , Li^{++} atď. Stačí všade nahradiť e'^2 výrazom Ze'^2 , kde Z je náboj jadra, a urobiť korekciu na pohyb jadra, o ktorej budeme hovoriť v nasledujúcom článku.

4.12 KOREKCIA NA POHYB JADRA

Doteraz sme považovali protón za fixovaný v začiatku súradnej sústavy a elektrón sa pohyboval v silovom poli tohto statického protónu. Takéto priblíženie by bolo celkom korektné iba pre nekonečne ťažký protón.⁸⁵ V skutočnosti má protón konečnú hmotnosť m_p , hoci v porovnaní s hmotnosťou elektrónu $m = m_e$ veľmi veľkú; $m_e/m_p \approx 1/1840$. Môžeme teda očakávať, že výrazy, ktoré sme odvodili pre energiu atómu vodíka v predchádzajúcom článku, bude treba poopraviť započítaním dôsledkov konečnej hmotnosti protónu. V klasickej fyzike je tento problém jednoduchý. Vieme, že ťažisko izolovanej sústavy je v pokoji a dve častice sa pohybujú tak, že obiehajú okolo tohto ťažiska. V kvantovej mechanike problém nie je oveľa komplikovanejší. Pre dvojčasticovú sústavu treba zase zaviesť súradnicu ťažiska a relatívnu súradnicu a riešiť príslušnú SchR. Ukazuje sa, že túto rovnicu možno separovať a ako výsledok dostaneme pre relatívny pohyb rovnicu veľmi blízku tej SchR, ktorá opisuje pohyb častice v silovom poli nehybnej a nekonečne ťažkej častice.

Teraz to ideme previesť podrobnejšie. Uvažujeme sústavu skladajúcu sa z dvoch častíc; ich súradnice označíme \mathbf{r}_1 a \mathbf{r}_2 . Nech ich vzájomné silové pôsobenie opisuje potenciálna energia $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Operátor celkovej energie sústavy sa bude skladať z operátorov kinetickej energie prvej častice, kinetickej energie druhej častice a potenciálnej energie vzájomného pôsobenia. Máme teda

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1)$$

kde

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$$

a analogický význam má aj ∇_2^2 . Zavedme teraz relatívnu súradnicu \mathbf{r} a súradnicu hmotného stredu \mathbf{R} vzťahmi

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad M = m_1 + m_2$$

Po elementárnych výpočtoch môžeme operátor \mathbf{H} vyjadriť v súradniciach \mathbf{r} a \mathbf{R} . Dostaneme:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \tilde{\nabla}^2 + V(\mathbf{r})$$

⁸⁴ Pozri napr. Baz, A. I. – ZeMovič, J. B. – Perelomov, A. M.: Rassejaniye, reakcii i raspady v nerelativistskoj kvantovoj mehanike, Moskva 1971.

⁸⁵ Pre neurčitost' polohy a hybnosti platí podľa vzťahu neurčitosti $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$. Ak položíme $\Delta p_x = m \Delta v_x$ máme $\Delta x \Delta v_x \sim \hbar/m_p$. V limite $m_p \rightarrow \infty$ môžeme považovať protón za lokalizovaný v začiatku ($\Delta x \sim 0$) a nehybný ($\Delta v_x \sim 0$).

kde μ je redukovaná hmotnosť

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4)$$

a Laplaceove operátory ∇^2 a $\tilde{\nabla}^2$ sú:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

Vlastné funkcie operátora H možno zrejme hľadať v separovanom tvare $\psi(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{R})$. Druhá z nich opisuje pohyb sústavy ako celku. Funkcia $\psi(\mathbf{r})$ opisuje relatívny pohyb dvoch častíc a spĺňa zvyčajnú Schrödingerovu rovnicu, len namiesto hmotnosti jednej z častíc vystupuje v nej redukovaná hmotnosť sústavy (4). Ak napr. častica 1 je elektrón a 2 protón, tak

$$\mu = m_1 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \approx m_1 \frac{1840}{1841}$$

a $\mu \approx m_1$. Zahnutie korekcií na pohyb jadra sa teda prejaví iba v tom, že vo všetkých vzťahoch predchádzajúceho článku nahradíme hmotnosť elektrónu redukovanou hmotnosťou určenou podľa (5).

4.13 ZHRNUTIE

V tejto kapitole sme sa zaoberali s niektorými exaktne riešiteľnými problémami pohybu jedinej častice v poli vonkajších síl. Niektoré zo študovaných otázok boli viac fyzikálnej, iné viac matematickej povahy. Naliehavo odporúčame čitateľovi, aby sa snažil uvedomiť si v každom probléme jeho fyzikálnu podstatu, alebo – snád presnejšie povedané – fyzikálnu logiku problému. Technické podrobnosti môže, v prípade ak ich bude potrebovať, nájsť v monografiách o kvantovej mechanike, alebo v odbornej literatúre o špeciálnych funkciách matematickej fyziky.

V záverečnom článku upozorníme na niektoré otázky, ktoré je zvlášť potrebné si premyslieť a uvedieme niektoré výsledné vzťahy, ktoré často potrebujeme pri riešení praktických úloh.

V prvom rade je žiaduce uvedomiť si súvis medzi úlohami riešenými v tejto kapitole a medzi kvalitatívnou diskusiou v 1. kapitole. Väčšina úloh, ktoré sme tu riešili, boli úlohy na hľadanie vlastných hodnôt hamiltoniánu sústavy, a príslušných vlastných funkcií. Pomocou týchto energií a vlastných funkcií môžeme okamžite zapísať stacionárne stavy sústavy odpovedajúce čistým harmonickým kmitom diskutovaným v 1. kapitole.

Ďalej si treba všimnúť na prípade potenciálovej jamy, harmonického oscilátora a atómu vodíka samotný „mechanizmus kvantovania“, t. j. úlohu SchR a podmienky normovateľnosti vlnovej funkcie. Táto podmienka sa vďaka správaniu sa vlnovej funkcie v okolí singulárnych bodov prejaví ako jednoduché okrajové podmienky a tie spolu so SchR vyberú len diskkrétne fyzikálne interpretovateľné stavy.

Pri prechode častice cez potenciálovú bariéru sa treba podrobnejšie zamyslieť nad rozdielom medzi klasickou a kvantovou mechanikou a všimnúť si najmä vzťah typu

$$\psi(x) \sim \exp\left\{-\int \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]} dx\right\}$$

dávajúci rýchlosť poklesu vlnovej funkcie v oblasti, kde energia častice je menšia ako potenciálna energia.

Teraz uvedieme vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátora energie pre lineárny harmonický oscilátor a pre atóm vodíka, ktoré sa často používajú v aplikáciách.

Lineárny harmonický oscilátor:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2$$

Rovnica $H\psi = E\psi$ má normovateľné riešenia len pri hodnotách energie

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

a príslušné vlnové funkcie sú

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2)$$

kde

$$\xi = x/x_0, \quad x_0 = (\hbar/m\omega_0)^{1/2}$$

Moment hybnosti má v kvantovej mechanike výnimočne dôležitú úlohu. Komutačné vzťahy zložiek operátora momentu hybnosti sú

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Operátor $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ komutuje so všetkými tromi operátormi L_x, L_y, L_z . Zo štvorice L_x, L_y, L_z, L^2 môžeme vybrať dva komutujúce operátory, napr. L_z, L^2 . Ich spoločné vlastné funkcie sú sférické funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ a platí

$$L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

kde $l = 0, 1, 2, \dots$ a pri danom l môže m nadobúdať hodnoty $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$.

Guľové funkcie tvoria úplný ortonormovaný systém na povrchu jednotkovej gule a platí

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Guľové funkcie s niekoľkými najnižšími hodnotami l, m sú

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{20}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_{11}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, \quad Y_{21}(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$$

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \quad Y_{22}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$$

a ďalšie funkcie s $l = 2, l = 1$ možno získať z predchádzajúcich pomocou vzťahu

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi)$$

Atóm vodíka

Vo sférických súradniciach

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right\} - \frac{e^2}{r}$$

kde

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 = -\frac{1}{\hbar^2} L^2 \quad e^2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Rovnica $H\psi = E\psi$ má normovateľné riešenia iba pri hodnotách

$$E_n = -\frac{e'^4}{2\hbar^2 n^2}$$

a príslušné vlastné funkcie sú⁸⁶

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

kde $n = n_r + l + 1$ a radiálne kvantové číslo nadobúda hodnoty $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Najnižšie radiálne vlnové funkcie sú:

$$R_{10}(r) = (1/a_1)^{3/2} \cdot 2e^{-r/a_1}$$

$$R_{20}(r) = (1/2a_1)^{3/2} (2 - r/a_1)e^{-r/2a_1}$$

$$R_{21}(r) = (1/2a_1)^{3/2} \frac{r}{a_1\sqrt{3}} e^{-r/2a_1}$$

kde $a_1 = \hbar^2/me'^2$.

4.14 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Aké sú energetické hladiny elektrónu viazaného
 - vnútri tenkej kovovej vrstvy,
 - vnútri dlhého tenkého kvádra s dĺžkou L a so štvorcovou základňou dĺžkou a , $L \gg a$.
Aproximujte v oboch prípadoch situáciu potenciálovými jamami s nekonečne vysokými stenami. Ktoré excitácie budú dôležité pri nižších teplotách?
- Porovnajte „tunelovacie“ schopnosti elektrónov a protónov. Podmienky „súťaže“ sú takéto: obe častice majú kinetickú energiu 1 eV a dopadajú na potenciálovú bariéru s výškou 2 eV a šírkou rovnou priemeru atómu vodíka. Porovnať treba príslušné koeficienty prechodu.
- Zväzok elektrónov s kinetickou energiou 80 eV letí v kovovej trubici. Elektróny potom vletia do druhej trubice, ktorá má voči prvej potenciál -50 V.
 - Koľko elektrónov sa odrazí naspäť?
 - Odzrazia sa niektoré elektróny naspäť aj vtedy, ak trubica B má potenciál $+50$ V?
- Positron je častica s rovnakou hmotnosťou a opačným nábojom ako elektrón. Elektrón a pozitron môžu vytvoriť nestabilný „atóm“ (pozitronium), podobný atómu vodíka. Zabudnite na chvíľu na otázky nestability a vypočítajte energie stacionárnych stavov pozitronia. Porovnajte so spektrom vodíka. Bude nejaká spektrálna séria pozitronia ležať v oblasti viditeľného svetla?
- μ -mezón je častica s rovnakým nábojom ako elektrón, ale jeho hmotnosť je asi 207-krát väčšia ako hmotnosť elektrónu.
 - Nájdite energetické hladiny μ -mezoatómu vodíka a Bohrov polomer tejto sústavy.
 - Ak sa v ťažších jadrách zachytí μ -mezón na jednu z hladín s nízkym hlavným kvantovým číslom n , potom sa pohybuje tak blízko pri jadre, že tienenie elektrónmi možno zanedbať. Odhadnite energiu γ -kvánt pre K_α -čiaru v μ -mezoatóme cínu (Sn, $Z = 50$). K_α čiara odpovedá prechodu z hladiny $n=2$ na hladinu $n=1$.
- Nájdite vlnové funkcie a vlastné hodnoty energie pre trojrozmerný harmonický oscilátor
 - separáciou premenných v karteziánskych súradniciach,
 - separáciou premenných vo sférických súradniciach.
- Častica sa nachádza v potenciálovej jame $V(r) = -V_0$, pre $r \leq a$ ($V_0 > 0$); $V(r) = 0$ pre $r > a$. Nájdite energiu a vlnové funkcie viazaných stavov s momentom hybnosti $l = 0$, $l = 1$.
- Častica je viazaná v guli s polomerom R . Formálne by sme mohli povedať, že sa pohybuje v poli potenciálu $V(r) = 0$ pre $r < R$, $V(r) = \infty$ pre $r > R$. Nájdite energie a vlnové funkcie stavov s $l = 0$ (s -stavy) a s $l = 1$ (p -stavy).
- Jadro deutéria sa skladá z protónu a z neutrónu. Celkový spin je 1 (v jednotkách \hbar), čo znamená, že obidva spiny sú rovnobežné. Orbitálny moment hybnosti je nulový (s -stav). Interakciu možno približne opísať sféricky symetrickou potenciálnou energiou

$$U(r) = A \exp(-r/a)$$

Nájdite vlnovú funkciu základného stavu.

⁸⁶ Vzhľadom na degeneráciu energetických hladín v atóme vodíka je ľubovoľná lineárna kombinácia $\sum_{lm} c_{lm} \psi_{nlm}$ vlastnou funkciou hamiltoniánu príslušnou k vlastnej hodnote E_n .

10. Rovinný rotátor si môžeme predstaviť ako „činku“, ktorej vonkajšie väzby dovoľujú rotovať iba v istej rovine. Takáto fyzikálna sústava je potom charakterizovaná jediným parametrom – momentom zotrvačnosti. Stav rovinného rotátora v klasickej mechanike je daný napríklad vhodným uhlom ako zovšeobecnenou súradnicou a momentom hybnosti ako príslušnou kanonicky združenou veličinou.
- Vyjadrite hamiltonián voľného rovinného rotátora,
 - nájdite spektrum energie.
11. Aké bude rotačné spektrum molekuly HCl, ak vzdialenosť medzi jadrami H a Cl je okolo 0,1 nm?
12. Molekula CO absorbuje (v mikrovlnnej oblasti) žiarenie na čiare s frekvenciou $\nu = 1,153 \cdot 10^5$ MHz. Tento prechod možno pripísať prechodu z rotačnej hladiny s $l = 1$ na hladinu s $l = 0$. Určte odtiaľ vzdialenosť medzi jadrom C a jadrom O v molekule CO.
13. V článku 4.4 sme pomocou kvalitatívnych argumentov ukázali, že v jednorozmernej pravouhlej prítiažlivej potenciálovej jame existuje vždy aspoň jeden viazaný stav. Zistite podobným spôsobom, či tvrdenie platí aj v 2- a 3-rozmernom prípade.

5 SPIN. SÚSTAVY S DVOMA HLADINAMI

5.1 ÚVOD

Spin elektrónu je najjednoduchší kvantovomechanický objekt a jeho opis je najčistejšou ukážkou formalizmu kvantovej mechaniky. Na prvý pohľad by sa mohlo zdať, že opis spinových stavov elektrónu je celkom iný ako napríklad opis stavov lineárneho harmonického oscilátora, alebo stavov elektrónu v atóme vodíka. Neskôr sa ale ukáže, že opis spinu je veľmi blízky všeobecnému kvantovo-mechanickému formalizmu a to je aj dôvod, pre ktorý sa so spinom budeme zaoberať podrobnejšie.

V tejto kapitole začneme s opisom spinových stavov a operátorov, ktoré na tento stav pôsobia. Potom si všimneme správanie spinu v magnetickom poli a v ďalšom ukážeme, že ľubovoľná „dvojhladinová“ sústava, t. j. sústava, ktorá má (presne, alebo v istom priblížení) iba dva lineárne nezávislé stavy, je opísaná tým istým formalizmom ako spin elektrónu. Napokon si ukážeme zovšeobecnenia „dvojhladinového“ formalizmu na prípad sústav s N -hladinami a pri tej príležitosti sa naučíme o vlastnostiach matic typu $N \times N$ to, čo v kvantovej mechanike často potrebujeme.

5.2 STAVY SPINU

Najkrajšie na kvantovomechanickom opise spinu je to, že tento opis je priamym dôsledkom všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky (najmä princípu superpozície) a experimentálnych výsledkov. Podľa toho, čo sme už hovorili v článku 1.8, o prechode zväzku elektrónov⁸⁷ cez Sternov-Gerlachov prístroj s nehomogenitou poľa v smere osi z , vieme, že zväzok sa rozštiepi na dve časti. V jednej z nich budú elektróny, ktoré majú priemet spinu na os z rovnú $+\hbar/2$ a priemet magnetického momentu $-\hbar/2m$ a v druhej budú elektróny s priemetom spinu na os z rovným $-\hbar/2$ a s priemetom magnetického momentu $\hbar/2m$ (v našej konvencii $e > 0$ a náboj elektrónu je $-e$).

Experiment takto jednoznačne ukazuje na to, že existujú dva *lineárne nezávislé spinové stavy elektrónu*, môžeme ich zatiaľ označiť celkom ľubovoľne, napríklad ako ψ_1 , ψ_2 .

Upozorníme tu výslovne, že pod ψ_1 a ψ_2 tu nemáme na mysli vlnové funkcie, ani zatiaľ bližšie nešpecifikujeme, o aký druh matematických objektov ide. Prosto ψ_1 a ψ_2 sú označenia stavov. Ich význam je zrejмый: ak spinový stav elektrónu je ψ_1 potom priemet jeho spinu na os z je $+\hbar/2$ a elektrón sa s určitou pravdepodobnosťou vychýli „nahor“, ak je v spinovom stave ψ_2 , potom tento priemet spinu je $-\hbar/2$ a elektrón sa určite vychýli „nadol“.

Podľa analógie s vlnovými funkciami očakávame, že i pre spinové stavy platí princíp superpozície. Všeobecný spinový stav preto zapíšeme v tvare

$$\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 \quad (1)$$

kde α_1 a α_2 sú komplexné čísla. Výraz (1) je zatiaľ len symbolický, pretože charakter ψ_1 a ψ_2 nie je definovaný. Napriek tomu zápis (1) má celkom určitý fyzikálny význam. Hodláme totiž koeficienty α_1 a α_2 interpretovať podobne ako v prípade superpozície vlnových funkcií. Koeficient α_1 by mal mať význam amplitúdy pravdepodobnosti pre nájdenie spinu v stave „hore“. Presnejšie: pravdepodobnosť toho, že pri prechode elektrónu nachádzajúceho sa v stave ψ prístrojom SG sa elektrón vychýli „nahor“ by mala byť $P_1 = |\alpha_1|^2$. A podobne pre koeficient α_2 .

⁸⁷ Pripomeňme, že experiment sa nedá uskutočniť s elektrónmi a preto si môžeme predstaviť prechod atómov Na alebo Ag v základnom stave cez SG prístroj. V tejto situácii sú v atóme Na skompenzované všetky magnetické momenty, okrem príspevku od jediného valenčného elektrónu a atóm ako celok je neutrálny. Druhou možnosťou je predstaviť si prechod zväzku neutrónov cez prístroj. Neutróny majú tiež spin $1/2$ ako elektróny, majú tiež magnetický moment úmerný spinu, a ich elektrický náboj je nulový.

Aby takáto interpretácia bola možná, musia byť – podľa analógie s vlnovými funkciami – stavy ψ_1 a ψ_2 „normované“ a „navzájom ortogonálne“. Pre vlnové funkcie bol pojem ortogonalita definovaný vzťahom typu

$$\int \Phi_1^*(x)\Phi_2(x)dx = 0 \quad (2)$$

Obdobný vzťah pre stavy ψ_1 a ψ_2 zatiaľ definovaný nemáme, ale fyzikálne tieto stavy majú všetky vlastnosti, ktoré prislúchajú ortogonálnym stavom.

Napríklad ak prepustíme zväzok elektrónov (v ľubovoľnom stave) cez SG prístroj a do zväzku odchýleného „hore“ postavíme ďalší rovnako orientovaný SG prístroj, potom tento druhý prístroj nájde vždy stav ψ_1 . Stavom ψ_1 a ψ_2 prislúchajú dva rôzne (makroskopické) údaje SG prístroja (vychýlenie nahor alebo nadol). Podľa našej diskusie o meraní v kvantovej mechanike teda sú to dva vlastné stavy veličiny, ktorú SG prístroj meria (priemet spinu), pritom stavy prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám, a teda (fyzikálne) ortogonálne. Zavedieme preto aj formálny symbol tejto ortogonalnosti⁸⁸

$$(\psi_1|\psi_2) = 0 \quad (2')$$

čo je analóg vzťahu (2).

Stavy ψ_1 a ψ_2 tvoria úplný systém spinových stavov, ľubovoľný stav sa dá vyjadriť ako ich lineárna kombinácia (1). Ak by vo vzťahu (1) išlo o vlnové funkcie, potom by sme mohli koeficient α_1 (resp. α_2) vyjadriť v tvare (pozri (2.13.9))

$$\alpha_1 = \int \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Na pravej strane stojí výraz rovnakého typu ako v podmienke ortogonalita. Preto i pre spinové stavy je užitočné definovať formálne

$$\alpha_i = (\psi_i|\psi_2) \quad i = 1, 2 \quad (3)$$

resp.

$$\alpha_i = (\psi_i|\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) \quad i = 1, 2 \quad (3')$$

Odtiaľ v špeciálnom prípade dostaneme

$$(\psi_i|\psi_i) = 1 \quad (3'')$$

čo je analóg podmienky normovanosti vlnových funkcií.

Domnievame sa, že v tomto štádiu je už motivovaná definícia⁸⁹ formálneho výrazu $(\Phi|\psi)$ pre ľubovoľné spinové stavy

$$\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 \quad (4)$$

$$\Phi = \beta_1\psi_1 + \beta_2\psi_2$$

v tvare⁹⁰

$$(\Phi|\psi) = \beta_1^*\alpha_1 + \beta_2^*\alpha_2 \quad (5)$$

Vzťahy (2'), (3), (3'), (3'') sú špeciálnym prípadom všeobecnej definície (5).

Všimnime si, že ľubovoľný stav ψ je plne určený zadaním koeficientov α_1 , α_2 v rozvoji (1). Každému stavu ψ je takto priradený dvojkomponentný výraz

$$\psi \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

⁸⁸ Graficky sa tento symbol podobá na v matematike používaný symbol označujúci skalárny súčin. Označenie nie je zvolené náhodne; ako uvidíme neskôr, výraz na ľavej strane je naozaj skalárnym súčinom.

⁸⁹ Výraz $(\Phi|\psi)$ má všetky vlastnosti skalárneho súčinu a nazývame ho skutočne skalárny súčin stavov ψ a Φ .

⁹⁰ Užitočnosť komplexného združenia koeficientov β vo vzťahu (5) bude zrejmá až neskôr.

špeciálne

$$\psi_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_2 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dvojkomponentné výrazy tohto typu nazývame spinormi⁹¹. Lubovoľný spinový stav možno teda reprezentovať dvojkomponentným spinorom. Pre takto spinormi reprezentované stavy naše doterajšie úvahy prestávajú mať iba formálny význam a nadobúdajú matematicky dobre definovaný zmysel.

Tak napríklad lineárnej kombinácii $\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$ priradíme dvojkomponentnú veličinu

$$\alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 \equiv \psi \rightarrow \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Zavedieme tiež spinor Φ^+ združený so spinorom Φ a označíme ho nasledovne

$$\text{ak } \Phi \rightarrow \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}, \text{ tak } \Phi^+ \rightarrow (\beta_1^*, \beta_2^*) \quad (7)$$

Súčin $\Phi^+ \psi$ potom definujeme tak, ako súčin dvoch matic typu (1, 2) a (2, 1), pričom prvé číslo v zátvorke udáva počet riadkov a druhé počet stĺpcov. Máme teda

$$(\Phi | \psi) \equiv \Phi^+ \psi = (\beta_1^*, \beta_2^*) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = (\beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2) \quad (8)$$

a tento symbol je práve rovný skalárnemu súčinu $(\Phi | \psi)$ zavedenému vyššie. Poznamenajme, že pre tento skalárny súčin platí

$$(\Phi | \psi)^* = (\psi | \Phi)$$

ako ľahko vidno zo vzťahu (8). Predchádzajúce môžeme zhrnúť nasledovne:

Stavom spinu elektrónu sú priradené dvojkomponentné veličiny

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 = \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

kde

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

sú dva stavy dané experimentálne tým, že v prvom z nich v SG prístroji (s nehomogenitou poľa v smere osi z) nájdeme s určitosťou spin v smere „hore“ a v druhom nájdeme s určitosťou spin „dolu“.

Skalárny súčin dvoch spinových stavov je definovaný rovnicami (4) a (5) a amplitúdy pravdepodobnosti pre nájdenie spinu „hore“ resp. „dolu“ v stave ψ sú dané skalárnymi súčinnami $(\psi_1 | \psi)$ resp. $(\psi_2 | \psi)$.

5.3 OPERÁTORY PÔSOBIACE NA SPINOVÉ STAVY A ICH ZÁKLADNÉ VLASTNOSTI

V kvantovej mechanike fyzikálnym veličinám priradíme lineárne hermitovské operátory.

Pozrime sa teraz na to, ako vyzerajú všeobecné lineárne a hermitovské operátory pôsobiace na spinové stavy. Každý spinový stav je charakterizovaný dvoma komplexnými číslami α_1, α_2 zapísanými v tvare spinora. Najvšeobecnejšia lineárna transformácia má zrejme tvar

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \alpha'_1 &= A_{11}\alpha_1 + A_{12}\alpha_2 \\ \alpha'_2 &= A_{21}\alpha_1 + A_{22}\alpha_2 \end{aligned} \quad (1)$$

⁹¹ Poznamenajme, že nie každá dvojkomponentná matica typu (2,1) sa nazýva spinorom. V pojme spinoru je zahrnutý aj predpis, podľa ktorého sa zložky spinoru transformujú pri rotáciách súradnicovej sústavy. Tento predpis uvidíme podrobne v kap. 11.

kde čísla $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$ charakterizujú danú lineárnu transformáciu, t. j. daný lineárny operátor a nezávisia od α_1, α_2 . Operátor definovaný v (1) môžeme zapísať aj takto

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

kde na pravej strane v (2) máme násobenie matice 2×2 a dvojkomponentného spinora. Lineárnemu operátoru pôsobiacemu na spinové stavy je teda jednoznačne priradená istá matica 2×2 .

Strednú hodnotu daného operátora definujeme ako skalárny súčin $(\psi | \mathbf{A} \psi)$, kde ψ je spinor, \mathbf{A} je 2×2 matica, $\mathbf{A} \psi$ je spinor, ktorý dostaneme po pôsobení operátora \mathbf{A} na spinor ψ a skalárny súčin je definovaný v (2.8). Ak strednú hodnotu označíme \bar{A} a vykonáme naznačený skalárny súčin, dostaneme

$$\begin{aligned} \bar{A} &= (\psi | \mathbf{A} \psi) \equiv \psi^\dagger \mathbf{A} \psi = \\ &= \alpha_1^* A_{11} \alpha_1 + \alpha_1^* A_{12} \alpha_2 + \alpha_2^* A_{21} \alpha_1 + \alpha_2^* A_{22} \alpha_2 \end{aligned} \quad (3)$$

Hermitovskými operátormi, alebo hermitovskými maticami nazveme také 2×2 matice, pre ktoré je stredná hodnota v (3) reálna pri každej dvojici α_1, α_2 . Z podmienky $\bar{A} = (\bar{A})^*$ dostaneme po dosadení z (3)

$$\begin{aligned} &\alpha_1^* A_{11} \alpha_1 + \alpha_1^* A_{12} \alpha_2 + \alpha_2^* A_{21} \alpha_1 + \alpha_2^* A_{22} \alpha_2 = \\ &= \alpha_1 A_{11}^* \alpha_1^* + \alpha_1 A_{12}^* \alpha_2^* + \alpha_2 A_{21}^* \alpha_1^* + \alpha_2 A_{22}^* \alpha_2^* \end{aligned} \quad (4)$$

Ak vyberieme $\alpha_1 \neq 0, \alpha_2 = 0$ dostaneme odtiaľ $A_{11} = A_{11}^*$, podobne pre $\alpha_1 = 0, \alpha_2 \neq 0$ dostaneme $A_{22} = A_{22}^*$ a z rovnice (4) ostane podmienka

$$\alpha_1^* (A_{12} - A_{21}^*) \alpha_2 + \alpha_2^* (A_{21} - A_{12}^*) \alpha_1 = 0$$

Táto bude splnená pri ľubovoľnom α_1, α_2 len vtedy, ak platí $A_{12} = A_{21}^*$. Ak má teda matica

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

opisovať hermitovský operátor, potom musí platiť $A_{11} = A_{11}^*, A_{22} = A_{22}^*, A_{12} = A_{21}^*$ a môžeme ju zapísať ako

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b + ic \\ b - ic & d \end{pmatrix} \quad (5)$$

kde a, b, c, d sú reálne čísla.

Maticou hermitovsky združenou k matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

nazývame maticu

$$\mathbf{A}^+ = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}$$

a pre elementy matíc \mathbf{A}, \mathbf{A}^+ teda platí

$$(\mathbf{A}^+)_{ik} = \mathbf{A}_{ki}^* \quad i, k = 1, 2 \quad (6)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že pre dva ľubovoľné spinory platí

$$(\Phi | \mathbf{A} \psi)^* = (\psi | \mathbf{A}^+ \Phi) \quad (7)$$

Z podmienky (6) vidíme tiež, že matica je hermitovská ak

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$$

Dôkaz rovnice (7) dostaneme najjednoduchšie tak, že ľavú i pravú stranu explicitne rozpíšeme

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \sum_{i,k=1,2} \Phi_i^* \mathbf{A}_{ik} \psi_k$$

$$(\psi|\mathbf{A}^+\Phi) = \sum_{i,k=1,2} \psi_k^* (\mathbf{A}^+)_{ki} \Phi_i$$

a využijeme vlastnosť (6).

Vlastným spinorom, alebo vlastným stavom matice \mathbf{A} nazývame spinor ψ , pre ktorý platí

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi \quad (8)$$

kde λ je číslo. Ľahko možno ukázať, že pre hermitovskú maticu musí byť λ reálne. Stačí totiž urobiť skalárny súčin

$$(\psi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\psi|\psi)$$

kde naľavo máme strednú hodnotu hermitovskej matice a tá je vždy reálnym číslom, ako sme ukázali už vyššie, a na pravej strane je $(\psi|\psi)$ tiež reálnym číslom, lebo pre

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

máme

$$(\psi|\psi) = \alpha_1^* \alpha_1 + \alpha_2^* \alpha_2 = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2$$

Podobne ľahko možno ukázať, že spinory príslušné k dvom rôznym vlastným hodnotám sú navzájom ortogonálne. Presnejšie, nech pre hermitovskú maticu \mathbf{A} a spinory ψ, Φ platí

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi, \quad \mathbf{A}\Phi = \lambda'\Phi, \quad \lambda \neq \lambda' \quad (9)$$

potom

$$(\psi|\Phi)^* = (\Phi|\psi) = 0$$

Z rovníc (9) najprv vytvoríme výrazy

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\Phi|\psi) \quad (10)$$

$$(\psi|\mathbf{A}\Phi) = \lambda'(\psi|\Phi) \quad (10')$$

V druhej z týchto rovníc prevedieme komplexné združenie a využijeme

$$(\psi|\Phi)^* = (\Phi|\psi), \quad (\psi|\mathbf{A}\Phi)^* = (\Phi|\mathbf{A}\psi)$$

pričom prvá z rovníc platí všeobecne a druhá podľa (7) platí pre hermitovské matice. Z rovníc (10) a (10') tak dostaneme

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\Phi|\psi)$$

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda'(\Phi|\psi)$$

Ak odrátame prvú od druhej máme a

$$0 = (\lambda - \lambda')(\Phi|\psi)$$

a pretože $\lambda \neq \lambda'$ dostávame $(\Phi|\psi) = 0$

Dôkazy tvrdení o reálnosti vlastných hodnôt a o ortogonálnosti vlastných funkcií príslušných k rôznym vlastným hodnotám, ktoré sme práve urobili sú presne analogické dôkazom v článku 2.13. Urobili sme ich tu znova jednak ako opakovanie, jednak ako zdôraznenie toho, že s maticami možno pracovať presne tak ako s operátormi a napokon aj preto, že abstraktne vyzerajúce tvrdenie použité pre matice 2×2 a dvojkomponentné stavy je sympatické tým, že si každý krok môžeme overiť „na prstoch“. Navyše ak si raz takúto vec na maticiach 2×2 uvedomíme podrobne, potom budú analogické tvrdenia vyzeráť prirodzene aj pre matice $N \times N$, s ktorými sa ešte bližšie stretne.

Podme si teda spočítať explicitne vlastné hodnoty všeobecnej 2×2 hermitovskej matice (5). Pre vlastný spinor so zložkami α_1, α_2 musí platiť

$$\begin{pmatrix} a & b+ic \\ b-ic & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (11)$$

kde λ je vlastná hodnota. Rovnicu (11) môžeme hneď prepísať na tvar

$$\begin{pmatrix} a-\lambda & b+ic \\ b-ic & d-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (12)$$

Toto je homogénna sústava rovníc, ktorá má riešenie len vtedy, ak jedna z rovníc je dôsledkom druhej a teda ak determinant sústavy je nulový. Nulovosť determinantu ale znamená

$$(a-\lambda)(d-\lambda) - (b+ic)(b-ic) = 0$$

t. j.

$$(a-\lambda)(d-\lambda) - (b^2 + c^2)$$

Úpravou máme

$$\lambda^2 - (a+d)\lambda + ad - b^2 - c^2 = 0$$

a dostávame dva korene

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \{a+d \pm \sqrt{D}\} \quad (13)$$

kde

$$D = (a-d)^2 + 4(b^2 - c^2) \geq 0$$

Pritom λ_1, λ_2 sú vlastnými hodnotami hermitovskej matice (11) a ako vidno obidve sú reálne. Príslušné vlastné spinory matice (11) sú určené podmienkami (12) až na multiplikačný (komplexný) faktor a pri tejto voľnosti ich môžeme vybrať napríklad takto

$$\Phi_1 = N_1 \begin{pmatrix} -\frac{2(b^2 + c^2)}{a-d-\sqrt{D}} \\ b-ic \end{pmatrix} \quad \Phi_2 = N_2 \begin{pmatrix} -\frac{2(b^2 + c^2)}{a-d+\sqrt{D}} \\ b-ic \end{pmatrix} \quad (14)$$

kde N_1, N_2 sú zatiaľ ľubovoľné konštanty.

Ľahko vidno, že $(\Phi_1|\Phi_2) = 0$ a bez ťažkosti by sme našli aj konštanty N_1, N_2 , pre ktoré $(\Phi_1|\Phi_1) = 1$, $(\Phi_2|\Phi_2) = 1$. Výber týchto konštánt, prirodzene, nemení platnosť vzťahu $(\Phi_1|\Phi_2) = 0$.

Vzhľadom na to, že každý operátor pôsobiaci na spinové stavy musí byť opísaný hermitovskou maticou typu (5), jednoduchý výpočet, ktorý viedol k (13) a (14) je vlastne univerzálnou schémou pre nájdenie vlastných hodnôt a vlastných spinorov operátora pôsobiaceho na spinové stavy. Ak teda meriame veličinu, ktorej odpovedá matica (5), potom ako výsledok merania môžeme dostať iba hodnoty λ_1, λ_2 dané vzťahmi (13) a po nameraní λ_1 , resp. λ_2 bude sústava v stave ψ_1 , resp. ψ_2 danom rovnicami (14). Pravdepodobnosť namerať hodnotu λ_i v stave opísanom spinorom Φ je daná výrazom

$$P_i = |(\psi_i|\Phi)|^2 \quad (15)$$

5.4 PAULIHO MATICE

V tomto článku nájdeme operátory odpovedajúce priemetu spinu do súradnicových osí x, y, z a potom nájdenie aj operátor odpovedajúci priemetu spinu do smeru daného jednotkovým vektorom \mathbf{n} . Pri diskusii je veľmi užitočné mať aj konkrétnu predstavu o nejakom prístroji, ktorým tieto priemety

meriame a budeme si teda predstavovať, že priemet do osi z meriame Sternovým a Gerlachovým prístrojom s nehomogenitou magnetického poľa v smere osi z . Takýto prístroj označíme ako $SG(z)$. Podobne prístroje na meranie priemetu spinu na osi x, y , resp. \mathbf{n} budeme označovať ako $SG(x), SG(y)$, resp. $SG(\mathbf{n})$, pričom je to vlastne vždy to isté zariadenie natočené tak, aby nehomogenita poľa mala smer naznačený v zátvorke. Najprv nájdeme operátor priemeru spinu na os z . Ak sú spinovým stavom priradené dvojkomponentné spinory podľa konvencie z článku 5.2, potom hľadaným operátorom je matica 2×2 s vlastnými

hodnotami $\pm\hbar/2$ a vlastnými spinormi $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ resp. $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Takáto matica má tvar

$$\mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Teraz potrebujeme nájsť matice s_x, s_y odpovedajúce priemetom spinu na os x , resp. y . Vzhľadom na to, že tieto veličiny nemajú klasický analóg, treba ich v istom zmysle „uhádnuť“. Ak však žiadame, aby tieto matice spĺňali isté fyzikálne nevyhnutné podmienky, je ich „uhádnutie“ prakticky jednoznačné. Podmienky, ktoré majú s_x, s_y, s_z spĺňať, sú tieto⁹²:

- každá z nich musí byť hermitovskou maticou (lebo len takéto matice môžu opisovať fyzikálne veličiny),
- každá z nich musí mať vlastné hodnoty $+\hbar/2, -\hbar/2$ (ako ukazuje experiment, priemet spinu do ľubovoľného smeru môže nadobúdať iba tieto dve hodnoty),
- musia spĺňať komutačné vzťahy typické pre moment hybnosti (pozri článok 4.9), t. j.

$$\begin{aligned} [\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y] &= i\hbar\mathbf{s}_z \\ [\mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z] &= i\hbar\mathbf{s}_x \\ [\mathbf{s}_z, \mathbf{s}_x] &= i\hbar\mathbf{s}_y \end{aligned} \quad (1)$$

Táto posledná požiadavka vlastne hovorí, že spinové matice $\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z$ majú spĺňať presne tie isté komutačné vzťahy ako operátory priemetov momentu hybnosti $\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y, \mathbf{L}_z$. Na tomto štádiu⁹³ je to intuitívna fyzikálna požiadavka a jej správnosť sa – ako vždy v takýchto prípadoch – potvrdzuje súhlasom dôsledkov s experimentom.

Pri hľadaní matíc, ktoré spĺňajú tieto požiadavky je užitočné zaviesť najprv matice $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ vzťahmi

$$\mathbf{s}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad \mathbf{s}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad \mathbf{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \quad (2)$$

Sú to opäť hermitovské matice, ich vlastné hodnoty sú ± 1 , a spĺňajú komutačné vzťahy

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad \text{a cyklicky ďalej} \quad (3)$$

Nebudeme sa tu pokúšať ukázať, že spomínané požiadavky určujú matice $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ prakticky jednoznačne, ale napíšeme rovno konečný výsledok (W. Pauli, 1925)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Všimnime si, že z matíc $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ je matica σ_z význačná: je diagonálna. Je to tak preto, že už pri preradení spinorov spinovým stavom sme vybrali os z ako význačnú. Presnejšie: spinory sme konštruovali pomocou vyjadrenia typu $\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$, kde ψ_1 a ψ_2 sú (konvenciou vybraté) vlastné stavy priemetu spinu na os z . Ak by sme boli vybrali ako význačnú inú os – napríklad x – bola by diagonálna matica σ_x a spinové stavy by boli reprezentované inými spinormi. Fyzikálne výsledky by však boli od zvolenej konvencie nezávislé.

Odporúčame tiež čitateľovi, aby sa postupom z predchádzajúceho odseku presvedčil explicitne o tom, že vlastné hodnoty každej z týchto matíc sú naozaj ± 1 a našiel príslušné vlastné spinory. Uvedieme tu

⁹² V skutočnosti tieto podmienky nie sú nezávislé.

⁹³ Neskôr, v kapitole venovanej momentu hybnosti ukážeme, že táto požiadavka vyplýva zo všeobecných vlastností transformácie stavov pri priestorových rotáciách.

iba výsledné vlastné spinory, pričom prvý vždy odpovedá vlastnej hodnote +1, druhý vlastnej hodnote -1.

$$\sigma_x: \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5a)$$

$$\sigma_y: \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1+i \\ 1+i \end{pmatrix} \quad (5b)$$

$$\sigma_z: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5c)$$

Ostáva nám ešte odpovedať na otázku, aký operátor odpovedá priemetu spinu do smeru \mathbf{n} ; inak formulované: akú fyzikálnu veličinu meria prístroj SG(\mathbf{n}) (pozri začiatok tohto článku). Odpoveď sa zase pokúsime „uhádnuť“. Všimnime si najprv, že každú z matic σ_x , σ_y , σ_z môžeme vlastne zapísať ako

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z \quad (6)$$

kde \mathbf{n} je určitý vhodne vybraný jednotkový vektor. V označení $\mathbf{n}(n_x, n_y, n_z)$ dostaneme zo (6), maticu σ_x ak vyberieme $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1(1, 0, 0)$, maticu σ_y pre $\mathbf{n} = -\mathbf{n}_2(0, 1, 0)$ a napokon maticu σ_z pre $\mathbf{n} = \mathbf{n}_3(0, 0, 1)$. Takto môžeme očakávať, že matica pre priemet spinu na os \mathbf{n} sa rovná práve $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}$. Jednotkový vektor \mathbf{n} je najvhodnejšie zapísať tak, že je zadaný uhlami ϑ a φ vo sférických súradniciach. Zložky \mathbf{n} v takomto zápise sú

$$\mathbf{n}(\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$$

o čom sa môžeme rýchlo presvedčiť ak si nakreslíme príslušný obrázok. Pre súčin $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ potom po jednoduchých úpravách dostaneme

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (7)$$

V tomto prípade sa tiež rýchlo presvedčíme o tom, že vlastné spinory odpovedajúce vlastným hodnotám +1, -1 tejto matice sú:

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Pri výpočte stačí použiť trigonometrické vzťahy $\cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta = \cos(\alpha + \beta)$, $\sin \alpha \cos \beta + \sin \beta \cos \alpha = \sin(\alpha + \beta)$. Vidno tiež, že výrazy v (5) sú len špeciálnymi prípadmi (8), pričom kladnému smeru osi x odpovedajú uhly $\varphi = 0$, $\vartheta = \pi/2$ a kladnému smeru osi y uhly $\varphi = \pi/2$, $\vartheta = \pi/2$.

Poznamenajme, že niekedy za vlastné spinory matice σ_y vyberáme

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

ktoré sa od uvedených v (5b) líšia iba multiplikatívnymi faktormi, s absolútnou hodnotou rovnou jednej.

V predchádzajúcom článku sme ukázali explicitným výpočtom ako možno nájsť vlastné hodnoty a vlastné vektory ľubovoľnej hermitovskej matice typu 2×2 , t. j. matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b+ic \\ b-ic & d \end{pmatrix}$$

Naznačíme tu ešte druhý prístup. Maticu môžeme totiž zapísať ako lineárnu kombináciu jednotkovej matice, označenej ako $\mathbf{1}$ a Pauliho matic. Pre maticu \mathbf{A} máme

$$\mathbf{A} = \frac{a+d}{2} \mathbf{1} + b\sigma_x - c\sigma_y + \frac{a-d}{2} \sigma_z$$

Tento výraz ale môžeme zapísať aj ako

$$\mathbf{A} = \alpha \mathbf{1} + \beta \mathbf{n} \cdot \vec{\sigma} \quad (9)$$

kde α, β sú reálne čísla a \mathbf{n} je jednotkový vektor

$$\alpha = \frac{a+d}{2}, \quad \beta = \left[b^2 + c^2 + \frac{(a-d)^2}{4} \right]^{1/2}$$

$$\mathbf{n} = \beta^{-1} \left(b, -c, \frac{a-d}{2} \right) \quad (10)$$

Vlastné hodnoty matice $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$ sú ± 1 , a preto vlastné hodnoty matice \mathbf{A} budú $\alpha \pm \beta$ a vlastné spinory matice \mathbf{A} sú vlastnými spinormi matice $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, pričom uhly ϑ, φ vystupujúce v (8) musíme určiť zo zložiek vektora \mathbf{n} daných v (10).

Ak poznáme vlastné hodnoty a vlastné spinory Pauliho matic a tým aj operátorov spinu, vieme odpovedať na veľa otázok týkajúcich sa merania priemetov spinu. Otázky tohto typu sú pritom najvhodnejším spôsobom na ujasnenie si kvantovomechanického opisu merania fyzikálnych veličín.

Uvedieme tu iba jeden veľmi jednoduchý príklad. Predpokladajme, že zväzok elektrónov prechádza cez prístroj SG(z) a prístroj prepustí iba elektróny s priemetom spinu na os z rovným $+\hbar/2$. Tieto elektróny necháme dopadať na prístroj SG(x) a pýtame sa na to, s akou pravdepodobnosťou nájdeme pri tomto meraní priemet spinu na os x rovný $+\hbar/2$. Odpoveď je jednoduchá. Elektróny, ktoré prešli cez SG(z) sú všetky v stave opísanom spinorom

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Pri meraní v SG(x) nájdeme priemet spinu na os x, rovný $\hbar/2$ s pravdepodobnosťou

$$P = |(\Phi | \psi)|^2 = 1/2$$

kde Φ je prvý zo spinorov v riadku (5a).

Pri tomto meraní nastáva zmena stavu a spinový stav, ktorý bol pred meraním opísaný spinorom ψ bude po meraní opísaný uvedeným spinorom Φ .

Pauliho matice $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (ďalej označované ako $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) spĺňajú viacero dôležitých vzťahov, často používaných pri riešení praktických úloh. Niektoré z nich tu uvedieme a dôkazy prenecháme čitateľovi.

$$[\sigma_i, \sigma_j] \equiv \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (11)$$

kde symbol ε_{ijk} označuje úplne antisymetrický tenzor, $\varepsilon_{123} = 1$ a používame (tzv. Einsteinovu) konvenciu, podľa ktorej cez index vyskytujúci sa dvakrát automaticky sčítujeme.

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \mathbf{1} \quad (12)$$

Z predchádzajúceho

$$\sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbf{1} \quad (13)$$

$$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = i \mathbf{1} \quad (14)$$

$$Sp \sigma_i = 0 \quad (15)$$

pričom symbol Sp označuje stopu matice, t. j. súčet jej diagonálnych elementov.

$$\text{Det } \sigma_i = -1 \quad (16)$$

Ak \mathbf{a}, \mathbf{b} sú dva trojrozmerné vektory (nie matice), platí

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{1} + i \vec{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (17)$$

Ak \mathbf{n} je jednotkový vektor a k celé číslo, platí

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})^{2k} &= \mathbf{1} \\ (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})^{2k+1} &= \vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}\end{aligned}\tag{18}$$

Symbol $\exp(\mathbf{A})$, kde \mathbf{A} je matica, chápeme ako

$$\exp(\mathbf{A}) = 1 + \mathbf{A} + \frac{1}{2!} \mathbf{A}^2 + \frac{1}{3!} \mathbf{A}^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{A}^n$$

Pomocou vzťahov (18) možno potom ukázať, že pre jednotkový vektor \mathbf{n} a reálne φ platí

$$\exp\left\{-\frac{i}{2} \varphi (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})\right\} = \mathbf{1} \cos(\varphi/2) - i (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\varphi/2)\tag{19}$$

a s využitím tohto vzťahu a komutačných vzťahov pre σ_i , pridáme k vzťahu ako

$$\exp\left\{i \frac{\vartheta}{2} \sigma_z\right\} \sigma_x \exp\left\{-i \frac{\vartheta}{2} \sigma_z\right\} = \sigma_x \cos \vartheta - \sigma_y \sin \vartheta\tag{20}$$

$$\exp\left\{i \frac{\vartheta}{2} \sigma_z\right\} \sigma_y \exp\left\{-i \frac{\vartheta}{2} \sigma_z\right\} = \sigma_x \sin \vartheta + \sigma_y \cos \vartheta\tag{21}$$

So vzťahmi tohto typu sa ešte stretne v kapitole venovanej momentu hybnosti.

5.5 VLNOVÉ FUNKCIE ČASTICE SO SPINOM

Doteraz, pri skúmaní pohybu elektrónu v atóme vodíka, alebo v situácii keď je elektrón viazaný na úsečku, sme nehovorili o spine elektrónu. Bolo to možné vďaka tomu, že uvažované interakcie nezáviseli od spinového stavu elektrónu. Pri podrobnejšom zisťovaní štruktúry spektrálnych čiar, alebo pri štúdiu atómu vo vonkajšom magnetickom poli budeme musieť brať spinové stavy elektrónu explicitne do úvahy.

Vyjadrenie stavu elektrónu musí teda zohľadniť tak priestorovú závislosť vlnovej funkcie ako aj spinový stav. Je preto prirodzené použiť na zobrazenie stavu dvojkomponentnú (spinovú) vlnovú funkciu.

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}\tag{1}$$

Fyzikálny význam ψ_+ a ψ_- je jednoduchý: $|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2$ udáva hustotu pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu s priemetom spinu na os z rovným $+\hbar/2$ v okolí bodu \mathbf{r} v čase t a podobne $|\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2$ má význam hustoty pravdepodobnosti nájdenia elektrónu s priemetom spinu na os z rovným $-\hbar/2$ v čase t v okolí miesta \mathbf{r} .

Pre dobudovanie formalizmu je ešte potrebné priradiť fyzikálnym veličinám operátory. V prípade spinorových vlnových funkcií operátory sú zrejme 2×2 matice, ktorých prvky sú operátory (pôsobiace už aj na obyčajné jednodokomponentné funkcie).

Tak napríklad ak hľadáme hamiltonián voľnej častice so spinom, potom vzhľadom na to, že spinové stavy sú v takomto prípade nezávislé od polohy elektrónu, je prirodzené vyjadrenie⁹⁴

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2m} \Delta & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2m} \Delta \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2m} \Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

⁹⁴ Diagonálna matica totiž „nemieša“ komponenty spinoru.

Ak interakcia s poľom, v ktorom sa elektrón nachádza, nezávisí od spinu, je hamiltonián opäť úmerný jednotkovej matici a vlnové funkcie $\psi_+(\mathbf{r}, t)$ a $\psi_-(\mathbf{r}, t)$ sú navzájom nezávislé. Ak je začiatkový spinový stav elektrónu rovnaký v celom priestore, čo odpovedá zápisu vlnovej funkcie (1) v tvare

$$\chi(\mathbf{r}, t_0) = \Phi(\mathbf{r}, t_0) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

potom v riešení príslušnej SchR sa komponenty spinora α_+ , α_- s časom nebudú meniť. V takejto situácii si môžeme úlohu zjednodušiť a zabudnúť na spin pri hľadaní riešení SchR – čo sme aj doteraz robili.

Po skončení výpočtov si ale treba uvedomiť, že všetky nájdené stavy budú ešte navyše dvakrát degenerované, pričom príslušné stavy elektrónu sa líšia priemetom spinu na určitú os.

Pre elektrón v magnetickom poli už takéto priblíženie nie je možné, spinové stavy elektrónu treba explicitne uvážiť a SchR treba už písať pre vlnovú funkciu v tvare (1).

5.6 SPIN ELEKTRÓNU V MAGNETICKOM POLI

V tomto článku sa budeme zaoberať časovou závislosťou spinového stavu elektrónu v statickom homogénnom magnetickom poli. Uvažujme pre určitost' atóm vodíka v základnom stave vložený do vonkajšieho homogénneho magnetického poľa. V tomto prípade sa hamiltonián elektrónu dá zapísať v tvare⁹⁵

$$H = H_1(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) + H_2(\vec{\sigma}) \quad (1)$$

kde $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ sú operátory súradnice a hybnosti elektrónu a σ sú Paulino matice. Operátor H_1 je dobre známy

$$H_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Operátor H_2 uhádneme jednoducho. Energia klasickej častice s magnetickým momentom $\boldsymbol{\mu}$ vo vonkajšom magnetickom poli s indukciou \mathbf{B} je rovná

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_x B_x - \mu_y B_y - \mu_z B_z \quad (2)$$

Pre elektrón sú podľa článku 1.8 operátory priemetu magnetického momentu do smeru súradnicových osí dané vzťahmi

$$\mu_x = -\frac{e}{m} s_x = -\frac{e\hbar}{2m} \sigma_x \quad \text{atď.} \quad (3)$$

Po dosadení týchto výrazov do (2) dostaneme

$$H_2 = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{e\hbar}{2m} (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) \quad (4)$$

Schrödingerova rovnica pre dvojkomponentný spinor $\chi(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (H_1 + H_2) \chi(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

sa dá separovať ak položíme

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \zeta(\mathbf{r}) \Phi(t) \quad (6)$$

kde $\Phi(t)$ je dvojkomponentný spinor a $\zeta(\mathbf{r})$ závisí iba od súradnice elektrónu. Po dosadení (6) do (5) dostaneme

$$i\hbar \zeta(\mathbf{r}) \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = \Phi(t) H_1 \zeta(\mathbf{r}) + \zeta(\mathbf{r}) H_2 \Phi(t)$$

⁹⁵ Zanedbávame tu tzv. hyperjemnú interakciu medzi magnetickými momentmi jadra a elektrónu (pozri kap. 12).

a odtiaľ

$$\frac{1}{\Phi(t)} \left[i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} - H_2 \Phi(t) \right] = \frac{1}{\xi(\mathbf{r})} H_1 \xi(\mathbf{r})$$

Ľavá strana závisí iba od spinových premenných, pravá iba od súradníc elektrónu a preto sa obe musia rovnať určitej konštante E_0 . Takto dostaneme dve rovnice

$$H_1 \xi(\mathbf{r}) = E_0 \xi(\mathbf{r}) \quad (7a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = (H_2 + E_0) \Phi(t) \quad (7b)$$

Rovnica (7a) je bezčasovou SchR pre elektrón v atóme vodíka. Pretože uvažujeme elektrón v základnom stave atómu vodíka bude E_0 rovné energii tohto základného stavu. V rovnici (7b) je užitočné položiť

$$\Phi(t) = e^{-iE_0 t/\hbar} \psi(t) \equiv e^{-iE_0 t/\hbar} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix}$$

Pre dvojkomponentný spinor takto dostaneme rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H_2 \psi(t)$$

ktorá má v úplnejšom rozpise tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \frac{e\hbar B}{2m} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} \quad (8)$$

Teraz sa budeme zaoberať riešeniami rovnice (8). Poznamenajme, že pre separáciu premenných bola podstatná homogénnosť poľa \mathbf{B} . V ďalšom sa zaoberáme iba týmto prípadom.⁹⁶

Začnime s jednoduchým prípadom magnetického poľa v smere osi z a označme $|\mathbf{B}| = B_z = B$. Rovnica (8) sa potom zjednoduší na

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \frac{e\hbar B}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} \quad (9)$$

a rozpadne sa na dve nezávislé rovnice pre komponenty $\psi_+(0)$, $\psi_-(0)$. Príslušné riešenie je

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(0) \exp(-iE_+ t/\hbar) \\ \psi_-(0) \exp(-iE_- t/\hbar) \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$E_{\pm} = \pm \frac{e\hbar B}{2m} \quad (11)$$

Hodnoty $\psi_+(0)$, $\psi_-(0)$ sú dané začiatočnými podmienkami v čase $t=0$. Výrazy $P_+ = |\psi_+(t)|^2$, $P_- = |\psi_-(t)|^2$ určujú pravdepodobnosti toho, že pri meraní priemetu spinu na os z nájdeme hodnoty $+\hbar/2$ resp. $-\hbar/2$. Hodnoty E_+ , E_- sú energie stacionárnych stavov, čo vidíme ľahko z toho, že hamiltonián

$$H_2 = \frac{e\hbar B}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

má dve vlastné hodnoty rovné práve E_+ , E_- a príslušné vlastné spinory sú rovné vlastným spinorom

⁹⁶ V prípade nehomogénneho magnetického poľa je situácia komplikovanejšia. Vtedy \mathbf{B} závisí od \mathbf{r} a separácia premenných sa nedá naznačeným spôsobom vykonať. Fyzikálne to odpovedá napríklad SG experimentom, kde magnetické pole priestorovo rozdeľuje spin „hore“ a „dolu“. Vzniká tak korelácia medzi spinom a súradnicou a riešenie nemožno písať v separovanom tvare.

matice σ_z (pozri 4.5c)). Teraz budeme hľadať fyzikálnu interpretáciu riešenia $\psi(t)$ daného rovnicou (10). Vzhľadom na to, že platí

$$|\psi_+(0)|^2 + |\psi_-(0)|^2 = 1$$

môžeme vždy nájsť taký uhol \mathcal{G} a vybrať reálne α, β tak, že platí

$$\psi_+(0) = \cos \frac{\mathcal{G}}{2} e^{i(\alpha-\beta)} \quad \psi_-(0) = \cos \frac{\mathcal{G}}{2} e^{i(\alpha+\beta)}$$

V ďalšom budeme predpokladať, že $\alpha = \beta = 0$, a prenecháme čitateľovi diskusiu všeobecného prípadu. Riešenie $\psi(t)$ dané rovnicou (10) potom môžeme zapísať v tvare

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\mathcal{G}}{2} e^{-i\omega t/2} \\ \cos \frac{\mathcal{G}}{2} e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}, \quad \omega = \frac{eB}{m} \quad (13)$$

Ak toto porovnáme s výsledkom (4.8) vidíme, že $\psi(t)$ opisuje spinor, ktorý má priemet spinu $+\hbar/2$ na os danú vektorom určeným uhlami

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathcal{G}, \varphi = \omega t) \quad (14)$$

Pri nepresnom⁹⁷, ale názornom vyjadrovaní by sme povedali, že spinor $\psi(t)$ má v čase t „smer“ daný jednotkovým vektorom \mathbf{n} v (14). V tomto zmysle hovoríme, že spin elektrónu vykonáva precesný pohyb okolo osi z , pričom uhlová rýchlosť tohto pohybu je daná vzťahom

$$\omega = \frac{e}{m} B, \quad \frac{e}{m} = 1,759 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1} \quad (15)$$

V prípade, že smer poľa \mathbf{B} je všeobecný, je riešenie s využitím spinorového formalizmu opäť jednoduché a, samozrejme, má opäť charakter precesie okolo smeru vektora \mathbf{B} . Podrobnosti prenechávame čitateľovi.

5.7 SÚSTAVY S DVOMA HLADINAMI

Matematika použitá pri opise správania sa spinu v homogénnom magnetickom poli je všeobecným opisom sústav s dvoma hladinami. S takýmito sústavami sa stretávame pomerne často. Sú to (zriedkavo) sústavy, ktoré skutočne majú iba dva stavy a jednak (oveľa častejšie) sústavy, ktoré majú síce veľa hladín (stacionárnych stavov), ale v istom kontexte sa môžeme obmedziť iba na dva stavy. Typickou situáciou je sústava, ktorá má veľa energetických hladín, ale dve z nich, povedzme E_1, E_2 sú blízko pri sebe a ďaleko od všetkých ostatných, t.j.

$$|E_1 - E_2| \ll |E_1 - E_n|, |E_2 - E_n| \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

Navyše musíme mať fyzikálnu situáciu, v ktorej prechody z hladín E_1, E_2 na ostatné vzdialenejšie hladiny nehrajú podstatnú úlohu. Ukážeme teraz, v akom zmysle je táto úloha ekvivalentná problému spinu vo vonkajšom magnetickom poli.

Nech \mathbf{A} je určitý lineárny operátor. Pri pôsobení \mathbf{A} na stav ψ_1 dostaneme lineárnu kombináciu všetkých možných stavov ψ_n :

$$\mathbf{A}\psi_1 = A_{11}\psi_1 + A_{21}\psi_2 + A_{31}\psi_3 + \dots \quad (1a)$$

a podobne

$$\mathbf{A}\psi_2 = A_{12}\psi_1 + A_{22}\psi_2 + A_{32}\psi_3 + \dots \quad (1b)$$

⁹⁷ Nepresnosť je v tom, že o smere spinoru by sme mohli hovoriť iba vtedy, keby všetky tri priemety spinu na jednotlivé osi mali „ostré“ hodnoty. Ale to nie je možné, lebo $\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z$, navzájom nekomutujú.

Ako sme už povedali, uvažujeme iba úlohy, v ktorých majú dôležitú úlohu iba stavy ψ_1 , ψ_2 a preto na pravých stranách zanedbáme všetky stavy okrem ψ_1 , ψ_2 . Takto máme

$$\mathbf{A}\psi_1 = A_{11}\psi_1 + A_{21}\psi_2 \quad (2)$$

$$\mathbf{A}\psi_2 = A_{12}\psi_1 + A_{22}\psi_2$$

kde A_{ik} sú čísla. Všeobecný stav dvojhladinovej sústavy je daný lineárnou kombináciou

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (3)$$

Pretože \mathbf{A} je lineárny operátor pôsobením na takýto stav dostaneme nový stav ψ' , pričom

$$\begin{aligned} \psi' = \mathbf{A}\psi &= \mathbf{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\mathbf{A}\psi_1 + c_2\mathbf{A}\psi_2 = \\ &= c_1(A_{11}\psi_1 + A_{21}\psi_2) + c_2(A_{12}\psi_1 + A_{22}\psi_2) = \\ &= (A_{11}c_1 + A_{12}c_2)\psi_1 + (A_{21}c_1 + A_{22}c_2)\psi_2 \end{aligned}$$

Výsledok môžeme zase zapísať ako lineárnu kombináciu stavov ψ_1 , a ψ_2 , ale s inými koeficientmi

$$\psi' = c'_1\psi_1 + c'_2\psi_2 \quad (3')$$

Z predchádzajúcich vzťahov vidíme, že transformácia

$$\psi \rightarrow \psi' = \mathbf{A}\psi$$

je plne opísaná zmenou koeficientov

$$(c_1, c_2) \rightarrow (c'_1, c'_2)$$

pričom platí v maticovom označení

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

V dvojhladinovej sústave je teda úplná informácia o stave obsiahnutá v dvojici koeficientov c_1 , c_2 a každému operátoru \mathbf{A} je priradená istá matica A_{ik} , ktorá nám priamo udáva prechod $\psi \rightarrow \psi' = \mathbf{A}\psi$ pomocou vzťahov (4) platných pre koeficienty (c_1, c_2) a (c'_1, c'_2) určujúce stavy ψ_1 , a ψ_2 pomocou (3) a (3').

Pre úplnosť ešte poznamenajme, že podľa (2) koeficienty A_{ik} môžeme pri ortonormovanej sústave funkcií ψ_i dostať zo vzťahov

$$A_{ik} = \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \mathbf{A} \psi_k(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (5)$$

Opis stavu pomocou dvojice koeficientov c_1 , c_2 a opis operátorov pomocou 2×2 matíc je presne rovnaký ako opis spinu a spinových operátorov.

Čitateľ sa ľahko presvedčí o tom, že hermitovskému operátoru je vzťahmi (5) priradená hermitovská matica. Ak si ďalej uvedomíme, že každá 2×2 hermitovská matica sa dá písať ako lineárna kombinácia jednotkovej matice a Pauliho matíc (pozri diskusiu okolo rovnice (4.9)) vidíme, že dostaneme pre ľubovoľný operátor energie zapísaný ako 2×2 matica vyjadrenie

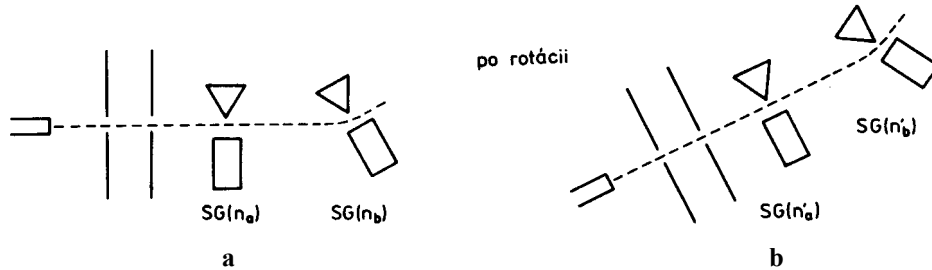
$$\mathbf{H} = \alpha \mathbf{1} + \beta \mathbf{n} \cdot \vec{\sigma} \quad (6)$$

Pritom výraz $\alpha \mathbf{1}$ je len aditívna konštanta pridávaná k energii všetkých stavov a druhý člen sa dá písať pri zavedení vhodného \mathbf{B} podľa $\beta = e\hbar B/2m$ presne ako (6.4).

Veľmi pekné a fyzikálne relevantné príklady na dvojhladinové sústavy možno nájsť vo Feynmanových prednáškach z fyziky. Odporúčame čitateľovi, aby si túto časť Feynmanových prednášok podrobne prečítal (a dobre urobí, ak si z nich prečíta aj všetko ostatné).

5.8 ĎALŠIE VLASTNOSTI MATÍC TYPU 2×2 . UNITÁRNE TRANSFORMÁCIE. DIAGONALIZÁCIA

- O hermitovských maticiach typu 2×2 už vieme dve dôležité veci
- každá takáto matica má dve vlastné reálne hodnoty,
 - príslušné vlastné spinory sú navzájom ortogonálne v zmysle skalárneho súčinu, zavedeného v rovnici (2.5).



Obr. 5.1

V tomto článku sa budeme zaoberať s ďalšími vlastnosťami matíc typu 2×2 . Začneme ale s jednoduchou fyzikálnou úlohou, znázornenou na obr. 5.1. Na obr. 5.1a máme zdroj elektrónov, t. j. rozžhavené vlákno, dve mriežky urýchľujúce elektróny a systém tienidiel. Zväzok elektrónov potom prechádza cez $SG(\mathbf{n}_a)$, pričom elektróny so spinom „pozdĺž“ \mathbf{n}_a sú prepustené a elektróny so spinom „proti“ \mathbf{n}_a sú pohltené. Elektrón, ktorý prejde týmto $SG(\mathbf{n}_a)$ je v spinovom stave ψ_a . Takýto zväzok elektrónov prechádza druhým prístrojom $SG(\mathbf{n}_b)$ a v ňom meriame pravdepodobnosť toho, že nájdeme spin v smere \mathbf{n}_b . Amplitúda tejto pravdepodobnosti je daná výrazom

$$A_{ba} = (\psi_b | \psi_a) \quad (1)$$

kde ψ_b je spinor odpovedajúci spinu v smere \mathbf{n}_b .

Na obr. 5.1b je tá istá situácia, len všetky zariadenia sú otočené o istý uhol v priestore. Elektróny, ktoré prejdú cez prístroj $SG(\mathbf{n}'_a)$ budú v stave ψ'_a a amplitúda pravdepodobnosti pre nájdenie spinu v smere \mathbf{n}'_b bude

$$A'_{ba} = (\psi'_b | \psi'_a) \quad (2)$$

Ak je sústava izolovaná, potom jej otočenie nemôže meniť experimentálne výsledky a očakávame, že bude platiť $A_{ba} = A'_{ba}$, t. j.

$$(\psi'_b | \psi'_a) = (\psi_b | \psi_a) \quad (3)$$

Pri danom stave ψ a danom pootočení bude i stav ψ' pootočený sústavou daný jednoznačne a teda bude funkciou stavu ψ a pootočenia. Formálne možno písať

$$\psi' = \mathbf{U} \psi$$

kde \mathbf{U} je lineárny operátor závislý od charakteru otočenia.

Označme teraz zložky spinora ψ ako a_1, a_2 , zložky spinora ψ' ako a'_1, a'_2 . Vzťah medzi ψ a ψ' potom píšeme pomocou matice \mathbf{U} priradenej danému pootočeniu ako

$$\psi \rightarrow \psi' = \mathbf{U} \psi \quad \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Matica \mathbf{U} ale musí byť podľa (3) taká, aby nemenila skalárny súčin.

Príslušné podmienky ľahko nájdeme. Zložky spinoru označíme nasledovne

$$\psi_a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$\psi'_a = \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix}, \quad \psi'_b = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \end{pmatrix}$$

Pritom platí

$$b'_i = U_{ik} b_k, \quad a'_i = U_{ik} a_k \quad (5)$$

kde cez opakované indexy sčítajeme. Pre skalárne súčiny vystupujúce v (3) máme

$$(\psi'_b | \psi'_a) = b'_i{}^* a'_i = b_k{}^* (U_{ik})^* U_{il} a_l \quad (6a)$$

$$(\psi_b | \psi_a) = b_k{}^* a_k \quad (6b)$$

Ak má byť pravá strana v (6a) rovná pravej strane v (6b) pre ľubovoľné a_1, a_2, b_1, b_2 , musí platiť

$$(U_{ik})^* U_{il} = \delta_{kl} \quad (7)$$

Rovnica (7) je teda nutnou podmienkou pre to, aby lineárna transformácia daná maticou \mathbf{U} nemenila skalárny súčin.

Podmienku (7) môžeme prepísať aj do uzavretejšieho tvaru, ak zavedieme maticu \mathbf{U}^+ hermitovsky združenú k \mathbf{U} . Pre maticu \mathbf{U}^+ platí podľa definície

$$(\mathbf{U}^+)_{ik} = \mathbf{U}_{ki}^*$$

a podmienku (7) prepisujeme ako

$$(\mathbf{U}^+)_{ik} U_{il} = (\mathbf{U}^+ \mathbf{U})_{kl} = \delta_{kl} \quad (8)$$

ale to je práve

$$\mathbf{U}^+ \mathbf{U} = \mathbf{1} \quad (9)$$

kde na pravej strane máme jednotkovú maticu. Ľahko sa dá ukázať, že zároveň s (9) bude platiť aj

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^+ = \mathbf{1} \quad (9')$$

Maticy \mathbf{U} , ktoré majú vlastnosť (9) sa nazývajú unitárne.

Doteraz sme uvažovali ako vyzerajú stavy pootočenej fyzikálnej sústavy. Predpokladajme teraz, že spolu so sústavou rovnako pootočíme i meracie prístroje. Nech prístroju je priradený operátor \mathbf{A} , otočenému prístroju operátor \mathbf{A}' . To, aký bude operátor \mathbf{A}' pri známom operátore \mathbf{A} zistíme ľahko pomocou jednoduchšej úvahy. Ak totiž otočíme meranú sústavu aj merací prístroj, potom výsledky merania musia byť štatisticky rovnaké. Značí to napríklad, že stredná hodnota veličiny A v stave ψ musí byť rovnaká ako stredná hodnota veličiny A' v stave ψ' .

Stredná hodnota veličiny A je rovná skalárnemu súčinu $(\psi | \mathbf{A} \psi)$, kde \mathbf{A} je príslušný operátor (matica 2×2). Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že tento skalárny súčin možno zapísať v tvare⁹⁸ (pozri 2.8)

$$\psi^+ \mathbf{A} \psi \quad (10)$$

Stavu otočenej sústavy odpovedá spinor

$$\psi' = \mathbf{U} \psi$$

pričom platí

$$\psi'^+ = \psi^+ \mathbf{U}^+$$

V pootočenej sústave na prístroji A' nameriame strednú hodnotu

$$\psi'^+ \mathbf{A}' \psi' = \psi^+ \mathbf{U}^+ \mathbf{A}' \mathbf{U} \psi \quad (11)$$

Podľa toho, čo sme uviedli vyššie však musí platiť rovnosť

$$\psi'^+ \mathbf{A}' \psi' = \psi^+ \mathbf{A} \psi$$

⁹⁸ Pripomeňme si, že v nasledujúcich vzťahoch ide o násobenie matic typov (1, 2), (2, 2) a (2, 1).

Táto rovnosť musí platiť pre ľubovoľný stav ψ . Po dosadení z(10)a(11)už ľahko dostaneme

$$\mathbf{U}^+ \mathbf{A}' \mathbf{U} = \mathbf{A}$$

a ak využijeme unitárnosť matice \mathbf{U}

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{U}^+ \quad (12)$$

Načrtnime si teraz jednoduchý príklad. Skúsime nájsť maticu \mathbf{U} , ktorá odpovedá rotácii fyzikálnej sústavy okolo osi y o 90° . Aby nedošlo k nedorozumeniu, zdôrazníme, že ide o otočenie v aktívnom zmysle, t. j. otočíme fyzikálny systém (napríklad elektrónové delo), pričom súradnicová sústava (osi x, y, z) ostane nehybná. Znamená to, že ak v pôvodnom systéme bol spinový stav $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (priemet $\hbar/2$ na os z), potom

po pootočení dostaneme stav, v ktorom priemet na os x je $\hbar/2$, teda stav (pozri (4.5a)) $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Podobne stavu $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ bude odpovedať stav $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$

Ľahko vidíme, že matica \mathbf{U} , ktorá prislúcha takejto rotácii musí mať tvar

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (13)$$

Platí totiž

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pozrime sa teraz, aký operátor bude prislúchať otočenému SG prístroju, ktorý v pôvodnom systéme meral priemet spinu v smere osi z . Pôjde vlastne o jednoduché dosadenie do (12), pričom pôvodný operátor je

$$\mathbf{A} = \mathbf{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dostaneme tak

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{U}^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_x = \mathbf{s}_x$$

Dostali sme výsledok, ktorý sme očakávali. Ak totiž SG(z) prístroj otočíme o 90° okolo osi y , potom z neho vlastne dostaneme prístroj SG(x), ktorému prislúcha operátor \mathbf{s}_x .

Na záver si uveďme ešte jedno tvrdenie, ktoré má hlboké fyzikálne dôsledky.⁹⁹ Pre ľubovoľnú hermitovskú maticu \mathbf{A} možno nájsť takú unitárnu maticu \mathbf{U} , že matica

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{U}^+ \quad (14)$$

je diagonálna.

Matica \mathbf{A}' bude mať tvar

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

⁹⁹ Plný dosah takéhoto tvrdenia si čitateľ uvedomí pravdepodobne až v kapitole o všeobecnom formalizme kvantovej mechaniky.

Zrejme λ_1 a λ_2 sú vlastné hodnoty matice \mathbf{A}' prislúchajúce spinorom

$$\psi'_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \psi'_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Lahko však možno ukázať, že λ_1 a λ_2 sú aj vlastnými hodnotami matice \mathbf{A} , prislúchajúce spinorom $\psi_1 = \mathbf{U}^+ \psi'_1$ a $\psi_2 = \mathbf{U}^+ \psi'_2$. Úloha nájsť vlastné hodnoty a vlastné spinory matice \mathbf{A} je teda ekvivalentná diagonalizácii v zmysle (14) a (15). Ak totiž poznáme tieto vlastné stavy

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$$

potom matica

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* \\ \beta_1^* & \beta_2^* \end{pmatrix}$$

diagonalizuje maticu \mathbf{A} v zmysle (14).

Overenie týchto tvrdení prenechávame čitateľovi.¹⁰⁰

5.9 SÚSTAVY S N HLADINAMI.

VLASTNOSTI HERMITOVSKÝCH MATÍC TYPU $N \times N$

V predchádzajúcich článkoch sme sa podrobne zaoberali s dvojhladinovou sústavou a s vlastnosťami matíc typu 2×2 . V tomto článku zovšeobecníme úvahy o dvojhladinovej sústave na sústavu s N -hladinami a potom uvedieme niektoré základné vlastnosti hermitovských matíc typu $N \times N$. Dôkazy nebudeme robiť, pretože sú vždy jednoduchým zovšeobením postupov, ktoré možno urobiť „na prstoch“ v prípade matíc typu 2×2 .

Predstavme si teda, že máme sústavu, v ktorej je N -hladín relatívne blízko seba a ostatné sú od týchto pomerne ďaleko a predpokladajme tiež, že sa zaoberáme iba s problémami, kde možno vo veľmi dobrom priblížení brať do úvahy iba týchto N -hladín. Vlnové funkcie príslušné k N uvažovaným ortonormovaným stavom označíme ako $\psi_1(\mathbf{r})$, $\psi_2(\mathbf{r})$, ..., $\psi_N(\mathbf{r})$. Ľubovoľný stav z uvažovanej množiny stavov je lineárnou kombináciou¹⁰¹

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Operátor \mathbf{A} pôsobiaci na jednotlivé stavy ψ dá

$$\mathbf{A} \psi_i = A_{ki} \psi_k \quad (2)$$

pričom koeficienty A_{mi} môžeme „vylúpnuť“ násobením rovnice (2) funkciou $\psi_m^*(\mathbf{r})$ a integrovaním cez celý priestor. Dostaneme tak

$$A_{mi} \equiv (\psi_m | \mathbf{A} \psi_i) = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \mathbf{A} \psi_i(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (3)$$

kde sme v druhom člene použili označenie typické pre skalárny súčin, pretože integrál v (3) má vlastne tú istú úlohu ako skalárny súčin v prípade spinorov.

Pôsobením operátora \mathbf{A} na lineárnu kombináciu (1) dostaneme

$$\mathbf{A} \psi_i = c'_k \psi_k \quad (4)$$

$$c'_k = A_{ki} c_i$$

¹⁰⁰Pri dôkazoch treba využiť, že rôzne vlastné spinory sú ortogonálne.

¹⁰¹ Cez dvakrát sa vyskytujúci index sumujeme v ďalšom od 1 po N .

Z uvedeného vidieť, že každý stav z uvažovanej množiny stavov možno jednoznačne zapísať pomocou stĺpca obsahujúceho koeficienty c_i a každému operátoru môžeme priradiť maticu \mathbf{A}_{ik}

$$\psi \rightarrow \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \quad (5)$$

Toto priradenie má nasledujúcu vlastnosť. Ak je stavu ψ' priradený stĺpec čísel obsahujúci $c'_1, c'_2, \dots, \dots, c'_N$, stavu ψ stĺpec obsahujúci c_1, c_2, \dots, c_N a ak platí $\psi' = \mathbf{A}\psi$, potom

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}, A_{12}, \dots, & A_{1N} \\ A_{21}, \dots & \\ \vdots & \\ A_{N1}, \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad (6)$$

Môžeme sa tiež presvedčiť o tom, že pre „skalárny“ súčin dvoch stavov

$$\psi \leftrightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad \Phi \leftrightarrow \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

platí

$$\int \Phi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \equiv (\Phi|\psi) = b_i^*a_i \quad (7)$$

Presvedčíme sa o tom rýchlo, ak za Φ, ψ do (7) dosadíme rozklady

$$\Phi(\mathbf{r}) = a_j\psi_j(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{r}) = a_k\psi_k(\mathbf{r})$$

a využijeme ortonormovanosť systému $\{\psi_k\}$.

V tomto štádiu môžeme zabudnúť na systém funkcií $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$ a pracovať už iba so stĺpcami a maticami podľa týchto pravidiel:

- každému stavu je priradený stĺpec čísel nazývaný vektorom
- skalárnym súčinom dvoch vektorov $\psi(c_1, \dots, c_N)$ a $\Phi(b_1, \dots, b_N)$ nazývame výraz

$$(\Phi|\psi) = b_i^*c_i \quad (8)$$

- každej fyzikálnej veličine A je priradená hermitovská matica s prvkami $A_{ik}; i, k = 1, 2, \dots, N$
- pôsobením matice \mathbf{A} na vektor s prvkami (c'_1, \dots, c'_N) vzniká nový vektor s prvkami (c_1, \dots, c_N) pričom vzťah medzi pôvodným a novým vektorom je daný rovnicou (6)
- stredná hodnota fyzikálnej veličiny, ktorej odpovedá matica \mathbf{A} v stave danom vektorom (c_1, \dots, c_N) sa rovná

$$(\psi|\mathbf{A}\psi) = c_i^*A_{ik}c_k \quad (9)$$

- pri meraní fyzikálnej veličiny, ktorej odpovedá matica \mathbf{A} , môžeme v jednotlivých meraniach nájsť iba vlastné hodnoty matice \mathbf{A} dané podmienkami

$$\mathbf{A}\chi^{(i)} = \lambda_i\chi^{(i)} \quad (10)$$

kde \mathbf{A} je matica typu $N \times N$, $\chi^{(i)}$ je vektor s prvkami $(c_1^{(i)}, c_2^{(i)}, \dots, c_N^{(i)})$

- amplitúda pravdepodobnosti pre nameranie hodnoty λ_i v stave Φ sa rovná skalárnemu súčinu $(\chi^{(i)}|\Phi)$, kde $\chi^{(i)}$ je vlastný vektor matice \mathbf{A} normovaný tak, že $(\chi^{(i)}|\chi^{(i)}) = 1$
- po nájdení hodnoty λ_i pri meraní veličiny A v stave Φ nastáva zmena stavu a tesne po meraní bude sústava v stave $\chi^{(i)}$
- časová závislosť stavu je daná časovou závislosťou koeficientov $c_i(t)$ opisujúcich tento stav.

Túto časovú závislosť dostaneme riešením Schrödingerovej rovnice, ktorá má tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & \dots & H_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & \dots & H_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix} \quad (11)$$

Toto je zhruba celá schéma kvantovej mechaniky pre N -hladinovú sústavu. Jednotlivé body sú zovšeobecnením výsledkov, ktoré sme podrobne prediskutovali pre prípad spinu. Implicitne sme však predpokladali, že matice typu $N \times N$ majú niektoré vlastnosti, ktoré sú priamym zovšeobením vlastností 2×2 . Teraz si tieto vlastnosti uvedieme podrobnejšie.

Vlastnosti hermitovských matíc typu $N \times N$

Matica s prvkami A_{ik} je hermitovská ak platí

$$A_{ik} = A_{ki}^* \quad i, k = 1, 2, \dots, N \quad (12)$$

Maticu \mathbf{B}^+ nazývame hermitovsky združenou k matici \mathbf{B} , ak

$$(\mathbf{B}^+)_{ik} = B_{ki}^* \quad (13)$$

Matica \mathbf{A} je hermitovská práve vtedy, keď $\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$.

Číslo λ nazývame vlastnou hodnotou matice, ak existuje vektor χ taký, že

$$\mathbf{A}\chi = \lambda\chi \quad (14)$$

Všetky vlastné hodnoty hermitovskej matice sú reálne čísla. Vlastné vektory matice \mathbf{A} príslušné k dvom rôznym vlastným hodnotám sú navzájom ortogonálne v zmysle skalárneho súčinu (8). Presnejšie: ak

$$\mathbf{A}\chi = \lambda\chi, \quad \mathbf{A}\chi' = \lambda'\chi' \quad \lambda' \neq \lambda'$$

potom

$$(\chi|\chi') = 0$$

Vychádzajúc z rovníc (14) zistíme, že vlastné hodnoty matice \mathbf{A} sú koreňmi rovnice

$$\det \begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2N} \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (15)$$

Táto rovnica je N -tého stupňa a má N koreňov, ktoré sú podľa predchádzajúceho reálne.

Ak sústavu vlastných vektorov matice \mathbf{A} ortonormujeme, prvky týchto vektorov označíme nasledovne

$$\chi^{(i)} = \begin{pmatrix} \chi_1^{(i)} \\ \chi_2^{(i)} \\ \vdots \\ \chi_N^{(i)} \end{pmatrix}$$

a zostrojíme maticu

$$\mathbf{U}^+ = \begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} & \chi_1^{(2)} & \dots & \chi_1^{(N)} \\ \chi_2^{(1)} & \chi_2^{(2)} & \dots & \chi_2^{(N)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \chi_N^{(1)} & \chi_N^{(2)} & \dots & \chi_N^{(N)} \end{pmatrix}$$

potom matica

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^+ \quad (16)$$

bude diagonálna a v diagonále budú vlastné hodnoty $\lambda^{(i)}$ v tom istom poradí, v akom idú vlastné vektory ako stĺpce v (16).

5.10 ZHRNUTIE

Zopakujeme na záver základné myšlienky opisu spinu 1/2, závislosť od priestorových premenných si nebudeme všimáť.

1. Spinovému stavu častice je priradený dvojkomponentný spinor

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

α_1 (α_2) má význam amplitúdy pravdepodobnosti, že v stave $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$ má častica priemet vnútorného

momentu hybnosti na os z rovný $+\frac{1}{2}\hbar$ ($-\frac{1}{2}\hbar$).

2. Fyzikálnym veličinám sú v tomto formalizme priradené 2×2 hermitovské matice, spĺňajúce vzťah $A_{ik} = A_{ki}^*$.

3. Operátor spinu $\hat{\mathbf{s}} = (s_1, s_2, s_3)$ má tvar $\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ a kde $\vec{\sigma}$ sú Pauliho matice

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

4. Pauliho matice spĺňajú dôležitý komutačný zákon

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (\text{sumácia cez opakovaný index})$$

Ďalšie užitočné algebraické vzťahy pre o-matice sú uvedené na str. 195.

5. Operátor magnetického momentu elektrónu je

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma} \quad e = -|e|$$

Operátor energie dipólu v magnetickom poli je $\mathbf{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Hodnota $e\hbar/(2m) = 0,9274 \cdot 10^{-23} \text{ JT}^{-1} = 5,7884 \cdot 10^{-23} \text{ eVT}^{-1}$ sa nazýva Bohrov magnetón. Pre kvalitatívne odhady je dobré zapamätať si, že na „preklopenie“ spinu elektrónu v magnetickom poli s indukciou 1 T je potrebná energia $\approx 10^{-4} \text{ eV}$.

6. Nech stav $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$ je pripravený istým prístrojom (napr. typu SG) a stav $\begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \end{pmatrix}$ je pripravovaný rovnakým, ibaže otočeným prístrojom. Potom platí

$$\alpha'_i = U_{ik}\alpha_k$$

kde U_{ik} je unitárna matica (ktorá je priradená uvažovanej rotácii). Platí

$$U_{ik} \cdot U_{jk}^* = \delta_{ij}$$

Ak určitému meraciemu prístroju (veľičine) odpovedá matica A_{ij} , potom tomuto prístroju otočenému uvažovaným spôsobom prislúcha matica s prvkami

$$A'_{ij} = U_{ik}A_{ki}U_{ji}^*$$

5.11 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Kolimovaný zväzok atómov sodíka prechádza Sternovým-Gerlachovým magnetom. Nehomogénne magnetické pole má smer osi z a

$$\frac{dB}{dz} = 5 \frac{T}{m}$$

Dĺžka magnetu je 0,5 m a rýchlosť atómov odpovedá tepelnému pohybu pri 500 K. Odhadnite výchylku atómov s projekciami $s_z = \hbar/2$, $s_z = -\hbar/2$ od pôvodného smeru.

2. Priemet spinu elektrónu do smeru daného uhlami (ϑ_1, φ_1) je $\hbar/2$. Nájdite pravdepodobnosť toho, že v tomto stave nájdeme elektrón s priemetom spinu $\hbar/2$ do smeru daného uhlami (ϑ_2, φ_2) . Opíšte fyzikálne usporiadanie experimentu.
3. Priemet spinu elektrónu na smer vonkajšieho magnetického poľa môže nadobúdať dve hodnoty a tomu odpovedajú dve energetické hladiny. Ak na elektrón, povedzme na nižšej hladine dopadá časovo premenné elektromagnetické pole s vhodnou kruhovou frekvenciou, môže „prehodiť“ elektrón na vyššiu hladinu. Vypočítajte túto kruhovú frekvenciu pre elektrón v poli 5 T.
4. Protón sa pohybuje rýchlosťou rovnou jednej stotine rýchlosti svetla v smere osi x a jeho spin „má smer“ osi x . Tento protón prejde homogénnym magnetickým pórom s intenzitou 0,1 T. Pole má smer osi z . Aký smer bude mať spin protónu po prechode pólom, ak dĺžka jeho dráhy v poli je 0,1 m? Magnetický moment protónu je $\mu_p = 2,79 e\hbar/2M$, kde M je hmotnosť protónu. Sformulujte korektné tvrdenie odpovedajúce nášmu názornému „spin má smer osi x “.
5. Dokážte pre Pauliho matice platnosť vzťahov (11), (12), (17), (19) uvedených v článku 5.4.
6. Nájdite vlastné hodnoty a vlastné spinory matice

$$\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{pmatrix}$$

7. Nájdite maticu, ktorá má vlastné spinory $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ prislúchajúce vlastným hodnotám $+1$ a -1 .

8. Nájdite spinory, ktoré sú lineárnymi kombináciami spinorov $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ tak, aby nové spinory boli ortonormálne.

9. Uvažujme dvojhladinový systém. Označme dva jeho nezávislé (nie nevyhnutne stacionárne) stavy ako ψ_1 a ψ_2 . Hamiltonián systému nech je v zmysle rovnice (7.4) reprezentovaný maticou

$$\begin{pmatrix} E_1 & A \\ A & E_2 \end{pmatrix}$$

kde E_1, E_2 a A sú reálne čísla. Riešte Schrödingerovu (časovú) rovnicu so začiatočnou podmienkou $\psi(t=0) = \psi_1$. Z nájdeného riešenia určte pravdepodobnosť toho, že v čase $t = \tau$ sa sústava bude nachádzať v stave ψ_2 . Nájdite túto pravdepodobnosť pre limitný prípad malého τ a všimnite si význam nediagonálnych maticových elementov v hamiltoniáne.

10. Nájdite stacionárne stavy pre sústavu z predchádzajúceho príkladu a určte ich energie.

6 PRIBLIŽNÉ METÓDY VÝPOČTU ENERGIÍ A VLNOVÝCH FUNKCIÍ VIAZANÝCH STAVOV

6.1 ÚVOD

V tejto kapitole sa budeme zaoberať s približnými metódami výpočtu energií a vlnových funkcií viazaných stavov. Najviac pozornosti budeme venovať *stacionárnej poruchovej metóde*. Jej názov pochádza z toho, že pomocou nej počítame korekcie k stacionárnym viazaným stavom spôsobené určitou „poruchou“. Poruchové metódy sa používali už dávnejšie v astronómii. Typický problém vyzeral asi nasledovne. Dráha planéty, povedzme Jupitera, je v prvom rade určená gravitačným pôsobením Slnka. Pôsobenie ostatných planét je zodpovedné len za malé korekcie, či poruchy, k dráhe, ktorú dostaneme ak zanedbáme všetko okrem gravitačného pôsobenia Slnka.

V kvantovej mechanike je situácia v niečom podobná a v niečom podstatne odlišná. Pre určitosť si predstavme atóm vodíka v základnom stave. Typická hodnota intenzity elektrického poľa je rádovo

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_1^2} \approx 5 \cdot 10^{11} \text{ Vm}^{-1} \quad (1)$$

kde sme pre určitosť vzali za a_1 Bohrov polomer (pozri kap. 1, články 1.4 a 1.15). Energia atómu vodíka v základnom stave je

$$\epsilon_1 = -\frac{me'^4}{2\hbar^2 n^2} = -13,6 \text{ eV}$$

a príslušná vlastná funkcia operátora energie je

$$\Phi_1(\mathbf{r}) = (\pi a_1^3)^{-1/2} \exp(-r/a_1)$$

Ak takýto atóm dáme do vonkajšieho elektrického poľa, očakávame, že sa zmení aj energia základného stavu aj vlnová funkcia, t. j.

$$\epsilon_1 \rightarrow E_1 = \epsilon_1 + \Delta\epsilon_1 \quad (2)$$

$$\Phi_1(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_1(\mathbf{r}) = \Phi_1(\mathbf{r}) + \Delta\Phi_1(\mathbf{r})$$

Očakávame tiež, že tieto zmeny budú v reálnych experimentálnych situáciách malé, pretože vonkajšie elektrické polia sú oveľa menšie ako vnútorné atomárne pole (1). Podobne sa môžeme zaujímať o zmeny energií excitovaných stavov atómu vodíka pod vplyvom vonkajšieho elektrického poľa. V tomto probléme má zrejme vonkajšie pole úlohu poruchy (analog vplyvu ostatných planét) a vnútorné Coulombovské pole protónu úlohu podobnú úlohe gravitačného poľa Slnka v astronómii. Toto je ale tiež jediná analógia, lebo v kvantovej mechanike nemôžeme hovoriť o trajektóriách častíc.

Matematická formulácia úlohy vyzerá nasledovne. Máme sústavu, napr. spomínaný atóm vodíka a v prípade, že porucha nie je prítomná, hamiltonián sústavy je H_0 . Predpokladáme, že bezčasovú SchR

$$H_0\Phi_k = \epsilon_k\Phi_k \quad (3)$$

vieme presne riešiť a poznáme hodnoty energií stacionárných stavov ϵ_k a vlnové funkcie $\Phi_k(\mathbf{r})$. Ak je „porucha“ prítomná, t. j. ak je vonkajšie pole nenulové, pribudne do hamiltoniánu člen H' opisujúci interakciu sústavy s vonkajším poľom (napríklad interakciu elektrónu s vonkajším elektrostatickým poľom) a celkový hamiltonián bude

$$H = H_0 + H' \quad (4)$$

To, čo chceme teraz poznať, sú hodnoty energie a vlnové funkcie stacionárnych stavov, t. j. riešenia úlohy

$$H\psi_k = (H_0 + H')\psi_k = E_k\psi_k \quad (5)$$

Tieto hodnoty energií sú experimentálne veľmi relevantné, lebo sa prejavajú napríklad v zmene frekvencií žiarenia emitovaného atómom. Ak atóm v neprítomnosti vonkajšieho poľa pri prechode z hladiny „2“ na hladinu „1“ vysiela žiarenie s uhlovou frekvenciou $\omega = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$ bude po zapnutí poruchy pri tom istom prechode vysielať žiarenie s $\omega' = (E_2 - E_1)/\hbar$. Veľa takýchto pozorovaní bolo urobených ešte pred vznikom kvantovej mechaniky a poruchové metódy vznikli práve pri snahe vysvetliť takýto experimentálny materiál.

Základná myšlienka poruchovej metódy, a práve tá nám pri riešení rovníc (5) umožňuje využiť znalosť neporušeného problému (3), spočíva v predpoklade, že vlnové funkcie a energie neporušeného problému (3) prechádzajú spojito na riešenia problému (5) pri zväčšovaní poruchy od nuly po H' .

Matematicky túto spojitosť formulujeme nasledovne. Namiesto problému (5) sa zaujímame o riešenie problému

$$(H_0 + \lambda H')\psi_k(\lambda) = E_k(\lambda)\psi_k(\lambda) \quad (6)$$

kde λ je istý parameter a predpokladáme, že $E_k(\lambda)$, $\psi_k(\lambda)$ sú hladkými funkciami parametra λ . To nám umožňuje rozložiť $E_k(\lambda)$, $\psi_k(\lambda)$ do mocninového radu v parametri λ :

$$\psi_k(\lambda) = \Phi_k^{(0)} + \lambda\Phi_k^{(1)} + \lambda^2\Phi_k^{(2)} + \dots \quad (7)$$

$$E_k(\lambda) = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots \quad (8)$$

a pomocou rovníc (6) a (3) hľadať postupne koeficienty v týchto rozvojoch. Samozrejme výrazy $\Phi_k^{(0)}$, $\Phi_k^{(1)}$, ..., podobne ako $\psi_k(\lambda)$ sú aj funkciami súradnice \mathbf{r} , ale túto závislosť sme explicitne neuvádzali. Riešenie rovníc (5) napokon dostaneme tak, že vo vzťahoch (7), (8) položíme $\lambda = 1$. V nasledujúcich článkoch sa budeme zaoberať realizáciou naznačeného postupu v jednotlivých špeciálnych prípadoch.

Neskôr si v tejto kapitole všimneme aj iné metódy približného výpočtu stacionárnych stavov.

6.2 STACIONÁRNA PORUCHOVÁ METÓDA.

PRVÉ PŘIBLÍŽENIE V NEDEGENEROVANOM PRÍPADE

V tomto článku budeme postupovať priamo podľa postupu naznačeného v závere článku 6.1. Dosaďme (1.7) a (1.8) do (1.6) a dostaneme

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda H')[\Phi_k^{(0)} + \lambda\Phi_k^{(1)} + \lambda^2\Phi_k^{(2)} + \dots] = \\ & = [E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots][\Phi_k^{(0)} + \lambda\Phi_k^{(1)} + \lambda^2\Phi_k^{(2)} + \dots] \end{aligned} \quad (1)$$

Tento vzťah rozpíšeme a porovnáme koeficienty pri jednotlivých mocninách λ . Z porovnania koeficientov pri λ^0 , λ^1 , λ^2 postupne vyplýva

$$H_0\Phi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\Phi_k^{(0)} \quad (2)$$

$$H_0\Phi_k^{(1)} + H'\Phi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\Phi_k^{(1)} + E_k^{(1)}\Phi_k^{(0)} \quad (3)$$

$$H_0\Phi_k^{(2)} + H'\Phi_k^{(1)} = E_k^{(0)}\Phi_k^{(2)} + E_k^{(1)}\Phi_k^{(1)} + E_k^{(2)}\Phi_k^{(0)} \quad (4)$$

Prvá z týchto rovníc sa zrejme zhoduje s (1.3) a pretože prípad je nedegenerovaný, máme (až na nepodstatný fázový faktor)

$$\Phi_k^{(0)} = \Phi_k, \quad E_k^{(0)} = \varepsilon_k \quad (5)$$

Z rovnice (3) môžeme získať korekciu $E_k^{(1)}$ k energii E_k . Pre zjednodušenie zápisu v ďalšom použijeme na niektorých miestach označenie

$$A_{kn} \equiv \int \Phi_k^* \mathbf{A} \Phi_n d^3r \equiv (\Phi_k | \mathbf{A} \Phi_n), \quad \int \psi^* \Phi d^3r \equiv (\psi | \Phi) \quad (6)$$

Vynásobíme teraz (3) zľava funkciou Φ_k^* a preintegrujeme cez celý priestor. Použitím symboliky (6) dostaneme:

$$(\Phi_k | H_0 \Phi_k^{(1)}) + (\Phi_k | H' \Phi_k) = \varepsilon_k (\Phi_k | \Phi_k^{(1)}) + E_k^{(1)} \quad (7)$$

kde sme využili predpokladanú ortonormovanosť systému funkcií $\{\Phi_k\}$, t. j. vzťahy $(\Phi_k | \Phi_n) = \delta_{nk}$.

Ak využijeme hermitovosť H_0 a reálnosť ε_k – môžeme prvý člen na ľavej strane prepísať takto

$$(\Phi_k | H_0 \Phi_k^{(1)}) = (H_0 \Phi_k | \Phi_k) = \varepsilon_k (\Phi_k | \Phi_k^{(1)})$$

Prvé členy na oboch stranách (7) sú rovnaké a pre $E_k^{(1)}$ dostávame výsledok:

$$E_k^{(1)} = H'_{kk} \equiv (\Phi_k | H' \Phi_k) \equiv \int \Phi_k^* H' \Phi_k d^3 r \quad (8)$$

Korekciu k vlnovej funkcii $\Phi_k^{(1)}$ a korekciu druhého rádu $E_k^{(2)}$ k energii možno tiež odvodiť z rovníc (3) a (4). Týmto otázkam venujeme 3. článok tejto kapitoly.

Poruchovú teóriu možno použiť úspešne len vtedy, ak operátor H' je malý v porovnaní s operátorom H_0 . Pri podrobnejšom skúmaní sa ukazuje, že termín „malý“ znamená asi toľko, že výrazy typu H'_{nm} sú oveľa menšie ako vzdialenosti medzi energetickými hladinami neporušeného systému. Tento predpoklad však nie je splnený ak sa v narušenom systéme vyskytujú degenerované hladiny (napr. $E_n = E_m$, ale $H'_{nm} \neq 0$). S poruchovou teóriou pre prípad degenerovaného spektra H_0 sa budeme zaoberať v článku 6.4.

6.3 STACIONÁRNA PORUCHOVÁ METÓDA. DRUHÉ PŘIBLÍŽENIE K ENERGII

Pri výpočte korekcie druhého rádu k energii budeme potrebovať znalosť korekcie $\Phi_k^{(1)}$ prvého rádu k vlnovej funkcii Φ_k . Hľadáme $\Phi_k^{(1)}$ v tvare

$$\Phi_k^{(1)} = \sum_n a_{kn}^{(1)} \Phi_n \quad (1)$$

kde sa sčítava cez úplný systém vlastných funkcií hamiltoniánu H_0 . Dosadíme teraz rozvoj (1) do rovnice (2.3) a vyjadrieme $E_k^{(1)}$ pomocou (2.8). Dostaneme tak

$$(H_0 - \varepsilon_k) \sum_n a_{kn}^{(1)} \Phi_n = (H'_{kk} - H') \Phi_k \quad (2)$$

Násobme (2) zľava funkciou Φ_m^* a preintegrujeme. Pre $m \neq k$ dostaneme

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_k) a_{km}^{(1)} = H'_{mk}, \quad m \neq k \quad (3)$$

Pre $m = k$ sa rovnica (2) po vynásobení Φ_m^* a integrovaní zmení na identitu. Nezískame teda žiadne informácie o koeficiente $a_{kk}^{(1)}$ a tento ostáva ľubovoľný. Pre korekciu prvého rádu k vlnovej funkcii takto dostávame výsledok

$$\Phi_k^{(1)} = a_{kk}^{(1)} \Phi_k + \sum_{m \neq k} \frac{H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \quad (4)$$

kde koeficient $a_{kk}^{(1)}$ zatiaľ nie je určený a v druhom člene na pravej strane čiarka pri symbole pre sumu značí, že vynecháme člen s $m = k$.

Korekciu druhého rádu $E_k^{(2)}$ k energii k -teho stacionárneho stavu určíme teraz z rovnice (2.4). Najprv celú rovnicu násobíme zľava funkciou Φ_k^* a integrujeme. Prvý člen na ľavej strane bude

$$\int \Phi_k^* H_0 \Phi_k^{(2)} d^3 r = \int (H_0 \Phi_k)^* \Phi_k^{(2)} d^3 r = \varepsilon_k \int \Phi_k^* \Phi_k^{(2)} d^3 r$$

a to je presne to, čo dostaneme z prvého člena na pravej strane, lebo $E_k^{(0)} = \varepsilon_k$. Tieto dva členy preto nemusíme ani zapisovať a zvyšné nám dajú vzťah

$$(\Phi_k | H' \Phi_k^{(1)}) = E_k^{(1)} (\Phi_k | \Phi_k^{(1)}) + E_k^{(2)} (\Phi_k | \Phi_k) \quad (5)$$

Koeficient násobiaci $E_k^{(2)}$ je rovný jednej, lebo funkcia Φ_k je normovaná na jednotku a dostávame

$$E_k^{(2)} = (\Phi_k | H' \Phi_k^{(1)}) - E_k^{(1)} (\Phi_k | \Phi_k^{(1)})$$

Teraz za $\Phi_k^{(1)}$ dosadíme (4) a prideme k

$$E_k^{(2)} = a_{kk}^{(1)} (\Phi_k | H' \Phi_k) + \sum_m' \left(\Phi_k | H' \frac{H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \right) - E_k^{(1)} a_{kk}^{(1)} (\Phi_k | \Phi_k) - \sum_m' \left(\Phi_k | \frac{H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \right) \quad (6)$$

Prvý a tretí člen na pravej strane sa navzájom zrušia, lebo $(\Phi_k | H' \Phi_k^{(1)}) = E_k^{(1)}$. Štvrtý člen je nulový alebo $H'_{mk}/(\varepsilon_k - \varepsilon_m)$ sú čísla a nie operátory a celý člen môžeme preto prepísať ako

$$\sum_m' \frac{H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} (\Phi_k | \Phi_m)$$

Čiarka nad sumou hovorí, že $m = k$ sa v súčte nevyskytuje a pre všetky ostatné m je $(\Phi_m | \Phi_k) = 0$, lebo funkcie Φ_m s rôznymi indexmi sú navzájom ortogonálne. Ostáva teda len druhý člen na pravej strane v rovnici (6) a ten, ako rýchlo vidíme, možno upraviť na tvar

$$E_k^{(2)} = \sum_m' \frac{H'_{km} H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \quad (7)$$

Pre úplnosť sa ešte vrátíme ku koeficientu $a_{kk}^{(1)}$ v rovnici (4). Funkcia ψ_k v priblížení do prvého rádu

$$\psi_k = \Phi_k + \lambda \Phi_k^{(1)} \quad (8)$$

musí byť normovaná tiež s presnosťou v prvom ráde, t. j.

$$(\psi_k | \psi_k) = 1 + 0(\lambda^2) \quad (9)$$

kde druhý člen označuje veličina rádu λ^2 . Ak (8) dosadíme do (9) máme

$$(\Phi_k + \lambda \Phi_k^{(1)} | \Phi_k + \lambda \Phi_k^{(1)}) = (\Phi_k | \Phi_k) + \lambda [(\Phi_k | \Phi_k^{(1)}) + (\Phi_k^{(1)} | \Phi_k)] + 0(\lambda^2)$$

Člen úmerný λ musí byť podľa (9) nulový. Ale z vyjadrenia $\Phi_k^{(1)}$ podľa (4) vidno, že

$$(\Phi_k | \Phi_k^{(1)}) = a_{kk}^{(1)}, \quad (\Phi_k^{(1)} | \Phi_k) = (a_{kk}^{(1)})^*$$

a nulovosť člena úmerného λ v (9) znamená

$$a_{kk}^{(1)} + (a_{kk}^{(1)})^* = 0$$

Podľa toho musí byť $a_{kk}^{(1)}$ čisto imaginárne číslo, t. j.

$$a_{kk}^{(1)} = i\alpha, \quad \alpha \text{ reálne} \quad (10)$$

Potom pre ψ_k v prvom priblížení podľa (8) a (4) máme

$$\psi_k = (1 + i\alpha\lambda)\Phi_k + \sum_m' \frac{\lambda H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \quad (11)$$

V prvom priblížení v λ platí aj $1 + i\alpha\lambda = \exp(i\alpha\lambda)$ a (11) môžeme prepísať ako

$$\psi_k = e^{i\alpha\lambda} \Phi_k + \sum_m' \frac{\lambda H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m$$

čo s presnosťou do 1. rádu v λ možno zapísať ako

$$\psi_k = e^{i\alpha\lambda} \left(\Phi_k + \sum_m' \frac{\lambda H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \right)$$

Nenulovosť koeficientu $a_{kk}^{(1)}$ je teda ekvivalentná zmene fázy funkcie ψ_k a takáto zmena nemá fyzikálne dôsledky. Preto môžeme položiť $a_{kk}^{(1)} = 0$.

Vlnovú funkciu $\Phi_k^{(2)}$ počítame podobne ako $\Phi_k^{(1)}$. Postup je v princípe jednoduchý. Zapišeme

$$\Phi_k^{(2)} = \sum_m' a_{km}^{(2)} \Phi_m$$

toto dosadíme do (2.4) a výslednú rovnicu násobíme Φ_s^* a integrujeme. Výsledok nebudeme explicitne uvádzať.

Poznamenajme na záver, že systematickejšia, formálnejšia a matematicky korektnejšia prehľad stacionárnej poruchovej metódy možno nájsť v knihách Messiaha a Merzbachera [10], [25], citovaných v zozname odporúčanej literatúry.

6.4 STACIONÁRNA PORUCHOVÁ METÓDA PRE DEGENEROVANÉ HLADINY

Hoci sme podrobnejšie nepreskúmali hranice použiteľnosti poruchovej metódy, je intuitívne jasné, že metóda je použiteľná pokiaľ porucha je malou korekciou k neporušeným energiám a vlnovým funkciám.

Ak sa obmedzíme na prvý rád, t. j.

$$E_k^{(1)} = H'_{kk} \quad (1)$$

$$\Phi_k^{(1)} = \sum_m' \frac{H'_{mk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_m} \Phi_m \quad (2)$$

vidno, že korekcie k energii budú malé, ak H'_{kk} je oveľa menšie ako vzdialenosť medzi k -tou a najbližšou susednou hladinou a ak

$$|H'_{mk}| \ll |\varepsilon_k - \varepsilon_m|$$

pre všetky m pri danom k .

Tieto podmienky určite nie sú splnené, ak hladina k je degenerovaná pri neporušenom hamiltoniáne H_0 , t. j. ak ku hladine s energiou ε_k prislúchajú dve (alebo viac) nezávislých vlastných funkcií. V ďalšom budeme predpokladať, že k -ta hladina je dvakrát degenerovaná, t. j. že existujú dve funkcie Φ_{k1} , Φ_{k2} , pre ktoré platí

$$H_0 \Phi_{k1} = \varepsilon_{k1} \Phi_{k1} \equiv \varepsilon_k \Phi_{k1} \quad (3)$$

$$H_0 \Phi_{k2} = \varepsilon_{k2} \Phi_{k2} \equiv \varepsilon_k \Phi_{k2}$$

Budeme tiež predpokladať, že Φ_{k1} , Φ_{k2} sú nielen normované na jednotku, ale aj ortogonálne, t. j.

$$(\Phi_{k1} | \Phi_{k2}) = 0 \quad (4)$$

Keby sme teraz chceli použiť vzťah (2) pre korekciu k vlnovej funkcii Φ_{k1} , dostali by sme sa do zlej situácie, pretože v (2) sčítujeme cez všetky stavy okrem $k1$ a teda stav $k2$ je do sumy zahrnutý. V tomto prípade je ale menovateľ nulový a výraz buď nemá zmysel (pri $H'_{k1, k2} = 0$), alebo je určite chybný (pri $H'_{k1, k2} \neq 0$).

Pre degenerovaný prípad treba začať s poruchovým rozvojom pozorne odznova.

Vráťme sa preto zas k začiatku článku 6.2 a všimnime si, na ktorých miestach sa vyskytnú zmeny.

Rovnica (2.1) sa formálne nezmení a rovnako formálne vedie ku vzťahom (2.2), (2.3) a (2.4).

V článku 6.2 sme ale z rovnice (2.2), t. j. z

$$H_0 \Phi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Phi_k^{(0)} \quad (5)$$

hneď usúdili, že $\Phi_k^{(0)}$ je vlastnou funkciou H_0 príslušnou ku k -tej hladine a pri tomto úsudku bolo podstatné to, že H_0 má nedegenerované spektrum, prinajmenšom, že k -ta hladina nie je degenerovaná. Teraz to už

ale nemôžeme urobiť a z rovnice (5) môžeme usúdiť len to, že $\Phi_k^{(0)}$ je lineárnou kombináciou funkcií Φ_{k1} , Φ_{k2} . Teda máme

$$\Phi_k^{(0)} = c_1\Phi_{k1} + c_2\Phi_{k2} \quad (6)$$

Toto vyjadrenie dosadíme do (2.3) a máme

$$H_0\Phi_k^{(1)} + H'(c_1\Phi_{k1} + c_2\Phi_{k2}) = \varepsilon_k\Phi_k^{(1)} + E_k^{(1)}(c_1\Phi_{k1} + c_2\Phi_{k2}) \quad (7)$$

Pri výpočte energie $E_k^{(1)}$ sme v článku 6.2 násobili analogickú rovnicu Φ_k^* a integrovali. Teraz máme k danej hodnote energie E_k príslušné dve vlastné funkcie hamiltoniánu H_0 a urobíme to isté s obidvoma. Násobíme (7) najprv Φ_{k1}^* a integrujeme. Prvé dva členy na oboch stranách rovnice dajú to isté číslo a vypadnú. Zo zvyšných členov máme

$$H'_{11}c_1 + H'_{12}c_2 = E_k^{(1)}c_1 \quad (8)$$

Podobne po násobení (7) funkciou Φ_{k2}^* a integrovaní máme

$$H'_{21}c_1 + H'_{22}c_2 = E_k^{(1)}c_2 \quad (9)$$

kde sme označili $H'_{11} = H'_{k1,k1}$, $H'_{12} = H'_{k1,k2}$ atď. Rovnice (8), (9) môžeme prepísať aj do tvaru

$$\begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E_k^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Toto je vlastne rovnica určujúca vlastné hodnoty a vlastné vektory hermitovskej matice typu 2×2 označenej H'_{ik} . Vo všeobecnosti má rovnica dva korene, ktoré dostaneme z požiadavky nulovosti determinantu

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E_k^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (11)$$

a ku každému koreňu prislúcha vlastná funkcia.

Tieto vlastné funkcie sú navzájom ortogonálne. Ak sú korene rovnice (11) rôzne, potom hovoríme, že porucha sníma degeneráciu – pod vplyvom poruchy sa hladina rozštiepi.

Podstatné je to, že tieto dve nové funkcie, označíme ich napríklad ako

$$\begin{aligned} \psi_k^{(0)} &= c_1\Phi_{k1} + c_2\Phi_{k2} \\ \psi_k'^{(0)} &= c_1'\Phi_{k1} + c_2'\Phi_{k2} \end{aligned}$$

majú tú dôležitú vlastnosť, že

$$\int \psi_k^{(0)*} H' \psi_k'^{(0)} d^3r = 0$$

Keby sme ich vybrali ako funkcie, z ktorých v nultom priblížení vychádzame, potom by H'_{12} bolo nulové a dal by sa realizovať bežný postup poruchovej metódy, ktorý by priviedol zas ku vzťahom ako (2), len v súčte by bolo treba vynechať všetky stavy degenerované so stavom k .

Takže v istom zjednodušení poruchová metóda pre degenerovanú hladinu vlastne hovorí: predtým ako začneš s poruchovou metódou vyber tak lineárne kombinácie nezávislých degenerovaných funkcií, aby nediagonálne maticové elementy H' boli (pre tieto nové funkcie) nulové. Potom pokračuj ako predtým.

Skúmanie poruchovej metódy pre degenerované stavy sme urobili na tom najjednoduchšom prípade 2-násobnej degenerácie istej hladiny. Zovšeobecnenie na prípad n -násobnej degenerácie je veľmi jednoduché a prenecháme ho čitateľovi.

6.5 VARIÁČNÁ METÓDA

Ak hamiltonián nemôžeme rozložiť na „veľkú“, presne riešiteľnú časť a na „malú“ poruchu, nemožno na riešenie použiť metódy z predchádzajúcich častí. V takýchto prípadoch sa musí problém riešiť numericky. Variačná metóda je v podstate návodom, ako takéto numerické riešenie možno uskutočniť. Je obzvlášť vhodná pre približný výpočet energie a vlnovej funkcie základného stavu. V princípe možno variačnú metódu použiť aj na výpočet energie ostatných viazaných stavov, ale praktické uskutočnenie je komplikovanejšie a výsledky sú menej presné.

Z numerického hľadiska výhoda tejto metódy je v tom, že problém riešenia SchR sa zmení na štandardnú, hoci často komplikovanú, úlohu minimalizovania funkcie viac premenných. Programy pre takéto minimalizácie existujú vo väčších výpočtových strediskách. Pri vhodnej voľbe skúšobných funkcií možno však získať približné riešenie problému aj „na kolene“.

Základná myšlienka variačnej metódy sa často používa pri konštruovaní modelov pre komplikované viacčasticové systavy. V tejto časti sa budeme zaoberať touto metódou len v najjednoduchšom prípade. Smer, ktorým sa uberajú zovšeobecnenia zložitejších situácií, by mal byť aj tak zreteľný.

Variačná metóda je založená na variačnom princípe, sformulovanom v nasledujúcom tvrdení.

Nech H je hamiltonián sústavy, a nech jeho vlastné funkcie tvoria úplný ortonormovaný systém. Nech E_0 je najnižšia vlastná hodnota operátora H . Potom pre ľubovoľnú normovanú vlnovú funkciu platí

$$\int \Phi^* H \Phi d^3 r \geq E_0 \quad (1)$$

Dôkaz: Vlastné funkcie hamiltoniánu H sú riešením rovnice $H\psi_i = E_i\psi_i$ a predpokladáme, že tvoria úplný ortonormovaný systém.

Ľubovoľné Φ možno teda vyjadriť v tvare

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n$$

Pretože Φ je normované, platí $\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$. Skutočne

$$1 = (\Phi|\Phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m (\psi_n|\psi_m) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m \delta_{nm} = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \quad (2)$$

Výraz na ľavej strane (1) možno upraviť nasledovne

$$(\Phi|H\Phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m (\psi_n|H\psi_m) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_n^* c_m E_m (\psi_n|\psi_m) = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n \quad (3)$$

Pretože $E_n \geq E_0$ pre všetky n podľa predpokladu, a pretože platí (2), bude výraz na pravej strane (3) určite väčší alebo rovnajúci sa E_0 . Tým je tvrdenie dokázané.

Pri použití variačnej metódy postupujeme nasledovne. Na základe kvalitatívnej informácie o sústave si vyberieme skúšobnú vlnovú funkciu $\Phi(\mathbf{r}, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$, ktorá závisí od niekoľkých voľných variačných parametrov α_i . Potom utvoríme výraz

$$E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \frac{1}{N^2} \int \Phi^*(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) H \Phi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) d^3 r \quad (4)$$

$$N^2 = \int |\Phi|^2 d^3 r$$

Faktor N^2 vystupuje v (4) preto, že funkcia $N^{-1}\Phi(\mathbf{r}, \alpha)$ je už podľa konštrukcie normovaná. Podľa predchádzajúceho tvrdenia vieme, že $E(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \geq E_0$. Najlepší horný odhad energie E_0 dostaneme, ak nájdeme minimum výrazu $E(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Ak označíme hodnoty α_i , pri ktorých $E(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ dosahuje minimum ako $\bar{\alpha}_i$ tak $E(\bar{\alpha}_1, \dots, \bar{\alpha}_n)$ a $\Phi(\mathbf{r}, \bar{\alpha}_1, \dots, \bar{\alpha}_n)$ možno považovať za približné výrazy pre energiu a vlnovú funkciu základného stavu. Variačná metóda dáva niekedy až neočakávane dobré výsledky.

Miernou modifikáciou predchádzajúcej metódy možno pomocou variačnej metódy hľadať aj vlnové funkcie excitovaných stavov.

Pri riešení variačného problému minimalizujúcu funkciu môžeme zvoliť aj v tvare

$$\varphi = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots + c_p f_p \quad (5)$$

pričom f_i sú dané funkcie a c_i sú variačné parametre. O funkciách f_i nemusíme predpokladať ani to, že sú normované, ani to, že sú navzájom ortogonálne. Ak žiadame, aby funkcia φ bola normovaná na jednotku, tak pre variačné parametre c_i platí podmienka

$$\sum_{i,k=0}^p S_{ik} c_i^* c_k = 1 \quad (6)$$

kde

$$S_{ik} = \int f_i^* f_k d^3 r \quad (7)$$

O správnosti (6) sa možno ľahko presvedčiť jednoduchým dosadením. Maticu \mathbf{S} s prvkami S_{ik} nazývame prekryvovou maticou (overlap matrix) a integrály S_{ik} prekryvovými integrálmi.

Strednú hodnotu operátora H v stave opísanom vlnovou funkciou (5) nájdeme teraz jednoducho. Podľa definície Φ je zrejmé, že energia bude funkciou p variačných parametrov

$$E(c_1, c_2, \dots, c_p) = \int \varphi^* H \varphi d^3 r \quad (8)$$

Po dosadení za φ a po elementárnych úpravách dostaneme:

$$E(c_1, c_2, \dots, c_p) = \sum_{i,k=1}^p H_{ik} c_i^* c_k \quad (9)$$

kde

$$H_{ik} = \int f_i^* H f_k d^3 r \quad (10)$$

sú maticové elementy operátora H , utvorené pomocou funkcií f_i .

Úlohu teraz možno formulovať takto: máme nájsť súbor koeficientov c_i tak, aby funkcia $E(c_1, c_2, \dots, c_p)$ mala minimum, a aby bola splnená vedľajšia podmienka (6). Pri riešení použijeme metódu Lagrangeovho multiplikátora.¹⁰² Utvoríme výraz

$$E(c_1, c_2, \dots, c_p) = \sum_{i,k=1}^p (H_{ik} - \varepsilon S_{ik}) c_i^* c_k \quad (11)$$

kde ε je Lagrangeov multiplikátor a hľadáme minimum $W(c_1, c_2, \dots, c_p)$. Podmienky minima W sú:

$$\frac{\partial W}{\partial c_i^*} = 0$$

pre všetky $i, i = 1, 2, \dots, p$. Po dosadení (11) z nich dostaneme systém rovníc

$$\sum_{i,k=1}^p (H_{ik} - \varepsilon S_{ik}) c_k = 0 \quad (12)$$

ktorý je homogénnym lineárnym systémom na určenie koeficientov c_k a má netriviálne riešenie len vtedy, ak sa jeho determinant rovná nule. Z tejto podmienky dostaneme rovnicu na určenie Lagrangeovho multiplikátora ε . Potom už vieme vypočítať pomery koeficientov c_k a s využitím (6) aj samotné koeficienty c_k . Za predpokladu, že poznáme c_k a ε , určíme minimum energie E . Podmienkou minima je (12). Ak túto rovnicu násobíme c_k^* a sčítame, dostaneme:

$$\sum_{i,k=1}^p (H_{ik} - \varepsilon S_{ik}) c_k c_i^* = \sum_{i,k=1}^p H_{ik} c_k c_i^* - \varepsilon \sum_{i,k=1}^p S_{ik} c_k c_i^* = 0$$

¹⁰² Základnú myšlienku metódy Lagrangeovho multiplikátora si ešte stručne všimneme na konci tohto článku.

Druhý člen sa podľa (6) rovná ε , kým prvý člen predstavuje práve energiu. Inými slovami: Lagrangeov multiplikátor je práve energia sústavy $E = \varepsilon$. Energiu teda môžeme vypočítať riešením rovnice

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} & \dots & H_{1p} - ES_{1p} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} & \dots & H_{2p} - ES_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{p1} - ES_{p1} & H_{p2} - ES_{p2} & \dots & H_{pp} - ES_{pp} \end{vmatrix} = 0 \quad (13)$$

Nulová hodnota determinantu (13) vedie pri určovaní E na rovnicu p -teho stupňa a vo všeobecnosti má p koreňov. Energia základného stavu sa rovná najmenšiemu z týchto koreňov. Výpočty sa podstatne zjednodušia, ak systém funkcií f_i v (5) je ortonormovaný. Potom prekryvové integrály majú tvar $S_{ik} = \delta_{ik}$. Ďalšie zjednodušenia vznikajú vtedy, ak maticové elementy H_{ik} sú rôzne od nuly iba pre i blízke ku k , napríklad pre $i = k$ a $i = k \pm 1$. Takéto priblíženia sa používajú často v kvantovej chémii.

Lagrangeov multiplikátor.¹⁰³ Tento veľmi pekný trik sa používa pri hľadaní lokálneho extrému funkcie v situáciách, keď je daná aj istá vedľajšia podmienka. Nebudeme sa tu snažiť o všeobecný výklad metódy; uvedieme len jeden veľmi jednoduchý príklad, na ktorom vidno základnú myšlienku.

Majme jednoduchú funkciu dvoch premenných

$$z = f(x, y) = \frac{1}{x^2 + y^2 + A^2} \quad (14)$$

Ak si ju nakreslíme, zistíme ľahko, že opisuje „kopec“ s oblým vrcholom nad bodom $x = y = 0$. Jej extrém nájdeme ľahko aj formálne. Stačí žiadať, aby v bode x_0, y_0 , v ktorom nastáva extrém platilo:

$$dz = \nabla f \cdot d\mathbf{r} = 0 \quad \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right) \quad (15)$$

kde $d\mathbf{r}$ je diferenciál so zložkami (dx, dy) , pričom (15) musí byť splnené pre ľubovoľný diferenciál $d\mathbf{r}$. Dostaneme tak podmienky

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (16)$$

Pre konkrétny príklad (14) vedú tieto podmienky, pravdaže, k určeniu lokálneho extrému v bode $x_0 = 0, y_0 = 0$.

Podme teraz hľadať extrém funkcie $f(x, y)$ za vedľajšej podmienky (napríklad)

$$\varphi(x, y) = ax + by + c = 0 \quad (17)$$

kde a, b, c sú určité čísla. Geometricky je jasné, čo hľadáme. Je to lokálny extrém čiary, ktorá vznikne rezom „kopca“ (14) rovinou (17) (odporúčame čitateľovi, aby si predsa len nakreslil obrázok).

V našom jednoduchom prípade môžeme teraz priamo spočítať $y = y(x)$ z rovnice (17), dosadiť to do (14) a hľadať maximum funkcie jednej premennej $Z = f(x, y(x))$. V zložitejších prípadoch je to ale zdĺhavá a často prakticky neuskutočniteľná cesta.

Druhou možnosťou – a tá vedie k Lagrangeovmu multiplikátoru – je žiadať, aby podmienka (15) nebola splnená pre ľubovoľné $d\mathbf{r}$, ale iba pre také $\delta\mathbf{r}$, ktoré nás „nevyvedie von“ z krivky $\varphi(x, y)$. Pre takéto $\delta\mathbf{r}$ musí zrejme platiť

$$d\varphi = \nabla\varphi \cdot \delta\mathbf{r} = 0 \quad (18)$$

Vzťah (18) hovorí, že zložky $\delta\mathbf{r} = (\delta x, \delta y)$ nie sú nezávislé, ale sú viazané podmienkou (18). Pre takéto $\delta\mathbf{r}$ potom žiadame splnenie podmienky

$$\delta z = \nabla f \cdot \delta\mathbf{r} = 0 \quad (19)$$

¹⁰³ Zvyšok článku je len pre čitateľov, ktorí už zabudli ako sa zavádza Lagrangeov multiplikátor, alebo tých, ktorí práve neboli v škole, keď sa toto v teoretickej mechanike alebo inde preberalo.

čo je zrejme podmienka hľadaného viazaného extrému.¹⁰⁴ Teraz si stačí uvedomiť, že vektory ∇f , $\nabla\varphi$ aj $\delta\mathbf{r}$ ležia v rovine x, y , pričom $\nabla\varphi$ aj ∇f sú podľa (18) a (19) kolmé na $\delta\mathbf{r}$, preto musia byť navzájom rovnobežné. Značí to, že v bode viazaného extrému existuje číslo λ , také, že platí:

$$\nabla f = \lambda \nabla \varphi \quad (20)$$

Rovnicu (20) môžeme ale prepísať aj ako

$$\nabla(f - \lambda\varphi) = 0 \quad (21)$$

a to je formálne podmienka pre minimum funkcie

$$g = f(x, y) - \lambda\varphi(x, y)$$

ale bez dodatočných podmienok. Rovnicu (21) ešte musíme doplniť podmienkou (17) a týmito tromi rovnicami (lebo (21) predstavuje dve rovnice) sú určené tri čísla x_0, y_0, λ .

Táto úvaha sa dá ľahko zovšeobecniť na funkcie N -premenných.

6.6 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Elektrón je viazaný na úsečku $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$. Nájdite korekcie k energii jednotlivých hladín spôsobené malou dodatočnou poruchou

$$V(x) = \alpha x^2$$

Ako sa zmení energia fotónu emitovaného pri prechode z prvého excitovaného stavu do základného?

- Na lineárny harmonický oscilátor s nábojom e pôsobí elektrické pole s intenzitou E orientovanou v smere osi x . Vypočítajte zmeny energetických hladín v prvom i v druhom ráde poruchovej teórie. Nájdite aj presné riešenie úlohy a porovnajte približný výsledok s presným.
- Určite v prvom priblížení poruchovej metódy korekciu k energii základného stavu atómu vodíka pochádzajúcu od nehodovosti jadra. Predpokladajte, že náboj protónu je rozložený rovnomerne v guli o polomere $R = 0,7 \cdot 10^{-15}$ m.
Návod: najprv nájdite potenciál budený takýmto rozložením náboja.
Prediskutujte relatívnu veľkosť korekcie pre tento prípad a pre ťažký atóm s μ -mezónom na K-hladine.
- Z experimentálnych údajov o rozptyle neutrónu na protóne sa zistilo, že v stave s $S = 1, L = 0$ je potenciálna energia medzi neutrónom a protónom približne opísaná funkciou

$$V(r) = -V_0 \exp(-r/a)$$

kde $a = 2,2$ fermi $= 2,2 \cdot 10^{-15}$ m, $V_0 = 32$ MeV.

Odhadnite variačnou metódou väzbovú energiu deuterónu. (Jej experimentálna hodnota je $-2,225$ MeV).

Návod: Vyberte si skúšobnú funkciu obsahujúcu jeden voľný parameter, najjednoduchšia je snáď $\Phi(r) = A \exp(-\alpha r)$, kde α je voľný parameter a A je určené normovaním: $A = A(\alpha)$.

- Dokážte nasledujúce tvrdenie: Nech $\psi_0(x)$ je vlnovou funkciou základného stavu sústavy opísanej hamiltoniánom H a nech $\Phi(x)$ je ortogonálna na $\psi_0(x)$. Potom

$$\frac{\int \Phi^*(x) H \Phi(x) dx}{\int \Phi^*(x) \Phi(x) dx} \geq E_1$$

kde E_1 je energia najnižšieho excitovaného stavu.

- Pomocou predchádzajúceho tvrdenia odhadnite vlnovú funkciu prvého excitovaného stavu lineárneho harmonického oscilátora. Vlnovú funkciu základného stavu považujte za známú.
Návod: Ak vlnová funkcia základného stavu má tvar

$$\psi_0(x) = A \exp(-x^2/2x_0^2)$$

potom vlnovú funkciu ψ_1 excitovaného stavu môžeme pre účely variačnej metódy hľadať v tvare $\psi_1(x) = Bx \exp(-\alpha x^2)$ čo automaticky spĺňa podmienku ortogonálnosti.

- Častica sa pohybuje v jednom rozmere v poli s potenciálnou energiou $V(x) \leq 0$, pričom $V(-\infty) = V(\infty) = 0$. Ukážte, že v tejto situácii existuje aspoň jeden viazaný stav.

¹⁰⁴ Dobré je uvedomiť si geometrický význam vzťahov (18) a (19). Vektor ∇f má smer priemetu spádnice plochy $z = f(x, y)$ do roviny x, y . Rovnice (18) a (19) hovoria, že krivka, ktorú dostaneme rezom plochy $z = f(x, y)$ rovinou $\varphi(x, y) = 0$ má v bode extrémú dotyčnicu, ktorá je kolmá na spádnicu a má teda smer vrstevnice.

Návod: Ukážte najprv, že pri dvoch pot. energiách $V_1(x) \leq V_2(x)$ takých, že $V_1(\infty) = V_2(\infty) = V_1(-\infty) = V_2(-\infty) = 0$ má $V_1(x)$ aspoň jeden viazaný stav, ak $V_2(x)$ má aspoň jeden viazaný stav. Potom si všimnite, že jednorozmerná jama $V_1(x) = -V_0$ pre $a \leq x \leq b$, $V(x) = 0$ pre x mimo tohto intervalu, má aspoň jeden viazaný stav, a to nezávisle od hĺbky jamy a od jej šírky.

8. Uvažujte časticu pohybujúcu sa po osi x v poli potenciálnej energie $V(x)$. Predpokladajte, že potenciálna energia je taká, že existuje aspoň jeden viazaný stav. Ukážte, že vlnová funkcia základného stavu nemá uzol, t. j. vlnová funkcia je všade nenulová.

Návod: Predpokladajte, že funkcia $\psi_1(x)$ má uzol v bode a . Uvažujte potom funkciu $\psi_2(x)$, ktorá je všade kladná a platí pre ňu $\psi_2(x) = |\psi_1(x)|$ všade s výnimkou malého okolia bodu a kde funkcia je „vyhladená“ tak, aby mala spojitú deriváciu. Ukážte potom (aspoň kvalitatívne), že vhodným „vyhladením“ možno docieľiť to, že stredná hodnota energie príslušná k $\psi_2(x)$ bude menšia ako stredná hodnota príslušná k $\psi_1(x)$.

7 PORUCHOVÁ METÓDA PRE ROZPTYLOVÉ STAVY. ROZPTYL ČASTÍC NA STATICKOM SILOVOM POLI

7.1 ÚVOD

V tejto kapitole sa budeme venovať poruchovej metóde pre výpočet stacionárnych rozptylových stavov. Budeme sa zaoberať špeciálnym prípadom rozptylu častíc na statickom silovom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$. S touto situáciou sa najčastejšie stretávame v aplikáciách.

Náš postup bude takýto: najprv sa pozrieme bližšie na fyzikálnu formuláciu úlohy a sformulujeme príslušné okrajové podmienky pre riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice. Skôr však, ako začneme s riešením, urobíme odbočku matematického charakteru. Oboznámime sa s Diracovou δ -funkciou a zopakujeme si niekoľko poznatkov z teórie funkcií komplexnej premennej. Až potom prídeme k vlastnej poruchovej metóde pre výpočet rozptylových stavov, kde využijeme spomínané matematické poznatky.

7.2 FYZIKÁLNA FORMULÁCIA ROZPTYLOVÉHO PROBLÉMU

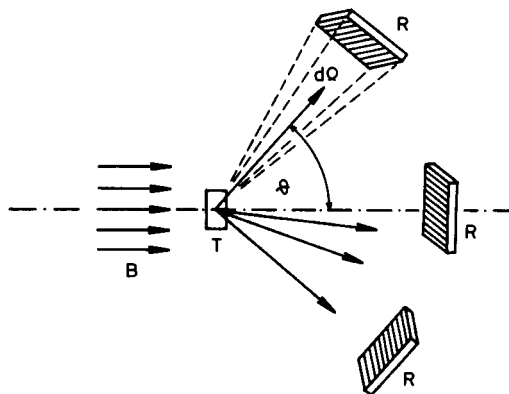
Typický prípad experimentu s rozptylom častíc možno opísať nasledujúcim spôsobom. Častice, ktoré hrajú úlohu rozptylových centier (pre určitosť si pod nimi môžeme predstaviť povedzme protóny) sa nachádzajú v terčíku, označenom ako T na obr. 7.1. Na terčík dopadá približne monoenergetický zväzok častíc typu B (povedzme elektróny), ktoré sa na terčíku rozptyľujú, a po rozptyle sú zachytené detektormi R umiestnenými okolo terčíku. Pri experimente poznáme tieto údaje:

j – hustotu prúdu dopadajúcich častíc

N – počet častíc v terčíku

dn – počet častíc zaregistrovaných určitým detektorom R za jednotku času

$d\Omega$ – priestorový uhol pokrytý týmto detektorom.



Obr. 7.1

Počet častíc dn bude zrejme úmerný hustote prúdu dopadajúcich častíc, počtu častíc v terčíku a veľkosti priestorového uhla pokrytého daným detektorom, takže máme

$$dn = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) jN d\Omega$$

Výraz v zátvorke je koeficient úmernosti označený tradičným spôsobom. Tento koeficient závisí od uhlov ϑ, φ . Rozmer $d\sigma/d\Omega$ je m^2 a preto ho nazývame diferenciálnym účinným prierezom. O rozmere $d\sigma/d\Omega$ sa presvedčíme rýchlo, ak si uvedomíme, že¹⁰⁵

$$[dn] = s^{-1}, \quad [j] = m^{-2} s^{-1}, \quad [N] = 1, \quad [d\Omega] = 1$$

Vzťah (1) platí za predpokladu, že pri rozptyle ide vždy iba o interakciu jednej častice dopadajúceho zväzku s jednou časticou terča. V praktických prípadoch je tento predpoklad zväčša dobre splnený.

Pri teoretickom opise sa preto zaujíname o rozptyl častíc zväzku na jedinej terčikovej častici. Vzájomnú interakciu dopadajúcej a terčikovej častice budeme opisovať potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ a pre jednoduchosť budeme predpokladať, že terčiková častica je oveľa ťažšia ako dopadajúca a počas interakcie ostáva fixovaná v začiatku súradnicovej sústavy.¹⁰⁶

Pri adekvátnom kvantovomechanickom opise rozptylu častice na silovom centre by sme dopadajúcu časticu opisovali vlnovým balíkom a sledovali časový vývoj tohto balíka riešením časovej SchR. Pri takomto postupe sa však všetky formulky stávajú neprehľadnými. Ako sme už spomínali pri diskusii v článku 4.7, môžeme sa obmedziť na hľadanie vhodných riešení bezčasovej SchR. Takéto riešenia v prípade prechodu častice cez bariéru obsahovali (v oblasti mimo bariéry) vlnu dopadajúcu na bariéru z jednej strany, vlnu odrazenú od bariéry a vlnu, ktorá prešla bariérou.

V prípade rozptylu častice na silovom centre budeme hľadať také riešenia bezčasovej SchR, ktoré vo vzdialenosti ďaleko od rozptylového centra obsahujú iba rovinnú vlnu priradenú dopadajúcej častici a rozbiehavú guľovú vlnu opisujúcu rozptýlenú časť dopadajúcej vlny.

Hamiltonov operátor pre časticu v poli silového centra s daným $V(\mathbf{r})$ je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$$

Bečasovú SchR potom píšeme v tvare

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

a po zavedení $U(\mathbf{r}) = (2m/\hbar^2)V(\mathbf{r})$, $k^2 = (2m/\hbar)E$ upravíme (2) na tvar

$$(\Delta + \mathbf{k}^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

Fyzikálny význam veličiny \mathbf{k}^2 je jednoduchý. V rozptylovom experimente je totiž energia dopadajúcej častice rovná tej energii, ktorú jej udelilo urýchľujúce zariadenie (elektrónové delo, urýchľovač atď.). V oblasti ďaleko od terčika môžeme túto energiu písať ako $E = \mathbf{p}^2/2m$ a pri zavedení vlnového vektora $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ako $E = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$. Veličina \mathbf{k} v (3) je takto vlnovým vektorom dopadajúcej častice v oblasti mimo dosahu síl zodpovedným za interakciu.

Riešenie $\psi(\mathbf{r})$ bezčasovej SchR, ktoré obsahuje dopadajúcu rovinnú vlnu $\exp(ikz)$ a okrem nej pri veľkých hodnotách r iba rozptýlenú vlnu, spĺňa podmienku

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ikz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad r \rightarrow \infty \quad (4)$$

Toto tvrdenie vyplýva z nasledujúcej úvahy. Riešenie $\psi(\mathbf{r})$ rovnice (2) je vlastnou funkciou operátora energie. Časová závislosť takéhoto riešenia je, tak ako pri všetkých stacionárnych stavoch,

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad \omega = E/\hbar$$

Podľa (4) pre $\Phi(\mathbf{r}, t)$ dostaneme

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i(kz - \omega t)} + \frac{f(\vartheta, \varphi)}{r} e^{i(kr - \omega t)} \quad r \rightarrow \infty \quad (5)$$

¹⁰⁵ Niekedy sa ako rozmer priestorového uhla $d\Omega$ berie steradián a potom $(d\sigma/d\Omega)$ má rozmer m^2 (sterad)⁻¹.

¹⁰⁶ Tohto predpokladu sa môžeme zbaviť prechodom do súradnicovej sústavy, v ktorej je nehybné ťažisko dopadajúcej a terčikovej častice. Po technickej stránke je to to isté, čo sme už urobili pri zavádzaní relatívnej súradnice v článku 4.12 a podrobnejšie sa k tomu ešte vrátíme v kapitole o rozptyle.

Prvý člen na pravej strane predstavuje dopadajúcu rovinnú vlnu, druhý sférickú rozbiehavú vlnu, $f(\vartheta, \varphi)$ nazývame amplitúdou rozptylu.

Hustotu prúdu dopadajúcej vlny spočítame podľa známeho vzťahu

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} [\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*] \quad (6)$$

pričom za Φ dosadíme iba člen $\exp(ikz - \omega t)$ opisujúci dopadajúcu rovinnú vlnu. Ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$j_z = j = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_x = j_y = 0$$

Hustotu prúdu rozbiehavej sférickej vlny spočítame tak, že do (6) dosadíme za Φ výraz $r^{-1}f(\vartheta, \varphi) \exp(ikr - i\omega t)$. Ak ∇ vyjadříme vo sférických súradniciach, dostaneme pre radiálnu zložku hustoty prúdu

$$j'_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\vartheta, \varphi)|^2 + \text{členy úmerné } r^{-3}$$

Počet častíc dn dopadajúcich za jednotku času do detektora pokrývajúceho priestorový uhol $d\Omega$ je daný vzťahom

$$dn = j'_r r^2 d\Omega \quad (7)$$

kde $dS = r^2 d\Omega$ je veľkosť plochy detektora kolmej na smer pohybu častíc rozptýlených daných smerom. Vzhľadom na to, že detektor je v skutočných experimentoch veľmi vzdialený od rozptylového centra ($r/\lambda \gg 1$, kde $\lambda = 2\pi/k$, $r/a_1 \gg 1$, pričom a_1 je Bohrov polomer) môžeme v (7) urobiť na pravej strane limitu $r \rightarrow \infty$ a pre počet častíc registrovaných za jednotku času detektorom dostávame

$$dn = |f(\vartheta, \varphi)|^2 j d\Omega$$

Tento vzťah treba porovnať s (1) pri $N = 1$ (lebo teraz sme uvažovali rozptyl na jedinej častici). Takto prichádzame k dôležitému výsledku

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (8)$$

Celkovým účinným prierezom nazývame výraz

$$\sigma_0 = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int |f(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (9)$$

To, čo sme doteraz povedali možno zhrnúť veľmi jednoducho:

- výsledky rozptylového experimentu sú charakterizované diferenciálnym účinným prierezom $d\sigma/d\Omega$
- teoretické predpovede pre túto veličinu dostaneme tak, že nájdeme riešenie bezčasovej SchR (2) či (3) s asymptotikou (4) a $d\sigma/d\Omega$ dostaneme potom pomocou (8).

Skôr ako začneme riešiť túto úlohu, musíme si v nasledujúcich článkoch uviesť niekoľko nevyhnutných poznatkov matematického charakteru. Nepôjde však iba o nejaké technické podrobnosti potrebné výlučne pre daný problém. Tento matematický aparát využijeme podstatne i neskôr pri ďalšom budovaní formalizmu kvantovej teórie.

7.3 DIRACOVA DELTA-FUNKCIA

Delta funkciu $\delta(\mathbf{r})$ zaviedol Dirac v tridsiatych rokoch vo svojich prácach z kvantovej mechaniky a odvtedy sa vo fyzike bežne používa. Z matematického hradiska však δ -funkcie neboli dlho dobre definovanými objektami. Korektnú teóriu δ -funkcií formuloval neskôr L. Schwartz v rámci teórie

distribúcií. Tu si uvedieme len niekoľko základných myšlienok a tvrdení teórie distribúcií, podrobnejšiu teóriu a presné definície možno nájsť v literatúre.¹⁰⁷

Začneme však s jednoduchými príkladmi, ktoré nám ukážu, čo to δ -funkcia je a kedy sa s ňou vo fyzike stretávame.

Potenciálna energia rozloženia náboja s hustotou $\rho(\mathbf{r})$ vo vonkajšom poli s potenciálom $\varphi(\mathbf{r})$ je

$$U = \int \rho(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

Takisto je dobre známe, že potenciálna energia bodového náboja Q v bode \mathbf{r}_0 je

$$U = Q\varphi(\mathbf{r}_0) \quad (2)$$

Obe formulky zrejme hovoria o tej istej veci a tak sa intuitívne zdá, že (2) je špeciálnym prípadom (1), lebo „bodový náboj“ intuitívne odpovedá náboju skoncentrovanému do veľmi malého objemu. Ak sa ale pokúsime sformulovať vec presnejšie, narazíme na ťažkosti. Stačí ak sa spýtame na to, aké rozloženie hustoty náboja $\rho(\mathbf{r})$ môžeme priradiť bodovému náboju v bode \mathbf{r}_0 . Odpoveď sa dá formulovať dvoma spôsobmi, označíme ich ako 1 a 2 a v druhom prípade uvedieme dva varianty.

1. Predstavíme si bodový náboj Q ako limitu postupnosti priestorových rozložení náboja. Napríklad takúto

$$\rho_n(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{pre } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| > a_n = \frac{a}{n} \\ Q(4\pi a_n^3/3)^{-1} & \text{pre } |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| < a_n \end{cases} \quad (3)$$

príčom a je istá veličina s rozmerom dĺžky. Fyzikálne je jasné, čo robíme. Konštruujeme postupnosť guľ so stredom v bode \mathbf{r}_0 a s polormi $a_n = a/n$, ktoré postupne konvergujú k nule. Pre dané n volíme hustotu náboja vnútri gule tak veľkú, aby vždy platilo

$$\int \rho_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = Q \quad (4)$$

príčom hustota náboja mimo danej gule je nulová. Pre takúto postupnosť platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \rho_n(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = Q\varphi(\mathbf{r}_0) \quad (5)$$

čo by sme ľahko dokázali pomocou vety o strednej hodnote (predpokladáme pritom spojitosť potenciálu $\varphi(\mathbf{r})$).

Bodovému náboju takto prisudzujeme postupnosť funkcií podľa schémy

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{bodový náboj} \\ Q \text{ v bode } \mathbf{r}_0 \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{postupnosť funkcií} \\ \rho_n(\mathbf{r}_0) \end{array} \right\} \quad (6)$$

Táto postupnosť má niektoré podivné vlastnosti. V každom bode $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0$ platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(\mathbf{r}) = 0 \quad \mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0 \quad (7)$$

ale v bode \mathbf{r}_0 rastie $\rho_n(\mathbf{r}_0)$ nad všetky hranice. Prítom ale pre každé n platí rovnica (4). Odtiaľ vidno, že limitu postupnosti $\rho_n(\mathbf{r})$ treba zavádzať veľmi opatrne.

Podivné vlastnosti postupnosti $\rho_n(\mathbf{r})$ nás veľmi neprekvapujú, pretože na otázku: aké rozloženie hustoty odpovedá bodovému náboju, sme inú odpoveď ani očakávať nemohli. Táto otázka ani nemá priamy fyzikálny zmysel, lebo hustotu bodového náboja merať nemôžeme. Fyzikálny zmysel má ale energia bodového náboja v poli vonkajšieho potenciálu $\varphi(\mathbf{r})$ a tej podľa predchádzajúceho priradíme dobre definovaný výraz stojaci na ľavej strane rovnice (5). Takto síce bodovému náboju priradíme vzťahom (6) postupnosť funkcií $\rho_n(\mathbf{r})$, ale priradenie chápeme tak, že zmysel budú mať iba výrazy typu ľavej strany v (5).

¹⁰⁷ Schwartz, L.: Matematické metódy vo fyzike. Praha 1972. Gelfand, I. M. – Šilov, G. E.: Obobščennyje funkcii i dejstvija nad nimi. Moskva 1959.

Vo veľmi voľnom jazyku, ktorý fyzici najčastejšie používajú, hovoríme, že postupnosť $\rho_n(\mathbf{r})$ konverguje k (trojrozmernej) δ -funkcii násobenej nábojom Q

$$\rho_n(\mathbf{r}) \rightarrow Q\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (8)$$

a táto δ -funkcia má nasledujúcu vlastnosť:

$$\int \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\varphi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \varphi(\mathbf{r}_0) \quad (9)$$

pre ľubovoľnú spojité funkciu $\varphi(\mathbf{r})$.

Pritom ale treba zdôrazniť, že táto obrazná terminológia znamená len to, čo už bolo povedané vyššie; teda to, že platí rovnica (5).

2a. V tomto prístupe si od začiatku uvedomíme, že nemá zmysel hovoriť podrobne o hustote bodového náboja, preto mu priradíme od začiatku iba symbol, ktorý bude vyzeráť formálne ako funkcia, ale nebude sa s ním dať robiť všetko to, čo bežne s funkciami robiť môžeme.

Jednotkovému bodovému náboju takto prisudzujeme symbol $\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, ktorý má zmysel jedine vo výrazoch typu ľavej strany v (9) a tieto výrazy definujeme rovnicou (9).

2b. Tento postup je zovšeobecnením predchádzajúceho. Namiesto toho, aby sme zavádzali symboly pripomínajúce „výzorom“ funkciu, zavádzame rovno pojem funkcionálu. Pod funkcionálom rozumieme zobrazenie, ktoré každej funkcii z istej množiny priradí určité číslo. Bodový náboj Q umiestnený v bode \mathbf{r}_0 by sme takto opísali funkcionálom, ktorý každému potenciálu $\varphi(\mathbf{r})$ priradí číslo $Q\varphi(\mathbf{r}_0)$.

Tento postup je určite najvšeobecnejší a pomocou neho možno δ -funkcie zaviesť konzistentným, elegantným a všeobecným spôsobom.

Ukazuje sa však, že oba spôsoby definície δ -funkcie sú v istom zmysle ekvivalentné.

V ďalšom uvedieme niekoľko príkladov na postupnosti funkcií konvergujúcich k δ -funkcii, ďalej uvedieme niekoľko dôležitých aplikácií, potom urobíme prehľad niektorých vlastností δ -funkcie a napokon veľmi stručne spomenieme niektoré z myšlienok Schwartzovej teórie distribúcií.

Budeme hovoriť, že postupnosť funkcií $\{f_n(x)\}$ konverguje k Diracovej δ -funkcii ak platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x)\varphi(x) dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\varphi(x) dx = \varphi(0) \quad (10)$$

pre ľubovoľnú spojité funkciu $\varphi(x)$, ktorá klesá rýchlo¹⁰⁸ k nule pre $|x| \rightarrow \infty$.

V rovniciach (10) treba stredný člen považovať iba za skrátenej a zjednodušený zápis prvého člena. Dá sa ukázať (a intuitívne sa nám to vidí byť prijateľným, takže sa nebudeme pokúšať o dôkaz), že požiadavka (10) je ekvivalentná podmienkam

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_n(x) dx = 1 \quad (11a)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b f_n(x) dx = 0 \quad \text{ak} \quad 0 \notin (a, b) \quad (11b)$$

Uvedieme teraz niekoľko príkladov

Príklad 1. Nech

$$f_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{pre } |x| > 1/(2n) \\ n & \text{pre } |x| \leq 1/(2n) \end{cases}$$

Podmienky (11a) a (11b) sú evidentne splnené.

Príklad 2. Nech

$$h_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (12)$$

a uvažujeme limitu $\varepsilon \rightarrow 0$. O splnení (11a) sa ľahko presvedčíme a (11b) je splnené tiež, lebo $h_\varepsilon(x)$ konverguje pre $\varepsilon \rightarrow 0$ rovnomerne k nule v každom intervale $\langle a, b \rangle$ neobsahujúcom začiatok.

¹⁰⁸ Presnejšie pre každú funkciu $\varphi(x)$ z množiny \mathcal{D} definovanej ďalej.

Príklad 3. Postupnosť

$$g_a(x) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \exp(-a^2 x^2) \quad (13)$$

konverguje pre $a \rightarrow \infty$ k $\delta(x)$. Pri dôkaze (11a) stačí využiť Laplaceov integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$$

Príklad 4. Definujme funkciu $f_n(x)$ vzt'ahom

$$f_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ikx} dx = \frac{1}{\pi x} \sin(nx) \quad (14)$$

Pre $n \rightarrow \infty$ táto postupnosť konverguje k $\delta(x)$. Podmienka (11a) je ekvivalentná tvrdeniu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin t}{\pi t} dt = 1$$

a tento výsledok je dobre známy, dokazuje sa pomocou teórie funkcií komplexnej premennej.¹⁰⁹

Podmienka (11 b) má v tomto prípade tvar

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \frac{1}{\pi x} \sin(nx) dx = 0 \quad \text{pre } 0 \notin \langle a, b \rangle \quad (15)$$

Toto tvrdenie je špeciálnym prípadom Riemannovej-Lebesgueovej vety z teórie funkcií reálnej premennej. Intuitívne ho možno vysvetliť tým, že s rastúcim n funkcia $\sin(nx)$ osciluje čoraz rýchlejšie a kladné a záporné hodnoty podintegrálnej funkcie sa pri $n \rightarrow \infty$ navzájom zrušia.

Teraz si podrobnejšie všimneme dve situácie, v ktorých sa často používajú delta funkcie.

Úplné systémy funkcií a δ -funkcia

Nech $\{\varphi_n(x)\}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ je úplný ortonormovaný systém funkcií na intervale (a, b) . Platí teda

$$\int_a^b \varphi_n^*(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{nk}$$

a každú¹¹⁰ funkciu $f(x)$ možno zapísať v tvare

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N c_n \varphi_n(x) \quad (16)$$

kde koeficienty c_n sú dané vzt'ahom

$$c_n = \int_a^b \varphi_n^*(y) f(y) dy \quad (17)$$

Ak dosadíme (17) do (16) dostaneme

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b K_N(x, y) f(y) dy \quad (18)$$

kde

$$K_N(x, y) = \sum_{n=1}^N \varphi_n^*(x) \varphi_n(y) \quad (19)$$

¹⁰⁹ Pozri napr. Fuchs, B. A. – Sabat, B. V.: Funkcii kompleksnogo peremennogo. Moskva, 1959.

¹¹⁰ Túto „špecifikáciu“ by bolo treba pri podrobnejšej analýze spresniť, ale nebudeme sa tým zaoberať.

Rovnice (18) a (19) ukazujú, že platí

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \varphi_n^*(y) \varphi_n(x) = \delta(x-y) \quad (20)$$

pričom symbol $\delta(x-y)$ je definovaný vzťahom

$$f(x) = \int_a^b \delta(x-y) f(y) dy \quad (21)$$

Porovnanie (18) a (21) je dôvodom pre vzťah (20).

Fourierove integrály

V článku 2.9 sme už videli, že súbor funkcií

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_n x) \\ k_n &= \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (22)$$

tvorí úplný systém funkcií na úsečke $(-L/2, L/2)$. Interval medzi dvoma susednými povolenými hodnotami v k -priestore je $(2\pi/L)$.

Ak zväčšujeme dĺžku úsečky, interval medzi susednými hodnotami k klesá a prichádzame k domnienke (správnej), že úplný systém funkcií na nekonečnom intervale $(-\infty, \infty)$ je tvorený všetkými funkciami typu $\exp(ikx)$, pričom k môže byť ľubovoľné reálne číslo.

Zovšeobecnením rozkladu

$$f(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

platnom na intervale $(-L/2, L/2)$ je potom Fourierov integrál

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \quad (23)$$

kde výraz 2π je iba otázkou konvencie.

Našou úlohou je teraz nájsť koeficienty $c(k)$ v rozklade (23). Za tým účelom násobíme obe strany rovnice funkciou $\exp(-iqx)$ a integrujeme od $-K$ po $+K$.

Dostaneme tak

$$\begin{aligned} \int_{-K}^K f(x) e^{-iqx} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \int_{-K}^K e^{i(k-q)x} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \left\{ \frac{1}{\pi} \frac{\sin(k-q)K}{(k-q)} \right\} \end{aligned} \quad (24)$$

Podľa diskusie okolo rovnice (14) však výraz v zloženej zátvorke konverguje pre $K \rightarrow \infty$ k δ -funkcii $\delta(k-q)$ a pravá strana v (24) potom bude

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk c(k) \delta(k-q) = c(q)$$

a toto je konečný výsledok. Koeficienty $c(k)$ vystupujúce v (24) sú teda dané vzťahom

$$c(q) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iqx} f(x) dx \quad (25)$$

Predchádzajúci argument vlastne ukazuje, že systém funkcií

$$\psi_q(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iqx}, \quad q \text{ reálne}$$

je úplný na intervale $(-\infty, \infty)$ a ortonormovaný v zmysle

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_q^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(q - k) \quad (26)$$

Niektoré vlastnosti δ -funkcií

Ak chápeme $\delta(x)$ ako limitu postupnosti

$$\delta(x) \leftrightarrow \{f_n(x)\} \quad (27)$$

v zmysle

$$\int \delta(x) \varphi(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int f_N(x) \varphi(x) dx \quad (28)$$

potom môžeme zaviesť prirodzene aj ďalšie symboly obsahujúce δ -funkciu, napríklad symbolu $\delta'(x)$ priradíme postupnosť

$$\delta'(x) \equiv \frac{d\delta(x)}{dx} \leftrightarrow \{f'_n(x)\}$$

a definujeme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \varphi(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} f'_N(x) \varphi(x) dx \quad (29)$$

Integrál na pravej strane upravíme integráciou po častiach; využijeme to, že $f_N(x)$ i $\varphi(x)$ idú rýchlo k nule pre $|x| \rightarrow \infty$ a dostaneme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'_N(x) \varphi(x) dx = [f_N(x) \varphi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f_N(x) \varphi'(x) dx$$

a po dosadení na pravú stranu (29) máme

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) \varphi(x) dx = -\varphi'(0)$$

Podobným postupom sa môžeme presvedčiť o tom, že δ -funkcia má nasledujúce vlastnosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (30a)$$

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (30b)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \quad a \neq 0 \quad (30c)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} \{\delta(x - a) + \delta(x + a)\} \quad (30d)$$

Nech $h(x)$ je rastúcou funkciou x a nech $h(x_0) = 0$, potom

$$\delta(h(x)) = \frac{1}{h'(x_0)} \delta(x - x_0) \quad (30e)$$

ďalej platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) \delta(x - b) dx = \delta(a - b) \quad (30f)$$

Napokon si všimneme podrobnejšie Schwartzovo zavedenie distribúcií, kvôli jednoduchosti len v jednorozmernom prípade.¹¹¹

¹¹¹ Zvyšok článku možno pri prvom čítaní vynechať.

Nech \mathfrak{F} je množina funkcií. Ak ku každej funkcii $f \in \mathfrak{F}$ priradíme číslo, označené ako $T[f]$ hovoríme, že na množine \mathfrak{F} je definovaný funkcionál T .

Ak z $f_1 \in \mathfrak{F}$, $f_2 \in \mathfrak{F}$ vyplýva $c_1 f_1 + c_2 f_2 \in \mathfrak{F}$ pre všetky čísla c_1, c_2 hovoríme, že \mathfrak{F} je lineárny priestor. Funkcionál T definovaný na lineárnom priestore sa nazýva lineárny, ak platí $T[c_1 f_1 + c_2 f_2] = c_1 T[f_1] + c_2 T[f_2]$ pre všetky $f_1, f_2 \in \mathfrak{F}$ a všetky čísla c_1, c_2 .

Nech $f(x)$ je definovaná na intervale $(-\infty, +\infty)$. Množinu všetkých bodov, kde $f(x) \neq 0$ (presnejšie uzáver tejto množiny) nazývame nositeľom funkcie f .

Ak funkcia $f(x)$, definovaná na celej reálnej osi je nekonečne mnohokrát diferencovateľná a má konečný nositeľ, hovoríme, že $f(x)$ patrí do množiny \mathfrak{D} .

Napríklad funkcia

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0, & \text{pre } |x| \geq a > 0 \\ \exp\left(-\frac{1}{a^2 - x^2}\right), & \text{pre } |x| < a \end{cases}$$

patrí do množiny \mathfrak{D} . Definícia množiny \mathfrak{D} aj príklad pochádzajú od L. Schwartza. Množina \mathfrak{D} nie je taká chudobná, ako by sa mohlo zdať. Napríklad ku každej spojitej funkcii $f(x)$ s ohraničeným nositeľom a pre ľubovoľné $\varepsilon > 0$ možno nájsť funkciu $g_\varepsilon \in \mathfrak{D}$ takú, že $|f(x) - g_\varepsilon(x)| < \varepsilon$ pre všetky x .

Konvergencia na množine \mathfrak{D} je zavedená nasledovne. Hovoríme, že postupnosť funkcií $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$, z ktorých každá patrí do \mathfrak{D} , konverguje k funkcii $\varphi \in \mathfrak{D}$, ($\varphi_n \rightarrow \varphi$), ak nositele všetkých funkcií φ_j ležia v istom intervale $\langle -k, k \rangle$, a ak $\varphi_n^{(l)}$ konverguje na tomto intervale pre $n \rightarrow \infty$ rovnomerne k $\varphi^{(l)}$ pre ľubovoľné pevné l . Symbol $\varphi^{(l)}$ označuje l -tú deriváciu φ , pričom $\varphi^{(0)} \equiv \varphi$.

Definícia: Funkcionál $T[\varphi]$ je spojitý na množine \mathfrak{D} , ak z $\varphi_n \rightarrow \varphi$ vyplýva $T[\varphi_n] \rightarrow T[\varphi]$.

Schwartzova definícia distribúcie je nasledovná:

Distribúciou nazývame každý lineárny spojitý funkcionál na množine \mathfrak{D} .

Ako príklad uvedieme Diracovu δ -funkciu, ktorá sa teraz objaví ako funkcionál, ktorý každej funkcii $\varphi \in \mathfrak{D}$ priradí jej hodnotu v bode $x = 0$

$$T_\delta[\varphi] = \varphi(0)$$

Lahko sa môžeme presvedčiť o tom, že tento funkcionál je lineárny a spojitý, čiže je distribúciou.

Ďalší príklad možno konštruovať takto. Nech $f(x)$ je funkcia definovaná na intervale $(-\infty, +\infty)$ a nech $f(x)$ je integrovateľná na každom konečnom intervale. Možno dokázať, že

$$T_f(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi(x) dx \quad (31)$$

je lineárnym spojitým funkcionálom, čiže tiež je distribúciou.

Distribúcie, ktoré možno zapísať v tvare (31) sa nazývajú regulárnymi, všetky ostatné singulárnymi. Výraz (31) má bežný tvar skalárneho súčinu,¹¹² namiesto označenia $T_f[\varphi]$ sa preto často používa

$$T_f[\varphi] = (f|\varphi)$$

V priestore distribúcií sa konvergencia definuje nasledovne. Ak pre každú funkciu $\varphi \in \mathfrak{D}$ platí $T_n[\varphi] \rightarrow T[\varphi]$, tak hovoríme, že postupnosť distribúcií T_n konverguje k distribúcii T .

Ukazuje sa, že každú distribúciu možno vyjadriť ako limitu postupnosti regulárnych distribúcií.¹¹³ Ku každej distribúcii T možno nájsť postupnosť funkcií f_n tak, že pre každé φ platí

$$T[\varphi] = \lim_{n \rightarrow \infty} (f_n|\varphi) \quad (32)$$

Toto tvrdenie je vlastne návodom na to, ako sa priradenie δ -funkcie istej postupnosti dá urobiť matematicky korektným spôsobom.

¹¹² V tomto článku uvažujeme len reálne funkcie.

¹¹³ Pozri napr. 2. diel monografie Geřfanda a Šilova, už citovanej v tomto článku.

7.4 INTEGROVANIE V KOMPLEXNEJ ROVINE

V aplikáciách sa často používa niekoľko trikov s integrovaním v komplexnej rovine. V tomto článku si ich veľmi stručne pripomenieme.

Komplexnú funkciu $f(z) = u(z) + iv(z)$, kde u, v sú reálne funkcie komplexnej premennej $z = x + iy$ nazývame holomorfnou v oblasti \mathbb{C} , ak v každom bode tejto oblasti existuje derivácia $f'(z)$ definovaná ako limita $\Delta f/\Delta z$ pre $\Delta z \rightarrow 0$. Derivácia $f'(z)$ nezávisí od smeru Δz a odtiaľ (ak raz vyberieme $\Delta z = \Delta x$ a raz $\Delta z = i\Delta y$) dostávame

$$\frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x} = \frac{\Delta u + i\Delta v}{i\Delta y}$$

a po limite máme Cauchyho-Riemannove podmienky

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad (1b)$$

Základná vlastnosť holomorfnjej funkcie je obsiahnutá v Cauchyho vete, ktorá tvrdí, že integrál z holomorfnjej funkcie $f(z)$ po uzavretej krivke C , ktorá aj so svojim vnútrajškom leží v oblasti holomorfnosti funkcie f , je rovný nule.

$$\oint_C f(z) dz = 0 \quad (2)$$

Toto tvrdenie je ekvivalentné podmienkam (1). Skutočne, ak prepíšeme (2) po dosadení $f = u + iv$, $dz = dx + idy$ dostaneme pre reálnu a imaginárnu časť (2)

$$\oint_C \{u(x, y)dx - v(x, y)dy\} = 0 \quad (3a)$$

$$\oint_C \{v(x, y)dx + u(x, y)dy\} = 0 \quad (3b)$$

Prepíšme prvú rovnicu v označení bežnom pre fyzikov tak, že položíme $A_x(x, y) = u(x, y)$, $A_y(x, y) = -v(x, y)$. Máme potom

$$\oint_C (A_x dx + A_y dy) = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \oint_C (\nabla \times \mathbf{A})_z \cdot d\mathbf{S} \quad (4)$$

pričom sme využili Stokesovu vetu pre funkcie reálnej premennej. Pre $(\nabla \times \mathbf{A})_z$ máme hneď

$$(\nabla \times \mathbf{A})_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$$

a to sa rovná nule podľa podmienky (1b).

Cauchyho veta (2) vedie priamo k často používanej vete o počítaní integrálov pomocou rezíduí. Uvažujme najprv holomorfnú funkciu $f(z)$ a integrál

$$\oint_C \frac{f(z)}{z} dz$$

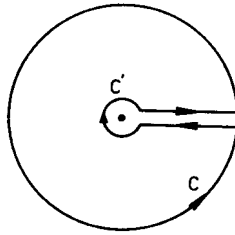
kde c je kružnica s maličkým polomerom a so stredom v začiatku. Na tejto kružnici $z = re^{i\varphi}$. Integrál rýchlo vyčíslime a dostaneme

$$\oint_C \frac{f(z)}{z} dz = 2\pi i f(0)$$

Jednoduchým zovšeobecnením tohto výsledku dostaneme: Ak $f(z)$ je holomorfná v oblasti D , C je jednoduchá uzavretá krivka v tejto oblasti a bod a leží vnútri nej, potom

$$\oint_C \frac{f(z)}{z-a} dz = 2\pi i f(a) \quad (5)$$

Namiesto pokusu o dôkaz uveďme len to, že integrál po celej krivke na obr. 7.2 je nulový, lebo vnútri nej je funkcia $f(z)/(z - a)$ holomorfná. Preto pôvodný integrál cez krivku C sa rovná integrálu cez krivku C' , a vtedy môžeme použiť predchádzajúci argument.



Obr. 7.2

Ak funkcia $g(z)$ je holomorfná v danej oblasti až na niekoľko bodov a_1, a_2, \dots, a_N v okolí ktorých platí

$$g(z) \approx \frac{R_i}{z - a_i} \quad \text{v okolí } a_i$$

potom zovšeobecnením predchádzajúceho argumentu dostaneme

$$\oint_C g(z) dz = 2\pi i \sum R_i$$

a to je tvrdenie, ktoré sa najčastejšie používa v aplikáciách.

7.5 GREENOVA FUNKCIA OPERÁTORA $\nabla^2 + q^2$

Pri riešení mnohých problémov súvisiacich s diferenciálnymi rovnicami je často výhodné použiť formalizmus Greenových funkcií. Tento formalizmus nám umožní veľmi jednoducho vyjadriť poruchový rozvoj riešenia problému rozptylu.

Mnohé fyzikálne problémy vedú ku Greenovým funkciám veľmi prirodzene. Matematický opis príslušnej fyzikálnej situácie má často schematický tvar

$$D\Phi = J$$

kde D je diferenciálny operátor, veličina F charakterizuje odozvu uvažovaného systému na vonkajší podnet, vyjadrený pravou stranou J . Greenovu funkciu dostaneme potom v špeciálnom prípade ako odozvu sústavy na „bodový“ vonkajší podnet J . Nebudeme sa tu snažiť rozvíjať teóriu v takomto všeobecnom tvare, namiesto toho si uvedieme jednoduchý konkrétny príklad.

Pripomeňme si však najprv niektoré poznatky z elektrostatiky. Potenciál $\varphi(\mathbf{r})$ budený bodovým nábojom Q umiestneným v bode \mathbf{r}' je daný vzťahom

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1)$$

Potenciál spojitého rozloženia náboja s hustotou $\rho(\mathbf{r}')$ je potom

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2)$$

a tento potenciál spĺňa Laplaceovu rovnicu

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) \quad (3)$$

ktorú dostaneme hneď zo vzťahov $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$, $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$.

Ak bodovému náboju Q v bode \mathbf{r}' priradíme hustotu opísanú výrazom $Q\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, potom pre bodový náboj máme z (3) rovnicu

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{Q}{\varepsilon_0}\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4)$$

a porovnaním s (1) vidíme, že musí platiť¹¹⁴

$$\Delta\left\{-\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right\} = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

kde Δ pôsobí iba na premennú \mathbf{r} . Rovnicu (5) by sme teraz mali poctivo dokázať, ale nebudeme to robiť, lebo ju dostaneme ako špeciálny prípad niečoho, čo dokážeme neskôr – zatiaľ budeme predpokladať, že (5) skutočne platí. Ak označíme

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (6)$$

prepíšeme (5) do tvaru

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (7)$$

a máme matematické vyjadrenie tvrdenia: Greenova funkcia $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ je reakciou na bodový podnet. Riešenie (2) rovnice (3) potom píšeme ako

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\left(-\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\mathbf{r}')\right)d^3\mathbf{r}' \quad (8)$$

teda ako súčet reakcií na jednotlivé bodové podnety.

V ďalšom sa budeme zaujímať o riešenie rovnice

$$(\nabla^2 + q^2)\psi(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}) \quad (9)$$

ktorá sa od Laplaceovej líši iba prítomnosťou q^2 na ľavej strane. Pri riešení budeme postupovať tak, ako v predchádzajúcom prípade – najprv nájdeme $\psi(\mathbf{r})$ budené bodovým podnetom, potom ukážeme, že pri nebudovanom $\chi(\mathbf{r})$ môžeme dostať riešenie $\psi(\mathbf{r})$ ako súčet riešení pri bodových podnetoch a napokon dopočítame niektoré veci, ktoré si cestou odložíme na neskôr.

Označme teda symbolom $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ riešenie rovnice s bodovým zdrojom

$$(\nabla^2 + q^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (10)$$

Poznamenajme hneď, že riešenie $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ nie je takto špecifikované (bez určenia okrajových podmienok) jednoznačne. Riešením rovnice (10) je i funkcia

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r})$$

kde $\psi_0(\mathbf{r})$ je ľubovoľné riešenie homogénnej rovnice

$$(\nabla^2 + q^2)\psi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (11)$$

V ďalšom budeme mať na mysli jedno ľubovoľné (ale fixované) riešenie rovnice (10). Jeho explicitný tvar uvedieme neskôr.

Ukážeme si teraz, že ľubovoľné riešenie rovnice (9) môžeme zapísať v tvare

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \quad (12)$$

kde $\psi_0(\mathbf{r})$ má opäť predchádzajúci význam.

¹¹⁴ Je zrejmé, že všetky vzťahy tohto typu treba chápať v zmysle distribúcií, t. j. zjednodušene povedané význam majú iba tvrdenia typu

$$\int \Delta\left(\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\right)f(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'$$

kde $f(\mathbf{r}')$ je ľubovoľná „dostatočne slušná“ funkcia.

Skutočne, ak pôsobíme operátorom $(\nabla^2 + q^2)$ na pravú stranu v (12), dostaneme pri pôsobení na $\psi_0(\mathbf{r})$ nulu a pôsobením na druhý člen dostaneme

$$\int \{(\nabla^2 + q^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\} \chi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \chi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \chi(\mathbf{r})$$

Vidíme, že funkcia $\psi(\mathbf{r})$ v tvare (12) je naozaj riešením rovnice (9). Pre lineárne rovnice platí vo všeobecnosti, že dve rôzne riešenia nehomogénnej rovnice sa môžu líšiť najvyššie o riešenie príslušnej homogénnej rovnice, preto vo vzťahu (12) sú už zahrnuté všetky riešenia rovnice (9) – navzájom sa líšiacie voľbou $\psi_0(\mathbf{r})$. To, aké ψ_0 treba zvoliť, je v konkrétnom prípade špecifikované napríklad okrajovými podmienkami.¹¹⁵ Ostáva nám už len nájsť explicitný tvar riešenia rovnice (10). Urobíme to dvoma spôsobmi. Prvý je jednoduchý a predpokladá platnosť rovnice (5) známej z elektrostatiky. Druhý je zložitejší, ale úplnejší.

Ideme teda najprv dokázať, že

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (13)$$

je riešením rovnice (10). Pre jednoduchosť položíme $\mathbf{r}' = 0$ a budeme dokazovať

$$(\nabla^2 + q^2) \left\{ -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} \right\} = \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Po rozpísaní

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} e^{iqr} \right) = e^{iqr} \nabla^2 \frac{1}{r} + 2(\nabla e^{iqr}) \cdot \left(\nabla \frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} \nabla^2 e^{iqr} \quad (15)$$

a pre jednotlivé členy máme

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{1}{r} &= -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r}), & \nabla e^{iqr} &= iq \frac{\mathbf{r}}{r} e^{iqr} \\ \nabla \frac{1}{r} &= -\frac{\mathbf{r}}{r^3}, & \nabla^2 e^{iqr} &= \left(\frac{2iq}{r} - q^2 \right) e^{iqr} \end{aligned} \quad (16)$$

pričom ostatný z nich dostaneme tak, že $\nabla^2 = \Delta$ zapíšeme vo sférických súradniciach a využijeme to, že funkcia, ktorú derivujeme, nezávisí od ϑ , φ . Po dosadení (16) do (15) a využití $\exp(iqr)\delta^{(3)}(\mathbf{r}) = \delta^{(3)}(\mathbf{r})$ sa presvedčíme o správnosti (14). Poznamenajme ešte, že na rovnici (10) sa nič nezmení, ak urobíme zámenu $q \rightarrow -q$.

Odtiaľ vidno, že spolu s (13) bude riešením rovnice (10) aj funkcia

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (17)$$

O fyzikálnych rozdieloch medzi riešeniami (13) a (17) budeme hovoriť v nasledujúcom článku.¹¹⁶

Napokon nájdeme ešte Greenove funkcie G_+ , G_- priamo ako riešenie diferenciálnej rovnice (10). Budeme pritom používať techniku Fourierových integrálov spomínanú v článku 2 a integrovanie v komplexnej rovine diskutované v článku 3. Použitím (3.14) zapíšeme δ -funkciu na pravej strane (10) ako

$$\begin{aligned} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned} \quad (18)$$

¹¹⁵ V predchádzajúcom príklade z elektrostatiky je riešenie špecifikované požiadavkou, aby potenciál v neprítomnosti nábojov bol nulový, alebo okrajovou podmienkou $\varphi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ pre $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

¹¹⁶ Funkcie G_+ a G_- predstavujú dva možné (z hľadiska praktických aplikácií užitočné) spôsoby špecifikácie Greenovej funkcie. Ďalšie možné tvary možno dostať pridaním ľubovoľného riešenia homogénnej rovnice.

a funkciu $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ zapíšeme ako

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 \mathbf{k} \quad (19)$$

Ak dosadíme (19) a (18) do (10) a využijeme $\nabla^2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = -k^2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ dostaneme porovnaním oboch strán

$$g(\mathbf{k}) \cdot (k^2 - q^2) = -1$$

$$g(\mathbf{k}) = -\frac{1}{k^2 + q^2}, \quad \text{pre } k^2 \neq q^2$$

a po dosadení do (19) máme (formálne)

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{k^2 - q^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3 \mathbf{k} \quad (20)$$

Pri integrovaní by sme narazili na ťažkosti pri $k^2 = q^2$. Toto ani nie je prekvapujúce, lebo k riešeniu rovnice (10) možno pridať riešenie príslušnej homogénnej rovnice a v parametrizácii (19) to odpovedá práve členom, v ktorých $k^2 = q^2$, takže funkcia $g(\mathbf{k})$ nebude určená pre tie \mathbf{k} , pre ktoré platí $k^2 = q^2$. Určenie dôsledkov tejto nejednoznačnosti si necháme až nakoniec, zatiaľ ťažkosť, na ktorú sme narazili obídeme trikom.

Budeme zatiaľ číslo q považovať za komplexné s malou imaginárnou časťou, potom pri integrácii v (20) už nenarazíme na pól, ktorý teraz leží mimo reálnej osi.

Označme v (20) $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, vyberme os z v \mathbf{k} -priestore v smere $\boldsymbol{\rho}$ a prejdime v \mathbf{k} -priestore k sférickým súradniciam. Integrál cez uhol φ je triviálny, lebo integrand od neho nezávisí, integrál cez ϑ vypočítame s použitím

$$\int_0^\pi e^{ik\rho \cos\vartheta} \sin\vartheta d\vartheta = \frac{1}{ik\rho} [e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}]$$

a máme

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\rho i} \int_0^\infty k dk \frac{1}{k} [e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}] \frac{1}{k^2 - q^2}$$

Integrál rozdelíme na dva a v druhom z nich zameníme premenné $k \rightarrow -k$. Dostaneme tak

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{i\rho(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty k \frac{e^{ik\rho}}{k^2 - q^2} dk$$

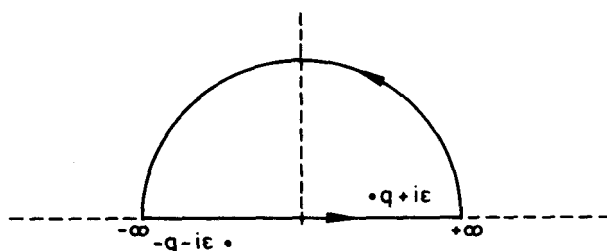
Zatiaľ je q stále komplexné. Zavedieme teraz dve Greenove funkcie tak, že v prvom prípade položíme $q = q + i\varepsilon$, kde q na pravej strane už chápeme ako reálne číslo a $\varepsilon > 0$; v druhom prípade položíme $q = q - i\varepsilon$ a napokon urobíme limitu $\varepsilon \rightarrow 0$. Prvú z týchto funkcií označíme $G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, druhú $G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

Dostaneme

$$G(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{4\pi^2 i\rho} \int_{-\infty}^\infty k \frac{e^{ik\rho}}{(q + i\varepsilon - k)(q + i\varepsilon + k)} dk \quad (21)$$

Integrál na pravej strane vypočítanie pomocou vety o rezíduách z teórie funkcií komplexnej premennej. Pravda, v integrále (21) nemáme integráciu po uzavretej krivke, iba po reálnej osi. Možno si však predstaviť, že ide o reálnu os v komplexnej rovine premennej k . Stačí si potom uvedomiť, že v hornej polovine je $\text{Im } k > 0$ a teda $\exp(i(\text{Im } k) \cdot \rho) = \exp(-\rho \cdot \text{Im } k)$ a to pre $\rho > 0$ je rýchlo klesajúca funkcia $\text{Im } k$. Ak teda doplníme integračnú dráhu o polkružnicu s veľkým polomerom (v limite s nekonečným polomerom) v hornej polovine komplexnej premennej k (obr. 7.3), dostaneme uzavretú krivku. Integrál po polkružnici je však v limite nulový, preto integrál po celej krivke je rovný integrálu po reálnej osi, ktorý chceme spočítať. Vnútri integračnej krivky leží jeden pól integrandu, a to v bode $k = q + i\varepsilon$. Pomocou vety o rezíduu ľahko dostaneme (už po limite $\varepsilon \rightarrow 0$, ktorú urobíme až nakoniec):

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iq\rho}}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (22)$$



Obr. 7.3

Tým istým spôsobom vypočítame Greenovu funkciu $G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ a prichádzame k výsledku

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-iq\rho}}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (23)$$

Fyzikálny rozdiel medzi G_+ a G_- vidno priamo zo vzťahov (22) a (23). Funkcia G_+ má tvar rozbiehavých guľových vln šíriacich sa z miesta „bodového podnetu“ a funkcia G_- zodpovedá zbiehavým vlnám šíriacim sa smerom do centra.

Vráťme sa teraz k nejednoznačnosti, na ktorú sme narazili pri riešení rovnice

$$g(\mathbf{k}) \cdot (k^2 - q^2) = -1 \quad (24)$$

Pre $k^2 = q^2$ sa nedá nájsť funkcia (v obvyklom zmysle) $g(\mathbf{k})$ tak, aby vzťah (24) bol splnený. V skutočnosti však stačí žiadať, aby vzťah (24) bol splnený iba v zmysle distribúcií. Potom však distribúcia $g(\mathbf{k})$ nie je vzťahom (24) definovaná jednoznačne. Ak si uvedomíme, že

$$(k^2 - q^2) \cdot \delta(k^2 - q^2) = 0$$

zistíme, že ak určitá distribúcia $g(\mathbf{k})$ spĺňa vzťah (24), potom ho spĺňa i distribúcia

$$g(\mathbf{k}) + f(\mathbf{k}) \cdot \delta(k^2 - q^2) \quad (25)$$

kde $f(\mathbf{k})$ je ľubovoľná „slušná“ funkcia. Ľahko sa dá presvedčiť o tom, že táto nejednoznačnosť je presne tá, ktorú sme čakali: ku Greenovej funkcii možno vždy pridať riešenie homogénnej rovnice. Po troche námahy s integrálmi v komplexnej premennej je možné presvedčiť sa o tom, že dva rôzne spôsoby špecifikácie distribúcie $g(\mathbf{k})$ vedúce k funkciám G_+ a G_- sa presne odlišujú spôsobom ukázaným vo vzťahu (25).

Zhrňme teda na záver: Nejednoznačnosti v určení Greenovej funkcie vzťahom (10) vedú k nutnosti špecifikovať ju iným vhodným spôsobom. Nie je to však na závalu, pretože vo vzťahu (12), ktorý ukazuje praktické použitie Greenovej funkcie, aj tak vystupuje nejednoznačnosť rovnakého typu daná členom $\psi_0(\mathbf{r})$, ktorý treba nájsť z podmienok (napr. okrajových) kladených na riešenie $\psi(\mathbf{r})$. V praxi je potom výhodné špecifikovať Greenovu funkciu podľa okrajových podmienok úlohy tak, aby nájdenie $\psi_0(\mathbf{r})$ bolo jednoduché, prípadne aby stačilo $\psi_0(\mathbf{r}) = 0$.

7.6 BORNOVO PRIBLIŽENIE PRE ROZPTYL ČASTICE NA POTENCIÁLI

Po troch prevažne technických článkoch sa zas vrátíme naspäť k fyzike. Budeme sa zaujímať o približný výpočet amplitúdy rozptylu a diferenciálneho účinného prierezu pre rozptyl častice na statickom potenciáli $V(\mathbf{r})$.

Podľa článku 7.2 amplitúdu rozptylu častice s energiou $E = \hbar^2 q^2 / 2m$ na potenciáli $V(\mathbf{r})$ dostaneme z toho riešenia rovnice

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + q^2)\psi(\mathbf{r}) &= U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \\ U(\mathbf{r}) &= \frac{2m}{\hbar} V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1)$$

ktoré má asymptotický tvar

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{iqz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{iqr}}{r} \quad (2)$$

Takéto riešenie v približnom tvare ľahko dostaneme pomocou Greenovej funkcie

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3)$$

ktorá spĺňa rovnicu

$$(\nabla^2 + q^2)G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4)$$

Najprv ukážeme, že diferenciálna rovnica (1) spolu s okrajovou podmienkou (2) sú ekvivalentné jedinej integrálnej rovnici

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iqz} + \int G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (5)$$

Skutočne, ak na obe strany pôsobíme operátorom $(\nabla^2 + q^2)$ na ľavej strane dostaneme ľavú stranu rovnice (1), z pravého člena na pravej strane (5) máme nulu, lebo $(\nabla^2 + q^2) \exp(iqz) = 0$ a z posledného člena v (5) máme

$$(\nabla^2 + q^2)G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = \int \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$$

a s využitím základnej vlastnosti δ -funkcie máme pravú stranu v (1). Asymptotická podmienka je tiež splnená. Pre $r \gg r'$ totiž možno písať

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}' \quad \text{kde} \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad r \equiv |\mathbf{r}|$$

a pre funkciu G_+ dostaneme asymptotický tvar pre

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} e^{iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} \quad \text{pre} \quad r \rightarrow \infty$$

Po dosadení do (5) dostaneme asymptotický tvar pre $\psi(\mathbf{r})$.

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{iqz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r} \int e^{-iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (6)$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vektor v smere (ϑ, φ) . Porovnaním so vzťahom (2) vidíme nielen to, že (6) má správnu asymptotiku, ale i to, že amplitúda rozptylu je daná vzťahom

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (7)$$

kde sme od $U(\mathbf{r})$ prešli naspäť k $V(\mathbf{r})$ a označili sme $\mathbf{q}' = q\mathbf{n}$, kde \mathbf{n} je jednotkový vektor v smere, v ktorom sa pohybuje rozptýlená častica.

Aby formulka (7) bola skutočne užitočná pre praktické výpočty, musíme ešte nájsť poruchovú (alebo inú) metódu riešenia rovnice (5). Poruchové riešenie nájdeme okamžite, ak zavedieme parameter λ a namiesto U píšeme v (5) λU . Zároveň s tým urobíme rozvoj

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots \quad (8)$$

Po dosadení do (5) a porovnaní koeficientov pri jednotlivých mocninách λ máme hneď

$$\begin{aligned} \psi_0 &= e^{iqz} \\ \psi_1 &= \int G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \\ &\vdots \\ \psi_{n+1} &= \int G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (8')$$

Najnižšie priblíženie pre amplitúdu rozptylu dostaneme, ak do (7) dosadíme na pravú stranu za $\psi(\mathbf{r})$ len

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

kde \mathbf{q} je vektor so smerom v osi z a $|\mathbf{q}| = q$. Tak dostaneme

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} d^3r \quad (9)$$

čo je prvá Bornova aproximácia pre amplitúdu rozptylu na potenciáli. Poznamenajme, že ďalšie priblíženia k vlnovej funkcii $\psi(\mathbf{r})$ dostaneme, ak dosadíme (8') do (8) a položíme $\lambda = 1$.

Takto máme

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \iint G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G_+(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi_0(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \dots \quad (10)$$

čo niekedy zapisujeme symbolicky ako

$$\psi = \psi_0 + G_+ U \psi_0 + G_+ U G_+ U \psi_0 + G_+ U G_+ U G_+ U \psi_0 + \dots = \sum_0^{\infty} (G_+ U)^n \psi_0 \quad (11)$$

Výrazy (10) a (11) treba chápať len ako symbolické zápisy radu (10).

Vo formálnej teórii rozptylu sa s jednotlivými operátormi pracuje starostlivejšie a potom chápeme U , G_+ ako operátory a rad v (11) môžeme formálne sčítať. Tu sa s tým ale nebudeme podrobnejšie zaoberať.

7.7 RUTHERFORDOVA FORMULA

V tomto článku spočítame amplitúdu rozptylu v najnižšom priblížení pre rozptyl nabitých častíc na potenciáli budenou druhou nabitou časticou nachádzajúcou sa v začiatku súradnicovej sústavy. Potenciálna energia interakcie oboch častíc je vtedy

$$V(r) = \frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \equiv \frac{e_1' e_2'}{r} \quad (1)$$

Pri výpočte sa na jednom mieste vyskytujú formálne ťažkosti, ktoré sa našťastie dajú odstrániť fyzikálne dobre motivovaným spôsobom. V skutočnosti aj v tom najdokonalejšom vákuu je Coulombovská interakcia dvoch nábojov tienená polarizáciou prostredia, takže realistický tvar potenciálnej energie je

$$V(r) = \frac{e_1' e_2'}{r} e^{-\lambda r} \quad (2)$$

kde $\lambda > 0$. Ak je vákuum naozaj dobré, potom môžeme previesť výpočty pre $\lambda > 0$ a v konečných vzťahoch urobiť limitu $\lambda \rightarrow 0$. Potenciál typu (2) je však sám osebe zaujímavý v kontexte jadrovej fyziky, kde sa $V(\mathbf{r})$ v tvare

$$V(r) = g \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (3)$$

nazýva Yukawovým potenciálom, g sa nazýva väzbou konštantnou a $r_0 = 1/\mu$ je dosahom jadrových síl.

Spočítame teda teraz Bornovu aproximáciu na potenciáli (3) a potom v konečných výsledkoch sa zámenou $g \rightarrow e_1' e_2'$ a limitou $\mu \rightarrow 0$ dostaneme k výrazu platnému pre rozptyl častice na Coulombovom potenciáli. Ak vlnový vektor v smere dopadajúcej častice označíme ako \mathbf{q} a v smere rozptýlenej častice ako \mathbf{q}' , máme podľa predchádzajúceho článku

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} g \int e^{-i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}'} \frac{e^{-\mu r}}{r} d^3r \quad (4)$$

Pri integrovaní je užitočné označiť

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$$

a použiť sférické súradnice (Θ, Φ) v r -priestore s osou z v smere vektora $\boldsymbol{\kappa}$. Integrácia cez uhol Φ je triviálna, lebo podintegrálna funkcia od Φ nezávisí. Pre integrál cez uhol Θ máme

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \int_0^\pi e^{-i\kappa r \cos\Theta} \sin\Theta d\Theta = \\ &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \int_{-1}^1 e^{-i\kappa r u} du = \\ &= -\frac{gm}{\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\mu r} dr \frac{1}{i\kappa r} [e^{i\kappa r} - e^{-i\kappa r}] = \\ &= i \frac{gm}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\mu r} dr [e^{(-\mu+i\kappa)r} - e^{(-\mu-i\kappa)r}] \end{aligned} \quad (5)$$

Tu sa objavuje spomínaná ťažkosť. Pri $\mu = 0$ uvedené integrály divergujú. Pri $\mu \neq 0$ integrál vykonáme ľahko a máme

$$f(\vartheta) = \frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + \kappa^2} \quad (6)$$

Možno sa presvedčiť o tom (stačí si nakresliť obrázok), že uhol rozptylu ϑ súvisí s $\kappa = |\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$ vzťahom

$$\kappa = 2q \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (7)$$

Stačí si totiž uvedomiť, že $q = |\mathbf{q}| = |\mathbf{q}'|$ a uhol ϑ je uhol medzi vektormi \mathbf{q}, \mathbf{q}' . Po dosadení (7) do (6) máme

$$f(\vartheta) = \frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + 4q^2 \sin^2(\vartheta/2)} \quad (8)$$

Coulombov prípad odtiaľto dostaneme zámennou $g \rightarrow e_1' e_2'$ a limitou $\mu \rightarrow 0$. Ak navyše položíme $q^2 \hbar^2 / 2m = E$, kde E je energia dopadajúcej častice, máme

$$f(\vartheta) = \frac{e_1' e_2'}{4E} \frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)} \quad (9)$$

Príslušný diferenciálny účinný prierez je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \left(\frac{e_1' e_2'}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)} \quad (10)$$

čo je práve známa Rutherfordova formula použitá pri klasických experimentoch s rozptylom α -častic na jadrách zlata. Zhodou okolností Rutherfordova analýza založená na klasickom výpočte (ide o rok 1912) vedie v tomto prípade k rovnakému výsledku ako prvé priblíženie v kvantovej mechanike.

Pre úplnosť ešte uvedieme výsledok pre celkový prierez rozptylu častice na Yukawovom potenciáli. Podľa článku 7.2 platí

$$\sigma = \int |f(\vartheta)|^2 d\Omega = \int |f(\vartheta)|^2 \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$$

Po dosadení za $f(\vartheta)$ z rovnice (8) a integrovaní cez $d\varphi$ máme

$$\sigma = (2\pi) \left(\frac{2gm}{\hbar^2} \frac{1}{4g^2} \right)^2 \int_0^\pi \frac{\sin\vartheta d\vartheta}{[a^2 + \sin^2\vartheta/2]^2}$$

kde

$$a = \frac{\mu^2}{4q^2}$$

Integrál spočítame substitúciou $\sin(\vartheta/2) = t$ a napokon dostaneme

$$\sigma = 4\pi \left(\frac{2gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[\mu^2 + 4q^2]\mu^2} \quad (11)$$

Pre coulombovský potenciál by sme mali urobiť zámenu $g \rightarrow e_1' e_2'$ a limitu $m \rightarrow 0$. Dostávame tak nekonečný účinný prierez, čo súvisí s pomalým poklesom coulombovského potenciálu pre $r \rightarrow \infty$.

7.8 FORMFAKTOR

V predchádzajúcom článku sme skúmali rozptyl nabitej častice na bodovom náboji. Teraz sa budeme zaoberať s trocha zložitejším problémom – s rozptylom nabitej častice na potenciáli budenom spojitým rozložením náboja $e_2 \rho(\mathbf{r})$. Pritom rozloženie hustoty náboja normujeme tak, aby platilo

$$\int \rho(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = 1 \quad (1)$$

Potenciálna energia interakcie dopadajúcej častice s nábojom e_1 a daného rozloženia náboja bude

$$V(\mathbf{r}) = e_1' e_2' \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' \quad (2)$$

Pre Bornovu aproximáciu dostaneme

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \\ &= \frac{2m e_1' e_2'}{4\pi \hbar^2} \int d^3 \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \int \frac{e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r} \end{aligned}$$

V druhom integráli na pravej strane prejdeme k novej premennej \mathbf{t} substitúciou

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{t}$$

a dostaneme

$$f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = -\frac{2m e_1' e_2'}{4\pi \hbar^2} \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}') \int \frac{e^{-i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{t}}}{t} d^3 \mathbf{t}$$

Pôvodný dvojný integrál takto prešiel na súčin dvoch integrálov. Predintegrálne faktory spolu s druhým z integrálov dávajú práve amplitúdu rozptylu na bodovom náboji, prvý z integrálov nazývame formfaktor.

$$F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = \int d^3 \mathbf{r}' e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}') \quad (3)$$

Amplitúdu rozptylu môžeme písať ako súčin

$$f(\mathbf{q}', \mathbf{q}) = f_0(\mathbf{q}', \mathbf{q}) F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (4)$$

kde f_0 označuje amplitúdu rozptylu na bodovom náboji danú rovnicou (6.9) a druhý člen je spomínaný formfaktor. Pre diferenciálny účinný prierez máme analogicky

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 |F(\mathbf{q} - \mathbf{q}')|^2 \quad (5)$$

Pričom index 0 opäť označuje veličinu vzťahujúcu sa na bodový náboj.

Táto jednoduchá analýza má viacero praktických aplikácií. Prvou z nich je možnosť získania určitých experimentálnych informácií o rozdelení náboja v ťažkých atónoch. Ak totiž skúmame takýto rozptyl, nájdeme $d\sigma/d\Omega$ a predelíme ho výrazom $(d\sigma/d\Omega)_0$ dostaneme priamo druhú mocninu formfaktora. Rozdelenie náboja v atóme sa skladá z dvoch častí: prvou je jadro umiestnené v začiatku súradnicovej sústavy a jeho hustota náboja je opísaná výrazom $eZ\delta^{(3)}(\mathbf{r})$. Ďalej máme elektrónový oblak atómu s hustotou opísanou výrazom $-eZ\rho(\mathbf{r})$, kde $\rho(\mathbf{r})$ je normované podľa (1). Predchádzajúcu analýzu môžeme teraz takmer doslova zopakovať a prideme k vzťahu (4) iba s týmito zmenami: Namiesto eZ píšeme $-Ze'$ a namiesto $F(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ daného rovnicou (3) dostaneme

$$\tilde{F}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = F(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - 1 \quad (6)$$

kde druhý člen je Fourierovým obrazom $\delta^{(3)}(\mathbf{r})$ opisujúcej rozloženie náboja jadra. Pre diferenciálny účinný prierez a amplitúdu rozptylu stačí nahradiť vo vzťahoch (4) a (5) formfaktor F formfaktorom \tilde{F} . Zo štúdia rozptylu elektrónov na atónoch potom môžeme získať informáciu o veličine

$$|\int d^3r e^{i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}') - 1| \quad (7)$$

kde $\mathbf{\kappa} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$ je zmena vlnového vektora pri rozptyle.

Informácia, ktorú takto môžeme o rozložení náboja získať, závisí podstatne od vlnovej dĺžky λ dopadajúcich elektrónov. Veličina $|\mathbf{\kappa}|$ je totiž aj pri veľkých uhloch rozptylu rádovo rovná $1/\lambda$ a výraz $\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}'$ v exponente v (7) je potom rádovo rovný a/λ , kde a je rozmer atómu. Pri $a/\lambda < 1$ možno exponent rozvinúť a pri zachovaní prvých troch členov máme

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{-i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) &\approx \int d^3r [1 + i\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r})^2] \rho(\mathbf{r}) \approx \\ &\approx 1 - \frac{1}{2} \int d^3r (\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r})^2 \rho(\mathbf{r}) \approx 1 - \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle \kappa^2 \end{aligned}$$

kde sme pri prvom člene využili normovanie $\rho(\mathbf{r})$, druhý člen v hranatej zátvorke dal nulu, lebo predpokladáme sféricky symetrické rozloženie náboja a pri treťom člene sme opäť využili sférické rozloženie náboja a dostali sme

$$\int d^3r (\mathbf{\kappa}\cdot\mathbf{r})^2 \rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} \kappa^2 \int d^3r r^2 \rho(\mathbf{r})$$

kde integrál na pravej strane označuje stredný kvadratický polomer rozloženia náboja elektrónov. Pri rozptyle pomalých elektrónov na atóme teda meriame formfaktor v priblížení

$$\tilde{F}(\kappa) \approx -\frac{1}{6} \kappa^2 \langle r^2 \rangle \quad (8)$$

Na získanie podrobnejšej informácie preto potrebujeme elektróny s krátkou vlnovou dĺžkou.

Druhým a podstatným predpokladom je to, aby atóm po rozptyle ostal v základnom stave. Jedine v tomto prípade môžeme totiž považovať rozptyl elektrónu za rozptyl na statickom rozložení náboja.¹¹⁷

Na veľmi podobnom princípe boli založené experimenty vykonané Hofstädterovou skupinou v Stanforde začiatkom šesťdesiatych rokov. Skupina študovala rozptyl rýchlych elektrónov na atómových jadrách i na protónoch a neutrónoch a získala informácie o tom, ako je v nich rozdelený elektrický náboj. Analýza bola, samozrejme, o čosi zložitejšia, lebo elektrón musel byť opísaný relativisticky, ale princíp bol rovnaký. Od týchto prác je známe, že $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ pre protón je okolo $0,7 \cdot 10^{-15}$ m a toto bol jeden z prvých argumentov v prospech neelementárnosti protónu.

Poznamenajme ešte, že analýzou iných experimentov s rozptylom elektrónov na protónoch, t. j. štúdiom prípadov rozptylu, pri ktorom sa mení stav protónu (nepružný rozptyl) bola tiež v Stanforde koncom šesťdesiatych a začiatkom sedemdesiatych rokov získaná informácia o tom, z čoho sa asi protón skladá. Ale o tom tu hovoriť nebudeme.

¹¹⁷ Aj vtedy zanedbávame tzv. výmenné efekty spočívajúce, zhruba povedané, v tom, že dopadajúci elektrón si vymení úlohu s jedným z elektrónov v atóme.

7.9 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Vypočítajte integrály

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin x \cdot \delta\left(x^2 - \frac{\pi}{4}\right) dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \delta(e^x - 2) dx$$

2. Nájdite $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2}$ integrovaním v komplexnej rovine.

3. Dokážte, že platí

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\varepsilon} = P \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

kde limitu chápeme v zmysle distribúcií, P má význam hlavnej hodnoty integrálu.

4. V tejto kapitole sme sa podrobne zaoberali riešeniami rovníc

$$\Delta G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ (\Delta + q)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

kde $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ je Laplaceov operátor v trojrozmernom priestore.

Sformulujte analogický prípad pre jednorozmernú a dvojrozmernú úlohu pre prvú z týchto rovníc a nájdite príslušné Greenove funkcie. Porozmýšľajte aj o tom, ako by ste pristúpili k riešeniu druhej z uvedených rovníc v jedno- a dvojrozmernom prípade.

5. Nájdite amplitúdu rozptylu v Bornovej aproximácii pre rozptyl na potenciálovej jame

$$V(r) = -V_0 \quad \text{pre } r \leq a \\ V(r) = 0 \quad \text{pre } r > a.$$

6. Nájdite Bornovu aproximáciu pre amplitúdu rozptylu na Yukawovom potenciáli v situácii, keď dĺžka vlny dopadajúcej častice je oveľa väčšia ako dosah potenciálu. Porovnajte výsledok s Bornovou amplitúdou pre rozptyl na potenciáli $V(\mathbf{r}) = -B\delta^{(3)}(\mathbf{r})$. Možno v takýchto situáciách určiť tvar potenciálu z experimentálnych údajov o rozptyle – prediskutujte fyzikálnu stránku problému.

7. Nájdite formfaktory príslušné k nasledujúcim trom rozloženiam náboja

- a) $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0$ pre $r \leq a$; $\rho(\mathbf{r}) = 0$ pre $r > a$
b) $\rho(\mathbf{r}) = Ar^{-1}\exp(-\kappa r)$
c) $\rho(\mathbf{r}) = B\exp(-\kappa r)$

8. Predstavte si, že máte navrhnuť experiment, v ktorom by sa pomocou rozptylu elektrónu na atómoch daného prvku určoval približne polomer rozdelenia náboja v atóme. K dispozícii máte urýchľovač elektrónov, ktorý dodáva zväzok s intenzitou 10^{11} elektrónov za sekundu a energiu zväzku môžete voliť ľubovoľne, ďalej máte detektor v tvare valca o dĺžke 2 m a so základňou s priemerom 20 cm. Detektor určuje smer vyletujúceho elektrónu a tiež jeho energiu. Napokon máte nádobu, v ktorej môžete mať atómy študovaného plynu. Máte vhodne vybrať energiu (prípadne energie) dopadajúceho zväzku, rozmery nádoby, v ktorej máte plyn; hustotu plynu (tlak), uhly, pod ktorými budete detegovať rozptýlené elektróny a dobu, počas ktorej budete merať počet častíc zachytených detektorom za daných podmienok. Chyba v určení počtu elektrónov registrovaných detektorom je \sqrt{N} , kde N je počet registrovaných častíc (toto neplatí vždy, ale je zväčša dobrým odhadom). Urobte najprv rýchle približné odhady a až potom rozmýšľajte o tom, čo všetko ste zanedbali, a čo by bolo potrebné spresniť a domyslieť. Začnite z toho, že načrtnete očakávané účinné prierezy.

8 ČASTICA V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

8.1 ÚVOD

Interakcia nabitej častice s elektromagnetickým poľom (ďalej často len EM poľom) sa vyskytuje v značnej časti praktických aplikácií kvantovej mechaniky. S jej najjednoduchším prípadom, t. j. s interakciou elektrónu s elektrostatickým poľom sme sa stretli už pri opise atómu vodíka. V nasledujúcej kapitole však už budeme potrebovať aj interakciu elektrónu so žiarením dopadajúcim na atóm a ešte neskôr budeme skúmať chovanie sa atómu vo vonkajších elektrických a magnetických poliach. Pre tieto prípady je potrebné mať aj všeobecnejší opis interakcie nabitej častice s EM poľom.

V nasledujúcom článku tejto kapitoly uvidíme veľmi zjednodušené odvodenie výrazu pre hamiltonián interakcie nabitej skalárnej častice s EM poľom a v ďalšom článku prídeme k Pauliho rovnici, ktorá opisuje interakciu nabitej častice so spinom s EM poľom.

Ďalšie články sa zaoberajú tou istou otázkou ešte raz, ale argumenty sú fyzikálne hlbšie i matematicky náročnejšie. Oboznámime sa tu so všeobecným postupom pre kvantovanie sústav opísaných v klasickom priblížení istým hamiltoniánom a všimneme si podrobnejšie kalibračnú invariantnosť EM poľa a jeho interakcie s nabitými časticami.

8.2 BEZSPINOVÁ ČASTICA V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

Začneme s prípadom bezspinovej častice v elektrostatickom poli a potom prejdeme k všeobecnejšiemu prípadu takejto častice v časovo premennom elektromagnetickom poli.

Intenzitu elektrostatického poľa $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ možno vyjadriť pomocou potenciálu

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Potenciálna energia častice s nábojom q v elektrostatickom poli je

$$V(\mathbf{r}) = q\varphi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

a silu pôsobiacu na časticu možno zapísať ako

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (3)$$

Schrödingerova rovnica pre časticu v elektrostatickom poli je

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) \quad (4)$$

Pre časticu pohybujúcu sa v časovo premennom elektromagnetickom poli s intenzitami $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ je situácia zložitejšia. Na časticu pôsobí Lorentzova sila

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (5)$$

kde q je náboj a \mathbf{v} rýchlosť častice. Pohybová rovnica častice je v klasickom prípade

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (6)$$

V tomto všeobecnom prípade sa už nedá nájsť taká funkcia $V(\mathbf{r}, t)$, aby platilo

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (7)$$

a preto ani nemožno prejsť ku kvantovomechanickému opisu tak jednoducho ako vyššie. To, že silu pôsobiacu na časticu v EM poli nemožno opísať pomocou (7) vidno intuitívne už z toho, že „magnetická“

časť Lorentzovej sily nekoná prácu lebo zrýchlenie, ktoré častici udeľuje, je kolmé na rýchlosť častice. Preto sila $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ nemeí absolútnu hodnotu rýchlosti častice ani jej kinetickú energiu. Pojem potenciálu elektrostatického poľa však možno na všeobecný prípad EM poľa rozšíriť iným spôsobom a práve toto rozšírenie budeme potrebovať.

Z teórie EM poľa je známe, že ľubovoľné pole $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ možno charakterizovať vektorovým a skalárnym potenciálom $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\varphi(\mathbf{r}, t)$, pričom

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}\end{aligned}\quad (8)$$

Poznamenajme hneď, že opis EM poľa pomocou potenciálov \mathbf{A} , φ nie je jednoznačný: tým istým intenzitám \mathbf{E} , \mathbf{B} odpovedá viacero možností výberu \mathbf{A} , φ . Skutočne, ak dvojica \mathbf{A} , φ vedie podľa (7) k istým hodnotám \mathbf{E} , \mathbf{B} , povedie k nim aj dvojica \mathbf{A}' , φ' daná vzťahmi

$$\begin{aligned}\varphi' &= \varphi + \frac{\partial}{\partial t} f \\ \mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \nabla f\end{aligned}\quad (9)$$

kde $f(\mathbf{r}, t)$ je ľubovoľná funkcia súradníc a času. Presvedčíme sa o tom priamo.

Položme podľa (8)

$$\begin{aligned}\mathbf{E}' &= -\frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} - \nabla \varphi' \\ \mathbf{B}' &= \nabla \times \mathbf{A}'\end{aligned}$$

Ak sem dosadíme za φ' , \mathbf{A}' , z (9) po elementárnych úpravách a využití rovnice $\nabla \times \nabla f = 0$ dostaneme $\mathbf{E}' = \mathbf{E}$, $\mathbf{B}' = \mathbf{B}$. Dvojice (φ', \mathbf{A}') a (φ, \mathbf{A}) sú teda ekvivalentné v tom zmysle, že im odpovedajú rovnaké intenzity \mathbf{E} , \mathbf{B} a teda aj rovnaká Lorentzova sila pôsobiaca na časticu v tomto poli.

Nejednoznačnosť výberu (φ, \mathbf{A}) nie je chybou, podstatné je zatiaľ iba to, že takúto dvojicu možno vždy vybrať.

Pokúsme sa teraz „uhádnuť“, ako bude vyzeráť SchR pre bezspinovú časticu v poli opísanom potenciálmi (φ, \mathbf{A}) . Toto „uhádnutie“ bude iba intuitívne a hlbšie dôvody uvedieme až v ďalších článkoch tejto kapitoly.

Budeme vychádzať z toho, že v teórii EM poľa a v špeciálnej teórii relativity sa ukazuje, že štvorica veličín

$$\left(\frac{1}{c} \varphi, A^1, A^2, A^3 \right) \quad (10)$$

je štvorvektorom, pričom prvý symbol je jeho „časovou“ (či nultou) zložkou. Podobným štvorvektorom je (ct, x^1, x^2, x^3) a teda aj štvorica operátorov¹¹⁸

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3} \quad (11)$$

Ak (11) násobíme faktorom $i\hbar$ vidíme, že štvorvektorom je štvorica operátorov

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \mathbf{p}^1, \mathbf{p}^2, \mathbf{p}^3 \right) \quad (12)$$

Pozrime sa teraz na SchR pre voľnú časticu a na SchR pre časticu v elektrostatickom poli. Prvá má tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi \quad (13a)$$

¹¹⁸ Vo vzťahoch (10), (11) c označuje rýchlosť svetla. Zmena znamienka pred priestorovými deriváciami pochádza zo vzťahu medzi kovariantnými a kontravariantnými komponentmi 4-vektorov. Štvorvektory (10) a (11) sú kontravariantné. Niekedy sa za štvorvektor berie štvorica (ict, x^1, x^2, x^3) a potom zmena znamienka súvisí s tým, že pri deriváciách i prechádza do menovateľa.

druhá

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi + q\varphi\psi \quad (13b)$$

Vidno hned', že (13b) dostaneme z (13a) záménou

$$\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{c} q\varphi \quad (14)$$

Toto je ale záména, ktorá obsahuje časové zložky 4-vektorov (10) a (11). Pritom pre elektrostatické pole je $\mathbf{A} = 0$, takže analogická záména pre priestorové zložky by tu nič na SchR nezmenila.

Pre časticu v EM poli opísanom potenciálom – štvorvektorom (φ/c , \mathbf{A}) je potom prirodzené predpokladať, že správnu SchR dostaneme ak záménu (14) doplníme príslušnou zmenou priestorových zložiek štvorvektorov, t. j.

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A} = \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}$$

Tento vzťah spolu s (13) môžeme zapísať ako

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{c} q\varphi \\ -i\hbar \nabla &\rightarrow -i\hbar \nabla - q\mathbf{A} \end{aligned} \quad (15)$$

Po takejto záméne na (13a) dostávame

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 \psi + q\varphi\psi \quad (16)$$

a to je skutočne SchR pre bezspinovú časticu v EM poli a výraz na pravej strane je príslušný hamiltonián. Urobíme úpravu:

$$\begin{aligned} (-i\nabla\hbar - q\mathbf{A})^2 \psi &= (-i\nabla\hbar - q\mathbf{A}) \cdot (-i\nabla\hbar - q\mathbf{A}) \psi = \\ &= -\hbar^2 \nabla^2 \psi + q^2 \mathbf{A}^2 \psi + i\hbar [\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) + \mathbf{A} \cdot \nabla \psi] \end{aligned} \quad (17)$$

V nasledujúcom sa presvedčíme o tom, že v realistických situáciách dáva člen obsahujúci \mathbf{A}^2 zanedbateľný príspevok a v ďalšom ho preto vynecháme. Rovnicu (16) upravíme s využitím (17) a identity

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = (\nabla \cdot \mathbf{A}) \psi + \mathbf{A} \cdot \nabla \psi$$

na tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + q\varphi\psi + \frac{iq\hbar}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi + \frac{iq\hbar}{2m} (\nabla \cdot \mathbf{A}) \psi \quad (18)$$

V teórii EM poľa sa ukazuje, že v kalibračných transformáciách (9) možno vždy vybrať funkciu f tak, aby platilo $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Pri takomto výbere \mathbf{A} sa (18) zjednoduší na

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + q\varphi\psi + \frac{iq\hbar}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi \quad (19)$$

a tento tvar budeme v ďalšom často potrebovať.

8.3 ČASTICA SO SPINOM 1/2 V MAGNETICKOM POLI. PAULIHO ROVNICA

Paulino rovnica opisuje nabitú časticu so spinom 1/2 a s magnetickým momentom v elektrostatickom a magnetostatickom poli. Typickým prípadom je atóm vodíka vo vonkajšom magnetickom poli. Elektrón je opísaný spinorovou vlnovou funkciou

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

a energia magnetického momentu v homogénnom poli \mathbf{B} je vyjadrená operátorom

$$U_{\text{dip}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (2)$$

kde $q = -e$ je náboj elektrónu a ostatné označenie je štandardné. Navyše musíme ešte do H zahrnúť interakciu orbitálneho pohybu elektrónu s magnetickým poľom. To za nás ale urobí rovnica (2.19), v ktorej je už tento príspevok zahrnutý.

Uvažujme špeciálny tvar tejto rovnice odpovedajúci vonkajšiemu homogénnemu magnetickému poľu, ktoré má smer osi z . V tomto prípade

$$\mathbf{B} = (0, 0, B) \quad (3)$$

a, ako sa možno ľahko presvedčiť, vektorový potenciál spĺňajúci podmienky

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \\ \nabla \cdot \mathbf{A} &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

možno voliť v tvare

$$A_x = -yB/2, \quad A_y = xB/2, \quad A_z = 0 \quad (5)$$

V tomto prípade výraz $i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla$ bude mať tvar

$$i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla = \frac{i\hbar}{2} \left[xB \frac{\partial}{\partial y} - yB \frac{\partial}{\partial x} \right] = -\frac{B}{2} [xp_y - yp_x] = -\frac{B}{2} L_z$$

a po dosadení do SchR (2.19) a zahrnutí príspevku (2) máme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + q\varphi - \frac{q}{2m} B(L_z + \hbar\sigma_z) \right\} \psi \quad (6)$$

V prípade všeobecného smeru magnetického poľa by sme zrejme dostali rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + q\varphi - \frac{q}{2m} \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{L}} + \hbar\vec{\sigma}) \right\} \psi \quad (7)$$

Táto rovnica sa v aplikáciách často používa a tiež sa jej hovorí Pauliho rovnica. Upozorníme, že výraz v okrúhlej zátvorke vo vzťahu (7)

$$\hat{\mathbf{L}} + \hbar\vec{\sigma} \quad (8)$$

nie je operátor celkového momentu hybnosti, ktorý by mal tvar

$$\hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2} \hbar\vec{\sigma} \quad (9)$$

keďže operátor orbitálneho momentu hybnosti je $\hat{\mathbf{L}}$ a operátorom spinu je $\hbar\vec{\sigma}/2$. O chýbajúcom faktore 1/2 v druhom člene výrazu (8) sme už raz hovorili (pozri diskusiu v 1.8); upozorňujeme naň opäť,

pretože táto skutočnosť sa prejaví v charaktere rozštiepenia spektrálnych čiar atómu v magnetickom poli.

Ostáva nám ešte ukázať, že kvadratický člen v rovnici (2.17) možno zanedbať, t. j. že platí (pre obvyklé intenzity polí)

$$|q^2 \mathbf{A}^2 \psi| \ll |\hbar q \mathbf{A} \cdot \nabla \psi|$$

Ak urobíme hrubý odhad pre absolútne hodnoty veličín, dostaneme

$$q^2 A^2 \psi \ll q A p$$

kde p je typická hodnota hybnosti častice v atóme (využili sme vzťah $\hbar \nabla \psi \approx \mathbf{p} \psi$) Máme teda podmienku

$$A \ll \frac{p}{q} \quad (10)$$

Podľa (5) dostaneme v našom prípade približný odhad $\mathbf{A} = a_1 \mathbf{B}$, kde a_1 je Bohrov polomer a \mathbf{B} je magnetická indukcia vonkajšieho poľa.

Po dosadení vzťahu $\mathbf{A} \approx a_1 \mathbf{B}$ do (10) máme podmienku

$$B \ll \frac{p}{a_1 q} \approx \frac{\hbar^2}{a_1^2 q}$$

kde $p \approx \hbar/a_1$ (podľa vzťahu neurčitosti). Po dosadení číselných hodnôt dostaneme

$$B \ll 10^5 \text{ T}$$

Tento vzťah je spravidla pre makroskopické polia splnený veľmi dobre.

8.4 KANONICKÝ FORMALIZMUS PRE POHYB KLASICKEJ ČASTICE V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

V tomto a v nasledujúcich článkoch sa budeme hlbšie a systematickejšie zaoberať opisom pohybu častice v EM poli. Začneme s klasickým opisom problému, potom uvedieme všeobecnú schému kvantovania klasických sústav a napíšeme SchR pre pohyb častice v EM poli. Napokon sa budeme zaoberať s kalibračnou invariantnosťou problému.

Všeobecný opis klasickej sústavy je založený na Lagrangeových a Hamiltonových pohybových rovniciach.¹¹⁹

Ak súradnice častice označíme ako x_i a ich časové derivácie ako \dot{x}_i potom Lagrangeove pohybové rovnice majú tvar

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial x_i} \quad (1)$$

kde $L = L(x_i, \dot{x}_i)$ je Lagrangeova funkcia, ktorá sa v najjednoduchších prípadoch dá písať ako rozdiel kinetickej a potenciálnej energie, ale všeobecne možnosť takéhoto rozdelenia nie je nutná.

Rovnice (1) sa tiež niekedy zapisujú ako

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} \quad (2)$$

kde $\mathbf{v} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3)$, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$. Pritom (2) je len skrátenejším zápisom (1).

¹¹⁹ Pozri napr. Landau, L. D. – Lifšic, J. M.: Úvod do teoretickej fyziky 1. Mechanika a elektrodynamika. Bratislava : Alfa, 1980. kap. 1.

Pre pohyb častice s nábojom q v EM poli s intenzitami $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ platí

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (3)$$

ako sme už hovorili v predchádzajúcom článku. Intenzity \mathbf{E} , \mathbf{B} môžeme vyjadriť pomocou potenciálov \mathbf{A} , φ :

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4)$$

Ukážeme teraz, že Lagrangeovu funkciu nabitej častice s nábojom q v elektromagnetickom poli možno voliť v tvare

$$L = \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 + q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - q\varphi \quad (5)$$

Dôkaz tohto tvrdenia je jednoduchý, stačí ukázať, že Lagrangeova pohybová rovnica vyplývajúca z funkcie (5) je totožná s Newtonovou rovnicou (3).

Po dosadení (5) do výrazov vystupujúcich v Lagrangeových rovniciach (2) dostávame

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} &\equiv \nabla L = q\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) - q\nabla\varphi \\ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} &= m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} &= \frac{d}{dt}(m\mathbf{v} + q\mathbf{A}) = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + q \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla \right) \mathbf{A} \right] = \\ &= m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + q(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} \end{aligned} \quad (6)$$

Dosadením do (2) a postupnými úpravami prideme k pohybovej rovnici

$$\begin{aligned} m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + q(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} &= q\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) - q\nabla\varphi \\ m \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= q \left(-\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + q(\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A}) \\ m \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= q \left(-\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + q\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \end{aligned} \quad (7)$$

keď sme použili známy vzorec

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$$

Za výrazy v okrúhlych zátvorkách v (7) teraz už len dosadíme intenzity \mathbf{E} , \mathbf{B} podľa (4) a máme skutočne pohybovú rovnicu (2). Lagrangeova funkcia (5) teda naozaj opisuje interakciu klasickej nabitej častice s vonkajším EM polom.

V priebehu výpočtu sme získali aj vzťah (6), ktorý v terminológii klasickej mechaniky určuje zovšeobecnenú hybnosť, kanonicky združenú v súradnici \mathbf{r} :

$$\mathbf{P} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \quad (8)$$

Pre zdôraznenie odlišnosti budeme označovať hybnosť kanonicky združenú k \mathbf{r} veľkým písmenom a výraz

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$$

budeme nazývať mechanickou hybnosťou. Medzi zovšeobenou kanonickou a mechanickou hybnosťou častice v EM poli platí teda vzťah

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + q\mathbf{A} \quad (9)$$

Postupom známym z teoretickej mechaniky dostaneme potom už ľahko výraz pre Hamiltonovu funkciu:

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{r}, \mathbf{P}) &= \left(\dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{r}}} L \right) - L = \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} L \right) - L = \\
 &= m\mathbf{v}^2 + q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) + q\varphi = \\
 &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q\varphi = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + q\varphi \\
 H(\mathbf{r}, \mathbf{P}) &= \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \tag{10}
 \end{aligned}$$

Podstatné je, že hamiltonovu funkciu bolo treba vyjadriť pomocou kanonicky združených veličín \mathbf{r}, \mathbf{P} . Hamiltonove pohybové rovnice potom sú

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}} \quad \dot{\mathbf{P}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}$$

Čitateľ sa môže presvedčiť, že tieto rovnice sú ekvivalentné pohybovej rovnici (3).

V nasledujúcom článku si ukážeme ako treba prejsť od hamiltonovského opisu klasickej častice ku kvantovomechanickému opisu. Aby sme ale už teraz videli, kde sa dostaneme, prezradíme, že pri kvantovaní priradíme operátor $-i\hbar\nabla$ nie mechanickej, ale zovšeobecnenej hybnosti a výraz (10) potom prejde na operátor vystupujúci na pravej strane (2.16).

Rovnica (9) potom bude

$$p \equiv p_{\text{mech}} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A} \tag{11}$$

Uvedieme teraz ešte jednoduchý kvalitatívny argument, ktorý ilustruje fyzikálny obsah vzťahu (11). Argument pochádza od Feynmana. Predstavme si časticu s nábojom q vnútri dlhého solenoidu. Nech pri $t < t_0$ solenoidom netečie prúd, elektrické i magnetické pole je nulové a potenciály φ, \mathbf{A} volíme $\varphi = 0, \mathbf{A} = 0$. V okamihu t_0 zapneme prúd tak, že za veľmi krátky čas Δt sa magnetická indukcia vnútri solenoidu ustáli na hodnote \mathbf{B} . Príslušný prechodový jav si môžeme predstaviť tak, že je opísaný „zapnutím“ potenciálu \mathbf{A} z nulovej hodnoty na hodnotu $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$ pričom platí $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}_0(\mathbf{r})$. Potenciál φ je stále nulový. Počas procesu „zapínania“ sa vnútri solenoidu objaví aj elektrické pole, pre ktoré podľa (2.8) platí $\mathbf{E} = -d\mathbf{A}/dt$. Podľa klasickej mechaniky toto elektrické pole udelí častici dodatočnú hybnosť

$$\Delta \mathbf{p}_{\text{mech}} = \mathbf{F}\Delta t = q\mathbf{E}\Delta t = -q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \Delta t \approx -q\mathbf{A}_0 \tag{12}$$

V situáciách, kde klasický výsledok má byť dobrým priblížením ku kvantovomechanickému výsledku, očakávame, že podobný výsledok dostaneme aj pre zmenu strednej hodnoty hybnosti častice, počítanej kvantovomechanickým formalizmom pomocou operátora (11). Ukážeme si, že je to naozaj tak. Zmena strednej hodnoty (12) presne zodpovedá druhému členu vo vzťahu (11). Príspevok k zmene strednej hodnoty pochádzajúci od prvého člena je nulový, ako vyplýva z nasledujúcej úvahy. Príspevok od tohto člena by sme nemohli zanedbať, keby vlnová funkcia častice v okamihu tesne pred zapnutím poľa a po ňom bola podstatne odlišná. Ako si hneď ukážeme, ak doba zapnutia je veľmi krátka, vlnová funkcia sa zmení len veľmi málo, príspevok k strednej hodnote hybnosti daný prvým členom v (11) v situácii pred zapnutím poľa a po ňom je teda rovnaký, príspevok k zmene strednej hodnoty je zanedbateľný. Feynmanov argument naozaj názorne ukazuje fyzikálny význam druhého člena vo vzťahu (11). Ukážeme si teraz, že spomínaná zmena vlnovej funkcie počas „zapínania poľa“ je naozaj malá. Táto zmena musí byť, samozrejme opísaná Schrödingerovou rovnicou. Predpokladáme, že pole vystupuje vo vyjadrení hamiltoniánu iba cez potenciály¹²⁰ \mathbf{A}, φ , pričom pre jednoduchosť predpokladajme, v zhode s (4.10), že hamiltonián má tvar

$$H = O_1 + \vec{O}_2 \cdot \mathbf{A} + O_3 A^2$$

¹²⁰ Tento predpoklad je podstatný. Ak by sme v hamiltoniáne pripustili i člen úmerný $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$, ďalšiu úvahu by sme nemohli použiť.

Podľa Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar\partial\psi/\partial t = H\psi$$

potom pre zmenu vlnovej funkcie dostaneme odhad

$$\|\Delta\psi\| \leq \frac{1}{\hbar} \{ \|\mathbf{O}_1\psi\| + \|\mathbf{O}_2\psi\| |\mathbf{A}_0| + \|\mathbf{O}_3\psi\| |\mathbf{A}_0|^2 \} \Delta t$$

Vidíme teda, že zmena vlnovej funkcie je pre malé časy Δt naozaj zanedbateľná.

8.5 KANONICKÉ KVANTOVANIE

Nie všetky fyzikálne systavy sa dajú charakterizovať ako súbory častíc interagujúcich navzájom pomocou síl, ku ktorým existuje potenciál v obvyklom zmysle. Príklad častice vo všeobecnom elektromagnetickom poli skúmaný v predchádzajúcom článku je ilustráciou takejto situácie. Často sa stretávame i so sústavami, ktoré (prinajmenej na klasickej úrovni) nemajú vôbec časticovú interpretáciu (polia). V teoretickej mechanike je však známy formalizmus, ktorý možno použiť i pre opis komplikovanejších fyzikálnych sústav a pre opis pohybu častíc v potenciálovom poli je ekvivalentný Newtonovmu formalizmu. Ide o Lagrangeovský resp. Hamiltonovský formalizmus, pomocou ktorého je možné opísať na klasickej úrovni všetky známe fyzikálne systavy.

Ak chceme teda prejsť ku kvantovému opisu sústav, ktoré majú klasický analóg, bolo by dobré poznať prechod od všeobecného Hamiltonovského formalizmu ku kvantovomechanickému formalizmu. Hamiltonovský formalizmus používa pojmy kanonicky konjugovaných (združených) súradníc (q) a hybností (P), pričom Hamiltonove pohybové rovnice majú tvar

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial P}; \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (1)$$

kde $H = H(P, q)$ je Hamiltonova funkcia uvažovanej sústavy. Pri prechode ku kvantovomechanickému formalizmu je treba priradiť zovšeobecneným súradniciam q a zovšeobecneným hybnostiam P vhodné operátory. Podrobnú diskusiu tejto problematiky možno nájsť v Diracovej monografii [14] a prípad kanonického kvantovania sústavy s väzbami¹²¹ v jeho lekciiach [31]. My sa obmedzíme na značne zjednodušené konštatovania. Podľa Diraca zovšeobecnenie „kvantovacieho predpisu“

$$x \rightarrow \mathbf{x} = x, \quad P \rightarrow \mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

ktorý už poznáme, na prípad zovšeobecnených súradníc a hybností, spočíva v zachovaní komutačného pravidla

$$[\mathbf{x}, \mathbf{P}] = i\hbar \quad (2)$$

Inými slovami operátory q a P , ktoré priraďujeme klasickým zovšeobecneným súradniciam a hybnostiam musia spĺňať komutačný vzťah

$$[q, P] = i\hbar \quad (3)$$

V prípade, že sústava je opísaná väčším počtom zovšeobecnených súradníc q_i , $i = 1, \dots, n$ a k nim konjugovaných hybností P_i , $i = 1, \dots, n$ vyžadujeme splnenie komutačných vzťahov¹²²

$$[q_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [q_i, q_j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0 \quad (4)$$

kde δ_{ij} je Kroneckerov symbol.

¹²¹ Dôležitosť tohto prípadu sa ukázala v poslednom období, keď sa v kvantovej teórii poľa vyskytol problém kvantovania kalibračných polí.

¹²² Porovnaj so vzťahmi (2.17.1).

Vzťahy (4) sa nazývajú *kanonické komutačné vzťahy* a postupu, ktorý klasickým zovšeobecným súradnicami q a hybnosťami P priradí operátory \mathbf{q} a \mathbf{P} spĺňajúce vzťahy (4) sa hovorí *kanonické kvantovanie*.

Na podmienky (4) sa treba pozerat' ako na postulát, ktorého platnosť sa overuje súhlasom jeho dôsledkov s experimentom. Poznamenajme, že formulácia postulátu (4) kladie dôraz na nekomutatívnosť operátorov priradených fyzikálnym veličinám v kvantovej mechanike, inými slovami vzťah (4) ukazuje na hlbokú úlohu vzťahu neurčitosti v kvantovomechanickom opise fyzikálnych sústav.

Zhrňme teda hlavnú ideu kanonického kvantovania vo forme algoritmu.

Ak máš kvantovať sústavu, ktorá má klasický analóg, potom:

1. Nájdi zovšeobecnené súradnice q a Lagrangeovu funkciu klasickej sústavy $L(q, \dot{q})$
2. Nájdi zovšeobecnené hybnosti združené ku q podľa vzťahu $P = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$
3. Nájdi Hamiltonovu funkciu sústavy a vyjadri ju pomocou premenných P, q podľa vzťahu

$$H(P, q) = \dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - L$$

4. Prirad' kanonicky združeným veličinám P, q operátory \mathbf{P}, \mathbf{q} tak, aby boli splnené komutačné vzťahy (4).

Dosaď do vyjadrenia Hamiltonovej funkcie $H(P, q)$ namiesto klasických veličín P, q operátory \mathbf{P}, \mathbf{q} . Dostaneš operátor Hamiltonián

$$\mathbf{H}(\mathbf{P}, \mathbf{q})$$

ktorý vystupuje v Schrödingerovej (pohybovej) rovnici.

6. Operátor priradený ľubovoľnej inej veličine F , ktorá má klasický analóg nájdi tak, že napred nájdeš klasické vyjadrenie veličiny F pomocou P a q : $F(P, q)$ a potom do tohto vyjadrenia dosaď operátory.

8.6 BEZSPINOVÁ ČASTICAV ELEKTROMAGNETICKOM POLI. KVANTOVOMECHANICKÝ OPIS PRI KANONICKOM KVANTOVANÍ

V predchádzajúcom článku sme uviedli všeobecný predpis pre kanonické kvantovanie sústav, ktoré sú na klasickej úrovni opísané hamiltonovským formalizmom. Pretože takýto formalizmus sme použili pre klasický opis častice v elektromagnetickom poli v článku 8.4 bude prechod ku kvantovomechanickému formalizmu jednoduchý. Podľa článku 8.4 kanonicky združenými veličinami sú súradnica \mathbf{r} a zovšeobecnená hybnosť

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + q\mathbf{A} \quad (1)$$

Teraz treba týmto veličinám priradiť operátory \mathbf{r} a \mathbf{P} tak, aby boli splnené kanonické komutačné vzťahy

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{P}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (2)$$

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j] = 0, \quad [\mathbf{P}_i, \mathbf{P}_j] = 0 \quad (3)$$

Predpokladajme pritom, že opis stavu častice v okamihu t_0 je opäť daný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ a jej interpretácia je tiež obvyklá, t. j. $|\psi(\mathbf{r}, t_0)|^2$ má význam hustoty pravdepodobnosti nájsť časticu v okolí bodu \mathbf{r} . Potom ale strednú hodnotu \mathbf{r} musíme počítať podľa vzťahu

$$\bar{\mathbf{r}}(t) = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) d^3r$$

a teda súradnici \mathbf{r} priradíme operátor

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \quad (4)$$

Aby boli splnené komutačné vzťahy (2) a (3), stačí, ak priradíme zovšeobecnenej hybnosti operátor

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla \quad (5)$$

Vtedy je ale mechanickej hybnosti \mathbf{p} priradený operátor

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A} \quad (6)$$

Treba však trochu opatrnosti. V skutočnosti komutačným vzťahom (2) vyhovuje aj operátor

$$\hat{P}' = -i\hbar\nabla + \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

kde $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ je ľubovoľná vektorová funkcia súradnice \mathbf{r} . Aby boli splnené aj komutačné vzťahy (3), musí platiť (presvedčíme sa o tom dosadením (7) do (3) po zložkách)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F_j(\mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial x_j} F_i(\mathbf{r}) = 0 \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (8)$$

Znamená to, že funkcia $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ nie je ľubovoľná, ale taká, že sa dá vyjadriť v tvare

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \nabla\Phi(\mathbf{r}) \quad (9)$$

kde $\Phi(\mathbf{r})$ je vhodná skalárna funkcia.

Znamená to, že vo všeobecnosti možno mechanickej hybnosti priradiť operátor

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A} + \nabla\Phi(\mathbf{r}) \quad (10)$$

kde $\Phi(\mathbf{r})$ je ľubovoľná skalárna funkcia súradnice. V článku 8.2 sme však videli, že vektorový potenciál je určený až na gradient ľubovoľnej skalárnej funkcie (vzťah (2.9)). Znamená to, že v prípade, keď volíme operátor \hat{p} v tvare (10) môžeme namiesto potenciálu \mathbf{A} používať pre vyjadrenie tej istej fyzikálnej situácie potenciál

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \frac{1}{q}\nabla\Phi \quad (11)$$

a operátor \hat{p} bude mať tvar

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A}'$$

čo je tvar (6). Vidíme teda, že napriek nejednoznačnosti voľby operátora \hat{p} možno vždy redefiníciou vektorového potenciálu dosiahnuť, že operátor \hat{p} má tvar (6). Zhrňme teda doterajšie výsledky: Pri kvantovomechanickom opise treba súradnici \mathbf{r} , mechanickej hybnosti \mathbf{p} a zovšeobecnenej hybnosti \mathbf{P} priradiť operátory

$$\hat{r} = \mathbf{r}$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A} \quad (12)$$

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla$$

kde \mathbf{A} je vektorový potenciál elektromagnetického poľa a q je náboj uvažovanej častice. Klasické vyjadrenie hamiltonovej funkcie je dané vzťahom (4.10). Kvantovomechanický hamiltonián bude mať preto tvar

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \quad (13)$$

kde φ je skalárny potenciál elektromagnetického poľa. Pohybová Schrödingerova rovnica častice v elektromagnetickom poli bude mať tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \right] \psi \quad (14)$$

s ktorým sme sa už vyššie stretli vo veľmi zjednodušenom „odvození“.

8.7 KALIBRAČNÁ INVARIANTNOSŤ

Doteraz sme sa už viackrát stretli s tým, že vlnová funkcia opisujúca stav častice je určená až na konštantný fázový faktor. Znamená to, že funkcie $\psi(\mathbf{r})$ a $e^{i\alpha}\psi(\mathbf{r})$, kde α je reálne číslo opisujú ten istý stav. Formálne sa táto skutočnosť prejavuje ako dôsledok lineárnosti kvantovomechanických rovníc, napríklad Schrödingerovej rovnice. Skutočne, ak funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ je riešením rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

potom riešením tejto rovnice je aj funkcia

$$e^{i\alpha}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

V prípade nabitej častice v EM poli má SchR tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 - q\varphi \right] \psi \quad (3)$$

a, pravdaže, spolu s riešením ψ je riešením rovnice (3) aj funkcia (2).

V tomto prípade však platí oveľa silnejšie tvrdenie. Vo funkcii opisujúcej stav možno nielen zmeniť fázu o konštantný faktor ako vo vzťahu (2), ale možno dokonca zmeniť fázu v závislosti od miesta a času

$$e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)}$$

Sformulujme naše tvrdenie presnejšie. Ak funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ je riešením rovnice (2), potom funkcia

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

je tiež riešením Schrödingerovej rovnice (2), v ktorej však namiesto potenciálov \mathbf{A} , φ vystupujú potenciály

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \frac{\hbar}{q} \nabla \alpha \quad (5)$$

$$\varphi' = \varphi - \frac{\hbar}{q} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (6)$$

O správnosti tohto tvrdenia pre ľubovoľnú funkciu $\alpha(\mathbf{r}, t)$ sa možno jednoducho presvedčiť dosadením (4), (5), (6) do rovnice (3).

Transformačné vzťahy (5), (6) však majú tvar (2.9), čo znamená, že dvojice φ , \mathbf{A} a φ' , \mathbf{A}' opisujú to isté elektromagnetické pole. SchR je teda invariantná voči transformácii danej vzťahmi (4), (5), (6). Z historických dôvodov sa táto invariantnosť nazýva kalibračnou invariantnosťou a transformácia

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \psi$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \frac{\hbar}{q} \nabla \alpha \quad (7)$$

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\hbar}{q} \frac{\partial \alpha}{\partial t}$$

sa nazýva kalibračnou transformáciou.¹²³

Prístup, pomocou ktorého sme sa oboznámili s kalibračnou invariantnosťou, môže ľahko vyvolať dojem, že ide o nepodstatnú technickú vec, skôr o zaujímavosť alebo kuriozitu. Dnes však vývoj fyziky,

¹²³ Príhodnejšie by bolo asda hovoriť o fázovej transformácii, resp. fázovej invariantnosti; termín kalibračná transformácia sa však vžil a používa sa, hoci vo vzťahoch (7) nejde o zmenu kalibrácie (škály), ale o zmenu fázy.

zdá sa, ukazuje, že požiadavka kalibračnej invariantnosti zohráva závažnú úlohu vo fyzikálnych teóriách a má – prinajmenej – veľkú heuristickú cenu. Možno, že dokonca patrí k jedným z najhlbších fyzikálnych princípov.¹²⁴

Heuristickú cenu princípu kalibračnej invariantnosti si môžeme načrtnúť i na skúmanom prípade nabitej (nerelativistickej) častice v elektromagnetickom poli. I Vyjdime zo SchR pre voľnú časticu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (8)$$

(ktorá opisuje pohyb častice bez vplyvu elektromagnetického póla). Táto rovnica je invariantná vzhľadom na transformácie typu (2) s konštantnou fázou. Pokúsme sa nájsť takú modifikáciu rovnice (8), aby nová pohybová rovnica bola invariantná vzhľadom na transformácie typu (4). Rovnica (8) invariantná nie je, vadí tu skutočnosť, že kým funkcia ψ sa transformuje homogénne

$$\psi \rightarrow e^{i\alpha(r,t)} \psi \quad (9)$$

jej derivácie podliehajú nehomogénnej transformácii:

$$\nabla \psi \rightarrow \nabla \psi' = \nabla(e^{i\alpha(r,t)} \psi) = (i\nabla\alpha)e^{i\alpha} \psi + e^{i\alpha}(\nabla \psi) \neq e^{i\alpha}(\nabla \psi) \quad (10)$$

Pohybová rovnica by bola invariantná, keby namiesto obyčajných diferenciálnych operátorov typu ∇ v nej vystupovali nejaké zovšeobecnené diferenciálne operátory D , pre ktoré by platilo pri transformácii (9)

$$D \psi \rightarrow D' \psi' = e^{i\alpha(r,t)} D \psi$$

Detailnejšia úvaha vedie k záveru, že vhodnou voľbou je náhrada diferenciálnych operátorov podľa vzťahov typu (2.14)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi \\ -i\hbar \nabla &\rightarrow -i\hbar \nabla - q\mathbf{A} \end{aligned} \quad (11)$$

Ak chceme teda splniť požiadavku kalibračnej invariantnosti, musíme zaviesť pomocné polia φ a \mathbf{A} , ktorých úlohou je kompenzovať nehomogénny člen v transformácii (10). Poľu danému potenciálmi φ , \mathbf{A} sa preto hovorí tiež kalibračné alebo kompenzujúce pole. Namiesto rovnice (8) dostaneme teda po náhrade (11) rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi - q\varphi \psi = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 \psi \quad (12)$$

ktorá už je kalibračne invariantná vzhľadom na transformácie (7).

Princíp kalibračnej invariantnosti teda priamo diktuje, ako má vyzerat' interakcia s elektromagnetickým poľom. Rovnica (12) je totožná s rovnicou (3). O interakcii, ktorú dostaneme náhradou diferenciálnych operátorov v pohybovej rovnici (neinteragujúcej častice) podľa vzťahov (11) sa niekedy hovorí ako o minimálnej interakcii.¹²⁵

8.8 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nabitá častica je vonkajšími väzbami nútená pohybovať sa ako rovinný rotátor (pozri príklad 10 ku 4. kapitole). Nájdite spektrum energie takejto sústavy ak sa nachádza v homogénnom magnetickom poli, ktoré má smer kolmý na rovinu rotátora.
2. Coulombovské elektrostatické pole možno opísať i pomocou potenciálov $\varphi = 0$, $\mathbf{A} = K \frac{\mathbf{r}}{r^3} t$. Prediskutujte formuláciu a riešenie úlohy „spektrum vodíka“. Nájdite súvis s obvyklým postupom. Ná v o d : využite kalibračnú invariantnosť.
3. Nájdite operátor rýchlosti $\hat{\mathbf{v}} = (v_1, v_2, v_3)$ bezspinovej častice v elektromagnetickom poli. Nájdite komutátory $[v_i, v_j]$.

¹²⁴ Postupy, opierajúce sa o princíp kalibračnej invariantnosti, viedli v posledných rokoch k podstatnému pokroku v chápaní dynamiky silných, slabých a elektromagnetických interakcií elementárnych častíc.

¹²⁵ Názov pochádza pravdepodobne z toho, že zámena typu (11) je „minimálna“ zmena, ktorú musíme urobiť v pohybovej rovnici, aby sme dostali kalibračne invariantnú pohybovú rovnicu.

4. Odvodte rovnicu kontinuity pre Schrödingerovu rovnicu bezspinovej častice vo vonkajšom elektromagnetickom poli. Ukážte, že hustota prúdu sa dá vyjadriť v tvare

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2}(\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi + (\hat{\mathbf{v}} \psi)^* \psi)$$

kde $\hat{\mathbf{v}}$ je operátor rýchlosti (pozri predchádzajúci príklad).

5. Aký tvar majú Ehrenfestove vety pre prípad bezspinovej častice v magnetickom poli. Porovnajte s klasickými rovnicami (vzťahom pre Lorentzovu silu).
6. Na základe predchádzajúceho príkladu ukážte, že v prípade homogénneho magnetického poľa sa stred vlnového balíka opisujúceho časticu pohybuje po klasickej trajektórii.

9 NESTACIONÁRNA PORUCHOVÁ METÓDA

9.1 ÚVOD

Typickou úlohou, ktorú rieši nestacionárna poruchová metóda, je interakcia atómu s pulzom žiarenia. Pred dopadom žiarenia je atóm v určitom, povedzme m -tom, stacionárnom stave a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou ho po prechode pulzu žiarenia nájdeme v k -tom stacionárnom stave. Stacionárne stavy atómu pred dopadom žiarenia i po prechode pulzu okolo atómu sú vlastnými stavmi hamiltoniánu H_0 . Interakcia žiarenia s atómom je opísaná „poruchou“ $H'(t)$ a celkový hamiltonián počas interakcie je

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (1)$$

Nestacionárna poruchová metóda je postupom pre určenie príslušného riešenia časovej Schrodingerovej rovnice s hamiltoniánom tvaru (1) v situáciách, keď člen $H'(t)$ možno považovať v istom zmysle za malú korekciu k H_0 .

9.2 FORMALIZMUS NESTACIONÁRNEJ PORUCHOVEJ METÓDY

Riešenie časovej Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H(t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

s hamiltoniánom (1.1) budeme hľadať v takom tvare, aby porucha $H'(t)$ mohla opisovať priamo odchýlky od riešenia časovej SchR v neprítomnosti poruchy. O rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H_0 \psi_0(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

už vieme, že jej riešenie možno písať všeobecne v tvare

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (3)$$

kde koeficienty a_n nezávisia od času a E_n , $\Phi_n(\mathbf{r})$ sú vlastné hodnoty a vlastné funkcie hamiltoniánu H_0 :

$$H_0 \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Nestacionárna poruchová metóda vychádza z toho, že riešenie rovnice (1) hľadáme v tvare

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (5)$$

pričom koeficienty $a_n(t)$ už môžu závisieť od času. Takýto postup je z matematického hľadiska umožnený tým, že funkcie $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ tvoria úplný systém a „každú“ funkciu $\psi(\mathbf{r}, t)$ v danom čase t môžeme rozložiť do radu

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n b_n(t) \Phi_n(\mathbf{r})$$

Hľadanie riešenia v tvare (5) má však tú výhodu, že za časovú závislosť koeficientov $a_n(t)$ je zodpovedná iba porucha: ak ju „vypneme“, prechádza časová SchR (2) na rovnicu (3) a koeficienty $a_n(t)$ prestanú závisieť od času.

Fyzikálna interpretácia (5) je tiež jednoduchá, výrazy

$$P_n(t) = |a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = |a_n(t)|^2 \quad (6)$$

odpovedajú pravdepodobnostiam nájsť v čase t sústavu v stave Φ_n .

Poznamenajme ešte, že zápis riešenia vo všeobecnom tvare (5) môžeme použiť vždy, teda aj vtedy, ak porucha nie je malá. Jedinou podmienkou možnosti zápisu riešenia v tvare (5) je úplnosť systému funkcií $\Phi_n(\mathbf{r})$, a tú predpokladáme. Ak však porucha nie je malá, rovnice pre koeficienty $a_n(t)$ nemožno riešiť jednoduchými poruchovými metódami. V prípade malej poruchy sú koeficienty $a_n(\mathbf{r})$ tiež vhodnými základnými pojmami pre fenomenologický opis sústavy. Ak napríklad uvažujeme atóm v poli elektromagnetickej vlny a v danom čase t platí $|a_0(t)|^2 = 0,9$; $|a_1(t)|^2 = 0,1$ potom hovoríme, že s pravdepodobnosťou 90 % sa atóm nachádza v základnom a s pravdepodobnosťou 10 % v prvom excitovanom stave.

Budeme teraz hľadať riešenie rovnice (1) spĺňajúce začiatočnú podmienku

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

V ďalšom, pre jednoduchosť, zvolíme $t_0 = 0$. Treba si pritom uvedomiť, že funkcie $\Phi_n(\mathbf{r})$ tvoria úplný systém, preto funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ udávajúcu začiatočný stav možno rozvinúť do radu

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Znamená to, že koeficienty $a_n(t)$ v rozvoji (5) musia spĺňať začiatočnú podmienku

$$a_n(t=0) = c_n \quad (9)$$

Rovnice pre $a_n(t)$ nájdeme ľahko, ak rozvoj (5) dosadíme do SchR (1). Potom štandardným spôsobom vynásobíme získanú rovnicu funkciou $\Phi_k^*(\mathbf{r}, t)$, preintegrujeme cez \mathbf{r} , využijeme ortonormovanosť systému $\{\Phi_n\}$ a dostaneme

$$\dot{a}_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n H'_{kn}(t) a_n(t) e^{i\omega_{kn} t}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (10)$$

kde bodka označuje deriváciu podľa času, pričom

$$\begin{aligned} \omega_{kn} &= (E_k - E_n)/\hbar \\ H'_{kn}(t) &= \int \Phi_k^*(\mathbf{r}) H'(t) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (11)$$

Doteraz sme neurobili žiadne priblíženia a systém rovníc (10) je úplne ekvivalentný pôvodnej SchR (1).

Systém rovníc (10) spolu so začiatočnými podmienkami (9) je, ako sa ľahko možno presvedčiť, ekvivalentný systému integrálnych rovníc

$$a_k(t) = c_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') a_m(t') e^{i\omega_{km} t'} dt' \quad (12)$$

Pri riešení systému (12) poruchovou metódou postupujeme podobne ako v šiestej kapitole. Namiesto (1.1) zapíšeme

$$H = H_0 + \lambda H'(t) \quad (13)$$

a rozvineme koeficienty $a_k(t)$ do radu

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \lambda a_k^{(1)}(t) + \lambda^2 a_k^{(2)}(t) + \dots \quad (14)$$

Tento rad dosadíme do (12) (kde namiesto H'_{km} bude teraz $\lambda H'_{km}$), porovnáme koeficienty pri jednotlivých mocninách λ a po skončení výpočtu položíme $\lambda = 1$. S využitím (9) potom dostaneme

$$\begin{aligned} a_k^{(0)}(t) &= c_k \\ a_k^{(n)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') a_m^{(n-1)}(t') e^{i\omega_{km} t'} dt' \end{aligned} \quad (15)$$

Koeficient $a_k^{(0)}(t)$ nezávisí od času a argument t môžeme vynechať. Ak je porucha „slabá“, stačí sa často obmedziť len na prvý koeficient $a_k^{(1)}(t)$ a zanedbať vyššie priblíženia. Dostaneme vyjadrenie

$$a_k(t) = c_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') c_m e^{i\omega_{km}t'} dt' \quad (16)$$

9.3 PRECHODY POD VPLYVOM PERIODICKEJ PORUCHY

Z praktického hľadiska dôležitý prípad poruchy predstavuje hamiltonián

$$H'(t) = H'(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (1)$$

kde H' na pravej strane už nezávisí od času. Aby sme situáciu zbytočne nekomplikovali, budeme najprv skúmať sústavu, ktorej neporušený hamiltonián má len dva vlastné stavy Φ_0, Φ_1 , prislúchajúce k vlastným hodnotám E_0, E_1 . Predpokladáme, že sústava sa v čase $t_0 = 0$ nachádza v stave Φ_0 a zaujímame sa o pravdepodobnosť prechodu za čas t do stavu Φ_1 . Podľa formalizmu z predchádzajúceho článku bude amplitúda pravdepodobnosti hľadaného prechodu v prvom ráde poruchovej teórie daná vzťahom (2.16)

$$a_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{10}(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) e^{i\omega_{10}t'} dt' \quad (2)$$

kde

$$\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar \quad (3)$$

je bohrovská kruhová frekvencia prechodu $\Phi_0 \leftrightarrow \Phi_1$.

Integrácia v (2) je triviálna:

$$a_1(t) = \frac{-1}{\hbar} H'_{10} \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_{10}} (e^{i(\omega + \omega_{10})t} - 1) + \frac{1}{-\omega + \omega_{10}} (e^{i(-\omega + \omega_{10})t} - 1) \right\} \quad (4)$$

Skôr, ako budeme formálne pokračovať ďalej, všimneme si kvalitatívny charakter riešenia. Ak sústava má prejsť zo základného do excitovaného stavu, musí pohltiť energiu $\Delta E = E_1 - E_0$. Podľa elementárnej kvantovej mechaniky (v analógii s Bohrovými postulátmi) očakávame, že to bude možné vtedy, ak frekvencia poruchy ω bude rovná bohrovskej frekvencii ω_{10} . Výraz (4) by preto mal mať nejakú výraznú štruktúru v okolí bodu $\omega = \omega_{10}$. Naozaj je to tak. Druhý z členov v zložených zátvorkách má pre malé $\Delta\omega = \omega_{10} - \omega$ tvar

$$\frac{1}{\Delta\omega} (e^{i\Delta\omega t} - 1) \approx \frac{1}{\Delta\omega} (1 - i\Delta\omega t - 1) = -it$$

teda rastie lineárne s časom, kým prvý člen pri ľubovoľnom ω je rýchlo oscilujúcou a v absolútnej hodnote ohraničenou funkciou času. V okolí $\omega_{10} \approx \omega$, kde očakávame prechody $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$, druhý člen zjavne dominuje, obmedzíme sa preto v ďalšej diskusii iba naň. V tomto priblížení pre pravdepodobnosť prechodu za čas t dostaneme

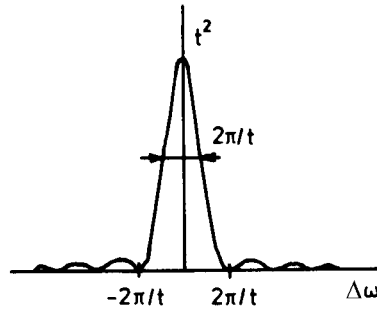
$$P_{10}(t) = |a_1(t)|^2 = \frac{|H'_{10}|^2 \sin^2[(\omega_{10} - \omega)t/2]}{\hbar^2 [(\omega_{10} - \omega)/2]^2} \quad (5)$$

Všimnime si bližšie úlohu faktoru

$$f(\Delta\omega, t) = \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{(\Delta\omega/2)^2} \quad (6)$$

vo vzťahu (5), ktorý je ako funkcia $\Delta\omega$ pri konštantnom t znázornený na obr. 9.1. Na obrázku si treba všimnúť ostré maximum v okolí $\Delta\omega = 0$. S rastúcim t výška tohto maxima rastie ako t^2 a jeho charakteristická šírka klesá ako $2\pi/t$. Znamená to, že významné prechody $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ nastanú, iba ak platí

$$|\Delta\omega| = \left| \frac{E_1 - E_0}{\hbar} - \omega \right| \leq \frac{2\pi}{t} \quad (7)$$



Obr. 9.1

Vidno teda, že bohrovská podmienka prechodu $\omega = \omega_{10}$ je splnená len s presnosťou $|\Delta\omega| < 2\pi/t$. Ak $|\Delta\omega| \ll 2\pi/t$, potom pre pravdepodobnosť prechodu dostaneme približenie

$$P_{10}(t) = \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} t^2 \quad (8)$$

Tento výsledok bol získaný v prvom ráde poruchovej metódy, ktorú ale možno použiť len vtedy, ak koeficient $a_1(t)$ je malý v porovnaní s jednotkou. Preto výsledok (8) môže platiť len pre také hodnoty t , pre ktoré

$$|H'_{10}|^2 t^2 / \hbar^2 \ll 1$$

a teda

$$t \ll \hbar / |H'_{10}| \quad (9)$$

Pri odvodení (8) sme v (4) zanedbali prvý člen na pravej strane v porovnaní s druhým. Veľkosť prvého člena je rádovo $1/\omega_{10}$ (pri $\omega \approx \omega_{10}$) a veľkosť druhého člena je rádovo t . Preto (8) platí len vtedy, ak $1/\omega_{10} \ll t$. Takto dostaneme pre platnosť (8) podmienku

$$\hbar / (E_1 - E_0) \ll t \ll \hbar / |H'_{10}| \quad (10)$$

Ak má vôbec existovať nejaký čas t , pri ktorom sú približenia vedúce k (8) použiteľné, potom z (10) dostaneme podmienku

$$|H'_{10}| \ll E_1 - E_0 \quad (11)$$

Porucha teda musí byť „dostatočne malá“. Podrobnejšie sa s otázkami použiteľnosti poruchovej metódy nebudeme zaoberať.

V aplikáciách sa s ideálnou situáciou, s ktorou sme sa doteraz zaoberali, nestretávame. Uvedme dva príklady realistickejších situácií.

Pulz žiarenia dopadá na atóm v základnom stave a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou prejde atóm do istého excitovaného stavu. Vzhľadom na to, že pulz žiarenia je reprezentovaný istým vlnovým balíkom s konečnými rozmermi, je približenie monochromatickej vlny nerealistické. Musíme teda zovšeobecniť predchádzajúce úvahy na prípad poruchy $H'(t)$, ktorá nie je monochromatická. S touto otázkou sa budeme podrobne zaoberať v nasledujúcom článku.

1. Pulz žiarenia dopadá na atóm v základnom stave a zaujímame sa o pravdepodobnosť ionizácie atómu. Vyletujúci elektrón je registrovaný detektorom, ktorý určí energiu elektrónu s presnosťou ΔE a priestorový uhol, pod ktorým elektrón vyletí, s presnosťou $\Delta\Omega$. Nezaujímame sa teda o prechod z daného začiatočného stavu do jediného koncového stavu, ale o prechod do istej skupiny stavov. V tomto prípade odchýlky poruchy od monochromatickosti obvykle nie sú podstatné, preto predchádzajúci postup môžeme použiť len s malými modifikáciami. Jednotlivé koncové stavy označíme indexom k a skupinu koncových stavov, špecifikovanú detektorom, označíme S . Pravdepodobnosť prechodu zo začiatočného stavu 0 do skupiny stavov S je daná súčtom¹²⁶ výrazov typu (5).

¹²⁶ Aby sme úvahy zbytočne nekomplikovali, budeme predpokladať, že koncové stavy elektrónu sú opísané rovinnými vlnami normovanými na konečný objem, takže energetické spektrum je diskrétné.

Dostaneme tak

$$P_{S_0}(t) = \sum_{k \in S} \frac{|H'_{10}|^2 \sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{\hbar^2 [(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} \quad (12)$$

kde

$$\omega_{k_0} = (E_k - E_0)/\hbar$$

V sume (12) budú prispievať najmä stavy, pre ktoré hodnota $\omega_{k_0} - \omega$ leží v oblasti maxima funkcie $f(\Delta\omega, t)$. Ak rozdiely energií uvažovaných koncových stavov sú oveľa menšie ako $2\pi\hbar/t$, potom v oblasti spomínaného maxima leží veľmi veľa uvažovaných koncových stavov a vo výraze (12) je možné sumáciu nahradiť integráciou.

Ak označíme $\rho(E_k)dE_k$ počet stavov s energiou v intervale $(E_k, E_k + dE_k)$, dostaneme

$$P_{S_0}(t) = \int_S dE_k \rho(E_k) \frac{|H'_{k_0}|^2 \sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{\hbar^2 [(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} \quad (13)$$

Vo vzťahu (13) sme symbolicky označili, že integrujeme cez energie stavov uvažovanej skupiny S . Označme energiu, pri ktorej nadobúda funkcia $f(\Delta\omega, t)$ vo vzťahu (13) maximum ako E_1 , teda

$$E_1 = E_0 + \hbar\omega \quad (14)$$

Predpokladajme, že energia E_1 spadá do intervalu energií, cez ktoré v (13) integrujeme. Ak čas t je dostatočne veľký, potom maximum funkcie $f(\Delta\omega, t)$ je veľmi ostré. Výraz $\rho(E_k)|H'_{10}|^2$ sa potom (ako funkcia energie) mení v oblasti tohto maxima obvykle len veľmi málo. Pri výpočte integrálu ho preto možno nahradiť konštantou – napríklad jeho hodnotou v bode E_1 a zostávajúci integrál sa potom dá metódami funkcií komplexnej premennej vypočítať explicitne.¹²⁷ Dostaneme tak:

$$\begin{aligned} P_{S_0}(t) &= \rho(E_1) \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} \int_S dE_k \frac{\sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} = \\ &= \rho(E_1) \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} 2\pi t \hbar = \frac{2\pi t}{\hbar} |H'_{10}|^2 \rho(E_1) \end{aligned} \quad (15)$$

Naopak, ak energia E_1 neleží v intervale, cez ktorý v (13) integrujeme, môžeme v našom priblížení položiť integrál rovný nule.

Všimnime si, že presne rovnaké výsledky dostaneme, ak vo vzťahu (13) v podintegrálnom výraze nahradíme

$$\frac{\sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} \rightarrow 2\pi t \delta(\omega_{k_0} - \omega) \quad (16)$$

Zhrňme teda: pravdepodobnosť prechodu do niektorého zo stavov v okolí hladiny E_1 , pre ktorú je (s presnosťou $2\pi\hbar/t$) splnený vzťah (14), je daná vzťahom (15); rastie teda lineárne s časom. Zavádzame preto užitočný pojem pravdepodobnosti prechodu za jednotku času, pre ktorú platí

$$W_{10}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{10}|^2 \rho(E_1) \quad (17)$$

pričom $\rho(E_1)$ má význam hustoty stavov v E -priestore v okolí hladiny E_1 .

Niekedy sa kvôli jednoduchosti zvykne formálne hovoriť i v prípade kvázispojitého alebo spojitého spektra o pravdepodobnosti prechodu za jednotku času do konkrétneho stavu a používa sa formálny výraz (využíva sa vzťah (16))

$$W_{k_0}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{10}|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \quad (18)$$

¹²⁷ Potrebujeme iba výsledok $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$

Samozrejme, tento vzťah má význam len po preintegrovaní typu

$$W_{10}(t) = \int_S dE_k \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{k0}|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \rho(E_k)$$

čím dostaneme vzťah (17). Vzťah (18) má mimoriadne časté použitie v aplikáciách. Niekedy sa nazýva „Fermiho zlaté pravidlo“.



Obr. 9.2

V doterajších úvahách v tomto článku sme sa zaoberali prechodom sústavy z nižšej energetickej hladiny na vyššiu. Celkom analogické úvahy by sme však mohli vykonať i pre prechod sústavy z vyššej hladiny na nižšiu. Po formálnej stránke by bol rozdiel iba v tom, že za také prechody by sa ukázal „zodpovedný“ prvý člen v hamiltoniáne (1). Analóg vzťahu (18) by zodpovedal napríklad situácii, v ktorej uvažujeme prechod elektrónu v tuhej látke z vyššieho energetického pásu do nižšieho. Pásový charakter spektra (obr. 9.2) zapríčiňuje, že koncový stav elektrónu nemôže byť experimentálne jednoznačne vymedzený. Pôjde vždy o prechod do nejakej skupiny stavov, pre ktorý by sme dostali formálny vzťah

$$W_{k1}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{k1}|^2 \delta(E_k - E_1 - \hbar\omega) \quad (19)$$

Fyzikálna interpretácia vzťahov (18) a (19) sa priam „ponúka“. V prípade (18) ide o absorpciu energetického kvanta $\hbar\omega$, kým v prípade (19) ide o jeho stimulovanú emisiu.

Pravda, takáto interpretácia nezodpovedá použitému formalizmu. Vonkajšia porucha je v tomto prístupe opísaná klasicky. Práve vzťahy (18) a (19) poukazujú na nedôslednosť takého prístupu a naznačujú potrebu použiť kvantový opis aj pre „vonkajší činiteľ“ (napríklad pre elektromagnetické pole).

9.4 STIMULOVANÁ EMISIA A ABSORPCIA

V tomto článku uvidíme kváziklasický výpočet pravdepodobnosti emisie a absorpcie fotónu pod vplyvom vonkajšej elektromagnetickej vlny. Aby sa zdôraznil rozdiel od samovoľného (spontánneho) procesu (ako je spontánny prechod z excitovanej hladiny na nižšiu emisiou fotónu), budeme hovoriť o stimulovanej emisii resp. absorpcii. Fyzikálna podstata problému bola už vlastne objasnená v predchádzajúcom článku.

Pravdepodobnosť stimulovaného prechodu bude zrejme úmerná intenzite dopadajúcej vlny a dobe pôsobenia. Skúmanú sústavu potom lepšie charakterizuje príslušný koeficient úmernosti, ktorý má význam pravdepodobnosti prechodu za jednotku času pri jednotkovej intenzite stimulujúcej vlny. V ďalšom si preto ukážeme, ako príslušný prepočet urobiť.

V realistickej situácii sa väčšinou jedná o prechody medzi diskretnými hladinami (teda nie medzi hladinami kvázispojitého spektra).

V tomto prípade musíme počítať s realistickou elektromagnetickou vlnou s istým spektrálnym rozložením (hoci úzkym).

Napriek tomu začneme so skúmaním monochromatickej poruchy, aby sme si jednoducho ukázali, že v prvom priblížení stačí uvažovať vplyv elektrickej zložky. Potom nájdeme pravdepodobnosť prechodu v realistickom prípade vlny so spektrálnym rozložením a nakoniec urobíme prepočet na jednotkovú intenzitu.

Majme teda monochromatickú vlnu, ktorej zodpovedá intenzita elektrického poľa opísaná vzťahom

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E\mathbf{e}[\exp(i\omega t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + \exp(-i\omega t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})] \quad (1)$$

kde \mathbf{e} je jednotkový vektor polarizácie.

Obmedzme sa pre jednoduchosť na prípad, keď vlnová dĺžka žiarenia je oveľa väčšia ako typický rozmer atómu. Pre viditeľné svetlo je táto podmienka splnená veľmi dobre, typická vlnová dĺžka je $5 \cdot 10^{-7}$ m, zatiaľ čo rozmery atómov sú rádovo 10^{-10} m. V takomto prípade sa intenzita poľa v rámci atómových vzdialeností mení len veľmi málo, a preto priestorovú závislosť vo vzťahu (1) možno zanedbať. Stačí uvažovať

$$\mathbf{E}(t) = E\mathbf{e}[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)] \quad (2)$$

Priestorová hustota energie elektrického poľa (2) ustrednená v čase je¹²⁸

$$w = \frac{\overline{\mathbf{E}^2(t)} \varepsilon_0}{2} = E^2 \varepsilon_0 \quad (3)$$

V prípade rovinatej elektromagnetickej vlny je hustota energie pripadajúca na magnetické pole rovnaká a rovná (ak magnetické pole zapíšeme v tvare analogickom ku (2))

$$w = \frac{B^2}{\mu_0} \quad (4)$$

Hustota toku energie (množstvo energie pretečené jednotkovou plochou za jednotku času) zodpovedajúca uvažovanej elektromagnetickej vlny je teda

$$P = 2wc = 2E^2 \varepsilon_0 c \quad (5)$$

Zo vzťahov (2) a (3) je tiež zrejmé, že vplyv magnetického poľa môžeme v našom prípade zanedbať. Vidno to z jednoduchej klasickej úvahy. Na elektrón s nábojom q pôsobí elektrické pole silou

$$qE$$

a magnetické pole silou

$$qvB$$

$$\varepsilon_0 E^2 = \frac{B^2}{\mu_0}$$

kde v je typická rýchlosť elektrónu. Z (2) – (4) však dostávame

$$B = E\sqrt{\varepsilon_0\mu_0} = E/c$$

a teda pre silu od magnetického poľa dostaneme

$$qEv/c \ll qE$$

v prípade nerelativistických rýchlostí.

Zhrňme teda, čo sme doteraz dostali.

Vplyv monochromatickej rovinatej vlny o kruhovej frekvencii ω , ktorej zodpovedá hustota prúdu energie (4), sa dá v uvažovanom priblížení nahradiť vplyvom periodického elektrického poľa (2).

Elektrické pole (2) môžeme vyjadriť pomocou skalárneho potenciálu

$$\mathbf{E}(t) = -\nabla\varphi(t), \quad \text{kde} \quad \varphi(t) = -\mathbf{r}\cdot\mathbf{e}E(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

¹²⁸ Použili sme známy vzťah **Chyba! Objekty sa nedajú vytvoriť úpravami kódov polí.**

Pretože interakciu s magnetickým poľom zanedbávame, môžeme vektorový potenciál dať rovný nule. Podľa predchádzajúcej kapitoly môžeme teda interakciu s dopadajúcou elektromagnetickou vlnou v použitom priblížení opísať poruchovým hamiltoniánom

$$H'(t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}qE(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (6)$$

To je hamiltonián typu (3.1), s ktorým sme sa podrobne zaoberali v predchádzajúcom článku. V praktických prípadoch však dopadajúca vlna nebýva dostatočne monochromatická, aby sme mohli priamo použiť postupy z predchádzajúceho článku. Realistickejšiemu prípadu odpovedá skôr hamiltonián

$$H'(t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}qE(t) \quad (7)$$

kde funkcia $E(t)$ opisujúca časový priebeh póla je „približne monochromatická“. Prakticky to znamená, že ak ju vyjadríme v tvare Fourierovho integrálu

$$E(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (8)$$

potom jej Fourierov obraz $\tilde{E}(\omega)$ má výrazné maximum v okolí istej kruhovej frekvencie ω_0 . Poznamenajme, že vhodným výberom začiatočného okamihu $t = 0$ možno vždy dosiahnuť, aby funkcia $\tilde{E}(\omega)$ bola reálna, čo v ďalšom budeme predpokladať.¹²⁹ Pretože funkcia $E(t)$ je reálna, platí $\tilde{E}(\omega) = \tilde{E}(-\omega)$.

Aby sme technicky výpočet ešte zjednodušili, predpokladajme, že pole bolo zapnuté iba po dobu T , t. j.

$$E(t) = 0 \quad \text{pre } t < 0 \quad \text{resp. } t > T \quad (9)$$

V prípade, že čas T je podstatne väčší ako perióda zodpovedajúca frekvencii ω_0 , tento dodatočný predpoklad neovplyvní podstatne charakter spektrálneho rozloženia funkcie $E(t)$.

Zaujímame sa teraz pre konkrétnosť o absorpciu, t. j. prechod medzi hladinami $m \rightarrow k$, kde $E_k > E_m$. Podľa všeobecného formalizmu z článku 9.2 bude amplitúda pravdepodobnosti prechodu pod vplyvom uvažovaného pulzu daná vzťahom (v prvom priblížení)

$$a_{km} = \frac{-1}{i\hbar} \int_0^T H'_{km}(t) e^{i\omega_{km} t} dt = -\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}}{i\hbar} \int_0^T E(t) e^{i\omega_{km} t} dt \quad (10)$$

kde

$$\mathbf{d}_{km} = \int q\Phi_n^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Phi_m(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (11)$$

je elektrický dipólový moment prechodu. Vzhľadom na predpoklad (9) môžeme písať

$$a_{km} = \frac{-1}{i\hbar} \mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\omega_{km} t} dt \quad (12)$$

Z vlastností Fourierových integrálov je zrejmé, že integrál v (12) je práve rovný $\tilde{E}(\omega_{km})$, ak spektrálny rozklad píšeme v tvare danom rovnicou (8). V tomto prípade totiž platí

$$\tilde{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\omega t} dt \quad (13)$$

Vidíme teda, že dostávame, čo sme čakali: stimulovaná absorpcia je možná iba vtedy, ak v dopadajúcej vlně je nenulová komponenta, zodpovedajúca kruhovej frekvencii ω_{km} danej vzťahom

$$\hbar\omega_{km} = E_k - E_m \quad (14)$$

Pravdepodobnosť absorpcie pod vplyvom uvažovaného δ -pulzu nájdeme ľahko

$$P_{km} = |a_{km}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}|^2 \tilde{E}^2(\omega_{km}) \quad (15)$$

¹²⁹ Poznamenajme, že v literatúre sa používajú často iné konvencie vo vyjadrení Fourierovho integrálu, lišiace sa od (8) faktormi typu $2, 2\pi$ a pod. V technickej praxi býva tiež zvykom integrovať len cez kladné frekvencie. Ak využijeme vzťah $\tilde{E}(\omega) = \tilde{E}(-\omega)$, dostaneme namiesto (8) vyjadrenie $E(t) = 1/\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(\omega) \cos \omega t d\omega$. Rozličné konvencie sa potom prejavajú aj v odlišnej definícii spektrálnej hustoty prúdu energie a tým aj vo výsledných koeficientoch stimulovanej emisie a absorpcie.

Koeficient P_{km} udáva pravdepodobnosť prechodu za celý čas trvania pulzu. Často však treba poznať pravdepodobnosť prechodu za jednotku času pri jednotkovej spektrálnej hustote prúdu energie žiarenia dopadajúceho na atóm. Spresnenie „spektrálny“ je tu preto, že pre prechod z hladiny E_k sú závažné iba zložky žiarenia s kruhovou frekvenciou $\omega = (E_k - E_m)/\hbar$ a spektrálna hustota prúdu je hustota pripadajúca na jednotkový interval $\Delta\omega$. Schematicky môžeme pre spektrálnu hustotu prúdu energie $\rho(\omega)$ písať

$$\rho(\omega) = \frac{\Delta W(\omega)}{T\Delta\omega} \quad (16)$$

kde T je čas trvania pulzu a ΔW je energia žiarenia z intervalu $(\omega, \omega + \Delta\omega)$, pripadajúca na celý pulz trvajúci T a na jednotkovú plochu kolmú na smer vlny.

Koeficientom absorpcie potom nazveme pravdepodobnosť prechodu za jednotku času pri jednotkovej spektrálnej hustote prúdu energie žiarenia, teda výraz

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{P_{km}}{T\rho(\omega_{km})} \quad (17)$$

Ďalší výpočet bude mať trochu technický charakter, preto si najskôr uveďme jednoduchú rozmerovú úvahu. Očakávame, že spektrálna intenzita bude úmerná kvadrátu $\tilde{E}(\omega)$. Pretože rozmer intenzity podľa $E(\omega)$ je Vm^{-1} , podľa (13) je rozmer $[\tilde{E}(\omega)] = \text{Vs m}^{-1}$. Bude teda

$$[\tilde{E}^2(\omega)] = \text{V}^2 \text{s}^2 \text{m}^{-2}$$

Podľa (16) rozmer¹³⁰

$$T\rho(\omega) = \text{J s m}^{-2} = \text{V}^2 \text{F s m}^{-2}$$

Ak teda čakáme $\rho(\omega)T = \text{konšt } \tilde{E}^2(\omega)$ musí mať uvedená konštanta rozmer $\text{Fs}^{-1} = \text{F m}^{-1} \text{m}^+ \text{s}^{-1}$ čo je práve rozmer konštanty $\varepsilon_0 c$ ¹³¹. Bude teda $\rho(\omega)T \approx \varepsilon_0 c \tilde{E}^2(\omega)$ a podľa (15) a (17) dostaneme

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 \varepsilon_0 c} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}|^2$$

kde sme už uviedli aj správnu bezrozmernú konštantu 2π , ktorú, pravda, z rozmerových úvah nemôžeme odvodiť.

Prejdime teraz k technickým podrobnostiam výpočtu spektrálnej intenzity žiarenia.

Množstvo energie, ktoré pretečie za čas T jednotkovou plochou kolmou na smer šírenia vlny, je

$$W = c\varepsilon_0 \int_0^T E^2(t) dt$$

Ak sem dosadíme vyjadrenie $E(t)$ podľa (8) a pri výpočte využijeme vzťah

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} d\omega = 2\pi\delta(\omega)$$

ktorý už poznáme z kap. 7, postupne dostaneme

$$\begin{aligned} W(t) &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} E^2(t) dt = \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \tilde{E}(\omega) e^{-i\omega t} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega') e^{+i\omega' t} = \\ &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega) \tilde{E}(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-it(\omega - \omega')} = \\ &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega) \tilde{E}(\omega') 2\pi\delta(\omega - \omega') = \frac{\varepsilon_0 c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{E}^2(\omega) \end{aligned} \quad (19)$$

Pritom sme opäť podľa predpokladu (9) integrovali v čase cez celý interval $(-\infty, \infty)$, hoci faktická doba trvania pulzu je len $(0, T)$.

¹³⁰ Pripomeňme si, že energia kondenzátora je $CU^2/2$, preto $J = V^2 F$.

¹³¹ Rozmer ε_0 : Uvažujme doskový kondenzátor s plochami dosák S navzájom vzdialenými o d . Gaussova veta dáva ($N = Q/\varepsilon_0$) $ES = Q/\varepsilon_0$, $E = Q/(\varepsilon_0 S)$. Potenciál $U = Ed = Qd/(\varepsilon_0 S)$. Kapacita $C = Q/U = \varepsilon_0 S/d \Rightarrow [\varepsilon_0] = \text{Fm}^{-1}$.

Spektrálnu hustotu prúdu energie žiarenia $\rho(\omega)$ definujeme vzťahom¹³²

$$\frac{W}{T} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) d\omega \quad (20)$$

kde T je čas trvania pulzu. Porovnaním (19) a (20) vidno, že platí

$$T\rho(\omega) = \frac{\varepsilon_0 c}{2\pi} \tilde{E}^2(\omega)$$

Teraz prejdeme od vyjadrenia pravdepodobnosti prechodu P_{km} daného vzťahom (15), ku koeficientu absorpcie B_{km}^{abs} definovanému v (18) a dostaneme

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 \varepsilon_0 c} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}|^2 \quad (21)$$

Pripomeňme ešte raz, že niekedy sa používajú definície $\rho(\omega)$ odlišné faktorom 2 alebo 2π od definície (20). Potom sa od vyjadrenia (21) príslušne líši aj vyjadrenie koeficientu absorpcie.

Priblíženiu (21) sa hovorí dipólové priblíženie, lebo vo vzťahu (21) sa objavuje elektrický dipólový moment prechodu. Svojou povahou (uhlovým rozložením, polarizáciou) emitované žiarenie zodpovedá žiareniu elektrického dipólu. Tieto otázky však bližšie rozoberať nebudeme. Pripomeňme si len, že toto priblíženie sme dostali ako dôsledok dlhovlnného priblíženia (prechod od (1) k (2)) a zanedbania efektov vyšších rádov vo v/c . V prípade, že dipólový elektrický moment (11) je nulový, potom elektrický dipólový prechod nie je možný. V takom prípade by prvé nenulové priblíženie k pravdepodobnosti prechodu mohlo byť dané až (tu zanedbaným) vyšším multipólovým (resp. magnetickým) prechodom.

Otázkou, kedy je maticový element typu (11) nenulový, sa tu podrobnejšie zaoberať nebudeme. O podmienkach na kvantové čísla stavov m, k , ktoré musia byť splnené, aby prechod typu (21) existoval, sa hovorí ako o výberových pravidlách. Ako ilustráciu uveďme výberové pravidlo, ktoré je zrejme bez väčšieho počítania: Ak by funkcie Φ_k aj Φ_m v (11) mali rovnakú paritu, potom by integrál (11) bol zrejme nulový (vzhľadom na faktor r by totiž celá podintegrálna funkcia bola nepárna). Elektrické dipólové prechody sú teda možné iba medzi stavmi, ktorých vlnové funkcie majú rôznu paritu (t. j. jedna musí byť párna a druhá nepárna).

V atóme vodíka parita vlnovej funkcie je daná orbitálnym kvantovým číslom l . Platí totiž

$$\psi_{nlm}(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Platí teda výberové pravidlo: Elektrické dipólové prechody „sú zakázané“ v atóme vodíka medzi stavmi, ktorých orbitálne kvantové čísla sa líšia o párne číslo. Podrobnejšou analýzou možno vcelku jednoducho nájsť oveľa silnejšie výberové pravidlá. V atóme vodíka sú napríklad možné elektrické dipólové prechody iba medzi stavmi, ktorých kvantové čísla sa líšia o

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0 \quad \text{alebo} \quad \pm 1$$

Výberové pravidlá sa získajú ľahko pomocou postupov, s ktorými sa zoznámime v kapitole o momente hybnosti. Tieto postupy tiež vedú k jasnému fyzikálnemu pohľadu na povahu výberových pravidiel. Zaoberať sa s nimi už tu by bolo predčasné. Poznamenajme preto len to, že \mathbf{d}_{km} dané výrazom (11) obsahuje výraz

$$\int Y_{l'm'}^*(\mathcal{G}, \varphi) \mathbf{r} Y_{lm}(\mathcal{G}, \varphi) d\Omega \quad (22)$$

kde $Y_{l'm'}$ sa týka stavu „ k “ a Y_{lm} stavu „ m “. Jednotlivé zložky polohového vektora, t. j. x, y, z môžeme vyjadriť pomocou guľových funkcií $Y_{\lambda\mu}$ a absolútnej hodnoty polohového vektora. Výrazy typu (22) potom budú špeciálnymi prípadmi všeobecných výrazov

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{\lambda\mu} Y_{lm} d\Omega \quad (23)$$

a formalizmus momentu hybnosti ukazuje bez komplikovaných výpočtov, čomu sa takéto výrazy rovnajú.

¹³² Porovnaj so (16)

9.5 VZŤAH NEURČITOSTI PRE ENERGIU A ČAS

V predchádzajúcej diskusii sme videli, že v dôsledku nestacionárnej poruchy „zapnutej“ po dobu Δt sústava môže prejsť z jedného stacionárneho stavu (zodpovedajúceho neporušenému hamiltoniánu) do iného, pričom presnosť ΔE , s akou je určená energia tohto stavu, je približne daná vzťahom (porovnaj (3.7))

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar \quad (1)$$

Vzťah (1) pripomína vzťah neurčitosti a skutočne sa ukazuje, že existujú preň „hlbšie dôvody“, a teda nie je to iba náhodná zvláštnosť typická pre poruchovú metódu.

Na rozdiel od vzťahu neurčitosti pre veličiny x a p_x vo vzťahu (1) vystupujúce veličiny energia E a čas t nie sú rovnocenné vo formalizme kvantovej mechaniky. Energia je fyzikálna veličina v obvyklom zmysle (t. j. zodpovedá jej určitý operátor – hamiltonián), zatiaľ čo čas vystupuje vo formalizme nie ako veličina, ale ako parameter v Schrödingerovej rovnici. Formálne „odvodenie“ vzťahu (1) naráža na problémy¹³³ rovnako ako aj rigorózná formulácia vzťahu neurčitosti typu (1).¹³⁴ Nebudeme sa preto ani my pokúšať o rigoróznejšie formulácie, namiesto toho uveďme niekoľko príkladov.

Príklad 1. Ako názornú ilustráciu nájdeme Fourierov obraz funkcie

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pre } t < 0 \\ e^{i\omega_0 t} & \text{pre } 0 < t < \tau \\ 0 & \text{pre } t > \tau \end{cases}$$

(máme teda „monochromatické“ kmity „zapnuté“ po dobu τ). Funkciu $f(t)$ možno vyjadriť v tvare

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

kde

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = \int_0^{\tau} e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} \cdot [e^{i(\omega_0 - \omega)\tau} - 1]$$

Pre druhú mocninu fourierovskej amplitúdy potom platí

$$|\tilde{f}(\omega)|^2 = \frac{1}{\left[\frac{\omega_0 - \omega}{2}\right]} \sin^2 \left[\frac{\omega_0 - \omega}{2} \tau \right]$$

a to je presne tvar funkcie, s ktorým sme sa už stretli v súvislosti so vzťahom (3.7). Vidíme teda, že v spektrálnom rozklade funkcie $f(t)$ sa vyskytujú najmä frekvencie z intervalu $\Delta\omega$ z okolia ω_0 , pričom platí (rádovo)

$$\Delta\omega \cdot \tau \sim 1$$

kde τ je doba zapnutia.

Príklad 2. Uvažujme sústavu, ktorá sa môže nachádzať v dvoch stacionárnych stavoch ψ_1 a ψ_2 s energiami E_1 a E_2 . Uvažujme teraz superpozíciu

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(\mathbf{r}) e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(\mathbf{r}) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

Hustota pravdepodobnosti

$$P_1(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, t) e^{-iE_1 t/\hbar}|^2 = |\psi_1(\mathbf{r})|^2$$

¹³³ Formálne odvodenie vzťahu typu (1) chápaného v istom zúženom zmysle podáme v kapitole 10.

¹³⁴ Pozri napr. diskusiu v článku Y. Aharonov – D. Bohm: Physical Review, 122, 1949 (1961).

resp.

$$P_2(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, t)e^{-iE_2t/\hbar}|^2 = |\psi_2(\mathbf{r})|^2$$

by bola stacionárna (nezávislá od času) v prípade, že by sa sústava nachádzala v niektorom zo stacionárnych stavov ψ_1, ψ_2 . V stave $\psi(\mathbf{r}, t)$ však hustota pravdepodobnosti bude

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2} |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + \text{Re}\{\psi_1^* \psi_2 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}\}$$

Táto pravdepodobnosť osciluje medzi dvoma hodnotami s periódou

$$\tau = \frac{\hbar}{2\pi|E_1 - E_2|}$$

Čas τ predstavuje istú charakteristickú dobu časových zmien v sústave. Platí teda rádovo

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

čo môžeme prečítať ako: charakteristická doba zmien prebiehajúcich v sústave, násobená neurčitosťou energie sústavy je úmerná Planckovej konštante.

*Príklad 3.*¹³⁵ Zaoberali sme sa prechodmi medzi hladinami v dôsledku vonkajšej poruchy (stimulovanou emisiou a absorpciou). V realistickom prípade je však možný i spontánny prechod z excitovanej hladiny na nižšiu hladinu spojený s tzv. spontánnou emisiou. Vyššie hladiny, ktoré sa nám javili ako stacionárne, sú v skutočnosti iba kvázistacionárne – s istou pravdepodobnosťou prechádzajú emisiou do nižších stavov. Z formalizmu kvantovej teórie možno dostať spontánne prechody až vtedy, keď do hamiltoniánu zahrnieme interakciu skúmanej sústavy s elektromagnetickým poľom, ktoré však už nechápeme ako klasické (vonkajšie) pole, ale považujeme ho tiež za kvantovanú sústavu. Pravdepodobnosť spontánneho prechodu je najvhodnejšie charakterizovať pomocou doby života¹³⁶ τ , ktorá je definovaná tak, aby platilo: ak sa sústava nachádza v excitovanom stave, potom pravdepodobnosť, že po čase t bude stále ešte v tomto stave, je rovná $1/e$. Pretože excitovaný stav zrejme nie je striktno stacionárnym stavom (úplného hamiltoniánu) je jeho energia určená iba s presnosťou ΔE . Na základe predchádzajúcej skúsenosti s poruchovou metódou sa dá očakávať, že *šírka hladiny* ΔE súvisí s dobou života t vzťahom

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

9.6 BORNOVO PRIBLIŽENIE PRE ROZPTYL ČASTICE NA POTENCIÁLI

Článok s rovnakým názvom bol už zaradený do 7. kapitoly, kde sme použili stacionárnu poruchovú metódu. Svojou povahou je však rozptyl problémom časového vývoja. Stacionárnu poruchovú metódu sme mohli použiť preto, že rozptylový potenciál, ktorý sme chápali ako poruchu, je nezávislý od času. Preto možno približne hľadať úplný systém stacionárnych stavov a problém časového vývoja vyriešiť rozvojom do tohto systému. V tomto článku budeme rozptylovú úlohu riešiť nestacionárnou poruchovou metódou. Hamiltonián má tvar

$$H = H_0 + H'$$

kde

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad H' = V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

a našou úlohou je vypočítať pravdepodobnosť rozptylu zo stavu s hybnosťou $\mathbf{p}_1 = \hbar \mathbf{q}$ do stavu s hybnosťou $\mathbf{p}_2 = \hbar \mathbf{k}$. Táto formulácia nie je celkom presná, preto sa vyjadríme presnejšie. Predovšetkým pri

¹³⁵ V tomto príklade sa obmedzíme skôr na sformulovanie istého tvrdenia ako na jeho striktné zdôvodnenie.

¹³⁶ Inokedy sa používa *polčas rozpadu*, ktorý je rovný $\tau \ln 2$.

realistickom opise rozptylového problému by sme stav dopadajúcej i rozptýlenej častice museli opísať stavovou vlnovou funkciou v tvare vlnového balíka. Situáciu si zjednodušíme tým, že budeme pracovať s harmonickými vlnami typu e^{ikr} . Ak rozptylový potenciál nie je ďalekodohový¹³⁷, potom v situácii keď dopadajúca častica je ešte ďaleko od rozptylového centra, môžeme ju považovať za voľnú – ako keby porucha bola „vypnutá“.

Predpokladajme teda, že porucha sa „zapne“ v čase $t = 0$, keď častica je ešte ďaleko od centra a nachádza sa v stave

$$\psi_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iq \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

Podobne predpokladajme, že porucha sa „vypne“ v čase T , keď častica po rozptyle je už opäť ďaleko od centra a nachádza sa v stave

$$\psi_q(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

Prakticky sa však nemôžeme zaujímať o rozptyl častice zo stavu (2) presne do stavu (3). Rôzne možné koncové stavy, ktoré sa líšia tým, že im prislúchajúce vlnové vektory majú smer vnútri určitého priestorového uhla $d\Omega_k$ a ktorých energie sú v istom intervale $(E, E + dE)$, sú vzhľadom na konečnú rozlišovaciu schopnosť experimentálnych zariadení nerozoznateľné.

Zhrňme teda: uvažujeme poruchu, ktorá je nenulová len v časovom intervale $(0, T)$ a počas tohto intervalu je konštantná a rovná $H' = V(\mathbf{r})$. Zaujímame sa o pravdepodobnosť rozptylu častice zo stavu (2) do skupiny stavov v okolí stavu (3). Podobným prípadom sme sa zaoberali podrobne v článku 9.3 a tam uvedený postup môžeme použiť s malými modifikáciami. Prípad konštantnej poruchy je vlastne limitný prípad poruchy (3.1) pre $\omega \rightarrow 0$. Analogickým postupom by sme preto pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času „zo stavu q do stavu k “ dostali výraz typu (3.18)

$$W_{kq} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kq}|^2 \delta(E_k - E_q) \quad (4)$$

kde

$$H'_{kq} = \int d^3r \psi_k^*(\mathbf{r}) H' \psi_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \int d^3r e^{i(q-k) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Výraz (4) je pravda, formálny, a nadobudne zmysel po preintegrovaní cez uvažované koncové stavy.

Zaujímajme sa teda o pravdepodobnosť rozptylu za jednotku času do smerového uhla $d\Omega_k$. Počet koncových stavov v príslušnom elemente \mathbf{k} -priestoru je

$$dN(\mathbf{k}) = \rho(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega_k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{km}{\hbar^2} dE_k d\Omega_k$$

keď sme použili vzťah $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Hľadaná pravdepodobnosť rozptylu za jednotku času bude

$$W_{kq} = \int dN(\mathbf{k}) \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kq}|^2 \delta(E_k - E_q)$$

a po dosadení dostaneme

$$W_{kq} = \frac{km}{(2\pi)^2 V \hbar^3} \left| \int d^3r e^{i(q-k) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2 d\Omega_k$$

Diferenciálny účinný prierez dostaneme, ak tento výraz predelíme hustotou prúdu dopadajúcich častíc. V našom prípade vzhľadom na (3) je táto hustota prúdu rovná

$$j = \hbar k / mV$$

a pre diferenciálny účinný prierez dostaneme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i(q-k) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (5)$$

v súhlase so vzťahom (7.6.9).

¹³⁷ Ďalekodohovým potenciálom je napr. coulombovský potenciál, s ktorým sa treba zaoberať osobitne.

9.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Lineárny harmonický oscilátor je v základnom stave vnútri kondenzátora. Pole v kondenzátore postupne zapneme a potom zas vypneme, takže jeho intenzitu môžeme opísať funkciou

$$E(t) = \frac{A}{\tau\sqrt{\pi}} \exp[-(t/\tau)^2]$$

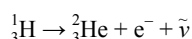
Nájdite v prvom ráde poruchovej metódy pravdepodobnosť toho, že v čase $t \rightarrow \infty$ nájdeme oscilátor v jednom z excitovaných stavov. Prediskutujte otázku zachovania energie pri tomto procese.

2. Elektrón sa pohybuje po dlhej organickej molekule, ktorá je vnútri kondenzátora postavená v smere kolmom na dosky. Elektrón modelujeme časticou viazanou na úsečku. V kondenzátore sa objaví pole s časovou závislosťou

$$\begin{aligned} E &= 0 && \text{pre } t < 0 \\ E &= E_0 \exp(-t/\tau) && \text{pre } t > 0 \end{aligned}$$

Nájdite pravdepodobnosti (v prvom ráde poruchovej teórie) toho, že pre $t \rightarrow \infty$ nájdeme elektrón v danom excitovanom stave.

3. Prediskutujte kvalitatívne, čo by sa stalo v prípade atómu vodíka v rovnakej situácii. Uvážte, do ktorých zo stavov $2p$ sa elektrón môže takto dostať zo základného stavu.
4. Nech systém je v čase $t < 0$ vo vlastnom stave ψ_0 hamiltoniánu H_0 . V čase $t = 0$ zapneme „poruchu“ $V(\mathbf{x})$ nezávisiacu od času a necháme ju už zapnutú pre všetky časy $t > 0$. Pre $t > 0$ bude hamiltoniánom sústavy $H = H_0 + V$ a vlastnými stavmi hamiltoniánu budú funkcie Φ_k spĺňajúce $H\Phi_k = (H_0 + V)\Phi_k = \epsilon_k\Phi_k$. Nájdite pravdepodobnosť toho, že v čase $t > 0$ nájdeme sústavu v stave Φ_n . Prediskutujte otázku zachovania energie pri takomto „okamžitom“ zapínaní interakcie.
5. Jadro atómu vodíka s hmotnostným číslom 3 (tzv. trítium) je nestabilné a rozpadá sa na jadro ${}^3_2\text{He}$ podľa schémy



Z hľadiska elektrónu, ktorý obieha okolo jadra, ide o veľmi rýchly proces, pri ktorom sa náhle zmení náboj jadra o jednotku. Predpokladajme, že atóm ${}^1_1\text{H}$ bol pred rozpadom v základnom stave. S akými pravdepodobnosťami bude vznikajúci atóm ${}^3_2\text{He}$ v základnom alebo v niektorom z excitovaných stavov?

6. Niekedy sa stáva, že „dodatočná interakcia“ je zapnutá na oveľa kratší čas, ako sú typické časy pre zmeny prebiehajúce vnútri sústavy. Stáva sa to napríklad vtedy, ak častica, ktorá sa pohybuje rýchlosťou len o málo menšou ako je rýchlosť svetla, letí okolo sústavy (ako atóm vodíka), v ktorej sú typické rýchlosti nerelativistické.
- Napište základné rovnice pre časovú závislosť koeficientov $a_n(t)$ a riešte ich za predpokladu, že porucha pôsobí len krátky časový okamih $0 < t < T$ a že v rámci tohto krátkeho intervalu môžeme $a_n(t)$ rozvinúť do Taylorovho radu $a_n(t) = a_n(0) + t\dot{a}_n(0) + \dots$. Obmedzte sa na prvý člen v rozvoji a spočítajte koeficient $a_n(T)$, za zjednodušujúceho predpokladu, že „dodatočná interakcia“ vnútri intervalu $0 < t < T$ už nezávisí od času. Prediskutujte oprávnenosť priblíženia.

10 MATEMATICKÝ FORMALIZMUS KVANTOVEJ MECHANIKY

10.1 ÚVOD

V doterajšom výklade sme používali formalizmus vlnových funkcií, pomocou ktorého sme boli schopní riešiť v zásade všetky problémy týkajúce sa pohybu častice vo vonkajšom potenciáli. K vlnovým funkciám sme prišli pomerne prirodzene vychádzajúc z de Broglieho hypotézy a z Bornovej pravdepodobnostnej interpretácie.

V priebehu výkladu sme však niekoľkokrát videli, že zobrazenie stavu fyzikálnej sústavy pomocou stavovej vlnovej funkcie nie je jedinou možnosťou ako postupovať. Tak napríklad vieme, že stavovú vlnovú funkciu, zodpovedajúcu ľubovoľnému viazanému stavu atómu vodíka, možno rozvinúť do úplného systému stacionárnych stavov

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,l,m,s} C_{n,l,m,s} \psi_{n,l,m,s}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

kde n, l, m, s sú po rade hlavné, orbitálne, magnetické a spinové kvantové čísla a $\psi_{n,l,m,s}(\mathbf{r})$ sú príslušné vlastné funkcie hamiltoniánu. Ak poznáme hodnoty koeficientov $C_{n,l,m,s}$ v rozklade (1) (a ich fyzikálny význam), potom je týmto stavová funkcia $\psi(\mathbf{r})$ určená jednoznačne. Preto môžu koeficienty $C_{n,l,m,s}$ reprezentovať uvažovaný stav práve tak dobre ako stavová funkcia $\psi(\mathbf{r})$.

V tejto kapitole budeme sledovať problém podrobnejšie a ukážeme si, že reprezentácia stavu pomocou vlnovej funkcie i pomocou koeficientov rozvoja typu (1) sú dve konkrétne realizácie rovnakého všeobecného prístupu.

Mnohé z postupov, ktoré tu budeme spomínať, sme tiež použili i v jednoduchom dvojrozmernom prípade spinového formalizmu (kapitola 5). Odporúčame čitateľovi, aby si zopakoval túto kapitolu a tvrdenia ďalej uvedené ilustroval na príkladoch matic typu 2×2 .

V princípe môžeme s formalizmom vlnových funkcií vystačiť, ale predsa je užitočné zoznámiť sa i so všeobecnou formuláciou kvantovej mechaniky. Najmä v úvahách teoretického charakteru je všeobecný formalizmus často prehľadnejší a ľahšie vyniknú mnohé súvislosti, ktoré sú vo formalizme vlnových funkcií skryté v dôsledku technických podrobností.

Všeobecný formalizmus nie je samoučelný. Často i pri praktickom výpočte je vhodné použiť takú reprezentáciu stavov uvažovaného systému, ktorá čo najlepšie zodpovedá charakteru danej úlohy. Podobne v úlohách z mechaniky volíme takú súradnicovú sústavu, v ktorej riešenie úlohy bude technicky jednoduché. Táto analógia je v skutočnosti (ako ďalej uvidíme) presnejšia, ako sa azda teraz môže zdať. Ako ilustráciu si ukážeme príklad harmonického oscilátora.

Skúsenosť s formalizmom vlnových funkcií i s opisom špinu naznačuje niektoré požiadavky na všeobecný matematický formalizmus kvantovej mechaniky.

Predovšetkým hľadaný formalizmus musí dávať jednoduchú možnosť zohľadniť princíp superpozície, t. j. skutočnosť, že ak sa uvažovaná sústava môže nachádzať v istých dvoch stavoch, potom sa môže nachádzať i v stave, ktorý je ich superpozíciou. Matematické objekty, ktoré budú zobrazovať vo formalizme stavy, musia sa dať vhodne lineárne „skladať“. Takejto požiadavke vyhovujú vektory (prvky abstraktných vektorových priestorov), pre ktoré je definovaná lineárna operácia súčtu a násobenia číslom. V analógii s formalizmom vlnových funkcií potom očakávame, že fyzikálnym veličinám budú zodpovedať lineárne operátory pôsobiace vo vektorovom priestore.

Vo všeobecnom formalizme musí byť zachovaný i pravdepodobnostný charakter jeho fyzikálnej interpretácie. Ak uvažujeme dva stavy (vektory), potom musí existovať (lineárny) predpis umožňujúci nájsť amplitúdu pravdepodobností (vo všeobecnosti komplexné číslo) toho, že sústava nachádzajúca sa v jednom zo stavov sa súčasne nachádza i v druhom. V prípade vlnových funkcií takejto amplitúde zodpovedal výraz typu

$$\int \Phi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^3r$$

ktorý má všetky vlastnosti skalárneho súčinu dvoch vektorov. Očakávame teda, že priestor stavov bude vektorový priestor so skalárnym súčinom. Podrobnejšia analýza ukazuje,¹³⁸ že to bude *Hilbertov priestor*.

V nasledujúcom článku matematického charakteru sa preto zoznámime s definíciou a vlastnosťami Hilbertových priestorov a až v ďalších článkoch uvedieme podrobnosti všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky.

10.2 HILBERTOV PRIESTOR

V tomto článku uvedieme definíciu a vlastnosti Hilbertovho priestoru. Obmedzíme sa pritom len na najpotrebnejšie poznatky, úplnejšiu informáciu môže čitateľ získať z úvodných učebníc funkcionálnej analýzy.¹³⁹

Vektorový priestor. Množinu \mathcal{V} , na ktorej je definovaná operácia súčtu jej prvkov (pre $f, g \in \mathcal{V}$, $(f + g) \in \mathcal{V}$) a násobenia komplexným číslom (pre $c \in \mathbb{C}$, $f \in \mathcal{V}$, $(cf) \in \mathcal{V}$.) nazývame vektorovým priestorom,¹⁴⁰ ak platí:

1. sčítanie je komutatívne, t. j. $f + g = g + f$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathcal{V}$
2. sčítanie je asociatívne, t. j. $f + (g + h) = (f + g) + h$, pre ľubovoľné $f, g, h \in \mathcal{V}$
3. existuje nulový¹⁴¹ prvok, t. j. existuje $0 \in \mathcal{V}$ tak, že platí $0 + f = f$ pre ľubovoľné $f \in \mathcal{V}$
4. ku každému prvku $f \in \mathcal{V}$ existuje inverzný prvok $-f \in \mathcal{V}$ taký, že platí: $f + (-f) = 0$
5. pre ľubovoľné $f, g \in \mathcal{V}$ a ľubovoľné $a, b \in \mathbb{C}$ platí

$$a(f + g) = af + ag, \quad (a + b)f = af + bf, \quad (ab)f = a(bf)$$

6. $1f = f$ pre ľubovoľné $f \in \mathcal{V}$

Prvky množiny \mathcal{V} nazývame vektory. Odporúčame čitateľovi, aby si túto a nasledujúce definície a tvrdenia ilustroval na vhodných príkladoch, akými sú:

- a) množina všetkých n -tíc $z = (z_1, \dots, z_n)$, $z_i \in \mathbb{C}$ s operáciou sčítania

$$(x_1, \dots, x_n) + (y_1, \dots, y_n) = (x_1 + y_1, \dots, x_n + y_n)$$

a násobenia číslom

$$c(x_1, \dots, x_n) = (cx_1, \dots, cx_n)$$

b) množina všetkých nekonečných postupností komplexných čísel $\{a\}_{n=1}^{\infty}$, pre ktoré existuje konečný súčet $\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2$ s obdobne definovanými operáciami,

c) množina všetkých komplexných funkcií reálnej premennej na intervale $(-\infty, \infty)$, pre ktoré existuje konečný integrál $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx$ s obvykle definovanými operáciami súčtu dvoch funkcií a násobenia funkcie číslom.

Súčasne je dobre pestovať si i geometrickú predstavivosť na modeli vektorov v obyčajnom trojrozmernom priestore. (Je to síce vektorový priestor nad telesom reálnych, a nie komplexných čísel, ale pre mnohé úvahy to nie je podstatné.)

¹³⁸ Podrobnosti možno nájsť v už citovanej Diracovej monografii, ktorá je písaná s veľkým fyzikálnym citom, otázky viac matematického charakteru však nerozoberá. Matematická stránka vecí je mimoriadne presne a korektné diskutovaná vo von Neumanovej klasickej monografii [18], ktorá sa ale číta dosť ťažko.

¹³⁹ Odporúčame napríklad Šilovovu knihu [32]. Špeciálnou učebnicou funkcionálnej analýzy, orientovanou na aplikáciu v kvantovej teórii, sú skriptá MFU UK v Prahe J. Blank – P. Exner – M. Havlíček: Vybrané kapitoly z matematické fyziky. SPN, Praha 1975 (1. diel) a 1978 (2. diel).

¹⁴⁰ V matematickej literatúre sa vektorovým priestorom nazýva množina \mathcal{V} spolu s operáciami na nej definovanými. Detailmi tohto typu sa zapodievať nebudeme.

¹⁴¹ Tu sme v označení nedôslední: 0 (nula) značí aj nulový prvok množiny M . aj nulu komplexných čísel, čo sú v princípe dve rôzne veci. V praxi sa však odlišné označenie nepoužíva a z kontextu je vždy zrejme, o čo ide.

Skalárny súčin. Skalárnym súčinom nazývame predpis, ktorý každým dvom vektorom f, g vektorového priestoru \mathfrak{V}^* priradí komplexné číslo (f, g) tak, že platí:

1. $(f, g) = (g, f)^*$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathfrak{V}^*$
 2. $(f, g + h) = (f, g) + (f, h)$ pre ľubovoľné $f, g, h \in \mathfrak{V}^*$
 3. $(f, cg) = c(f, g)$ pre ľubovoľné $f, g \in \mathfrak{V}^*$, $c \in \mathbb{C}$
 4. (f, f) je reálne a platí $(f, f) \geq 0$ pre ľubovoľné $f \in \mathfrak{V}^*$, pričom $(f, f) = 0$ len pre $f = 0$.
- Na základe uvedených vlastností už možno ľahko dokázať ďalšie, ako napr.

$$(cf, g) = c^*(f, g)$$

V uvedených príkladoch vektorových priestorov môžeme zaviesť skalárny súčin nasledovne:

$$\text{a) } (x, y) = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i \quad \text{b) } (a, b) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^* b_n \quad \text{c) } (f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)$$

Vo vektorových priestoroch, na ktorých je definovaný skalárny súčin, možno definovať normu (dĺžku) vektora označenú ako $\|f\|$ vzťahom

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} \quad (1)$$

Pre skalárny súčin platí dôležitá *Schwarzova nerovnosť*:¹⁴²

$$|(f, g)|^2 \leq \|f\|^2 \cdot \|g\|^2 \quad (2)$$

Nerovnosť (2) dokážeme ľahko.¹⁴³ Utvoríme pre komplexné λ výraz

$$0 \leq (f - \lambda g, f - \lambda g) = \|f\|^2 + \lambda^2 \|g\|^2 - \lambda(f, g) - \lambda^*(f, g)^*$$

označme teraz

$$(f, g) = |(f, g)| \cdot e^{i\alpha}$$

a zvolíme $\lambda = t e^{-i\alpha}$, t reálne. Dostaneme

$$0 \leq \|f\|^2 + t^2 \|g\|^2 - 2t|(f, g)|$$

čo musí byť splnené pre všetky reálne t . Pretože to je kvadratický trojčlen, musí jeho diskriminant spĺňať podmienku

$$|(f, g)|^2 - \|f\|^2 \cdot \|g\|^2 \leq 0$$

čo je vzťah (2).

Vo vektorových priestoroch s normou možno zaviesť prirodzene metriku a na jej základe topologické pojmy. Nebudeme sa zaoberať týmito otázkami, uveďme len definíciu konvergencie postupnosti vektorov.

Hovoríme, že postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ vektorov z normovaného vektorového priestoru \mathfrak{V}^* konverguje (silne) k vektoru $f \in \mathfrak{V}^*$, ak platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\| = 0 \quad (3)$$

Poznamenajme, že v priestore so skalárnym súčinom možno zaviesť i inú definíciu, a to *slabej konvergencie*. Hovoríme, že postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ vektorov z vektorového priestoru M konverguje k vektoru $f \in \mathfrak{V}^*$ v slabom zmysle, ak pre ľubovoľný vektor $g \in \mathfrak{V}^*$ platí

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (g, f_n) = (g, f) \quad (4)$$

V ďalšom, ak neuvedieme inak, budeme chápať konvergenciu vždy v silnom zmysle.

Zavedieme teraz pojem úplného priestoru.

¹⁴² V prípade vektorového priestoru nad reálnymi číslami Schwarzova nerovnosť hovorí, že kosinus uhla zovretého dvoma vektormi je v absolútnej hodnote menší alebo rovný 1.

¹⁴³ Všimnime si, že použijeme rovnaký trik ako pri odvodení vzťahu neurčitosti v 2. kapitole.

Najprv potrebujeme pojem cauchyovskej postupnosti. O postupnosti $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ hovoríme, že je *cauchyovská*, ak platí

$$\forall \varepsilon > 0 \exists M \forall m, n > M: \|f_n - f_m\| < \varepsilon$$

O normovanom vektorovom priestore hovoríme, že je *úplný*, ak v ňom každá cauchyovská postupnosť má limitu, t. j. ak existuje $f \in \mathfrak{V}$ také, že platí $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f$.

Vo vektorovom priestore je zavedený obvyklým spôsobom pojem *lineárnej závislosti*. Hovoríme, že vektory f_1, \dots, f_n sú lineárne nezávislé, ak rovnica

$$\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \dots + \alpha_n f_n = 0$$

je splnená len pre $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$

Ak vo vektorovom priestore maximálny počet lineárne nezávislých vektorov je konečný, potom tomuto počtu hovoríme *rozmer* vektorového priestoru. V opačnom prípade hovoríme, že vektorový priestor je *nekonečnerozmerný*.

Dôležitým prípadom lineárne nezávislých vektorov sú vektory navzájom ortogonálne. V priestore so skalárnym súčtom sa dva vektory f, g nazývajú ortogonálne, ak platí $(f, g) = 0$. Usporiadaná množina¹⁴⁴ $\{f_n\}_{n=1}^N$ vektorov sa nazýva ortogonálnou, ak každé dva jej rôzne prvky sú navzájom ortogonálne. Ak navyše platí $\|f_n\| = 1$ pre všetky n , potom množinu nazývame ortonormálnou. Čitateľ si ľahko môže sám dokázať, že vektory ľubovoľnej konečnej podmnožiny z ortogonálnej množiny sú lineárne nezávislé. Množina $\{f_n\}_{n=1}^N$ vektorov sa nazýva úplná, ak sa ľubovoľný vektor f uvažovaného priestoru dá vyjadriť v tvare

$$f = \sum_{i=1}^N \alpha_i f_i \quad (5)$$

Poznamenajme, že nie v každom priestore musí taká úplná množina existovať. Priestor, v ktorom existuje spočítateľná úplná množina, sa nazýva separabilný. V prípade, že vektory úplnej množiny sú ortonormálne, je dokonca rozklad (5) jednoznačný a koeficienty α_i sú určené vzťahom

$$\alpha_i = (f_i, f)$$

o čom sa možno ľahko presvedčiť vynásobením vzťahu (5) zľava vektorom f_i (v zmysle skalárneho súčinu). Úplnú ortonormálnu usporiadanú množinu vektorov budeme nazývať *bázou*.

Máme teraz už dosť prostriedkov, aby sme mohli definovať pojem *Hilbertov priestor*. Budeme tak nazývať vektorový priestor so skalárnym súčinom, ktorý je úplný a separabilný.¹⁴⁵ V ďalšom, ak nepoviemme inak, budeme pod priestorom \mathfrak{H} rozumieť Hilbertov priestor. Pripomeňme si teraz niekoľko definícií a tvrdení o funkcionáloch a operátoroch na Hilbertovom priestore.

Predpis $T[f]$, ktorý vektorom Hilbertovho priestoru $f \in \mathfrak{H}$ priraduje komplexné čísla, sa nazýva funkcionál. Je to teda zobrazenie $T: \mathfrak{H} \rightarrow \mathbb{C}$. Funkcionál T je lineárny, ak platí

$$T[\alpha f + \beta g] = \alpha T[f] + \beta T[g] \text{ pre všetky } f, g \in \mathfrak{H}; \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Na množine všetkých lineárnych funkcionálov na Hilbertovom priestore \mathfrak{H} možno jednoducho definovať operácie sčítania a násobenia číslom a možno sa presvedčiť o tom, že táto množina tvorí vektorový priestor, ktorý sa nazýva *algebraicky duálny* k priestoru \mathfrak{H} , a označuje sa \mathfrak{H}^* . Špeciálnym prípadom lineárnych funkcionálov sú spojité lineárne funkcionály, t. j. také, pre ktoré z tvrdenia $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f$ plynie

tvrdenie $\lim_{n \rightarrow \infty} T[f_n] = T[f]$. Spojité funkcionály tvoria opäť vektorový priestor, označujeme ho \mathfrak{H}^{**} (\mathfrak{H}^* , $\subset \mathfrak{H}^*$) a nazývame ho duálnym k \mathfrak{H} .

Dôležitý príklad spojitého lineárneho funkcionálu na Hilbertovom priestore predstavuje skalárny súčin. Skutočne, na skalárny súčin (g, f) sa možno, pri fixovanom $g \in \mathfrak{H}$, dívať ako na predpis, ktorý každému $f \in \mathfrak{H}$ priradí isté komplexné číslo. Možno jednoducho ukázať, že takto definovaný funkcionál

¹⁴⁴ Pripúšťame i prípad $N = \infty$.

¹⁴⁵ V niektorých učebniciach sa separabilnosť nepožaduje.

je lineárny a spojitý. Platí aj dôležité opačné tvrdenie: Ku každému $T \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H})$ existuje práve jeden vektor $g_T \in \mathfrak{H}$ taký, že pre všetky $f \in \mathfrak{H}$ platí $T[f] = (g_T, f)$.

Predpis, ktorý vektorom (nie nevyhnutne všetkým) z Hilbertovho priestoru priraduje opäť vektory tohto priestoru, sa nazýva *operátor*. Je to teda zobrazenie $A: \mathfrak{H} \rightarrow \mathfrak{H}$. Definičný obor¹⁴⁶ (množinu vektorov, pre ktoré je predpis A definovaný) budeme značiť D_A . *Obor hodnôt* (t. j. množinu všetkých vektorov $f \in \mathfrak{H}$, pre ktoré existuje $g \in \mathfrak{H}$ také, že platí $f = Ag$) budeme značiť AD_A . Hovoríme, že dva operátory A a B sú si rovné, ak platí $D_A = D_B$ a $Af = Bf$ pre všetky $f \in D_A$.

Operátor A sa nazýva lineárny, ak platí:

1. Definičný obor D_A je lineárny podpriestor \mathfrak{H} . Z toho vyplýva, že pre všetky $f, g \in D_A$ pre ľubovoľné $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ platí $\alpha f + \beta g \in D_A$.

2. Pre všetky $f, g \in D_A$ a ľubovoľné $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ platí $A(\alpha f + \beta g) = \alpha Af + \beta Ag$. Na množine operátorov zavádzame prirodzene pojem súčtu dvoch operátorov a pojem násobenia operátora číslom. *Súčtom* $A + B$ nazývame operátor C , pre ktorý platí

$$Cf = Af + Bf$$

pre všetky $f \in D_c = D_A \cap D_B$. α -násobkom operátora A nazývame operátor $C = \alpha A$, pre ktorý platí $Cf = \alpha Af$ pre všetky $f \in D_c = D_A$. Súčin operátorov A, B definujeme ako zložené zobrazenie $C = AB$ definované vzťahom $Cf = A(Bf)$ pre všetky $f \in D_B$, pritom však také, že $Bf \in D_A$.

Špeciálnym prípadom operátora je jednotkový operátor (identické zobrazenie, vektoru je priradený ten istý vektor) a nulový operátor (každému vektoru je priradený nulový vektor). Pre jednotkový a nulový operátor často nebudeme zavádzať osobitné symboly a budeme ich značiť ako I a O (teda číslami). Z kontextu však bude vždy zrejmé, že ide o operátor.

Hovoríme, že operátor B je inverzný k operátoru A ak platí $D_B = AD_A$, $BD_B = D_A$ a platí $BAf = f$ pre všetky $f \in D_A$ a $ABf = f$ pre všetky $f \in D_B$. Inverzný operátor označujeme ako A^{-1} .

Dôležitú triedu operátorov tvoria spojité *operátory*. Hovoríme, že operátor A je spojitý, ak pre ľubovoľnú konvergentnú postupnosť $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}, f_n \in D_A$, pre ktorú $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f \in D_A$ platí $\lim_{n \rightarrow \infty} (Af_n) = Af$.

Pre lineárne operátory platí dôležité tvrdenie: Lineárny operátor A je spojitý vtedy a len vtedy, ak je *ohraničený*, t. j. ak existuje reálne $C > 0$ také, že platí

$$\|Af\| \leq C\|f\|$$

pre všetky $f \in D_A$.

Dá sa ukázať, že ak operátor A je lineárny spojitý (t. j. ohraničený), potom, ak aj nie je pôvodne definovaný na celom uvažovanom Hilbertovom priestore, dá sa jeho definičný obor rozšíriť na celý Hilbertov priestor (pri zachovaní lineárnosti a ohraničenosti). Preto ak sa v ďalšom stretne s lineárnym ohraničeným operátorom, budeme ho automaticky považovať za definovaný na celom Hilbertovom priestore. Poznamenajme, že takýto predpoklad zďaleka nie je triviálny, ako to uvidíme neskôr na príkladoch niektorých neohraničených operátorov.

Ak A je lineárny spojitý operátor, potom skalárny súčin (g, Af) predstavuje pri ľubovoľnom fixovanom $g \in M$ spojitý lineárny funkcionál (premennej $f \in \mathfrak{H}$). Z vlastností funkcionálov na Hilbertovom priestore vieme, že tento funkcionál sa dá realizovať ako skalárny súčin premenného vektora f s iným pevným vektorom g' , t. j. pre ľubovoľné g existuje (a pritom jednoznačne) vektor $g' \in \mathfrak{H}$ taký, že platí

$$(g, Af) = (g', f)$$

pre všetky $f \in \mathfrak{H}$. Operátor, ktorý priraduje každému vektoru g vektor g' sa nazýva *hermitovsky združený* k operátoru A a značí sa A^+ .

Z tejto definície vyplýva, že operátor A^+ je určený jednoznačne, je lineárny a dá sa ukázať, že je spojitý.

Z definície A^+ teda vyplýva dôležitý vzťah

¹⁴⁶ Vo fyzikálnych úvahách definičný obor uvažovaného operátora často špeciálne neskúmame, hoci, striktné vzaté, je to nedôslednosť, ktorá niekedy môže viesť k chybným záverom. Bližšie pozri napr. v článku o spojitom spektre operátora.

$$(g, Af) = (A^+g, f) \quad (6)$$

platí pre všetky $f, g \in \mathcal{H}^*$.

Pre fyzikálnu interpretáciu sú dôležité *spojité hermitovské operátory*¹⁴⁷, t. j. spojité lineárne operátory, pre ktoré platí $A = A^+$.

Operácia hermitovského združenia má nasledujúce (ľahko dokázateľné) vlastnosti

$$(AB)^+ = B^+A^+ \quad (7)$$

$$(\alpha A)^+ = \alpha^*A^+ \quad (8)$$

Ďalším dôležitým typom operátora sú *unitárne operátory*. Lineárny spojité operátor U sa nazýva unitárny, ak k nemu existuje inverzný operátor U^{-1} a ak platí

$$U^{-1} = U^+ \quad (9)$$

t. j.

$$UU^+ = U^+U = 1 \quad (10)$$

Unitárny operátor má dôležitú vlastnosť, že zachováva skalárny súčin, t. j. platí (dôkaz je triviálny)

$$(Uf, Ug) = (f, g) \quad (11)$$

pre všetky $f, g \in \mathcal{H}^*$.

Posledným typom operátora, o ktorý sa budeme zaujímať, sú *projektory* (projekčné operátory). Projektorom sa nazýva spojité hermitovský operátor P , ktorý je idempotentný, t. j. pre ktorý platí

$$P^2 = P \quad (12)$$

Názov projektor bude jasnejší, ak si uvedomíme, že ľubovoľný vektor $f \in \mathcal{H}^*$ môžeme vyjadriť v tvare¹⁴⁸

$$f = Pf + (1 - P)f \quad (13)$$

Na základe vzťahu (12) sa dá ľahko ukázať, že vektory $f_1 = Pf$ a $f_2 = (1 - P)f$ sú ortogonálne. Platí tiež $f_1 \in \mathcal{H}_P^*$, $f_2 \in \mathcal{H}_{P^\perp}^*$, kde \mathcal{H}_P^* je podpriestor priestoru \mathcal{H}^* tvorený všetkými takými vektormi $g \in \mathcal{H}^*$, pre ktoré platí $Pg = g$ a $\mathcal{H}_{P^\perp}^*$ je podpriestor všetkých vektorov $g' \in \mathcal{H}^*$, ktoré sú ortogonálne na všetky vektory z \mathcal{H}_P^* .¹⁴⁹ Vektor f_1 (resp. f_2) sa nazýva ortogonálnou projekciou vektora f do podpriestoru \mathcal{H}_P^* (resp. $\mathcal{H}_{P^\perp}^*$).

Podľa vzťahu

$$f_1 = Pf \quad (14)$$

teda operátor P priradí každému vektoru jeho projekciu na podpriestor \mathcal{H}_P^* . Neskôr uvidíme, ako skonštruovať projektor na vopred daný podpriestor Hilbertovho priestoru.

Na záver tohto článku ešte zavedieme pojmy *vlastnej hodnoty* a *vlastného vektora* operátora. Nech A je lineárny operátor na Hilbertovom priestore. Komplexné číslo λ nazývame vlastnou hodnotou operátora A , ak existuje nenulový vektor $f \in D_A$ tak, že platí

$$Af = \lambda f$$

Vektor f potom nazývame vlastným vektorom operátora A , prislúchajúcim k vlastnej hodnote λ .

Ak A je spojité hermitovský operátor, potom platí

1. všetky jeho vlastné hodnoty sú reálne čísla;
2. vlastné vektory prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám sú ortogonálne;
3. množina vlastných vektorov prislúchajúcich rovnakej vlastnej hodnote tvorí podpriestor priestoru \mathcal{H}^* (a teda dá sa v ňom zvoliť ortonormálna báza).

Dôkaz tvrdení je jednoduchý a vlastne sme ho robili na špeciálnom prípade Hilbertovho priestoru kvadraticky integrovateľných funkcií v kapitole 2.

¹⁴⁷ V matematickej literatúre sa obvykle pod hermitovským operátorom automaticky myslí spojité operátor. My budeme v tomto prípade používať pojem spojité hermitovský operátor.

¹⁴⁸ Nasledujúce tvrdenia nebudeme dokazovať. Čitateľ si jednoduché dôkazy môže urobiť ako cvičenie.

¹⁴⁹ Nápadne si môžeme predstaviť \mathcal{H}_P^* ako napríklad rovinu v trojrozmernom priestore a $\mathcal{H}_{P^\perp}^*$ ako priamku na ňu kolmú. Vektory f_1 , resp. f_2 sú potom priemety vektora f do tejto roviny resp. priamky.

10.3 MATEMATICKÝ FORMALIZMUS KVANTOVEJ MECHANIKY

V úvode k tejto kapitole sme už naznačili, že v rámci matematického formalizmu kvantovej mechaniky priradíme stavu uvažovaného fyzikálneho systému vektor v Hilbertovom priestore. Hilbertov priestor stavov budeme označovať \mathcal{H} a stavy-vektory v priestore \mathcal{H} budeme podľa Diraca označovať ako $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, |f\rangle$ a pod. Výhody takéhoto označenia budú zrejme neskôr. Skalárny súčin dvoch vektorov $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ budeme označovať

$$\langle\varphi|\psi\rangle \quad (1)$$

pričom platí $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$.

Zavádzame i samostatné označenie typu $\langle\varphi|$, ktoré má význam funkcionálu na Hilbertovom priestore. (Teda $\langle\varphi| \in \mathcal{H}^*$. Ako vieme z predchádzajúceho článku, na skalárny súčin (1) s premenným vektorom $|\psi\rangle$ sa môžeme pozerať ako na funkcionál $\langle\varphi|$ (priradený k vektoru $|\varphi\rangle$), ktorý každému vektoru $|\psi\rangle$ priradí isté komplexné číslo podľa predpisu (1). Funkcionály typu $\langle\psi|$ sú vektorom z \mathcal{H}^* jednoznačne priradené, tvoria tiež vektorový priestor \mathcal{H}^* . Vektorom typu $\langle\psi|$ sa hovorí tiež bra-vektory, na rozdiel od vektorov typu $|\varphi\rangle$, ktoré sa nazývajú ket-vektory. Názov pochádza z anglického slova bracket (zátvorka) a vznikol z toho, že „spojením“ (mnemotechnicky) vektoru bra a vektoru ket vznikne skalárny súčin – zátvorka – typu

$$\langle\varphi|\psi\rangle$$

Pripomeňme, že v komplexnom Hilbertovom priestore je skalárny súčin antilineárny v prvom komponente, preto ket-vektoru $\alpha|\varphi\rangle$ je priradený bra-vektor $\alpha^*\langle\varphi|$, aby platilo

$$\langle\alpha\varphi|\psi\rangle = \alpha^*\langle\varphi|\psi\rangle$$

Teraz začneme budovať formalizmus, ktorý vychádza z predpokladu (postulátu), že stavu fyzikálneho systému je priradený ket-vektor určitého Hilbertovho priestoru \mathcal{H} .

V analógii s formalizmom vlnových funkcií potom predpokladáme, že každej fyzikálnej veličine je priradený určitý spojitý hermitovský operátor na Hilbertovom priestore.¹⁵⁰ Strednú hodnotu veličiny A v stave $|\varphi\rangle$ potom vypočítame podľa vzťahu

$$\bar{A} = \langle\varphi|A|\varphi\rangle \quad (2)$$

kde A je operátor priradený veličine A . Pritom stredná hodnota jednotkového operátora (operátora priradeného triviálnej fyzikálnej veličine, ktorá je vždy rovná jednej) musí byť zrejme rovná jednej, preto musí platiť

$$\langle\varphi|1|\varphi\rangle = \langle\varphi|\varphi\rangle$$

teda vektory prislúchajúce stavom musia byť normované. Symbol v (2) treba chápať ako skalárny súčin vektora $A|\varphi\rangle$ s vektorom $|\varphi\rangle$. Vo výrazoch typu (2) teda operátor „pôsobí doprava“

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle \equiv \langle\psi|A\varphi\rangle \quad (3)$$

Vzhľadom na to, že operátor A je hermitovský, je to však to isté, ako keby pôsobil „doľava“, t. j. platí

$$\langle A\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A\varphi\rangle \quad (4)$$

Vo všeobecnom prípade lineárneho spojitého (nie nevyhnutne hermitovského) operátora môžeme vo výrazoch typu (3) nahradiť „pôsobenie doprava“ „pôsobením doľava“, ak operátor vymeníme za hermitovsky združený¹⁵¹, t. j. platí

$$\langle\psi|B|\varphi\rangle \equiv \langle\psi|B\varphi\rangle = \langle B^+\psi|\varphi\rangle \quad (5)$$

Často však potrebujeme úplnejšiu predpoveď o výsledkoch merania, než akú poskytuje výpočet strednej hodnoty (2). Úplná predpoveď o výsledkoch merania veličiny A v stave $|\varphi\rangle$, ktorú kvantová

¹⁵⁰ Neskôr ešte podmienky kladené na operátor priradený fyzikálnej veličine zovšeobecňime.

¹⁵¹ Pozri definíciu hermitovsky združeného operátora v predchádzajúcom článku.

mechanika môže (v svojej pravdepodobnostnej interpretácii) poskytnúť, obsahuje (pre prípad diskrét-
nych možných hodnôt):

1. udanie všetkých hodnôt a_n , ktoré môžu byť výsledkom merania,
2. udanie pravdepodobností P_n , s ktorými môžeme v stave $|\varphi\rangle$ namerať jednotlivé hodnoty a_n .

Opäť v analógii s formalizmom vlnových funkcií postulujeme:

Meraním veličiny A môžeme namerať iba niektorú z vlastných hodnôt operátora \mathbf{A} .

Výpočet pravdepodobnosti P_n bol vo formalizme vlnových funkcií založený na rozvoji vlnovej funkcie do systému vlastných funkcií. Aby takýto rozvoj bol možný, musíme urobiť ďalší predpoklad:

Fyzikálnej veličine je priradený taký spojitý hermitovský operátor, ktorého vlastné vektory tvoria úplný systém¹⁵².

Ak vlastný vektor príslušný vlastnej hodnote a_n označíme ako $|a_n\rangle$, čo znamená, že platí (stále predpokladáme diskkrétne spektrum)

$$\mathbf{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \quad (6)$$

potom predpoklad o úplnosti hovorí, že ľubovoľný stavový vektor $|\varphi\rangle$ možno písať v tvare

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle \quad (7)$$

V ďalšom budeme predpokladať, že systém vektorov $|a_n\rangle$ je ortonormovaný (čo vždy možno dosiahnuť), teda že platí podmienka ortonormálnosti

$$\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm} \quad (8)$$

Postulujeme potom, že pravdepodobnosť P_n namerať v stave $|\varphi\rangle$ hodnotu a_n veličiny A je daná vzťahom

$$P_n = |c_n|^2 \quad (9)$$

kde c_n je koeficient rozvoja (7).

Koeficienty c_n nájdeme ľahko, keď vynásobíme vzťah (7) zľava bra-vektorom $\langle a_m |$. Dostaneme (po využití (8))

$$c_m = \langle a_m | \varphi \rangle \quad (10)$$

a teda platí

$$P_n = |\langle a_n | \varphi \rangle|^2 \quad (11)$$

Všimnime si teraz formu vzťahu (7), ktorú dostaneme, ak doň za c_n dosadíme zo vzťahu (10). Platí

$$|\varphi\rangle = \sum_n \langle a_n | \varphi \rangle |a_n\rangle \quad (12)$$

Vo vzťahu (12) sú výrazy $\langle a_n | \varphi \rangle$ komplexné čísla, ktoré násobia vektory $|a_n\rangle$. Užitočnejšiu formu zápisu dostaneme, ak tieto komplexné čísla budeme namiesto pred vektor, ktorý násobia, písať zaň (čo je vecou konvencie v označení násobenia vektora komplexným číslom). Dostaneme tak

$$|\varphi\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \varphi \rangle \quad (13)$$

Vidíme teda, že výraz $\sum_n |a_n\rangle \langle a_n |$ môžeme chápať ako operátor¹⁵³, ktorý vektoru $|\varphi\rangle$ priradí opäť vektor $|\varphi\rangle$. Je to teda jednotkový operátor:

$$\sum_n |a_n\rangle \langle a_n | = 1 \quad (14)$$

¹⁵² V anglickej literatúre sa pre takýto operátor používa termín „observable“, po slovensky by sa možno dal použiť termín „pozorovateľná“.

¹⁵³ Je to vlastne nekonečná suma operátorov, pričom treba povedať, že otázkami zmyslu konvergencie takýchto výrazov sme sa nezaoberali. Nebudeme sa týmto problémom venovať podrobnejšie. Stačí nám intuitívny pohľad na vec a fakt, že vzťah (13) je dobre definovaný pre každý vektor $|\varphi\rangle$.

Vzťah (14) nazývame podmienkou úplnosti systému $\{|a_n\rangle\}$, lebo, ako je zrejmé, vzťah (14) hovorí, že ľubovoľný vektor $|a_n\rangle \in \mathcal{H}$ možno vyjadriť v tvare (7).

Ako ukážku manipulácie s Diracovou symbolikou si teraz overíme, že postuláty (2) a (11) sú navzájom konzistentné. Podľa (11) platí

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_n P_n a_n = \sum_n \langle a_n | \varphi \rangle^2 a_n = \sum_n \langle a_n | \varphi \rangle^* \langle a_n | \varphi \rangle a_n = \\ &= \sum_n \langle \varphi | a_n \rangle \langle a_n | \varphi \rangle = \sum_n \langle \varphi | \mathbf{A} | a_n \rangle \langle a_n | \varphi \rangle = \\ &= \langle \varphi | \mathbf{A} \sum_n | a_n \rangle \langle a_n | \varphi \rangle = \langle \varphi | \mathbf{A} \mathbf{1} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \mathbf{A} | \varphi \rangle \end{aligned}$$

čo je vzťah (2). Pri úpravách sme použili vzťah (14) a vzťah (6), podľa ktorého sme písali¹⁵⁴

$$a_n \langle \varphi | a_n \rangle = \langle \varphi | a_n | a_n \rangle = \langle \varphi | \mathbf{A} | a_n \rangle$$

Vieme, že meraním možno získať iba niektorú z vlastných hodnôt a_n . Môžeme sa pýtať, v akom stave sa sústava bude nachádzať po meraní. Musíme si pritom uvedomiť, že vo vzťahu typu (6) nie vždy musia byť veľkosti vlastných hodnôt a_n pre rôzne n rôzne (t. j. jednej vlastnej hodnote môže prislúchať viacero lineárne nezávislých vlastných vektorov). Znamená to potom, že aj v rozvoji (7) viacero vlastných vektorov $|a_n\rangle$ prislúcha tej istej vlastnej hodnote. Nebudeme tu opakovat' naše diskusie o charaktere merania v kvantovej mechanike, uvedieme rovno postulát:

Predpokladajme, že pri konkrétnom meraní veličiny A na sústave v stave $|\varphi\rangle$ bola nameraná hodnota $a = a_i$. Ak hodnota a_i je nedegenerovaná, t. j. prislúcha jej (až na fázou) jediný normovaný vektor $|a_i\rangle$, potom po meraní sa sústava bude nachádzať v stave $|a_i\rangle$

Túto zmenu stavu možno formálne popísať pomocou projekčného operátora¹⁵⁵

$$P_{a_i} = |a_i\rangle \langle a_i| \quad (15)$$

Skutočne, pôsobením operátora (15) na stav (7) dostaneme

$$P_{a_i} |\varphi\rangle = |a_i\rangle \langle a_i | \sum_n c_n |a_n\rangle = \sum_n c_n |a_i\rangle \langle a_i | a_n \rangle = \sum_n c_n |a_i\rangle \delta_{in} = c_i |a_i\rangle$$

čo je (až na normalizáciu) naozaj stav $|a_i\rangle$ po meraní. Operátor P_{a_i} naozaj zo stavu $|\varphi\rangle$ vyprojektuje jeho zložku v „smere“ $|a_i\rangle$. Po normalizácii teda dostaneme, že pri meraní, ktorého výsledkom je nedegenerovaná vlastná hodnota a_i , prejde sústava zo stavu $|\varphi\rangle$ do stavu

$$\frac{1}{\langle a_i | \varphi \rangle} P_{a_i} |\varphi\rangle$$

Pre normalizačný koeficient $c_i \equiv \langle a_i | \varphi \rangle$ platí

$$P_i = |c_i|^2 = |\langle a_n | \varphi \rangle|^2 = \langle \varphi | P_{a_i} | \varphi \rangle \quad (16)$$

takže nakoniec možno redukciu stavu pri nameraní hodnoty $|a_i\rangle$ znázorniť schémou

$$|\varphi\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\langle \varphi | P_{a_i} | \varphi \rangle}} \cdot P_{a_i} |\varphi\rangle \quad (17)$$

kde P_{a_i} je projekčný operátor (15). Stav (17) sa od $|a_i\rangle$ líši nanajvyš fázou, čo je nepodstatné.

Ak pri meraní veličiny A nameriame hodnotu a_i ktorá je rovná degenerovanej vlastnej hodnote operátora \mathbf{A} , potom redukciu stavu možno vyjadriť pomocou rovnakej schémy (17), ibaže operátor P_{a_i} bude projekčný operátor na podpriestor tvorený stavmi prislúchajúcimi vlastnej hodnote a . Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že operátor P_a má tvar

$$P_a = \sum_{n: a_n = a} |a_n\rangle \langle a_n| \quad (18)$$

kde sumujeme iba cez vlastné vektory prislúchajúce vlastnej hodnote a . Operátor P_a vyprojektuje zo

¹⁵⁴ Výraz typu $\langle \varphi | \alpha | \psi \rangle$ kde α je číslo, je skalárny súčin vektorov $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$.

¹⁵⁵ O tom, že operátor P_{a_i} je projekčný, t. j. spojitý hermitovský a platí $P_{a_i}^2 = P_{a_i}$ sa čitateľ môže ľahko presvedčiť.

stavu $|\varphi\rangle$ jeho priemet na podpriestor tvorený týmito vektormi, Pri meraní nastane redukcia vyjadrená schémou

$$|\varphi\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\langle\varphi|\mathbf{P}_a|\varphi\rangle}} \cdot \mathbf{P}_a|\varphi\rangle \quad (19)$$

Nebudeme na tomto mieste opakovať diskusiu o vlastných vektorech komutujúcich operátorov a o úplnom systéme komutujúcich operátorov, ktoré sa do všeobecného formalizmu prenášajú z formalizmu vlnových funkcií bezo zmeny.

Ukážeme si iba formálne odvodenie vzťahu neurčitosti, ktoré je vo všeobecnom formalizme prehľadnejšie a geometricky názornejšie. Uvažujme dva hermitovské operátory \mathbf{A} , \mathbf{B} , pre ktoré platí¹⁵⁶

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = i\mathbf{C}$$

Nech pre jednoduchosť¹⁵⁷ v stave $|\varphi\rangle$ platí

$$\bar{A} = \langle\varphi|\mathbf{A}|\varphi\rangle = 0 \quad \bar{B} = \langle\varphi|\mathbf{B}|\varphi\rangle = 0$$

Potom platí:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} &= \langle\varphi|\mathbf{A}^2|\varphi\rangle \langle\varphi|\mathbf{B}^2|\varphi\rangle = \langle\mathbf{A}\varphi|\mathbf{A}\varphi\rangle \langle\mathbf{B}\varphi|\mathbf{B}\varphi\rangle = \\ &= \|\mathbf{A}|\varphi\rangle\|^2 \|\mathbf{B}|\varphi\rangle\|^2 \end{aligned}$$

Využitím Schwartzovej nerovnosti však dostaneme

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} &= |\langle\mathbf{A}\varphi|\mathbf{B}\varphi\rangle|^2 = |\langle\varphi|\mathbf{AB}|\varphi\rangle|^2 \geq (\text{Im} \langle\varphi|\mathbf{AB}|\varphi\rangle)^2 = \\ &= \left(\frac{1}{2i} \langle\varphi|\mathbf{AB}|\varphi\rangle - \frac{1}{2i} \langle\varphi|\mathbf{AB}|\varphi\rangle^* \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{i} \langle\varphi|\mathbf{AB} - \mathbf{BA}|\varphi\rangle \right)^2 = \frac{1}{4} (\langle\varphi|\mathbf{C}|\varphi\rangle)^2 \end{aligned}$$

platí teda

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} (\langle\varphi|\mathbf{C}|\varphi\rangle)^2 \quad (21)$$

V prípade, že \mathbf{C} je číslo $\mathbf{C} = C$ (presnejšie operátor rovný násobku jednotkového operátora) dostaneme

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} C^2 \quad (22)$$

Diskusie o fyzikálnom význame vzťahu neurčitosti nebudeme opakovať.

Tým máme zavedenú fyzikálnu interpretáciu všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky; obmedzili sme sa však iba na formalizmus týkajúci sa určitého časového okamihu. Otázkami opisu časového vývoja fyzikálnej sústavy sa budeme zaoberať v osobitnom článku tejto kapitoly.

Poznamenajme ešte na záver, že experimentálne priamo verifikovateľné sú jedine predpovede získané na základe vzťahu (11) (resp. vzťahu (2), ktorý je jeho dôsledkom). Výsledok v (11) sa však nezmení, ak namiesto vektora $|\varphi\rangle$ priradíme tomu istému stavu vektor s inou fázou napr.

$$e^{i\alpha}|\varphi\rangle \quad (23)$$

kde α je reálne číslo. Znamená to, že vektory $|\varphi\rangle$ a $e^{i\alpha}|\varphi\rangle$ sú priradené tomu istému stavu. Množinu vektorov (23), ktoré sa navzájom líšia iba fázou, nazývame normovaným lúčom v Hilbertovom priestore. Striktne hovoriac stavu fyzikálneho systému je priradený lúč v Hilbertovom priestore. Poznamenajme však hneď, že to neznamená, že pri výpočtoch nemusíme dávať pozor na fázu. Mnohé výsledky sú totiž odvodené pre istú fázovú konvenciu, ktorú pri výpočtoch potom musíme rešpektovať.

¹⁵⁶ Ukážte ako cvičenie, že takto definovaný operátor \mathbf{C} je hermitovský.

¹⁵⁷ Zovšeobecnenie na prípad $\bar{A}, \bar{B} \neq 0$ je už jednoduché.

10.4 TEÓRIA REPREZENTÁCIÍ

Pri praktických výpočtoch je niekedy vhodné používať formalizmus v tvare, v akom sme ho opísali, t. j. pracovať s vektormi a operátormi bezsúradnicovým spôsobom. Inokedy je ale technicky výhodnejšie zaviesť vo vektorovom priestore súradnice a pracovať s nimi.¹⁵⁸ V tomto článku ukážeme, ako takéto súradnice v priestore stavov zaviesť a ako možno prechádzať od jedného systému súradníc k inému.

Základná myšlienka je očividná: treba v priestore stavov zvoliť vhodnú bázu a vektory reprezentovať ich zložkami vo zvolenej báze.

Podľa nášho predpokladu priestor stavov je separabilný Hilbertov priestor, preto v ňom možno zvoliť úplnú postupnosť ortonormálnych vektorov; označme ju $\{|\varphi\rangle\}_{n=1}^{\infty}$. Budeme predpokladať, že priestor je nekonečnorozmerný, t. j. zvolená báza má nekonečne veľa prvkov. V niektorých prípadoch, ako je napríklad opis spinu častice v kapitole 5, vystačíme s konečnorozmerným vektorovým priestorom. Potrebné vzťahy v takomto prípade sú úplne analogické nekonečnorozmernému prípadu. Vo vzťahoch obsahujúcich znak sumácie nebudeme preto vypisovať hranice (t. j. nebudeme písať napr. $\sum_{n=1}^{\infty}$ ale iba \sum_n).

Podmienky ortonormálnosti a úplnosti systému $\{|\varphi\rangle\}$ sú

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \quad (1)$$

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \quad (2)$$

Vzhľadom na (2) môžeme každý vektor $|\varphi\rangle$ vyjadriť v tvare

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\varphi\rangle \quad (3)$$

Koeficienty $a_n = \langle\varphi_n|\varphi\rangle$ sa nazývajú zložky (Fourierove komponenty) vektora $|\varphi\rangle$ v báze $\{|\varphi_n\rangle\}$ a jednoznačne určujú – reprezentujú – vektor $|\varphi\rangle$. Je užitočné koeficienty a_n usporiadať do tvaru stĺpca (s nekonečným počtom riadkov). Vektor $|\varphi\rangle$ je potom jednoznačne reprezentovaný takýmto stĺpcom

$$|\varphi\rangle \sim \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\varphi_1|\varphi\rangle \\ \langle\varphi_2|\varphi\rangle \\ \langle\varphi_3|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4)$$

Ak poznáme komponenty vektora v danej báze, možno jednoducho vyjadriť skalárny súčin dvoch vektorov, napr. $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$. Vektor $|\varphi\rangle$ máme už vyjadrený v (3) a vektor $|\psi\rangle$ vyjadríme obdobne v báze $\{|\varphi_n\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_n b_n |\varphi_n\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \quad (5)$$

Pre skalárny súčin $\langle\varphi|\psi\rangle$ dostaneme vyjadrenie

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\sum_n a_n^* \langle\varphi_n|) (\sum_m b_m |\varphi_m\rangle) = \sum_n \sum_m a_n^* b_m \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \sum_n \sum_m a_n^* b_m \delta_{nm}$$

bude teda

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_n a_n^* b_n = \sum_n \langle\varphi_n|\varphi\rangle^* \langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_n \langle\varphi|\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|\psi\rangle \quad (6)$$

Vzťah (6) ukazuje, že je vhodné priradiť bra-vektoru $\langle\varphi|$ riadkovú maticu (s nekonečným počtom stĺpcov)

$$\langle\varphi| \sim (a_1^*, a_2^*, \dots) \quad (7)$$

Keďže ket-vektoru je priradený stĺpec (4), môžeme skalárny súčin dvoch vektorov chápať ako násobenie riadku typu (7) so stĺpcom typu (4) v zmysle maticového násobenia¹⁵⁹ (matice typu $(1, \infty)$ s maticou typu $(\infty, 1)$).

¹⁵⁸ Podobne aj napríklad v úlohách z mechaniky je niekedy výhodné pracovať s rovnicami „vo vektorovom tvare“. Inokedy je výhodnejšie pracovať so súradnicami vektorov.

¹⁵⁹ Porovnaj so skalárnym súčinom v spinovom priestore (kapitola 5).

Všimnime si, že vzťah (6) môžeme dostať i priamo, ak využijeme podmienku úplnosti (2) a do skalárneho súčinu „vsunieme jednotkový operátor“ v tvare (2). Dostaneme

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | 1 | \psi \rangle = \langle \varphi | \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \psi \rangle = \sum_n \langle \varphi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle$$

čo je vzťah (6). Trik so „vsunutím“ jednotky sa používa mimoriadne často a treba si ho zapamätať. Pripomeňme si tu druhý častý trik (ktorý sme už viackrát použili), a to násobenie vektorovej rovnosti vhodným bra-vektorom a využitie podmienky ortonormálnosti (1). Príklad

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \sum_n a_n |\varphi_n\rangle \\ \langle \varphi_m | \varphi \rangle &= \sum_n a_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle \\ \langle \varphi_m | \varphi \rangle &= a_m \end{aligned}$$

S týmito dvoma trikmi sa dá zvládnuť celá teória reprezentácií tak ľahko, že by sme zvyšok tohto článku mohli nechať čitateľovi ako cvičenie.

Ostáva nám zodpovedať otázku, ako je reprezentovaný operátor v prípade, že vektory sú reprezentované jednodielcovými maticami. Použijeme spomínané triky a prepíšeme vektorovú rovnosť

$$|\psi\rangle = \mathbf{A}|\varphi\rangle$$

do tvaru

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \psi \rangle &= \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi \rangle \\ \langle \varphi_n | \psi \rangle &= \sum_m \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \varphi \rangle \\ b_n &= \sum_m A_{nm} a_m \end{aligned} \tag{8}$$

kde sme zaviedli označenie

$$A_{nm} = \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi_m \rangle \tag{9}$$

Vidíme, že operátor \mathbf{A} je jednoznačne¹⁶⁰ reprezentovaný maticou

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \tag{10}$$

a vzťah (8) budeme chápať ako maticové násobenie. Reprezentácia operátorov maticami (9) má tú vlastnosť, že súčinu operátorov je priradený súčin príslušných matic, t. j. operátoru $\mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ je priradená matica

$$\mathbf{C}_{ik} = \sum_n \mathbf{A}_{in} \mathbf{B}_{nk}$$

kde \mathbf{A}_{ij} , \mathbf{B}_{ij} sú matice priradené operátorom \mathbf{A} , \mathbf{B} . Dôkaz je jednoduchý a využíva trik so „vsunutím jednotky“.

Všimnime si ešte, že ak operátor \mathbf{A} je hermitovský, potom platí

$$\mathbf{A}_{nm}^* = \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi_m \rangle^* = \langle \mathbf{A} \varphi_m | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \mathbf{A}^+ | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \mathbf{A} | \varphi_n \rangle = \mathbf{A}_{mn}$$

V konečnorozmernom prípade nazývame maticu, pre ktorú platí

$$\mathbf{A}_{nm} = \mathbf{A}_{mn}^* \tag{11}$$

hermitovskou maticou. Budeme používať tento názov aj v nekonečnorozmernom prípade.¹⁶¹

¹⁶⁰ Pre ohraničený operátor sa jednoznačnosť priradenia operátor \leftrightarrow matica dá ľahko ukázať. Pre všeobecnejšie operátory môžeme naraziť na ťažkosti a takéto prípady treba preskúmať zvlášť, čo robiť nebudeme.

¹⁶¹ Nie je to celkom korektné, pretože nie každej (nekonečnorozmernej) matici, ktorá spĺňa vzťah (11), zodpovedá spojitý hermitovský operátor. Vzťah (11) nezaručuje totiž spojitosť (ohraničenosť).

Vektory (a operátory) môžeme reprezentovať vo viacerých bázach. Všimnime si preto vzťahy medzi zložkami vektorov v rôznych bázach a tak isto vzťahy medzi maticami reprezentujúcimi ten istý operátor v rôznych bázach.

Predpokladajme, že v danom vektorovom priestore máme dve bázy; prvú označíme $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots$, druhú $|b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots$. Pri prvej báze budeme hovoriť o A -reprezentácii, pri druhej o B -reprezentácii.

Zložky vektora $|\psi\rangle$ v A -reprezentácii sú $\langle a_i|\psi\rangle$, v B -reprezentácii $\langle b_i|\psi\rangle$. Každá z báz tvorí úplný ortonormovaný systém, a preto

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1, \quad \sum_n |b_n\rangle\langle b_n| = 1 \quad (12)$$

Ak do skalárneho súčinu $\langle a_i|\psi\rangle$ vsunieme jednotkový operátor zapísaný v tvare druhého z rozkladov (12), dostaneme:

$$\langle a_i|\psi\rangle = \sum_k \langle a_i|b_k\rangle\langle b_k|\psi\rangle \quad (13)$$

Rovnica (13) predstavuje vzťah medzi zložkami vektora v A - a B -reprezentáciách. Ak zavedieme maticu U_{ik} vzťahom $U_{ik} = \langle a_i|b_k\rangle$, môžeme prepísať (13) na tvar

$$\langle a_i|\psi\rangle = \sum_k U_{ik}\langle b_k|\psi\rangle \quad (14)$$

Matica (nekonečnorozmerná) U_{ik} spĺňa podmienku

$$\sum_k U_{ik}(U_{jk})^* = \sum_k \langle a_i|b_k\rangle\langle b_k|a_j\rangle = \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \quad (15)$$

Takúto maticu budeme volať (podobne ako v konečnorozmernom prípade – pozri (5.8.8)) unitárnou.

Nech teraz D je operátor. V A -reprezentácii je operátor D reprezentovaný maticou s prvkami $\langle a_i|D|a_k\rangle$, v B -reprezentácii maticou s prvkami $\langle b_i|D|b_k\rangle$. Pre prechod od jednej reprezentácie k druhej stačí položiť $D = \mathbf{1}D\mathbf{1}$ a vyjadriť jednotkový operátor pomocou (12). Dostaneme:

$$\langle a_i|D|a_k\rangle = \sum_m \sum_s \langle a_i|b_m\rangle\langle b_m|D|b_s\rangle\langle b_s|a_k\rangle \quad (16)$$

Pomocou matice s prvkami $U_{ik} = \langle a_i|b_k\rangle$ môžeme (16) upraviť na tvar

$$\langle a_i|D|a_k\rangle = \sum_m \sum_s U_{im}\langle b_m|D|b_s\rangle(U^+)_{sk} \quad (17)$$

kde $(U^+)_{sk} = (U_{ks})^* = \langle a_k|b_s\rangle^* = \langle b_s|a_k\rangle$. Rovnice (14) a (17) predstavujú vzťahy medzi vyjadreniami operátorov a vektorov v A - a B -reprezentáciách. Prechod od jednej reprezentácie k druhej teda sprostredkuje unitárna matica U_{ik} . Je dobré uvedomiť si názornú geometrickú interpretáciu prvkov tejto matice: V prípade reálneho Hilbertovho priestoru prvky $U_{ik} = \langle a_i|b_k\rangle$ sú vlastne smerové kosínusy jednotlivých vektorov jednej bázy voči druhej báze.

Prakticky volíme vhodnú bázu zväčša tak, že zvolíme určitý úplný systém komutujúcich operátorov a za bázu potom volíme systém (ortonormálny) ich spoločných vlastných vektorov. Čitateľ si sám môže overiť, že v tomto prípade matice reprezentujúce operátory zvoleného úplného systému (a operátory, ktoré sú ich funkciami) budú diagonálne matice.¹⁶²

Na záver ešte terminologickú poznámku. Na stĺpcové matice, ktoré reprezentujú vektory v určitej báze, sa môžeme pozeráť aj ako na určitú konkrétnu realizáciu Hilbertovho priestoru.¹⁶³ Operátormi na tomto Hilbertovom priestore sú práve matice. Preto často zamieňame pojmy stavový vektor a vektor-stĺpec reprezentujúci stavový vektor, ako aj pojmy operátor a matica reprezentujúca operátor.

10.5 PRÍPAD SPOJITÉHO SPEKTRA

V doterajšej diskusii sme sa obmedzili iba na veličiny, ktorým sú priradené spojité hermitovské operátory s čisto diskretným spektrom. Prax ale ukazuje, že nie všetkým fyzikálne zaujímavým

¹⁶² S diagonálnymi maticami sa technicky manipuluje oveľa jednoduchšie. Tu je príčina toho, že pre danú konkrétnu úlohu je jedna reprezentácia technicky výhodnejšia ako druhá.

¹⁶³ Normovateľné postupnosti, ako vieme, tvoria Hilbertov priestor.

veličinám sa dajú priradiť takéto operátory, čo však vedie k podstatným matematickým ťažkostiam.¹⁶⁴ Budeme ich ilustrovať niekoľkými príkladmi na konkrétnej realizácii Hilbertovho priestoru stavov na vlnových funkciách v jednorozmernom prípade.¹⁶⁵ Presnejšie: budeme uvažovať Hilbertov priestor komplexných funkcií jednej reálnej premennej kvadraticky integrovateľných na intervale $(-\infty, \infty)$, t. j. takých, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 < \infty \quad (1)$$

Jedna ťažkosť spočíva v tom, že fyzikálne relevantný operátor – akým je napríklad operátor x (násobenie súradnicou) – nemusí byť definovateľný na celom Hilbertovom priestore. Naozaj, z podmienky (1) ešte nevyplýva, že aj funkcia $\psi(x) = x\varphi(x)$ je kvadraticky integrovateľná.

Horšie však je, že z podmienky (1) nevyplýva ani existencia integrálu typu

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x)x\varphi(x) \quad (2)$$

ktorý by mal reprezentovať strednú hodnotu súradnice v (normovanom!) stave $\varphi(x)$. Zdalo by sa, že ťažkosť môžeme obísť tak, že sa obmedzíme len na také kvadraticky integrovateľné funkcie, ktoré klesajú v ∞ k nule rýchlejšie ako, povedzme, $1/x^2$. Narazíme však na to, že priestor takýchto funkcií nie je úplný. Iná ťažkosť sa objaví pri operátore $p = -i\hbar\partial/\partial x$, ktorý nemá v uvažovanom Hilbertovom priestore žiadny vlastný vektor. Naozaj, rovnica

$$p\varphi(x) = a\varphi(x) \quad (3)$$

má síce netriviálne riešenie $\varphi(x) = e^{ipx/\hbar}$ pre ľubovoľné p , lenže funkcia $e^{ipx/\hbar}$ nie je kvadraticky integrovateľná, a nepatrí do Hilbertovho priestoru stavov.

Rovnica

$$x\varphi_a(x) = a\varphi_a(x) \quad (4)$$

dokonca vôbec nemá riešenie v priestore obyčajných funkcií okrem triviálneho $\varphi(x) = 0$. V zmysle zovšeobecnených funkcií však platí

$$x\delta(x-a) = a\delta(x-a) \quad (5)$$

Ukážme si teraz, ako ťažkosti tohto druhu formálne elegantne obišiel Dirac v svojej teórii reprezentácií operátorov so spojitým spektrom. Jeho argumentácia je síce skôr intuitívna ako matematicky presná, ale jeho formalizmus je veľmi praktický a názorný. Fyzici ho preto bežne používajú.

Pripomeňme si opäť situáciu v prípade operátora hybnosti vo formalizme vlnových funkcií (v jednom rozmere). Doteraz sme ťažkosti obchádzali zväčša tak, že sme používali „normovanie na konečný objem“ (pozri článok 2.2). Diracov formalizmus namiesto toho pracuje s rovinnými vlnami „normovanými na δ -funkciu“.

Funkcie

$$\Phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar)$$

splňajú vzťah

$$p\Phi_p(x) = p\Phi_p(x)$$

nepatria však do Hilbertovho priestoru funkcií s integrovateľným kvadrátom. Nazvime ich preto zovšeobecnené vlastné funkcie operátora p . Tieto funkcie majú však mnohé vlastnosti podobné ako funkcie tvoriace bázu v Hilbertovom priestore: Podľa článku 7.3 funkcie $\Phi_p(x)$ tvoria ortonormovaný systém v zmysle

$$\int \Phi_p^*(x)\Phi_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$$

ktorý je úplný, t. j. „ľubovoľnú“ funkciu $\psi(x)$ možno vyjadriť v tvare

$$\psi(x) = \int c(p)\Phi_p(x) dp$$

¹⁶⁴ K fyzikálnym zriedkavejšie, lebo často problém odstránime, ak si predstavíme sústavu uzavretú v konečnom (hoci obrovskom) objeme a použijeme periodické okrajové podmienky.

¹⁶⁵ Pozri diskusiu v závere predchádzajúceho článku.

kde

$$c(p) = \int \Phi_p^*(x) \psi(x) dx$$

Po dosadení do predchádzajúceho vzťahu dostaneme podmienku úplnosti

$$\int \Phi_p(x) \Phi_p^*(x') dp = \delta(x - x')$$

Rovinné vlny „normované na δ -funkciu“ môžeme teda použiť ako „spojitú bázu“ v priestore stavov.

Vráťme sa teraz naspäť k všeobecnému formalizmu. Majme hermitovský operátor A priradený nejakej veličine. Nech jeho zovšeobecnené vlastné hodnoty, definované formálnym vzťahom

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (7)$$

(kde $|a_n\rangle$ je zovšeobecnený¹⁶⁶ vlastný vektor príslušný k hodnote a) pokrývajú celú reálnu os $(-\infty, \infty)$. Pre konkrétnosť si môžeme predstavovať pod A operátor hybnosti na priestore kvadraticky integrovateľných funkcií.

Predpoklad o úplnosti systému vlastných vektorov $\{|a_n\rangle\}$ hovorí, že každý vektor Hilbertovho priestoru môžeme písať v tvare

$$|\varphi\rangle = \int da c(a)|a\rangle \quad (8)$$

kde $c(a)$ je vhodná funkcia (Fourierova transformácia). Je užitočné normovať vektory $|a_n\rangle$ tak, aby platilo

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a') \quad (9)$$

Potom totiž z (8) po vynásobení vektorom $\langle a'|$ dostaneme

$$\langle a'|\varphi\rangle = \int da c(a)\langle a'|a\rangle = \int da c(a)\delta(a - a') = c(a')$$

Teda platí:

$$c(a) = \langle a|\varphi\rangle \quad (10)$$

čo predstavuje „Fourierovu transformáciu“.

Po dosadení (10) do (8) dostaneme formálny tvar podmienky úplnosti

$$1 = \int da |a\rangle \langle a| \quad (11)$$

Vidíme teraz zrejmu analógiu s reprezentáciou vektorov v báze (spočítateľnej) Hilbertovho priestoru. Funkcia $c(a)$ je analógiou Fourierových koeficientov (4.4), podmienka (9) je analógiou podmienky (4.1) a podmienka (11) analógiou (4.2). Operátor B potom tiež reprezentujeme „maticou“ so spojito sa meniacimi indexmi

$$B_{aa'} = \langle a|B|a'\rangle \quad (12)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že pre takéto reprezentácie vektorov a operátorov ostanú formálne splnené všetky vzťahy z predchádzajúceho článku, iba sumovania sa nahradia integrálmi, vzťah (4.1) vzťahom (9) a vzťah (4.2) vzťahom (11). O systéme (zovšeobecnených) vektorov $|a\rangle$ preto často zjednodušene hovoríme ako o (spojitej) báze Hilbertovho priestoru. Striktne vzaté toto pomenovanie neobstoí, lebo vektory $|a\rangle$ nie sú prvkami tohto priestoru, ktorý naďalej ostáva separabilný, a teda v ňom existuje nanajvyš spočítateľná báza.

Prechod od jednej „spojitej bázy“ $\{|a\rangle\}$ k inej báze $\{|b\rangle\}$ potom v analógii so vzťahmi (4.14) a (4.17) sprostredkuje „unitárna matica“

$$U_{ba} = \langle b|a\rangle \quad (13)$$

Ostáva nám ešte pripomenúť si postuláty súvisiace s meraním v prípade spojitého spektra. V platnosti ostáva predpoklad, že výsledkom merania veličiny A „môže byť“ ľubovoľná (zovšeobecnená) vlastná hodnota operátora A . Slová môže byť sme napísali v úvodzovkách preto, že zrejme nemá zmysel pýtať

¹⁶⁶ V ďalšom už prívlastok „zovšeobecnený“ budeme často vynechávať; z kontextu bude zrejmé, kam takýto prívlastok patrí.

sa na pravdepodobnosť namerať presne určitú hodnotu a . Zmysel má jedine pravdepodobnosť namerať niektorú hodnotu z intervalu $\Delta = (a, a')$ a pre túto pravdepodobnosť postulujeme

$$P(\Delta) = \int_{\Delta} da |c(a)|^2 \quad (14)$$

kde $c(a)$ je funkcia z rozkladu (8), ktorej kvadrát je teda hustotou pravdepodobnosti.

Formálnejšie možno (v analógii so vzťahom (3.16)) pravdepodobnosť $P(\Delta)$ vyjadriť i pomocou projekčného operátora

$$P(\Delta) = \int_{\Delta} |a\rangle da \langle a| \quad (15)$$

v tvare

$$P(\Delta) = \langle \varphi | P(\Delta) | \varphi \rangle \quad (16)$$

Strednú hodnotu veličiny a počítame obvyklým spôsobom, t. j.

$$\bar{A} = \langle \varphi | \mathbf{A} | \varphi \rangle \quad (17)$$

Na záver tohto článku ešte naznačíme, akým smerom sa uberajú rigorózne matematické úvahy, ktoré dávajú oprávnenie „elegantnému, ale matematicky nedefinovanému Diracovmu formalizmu, ktorý fyzici už počas niekoľkých generácií používajú“.¹⁶⁷

Predovšetkým treba zohľadniť fakt, ktorý sme videli ilustrovaný na viacerých príkladoch, že Hilbertov priestor ako priestor stavov je na niektoré účely „príliš veľký“, pre iné účely zasa „príliš malý“. Fyzikálne je napríklad neprijateľné, aby pre stav nebola definovaná stredná hodnota súradnice. Videli sme však, že takýto stav patrí do Hilbertovho priestoru kvadraticky integrovateľných funkcií. V príkladoch za touto kapitolou je naznačená konštrukcia stavu lineárneho harmonického oscilátora, ktorý je normovateľný, ale zodpovedá mu nekonečná stredná hodnota energie. Takýto stav je opäť fyzikálne neprijateľný. Vidno teda, že v tomto zmysle je Hilbertov priestor priveľký a bolo by ho treba zúžiť na nejaký priestor „fyzikálne realizovateľných stavov“. Na druhej strane by Hilbertov priestor bolo treba i rozšíriť, aby obsahoval i (experimentálne nerealizovateľné ale z teoretického hľadiska užitočné) zovšeobecnené stavy napríklad typu rovinných vln. Takéto zovšeobecnené stavy vlastne potrebujeme len na to, aby sme mohli pracovať v reprezentácii, v ktorej „realizovateľný“ vektor $|\varphi\rangle$ Hilbertovho priestoru je reprezentovaný pomocou (Fourierových) koeficientov typu

$$\langle a | \varphi \rangle \quad (18)$$

kde $|a\rangle$ formálne označuje zovšeobecnený stav. Koeficienty typu (18) sa síce nedajú realizovať ako skalárny súčin v Hilbertovom priestore, ale môžeme ich definovať ako funkcionály na priestore vektorov $|\varphi\rangle$. Výrazy typu $\langle \varphi | a \rangle$ potom môžeme čisto formálne definovať vzťahom

$$\langle \varphi | a \rangle = \langle a | \varphi \rangle^*$$

Ak sú definované funkcionály $\langle a |$, potom môžeme nazvať zobecnenou vlastnou hodnotou „hermitovského“ operátora \mathbf{A} také číslo a , pre ktoré existuje (nenulový) funkcionál $\langle a |$ taký, že platí:

$$\langle a | \mathbf{A} | \varphi \rangle = a \langle a | \varphi \rangle$$

pre všetky $|\varphi\rangle$ z priestoru „realizovateľných“ stavov. Funkcionál $\langle a |$ môžeme nazvať zovšeobecneným vlastným vektorom operátora \mathbf{A} .

Ak pre systém zovšeobecnených vlastných vektorov operátora \mathbf{A} platí, že skalárny súčin ľubovoľných vektorov $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ môžeme vyjadriť v tvare

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int da \langle \varphi | a \rangle \langle a | \psi \rangle \quad (19)$$

potom vektory $|a\rangle$ tvoria „úplný systém“ a môžeme formálne (v zmysle vzťahu (19)) zaviesť označenie

$$1 = \int da |a\rangle \langle a| \quad (20)$$

¹⁶⁷ Voľný citát z knihy A. Böhma, *The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics*, zo série *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag 1978.

resp.

$$|\psi\rangle = \int da |a\rangle \langle a|\psi\rangle \quad (21)$$

Vzťahy (20), (21) stačia na to, aby sme mohli používať pre vektory $|\varphi\rangle, \dots$ Diracov formalizmus. Základná idea rigorózneho matematického prístupu k tejto problematike je teda pomerne jednoduchá. Presné formulácie, dôkazy a zistenie toho, o aké priestory ide v prípade „realizovateľných“ vektorov $|\varphi\rangle$ a zovšeobecnených vektorov $|a\rangle$ sú dosť náročné. Príslušným matematickým aparátom je teória tzv. Gel'fandových tripletov.¹⁶⁸ Pre prvé zoznámenie sa s použitím tohto matematického aparátu odporúčame už citovanú monografiu A. Böhma, kde je podrobne a matematicky korektne spracovaný problém lineárneho harmonického oscilátora.

10.6 x-REPREZENTÁCIA A p-REPREZENTÁCIA

V tomto článku si ukážeme, že na formalizmus vlnových funkcií, používaný v predchádzajúcich kapitolách, sa môžeme pozerat' ako na reprezentáciu v „spojitej báze“ vlastných stavov operátora x . Ukážeme tým vlastne, že formalizmus vlnových funkcií, ktorý predsa len mal určité význačné postavenie pri našom intuitívnom a induktívnom spôsobe budovania aparátu kvantovej mechaniky, je len špeciálnym prípadom všeobecnej schémy opísanej v tejto kapitole.

Pre jednoduchosť uvažujme jednorozmerný pohyb častice. Všeobecnému stavu častice je priradený ket-vektor $|\psi\rangle$ z Hilbertovho priestoru. Vlastné stavy operátora súradnice x prislúchajúce k hodnote x označme $|x\rangle$. Platí teda¹⁶⁹

$$x|x\rangle = x|x\rangle \quad (1)$$

V „spojitej báze“ $\{|x\rangle\}$ je stav $|\psi\rangle$ reprezentovaný zložkami

$$\langle x|\psi\rangle \quad (2)$$

Pri fixovanom $|\psi\rangle$ definuje výraz (2) komplexnú funkciu reálnej premennej x , ktorá podľa (5.19) má význam amplitúdy pravdepodobnosti v x -priestore. To sú presne vlastnosti stavovej vlnovej funkcie, zodpovedajúcej stavu $|\psi\rangle$. Označme teda

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (3)$$

Ukážme si teraz, že operátoru x v tejto reprezentácii zodpovedá podľa očakávania obyčajné násobenie súradnicou x . Operátor x je reprezentovaný maticou

$$\langle x'|x|x''\rangle$$

ktorú vzhľadom na (1) a na podmienku normovanosti

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

môžeme vyjadriť v tvare

$$\langle x'|x|x''\rangle = x''\delta(x' - x'') \quad (4)$$

Zo vzťahu (4) a z podmienky úplnosti

$$\int |x\rangle dx \langle x| = 1$$

máme

$$\langle x|x|\psi\rangle = \int dx' \langle x|x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \int dx' x' \delta(x' - x) \psi(x') = x\psi(x)$$

čo hovorí, že zložky vektora $x|\psi\rangle$ v súradnicovej reprezentácii sú

$$\langle x|x|\psi\rangle = x\psi(x) \equiv x\langle x|\psi\rangle$$

¹⁶⁸ Terminológia, zdá sa, nie je celkom ustálená; príslušný ruský termín je „osnaščennoje prostranstvo Gilberta“, anglický: „Rigged Hilbert Space“.

¹⁶⁹ Stav $|x\rangle$ by mal byť stav, v ktorom s istotou nameriame hodnotu súradnice x . Takýto stav, samozrejme, nie je prakticky realizovateľný, ide teda o „zovšeobecnený“ vlastný stav operátora x .

a túto rovnicu sme použili vo formalizme vlnových funkcií v tvare

$$x\psi(x) = x\psi(x)$$

Teraz nájdeme operátor hybnosti v súradnicovej reprezentácii. Budeme vychádzať z toho, že vlastné stavy operátora p spĺňajú rovnicu

$$p|p\rangle = p|p\rangle$$

a sú normované na δ -funkciu $\langle p|p\rangle = \delta(p - p')$

V súradnicovej reprezentácii už tieto stavy poznáme.

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

Pre maticové elementy operátora p v x -reprezentácii platí (využívame $1 = \int dp' |p'\rangle\langle p'|$)

$$\begin{aligned} \langle x'|p|x''\rangle &= \iint dp' dp'' \langle x'|p'\rangle \langle p'|p|p''\rangle \langle p''|x''\rangle = \\ &= \iint dp' dp'' \langle x'|p'\rangle p'' \delta(p' - p'') \langle p''|x''\rangle = \\ &= \iint dp' \langle x'|p'\rangle p' \langle p'|x''\rangle = \\ &= \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} p' e^{ip'(x' - x'')/\hbar} = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{ip'(x' - x'')/\hbar} = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x'') \end{aligned}$$

Pre vektor $|p|x\rangle$ potom platí

$$\begin{aligned} \langle x|p|\psi\rangle &= \int dx' \langle x|p|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \\ &= \int dx' \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) \langle x'|\psi\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle \end{aligned}$$

a to je známy vzťah, ktorý sme vo formalizme vlnových funkcií písali v tvare

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

Úplne rovnakým postupom dostaneme

$$\langle x'|p^2|\psi\rangle = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x|\psi\rangle$$

a toto spolu so vzťahom

$$\langle x|V(x)|\psi\rangle = V(x)\langle x|\psi\rangle = V(x)\psi(x)$$

stačí na to, aby sme z bezčasovej Schrödingerovej rovnice zapísanej vo všeobecnom tvare

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(x) \quad (5)$$

prišli v súradnicovej reprezentácii k známemu tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x|\psi\rangle + V(x)\langle x|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle \quad (5')$$

kde

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

Schrödingerovu rovnicu (5') sme používali vo formalizme vlnových funkcií v 2. až 9. kapitole.

Časová závislosť stavu je vo všeobecnom formalizme popísaná vektorom $|\psi(t)\rangle$ ktorý je riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

kde H je hamiltonián sústavy. Pre časticu vo vonkajšom poli s potenciálovou energiou $V(x)$ je H dané vzťahom (5). Ak časovú Schrödingerovu rovnicu prepíšeme tým istým postupom ako vyššie do súradnicovej reprezentácie¹⁷⁰ dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x|\psi(t)\rangle = \left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \langle x|\psi(t)\rangle$$

čo je v zápise $\langle a|\psi(t)\rangle \equiv \psi(x, t)$ časová Schrödingerova rovnica vo formalizme vlnových funkcií.

Celkom analogickým postupom by sme mohli bezčasovú Schrödingerovu rovnicu prepísať i do p -reprezentácie. Vyjadrenie operátora p je v nej jednoduché

$$\langle p'|p|p''\rangle = p''\delta(p' - p'') \quad (6)$$

Vyjadrenie operátora x je o čosi zdĺhavejšie, ale prebieha po už vychodených koľajach

$$\begin{aligned} \langle p'|x|p''\rangle &= \iint dx' dx'' \langle p'|x'\rangle \langle x'|x|x''\rangle \langle x''|p''\rangle = \\ &= \iint dx' dx'' \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-ip'x'/\hbar} x'' \delta(x' - x'') e^{ip''x''/\hbar} = \\ &= \int \frac{dx'}{2\pi\hbar} x' e^{-ix'(p' - p'')/\hbar} = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \int \frac{dx'}{2\pi\hbar} e^{-ix'(p' - p'')/\hbar} = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p'') \end{aligned}$$

Analogicky

$$\langle p'|x''|p''\rangle = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \right)^n \delta(p' - p'') \quad (7a)$$

$$\langle p'|V(x)|p''\rangle = V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \right) \delta(p' - p'') \quad (7b)$$

Pomocou vzťahov (6) a (7) už môžeme prepísať bezčasovú Schrödingerovu rovnicu do p -reprezentácie. Výsledok bude

$$E\langle p|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m} \langle p|\psi\rangle + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \langle p|\psi\rangle$$

pričom $\langle p|\psi\rangle = \psi(p)$ je stavovou vlnovou funkciou v p -reprezentácii.

Pre lineárny harmonický oscilátor by sme týmto postupom pre bezčasovú Schrödingerovu rovnicu dostali v x -reprezentácii.

$$E\langle x|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x|\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \langle x|\psi\rangle \quad (8)$$

¹⁷⁰ Báza nezávisí od času a je úplne rovnaká ako tá, ktorú sme používali vyššie.

a v p -reprezentácii

$$E\langle p|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} p^2 \langle p|\psi\rangle - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \langle p|\psi\rangle \quad (9)$$

pričom riešenia v jednej a v druhej reprezentácii sú viazané vzťahmi

$$\langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle$$

$$\langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

Rovnice (8) a (9) sú vyjadrením tej istej abstraktnej rovnice

$$H|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m} |\psi\rangle + \frac{m\omega^2}{2} x^2 |\psi\rangle \quad (10)$$

v dvoch rôznych reprezentáciách.

Teraz vidno, že rôzne reprezentácie abstraktných operátorových rovníc v Hilbertovom priestore sú v istom zmysle analógiou dobre známej situácie z elementárnej mechaniky. Druhý Newtonov zákon môžeme totiž písať buď v „abstraktnom“ vektorovom tvare

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (11)$$

alebo v zložkách odpovedajúcich určitému výberu bázy (súradných osí)

$$F_x = ma_x, \quad F_y = ma_y, \quad F_z = ma_z \quad (12)$$

Všeobecný zápis Schrödingerovej rovnice je analógom „abstraktného vektorového zápisu“ (11) a Schrödingerove rovnice (8) a (9) sú analógmi vzťahov (12) v dvoch súradných sústavách.

Pre lineárny harmonický oscilátor sa však ukazuje, že najvýhodnejšou reprezentáciou nie je ani x -reprezentácia, ani p -reprezentácia, ale energetická reprezentácia, s ktorou sa budeme podrobnejšie zaoberať v nasledujúcom článku. Toto je tiež reprezentácia, v ktorej Heisenberg objavil kvantovú mechaniku.

10.7 HARMONICKÝ OSCILÁTOR V ENERGETICKEJ REPREZENTÁCI

Ako ukážku výhodného použitia všeobecného formalizmu nájdeme teraz spektrum lineárneho harmonického oscilátora.

Lineárny harmonický oscilátor je fyzikálny systém daný hamiltoniánom

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

kde x a p sú hermitovské operátory (súradnice a hybnosti), ktoré spĺňajú komutačné pravidlo

$$[x, p] = i\hbar \quad (2)$$

Ukazuje sa, že je výhodné zaviesť pomocné operátory a , a^+ a N definované vzťahmi¹⁷¹

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad (3)$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad (4)$$

$$N = a^+ a \quad (5)$$

¹⁷¹ Trik so zavedením kreačných a anihilačných operátorov a^+ a a má také široké použitie, že si ho treba zapamätať.

V ďalšom postupe budeme skúmať vzťahy medzi operátormi a , a^+ , N a H . Z nasledujúcich tvrdení nebudeme všetky podrobne dokazovať, čitateľ si tak môže urobiť sám ako cvičenie.

Predovšetkým z definičných vzťahov (3), (4) a (5) vyplýva, že operátory a a a^+ sú navzájom hermitovsky združené (označenie sme už tak volili) a operátor N je hermitovský:¹⁷²

$$N^+ = (a^+a)^+ = a^+a^{++} = a^+a = N$$

Priamym výpočtom ľahko overíme, že platia komutačné vzťahy:

$$[a, a^+] = 1 \quad (6)$$

$$[a, N] = a, \quad [a^+, N] = -a^+ \quad (7)$$

Zo vzťahov (3), (4) môžeme vyjadriť operátory x a p .

$$x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a + a^+) \quad (8)$$

$$p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}i(a - a^+)$$

po dosadení do (1) dostaneme vyjadrenie Hamiltoniánu pomocou operátorov a , a^+ (pri úprave použijeme aj vzťah (6)):

$$H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \quad (9)$$

Spektrum hamiltoniánu nájdeme, keď nájdeme spektrum operátora N . Predpokladajme¹⁷³ teda, že existuje systém vlastných stavov $|c\rangle$ operátora N :

$$N|c\rangle = c|c\rangle$$

kde vlastné hodnoty c sú zatiaľ bližšie nešpecifikované.

Ukážeme si teraz, že vlastné hodnoty operátora N sú nezáporné (samozrejme, že sú reálne, pretože $N = N^+$).

Skutočne platí:

$$c = \langle c|N|c\rangle = \langle c|a^+a|c\rangle = \langle c'|c'\rangle \geq 0$$

kde $|c'\rangle = a|c\rangle$

Všimnime si, že ak $c = 0$, potom vektor $|c'\rangle$ má nulovú normu, teda je to nulový vektor.

Ukážeme si teraz, že v prípade $c \neq 0$ je vektor $|c'\rangle = a|c\rangle$ tiež vlastným vektorom operátora N , prislúchajúci k vlastnej hodnote $c' = c - 1$. Je to jednoduchý dôsledok komutačného vzťahu (7):

$$Na|c\rangle = (Na - aN + aN)|c\rangle = ([N, a] + aN)|c\rangle = (-a + ac)|c\rangle = (c - 1)a|c\rangle$$

Platí teda (už po zohľadnení správnej normalizácie)¹⁷⁴

$$|c - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{c}}a|c\rangle \quad (10)$$

Zdôraznime opäť, že pomocou operátora a možno zo stavu $|c\rangle$ vyrobiť nový vlastný stav $|c - 1\rangle$ iba vtedy, keď $c \neq 0$.

Podobne možno ľahko ukázať, že platí (už pre ľubovoľné c)

$$|c + 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{c + 1}}a^+|c\rangle \quad (11)$$

¹⁷² Pretože neskúmame súčasne i definičné obory (neohraničených!) operátorov a , a^+ , N ... majú všetky naše „dôkazy“ len formálny charakter. Rigorózný postup by bol mnohonásobne dlhší a náročnejší. Čitateľ sa s ním môže zoznámiť napr. v monografii A. Böhma citovanej v predchádzajúcom článku, ale pri prvom čítaní kvantovej mechaniky to rozhodne neodporúčame.

¹⁷³ K tomuto predpokladu sa o chvíľu vrátíme.

¹⁷⁴ Predpokladáme, že spektrum H je nedegenerované.

Vzhľadom na vlastnosti (10) a (11) nazývajú sa a^+ a a zvyšovacím a znižovacím operátorom. Častejšie sa však používajú názvy kreačný a anihilačný operátor (dôvod tohto pomenovania bude zrejmý až v kapitole venovanej sekundárnemu kvantovaniu).

Ďalšia myšlienka je už jednoduchá: ak by bolo možné opakovaným pôsobením operátora N a vychádzajúc z nejakého stavu $|c\rangle$ „vyrábať“ stále ďalšie vlastné stavy operátora N s vlastnými hodnotami vždy o jednotku nižšími, prišli by sme do sporu s tvrdením, že tieto vlastné hodnoty musia byť nezáporné. Musí teda nastať taká situácia, že pôsobením operátora a už nemôžeme nový vlastný stav „vyrobiť“, a to, ako vieme, bude len vtedy, ak pri opakovanom pôsobení operátora a narazíme na stav s nulovou vlastnou hodnotou, teda stav $|0\rangle$, pre ktorý platí

$$N|0\rangle = 0|0\rangle \quad (12)$$

Ukázali sme tak, že ak existuje aspoň jeden vlastný stav operátora N , potom musí existovať aj vlastný stav s nulovou vlastnou hodnotou. Nulovú vlastnú hodnotu sme ale dostali postupným znižovaním o jednotku, vychádzajúc z ľubovoľnej vlastnej hodnoty c . Preto číslo c musí byť celé číslo.

V ďalšom budeme preto označovať vlastné stavy N symbolom $|n\rangle$:

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (13)$$

Vychádzajúc zo stavu $|0\rangle$ možno pomocou operátora a^+ skonštruovať ľubovoľný stav $|n\rangle$. Platí (podľa (11))

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle \quad (14)$$

Podľa vzťahu (8) už je zrejmé, že $|n\rangle$ sú aj vlastné stavy hamiltoniánu a platí

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega |n\rangle \quad (15)$$

Vlastné hodnoty operátora energie teda sú

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Náš doterajší postup bol zatiaľ čisto formálny, pod operátormi sme si zatiaľ nepredstavovali nijakú ich konkrétnu realizáciu na určitom Hilbertovom priestore. Podstatné boli len algebraické vzťahy medzi operátormi, z nich význačnú úlohu zohrali komutačné vzťahy (2). Musíme teraz ešte overiť, či taký Hilbertov priestor, spĺňajúci všetky predpoklady (menovite existenciu aspoň jedného vlastného stavu operátora N), existuje. V podstate môžeme postupovať dvoma spôsobmi.

Prvý spôsob. Algebraické vzťahy typu (1), (2) pokladáme fyzikálne za prvotné a dodatočne sa pokúsime skonštruovať abstraktný Hilbertov priestor, na ktorom existuje ich operátorová realizácia. Konštrukcia takého priestoru je jednoduchá. Vydeme z abstraktne chápaných „objektov“ $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$, a abstraktný Hilbertov priestor definujeme ako priestor všetkých ich (formálnych) lineárnych kombinácií¹⁷⁵. Príslušný skalárny súčin na tomto priestore definujeme tak, aby platilo $\langle n|n\rangle = \delta_{nn}$. Vektory $|n\rangle$ potom tvoria bázu takto skonštruovaného Hilbertovho priestoru a vzťahy (10) a (11) potom môžeme považovať za vzťahy, ktorými sú *definované* operátory a a a^+ . Ostatné operátory potom definujeme pomocou príslušných vyjadrení z operátorov a , a^+ (napr. (8), (9)). Čitateľ sa sám môže presvedčiť, že na takto skonštruovanom Hilbertovom priestore budú splnené všetky predpoklady, na ktorých boli založené naše úvahy. Vektory $|n\rangle$ tvoria bázu energetickej reprezentácie, v ktorej operátoru H prislúcha diagonálna matica s elementmi E_0, E_1, E_2, \dots . Operátorom a , a^+ priradíme matice

$$a_{mn} = \langle m|a|n\rangle, \quad a_{mn}^+ = \langle m|a^+|n\rangle$$

Z (10) a (11) vyplýva

$$a_{mn} = \sqrt{n} \delta_{m, n-1}, \quad a_{mn}^+ = \sqrt{n+1} \delta_{m, n+1} \quad (17)$$

¹⁷⁵ Presnejšie ako zaplnenie takého priestoru.

takže matice a_{mn} , a a_{mn}^+ sú:

$$a_{mn} = \begin{pmatrix} \cdot & \sqrt{1} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \text{atd.} \end{pmatrix} \quad a_{mn}^+ = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \text{atd.} & \cdot \end{pmatrix}$$

kde bodky označujú nuly.

Maticové elementy operátorov x a p dostaneme už rýchlo. Z rovníc (8) s využitím (17) dostaneme

$$x_{kj} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} (\sqrt{j}\delta_{k,j-1} + \sqrt{j+1}\delta_{k,j+1})$$

$$p_{kj} = i \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} (\sqrt{j+1}\delta_{k,j+1} - \sqrt{j}\delta_{k,j-1})$$
(18)

Tento spôsob svojím duchom zodpovedá Heisenbergovmu prístupu ku kvantovej mechanike. To, že Heisenberg sa mohol v podstate analýzou spektroskopických dát dostať až k „maticovej mechanike“, k maticovým elementom typu (18), je spojené s faktom, že¹⁷⁶ interakcia žiarenia s nabitou časticou je daná v dipólovom priblížení maticovými elementármi $(r)_{mn}$. Pre lineárny harmonický oscilátor je interakcia daná maticovými elementármi $(x)_{mn}$. Rovnice (18) ukazujú, že $x_{mn} \neq 0$ len pre $m = n \pm 1$. Oscilátor môže preto absorbovať a emitovať len kvantá s energiou $\hbar\omega$, kde ω je kruhová frekvencia oscilátora a $\hbar\omega$ je rozdiel energií medzi dvoma susednými stavmi oscilátora.

Druhý spôsob svojím duchom viac zodpovedá Schrödingerovmu prístupu ku kvantovej mechanike, chápanej ako „vlnovej mechanike“. Tam od začiatku predpokladáme, že máme daný Hilbertov priestor vlnových funkcií a na ňom operátory $x = x$, $p = -i\hbar\partial/\partial x$. Potom, aby mal celý postup až po vzťah (16) oprávnenie, musíme explicitne skonštruovať aspoň jeden vlastný stav operátora N . Ak sa nám to podarí, ukážeme tým tiež, že „heisenbergovský“ a „schrödingerovský“ prístup sú – aspoň v tomto prípade – ekvivalentné.

Vyberieme si stav $|0\rangle$, ktorý spĺňa podmienku

$$a|n\rangle = 0|0\rangle$$
(19)

a preto aj

$$N|0\rangle = a^+a|0\rangle = 0|0\rangle$$

Budeme pracovať v x -priestore a zavedieme označenie $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$. Operátor a vyjadríme podľa (3) a postupom podrobne diskutovaným v predchádzajúcom článku prepíšeme (19) do x -reprezentácie. Dostaneme tak

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

Riešením tejto diferenciálnej rovnice je

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Z požiadavky normovanosti $\psi_0(x)$ nájdeme konštantu A a dostávame

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

čo je dobre známa vlnová funkcia základného stavu lineárneho harmonického oscilátora.

¹⁷⁶ Pozri kapitolu 9.

Tento výsledok spolu s vyjadrením operátora a^+ pomocou (4) a vzťahom (14) vedie k

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \psi_0(x), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (20)$$

kde $\psi_n(x)$ je vlastnou funkciou n -tého excitovaného stavu lineárneho harmonického oscilátora

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

Operátor a^+ má v x -reprezentácii tvar

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \quad (21)$$

a čitateľ sa môže sám presvedčiť, že podľa vzťahu (20) dostaneme nám už známe vlnové funkcie stacionárnych stavov (4.6.14).

10.8 OPIS ČASOVÉHO VÝVOJA

Doteraz sme sa zaoberali formalizmom opisu stavu fyzikálnej sústavy v určitom časovom okamihu. Ak chceme zobrazit' časový vývoj, potom prirodzene predpokladáme, že v každom časovom okamihu t je stavu sústavy priradený určitý vektor Hilbertovho priestoru. Označíme ho napríklad $|\psi(t)\rangle$. Podľa analógie s formalizmom vlnových funkcií potom predpokladáme, že bude platiť Schrödingerova rovnica¹⁷⁷

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (1)$$

kde H je hamiltonián uvažovanej sústavy. Prakticky sa opäť (1) používa ako pohybová rovnica, t. j. hľadáme jej riešenie $|\psi(t)\rangle$ spĺňajúce určitú začiatočnú podmienku typu

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi\rangle \quad (2)$$

Rovnicu (1) so začiatočnou podmienkou (2) možno (prinajmenej formálne) jednoducho vyriešiť. Skonstruujeme operátor

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (3)$$

S výrazmi tohto typu sme sa zatiaľ nestretli a detailnejšie sa s ich definíciou zaoberať nebudeme. Pod takýmito funkciami operátorov si môžeme predstaviť napríklad mocninný rad, v našom prípade

$$e^{-iHt/\hbar} = 1 - \frac{iHt}{\hbar} + \frac{1}{2!} \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^2 + \dots$$

Charakter konvergencie opäť nebudeme skúmať podrobnejšie¹⁷⁸.

Čitateľ sa môže presvedčiť o tom, že takto definovaný operátor je unitárny, t. j. platí

$$U^+(t)U(t) = U(t)U^+(t) = 1$$

Pomocou operátora $U(t)$ možno riešenie rovnice (1) spĺňajúce začiatočnú podmienku (2) zapísať v tvare¹⁷⁹

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\varphi\rangle \quad (4)$$

¹⁷⁷ Pojem derivácie vektorovej funkcie reálnej premennej sme formálne nezaviedli. Čitateľ si vhodnú definíciu sám môže doplniť.

¹⁷⁸ Môžeme si predstaviť pod výrazom typu $\sum_1^\infty A_n$ jeho tzv. silnú limitu, t. j. taký operátor A , pre ktorý platí pre ľubovoľný vektor

$$A|\varphi\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_1^N A_n|\varphi\rangle$$

¹⁷⁹ Keďže operátor $U(t)$ je unitárny, bude stav $|\psi(t)\rangle$ správne normovaný, ak stav $|\varphi\rangle$ je normovaný.

Ak poznáme spektrum hamiltoniánu

$$H|a\rangle = E_n|a\rangle$$

potom operátor $U(t)$ možno vyjadriť v tvare¹⁸⁰

$$U(t) = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n| \quad (5)$$

Techniku riešenia SchR zodpovedajúcu vzťahu (5) už poznáme; ide o použitie rozvoja do úplného systému stacionárnych stavov.

Vyššie uvedený spôsob popisu časového vývoja sústavy sa nazýva *Schrödingerov obraz*.

Často je užitočný iný spôsob popisu časového vývoja (s ktorým sme sa zatiaľ nestretli), a to Heisenbergov obraz.

Stavu, ktorý je opísaný v Schrödingerovom obraze vektorom $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_S(t)\rangle$ priradíme vektor Hilbertovho priestoru

$$|\psi_H\rangle = U^+(t)|\psi_S(t)\rangle = e^{+iHt/\hbar}|\psi_S(t)\rangle \quad (6)$$

Jednoducho si možno overiť, že platí:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi_H\rangle = 0 \quad (7)$$

teda vektor $|\psi_H\rangle$ priradený podľa (6) stavu sústavy nezávisí od času. Pritom priradenie vektora $|\psi_H\rangle$ je jednoznačné, stav $|\psi_S\rangle$ možno jednoznačne zrekonštruovať

$$|\psi_S(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi_H\rangle \quad (8)$$

Vektor $|\psi_H\rangle$ preto môže rovnako dobre reprezentovať stav sústavy ako vektor $|\psi_S(t)\rangle$. Fyzikálnu informáciu – napr. strednú hodnotu veličiny A v čase t – možno pomocou vektora $|\psi_H\rangle$ získať aj tak, že najprv podľa (8) nájdeme $|\psi_S(t)\rangle$ a potom už postupujeme štandardne:

$$\bar{A}(t) = \langle \psi_S(t)|A|\psi_S(t)\rangle = \langle \psi_H|U^+AU|\psi_H\rangle \quad (9)$$

Podľa (9) je však zřejmé, že ak zavedieme označenie

$$A_H(t) = U^+(t)AU(t) \quad (10)$$

potom $A_H(t)$ je (od času závislý) operátor, pomocou ktorého možno vyjadriť strednú hodnotu priamo pomocou $|\psi_H\rangle$:

$$\bar{A}(t) = \langle \psi_H|A_H(t)|\psi_H\rangle \quad (11)$$

Vyjadrenia stavov a operátorov v tvare (6) a (10) nazývame *Heisenbergovým obrazom*. V tomto obraze vektory priradené stavom od času nezávisia, časový vývoj v sústave je opísaný vhodnou časovou závislosťou operátorov: ak v Schrödingerovom obraze je fyzikálnej veličine priradený operátor A , potom v Heisenbergovom obraze je tej istej veličine priradený operátor A_H podľa vzťahu (10).

Úlohu pohybovej rovnice hrá namiesto Schrödingerovej rovnice rovnica, ktorú dostaneme z (10) derivovaním podľa času. Po elementárnych úpravách dostaneme

$$\dot{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A_H(t)] \quad (12)$$

Túto rovnicu potom treba riešiť so začiatočnou podmienkou¹⁸¹

$$A_H(t=0) = A$$

Názorne si možno predstaviť rozdiel medzi Schrödingerovým a Heisenbergovým obrazom tak, že v Schrödingerovom obraze vektory stavov „rotujú“ s časom v Hilbertovom priestore a operátory sa

¹⁸⁰ Vzťah (5) sa dá tiež chápať ako jedna z možných definícií operátorového výrazu $\exp(-iHt/\hbar)$

¹⁸¹ Skutočnosť, že rovnosť vektorov a operátorov priradených v Schrödingerovom a Heisenbergovom obraze stavom a veličinám požadujeme práve v čase $t=0$, je konvencia. Práve tak dobre by sme mohli vybrať ľubovoľný iný časový okamih.

nemenia, kým v Heisenbergovom obraze vektory stavov sú konštantné a operátory sa menia s časom tak, aby stredné hodnoty (9) a (11) boli rovnaké.

Často sa stretávame so situáciami, v ktorých

$$H = H_0 + H' \quad (13)$$

kde H_0 nerobí nijaké ťažkosti pri riešení problému ani v Heisenbergovom ani v Schrödingerovom obraze. Vtedy možno použiť interakčný alebo Diracov obraz, pri ktorom časová závislosť operátorov je daná len „neporušeným“ hamiltoniánom H_0 a časová závislosť stavov len „poruchou“ (interakčným hamiltoniánom) H' . Veličiny vyjadrené v interakčnom obraze označujeme indexom I . Vzťah medzi interakčným a Schrödingerovým obrazom je daný rovnicami

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= e^{iH_0t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle \\ A_I(t) &= e^{iH_0t/\hbar} A e^{-iH_0t/\hbar} \end{aligned} \quad (14)$$

a pre časové derivácie dostaneme:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0t/\hbar} (H - H_0) |\psi_S(t)\rangle$$

Ak teraz zapíšeme $(H - H_0) = H'$, vsunieme pred $|\psi_S(t)\rangle$ jednotkový operátor zapísaný v tvare $1 = \exp(-i/\hbar H_0 t) \exp(i/\hbar H_0 t)$ a použijeme druhú z rovníc (14) pre definíciu veličiny $H'_I(t)$ dostaneme:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = H'_I |\psi_I(t)\rangle \quad (15)$$

Pre časovú deriváciu operátorov dostaneme tým istým postupom ako pri odvodení rovnice (12) výsledok

$$\dot{A}_I(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I(t)] \quad (16)$$

V interakčnom obraze máme teda dva druhy pohybových rovníc: (15) a (16). Operátor H_0 je obvykle volený tak, že riešenie rovníc (16) poznáme.

Na záver tohto článku ešte uvedieme formálny postup odvodenia *vzťahu neurčitosti pre čas a energiu*. Niekoľko ilustratívnych príkladov sme uviedli v kapitole o nestacionárnej poruchovej teórii.

V kvantovej mechanike nevystupuje čas ako fyzikálna veličina (t. j. nie je mu priradený operátor), ale ako parameter v pohybovej rovnici. Napriek tomu sa bežne hovorí o „meraní času“. Ak sa však bližšie zamyslíme nad princípmi konštrukcie hodín, vidíme, že fakticky meriame nejakú inú fyzikálnu veličinu (napríklad uhol výchylky kyvadla), ktorá je s časom spojená pomocou teoretického prepočtu. Vhodné automatické zariadenie takýto prepočet vykonáva, takže „stupnica prístroja“ už môže byť ciachovaná v jednotkách času. Ďalší formálny postup nebude úplne zodpovedať tejto myšlienke, ale v podstate sa dá takto interpretovať.

Nech A je operátor prislúchajúci veličine A , ktorý (v Schrödingerovom obraze) nezávisí explicitne od času. Potom časovú závislosť strednej hodnoty \bar{A} v stave $|\psi(t)\rangle$ opisuje rovnica

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle \quad (17)$$

Zvoľme si určitý časový okamih a určíme stredné kvadratické odchýlky

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle \psi(t) | (A - \bar{A})^2 | \psi(t) \rangle \\ (\Delta E)^2 &\equiv \langle \psi(t) | (H - \bar{E})^2 | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

Pre ΔA a ΔE platí vzťah neurčitosti v tvare (3.21)

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} |\langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle| \quad (18)$$

Ak použijeme vzťah (17) môžeme prepísať (18) do tvaru

$$\frac{\Delta A}{|\overline{dA/dt}|} \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (19)$$

Hodnota \bar{A} sa s časom mení, rýchlosť tejto zmeny je daná výrazom $d\bar{A}/dt$. Pretože však veličina A je „rozmazaná“ okolo hodnoty \bar{A} o hodnotu $\sim \Delta A$, dá sa (signifikantným spôsobom) prakticky zaregistrovať iba taká zmena \bar{A} , ktorá je porovnateľná s ΔA . Charakteristická doba, za ktorú nastane takáto zmena (označme ju τ_A) je potom daná vzťahom

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{|\overline{dA/dt}|}$$

Platí teda vzťah

$$\tau_A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (20)$$

V princípe čas τ_A je závislý od toho, o akú veličinu A ide. Možno hľadať takú veličinu, pre ktorú je tento čas najkratší. Označme ho τ . Čas τ takto charakterizuje samotný fyzikálny systém v uvažovanom stave $|\psi(t)\rangle$ (v zvolenom okamihu t). Je to vlastne charakteristická doba, za ktorú sa stav systému časovým vývojom podstatne zmení. Platí pritom vzťah neurčitosti

$$\tau \Delta E \geq \hbar/2 \quad (21)$$

10.9 MATICA HUSTOTY

Opis stavu sústavy vektorom v Hilbertovom priestore je z hľadiska kvantovej mechaniky úplným opisom stavu. V niektorých situáciách však takýto opis stavu nie je možný a vtedy stav sústavy opisujeme maticou hustoty. Používame ju v dvoch typických prípadoch. Po prvé vtedy, keď uvažovaná sústava je časťou (podsústavou) väčšej sústavy a po druhé vtedy, keď o sústave nemôžeme získať úplnú informáciu a musíme používať metódy štatistickej fyziky.

Matica hustoty ako opis podsústavy.

Uvažujme sústavu S skladajúcu sa z dvoch podsústav S_1 a S_2 . Premenné opisujúce S_1 označíme symbolom x , premenné S_2 symbolom ξ . Stav zloženej sústavy S nech je opísaný vektorom $|\psi\rangle$ z Hilbertovho priestoru sústavy S . V x, ξ -reprezentácii má vektor $|\psi\rangle$ zložky $\langle x, \xi | \psi \rangle$. Nech operátor A pôsobí iba na premenné sústavy S_1

$$\langle x', \xi' | A | x, \xi \rangle = \langle x' | A | x \rangle \delta(\xi' - \xi) \quad (1)$$

Stredná hodnota operátora A v stave $|\psi\rangle$ sústavy S bude

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int dx' d\xi' dx'' d\xi'' \langle \psi | x', \xi' \rangle \langle x', \xi' | A | x'', \xi'' \rangle \langle x'', \xi'' | \psi \rangle$$

Po využití (1) máme

$$\bar{A} = \int dx' dx'' d\xi' \langle \psi | x', \xi' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'', \xi' | \psi \rangle \quad (2)$$

Vo veľmi špeciálnom prípade stav S odpovedá tomu, že S_1 sa nachádza v stave $|\psi_1\rangle$ a S_2 v stave $|\psi_2\rangle$. Vtedy platí

$$\langle x, \xi | \psi \rangle = \langle x | \psi_1 \rangle \langle \xi | \psi_2 \rangle \quad (3)$$

Po dosadení (3) do (2) a využití $\int \langle \psi_2 | \xi \rangle \langle \xi | \psi_2 \rangle d\xi = 1$ dostaneme

$$\bar{A} = \int dx' dx'' d\xi' \langle \psi_1 | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'' | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle$$

Tento výsledok ukazuje, že v prípade (3) sa sústava naozaj nachádza v stave $|\psi_1\rangle$. Fyzikálne je to jasné, lebo (3) hovorí, že v stave $|\psi\rangle$ zloženej sústavy niet žiadnych korelácií medzi premennými x a ξ .

Všeobecne toto ale neplatí, korelácia medzi podsústavami existuje a pre stav $|\psi\rangle$ neplatí (3).

Vo všeobecnom prípade pre výpočet strednej hodnoty používame vzťah (2). Je užitočné definovať operátor

$$\langle x''|\rho|x'\rangle = \int d\xi' \langle x''|\xi'\rangle \langle \xi'|\psi\rangle \langle \psi|x'\rangle \langle x'|\xi'\rangle \quad (4)$$

a prepísať (2) do tvaru

$$\bar{A} = \int dx' dx'' \langle x''|\rho|x'\rangle \langle x'|A|x''\rangle \quad (5)$$

V špeciálnom prípade (3) pre $\langle x''|\rho|x'\rangle$ dostávame

$$\langle x''|\rho|x'\rangle = \int d\xi' \langle x''|\psi_1\rangle \langle \xi'|\psi_2\rangle \langle \psi_1|x'\rangle \langle \psi_2|\xi'\rangle = \langle x''|\psi_1\rangle \langle \psi_1|x'\rangle \quad (6)$$

odkiaľ vidno, že v prípade (3) je operátor ρ projektorom na jednorozmerný podpriestor stavov sústavy S_1

$$\rho = |\psi_1\rangle \langle \psi_1| \quad (6')$$

Po dosadení (6) alebo (6') do (5) vidíme, že v tomto prípade pre stredné hodnoty všetkých operátorov A pôsobiacich len na premenné podsústavy S_1 platí $\bar{A} = \langle \psi_1|A|\psi_1\rangle$

Vo všeobecnom prípade ale (3) neplatí a operátor ρ nie je projektorom na jednorozmerný podpriestor Hilbertovho priestoru sústavy S_1 .

Maticu s elementárni $\langle x''|\rho|x'\rangle$ nazývame maticou hustoty a samotný operátor ρ nazývame operátorom hustoty alebo štatistickým operátorom.

Teraz uvedieme ešte prepis predchádzajúcich vzťahov pre prípad, keď premenné charakterizujúce podsústavy S_1, S_2 môžu nadobúdať iba diskkrétne hodnoty. Možné hodnoty premenných sústavy S_1 označíme ako m a sústavy S_2 ako n . V m, n -reprezentácii má stav $|\psi\rangle$ sústavy S zložky $\langle m, n|\psi\rangle$. Pre maticové elementy operátora A pôsobiaceho len na premenné sústavy S_1 platí

$$\langle m, n|A|m', n'\rangle = A_{mm'} \delta_{nn'} \quad (7)$$

Pre stredné hodnoty takéhoto operátora v stave $|\psi\rangle$ máme

$$\bar{A} = \sum_{m,n} \langle \psi|m, n\rangle \langle m, n|A|m', n'\rangle \langle m', n'|\psi\rangle = \sum_{m,m'} A_{mm'} \rho_{m'm} \quad (8)$$

kde

$$\rho_{m'm} = \sum_n \langle m', n|\psi\rangle \langle \psi|m, n\rangle \quad (9)$$

Výraz na pravej strane (8) je stopou (spurom) matice, ktorá je súčinom matíc \mathbf{A} a ρ . Preto môžeme prepísať (8) na

$$\bar{A} = \text{Sp}(\mathbf{A}\rho) \quad (8')$$

Stopa matice nezávisí od výberu bázy a vzťah (8') platí nezávisle od výberu reprezentácie. V prípade, keď premenné môžu nadobúdať spojitú množinu hodnôt, je pravá strana (8') definovaná pravou stranou v (5).

Vlastnosti matice hustoty.

Priamo z (9) vidno, že matica ρ má jednotkovú stopu. Skutočne

$$\text{Sp}(\mathbf{A}\rho) = \sum_n \rho_{mm} = \sum_n \langle \psi|m, n\rangle \langle m, n|\psi\rangle = \langle \psi|\psi\rangle = 1$$

Matica s prvkami ρ_{mm} je ďalej pozitívne definitná. Aby sme to dokázali, zostrojme projekčný operátor

$$P_\xi = |\xi\rangle \langle \xi|, \quad |\xi\rangle = \sum_m \xi_m |m\rangle \quad (10)$$

Vlastné hodnoty projekčného operátora P_ξ , tak ako každého projekčného operátora sú 0, 1. Stredná hodnota operátora nemôže byť nikdy menšia ako jeho najmenšia vlastná hodnota, a preto stredné hodnoty musia byť nezáporné. Odtiaľ

$$\text{Sp}(\rho P_\xi) = \sum_{m,m'} \rho_{mm'} \xi_m \xi_m^* \geq 0 \quad (11)$$

Maticu $\rho_{mm'}$ spĺňajúcu nerovnosť (11), nazývame pozitívne definitnou.

Ak sústava S_1 je v interakcii so zvyškom sústavy S , nemôžeme vo všeobecnosti zapísať časovú závislosť matice hustoty pre podsústavu S_1 . Ak však interakcia medzi S_1 a zvyškom S je od istého času t_0 nulová (alebo zanedbateľná), môžeme pre $t > t_0$ nájsť pohybovú rovnicu pre $\rho_{mm'}(t)$.

Predpokladajme, že pre $t > t_0$ sú stavy $|m, n\rangle$ vlastnými stavmi operátorov energie podsústavy S_1 a zvyšku sústavy S , označeného ako S_2 . Pretože energia interakcie je nulová, bude vektor $|\psi(t)\rangle$ závisieť od času nasledovne

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(H_1 + H_2)t/\hbar} |\psi(t_0)\rangle$$

kde H_1, H_2 sú operátory energie pre S_1, S_2 . Ak využijeme hermitovosť H_1 a H_2 a to, že H_1 a H_2 komutujú, dostaneme:

$$\langle m, n | \psi(t) \rangle = e^{-i(E_{1m} + E_{2m})t/\hbar} \langle m, n | \psi(t_0) \rangle$$

kde E_{1m} a E_{2m} sú energie podsústav S_1, S_2 v stave $|m, n\rangle$. Po dosadení tohto výrazu do (9) (ak nahradíme $|\psi\rangle$ vektorom $|\psi(t)\rangle$) dostaneme:

$$\rho_{mm'}(t) = e^{-iE_{1m}t/\hbar} \rho_{mm'}(t_0) e^{+iE_{1m}t/\hbar} \quad (12)$$

Pre operátor ρ je táto podmienka ekvivalentná zápisu

$$\rho(t) = e^{-iH_1t/\hbar} \rho(t_0) e^{iH_1t/\hbar} \quad (13)$$

odkiaľ derivovaním dostaneme:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H_1, \rho] \quad (14)$$

Matica hustoty ako opis štatistického súboru.

Najprv stručne opíšeme spôsob, ktorým v štatistickej fyzike opisujeme stav sústavy. Stav makroskopickej sústavy je charakterizovaný istými makroskopickými veličinami, napríklad objemom a energiou alebo objemom a teplotou. Pre určitosť si môžeme predstaviť ideálny plyn v istom objeme a s istou celkovou (vnútornou) energiou, alebo ideálny plyn v istom objeme a s istou teplotou udržiavanou rezervoárom, s ktorým je plyn v tepelnom kontakte.

Pri výpočte termodynamických veličín v takomto makroskopicky určenom stave (makrostave) priradíme sústave najprv istý štatistický súbor. Tento súbor sa skladá z mnohých identických sústav, pričom každá z nich sa nachádza v určitom kvantovomechanickom stave (tzv. „mikrostave“) opísanom vektorom Hilbertovho priestoru. Pre ideálny plyn vektor $|\psi_i\rangle$ priradený i -temu mikrostavu obsahuje úplnú informáciu o stave sústavy častíc, z ktorých sa plyn skladá. Na základe informácie o makrostave priradíme každému mikrostavu $|\psi_i\rangle$ zo štatistického súboru istú pravdepodobnosť p_i . Strednú hodnotu \bar{A} veličiny A v určitom makrostave počítame potom podľa vzt'ahu

$$\bar{A} = \sum p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \quad (15)$$

kde na pravej strane sčítujeme cez všetky mikrostavy daného štatistického súboru.

Pre plyn uzavretý v izolovanej nádobe s objemom V a s vnútornou energiou plynu E uvažujeme na pravej strane (15) všetky mikrostavy s energiou z intervalu $(E, E + \delta E)$, kde δE je veľmi malé $\delta E \ll E$ a každému mikrostavu priradíme rovnakú pravdepodobnosť $p_i = 1/N$, kde N je počet mikrostavov s energiou v intervale $(E, E + \delta E)$ (uvažujeme len mikrostavy s nulovou celkovou hybnosťou). Toto rozdelenie pravdepodobností v štatistickom súbore nazývame *mikrokanonickým rozdelením*.

Pre plyn v kontakte s rezervoárom udržiavajúcim konštantnú teplotu T plynu uvažujeme na pravej strane (15) všetky mikrostavy (s nulovou celkovou hybnosťou a momentom hybnosti) a mikrostavu s energiou E_i priradíme pravdepodobnosť $p_i = C \exp(-E_i/kT)$, kde normovacia konštanta C zaručuje splnenie podmienky $\sum p_i = 1$ a k je Boltzmannova konštanta. Toto rozdelenie pravdepodobností v štatistickom súbore sa nazýva *kanonickým rozdelením*.

Z diskusie vidno, že stavy $|\psi_i\rangle$, ktoré vystupujú na pravej strane (15) nemusia tvoriť úplnú bázu Hilbertovho priestoru. Pri kanonickom rozdelení sme uvažovali všetky stavy, zatiaľ čo v prípade mikrokanonického rozdelenia uvažujeme iba stavy s celkovou energiou v úzkom intervale $(E, E + \delta E)$.

Podľa toho, čo sme hovorili vyššie, by sa mohlo zdať, že výpočet stredných hodnôt pomocou (15)

možno použiť len pre makroskopické sústavy. Nie je to ale pravda. Pomocou štatistickej fyziky niekedy opisujeme i mikroskopické sústavy. Predstavme si napríklad atóm vodíka v dutine zahriatej na vysokú (aby kT bolo rádové 10 eV) teplotu T . V dutine bude elektromagnetické žiarenie a atóm vodíka s ním bude v tepelnej rovnováhe. Strednú hodnotu určitej fyzikálnej veličiny charakterizujúcej atóm vodíka budeme počítať podľa (15) pričom stavy $|\psi_i\rangle$ na pravej strane (15) budú stavy atómu vodíka s určitou hodnotou energie E_i a pravdepodobnosti p_i budú zas dané ako $p_i = C \exp(-E_i/kT)$.

Všeobecne vzťah (15) používame vtedy, ak sa sústava s pravdepodobnosťami p_i nachádza v stavoch $|\psi_i\rangle$.

Takto opísaný stav sústavy je podstatne odlišný od stavu opísaného vektorom Hilbertovho priestoru

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle \quad (16)$$

Skutočne, pre strednú hodnotu veličiny A v stave (16) máme

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{i,k} \sqrt{p_i p_k} \langle \psi_i | A | \psi_k \rangle \quad (17)$$

Vyjadrenia \bar{A} v (15) a (17) sú rovnaké len vtedy ak $\langle \psi_i | A | \psi_k \rangle = 0$ pre všetky $i \neq k$.

Strednú hodnotu \bar{A} v (15) môžeme tiež zapísať v tvare

$$\bar{A} = \sum_k \langle \psi_k | \mathbf{p} A | \psi_k \rangle = \text{Sp}(\mathbf{p} A) \quad (18)$$

kde štatistický operátor \mathbf{p} je definovaný vzťahom

$$\rho = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle \psi_i| \quad (19)$$

Skutočne, ak (19) dosadíme do (18) a využijeme ortonormovanosť stavov $|\psi_i\rangle$ máme

$$\bar{A} = \sum_{i,k} \langle \psi_k | \psi_i \rangle p_i \langle \psi_i | A | \psi_k \rangle = \sum_{i,k} \delta_{ik} p_i \langle \psi_i | A | \psi_k \rangle = \sum_{i,k} p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle$$

a to je práve rovnica (15).

Operátory $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ vystupujúce v (19) sú projektorami na jednorozmerné podprieštory Hilbertovho priestoru tvorené násobkami vektorov $|\psi_i\rangle$ číslom. Štatistický operátor \mathbf{p} daný rovnicou (19) je takto lineárnou superpozíciou projektorov. V prípade, že pre p_i v (19) platí $p_i = 0$ pre i rôzne od istého pevného k a $p_k = 1$ máme

$$\mathbf{p} = |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (20)$$

stredná hodnota ľubovoľnej veličiny A je daná výrazom

$$\bar{A} = \langle \psi_k | A | \psi_k \rangle \quad (21)$$

Opis stavu sústavy pomocou štatistického operátora \mathbf{p} daného rovnicou (20) je teda ekvivalentný opisu sústavy vektorom $|\psi_k\rangle$.

Napokon ešte uvedieme podmienky, ktoré musí operátor \mathbf{p} spĺňať, ak má byť opis stavu pomocou neho ekvivalentný opisu stavu vektorom z Hilbertovho priestoru.

Pre každý operátor typu (19) platí

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^+ \quad (22a)$$

Podmienka $\sum p_i = 1$ implikuje

$$\text{Sp}(\mathbf{p}) = 1 \quad (22b)$$

Pre druhú mocninu operátora \mathbf{p} z (19) dostávame

$$\mathbf{p}\mathbf{p} = \sum_i |\psi_i\rangle p_i^2 \langle \psi_i|$$

a v prípade $p_i = \delta_{ik}$, $i = 1, 2, 3, \dots, k$ pevné, máme

$$\mathbf{p}\mathbf{p} = \mathbf{p} \quad (22c)$$

Podmienky (22a, b, c) sú nutnými podmienkami pre to, aby ρ mal tvar (20). Možno tiež ukázať, že sú to aj postačujúce podmienky. Každý hermitovský operátor možno diagonalizovať a vo vhodnej báze zapísať v tvare (19), kde p_i budú reálne čísla a $|\psi_i\rangle$ sú vektory bázy. Podmienky (22b, c) potom vedú k $p_i = \delta_{ik}$, a tým k (20).

10.10 ZHRNUTIE

Zopakujeme tu stručne logickú štruktúru základných postulátov kvantovej mechaniky. Pripomíname opäť, že v rámci pomerne značnej „pedagogickej licencie“ naše zhrnutie bude len schematické, bez nároku na rigoróznosť. Podrobnosti možno nájsť buď v texte kapitoly alebo (častejšie) v špeciálnych monografiách.

1. Stav fyzikálnej sústavy je priradený vektor (presnejšie lúč) v Hilbertovom priestore.
2. Fyzikálnym veličinám sú priradené hermitovské operátory v Hilbertovom priestore. O (zovšeobecných) vlastných vektoroch týchto operátorov predpokladáme, že tvoria úplný ortonormovaný systém. Vlastný stav operátora A je definovaný vzťahom (diskrétno spektrum)

$$A|\Phi_n\rangle = A_n|\Phi_n\rangle$$

Podmienka ortonormálnosti

$$\langle\Phi_n|\Phi_m\rangle = \delta_{nm}$$

Podmienka úplnosti

$$\sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = 1$$

3. Pri meraní veličiny A v stave $|\psi\rangle$ je možné namerať iba niektorú z hodnôt A_n (t. j. niektorú z vlastných hodnôt operátora A) a to s pravdepodobnosťou

$$P_n = |\langle\Phi_n|\psi\rangle|^2$$

Pre strednú hodnotu veličiny A platí

$$\bar{A} = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

4. Pri meraní nastane zmena stavu; po meraní veličiny A , pri ktorom sa získala hodnota A_i sa sústava bude nachádzať v stave

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_{A_i}|\psi\rangle}} P_{A_i}|\psi\rangle$$

kde $|\psi\rangle$ je stav pred meraním a P_{A_i} je projekčný operátor na podpriestor vlastných stavov operátora A prislúchajúcich hodnote A_i .

V nedegenerovanom prípade

$$P_{A_i} = |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = 1 \quad (\text{nesčítavať cez } i)$$

Stav sústavy je jednoznačne určený zadaním hodnôt veličín, ktorým prislúcha úplný systém komutujúcich operátorov.

5. Ak poznáme stav $|\Phi\rangle$ v okamihu $t = t_0$, potom (v Schrödingerovom obraze) bude stav sústavy v ľubovoľnom neskoršom čase (až do ďalšieho merania!) určený riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

so začiatočnou podmienkou $|\psi(t = t_0)\rangle = |\Phi\rangle$.

6. Pri praktickom výpočte je niekedy užitočné prejsť k určitej reprezentácii vektorov v Hilbertovom priestore. Vyberieme najprv bázu reprezentácie – úplný ortonormovaný systém stavov $\{|\chi_n\rangle\}$. Ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ bude v tejto báze reprezentovaný koeficientmi rozvoja

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\chi_n\rangle$$

teda

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \{c_n\} \quad c_n = \langle \chi_n | \psi \rangle$$

Operátor \mathbf{A} bude reprezentovaný (nekonečnorozmernou) maticou

$$\mathbf{A} \leftrightarrow A_{mn}, \quad A_{mn} = \langle \chi_m | \mathbf{A} | \chi_n \rangle$$

Vzťah

$$|\psi'\rangle = \mathbf{A}|\psi\rangle$$

potom zodpovedá maticový vzťah

$$c'_n = \sum_m A_{nm} c_m$$

pričom c'_n reprezentujú stav $|\psi'\rangle$, t. j. $c'_n = \langle \chi_n | \psi' \rangle$.

Rôznym výberom báz možno dostať rôzne (ekvivalentné) reprezentácie. Súvis medzi súradnicami toho istého vektora v dvoch reprezentáciách je daný (nekonečnorozmernou) unitárnou maticou $U_{nm} = \langle \chi'_n | \chi_m \rangle$

$$\langle \chi'_n | \psi \rangle = \sum_m \langle \chi'_n | \chi_m \rangle \langle \chi_m | \psi \rangle$$

kde $\{|\chi_n\rangle\}$ a $\{|\chi'_n\rangle\}$ sú dve bázy.

7. Doteraz sme sa obmedzili na prípad diskretných spektier. V prípade spojitého spektra možno v podstate použiť analogický formalizmus s tým, že v príslušných vzťahoch nahradíme sumovanie integráciou a podmienky úplnosti a ortonormálnosti budú mať tvar

$$\int |a\rangle \langle a| da = 1$$

$$\langle a | a' \rangle = \delta(a - a')$$

10.11 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Súčet diagonálnych členov matice voláme jej stopou (spurom) a značíme $\text{Sp } \mathbf{A}$. Dokážte, že stopa matice nezávisí od voľby bázy, v ktorej je matica vyjadrená.
2. Dokážte, že absolútna hodnota vlastných hodnôt unitárneho operátora sa rovná jednej.
3. Uvažujte pre jednoduchosť trojrozmerný vektorový priestor s bázou $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$. Skonstruujte projekčný operátor, ktorý zodpovedá projekcii do „smeru“ $|e_1\rangle$. Aká matica mu zodpovedá v tejto báze? Podobne urobte pre projekciu do „roviny“ $|e_2\rangle, |e_3\rangle$.
4. Uvažujte n -rozmerný vektorový priestor s bázou $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$. Nech \mathbf{A} je $n \times n$ nesingulárna (t. j. existuje \mathbf{A}^{-1}) hermitovská matica. Ukážte, že vhodným výberom bázy môžeme maticu \mathbf{A} diagonalizovať.
Návod: Ukážte najprv, že matica má n vlastných vektorov, overte ich ortogonálnosť a využite ich pri konštrukcii novej bázy.
5. Nech \mathbf{A} je $n \times n$ rozmerná hermitovská matica. Ukážte, že platí

$$\det(e^{\mathbf{A}}) = \exp(\text{Sp } \mathbf{A})$$

Návod: Ukážte, že tvrdenie nezávisí od zvolenej reprezentácie a dokážte ho pre prípad diagonálnej matice.

6. Dokážte platnosť formálnej identity

$$e^{\lambda \mathbf{A}} \mathbf{B} e^{-\lambda \mathbf{A}} = \mathbf{B} + \lambda [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \frac{\lambda^2}{2!} [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]]$$

Návod: Derivujte rovnosť podľa parametra λ , položte vo výsledku $\lambda = 0$ a porovnajte obe strany. Derivujte rovnosť dvakrát podľa parametra λ , a položte $\lambda = 0$ atď.

7. Pre lineárny harmonický oscilátor nájdite stredné hodnoty $\langle n | x^2 | n \rangle$ a $\langle n | p^2 | n \rangle$. Použite formalizmus kreačných a anihilačných operátorov.
8. Pre trojrozmerný izotropný harmonický oscilátor nájdite kreačný operátor, ktorý pôsobením na základný stav dá stav s kvantovými číslami $E = (1 + \frac{3}{2})\hbar\omega$, $l = 1$, $m = 1$.

Návod: Uvedomte si, že vo formalizme vlnových funkcií sa bezčasová SchR dala riešiť separáciou premenných vo sférických i v karteziánskych súradniciach. Vyjadrite potom hľadaný operátor ako vhodnú kombináciu kreačných operátorov zodpovedajúcich excitáciám v smere súradnicových osí.

9. Označme stacionárne stavy harmonického oscilátora ako $|n\rangle$. Ukážte, že vektor

$$|\Phi\rangle = \sum_1^{\infty} \frac{1}{n} |n\rangle$$

je normalizovateľný. Určte strednú hodnotu energie oscilátora v stave $|\Phi\rangle$. Prediskutujte význam výsledku. Uvedomte si, že ťažkostí vznikajú preto, že hamiltonián je neohraničený (hoci má diskkrétne spektrum).

10. Napíšte Schrödingerovu rovnicu pre pohyb častice v poli potenciálu $V(\mathbf{r})$ v p -reprezentácii!

11. Ukážte (pre jednoduchosť v jednorozmernom prípade), že pre operátory súradnice a hybností v Heisenbergovom obraze platia pohybové rovnice

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}_H = \frac{1}{m} \mathbf{p}_H, \quad \frac{d}{dt} \mathbf{p}_H = - \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} \right)_H$$

kde m je hmotnosť častice a V je potenciál. Nájdite príslušné rovnice pre lineárny harmonický oscilátor a porovnajte ich s rovnicami klasickej mechaniky. Bude uzáver z takéhoto porovnania rovnaký i pre iné sústavy ako je harmonický oscilátor?

12. Ukážte, že ak matica hustoty zodpovedá štatistickému súboru (vzájomne neintegrujúcich) sústav, potom v Schrödingerovom obraze operátor \mathbf{p} spĺňa tiež pohybovú rovnicu (9.9). (Treba si uvedomiť, že operátor \mathbf{p} nezodpovedá veličine ale stavu, preto nie je prekvapujúce, že závisí od času v Schrödingerovom obraze.)

13. Uvažujte atóm vodíka v termodynamicknej rovnováhe so žiarením v dutine s teplotou T nasledujúcimi spôsobmi:

a) atóm je opísaný kanonickým rozdelením pri teplote T .

b) zložená sústava (atóm plus žiarenie) je opísaná mikrokanonickým rozdelením.

Napokon

c) zloženú sústavu opisujeme (teoreticky je to možné) stavom Hilbertovho priestoru s ostrou hodnotou energie. Prediskutujte, či je atóm vodíka vo všetkých troch prípadoch opísaný rovnakým štatistickým operátorom. Pripomíname, že pre makroskopickú sústavu s teplotou T platí

$$\frac{\partial}{\partial E} \ln n(E) = \frac{1}{kT}$$

kde $n(E)$ je počet stavov s energiou menšou ako E .

11 MOMENT HYBNOSTI. ROTÁCIE

11.1 ÚVOD

Moment hybnosti má v kvantovej mechanike ešte dôležitejšiu úlohu ako v klasickej mechanike. Mnohé vlastnosti viazaných stavov a pravdepodobností prechodov možno totiž pochopiť bez podrobného riešenia dynamických rovníc, len na základe znalosti momentu hybnosti uvažovaných stavov. Venujeme preto problematike momentu hybnosti samostatnú kapitolu.

S momentom hybnosti sme sa už v doterajšom výklade stretli viackrát. Hovorili sme o orbitálnom momente hybnosti a v kapitole 5 o spine $\frac{1}{2}$. Tu jednak zovšeobecníme tieto poznatky na prípad ľubovoľného momentu hybnosti, jednak sa na moment hybnosti pozrieme z iného aspektu: všimneme si jeho súvislosť s rotáciami sledovanej fyzikálnej sústavy.

Východiskom pri zisťovaní vlastných stavov a vlastných hodnôt operátorov momentu hybnosti J_i ($i = 1, 2, 3$) budú komutačné vzťahy¹⁸² (porovnaj s (4.9.3))

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k \quad (1)$$

teda komutačné vzťahy pre operátory orbitálneho momentu hybnosti

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} \quad (2)$$

Fyzikálnou motiváciou pre postulovanie komutačných vzťahov (1) je okrem analógie s orbitálnym momentom hybnosti i súvis momentu hybnosti s rotáciami. Ukážeme si najprv v čom spočíva tento súvis, na jeho základe budeme postulovať vzťah (1) a v ďalšom určíme dôsledky tohto vzťahu.

11.2 SÚVIS MOMENTU HYBNOSTI S ROTÁCIAMI

Fyzikálnu analýzu problému rotácie fyzikálnej sústavy (pre $s = \frac{1}{2}$) sme urobili v článku 5.2. Tu overíme ďalší špeciálny prípad rotácie stavu bezspinovej častice, opísaného vlnovou funkciou. Uvažujme nejaký stav $\psi(x, y, z)$ a pýtajme sa, aká vlnová funkcia zodpovedá tomuto stavu po rotácii napríklad o uhol \mathcal{G} okolo osi z . Pod touto nie úplne presnou formuláciou rozumieme nasledovné: Stav $\psi'(x, y, z)$ je „pripravovaný“ určitým makroskopickým prístrojom (napríklad žeravá katóda a štrbiny vymedzujúce úzky zväzok). Môžeme si teraz predstaviť rovnaký prístroj, iba pootočený voči pôvodnému o istý uhol. Stav pripravovaný týmto prístrojom¹⁸³ označme $\psi'(x, y, z)$.

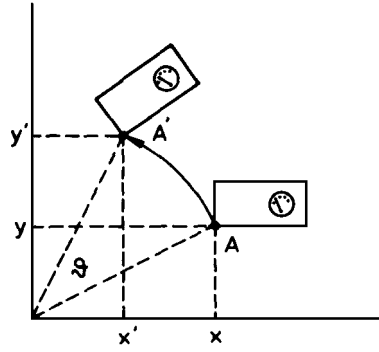
Obrázok 11.1 znázorňuje rotáciu „pripravujúceho prístroja“. Bod A so súradnicami (x, y, z) je nejaký bod na pôvodnom prístroji, bod A' so súradnicami (x', y', z') je rovnaký bod na otočenom prístroji. Na základe obrázku sa dá ľahko ukázať, že súradnice bodov A a A' spolu súvisia vzťahmi¹⁸⁴

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \mathcal{G} - y \sin \mathcal{G} \\ y' &= x \sin \mathcal{G} + y \cos \mathcal{G} \end{aligned} \quad (2)$$

¹⁸² V tomto vzťahu sú operátory J_i vyjadrené v jednotkách \hbar , inak treba pravú stranu násobiť faktorom \hbar . V texte budeme často používať rovnicu (1) v tom tvare ako je zapísaná.

¹⁸³ Všimneme si, že argumenty funkcie $\psi(x, y, z)$ nepíšeme „s čiarkami“. Argumenty so stavom nemajú nič spoločné, označujú bod v priestore (nehybný!), v ktorom nás zaujíma pravdepodobnosť registrácie častice. V pôvodnom stave je to $|\psi(x, y, z)|^2$ a v stave po rotácii je to $|\psi'(x, y, z)|^2$.

¹⁸⁴ Upozorňujeme na našu znamienkovú konvenciu. Znamienko uhla rotácie je dané tak, že kladný uhol zodpovedá pravotočivej rotácii (t. j. proti smeru pohybu hodinových ručičiek), v rovine x, y pri pohľade zo strany kladnej polosi z . Cyklickou zámenou x, y, z dostaneme konvencie pre rotácie okolo ďalších osí.



Obr. 11.1

Vzťahy (2) je užitočné zapísať v maticovom tvare

$$x'_i = \sum_{k=1}^3 [R_z(\vartheta)]_{ik} x_k \quad (3)$$

kde $(x'_1, x'_2, x'_3) = (x', y', z')$, $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ a podľa (2) pre maticu $R_z(\vartheta)$ platí:

$$R_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta & 0 \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4a)$$

Analógy rovnice (3) pre rotácie o uhly ϑ okolo osí x a y možno odvodiť podobne. Príslušné matice budú mať tvar

$$R_x(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ 0 & \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad R_y(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & \sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (4b)$$

Pre infinitezimálne rotácie položíme $\vartheta = \varepsilon$ a zanedbáme v rovniciach (4) vyššie mocniny ε . V tomto priblížení $\cos \varepsilon \approx 1$, $\sin \varepsilon \approx \varepsilon$, matice R_x , R_y , R_z prejdú na tvar

$$R_x(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \quad R_y(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Všimnime si teraz, že ak vykonáme dve rotácie za sebou (vzhľadom na rôzne osi) tak výsledná rotácia závisí na tom, v akom poradí tieto rotácie vykonáme¹⁸⁵. Tak napríklad ak vyjadríme rotačné matice s presnosťou do *druhého* rádu v ε , potom s touto presnosťou

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) \neq R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) \quad (6)$$

ale v tomto ráde platí (ako sa možno presvedčiť priamym výpočtom)

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)R_z(-\varepsilon^2) = R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) \quad (7)$$

zo vzťahu (7) neskôr odvodíme komutačné pravidlá (1.1). Upozorníme ešte raz, že vzťahy ako (3), (6), (7) sú vzťahy pre rotáciu makroskopického „pripravujúceho prístroja“. Preto ich „klasické odvodenie“ na základe *obrázku 11.1* ostáva v platnosti i v kvantovej mechanike.

Pýtajme sa teraz, aký stav $\psi'(x, y, z)$ pripraví prístroj pootočený voči pôvodnému podľa vzťahov (2). Uvažujme dva body $B(x, y, z)$ a $B'(x', y', z')$ pričom do bodu B' sa z bodu B dostaneme tou istou

¹⁸⁵ Vykonaniu dvoch rotácií za sebou pritom zodpovedá vynásobenie príslušných rotačných matic R .

rotáciou, ktorou sme pootočili prístroj z pôvodnej do novej polohy. Bod B' je v rovnakej relatívnej polohe voči pootočenému prístroju, ako bol bod B voči pôvodnému. Je preto rozumné predpokladať, že ψ' v bode B' je rovnaké ako ψ v bode B . Preto

$$\psi'(x', y', z') = \psi(x, y, z) \quad (8)$$

kde argumenty spolu súvisia vzťahom (2).

Obrátením (2) pri infinitezimálnom $\mathcal{G} = \varepsilon$ dostaneme

$$x = x' + y'\varepsilon, \quad y = -x'\varepsilon + y', \quad z' = z \quad (9)$$

Ak dosadíme (9) na pravú stranu (8), máme

$$\psi'(x', y', z') = \psi(x' + y'\varepsilon, y' - x'\varepsilon, z')$$

Táto rovnica platí pre všetky hodnoty (x', y', z') . Pretože na oboch stranách rovnice sú tie isté premenné (x', y', z') , môžeme čiarky v argumentoch vynechať a napísať:

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x + y\varepsilon, y - x\varepsilon, z) \quad (10)$$

Pravú stranu (10) teraz rozvieme do Taylorovho radu, a pretože ide o infinitezimálne ε , ponecháme v rozvoji len členy lineárne v ε . Dostaneme:

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z) - \varepsilon \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x, y, z) \quad (11)$$

Výraz v hranatej zátvorke sa rovná $(i/\hbar)L_z$, kde L_z je z -zložka operátora momentu hybnosti. Namiesto ψ' často používame aj symbol $U_z(\varepsilon)\psi$, aby sme znázornili, že ψ' vznikla z funkcie ψ rotáciou o uhol ε okolo osi z . Rovnicu (11) potom prepíšeme nasledovne:¹⁸⁶

$$U_z(\varepsilon)\psi(x, y, z) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon L_z \right) \psi(x, y, z) \quad (12)$$

Rotáciu o konečný uhol \mathcal{G} okolo osi z si môžeme približne predstaviť ako výsledok n rotácií o uhol $\varepsilon = \mathcal{G}/n$. V takomto prípade dostaneme približný vzťah

$$U_z(\mathcal{G})\psi(x, y, z) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon L_z \frac{\mathcal{G}}{n} \right)^n \psi(x, y, z)$$

Posledný vzťah sa stane presným, ak urobíme limitu $n \rightarrow \infty$. S využitím známeho vzťahu

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n} \right)^n = e^x$$

potom dostaneme¹⁸⁷

$$U_z(\mathcal{G})\psi(x, y, z) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon L_z \mathcal{G}\right) \psi(x, y, z) \quad (13)$$

Doteraz sme uvažovali len rotáciu okolo osi z . Vo všeobecnom prípade si môžeme predstaviť, že os rotácie v priestore je daná jednotkovým vektorom \mathbf{n} a skúmať rotáciu okolo tejto osi o uhol \mathcal{G} . Funkciu, ktorú dostaneme touto rotáciou z funkcie ψ budeme označovať $U_n(\mathcal{G})\psi$ a príslušné zovšeobecnenie vzorca (13) zrejme bude:

$$U_n(\mathcal{G})\psi(x, y, z) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \mathcal{G}\right) \psi(x, y, z) \quad (14)$$

¹⁸⁶ Symboliku v (12) treba podrobnejšie vysvetliť. Výraz $U_z(\varepsilon)\psi(x, y, z)$ neznamena pôsobenie akéhosi operátora na číslo $\psi(x, y, z)$, ale má význam hodnoty funkcie $U_z(\varepsilon)\psi$ v bode (x, y, z) . Trochu ťažkopádna, ale pritom jasnejšia forma zápisu by bola $[U_z(\varepsilon)\psi](x, y, z)$.

¹⁸⁷ Rovnicu (13) sme tu odvodili intuitívne. Matematicky korektný postup by bol založený na Stoneovej vete, s ktorou sa čitateľ môže zoznámiť v učebniciach funkcionálnej analýzy.

Rovnicu (14) netreba osobitne dokazovať, pretože vo vzťahu (13) sme uvažovali rotáciu okolo špeciálne vybranej osi z . Faktor pod exponentom v (13) môžeme preto napísať v tvare $-i\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar$, kde \mathbf{n} je jednotkový vektor v smere osi z . Ak zmeníme označenie súradnicových osí, dostaneme hneď rovnicu (14). Z rovnice (14) vidno význam operátora momentu hybnosti pre transformáciu vlnovej funkcie pri rotáciách.

Zaujímame sa teraz o strednú hodnotu nejakej veličiny A v stave¹⁸⁸ po rotácii

$$|\psi'\rangle = \mathbf{U}|\psi\rangle \quad (15)$$

Strednú hodnotu vypočítame štandardným spôsobom

$$\langle\psi'|A|\psi'\rangle = \langle\psi|U^+AU|\psi\rangle \quad (16)$$

Stredná hodnota veličiny A v stave $|\psi'\rangle$ bude teda vo všeobecnosti odlišná od strednej hodnoty tejto veličiny v stave $|\psi\rangle$. Tvrdenie je, pravda, triviálne: ide o to, že jedným meracím prístrojom (označme ho M), ktorý meria veličinu A , meriame túto veličinu na dvoch rôznych spôsobom pripravených stavoch. Ľahko si však možno predstaviť rovnaký prístroj M' , ktorý má voči prístroju M rovnakú polohu (je rovnako pootočený), ako má prístroj pripravujúci stav $|\psi'\rangle$ voči prístroju pripravujúcemu stav $|\psi\rangle$. Potom meranie prístrojom M' na stavoch po rotácii musí dávať štatisticky rovnaké výsledky ako meranie prístrojom M na pôvodných stavoch¹⁸⁹.

Ukážeme si teraz, že ak je fyzikálnej veličine meranej prístrojom M priradený operátor A , potom je veličine meranej prístrojom M' priradený operátor

$$A' = \mathbf{U}A\mathbf{U}^+ \quad (17)$$

Skutočne, operátor \mathbf{U} definovaný v x -reprezentácii vzťahom (14) je unitárny

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+ = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{g}\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right) \quad (18)$$

preto stredná hodnota veličiny A' v stave $|\psi'\rangle$ bude

$$\langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|U^+U A U^+U|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad (19)$$

Poznamenajme na záver, že v niektorých učebniciach je možné stretnúť sa s odlišnou definíciou rotácie. Je to tzv. *pasívny zmysel*, pri ktorom namiesto fyzikálnej sústavy (*aktívny zmysel*) rotujeme sústavu súradníc v priestore. Potom sa zaujímame o vzťah medzi vlnovou funkciou (nemenného) stavu v pôvodnej sústave a v súradnicovej sústave po rotácii.

Po formálnej stránke sú oba prístupy značne podobné. Tu budeme uvažovať rotácie v aktívnom zmysle.

11.3 MOMENT HYBNOSTI – VŠEOBECNÝ PRÍPAD

Doteraz sme sa zaoberali prípadom orbitálneho momentu hybnosti a prípadom čisto spinového momentu hybnosti pre spin $1/2$. Vo všeobecnosti sú možné aj prípady vyšších spinov, aj prípady, v ktorých celkový moment hybnosti vznikne napríklad zložením orbitálneho a spinového momentu hybnosti. V tomto článku zistíme tie vlastnosti operátorov momentu hybnosti, ktoré nezávisia od detailov skúmanej sústavy. Moment hybnosti budeme chápať ako trojicu operátorov $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3$, spĺňajúcich komutačné vzťahy

$$[\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] = i\varepsilon_{ijk}\mathbf{J}_k \quad (1)$$

Tieto vzťahy možno chápať ako zovšeobecnenie vzťahov $[\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\mathbf{L}_k$, $[\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j] = i\varepsilon_{ijk}\mathbf{s}_k$ platných pre orbitálny a spinový moment hybnosti (spin $1/2$).

¹⁸⁸ Na miestach, kde je to technicky výhodné, budeme namiesto reprezentácie pomocou vlnových funkcií používať všeobecný Diracov formalizmus.

¹⁸⁹ Porovnaj s obdobnou diskusiou o rotácii Sternovho-Gerlachovho prístroja v kapitole o spine.

Skutočný dôvod platnosti vzťahov (1) je ale hlbší a súvisí priamo s opisom transformácií vlnových funkcií pri rotáciách.

Uvažujme určitý stav $|\psi\rangle$ a stav $|\psi'\rangle$, ktorý z neho dostaneme infinitezimálnou rotáciou o uhol ε okolo osi z . Zapišeme

$$|\psi'\rangle = U_z(\varepsilon)|\psi\rangle$$

Je prirodzené žiadať, aby $U_z(\varepsilon)$ bol unitárnym operátorom (potom $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$). Ak je ε infinitezimálne, môžeme zanedbať veličiny druhého rádu a písať

$$U_z(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon J_z$$

kde J_z je hermitovský, ak $U_z(\varepsilon)$ má byť unitárny. Skutočne

$$U_z^+(\varepsilon)U_z(\varepsilon) = (1 - i\varepsilon J_z)(1 + i\varepsilon J_z^+) = 1 - i\varepsilon(J_z - J_z^+) + O(\varepsilon^2)$$

kde $O(\varepsilon^2)$ označuje veličiny rádu ε^2 . Ak sa má pravá strana v ráde ε rovnať 1, musí byť J_z skutočne hermitovský.

Rotácie majú ale mimoriadne dôležitú vlastnosť: konečnú rotáciu možno zložiť z infinitezimálnych¹⁹⁰. Preto, podobne ako v predchádzajúcom článku, pre konečnú rotáciu o uhol \mathcal{G} okolo osi z platí

$$U_z(\varepsilon) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - i \frac{\mathcal{G}}{n} J_z\right)^n = \exp(-i\mathcal{G}J_z)$$

Podobne ako v predchádzajúcom článku môžeme prejsť k rotáciám okolo osi n a napokon prideme k tomu, že pri rotácii o uhol \mathcal{G} okolo osi n sa stav $|\psi\rangle$ zmení na

$$|\psi'\rangle = U_n(\mathcal{G})|\psi\rangle = \exp(-i\mathcal{G}\mathbf{n}\cdot\mathbf{J})|\psi\rangle \quad (2)$$

kde J_1, J_2, J_3 je trojica hermitovských operátorov.

Zdôrazníme opäť, že na tomto štádiu o operátoroch J_1, J_2, J_3 vieme len to, že sú hermitovské. Napriek tomu ich budeme zatiaľ nazývať *operátormi celkového momentu hybnosti* (v jednotkách \hbar).

Pre rotácie súradníc platí ale vzťah¹⁹¹ (2.7), ktorý nám hovorí, že tri rotácie na ľavej strane sú do rádu ε^2 úplne ekvivalentné dvom rotáciám na pravej strane. Toto tvrdenie musí potom platiť pre rotáciu ľubovoľného stavu. Odtiaľ dostávame podmienku (do rádu ε^2 vrátane)

$$U_x(\varepsilon)U_y(\varepsilon)U_z(-\varepsilon^2) = U_y(\varepsilon)U_x(\varepsilon) \quad (3)$$

Po dosadení výrazov typu (2) máme

$$\left(1 - i\varepsilon J_x - \frac{1}{2}\varepsilon^2 J_x^2\right)\left(1 - i\varepsilon J_x - \frac{1}{2}\varepsilon^2 J_y^2\right)\left(1 + i\varepsilon^2 J_z\right) = \left(1 - i\varepsilon J_y - \frac{1}{2}\varepsilon^2 J_y^2\right)\left(1 - i\varepsilon J_x - \frac{1}{2}\varepsilon^2 J_x^2\right)$$

a po zachovaní členov do rádu ε^2 dostaneme

$$J_x J_y - J_y J_x = i J_z \quad (4)$$

čo je jeden zo vzťahov (1). Ostatné dostaneme cyklickými zamenami zo (4).

V ďalšom budeme hľadať vlastné stavy a vlastné hodnoty momentu hybnosti vychádzajúc len zo vzťahu (1). Základná myšlienka postupu bude po technickej stránke veľmi podobná na tú, ktorú sme použili, keď sme hľadali spektrum oscilátora čisto algebraickými metódami (v kap. 10).

Definujme napred operátor druhej mocniny momentu hybnosti:

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (5)$$

V dôsledku (1) platí:

$$[J_x, J^2] = [J_y, J^2] = [J_z, J^2] = 0 \quad (6)$$

¹⁹⁰ Neskôr ešte uvedieme podrobnejšie, že tieto jednoduché tvrdenia možno zhrnúť tým, že rotácie okolo určitej osi tvoria spojitú grupu.

¹⁹¹ Vzťah (2.7) vyzerá na prvý pohľad ako istá technická drobnosť týkajúca sa rotácií. Nie je tomu tak; je to vzťah, v ktorom sídli „duša rotácií“. Vieme už totiž, že rotácie okolo určitej osi môžeme vybudovať postupne z infinitezimálnych rotácií. Vzťah (2.7) nám hovorí, ako súvisia infinitezimálne rotácie okolo rôznych osí. Tým je fakticky daná celá štruktúra všetkých rotácií. Podrobnejšie sa s týmto stretneme ešte v kapitole o symetriách.

Zo štvorice operátorov J_x, J_y, J_z, J^2 vyberieme dva navzájom komutujúce: J_z a J^2 . Ich spoločné vlastné funkcie a vlastné hodnoty označíme nasledovne:

$$\begin{aligned} J^2|j, m\rangle &= \eta_j|j, m\rangle \\ J_z|j, m\rangle &= m|j, m\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

Z definície (5) je pritom zrejmé, že $\eta_j \geq 0$.

Pretože J^2 a J_z sú hermitovské operátory, budú stavy $|j, m\rangle$ tvoriť ortogonálny systém. Ak ich normujeme na jednotku, dostaneme :

$$\langle j', m'|j, m\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \quad (8)$$

Zavedme teraz operátory J_+ a J_- vzťahom

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (9)$$

Vychádzajúc z (1) odvodíme komutačné vzťahy

$$[J_z, J_+] = J_+ \quad [J_z, J_-] = -J_- \quad [J_+, J_-] = 2J_z \quad (10)$$

Podobne môžeme odvodiť vzťahy

$$\begin{aligned} J_+J_- &= J^2 - J_z^2 + J_z \\ J_-J_+ &= J^2 - J_z^2 - J_z \end{aligned} \quad (11)$$

Skúmame teraz stavové vektory

$$|j, m\rangle_+ = J_+|j, m\rangle, \quad |j, m\rangle_- = J_-|j, m\rangle$$

Pretože $[J_+, J^2] = [J_-, J^2] = 0$ platí:

$$J^2|j, m\rangle_+ = \eta_j|j, m\rangle_+ \quad J^2|j, m\rangle_- = \eta_j|j, m\rangle_-$$

Na základe prvých dvoch rovníc (10) dostaneme tiež

$$J_z|j, m\rangle_+ = J_zJ_+|j, m\rangle = \{[J_z, J_+] + J_+J_z\}|j, m\rangle = (J_+ + mJ_+)|j, m\rangle = (m+1)|j, m\rangle_+$$

Podobne postupujeme pri výpočte $J_z|j, m\rangle_-$ a dostaneme:

$$\begin{aligned} J_z\{J_+|j, m\rangle\} &= (m+1)\{J_+|j, m\rangle\} \\ J_z\{J_-|j, m\rangle\} &= (m-1)\{J_-|j, m\rangle\} \end{aligned} \quad (12)$$

odkiaľ vyplýva

$$\begin{aligned} J_+|j, m\rangle &= C_{jm}^{(+)}|j, m+1\rangle \\ J_-|j, m\rangle &= C_{jm}^{(-)}|j, m-1\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Rovnice (13) ukazujú význam operátorov J_+ a J_- . Ich pôsobením na stav $|j, m\rangle$ vzniká nový stav, ktorý je opäť vlastným stavom operátorov J^2 a J_z , pričom vlastná hodnota J^2 je nezmenená a vlastná hodnota J_z narastie (alebo pri pôsobení J_- poklesne) o jednotku.

Preto niekedy nazývame J_+ *zvyšovacím* a J_- *znižovacím operátorom*. Určíme teraz konštanty $C_{jm}^{(+)}$ a $C_{jm}^{(-)}$. Využijeme normovanosť stavov $|j, m\rangle$ danú rovnicou (8) a všimneme si, že operátor J_+ je hermitovsky združený s operátorom J_- . Potom z rovníc (13) vyplýva

$$\begin{aligned} |C_{jm}^{(+)}|^2 &= \langle j, m|J_-J_+|j, m\rangle \\ |C_{jm}^{(-)}|^2 &= \langle j, m|J_+J_-|j, m\rangle \end{aligned}$$

Využijeme ďalej (11) a (8) a dostaneme:

$$\begin{aligned} |C_{jm}^{(+)}|^2 &= \eta_j - m(m+1) \\ |C_{jm}^{(-)}|^2 &= \eta_j - m(m-1) \end{aligned} \quad (14)$$

Z rovníc (14) okamžite vyplýva ohraničenie

$$\eta_j \geq m(m+1) \quad \eta_j \geq m(m-1) \quad \text{pre všetky } m \quad (15)$$

Pri danom η_j je teda m ohraničené zhora aj zdola. Na druhej strane pôsobením J_+ na stav $|j, m\rangle$ dostaneme podľa rovnice (13) stav $|j, m+1\rangle$, ktorý má m o jednotku väčšie. Nový stav nedostaneme len vtedy, ak pre určité m_0 platí $\eta_j = m_0(m_0+1)$, vtedy podľa rovnice (8) sa konštanta $C_{jm_0}^{(+)}$ v rovnici (13) rovná nule a nedostávame stav s vyšším m . Takéto m_0 označujeme v ďalšom symbolom j , čiže platí

$$m \leq j, \quad \eta_j = j(j+1) \quad (16)$$

Podľa (15) musí byť m ohraničené aj zdola. Podobne ako v predchádzajúcom prípade musí byť konštanta $C_{j\mu}^{(-)}$ nulová. Z rovnice (14) vidíme, že musí platiť:

$$\eta_j = j(j+1) = \mu(\mu+1); \quad \mu = m_{\min} \quad (17)$$

Rovnica (17) má riešenia $\mu = -j$, $\mu = j+1$. Prvé z nich je zrejme hľadaná najmenšia hodnota m . Keď to zhrnieme, dostávame:

$$\eta_j = j(j+1) \quad (18)$$

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (19)$$

Pri fixovanom j môže teda m nadobúdať $2j+1$ možných hodnôt uvedených v (19). „Počet hodnôt“ je ale celé číslo, preto musí byť číslo $2j+1$ celé a aj $2j$ musí byť celé a nezáporné. Vlastné hodnoty a vlastné stavy operátorov J^2 a J_z majú preto nasledujúce vlastnosti:

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle \quad (20)$$

$$2j = \text{celé číslo}, j \geq 0$$

$$J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle, \quad m \text{ je z (19)}$$

Vrátíme sa teraz k rovniciam (13). Rovnice (14) a (15) určujú konštanty $C_{jm}^{(+)}$ a $C_{jm}^{(-)}$ až na fázový faktor. Výber tohto faktora je ekvivalentný výberu relatívnych fáz jednotlivých stavov $|j, m\rangle$. Najčastejšie sa tento výber robí tak, aby $C_{jm}^{(+)}$ a $C_{jm}^{(-)}$ boli reálne kladné veličiny. Ak využijeme vzťahy

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1)$$

$$j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$$

dostaneme

$$J_+|j, m\rangle = \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j, m+1\rangle \quad (21)$$

$$J_-|j, m\rangle = \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j, m-1\rangle$$

Fázová konvencia (21) sa niekedy nazýva *Condonova-Shortleyho konvencia*.

Ak si pripomenieme vzťahy (9), ľahko odvodíme z predchádzajúcich dvoch rovníc

$$J_x|j, m\rangle = \frac{1}{2} \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j, m+1\rangle + \frac{1}{2} \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j, m-1\rangle \quad (22)$$

$$J_y|j, m\rangle = \frac{1}{2i} \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j, m+1\rangle - \frac{1}{2i} \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j, m-1\rangle$$

Spolu so vzťahmi (20) nám posledné tri rovnice umožňujú nájsť maticové elementy operátorov J_x , J_y , J_z v ľubovoľnom systéme funkcií $|j, m\rangle$.

Podstatný rozdiel medzi všeobecným prípadom, ktorý sme práve sledovali a prípadom orbitálneho momentu hybnosti, pri ktorom sme vychádzali z definície $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, je v prípustných hodnotách j , m . Pre orbitálny moment hybnosti musia byť j , m celé čísla, kým vo všeobecnom prípade môžu byť j a m aj polocelé (číslo x nazývame polocelým, ak $x = n + 1/2$, n je celé). Polocelé hodnoty j sa nedajú realizovať ako orbitálny moment hybnosti, preto napríklad spin 1/2 nemôže mať klasický analóg.

Všimnime si, že formalizmus spinu $1/2$ diskutovaný v 5. kapitole nie je nič iné ako prípad $j = 1/2$ v reprezentácii danej bázou

$$\{|j = 1/2, m = 1/2\rangle, |j = 1/2, m = -1/2\rangle\}$$

Stavovému vektoru je potom priradená jednotlíp cová matica

$$|\psi\rangle \rightarrow \Psi_m = \langle 1/2, m | \psi \rangle, \quad m = 1/2, -1/2 \quad (23)$$

a operátorom matica typu 2×2 :

$$\mathbf{A} \rightarrow A_{m,m'} = \langle 1/2, m | \mathbf{A} | 1/2, m' \rangle \quad (24)$$

Pretože vektory $|j, m\rangle$ tvoria úplný systém stavov, budeme vedieť rotáciu ľubovoľného stavového vektora vyjadriť, ak budeme poznať, ako pôsobí operátor rotácie \mathbf{U} na vektory $|j, m\rangle$, t. j. ak budeme poznať maticové elementy

$$\langle j', m' | \mathbf{U} | j, m \rangle \quad (25)$$

Ich výpočet je najjednoduchší v prípade rotácie o uhol φ okolo osi z . Potom totiž platí

$$\mathbf{U} = \exp(-i\mathbf{J}_z\varphi) \quad (26)$$

a podľa (20):

$$\mathbf{U} | j, m \rangle = e^{-im\varphi} | j, m \rangle \quad (27)$$

Vo všeobecnom prípade rotácie okolo osi \mathbf{n} o uhol \mathcal{G} maticové elementy

$$\langle j', m' | \exp(-i\mathcal{G}\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) | j, m \rangle \quad (28)$$

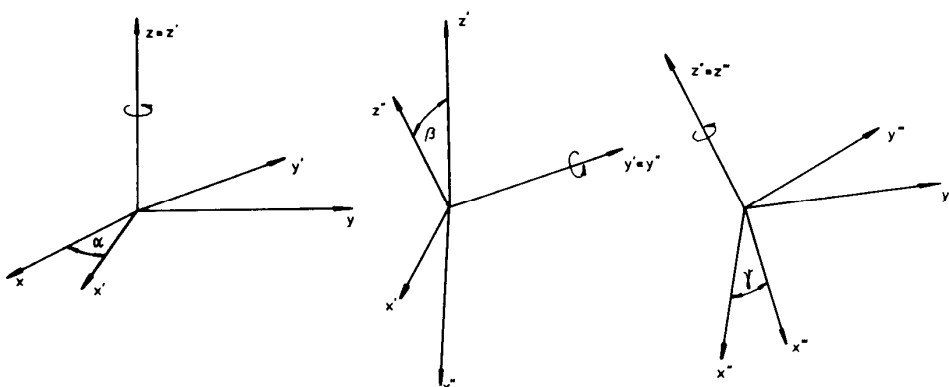
môžeme vypočítať pomocou vzťahov (20) a (22) ak exponenciálu v (28) rozvineme do mocninového radu. Výpočet je technicky komplikovaný, uvedieme iba výsledok pre $j = 1/2$. Na základe (28) sa dá ukázať, že spinory sa transformujú pri rotácii o uhol \mathcal{G} okolo osi \mathbf{n} podľa vzťahu

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \left\{ \cos\left(\frac{1}{2}\mathcal{G}\right) - i\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin\left(\frac{1}{2}\mathcal{G}\right) \right\} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (29)$$

kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sú Pauliho matice.

V aplikáciách sa často používa iné vyjadrenie rotácie, a to pomocou Eulerových uhlov. Rotáciu okolo ľubovoľnej osi totiž možno vždy vyjadriť ako zloženú transformáciu skladajúcu sa z troch špeciálnych rotácií (obr. 11.2)

- z rotácie o uhol α okolo osi z
- z rotácie o uhol β okolo (novej polohy¹⁹²) osi y
- z rotácie o uhol γ okolo (ďalšej novej polohy) osi z .



Obr. 11.2

¹⁹² S rotovaným telesom si môžeme myslieť s ním spojenú súradnicovú sústavu, ktorá sa pôvodne kryje s pevnou referenčnou sústavou. Osi rotácií, o ktorých je reč, sú osi sústavy pevne spojené s telesom, ich poloha v priestore sa teda rotáciami postupne mení.

Prvá z týchto rotácií je zrejme opísaná operátorom

$$\exp(-iJ_z \cdot \alpha)$$

druhá operátorom

$$\exp(-iJ'_y \cdot \alpha)$$

kde J'_y je operátor momentu hybnosti vzhľadom na novopoloženú os y . Podľa (2.17) môžeme operátor J'_y vyjadriť pomocou J_y ako

$$J'_y = U J_y U^\dagger$$

kde U je operátor rotácie, ktorým sme pôvodnú os y previedli do novej polohy. Ak za U dosadíme $U = \exp(-i\alpha J_z)$, dostaneme

$$\exp(-iJ'_y \beta) = \exp(-iJ_z \alpha) \exp(-iJ_y \beta) \exp(+iJ_z \alpha)$$

kde J_y je už operátor momentu hybnosti vzhľadom na os y v jej pôvodnej (v priestore nehybnej) polohe. Operátor, ktorý prevádza stav sústavy z pôvodného stavu do stavu po dvoch rotáciách (okolo osi z o uhol α a okolo osi y' o uhol β), potom je

$$U_{21} = e^{-i\beta J'_y} e^{-i\alpha J_z} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y}$$

Ak konečnú polohu osi z označíme ako z'' , máme pre tretiu rotáciu operátor

$$U_3 = e^{-i\gamma J_{z''}} = U_{21} e^{-i\gamma J_z} U_{21}^\dagger = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}$$

Takže celá rotácia vyjadrená pomocou Eulerových uhlov bude daná operátorom

$$U_3 U_{21} = \exp(-iJ_z \alpha) \exp(-iJ_y \beta) \exp(-iJ_z \gamma) = R(\alpha, \beta, \gamma) \quad (30)$$

Zo vzťahov (20), (22) vyplýva, že pri rotácii stavu $|j, m\rangle$ sa nemení kvantové číslo j , preto možno písať

$$R(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j \mathfrak{D}_{m', m}^j(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle \quad (31)$$

kde $\mathfrak{D}_{m', m}^j$ sú rotačné matice. Vzťah (31) je ich definičným vzťahom.

Podľa (30) je zřejmé, že rotačné matice sa dajú vyjadriť v tvare

$$\mathfrak{D}_{m', m}^j(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im'\alpha - im\gamma} d_{m', m}^j(\beta) \quad (32)$$

kde

$$d_{m', m}^j(\beta) = \langle j, m' | \exp(-i\beta J_y) | j, m \rangle \quad (33)$$

sú Wignerove matice. Ich maticové elementy možno vypočítať zo vzťahov (20) a (22). V špeciálnom prípade $j = 1/2$ dostaneme

$$d_{m', m}^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

11.4 SKLADANIE MOMENTOV HYBNOSTI, CLEBSCHOVE-GORDANOVE KOEFICIENTY

Moment hybnosti sústavy je často súčtom momentov hybnosti dvoch alebo viacerých podsústav. Napríklad pre elektrón v centrálne symetrickom poli sa celkový moment hybnosti skladá z orbitálneho a spinového momentu hybnosti. V atóme hélia (ak zanedbávame spiny elektrónov) bude celkový moment hybnosti daný súčtom orbitálnych momentov dvoch elektrónov. V tejto časti sa budeme zaoberať s formalizmom skladania dvoch momentov hybnosti v kvantovej mechanike. Situácia je tu

formálne komplikovanejšia ako v klasickej mechanike, kde dva momenty hybnosti \mathbf{L}_1 a \mathbf{L}_2 sa skladajú na výsledný moment jednoducho podľa pravidla sčítania vektorov:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \quad (1)$$

Vektorový súčet v (1) priamo implikuje nerovnosti

$$\left| |\mathbf{L}_1| - |\mathbf{L}_2| \right| \leq |\mathbf{L}| \leq |\mathbf{L}_1| + |\mathbf{L}_2| \quad (2)$$

S kvantovým analógom týchto nerovností sa stretne v ďalšom.

V kvantovej mechanike pri opise dvoch momentov hybnosti \mathbf{J}_1 a \mathbf{J}_2 uvažujeme dva súbory operátorov

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{1,x}; \mathbf{J}_{1,y}; \mathbf{J}_{1,z}; \mathbf{J}_1^2 &= \mathbf{J}_{1,x}^2 + \mathbf{J}_{1,y}^2 + \mathbf{J}_{1,z}^2 \\ \mathbf{J}_{2,x}; \mathbf{J}_{2,y}; \mathbf{J}_{2,z}; \mathbf{J}_2^2 &= \mathbf{J}_{2,x}^2 + \mathbf{J}_{2,y}^2 + \mathbf{J}_{2,z}^2 \end{aligned} \quad (3)$$

Jednotlivé momenty hybnosti spĺňajú komutačné vzťahy:

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_{1,x}, \mathbf{J}_{1,y}] &= i\mathbf{J}_{1,z} \text{ a cyklicky ďalej} \\ [\mathbf{J}_{2,x}, \mathbf{J}_{2,y}] &= i\mathbf{J}_{2,z} \text{ a cyklicky ďalej} \\ [\mathbf{J}_{1,x}, \mathbf{J}_1^2] &= [\mathbf{J}_{1,y}, \mathbf{J}_1^2] = [\mathbf{J}_{1,z}, \mathbf{J}_1^2] = 0 \\ [\mathbf{J}_{2,x}, \mathbf{J}_2^2] &= [\mathbf{J}_{2,y}, \mathbf{J}_2^2] = [\mathbf{J}_{2,z}, \mathbf{J}_2^2] = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Spoločné vlastné vektory operátorov \mathbf{J}_1^2 a $\mathbf{J}_{1,z}$ označíme $|j_1, m_1\rangle$ a spoločné vlastné vektory operátorov \mathbf{J}_2^2 a $\mathbf{J}_{2,z}$ ako $|j_2, m_2\rangle$. Pre tieto funkcie platí

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle &= j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle \\ \mathbf{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle \\ \mathbf{J}_{1,z} |j_1, m_1\rangle &= m_1 |j_1, m_1\rangle \\ \mathbf{J}_{2,z} |j_2, m_2\rangle &= m_2 |j_2, m_2\rangle \end{aligned}$$

Operátory s indexom 1 pôsobia na iné premenné (len na stavy $|j_1, m_1\rangle$) ako operátory s indexom 2 (tie pôsobia len na stavy $|j_2, m_2\rangle$), a preto

$$\text{každý operátor s indexom 1 komutuje s každým operátorom s indexom 2} \quad (5)$$

Operátor celkového momentu hybnosti (dvojčasticovej sústavy) definujeme analogicky ako v klasickej príhode¹⁹³:

$$\mathbf{J}_x = \mathbf{J}_{1,x} + \mathbf{J}_{2,x} \quad \mathbf{J}_y = \mathbf{J}_{1,y} + \mathbf{J}_{2,y} \quad \mathbf{J}_z = \mathbf{J}_{1,z} + \mathbf{J}_{2,z} \quad (6)$$

V dôsledku (5) platí:

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y] &= i\mathbf{J}_z \quad [\mathbf{J}_y, \mathbf{J}_z] = i\mathbf{J}_x \quad [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_x] = i\mathbf{J}_y \\ [\mathbf{J}_x, \mathbf{J}^2] &= [\mathbf{J}_y, \mathbf{J}^2] = [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}^2] = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Na základe predchádzajúcich komutačných vzťahov možno ľahko dokázať, že

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}^2] &= [\mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2] = 0 \\ [\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_z] &= [\mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}_z] = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Rovnice (3) až (8) ukazujú, že zo súboru operátorov:

$$\mathbf{J}_{1,x}; \mathbf{J}_{1,y}; \mathbf{J}_{1,z}; \mathbf{J}_1^2; \mathbf{J}_{2,x}; \mathbf{J}_{2,y}; \mathbf{J}_{2,z}; \mathbf{J}_2^2; \mathbf{J}_x; \mathbf{J}_y; \mathbf{J}_z \text{ a } \mathbf{J}^2$$

možno vybrať štyri navzájom komutujúce operátory.

Spravidla vyberáme súbor

$$\mathbf{J}_{1,z}; \mathbf{J}_1^2; \mathbf{J}_{2,z}; \mathbf{J}_2^2 \quad (9)$$

alebo súbor

$$\mathbf{J}^2; \mathbf{J}_z; \mathbf{J}_1^2; \mathbf{J}_2^2 \quad (10)$$

¹⁹³ Pri takejto definícii operátory $\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y, \mathbf{J}_z$ opisujú rotácie zloženej sústavy. V tomto zmysle je teda definícia (6) nevyhnutná.

Vlastné stavy súboru (9) možno ľahko skonštruovať. Ak ich označíme ako $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$, tak môžeme hneď zapísať:¹⁹⁴

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (11)$$

Tieto stavy tvoria úplný systém a (ak považujeme j_1 a j_2 za pevné) spĺňajú vzťah ortogonálnosti

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, m'_1, m'_2 \rangle = \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2}$$

Pretože m_1 môže nadobúdať $(2j_1 + 1)$ a m_2 zase $(2j_2 + 1)$ hodnôt, vidíme, že počet lineárne nezávislých stavov typu (11) je:

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (12)$$

Vlastné funkcie súboru operátorov (10) označíme ako $|j, m, j_1, j_2\rangle$; tieto stavy zrejme spĺňajú rovnice

$$\begin{aligned} J^2 |j, m, j_1, j_2\rangle &= j(j+1) |j, m, j_1, j_2\rangle \\ J_z |j, m, j_1, j_2\rangle &= m |j, m, j_1, j_2\rangle \\ J_1^2 |j, m, j_1, j_2\rangle &= j_1(j_1+1) |j, m, j_1, j_2\rangle \\ J_2^2 |j, m, j_1, j_2\rangle &= j_2(j_2+1) |j, m, j_1, j_2\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Všimnime si teraz štruktúru systému stavov $|j, m, j_1, j_2\rangle$ a jeho súvis so stavmi (11). Pretože operátory J_x, J_y, J_z, J^2 spĺňajú komutačné vzťahy (3.1) možno stavy $|j, m, j_1, j_2\rangle$ usporiadať do nasledujúcich skupín

$$\{ |j, j, j_1, j_2\rangle, |j, j-1, j_1, j_2\rangle, \dots, |j, -j, j_1, j_2\rangle \} \quad (14)$$

s rôznymi hodnotami m . Najvyššia možná hodnota m bude rovnaká ako najvyššia možná hodnota j . Takýto stav zostrojíme hneď, ak si uvedomíme, že platí $J_z = J_{1,z} + J_{2,z}$

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2, j_1, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle \quad (15)$$

Aplikáciou operátorov $J_-, (J_-)^2, \dots$ na stav (15) možno podobne ako v 3. časti zostrojiť systém stavov (14) prislúchajúci k rôznym hodnotám m . Stav $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle$, bude istou kombináciou stavov $|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle$ a $|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle$. Ak zostrojíme kombináciu ortogonálnu k tejto, dostaneme zrejme stav

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle$$

Postupnou aplikáciou operátorov $J_-, (J_-)^2, \dots$ dostaneme teraz systém stavov (14), príslušný k $j = j_1 + j_2 - 1$. Ak tento postup opakujeme ďalej, môžeme zostrojiť všetky možné systémy stavov typu (14). Hodnoty j budú pritom z množiny hodnôt:

$$j \in \{j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|\} \quad (16)$$

Tento výsledok nie je prekvapujúci, pretože zodpovedá presne vzťahu (2) platnému pre skladanie momentov hybnosti v klasickej mechanike. Z konštrukcie vidíme, že každý stav $|j, m, j_1, j_2\rangle$ je lineárnou kombináciou stavov $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j, m | j_1, m_1, j_2, m_2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (17)$$

Koeficienty $C(j, m | j_1, m_1, j_2, m_2)$ v rovnici (17) sa nazývajú *Clebschove-Gordanove koeficienty* alebo *koeficienty vektorového skladania*¹⁹⁵. Umožňujú vyjadriť vlastné stavy celkového momentu hybnosti a jeho tretej zložky pomocou vlastných stavov momentov hybnosti podsústav. Niekedy sa tiež používajú *Wignerove koeficienty* definované vzťahom

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + m}}{\sqrt{2j+1}} C(j, m | j_1, m_1, j_2, m_2)$$

¹⁹⁴ Po formálnej stránke ide o tenzorový súčin dvoch vektorov, ktorý sme z matematického hľadiska striktné nedefinovali, intuitívne je však zrejmy. Prítom skalárny súčin vektorov $|a, b\rangle = |a\rangle|b\rangle$ a $|c, d\rangle = |c\rangle|d\rangle$ definujeme ako $\langle c, d | a, b \rangle = \langle c | a \rangle \langle d | b \rangle$. Pre Clebschove-Gordanove koeficienty sa v literatúre bežne používajú aj iné označenia. Symbol, ktorý tu označujeme ako $C(j, m | j_1, m_1, j_2, m_2)$, sa niekedy značí výstižne ako $\langle j, m | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle$ alebo ako $\langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle$

ktoré majú užitočné vlastnosti symetrie. Tabuľky niektorých Clebschových-Gordanových koeficientov uvádzame na konci tejto časti. Clebschove-Gordanove koeficienty sú uvedené vo fázovej konvencii Condon a Shortleyho, čiže všetky koeficienty sú reálne. Pretože určujú transformáciu medzi dvoma ortogonálnymi bázami, sú tieto koeficienty elementami unitárnej matice. Transformácia inverzná k (17) potom bude:

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle = \sum_{j=j_1-j_2}^{j=j_1+j_2} C(j, m_1+m_2|j_1, m_1, j_2, m_2)|j, m_1+m_2, j_1, j_2\rangle \quad (18)$$

Ak pôsobíme operátorom $J_z = J_{1,z} + J_{2,z}$ na (17), vidíme, že koeficient $C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)$ je nenulový len vtedy, ak $m_1 + m_2 = m$. V opačnom prípade by totiž pravá, resp. ľavá strana v rovniciach (17) a (18) zodpovedala inej hodnote J_z . V rovnici (18) sme už túto skutočnosť explicitne využili.

Niektoré najčastejšie sa vyskytujú Clebschove-Gordanove koeficienty sú uvedené v tab. 1 a 2.

j	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j_1 + 1/2$	$\left(\frac{j_1 + m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{j_1 - m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$
$j_1 - 1/2$	$\left(\frac{j_1 - m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$-\left(\frac{j_1 + m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$

j	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1 + m)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}\right]^{1/2}$
j_1	$-\left[\frac{(j_1 + m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)}\right]^{1/2}$	$\frac{m}{\sqrt{j_1(j_1 + 1)}}$	$\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 + m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(2j_1 + 1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{j_1(2j_1 + 1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{(2j_1)(2j_1 + 1)}\right]^{1/2}$

Uvedieme niekoľko príkladov na skladanie momentov hybnosti. Použité označenie odpovedá rovnici (17) s tým, že na ľavej strane vynecháme j_1, j_2 .

Skladanie $j_1 = 1/2$ a $j_2 = 1/2$

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \\ |1, -1\rangle &= |1/2, -1/2\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \end{aligned}$$

Skladanie $j_1 = 1$ a $j_2 = 1/2$

$$\begin{aligned} |3/2, -3/2\rangle &= |1, 1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 \\ |3/2, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \\ |3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \\ |3/2, 3/2\rangle &= |1, -1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 \\ |1/2, 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \\ |1/2, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2 - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 \end{aligned}$$

Skladanie $j_1 = 1$ a $j_2 = 1$

$$\begin{aligned}
 |2, 2\rangle &= |1, 1\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \\
 |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle_1 |1, 0\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \\
 |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} |1, 1\rangle_1 |1, -1\rangle_2 + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_1 |1, 0\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{6}} |1, -1\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \\
 |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle_1 |1, -1\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle_1 |1, 0\rangle_2 \\
 |2, -2\rangle &= |1, -1\rangle_1 |1, -1\rangle_2 \\
 |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle_1 |1, 0\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \\
 |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle_1 |1, -1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \\
 |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle_1 |1, -1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle_1 |1, 0\rangle_2 \\
 |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle_1 |1, -1\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_1 |1, 0\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle_1 |1, 1\rangle_2
 \end{aligned}$$

Ako jednoduchý test sa presvedčte o tom, že pre skalárne súčiny $|j, m\rangle$ platí

$$\langle 1, 1|2, 1\rangle = 0 \quad \langle 2, 0|1, 0\rangle = 0 \quad \langle 2, -1|1, -1\rangle = 0 \quad \langle 2, 0|1, 0\rangle = 0 \quad \langle 2, 0|0, 0\rangle = 0$$

Predchádzajúca časť výkladu bola snáď trochu príliš abstraktná. Ilustrujme si preto celú schému na tom najjednoduchšom prípade – skladaní dvoch spinov $1/2$. Operátory momentu hybnosti častíc označovaných ako 1, 2 budú potom

$$\mathbf{s}_x^{(a)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a, \quad \mathbf{s}_y^{(a)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_a, \quad \mathbf{s}_z^{(a)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_a$$

kde $a = 1$ alebo $a = 2$ podľa toho, či matica pôsobí na spinor prvej alebo druhej častice. Zvyšovacie a znižovacie operátory pre jednotlivé častice sú

$$\mathbf{s}_+^{(a)} = \mathbf{s}_x^{(a)} + i\mathbf{s}_y^{(a)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_a$$

$$\mathbf{s}_-^{(a)} = \mathbf{s}_x^{(a)} - i\mathbf{s}_y^{(a)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a$$

Celkový znižovací operátor bude

$$\mathbf{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \quad (19)$$

pričom prvá matica pôsobí iba na stavy prvej a druhá iba na stavy druhej častice.

Najvyšší priemet momentu hybnosti dostaneme vtedy, ak obe častice sú v stave $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, čo zapíšeme ako

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \quad (20)$$

kde symbol \otimes znamená direktný súčin, t. j. súčin dvoch stavov závisiacich od rôznych premenných. Ak operátorom (19) pôsobíme na stav (20) dostaneme stav

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \quad (21)$$

Tento stav nie je normovaný na 1, ale ako vidno z (3.14) alebo okamžite, normovaným stavom bude

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right] \quad (22)$$

Ďalším pôsobením operátora S_- prideme k stavu

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad (23)$$

Stavy (20), (22) a (23) odpovedajú celkovému spinu rovnému 1 a priemetom na os z rovným 1, 0, -1 v uvedenom poradí. Ostáva nám nájsť ešte stav s celkovým momentom hybnosti 0 a priemetom na os z tiež nulovým. Tento stav musí byť lineárnou kombináciou členov

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad \text{a} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$$

pričom koeficienty musia byť také, aby stav, ktorý dostaneme, bol ortogonálny na stav (22). Výsledok až na fázový faktor, ktorý určujeme konvenciou, je zrejme

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right] \quad (24)$$

Doteraz sme používali označenie spinorov ako stĺpcov a operátorov ako matíc, teraz prepíšeme výsledky do tvaru používaného predtým.

Stavy zloženej sústavy píšeme ako $|S, S_z, s_1, s_2\rangle$ a stavy jednotlivých častíc ako $|s_a, s_{za}\rangle$. V označení ako v rovnici (17) potom máme

$$\begin{aligned} |1, 1, 1/2, 1/2\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |1, 0, 1/2, 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \\ |1, -1, 1/2, 1/2\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (25)$$

a napokon pre (24)

$$|0, 0, 1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

Odtiaľ porovnaním so (17) môžeme okamžite nájsť hodnoty Clebschových-Gordanových koeficientov pre tento prípad. Koeficienty, ktoré takto získame, sú uvedené v *tab. 3*. Odporúčame čitateľovi, aby sa o tom presvedčil a všimol si pritom poznámku za ostatnou tabuľkou, kde je vysvetlené označenie. Poznamenajme ešte, že niekedy sa spinové stavy častíc značia aj symbolmi $\chi_+(1)$, $\chi_-(1)$, čo označuje stavy so spinom „hore“, resp. „dolu“ pre časticu číslo „1“. V tomto označení pravá strana v druhej z rovníc (25) by bola

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

a čitateľ si ľahko prepíše aj ostatné.

11.5 TENZOROVÉ OPERÁTORY, WIGNEROVA-ECKARTOVA VETA

Pri výpočtoch pravdepodobnosti prechodu atómu zo stavu „1“ do stavu „2“ sme sa v 9. kapitole stretli s výrazmi typu

$$\int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 d^3 r$$

kde ψ_1 je vlnová funkcia začiatočného a ψ_2 konečného stavu atómu. Indexy 1, 2 boli stručným označením pre tri kvantové čísla: hlavné, orbitálne a magnetické. Podrobnejšie: $1 \sim (n, l, m)$, $2 \sim (n', l', m')$. V uvedenom maticovom elemente poznáme transformačné vlastnosti oboch vlnových funkcií pri rotáciách a správanie sa \mathbf{r} pri rotáciách je tiež dobre známe. Základná myšlienka je jednoduchá. Pretože operátor \mathbf{r} sa pri rotáciách transformuje veľmi podobne ako stav s momentom hybnosti 1 (v zmysle uvedenom nižšie) správa sa výraz $\mathbf{r} \psi_1$ ako stav získaný zložením momentov hybnosti 1 a l . Závislosť skalárneho súčinu takéhoto stavu so stavom s momentom hybnosti l' na niektorých kvantových číslach je preto triviálna. Vychádzajúc len zo správania sa funkcií $\psi_{n, l, m}$, $\psi_{n', l', m'}$ a operátora \mathbf{r} pri rotáciách môžeme odvodiť viaceré dôležité vlastnosti uvedeného maticového elementu. V tejto časti sa budeme zaoberať všeobecnou formuláciou takýchto úloh.

Tenzorové operátory. Uvažujme rotáciu¹⁹⁶

$$x_i \rightarrow x'_i = \mathbf{R}_{ik} x_k \quad (1)$$

Stavy $|\psi\rangle$ sa pri rotácii (1) transformujú nasledovne

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \mathbf{U}(\mathbf{R})|\psi\rangle \quad (2)$$

kde $\mathbf{U}(\mathbf{R})$ je unitárny operátor priradený rotácii (1). Operátor \mathbf{A} sa podľa (2.17) pri rotácii (1) transformuje nasledovne

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{U}(\mathbf{R})\mathbf{A}\mathbf{U}^\dagger(\mathbf{R}) \quad (3)$$

Sústavu $(2L + 1)$ operátorov

$$\mathbf{T}_M^L; \quad M = -L, (-L + 1), \dots, (L - 1), L \quad (4)$$

kde L je celé číslo nazývame (*ireducibilným*) *tenzorovým operátorom*, ak pri transformácii (3) platí:

$$\mathbf{U}(\mathbf{R})\mathbf{T}_M^L\mathbf{U}^\dagger(\mathbf{R}) = \sum_{M'} \mathbf{T}_{M'}^L \mathfrak{D}_{M', M}^L(\mathbf{R}) \quad (5)$$

kde matica $\mathfrak{D}_{M', M}^L(\mathbf{R})$ je daná rovnicou (3.31) a symbol \mathbf{R} v (5) označuje Eulerove uhly (α, β, γ) .

Nech $|(\alpha, j, m)\rangle$ označuje stav, pre ktorý platí¹⁹⁷

$$\mathbf{J}^2 |(\alpha, j, m)\rangle = j(j + 1) |(\alpha, j, m)\rangle \quad (6)$$

$$\mathbf{J}_z |(\alpha, j, m)\rangle = m |(\alpha, j, m)\rangle$$

kde \mathbf{J}^2 , \mathbf{J}_z sú druhá mocnina a tretí komponent celkového momentu hybnosti sústavy. Podľa (3.31) pri rotácii (1) platí:

$$|(\alpha, j, m)\rangle \rightarrow \mathbf{U}(\mathbf{R}) |(\alpha, j, m)\rangle = \sum_{M'} \mathfrak{D}_{M', m}^j(\mathbf{R}) |(\alpha, j, M')\rangle \quad (7)$$

Definujme teraz vektor (nie nevyhnutne normovaný)

$$|(\alpha, T^L, j, m, L, M)\rangle = \mathbf{T}_M^L |(\alpha, j, m)\rangle \quad (8)$$

¹⁹⁶ V rovnici (1) používame označenie $(x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ a na pravej strane používame sumačnú konvenciu – sčítavame podľa opakovaného indexu k . Ak je rotácia daná Eulerovými uhlami α, β, γ tak matica \mathbf{R}_{ik} je tiež jednoznačne daná týmito uhlami a v podrobnom zápise by sme mali písať $\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma)_{ik}$. V ďalšom budeme symbolom \mathbf{R} (tam, kde to nemôže viesť k nedorozumeniu) označovať aj trojicu Eulerových uhlov, určujúcich rotáciu.

¹⁹⁷ Symbol a v $|(\alpha, j, m)\rangle$ označuje všetky kvantové čísla, odlišné od j, m .

Podľa rovníc (5) a (7) sa tento vektor pri rotácii (1) transformuje nasledovne

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{R})|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle &= \mathbf{U}(\mathbf{R}) T_M^L \mathbf{U}^+(\mathbf{R}) \mathbf{U}(\mathbf{R}) |(\alpha), j, m\rangle = \\ &= \sum_{M'm'} \langle M', M | \mathbf{R} \rangle \langle j', m' | \mathbf{R} \rangle T_{M'}^L |(\alpha), j, m'\rangle \end{aligned}$$

teda tak isto, ako by sa transformoval direktný súčin dvoch stavov $|j, m\rangle |L, M\rangle$. Túto skutočnosť sme v zápise vektora $|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle$ znázornili tým, že do zátvorky sme dali symboly, ktoré naznačujú, ako daný stav vznikol a mimo zátvorku kvantové čísla určujúce jeho transformačné vlastnosti pri rotáciách. So stavmi typu $|j, m, L, M\rangle$ sme sa už stretli v 4. časti a rozkladali sme ich pomocou Clebschových-Gordanových koeficientov do stavov s určitou hodnotou celkového momentu hybnosti. Dá sa teda predpokladať, že existuje systém vektorov, $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$, ktoré sa transformujú pri rotáciách ako stavy s celkovým momentom hybnosti J a s priemetom na os z rovnajúcim sa μ , pričom

$$|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle = \sum_{J=|L-j|}^{J=L+j} C(J, M+m | j, m, L, M) |(\alpha, T^L, j), J, M+m\rangle \quad (9)$$

Táto rovnica je zrejme analogická k rovnici (4.18). Vzťah inverzný k vzťahu (9), ktorý je analógom (4.17) možno potom považovať za definíciu vektorov $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ a ukázať, že tieto vektory majú spomínané vlastnosti. Z transformačných vlastností vektorov $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ pri rotáciách vyplýva, že $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ je stav s celkovým momentom hybnosti J a s priemetom na os z rovnajúcim sa μ .

Pokúsime sa teraz nájsť závislosť maticových elementov

$$\langle(\alpha'), j', m' | T_M^L |(\alpha), j, m\rangle \quad (10)$$

od kvantových čísel m', M, m .

Vyjadríme $T_M^L |(\alpha), j, m\rangle$ pomocou rozkladu (9) a po dosadení do (10) máme:

$$\begin{aligned} \langle(\alpha'), j', m' | T_M^L |(\alpha), j, m\rangle &= \\ &= \sum_{J=|L-j|}^{J=L+j} C(J, M+m | j, m, L, M) \langle(\alpha'), j', m' |(\alpha, T^L, j), J, M+m\rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Dva vlastné stavy operátora J^2 sú navzájom ortogonálne, ak nezodpovedajú tej istej vlastnej hodnote a to isté platí pre operátor J_z . Navyše, maticový element $\langle(\alpha), j, m |(\beta), j, m\rangle$ nezávisí od kvantového čísla m . Toto tvrdenie dokážeme o chvíľu. Preto maticový element v (11) bude sa rovnáť nule pre $j' \neq J, m' \neq M+m$ a môžeme písať

$$\langle(\alpha'), j', m' |(\alpha, T^L, j), J, M+m\rangle = \delta_{j', J} \delta_{m', (M+m)} \langle\alpha', j' | T^L | \alpha, j\rangle$$

Tento vzťah je definíciou redukovaného maticového elementu $\langle\alpha', j' | T_L | \alpha, j\rangle$, ktorý, podľa toho, čo sme vyššie povedali, závisí iba od α', j', α, j a je rovnaký pre všetky operátory T_M^L pre rôzne M . Po dosadení dostaneme

$$\langle(\alpha'), j', m' | T_M^L |(\alpha), j, m\rangle = C(j', m' | j, m, L, M) \frac{\langle\alpha', j' | T^L | \alpha, j\rangle}{\sqrt{2j'+1}} \quad (12)$$

Na pravej strane sme vynechali faktor $\delta_{m', (M+m)}$, ktorý je zbytočný, pretože Clebschov-Gordanove koeficienty sa rovnajú nule pre $m' \neq m+M$.

Rovnica (12) sa nazýva Wignerovou-Eckartovou vetou. Fyzikálny význam Wignerovej-Eckartovej vety je v tom, že závislosť maticového elementu (12) od magnetických kvantových čísel m, M, m' je daná výlučne Clebschovým-Gordanovým koeficientom. Pomer dvoch maticových elementov pri pevnom $\alpha', \alpha, j', j, L$ je jednoznačne daný vzťahom (12). Navyše Clebschov-Gordanov koeficient v (12) je rôzny od nuly len vtedy, ak $m' = M+m$ a ak $|L-j| \leq j' \leq L+j$. Odtiaľ vyplývajú rôzne výberové pravidlá.

Dokážeme ešte tvrdenie, použité za rovnicou (11). Podľa neho maticový element $\langle(\alpha), j, m |(\alpha'), j, m\rangle$

nezávisí od kvantového čísla m , pritom nie je podstatné, aký je význam kvantových čísel α , α' . Využijeme tu operátory J_+ , J_- a rovnice (3.11) a (21). Podľa nich platí:

$$|(\alpha), j, m+1\rangle = [(j-m)(j+m+1)]^{-1/2} J_+ |(\alpha), j, m\rangle$$

a to isté pre $|(\alpha'), j, m+1\rangle$. Odtiaľ

$$\langle(\alpha), j, m+1|(\alpha'), j, m+1\rangle = [(j-m)(j+m+1)]^{-1} \langle(\alpha), j, m|J_- J_+ |(\alpha'), j, m\rangle$$

Ďalej platí

$$J_- J_+ |(\alpha'), j, m\rangle = (J^2 - J_z^2 - J_z) |(\alpha'), j, m\rangle = [j(j+1) - m^2 - m] |(\alpha'), j, m\rangle$$

Z dvoch posledných rovníc dostaneme ihneď

$$\langle(\alpha), j, m+1|(\alpha'), j, m+1\rangle = \langle(\alpha), j, m|(\alpha'), j, m\rangle$$

Pretože toto tvrdenie platí pre ľubovoľné $m = -j, \dots, j-1, j$, vyplýva odtiaľ nezávislosť maticového elementu od m .

Ako ilustráciu uvedme, že trojica operátorov (v x -reprezentácii)

$$T_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy), \quad T_0^1 = z, \quad T_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) \quad (13)$$

je v zmysle definície (5) tenzorovým operátorom, o čom sa možno presvedčiť priamym výpočtom. V maticovom elemente typu

$$\int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 d^3 r \quad (14)$$

potom môžeme vyjadriť \mathbf{r} pomocou operátorov T_M^1 vzt'ahmi inverznými k (13). Orbitálne kvantové čísla stavov ψ_1 a ψ_2 označme l_1 a l_2 . Podľa *tab. 2* CG koeficientov z predchádzajúceho článku je podľa (12) i bez počítania zrejmé, že maticový element (14) môže byť nenulový iba pre $l_2 = l_1$ alebo $l_2 = l_1 + 1$ alebo $l_2 = l_1 - 1$. Zložením momentov hybnosti l_1 a 1 totiž môžeme dostať iba niektorý z vyššie uvedeníh momentov hybnosti. Z diskusie v 9. kapitole však vieme, že pre $l_2 = l_1$ sa maticový element rovná nule kvôli parite. Pomocou Wignerovej-Eckartovej vety sme teda dokázali jednoduché výberové pravidlo (porovnaj s kapitolou 9): elektrické dipólové prechody sú v prvom ráde možné iba medzi stavmi, ktorých orbitálne kvantové čísla sa líšia o jednotku.

11.6 ZHRNUTIE

Bez podrobnejšieho komentára zopakujeme prehľadne základné vzt'ahy:

Operátory momentu hybnosti spĺňajú komutačný vzt'ah

$$[J_i, J_k] = i \varepsilon_{ijk} \hbar J_j \quad (\text{sumovanie!})$$

Vlastné stavy:

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle \quad m = -j, -j+1, \dots, j$$

Pre operátory $J_+ = J_x + iJ_y$, $J_- = J_x - iJ_y$ platí

$$J_+ |j, m\rangle = \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2} \hbar |j, m+1\rangle$$

$$J_- |j, m\rangle = \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2} \hbar |j, m-1\rangle$$

Skladanie momentov hybnosti (definícia CG koeficientov)

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(J, M | j_1, m_1, j_2, m_2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

$$|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \sum_J C(J, m_1 + m_2 | j_1, m_1, j_2, m_2) |J, m_1 + m_2\rangle$$

Pri rotácii o uhol \mathcal{G} okolo osi \mathbf{n} sa transformujú stavy podľa vzťahu

$$|\psi'\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}\right) |\psi\rangle$$

Ak je rotácia zadaná Eulerovými uhlami α, β, γ :

$$|\psi'\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha\right) |\psi\rangle = R(\alpha, \beta, \gamma) |\psi\rangle$$

Vlastné stavy momentu hybnosti sa transformujú pri rotáciách podľa vzťahu (definícia Wignerových matic)

$$R(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle = \sum_{m'=j}^j e^{-im'\alpha - im\gamma} d_{m'm}^j(\beta) |j, m'\rangle$$

11.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Nájdite stredné hodnoty operátorov J_x, J_y, J_z v stave $|J, M\rangle$!
- Vypočítajte strednú kvadratickú odchýlku

$$\overline{(\Delta J_x)^2} = \langle JM | (J_x - \bar{J}_x)^2 | JM \rangle$$

a to isté pre

$$\overline{(\Delta J_y)^2} = \langle JM | (J_y - \bar{J}_y)^2 | JM \rangle$$

- Odvodte vzťah (3.29) na základe vzťahu (3.28). Návod: použite vzťah (5.4.19).
- Nech $R = \exp(-i \frac{\mathcal{G}}{2} \sigma_z)$ (operátor rotácie spinoru okolo osi z). Ukážte, že platí

$$\begin{aligned} \sigma'_x &= R^\dagger \sigma_x R = \sigma_x \cos \mathcal{G} - \sigma_y \sin \mathcal{G} \\ \sigma'_y &= R^\dagger \sigma_y R = \sigma_y \sin \mathcal{G} + \sigma_x \cos \mathcal{G} \\ \sigma'_z &= R^\dagger \sigma_z R = \sigma_z \end{aligned}$$

Návod: použite vzťah (5.4.19).

- Nájdite Wignerovu maticu (pozrite vzťah (3.33)) pre prípad spinu $1/2$.
- Odvodte CG koeficienty uvedené v *tab. 1* vo 4. článku.
- Uvažujme dve častice so spinom $1/2$ Dvojčasticová spinová funkcia môže odpovedať celkovému spinu jedna alebo nula (alebo ich superpozícii) Nájdite operátory P_0, P_1 , ktoré z dvojčasticovej vlnovej funkcie vyprojektujú stavy s celkovým spinom 0 resp 1.
- Častica so spinom $1/2$ sa pohybuje v centrálne symetrickom poli tak, že jej orbitálny moment hybnosti je l Nájdite projekčné operátory $P_{l+1/2}, P_{l-1/2}$, ktoré vyberajú z celkovej vlnovej funkcie stavy s $j = l + 1/2, j = l - 1/2$.
- Nestabilná častica s momentom hybnosti l a s priemetom momentu hybnosti do osi z rovným m sa rozpadá na dve bezspinové častice Nájdite uhlové rozdelenie produktov rozpadu v pokojovej sústave rozpadajúcej sa častice.
- Ukážte, že trojica $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ tvorí vektorový operátor.
- Uvažujte vlnové funkcie v atóme vodíka $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ a trojicu maticových elementov

$$\int \varphi_{n'l'm'}^*(\mathbf{r}) x_i \psi_{nlm}(\mathbf{r}) dV, \quad i = 1, 2, 3$$

Vyjadrite $x_i, i = 1, 2, 3$ pomocou guľových funkcií $Y_{lm}, m = -1, 0, 1$, rozdeľte uhlovú a radiálnu časť maticového elementu a spočítajte pomocou CG koeficientov uhlovú časť. Zovšeobecnite potom príklad tak, že x_i nahradíte výrazmi $Y_{\lambda\mu}(\mathcal{G}, \varphi)$ pri pevnom λ a premennom μ . Interpretujte výsledky pomocou Wignerovej-Eckartovej vety.

- Elektrický kvadrupólový moment náboja rozloženého s hustotou $\rho(\mathbf{r})$ je v klasickom prípade definovaný ako tenzor

$$\mathbf{Q}_{ik} = \int \rho(\mathbf{r}) (3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) dV, \quad i, k = 1, 2, 3$$

Pretože zrejme platí $\mathbf{Q}_{ik} = \mathbf{Q}_{ki}, \Sigma \mathbf{Q}_{ii} = 0$, má tento tenzor len 5 nezávislých komponentov. Vyjadrite tieto komponenty pomocou piatich veličín

$$\mathbf{Q}_{ik} = \int \rho(\mathbf{r}) r^2 Y_{2m}(\mathcal{G}, \varphi) dV$$

kde $m = -2, -1, 0, 1, 2$ Aká je kvantovomechanická analógia týchto vzťahov? Pokúste sa sformulovať na základe Wignerovej-Eckertovej vety výberové pravidlá pre elektrický kvadrupólový moment.

12 ATÓM VODÍKA V STATICKOM ELEKTRICKOM A MAGNETICKOM POLI JEMNÁ ŠTRUKTÚRA SPEKTRÁLNYCH ČIAR

12.1 ÚVOD

Štúdium zmien spektrálnych čiar atómov a molekúl spôsobených vonkajšími elektrickými a magnetickými poliami zohralo veľmi dôležitú úlohu v rozvoji atómovej fyziky i kvantovej mechaniky. V tejto kapitole sa budeme zaoberať iba najjednoduchšou sústavou – atómom vodíka. Sústreďme sa pritom najmä na kvalitatívnu a metodickú stránku jednotlivých problémov. Podrobnosti výpočtov a použitie príbuzných metód ku komplikovanejším systémom možno nájsť v literatúre.¹⁹⁸

Zmena energetických hladín atómu vonkajším elektrostatickým poľom sa všeobecne nazýva *Starkovým javom*. Jeho kvalitatívnou analýzou sa budenie zaoberať v nasledujúcom článku a výpočet lineárneho a kvadratického Starkovho javu načrtne v článku 12.3.

Zmeny energetických hladín atómu spôsobené vonkajším magnetickým poľom nazývame všeobecne *Zeemanovým javom*. Jeho analýza je trochu komplikovaná tým, že pri bežne dosahovaných intenzitách predstavuje vonkajšie magnetické pole naozaj iba malú poruchu. Aby malo zmysel porovnanie výsledkov s experimentom, musíme najprv parametre „neporušených hladín“ určiť presnejšie ako doteraz. Konkrétne musíme pri výpočte spektra atómu vodíka (pri nulových vonkajších poliach) použiť realistickejší hamiltonián, v ktorom budú zahrnuté aj relativistické korekcie a spinovo-orbitálna väzba. Diskusiu týchto otázok začneme tým, že v článku 12.4 urobíme kvalitatívne odhady rádovej veľkosti jednotlivých efektov, v ďalšom sa budeme trochu podrobnejšie zaoberať odvodením výrazov pre spinovo-orbitálnu väzbu a relativistické korekcie a v článku 12.6 prediskutujeme jemnú štruktúru spektrálnych čiar – stále bez vonkajšieho magnetického poľa.

V poslednom článku sa budeme zaoberať Zeemanovým javom.

Poznamenajme ešte nakoniec, že problematika preberaná v tejto kapitole bola pri zrode kvantovej mechaniky jedným zo základných „skúšobných kameňov“ nových ideí. Klasici ako Lorentz, Sommerfeld, Heisenberg, Jordan a mnohí ďalší poznali dokonale experimentálny stav a spektrá mali naozaj „v ruke“. Dnes, keď kvantová mechanika je v podstate uzavretou teóriou, sa hlavný akcent trochu posunul na „teoretickejšie“ problémy. Otázka spektier sa diskutuje iba stručne ako príklad na aplikáciu. Obmedzený rozsah potom núti vynechať na veľa miestach podrobný postup a obmedziť sa iba na náznaky. Je preto prirodzené, že v štruktúre výkladu sa musia objaviť „logické medzery“. Tak napríklad pri diskusii Starkovho javu z uvedených rádoových odhadov nijako nevyplýva, že možno zanedbať spinovo-orbitálnu interakciu, a vo všeobecnom prípade to ani možné nie je. Historicky však obdobný výpočet slúžil iba na štúdium charakteru rozštiepenia spektrálnych čiar v takej oblasti spektra, kde spomenuté zanedbanie nebolo na závalu. Preto i my uvádzame „klasický výpočet“. Podobných medzier si čitateľ všimne i viac. Záujemcov o podrobnosti súvisiace s touto historicky významnou problematikou odkazujeme na Sommerfeldovu monografiu [6].

12.2 KVALITATÍVNA DISKUSIA STARKOVHO JAVU

Hamiltonián atómu vodíka bez prítomnosti vonkajšieho elektrostatického poľa je

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

¹⁹⁸ Odporúčame na úvod učebnicu Landaua a Lifšica [9] a monografie Betheho a Salpetera [12] a Sommerfelda [6].

Vplyv vonkajšieho homogénneho elektrostatického poľa opíšeme jednoducho. Pre určitost' predpokladajme, že pole má intenzitu $E = |\mathbf{E}|$ a smer osi z . Potenciál príslušného elektrostatického poľa je $\varphi(\mathbf{r}) = -Ez$ a potenciálna energia elektrónu s nábojom $(-e)$ v tomto poli je

$$H' = eEz \quad (2)$$

Z hľadiska kvantovej mechaniky je tým úloha v podstate sformulovaná. Máme

$$H = H_0 + H' \quad (3)$$

pričom poznáme vlastné funkcie neporušeného hamiltoniánu H_0 .

$$H_0 \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \quad (4)$$

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (5)$$

Ostáva nám už iba použiť poruchové metódy výpočtu korekcií k energetickým hladinám. Predtým ako by sme to urobili je však užitočné odhadnúť výsledky, ktoré očakávame.

Lineárny Starkov jav

Porucha H' je úmerná intenzite E , preto korekcie prvého rádu k energetickým hladinám budú tiež úmerné E . Vtedy hovoríme o *lineárnom Starkovom jave*, ale znamená to presne to isté ako Starkov jav v prvom ráde poruchovej teórie.

Všimnime si najprv základný stav. Korekcia prvého rádu k jeho energii je daná vzťahom

$$\Delta E_1 = \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) H' \psi_{100}(\mathbf{r}) dV \quad (6)$$

Okamžite však vidno, že $\Delta E_1 = 0$. Je to tým, že v tomto stave $l = m = 0$ a Y_{00} je konštanta. Preto $\psi_{100}(\mathbf{r})$ závisí iba od absolútnej hodnoty $r = |\mathbf{r}|$. Preto je $\psi_{100}^*(\mathbf{r}) \psi_{100}(\mathbf{r})$ párnou funkciou z , zatiaľ čo H' je nepárna. Podintegrálna funkcia v (6) je teda nepárnou funkciou z a integrál z nej je nulový.

Pri korekciách k vyšším hladinám je situácia podstatne iná. Je to spôsobené tým, že tieto hladiny sú degenerované a pri výpočte korekcií treba použiť príslušnú verziu poruchovej metódy. Napríklad pre hladinu s $n = 2$ máme štyri rôzne, navzájom ortogonálne stavy¹⁹⁹.

$$n = 2, l = 0, m = 0; \quad n = 2, l = 1, m = 0 \quad (7)$$

$$m = 1$$

$$m = -1$$

Pri poruchovej metóde pre degenerované hladiny hľadáme také lineárne kombinácie vlnových funkcií, ktoré diagonalizujú poruchu H' . Takéto lineárne kombinácie vlnových funkcií už vedú k stavom s istým nenulovým dipólovým momentom²⁰⁰. Typická veličina dipólového momentu p bude daná súčinom náboja elektrónu a typického rozmeru atómu, t. j. Bohrovho polomeru a_1 :

$$p \sim ea_1 \quad (8)$$

Energia (tuhého) dipólu vo vonkajšom elektrickom poli je

$$\delta U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \quad (9)$$

a rádový odhad korekcie k energii degenerovanej hladiny teda bude

$$\delta U \sim ea_1 E \quad (10)$$

Kvôli názornejšej predstave o veľkosti tejto korekcie uvedme, že typické hodnoty rozdielu (neporušených) energetických hladín v atóme vodíka sú rádovo rovné

$$\Delta U \sim 2|E_1| = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

¹⁹⁹ Spin elektrónu tu neuvažujeme, lebo hamiltonián (3) nezávisí od spinu a všetky hladiny sú rozdelené na časť so spinom „hore“ a časť so spinom „dolu“, pričom prechody medzi nimi nie sú v rámci (3) možné.

²⁰⁰ Podrobnejšie to uvidíme v nasledujúcom článku.

čo možno prepísať do tvaru

$$\Delta U \sim e \left(\frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{m \cdot e^2} \right)^{-1} \cdot \frac{e}{4\pi\epsilon_0} = e \cdot a_1 \cdot \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_1^2} = e \cdot a_1 \cdot E_{\text{int}} \quad (11)$$

kde $E_{\text{int}} (\approx 5 \cdot 10^{10} \text{ Vm}^{-1})$ má význam intenzity coulombovského poľa v atóme na prvej Bohrovej dráhe.

Pre vyššie excitované stavy môžeme pre orientáciu brať

$$E_{\text{int}} \sim 10^{10} \text{ až } 10^{12} \text{ Vm}^{-1} \quad (12)$$

Pre pomer korekcie za lineárny Starkov jav k energetickému rozdielu hladín takto dostaneme

$$\frac{\delta U}{\Delta U} \sim \frac{E}{E_{\text{int}}} \quad (13)$$

Dĺžka spektrálnych čiar vo viditeľnej oblasti je niekoľko sto nm, a preto pri $E \sim 10^7 \text{ Vm}^{-1}$ (príklad pre orientáciu) očakávame korekcie rádovo 0,1 nm.

Kvadratický Starkov jav

O kvadratickom Starkovom jave hovoríme vtedy, keď korekcia k energetickej hladine je úmerná E^2 , čo matematicky odpovedá korekciám druhého rádu poruchovej metódy.

Fyzikálne korekcie druhého rádu odpovedajú polarizovateľnosti atómu. Ak totiž má atóm dipólový moment

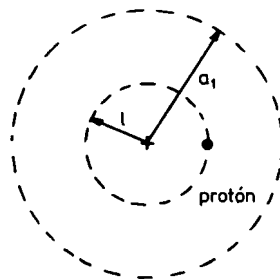
$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (14)$$

potom jeho energia vo vonkajšom poli je

$$U = -\frac{1}{2} \alpha E^2 \quad (15)$$

O vzťahu (15) sa ešte zmienieme na záver článku, teraz sa budeme zaujímať o rádový odhad veličiny α vystupujúcej vo vzťahu (14).

Predstavme si pre tento účel veľmi zjednodušený model atómu vodíka v základnom stave. Protón je nehybný a je v strede a elektrónový oblak odpovedá náboju rovnomerne rozdelenému v guli s polomerom a_1 . Ak túto sústavu dáme do vonkajšieho poľa s intenzitou E , celá guľa záporného náboja sa posunie o vzdialenosť l voči jadru. Posunutie odhadneme takto. Na protón posunutý o l z centra oblaku pôsobia dve sily: po prvé sila od vonkajšieho poľa rovná eE a po druhé sila od záporného elektrického náboja atómu. Náboj elektrónového oblaku rozdelíme na dve časti, tak, ako je to ukázané na obr. 12.1. Sila od náboja ležiaceho mimo gule s polomerom l je nulová.



Obr. 12.1

Celkový náboj v guli s polomerom l je $\delta Q = -e(l/a_1)^3$ a tento náboj pôsobí na protón príťažlivou silou tak, ako by bol umiestnený v začiatku. Veľkosť tejto sily je

$$F = \frac{e(l/a_1)^3 e}{4\pi\epsilon_0 l^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_1^3} l$$

Táto sila ale musí byť rovná vonkajšej sile $F = eE$. Odtiaľ pre posunutie l dostaneme

$$l = E \frac{4\pi\epsilon_0 a_1^3}{e}$$

Indukovaný dipólový moment je $p = el$ a porovnaním so (14) máme odhad

$$\alpha \sim 4\pi\epsilon_0 a_1^3 \quad (16)$$

Použitý model bol veľmi hrubý a v skutočnosti očakávame ako výsledok pravú stranu v (16) násobenú faktorom medzi, povedzme 0,1 a 10. Tento faktor nájdeme až numerickým výpočtom, ktorého postup naznačíme neskôr.

Teraz odhadneme očakávaný výsledok pre korekciu druhého rádu pomocou vzťahu (15) s koeficientom α daným vzťahom (16).

$$\delta U \sim (4\pi\epsilon_0 a_1^3) a_1 E^2 \quad (17)$$

Intenzita vnútorného poľa v atóme je $E_{\text{int}} \sim e/(4\pi\epsilon_0 a_1^2)$. Pomocou tohto upravíme prvý člen na pravej strane (17) a máme odhad

$$\delta U \sim e a_1 E (E/E_{\text{int}}) \quad (18)$$

Výraz $e a_1 E$ je ale odhadom pre lineárny Starkov jav, takže korekcia druhého rádu (18) sa od prvého rádu líši faktorom (E/E_{int}) , ktorý pri $E \sim 10^7 \text{ Vm}^{-1}$ prináša ďalší faktor 10^{-3} až 10^{-4} , pri základnom stave atómu vodíka.

Napokon sa ešte vrátíme k vzťahu (15) pre energiu indukovaného dipólu vo vonkajšom poli. Tento výraz možno písať ako

$$U = -(\alpha E)E + \frac{1}{2} \alpha E^2 \quad (19)$$

a odtiaľ vidno fyzikálnu interpretáciu. Prvý člen na pravej je energia tuhého dipólu vo vonkajšom poli, druhý je vnútorná energia dipólu. Najjednoduchšie to vidno z modelu, kde si dipól predstavíme ako dva náboje spojené pružinkou s tuhosťou k . Ak takýto dipól dáme do vonkajšieho poľa, pružinka sa natiahne tak, aby sila eE bola rovná sile pružinky kx :

$$eE = kx$$

Odtiaľ $x = (eE/k)$. Dipólový moment pružinky je $p = ex = e^2 E/k$ a jeho energia vo vonkajšom poli je $-pE = -e^2 E^2/k$. Energia natiahnutej pružinky je $kx^2/2$ a po dosadení za x máme $e^2 E^2/2k$, čo je situácia odpovedajúca presne (19) pri $\alpha = e^2/k$.

Všeobecnejšiu a podrobnejšiu diskusiu čitateľ nájde v učebniciach teórie EM poľa, odporúčame špeciálne Jacksonovu učebnicu²⁰¹.

12.3 STARKOV JAV

Najprv naznačíme postup výpočtu lineárneho Starkovho javu pre hladinu $s, n = 2$ pre atóm vodíka. Prvou vecou, ktorú potrebujeme sú maticové elementy poruchy pre stavy (2.7).

Výsledok je uvedený v tabuľke 12.1.

Tabuľka 12.1

Maticové elementy poruchy $H' = eEz$ pre funkcie ψ_{2lm}

	2, 0, 0	2, 1, 0	2, 1, 1	2, 1, -1
2, 0, 0	0	$-3a_1 eE$	0	0
2, 1, 0	$-3a_1 eE$	0	0	0
2, 1, 1	0	0	0	0
2, 1, -1	0	0	0	0

²⁰¹ Jackson, J. D.: Classical electrodynamics. J. Wiley & Sons, New York 1962.

Riadky a stĺpce tabuľky sú číslované trojicou kvantových čísel (n, l, m) a v každom mieste tabuľky uvádzame maticový element

$$\int \psi_{nlm}^* \mathbf{H}' \psi_{n'l'm'} dV = \int R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) e E_z R_{n'l'}(r) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) dV \quad (1)$$

Pozrime sa teraz na to, prečo sú takmer všetky maticové elementy v *tab. 12.1* nulové. Diagonálne elementy sú podľa (1) rovné

$$\int |R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 e E_z dV \quad (2)$$

Funkcia $R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ pri zámene $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ je párna pre párne l a nepárna pre nepárne l , ale v oboch prípadoch je druhá mocnina jej absolútnej hodnoty párna. Faktor z je ale nepárny, a preto podintegrálna funkcia v (2) je nepárna a integrál z nej je nulový.

Pre nediagonálne elementy prideme rýchlo k tomu, že môžu byť nenulové len pre $m = m'$. Funkcia Y_{lm} v (1) totiž obsahuje faktor $\exp(im\varphi)$ a podobne za $Y_{l'm'}$ dostaneme faktor $\exp(-im'\varphi)$. Ak $m \neq m'$ bude integrál nulový kvôli integrovaniu cez uhol φ . Múdrejšie znejúca reformulácia tohto „výberového pravidla“ vychádza z tvrdenia:

Ak porucha \mathbf{H}' komutuje s operátorom L_z , potom výraz

$$\langle nlm | \mathbf{H}' | n'l'm' \rangle$$

je nenulový len pre $m = m'$. Dôkaz je jednoduchý. Obložíme výraz

$$0 = [\mathbf{H}', L_z]$$

príslušnými stavmi a máme

$$0 = \langle nlm | \mathbf{H}' L_z - L_z \mathbf{H}' | n'l'm' \rangle = (m' - m) \langle nlm | \mathbf{H}' | n'l'm' \rangle$$

Pre $m \neq m'$ musí byť maticový element nulový. Takto vidíme, že nenulovými elementmi v *tab. 12.1* sú skutočne len tie, ktoré môžu byť nenulové na základe uvedených „výberových“ pravidiel. Hodnotu jediného nenulového maticového elementu treba nájsť priamym dosadením vlnových funkcií atómu vodíka do (1).

Podľa všeobecnej schémy poruchovej metódy pre degenerované hladiny preberanej v článku 6.4 potrebujeme už len nájsť lineárne kombinácie vlnových funkcií, ktoré diagonalizujú maticu danú *tab. 12.1*. Jednoducho sa presvedčíme o tom, že hľadanými kombináciami sú

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{210} + \psi_{200}), \quad \Delta E = -3a_1 e E \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{210} - \psi_{200}), \quad \Delta E = +3a_1 e E \end{aligned} \quad (3)$$

$$\psi_{211}, \quad \Delta E = 0$$

$$\psi_{21-1}, \quad \Delta E = 0$$

Tým je problém v prvom ráde poruchovej metódy pre hladinu $s n = 2$ vyriešený.

Teraz naznačíme schému výpočtu pre kvadratický Starkov jav v atóme vodíka v základnom stave. Výpočet neurobíme až do konca, uvedieme iba základnú myšlienku postupu, ktorá je skutočne pekná²⁰².

Pre zmenu energie základného stavu atómu vodíka v druhom ráde poruchovej metódy platí

$$\delta U_0 = \sum_k \frac{H'_{0k} H'_{k0}}{E_0 - E_k} \quad (4)$$

kde indexom 0 označujeme základný stav a sčítujeme cez všetky $k \neq 0$. V Diracovej symbolike $H'_{k0} \equiv \langle k | \mathbf{H}' | 0 \rangle$ a stavy $|k\rangle$ sú vlastnými stavmi neporušeného operátora \mathbf{H}_0 , s vlastnými hodnotami E_k .

²⁰² Metóda bola navrhnutá v knihe Kotani, M.: Quantum Mechanics. Tokyo 1951 a je prebraná v 2. vydání učebnice L. Schiffa [8]. Rozpracovanie metódy bolo uverejnené v prácach Dalgarno, A. – Lewis, T. T.: Proc. Roy. Soc., A 233, 1955, s. 70, Schwartz, C: Ann Phys., 6, 1959, s. 156.

V tejto symbolike predchádzajúca rovnica nadobudne tvar

$$\delta U_0 = \sum_k' \frac{\langle 0|H'|k\rangle\langle k|H'|0\rangle}{E_0 - E_k} \quad (5)$$

Predpokladajme, že sa nám nejako podarí – a v tom je vtip tohto prístupu – nájsť operátor F , pre ktorý platí

$$[F, H_0]|0\rangle = H'|0\rangle$$

Potom

$$\langle k|H'|0\rangle = \langle k|[F, H_0]|0\rangle = (E_0 - E_k)\langle k|F|0\rangle$$

Ak toto dosadíme do (5), zbavíme sa menovateľov a máme

$$\delta U_0 = \sum_k' \langle 0|H'|k\rangle\langle k|F|0\rangle \quad (6)$$

Využijeme teraz známy vzťah

$$1 = \sum_k |k\rangle\langle k| = \sum_k' |k\rangle\langle k| + |0\rangle\langle 0|$$

a z rovnice (6) dostaneme

$$\delta U_0 = \langle 0|H'F|0\rangle - \langle 0|H'|0\rangle\langle 0|F|0\rangle \quad (7)$$

Rovnica (7) je vhodná na numerické alebo analytické výpočty, pretože namiesto nekonečného súčtu v (5) stačí nájsť tri maticové elementy.

Celá vec závisí od toho, či sa podarí nájsť operátor F s požadovanou vlastnosťou. V uvažovanom prípade ho možno nájsť dosť jednoducho (pozri citovanú literatúru), ale nebudeme sa tu s touto otázkou zaoberať a uvedieme iba výsledok

$$F = -\frac{eEma_1}{2\hbar}(r^2 + 2a_1r)\cos\vartheta$$

Po dosadení do (7) a vykonaní príslušných integrácií dostaneme

$$\delta U_0 = -\frac{1}{2}\alpha E^2 \quad (8)$$

kde

$$\alpha = \frac{9}{2}4\pi\epsilon_0 a_1^3$$

Výsledok má očakávaný tvar, ako vidno porovnaním s rovnicami (15) a (16) predchádzajúceho článku.

12.4 KVALITATÍVNA DISKUSIA SPINOVO-ORBITÁLNEJ VÄZBY

Pri diskusii atómu vodíka v článku 11.4 sme brali do úvahy iba elektrostatickú interakciu protónu a elektrónu. V atóme vodíka sú však i ďalšie interakcie, ktoré pri podrobnejšom štúdiu spektrálnych čiar treba vziať do úvahy. Jednou z nich je spinovo-orbitálna väzba, označovaná tiež ako väzba *LS*. Názorne si túto interakciu môžeme predstaviť nasledovne: Ak sa elektrón pohybuje okolo jadra má istý orbitálny moment hybnosti. Pretože je nabitou časticou, zodpovedá tomuto pohybu aj istý magnetický moment daný výrazom $-eL/2m$. Tento magnetický moment budí magnetické pole, ktoré interaguje so spinovým magnetickým momentom elektrónu.

Pri hrubom kvalitatívnom odhade veľkosti tejto interakcie si môžeme predstaviť vzájomné pôsobenie dvoch magnetických momentov $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$, pričom ich veľkosti sú približne

$$\mathbf{M}_i \sim \frac{e\hbar}{2m} \quad (1)$$

kde m je hmotnosť elektrónu a ich vzdialenosť je rádovo rovná Bohrovmu polomeru a_1 . Podľa teórie

EM poľa je energia ich interakcie daná rádové výrazom²⁰³

$$\delta U \sim \frac{\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2}{a_1^3} \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} \quad (2)$$

kde μ_0 je permeabilita vákuu. Ak za $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$ dosadíme z (1) do (2) a použijeme vzťah $\mu_0 \epsilon_0 = c^{-2}$, dostaneme

$$\delta U \sim \left(\frac{e\hbar}{2m} \right)^2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_1^3} \frac{1}{c^2} \quad (3)$$

Elementárnou úpravou dostaneme

$$\delta U \sim \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{a_1^2 c^2} \left[\frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 a_1} \right] = \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{a_1^2 c^2} |E_1| \quad (4)$$

kde $|E_1| = 13,6 \text{ eV}$ je absolútna hodnota väzbovej energie v základnom stave atómu vodíka.

Do (4) teraz dosadíme vyjadrenie Bohrovho polomeru v tvare

$$a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

a máme

$$\delta U \sim \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 |E_1| = \frac{1}{2} \alpha^2 |E_1| \quad (5)$$

kde $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c) \approx 1/137$ je konštanta bez rozmeru, nazývaná konštantou jemnej štruktúry.

Vidíme teda, že zahrnutie spinovo-orbitálnej väzby do hamiltoniánu vedie k tomu, že energetické hladiny v atóme vodíka budú posunuté rádové o 10^{-4} eV oproti hladinám, ktoré by zodpovedali čisto coulombovskej interakcii protónu a elektrónu. Uvidíme, že hladiny, ktoré „v coulombovskom modeli“ boli degenerované sa pritom „rozštiepia“, čo sa v spektre prejaví ako jemná štruktúra spektrálnych čiar so štruktúrou na úrovni 0,1 nm (čiara, javiaca sa pri hrubšom pozorovaní ako jednoduchá, je zložená z niekoľkých tesne pri sebe ležiacich čiar).

Na výraz (3) sa môžeme pozerat' aj ako na energiu interakcie spinového magnetického momentu s vnútorným poľom v atóme. Pre toto vnútorné pole potom máme (v označení $\delta U \sim \left(\frac{e\hbar}{2m} \right) \cdot B_{\text{int}}$)

$$B_{\text{int}} \sim \frac{e\hbar}{2m} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{a_1^3} \quad (6)$$

Po dosadení jednotlivých veličín (pozri koniec kap. 1) dostaneme²⁰⁴

$$B_{\text{int}} \sim 6 \text{ T} \quad (7)$$

pričom odhad treba považovať iba za veľmi približný. Vidno z neho ale dôležitý záver: Ak chceme sledovať správanie sa atómu vo vonkajších poliach, ktoré nie sú podstatne väčšie ako B_{int} , musíme zároveň uvažovať spinovo-orbitálnu väzbu.

²⁰³ V klasickej teórii EM póla je interakcia dvoch bodových magnetických dipólov s magnetickými momentmi $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$ daná vzťahom

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{r^3} - \frac{(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} \right]$$

Nemôžeme očakávať, že v kvantovej mechanike pre interakciu spinového a orbitálneho momentu hybnosti bude platiť rovnaký vzťah, lebo orbitálny moment určite nezodpovedá bodovému dipólu, ale z rozmerových dôvodov bude aj v kvantovej mechanike pre rádové odhady vhodný výraz (2).

²⁰⁴ V jednotkách SI máme: $(e\hbar/2m) = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ JT}^{-1}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ kg.m.C}^{-2}$, $a_1 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

V nasledujúcom článku ešte ukážeme, že rádové rovnakú veľkosť ako väzba LS majú aj relativistické korekcie na pohyb elektrónu.

Kvôli úplnosti sa napokon zmienime o interakcii magnetického momentu jadra s magnetickým momentom elektrónu.

Rádový odhad energie interakcie je opäť daný vzťahom (2), ale jeden z magnetických momentov \mathbf{M}_i už bude magnetickým momentom jadra, ktorý má typickú veľkosť rádovo $(e\hbar/2m_j)$, kde m_j je hmotnosť jadra – v našom prípade protónu. Úpravami, ako v predchádzajúcom, pridáme k výsledku

$$\delta U_{\text{HF}} \sim \frac{1}{2} \alpha^2 |E_1| \frac{m_e}{m_j} \quad (8)$$

Korekcie k energetickým hladinám spôsobené touto interakciou nazývame *hyperjemnou štruktúrou*. Z porovnania (8) a (5) vidno, že hyperjemná štruktúra je faktorom $(m_e/m_j) \sim 10^{-3}$ jemnejšia ako jemná štruktúra.

12.5 SPINOVO-ORBITÁLNA VÄZBA A RELATIVISTICKÉ KOREKcie

Korektný postup ako odvodiť časť hamiltoniánu príslušnú k spinovo-orbitálnej väzbe je vyjsť z relativistickej Diracovej rovnice a urobiť v nej nerelativistické priblíženia.

S Diracovou rovnicou sa ale v tejto učebnici nestretáme, a preto napíšeme priamo výsledok a ukážeme, že odpovedá kvalitatívnym predstavám z predchádzajúceho článku. Pre elektrón v atóme vodíka je spinovo-orbitálna interakcia charakterizovaná hamiltoniánom

$$H'_{SL} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (1)$$

Tento výraz môžeme prepísať aj nasledovne

$$H'_{SL} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} \left(\frac{e}{m} \hat{\mathbf{s}} \right) \cdot \left(\frac{e\hat{\mathbf{L}}}{2m} \right) \quad (2)$$

pričom sme využili identitu $\epsilon_0\mu_0 = c^{-2}$ a usporiadali sme členy tak, aby sa v okrúhlych zátvorkách objavili práve magnetické momenty spojené so spinovým a orbitálnym magnetickým momentom elektrónu. Výraz (2) je ale práve to, čo sme použili v rovnici (4.2) v predchádzajúcom článku, iba namiesto strednej vzdialenosti, ktorú sme tam odhadli na a_1 , píšeme premennú vzdialenosť r . Poznamenajme však, že samotný tvar skalárneho súčinu v (2) ani znamienko, ktoré pred ním stojí, nevyplývajú z kvalitatívnej diskusie v článku 12.4, ale ich obdržíme z nerelativistickej limity Diracovej rovnice²⁰⁵.

Ďalší príspevok k jemnej štruktúre pochádza z korekcie na relativistický charakter pohybu elektrónu.

V teórii relativity je kinetická energia častice s hmotnosťou m a hybnosťou \mathbf{p} daná vzťahom

$$E_{\text{kin}}^{(R)} = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} - mc^2$$

pre $\mathbf{p}^2 \ll m^2c^2$ približne platí

$$E_{\text{kin}}^{(R)} \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m^3c^2} = E_{\text{kin}}^{(NR)} - \frac{1}{mc^2} (E_{\text{kin}}^{(NR)})^2$$

kde $E_{\text{kin}}^{(R)}$ a $E_{\text{kin}}^{(NR)}$ označuje relativistický, resp. nerelativistický výraz pre kinetickú energiu. V druhom korekčnom člene možno pre elektrón s celkovou nerelativistickou energiou E v elektrostatickom poli

²⁰⁵ Správny výraz možno dostať aj pomocou podrobnejších intuitívnych úvah, pri ktorých prejdeme do pokojovej sústavy klasického elektrónu pohybujúceho sa v klasickom analógii atómu vodíka a nájdeme magnetické pole pôsobiace na spinový magnetický moment. Náčrt odvodu je napr. v predchádzajúcom vydaní tejto učebnice. Zdá sa nám ale, že takéto odvodenie nie je veľmi poučné, a preto ho neuvádzame.

s potenciálom $\varphi(r)$ použiť vzťah $E = E_{\text{kin}}^{(\text{NR})} - e\varphi(r)$. Korekciu k hamiltoniánu danú posledným členom v (3) možno potom zapísať ako

$$H'_{\text{rel}} = -\frac{(E + e\varphi(r))^2}{2mc^2}$$

Pravdu povediac, ani toto odvodenie nie je veľmi presvedčivé, ale aj tento člen možno korektne získať z Diracovej rovnice.

12.6 JEMNÁ ŠTRUKTÚRA SPEKTRÁLNYCH ČIAR

Základom pre výpočet korekcií jemnej štruktúry k energetickým hladinám je hamiltonián H' , uvedený v predchádzajúcom článku. Ak zoberieme do úvahy spinovo-orbitálnu väzbu (5.1) a relativistickú korekciu (5.4), máme

$$H = H_0 + H' = H_0 + H'_{SL} + H'_{\text{rel}} \quad (1)$$

kde

$$H'_{SL} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (2)$$

$$H'_{\text{rel}} = -\frac{1}{2mc^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]^2 \quad (3)$$

V tejto časti sa budeme zaoberať zmenou energetických hladín atómu vodíka spôsobenou poruchami (2) a (3). Podrobné výpočty nebudeme vykonávať – iba naznačíme postup riešenia a uvedieme konečné výsledky.

Začneme so spinovo-orbitálnou väzbu. Vlnové funkcie vodíkového atómu, zodpovedajúce neporušenému hamiltoniánu H_0 , možno v súradnicovej reprezentácii písať ako

$$\langle \mathbf{r} | n l m s_z \rangle = \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \chi(s_z) \quad (4)$$

kde $\chi(s_z)$ je spinová vlnová funkcia. Budeme používať označenie $\chi(+)$, $\chi(-)$, pričom prvá z nich odpovedá vlastnej hodnote operátora \mathbf{s}_z rovnaj $\hbar/2$ a druhá vlastnej hodnote $-\hbar/2$.

Vlnové funkcie (4) ale nie sú vhodnou bázou pre začiatok použitia poruchovej metódy v našom prípade. Dôvod je v tom, že operátor $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ nekomutuje ani s \mathbf{s}_z , ani s \mathbf{L}_z a vlnové funkcie (4), ktoré sú vlastnými funkciami \mathbf{s}_z a \mathbf{L}_z nedagonalizujú poruchu.

Správne vlnové funkcie pre tento degenerovaný prípad uhádneme hneď, ak si všimneme, že platí

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \hat{\mathbf{s}})^2 = \mathbf{L}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

a odtiaľ

$$\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2) \quad (5)$$

Rýchlo sa dá ukázať, že operátor $\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ komutuje s operátormi

$$\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \hat{\mathbf{s}}^2 \quad (6)$$

kde \mathbf{J}^2 je operátor druhej mocniny celkového momentu hybnosti a J_z je priemet celkového momentu hybnosti na os z . Vlastné hodnoty \mathbf{J}^2 sú $\hbar^2 J(J+1)$, kde pri danom l môže J nadobúdať iba dve hodnoty $J = l \pm 1/2$. Vlastné hodnoty J_z budeme označovať symbolom M .

Vlastné funkcie H_0 , ktoré sú súčasne vlastnými funkciami štvorice komutujúcich operátorov, budeme označovať ako

$$|n, J, M, l\rangle \quad (7)$$

kde prvý index označuje hlavné kvantové číslo, druhý vlastnú hodnotu operátora \mathbf{J}^2 tretí vlastnú hodnotu J_z a štvrtý vlastnú hodnotu \mathbf{L}^2 . Orbitálna časť týchto vlnových funkcií je (v súradnicovej

reprezentácii) rovná $R_{nl}(r)$. Pomocou (5) okamžite nájdeme

$$\hat{L} \cdot \hat{s} |n, J, M, l\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)] |n, J, M, l\rangle$$

a to je všetko, čo vlastne potrebujeme na výpočet maticových elementov poruchy H'_{SL} , i poruchy H'_{rel} . Prirodzene, je ešte treba integrály z radiálnych vlnových funkcií násobených faktorom r^{-1} v (2) a faktormi r^{-1} resp. r^{-2} , ktoré sú prítomné vo výraze (3). Výpočet tu nebudeme podrobne uvádzať, konečný tvar pre energiu hladiny s daným n, J, l je

$$E(n, J, l) = -\frac{|E_1|}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8)$$

kde $|E_1| = 13,6$ eV je energia základného stavu atómu vodíka, a $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ je konštanta jemnej štruktúry. Výraz $-|E_1|/n^2$ je energiou danej hladiny bez započítania poruchy a druhý člen v hranatej zátvorke násobený faktorom stojacim pred zátvorkou je rovný príspevku od poruchy. Podstatnou črtou výsledku (8) je nezávislosť energie od kvantového čísla l .

Pri danej hodnote hlavného kvantového čísla n môže l nadobúdať hodnoty $0, 1, \dots, n-1$ a kvantové číslo J prechádza hodnotami $1/2, 3/2, \dots, n-1/2$. Degenerovaná hladina s hlavným kvantovým číslom n sa rozštiepi na n hladín s hodnotami $J = 1/2, 3/2, \dots, n-1/2$. Tieto hladiny budú ešte stále viacnásobne degenerované, jednak preto, že každú hodnotu J možno dostať zo stavu $s = l - 1/2$ alebo zo stavu $s = l + 1/2$ (a stavy $s = l$ lišiacim sa o jednotku majú opačnú paritu) a jednak preto, že každá hladina s daným J je $(2J+1)$ -krát degenerovaná podľa rôznych hodnôt priemetu celkového momentu hybnosti M na os z . Hladiny atómu vodíka sa najčastejšie označujú stručne tak, že namiesto danej hodnoty l používame písmeno podľa predpisu

$l:$	0	1	2	3	4	5
Symbol:	S	P	D	F	G	H

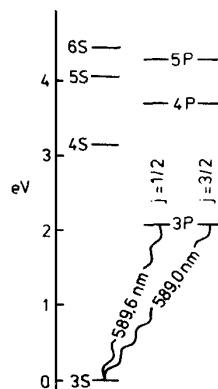
19

Hlavné kvantové číslo píšeme dopredu a J pripojíme ako index vpravo dolu. Napríklad $2P_{1/2}$ označuje stav $n=2, l=1, J=1/2$.

Veľkosť rozštiepenia hladiny v efektoch jemnej štruktúry možno posúdiť z nasledujúceho príkladu. Degenerovaná hladina s $n=2$ má bez zahrnutia spinovo-orbitálnej väzby a relativistických korekcií energiu $E_2 = -3,40$ eV a rozdiel medzi E_2 a E_1 je $E_2 - E_1 \sim 10,21$ eV.

Podľa (8) sa hladina $n=2$ rozštiepi na dve hladiny s $J=1/2$ a $J=3/2$ a rozdiel ich energií bude

$$E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) = \frac{\alpha^2}{8} \left(1 - \frac{1}{2} \right) |E_1| \approx \frac{1}{3} 10^{-5} |E_1| \approx 4,53 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$



Obr. 12.2

Ak použijeme približný vzťah $eV/\hbar \approx 1,5 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, dostaneme kruhovú frekvenciu príslušnú k tomuto prechodu $\omega \approx 6,9 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ a obyčajnú frekvenciu $\nu \approx 1,1 \cdot 10^4 \text{ MHz}$. Dĺžka elektromagnetickej vlny s takouto frekvenciou je približne 2,7 cm.

Rozštiepenie spektrálnych čiar spinovo-orbitálnou väzbou zohralo dôležitú úlohu pri „objave“ spinu elektrónu.

Známy príklad uvádzaný v tomto kontexte je „sodíkový dublet“. Za žlté svetlo sodíka je „zodpovedný“ prechod valenčného elektrónu z hladiny $3P$ na hladinu²⁰⁶ $3S$. Hladina $3P$ je ale rozštiepená spinovo-orbitálnou väzbou na hladiny $3P_{3/2}$ a $3P_{1/2}$. Preto príslušná „spektrálna čiara“ je dubletom s vlnovými dĺžkami $\lambda_1 = 589,0$ nm a $\lambda_2 = 589,6$ nm (pozri obr. 12.2).

12.7 ZEEMANOV JAV

Ak sa atóm vodíka nachádza vo vonkajšom magnetickom poli, potom hamiltonián príslušný k tomuto problému bude mať tvar:

$$H = H_0 + H'_1 + H'_2 \quad (1)$$

kde H_0 je „neporušený“ hamiltonián zodpovedajúci kinetickej energii a coulombovskej interakcii,

$$H'_1 = \frac{e}{2m} B(L_z + 2S_z) \quad (2)$$

je podľa (8.3.7) hamiltonián interakcie s vonkajším poľom a

$$H'_2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{2mc^2} \left[E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \quad (3)$$

zodpovedá spinovo-orbitálnej interakcii a relativistickým korekciám ku kinetickej energii. Z fyzikálneho hľadiska H'_1 predstavuje vonkajšiu poruchu, H'_2 má „vnútorné príčiny“. Z hľadiska metodiky riešenia budeme však za „neporušený“ hamiltonián brať H_0 a $H'_1 + H'_2$ budeme chápať ako poruchu.

Aby sme zjednodušili zápis nasledujúcich formuliek prepíšeme v zrejmom označení jednotlivé členy ešte raz

$$H'_1 = a(L_z + 2S_z) \quad (4)$$

$$H'_2 = b\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{J} + c \quad (5)$$

kde a je konštanta a $b = b(r)$, $c = c(r)$ závisia len od absolútnej hodnoty polohového vektora.

Hladina s daným kvantovým číslom n je degenerovaná, a preto pri výpočte musíme používať poruchovú metódu pre degenerované stavy. Prvou otázkou, ktorú treba rozhodnúť, je výber reprezentácie vlnových funkcií, ktorú budeme používať a predtým si treba všimnúť, aké operátory komutujú s H . Vzhľadom na to, že uvažujeme len jednu degenerovanú hladinu s daným hlavným kvantovým číslom n , budeme uvažovať len takéto funkcie a číslo n nebudeme explicitne vypisovať. Operátor H'_2 , daný v (5), určite komutuje so súborom operátorov

$$\mathbf{L}^2, \hat{\mathbf{s}}^2, \mathbf{J}^2, J_z \quad (6)$$

ako sme sa o tom presvedčili už v predchádzajúcom článku. Operátor H'_2 ale nekomutuje ani s L_z ani s priemtom spinu S_z .

Vlnové funkcie, v ktorých je operátor H'_2 diagonálny, sú teda vlastnými funkciami štvorice operátorov (6) a tieto funkcie dostaneme štandardným spôsobom pomocou Clebschových-Gordanových koeficientov. Symboly pre vlastné hodnoty L^2 , S^2 nebudeme vypisovať a vlnové funkcie budeme označovať ako $|J, M\rangle$.

Pomocou CG koeficientov máme

$$|JM\rangle = \sum_{m_l+m_s=M} C(JM|l, m_l, s, m_s) Y_{lm_l} \chi_{m_s} \quad (7)$$

kde Y_{lm_l} je guľová funkcia s danými kvantovými číslami, χ označuje spinovú vlnovú funkciu a m_s je priem spinu na os z . V skutočnosti na pravej strane (7) máme vždy len dva členy, pretože m_s môže nadobúdať iba hodnoty $1/2$ alebo $-1/2$.

²⁰⁶ Elektróny na vnútorných hladinách spôsobujú, že valenčný elektrón sa nepohybuje v čisto coulombovskom poli. Hladiny s rovnakým hlavným, ale rôznym orbitálnym kvantovým číslom preto nie sú degenerované.

Príslušné CG koeficienty sú dobre známe a stretli sme sa s nimi už v kapitole 11. Pretože ich budeme potrebovať v ďalšom, vypíšeme ich tu explicitne. Pri danom l môže J nadobúdať iba dve hodnoty, a to $J = l + 1/2$ alebo $J = l - 1/2$. Pre ne máme (článok 11,4 Tabuľka 1)

$$|l + 1/2, M\rangle = \sqrt{\frac{l + M + 1/2}{2l + 1}} Y_{lM-1/2} \chi_{1/2} + \sqrt{\frac{l - M + 1/2}{2l + 1}} Y_{lM+1/2} \chi_{-1/2}$$

$$|l - 1/2, M\rangle = -\sqrt{\frac{l - M + 1/2}{2l + 1}} Y_{lM-1/2} \chi_{1/2} - \sqrt{\frac{l + M + 1/2}{2l + 1}} Y_{lM+1/2} \chi_{-1/2}$$
(8)

Teraz prejdeme k členu H'_1 . Problém s ním je v tom, že tento člen nekomutuje s J^2 . Je to tým, že $(L_z + 2S_z)$ môžeme písať ako $J_z + S_z$, pričom J_z samozrejme komutuje s J^2 , ale S_z s J^2 nekomutuje. Vidno to najrýchlejšie zo zápisu $J^2 = L^2 + S^2 + 2\hat{s} \cdot \hat{L}$, kde práve člen $\hat{s} \cdot \hat{L}$ nekomutuje s operátorom S_z . Pre operátor H'_1 je vhodnou sústavou komutujúcich operátorov štvorica

$$L^2, S^2, L_z, S_z$$
(9)

Teraz vidno, že už na začiatku sme sa mohli rozhodnúť prirodzene pre dve bázy. Prvou je báza daná operátormi (6) a v nej je diagonálne H'_2 , druhou je báza daná operátormi (9) a v nej je diagonálne H'_1 . V oboch bázach dospejeme k rovnakému výsledku. Pre nás je výhodnejšia báza, v ktorej je diagonálna spinovo-orbitálna väzba, lebo príslušné maticové elementy máme už uvedené v predchádzajúcom článku. Teraz teda ideme v báze (8) spočítať maticové elementy operátora H'_1 . Budeme pritom podstatne využívať to, že funkcie vystupujúce na pravej strane v (8) sú vlastnými funkciami operátora H'_1 . Postupne dostaneme

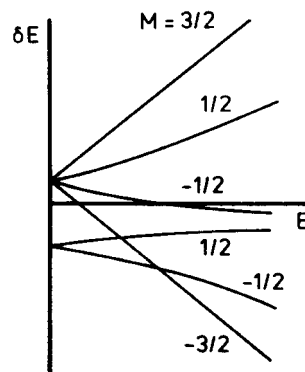
$$(H'_1)_{ik} = \frac{a\hbar}{2l+1} \begin{pmatrix} 2(l+1)M & -\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - M^2} \\ -\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - M^2} & 2lm \end{pmatrix}$$
(10)

Indexy i, k tu nadobúdajú dve hodnoty, z nich prvá hodnota zodpovedá stavu $|l + 1/2, M\rangle$ a druhá stavu $|l - 1/2, M\rangle$. Koeficient vystupujúci v (10) je podľa (4) a (2) daný vzťahom

$$a = \frac{eB}{2m}$$
(11)

Matica odpovedajúca H'_2 bola už vlastne uvedená v predchádzajúcom článku. Ak totiž z rovnice (6.8) odtrhneme hodnotu neporušenej energie, ostáva nám práve príspevok za spinovo-orbitálnu väzbu a relativistické korekcie. Do (6.8) iba potrebujeme raz dosadiť $J = l + 1/2$ a raz $J = l - 1/2$. Takto máme

$$(H'_2)_{ik} = -\frac{\alpha^2 2|E_1|}{n^3} \begin{pmatrix} \frac{1}{l+1} - \frac{3}{4n} & 0 \\ 0 & \frac{1}{l} - \frac{3}{4n} \end{pmatrix}$$
(12)



Obr. 12.3

Teraz už potrebujeme iba spojiť oba výsledky a zostrojiť maticu H' . Korekcie k jednotlivým energetickým hladinám nájdeme riešením kvadratickej rovnice

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - \delta E & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} - \delta E \end{vmatrix} = 0 \quad (13)$$

Výpočet nebudeme vykonávať explicitne, uspokojíme sa s tým, že na *obr. 12.3* ukážeme veľmi schematicky závislosť rozštiepenia hladín $2p$ stavu v atóme vodíka (t. j. $n = 2$, $l = 1$ stavu) od intenzity vonkajšieho poľa.

Zdôraznime ešte to, že rozštiepené hladiny majú ako dobré kvantové čísla iba tie, ktoré sú vlastnými hodnotami operátorov vystupujúcich aj v súbore (6) aj v súbore (9). Sú to len hodnoty²⁰⁷ (l , M) príslušné k operátorom L^2 , J_z . V tomto zmysle je *obr. 12.3* trochu klamný. Mohlo by sa zdať, že krivky naznačujúce závislosť energie rozštiepených hladín od B majú stále tie kvantové čísla, z ktorých vychádzajú pri $B = 0$. To ale nie je pravda, kvantové číslo J je dobré iba v limite $B \rightarrow 0$

Pre malé vonkajšie polia B sú ale vlnové funkcie rozštiepených hladín približne rovné dvom vlnovým funkciám v (8)

12.8 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Odhadnite radové intenzitu magnetického poľa potrebnú na to, aby spiny elektrónov v atóme hélia mali rovnaký smer. Podľa Pauliho princípu na to treba prehodil jeden z $1s$ elektrónov do stavu s $n = 2$.
2. Lineárny harmonický oscilátor je vo vonkajšom homogénnom elektrostatickom poli s intenzitou \mathbf{E} v smere, v ktorom oscilátor kmitá. Aká bude korekcia k energii n -tého stacionárneho stavu v prvom ráde poruchovej teórie (lineárny Starkov jav)?
3. Nájdite polarizovateľnosť lineárneho harmonického oscilátora v n -tom stacionárnom stave (kvadratický Starkov jav)! Riešte poruchovo a porovnajte s presným riešením. Pripomenka: Kreačný a anihilačný operátor je daný vzťahmi (článok 10.6)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} i(a^\dagger - a)$$

4. Urobte predbežnú diskusiu výpočtu lineárneho Starkovho javu v $n = 3$ stave atómu vodíka – zostrojte analóg tabuľky 12.1 a zistite, ktoré maticové elementy budú nenulové.
5. Mame sústavu skladajúcu sa z dvoch častíc so spinom $1/2$, príslušne operátory spinov sú $\mathbf{s}_1 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$, $\mathbf{s}_2 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$. Ukážte, že pre operátor celkového spinu $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$ platí

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{2} (3 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$$

pričom v singletnom stave je $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -3$ a v tripletnom $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 1$.

6. Základný stav atómu vodíka je rozštiepený v dôsledku interakcie magnetického momentu jadra s magnetickým momentom elektrónu (hyperjemná štruktúra). Ukážte na základe kvalitatívnej analýzy že poruchový hamiltonián v spinovom priestore (t. j. po preintegrovani cez priestorové premenné v príslušnom maticovom elemente) možno vyjadriť v tvare

$$H = C \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_2}{a_1^3}$$

kde a_1 je Bohrov polomer a C je bezrozmerná konštanta. Odhadnite rozdiel energie hladín, na ktoré sa základný stav rozštiepi a určte vlnovú dĺžku elektromagnetického žiarenia emitovaného alebo absorbovaného pri takomto prechode.

Poznámka: Táto čiara s $\lambda = 21$ cm je veľmi dôležitá v astrofyzike. Prečítajte si o tom niečo napr. vo Feynmanových prednáškach o fyzike [17].

7. Odhadnite veľkosť efektu hyperjemnej štruktúry v základnom stave pozitronia.
8. Atóm vodíka v základnom stave sa nachádza vo vonkajšom magnetickom poli. Uvedte dôvody pre to, že hamiltonián v spinovom priestore môžeme písať v tvare

$$H = A + D\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p - \boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B}$$

kde index e odpovedá elektrónu a index p protónu. Nájdite fyzikálnu interpretáciu jednotlivých členov, odhadnite ich rádové veľkosti pri vonkajšom poli $B = 1$ T a nájdite vlastné stavy a vlastné hodnoty energie.

²⁰⁷ Operátor J_z síce nevystupuje v súbore (9), ale je súčtom $L_z + S_z$, pričom L_z aj S_z v (9) vystupujú.

13 SYMETRIE A ZÁKONY ZACHOVANIA

13.1 TRANSFORMÁCIE A SYMETRIE

V tejto kapitole zovšeobecníme formalizmus, ktorým sme v 11. kapitole opisovali rotácie fyzikálnej sústavy na prípad všeobecných transformácií. Pod transformáciou stavu sústavy si budeme, podobne ako pri rotáciách, predstavovať príslušnú transformáciu (napr. posunutie, otočenie, zrkadlové prevrátenie, ...) prístroja „pripravujúceho uvažovaný stav“. Takejto transformácii stavu je priradený istý operátor²⁰⁸ U . Stav $|\varphi'\rangle$ pripravený transformovaným prístrojom vyjadríme pomocou pôvodného stavu $|\varphi\rangle$ nasledovne

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle \quad (1)$$

Veličina $\langle\psi|\varphi\rangle$ je amplitúdou pravdepodobnosti toho, že v stave $|\varphi\rangle$ nájdeme stav $|\psi\rangle$. Ak žiadame, aby sa táto veličina pri transformácii nemenila, prideme prirodzene k opisu transformácií pomocou unitárnych operátorov.

Operátor U budeme nazývať *unitárnym*, ak je lineárny a ak preň platí

$$U^+U = UU^+ = \mathbf{1} \quad (2)$$

Ak sa stavy $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ transformujú podľa

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle, \quad |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$

potom pre ne zrejme platí

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|U^+U|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle \quad (3)$$

a ako špeciálny prípad aj

$$\langle\varphi'|\varphi'\rangle = \langle\varphi|\varphi\rangle \quad (4)$$

čo hovorí, že norma stavu sa nemení pri transformácii. Súčasná transformácia všetkých stavov sústavy pomocou unitárneho operátora teda nemení skalárne súčiny stavových vektorov.

Predpokladajme teraz, v analógii s prípadom rotácií, že uvažovaná transformácia stavov sústavy je opísaná unitárnym operátorom U a pozrime sa na fyzikálny význam vzťahu (3). Nech sú stavy $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ pripravené prístrojmi I, II. Stavy $|\varphi'\rangle, |\psi'\rangle$ sú pripravené transformovanými prístrojmi I', II'. Vzťah (3) potom hovorí, že amplitúda $\langle\psi|\varphi\rangle$ odpovedajúca pôvodným prístrojom pripravujúcim stavy sa nezmení ak na oboch prístrojoch I, II prevedieme uvažovanú transformáciu a prejdeme tým od pôvodných stavov k transformovaným²⁰⁹.

Operátor A' spojený s operátorom A transformáciou (1) definujeme vzťahom

$$A \rightarrow A' = UAU^+ \quad (5)$$

Pre takto definovaný operátor a dva ľubovoľné stavy zrejme platí

$$\langle\psi'|A'|\varphi'\rangle = \langle\psi|U^+UAU^+U|\varphi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle \quad (6)$$

Vzťah (6) hovorí, že maticový element typu $\langle\psi|A|\varphi\rangle$ sa nezmení, ak súčasne transformujeme stavy (t. j. prístroje, ktoré tieto stavy pripravujú) i prístroje, ktoré realizujú merania na týchto stavoch²¹⁰.

²⁰⁸ V tomto článku predpokladáme, že U je definovaný na celom Hilbertovom priestore stavov sústavy.

²⁰⁹ Striktne vzaté, ak uvažovaná transformácia nie je súčasne symetriou, nemáme fyzikálny dôvod žiadať, aby sa pri nej nemenili amplitúdy typu $\langle\psi|\varphi\rangle$. Z matematického hľadiska však vystačíme s požiadavkou, aby sa pri transformácii zachovávala norma $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ čo fyzikálne zodpovedá tomu, že normovanému stavu musí po transformácii zodpovedať opäť normovaný stav. Vo funkcionálnej analýze sa ukazuje, že lineárny operátor, ktorý zachováva normu (a je definovaný na celom Hilbertovom priestore) je unitárny, t. j. zachováva nielen normu, ale automaticky potom aj skalárny súčin.

²¹⁰ Porovnaj s diskusiou v článku 11.1.

Predchádzajúca diskusia nebola logicky celkom dôsledná. Opis transformácií pomocou unitárnych operátorov sme totiž motivovali tým, že pri transformáciách typu (1), (2) sa nemenia skalárne súčiny ako $\langle \psi | \varphi \rangle$. V skutočnosti sú však priamo merateľné nie amplitúdy, ale pravdepodobnosti, t. j. veličiny typu $|\langle \psi | \varphi \rangle|^2$. Pri skúmaní transformácií by sme sa teda mohli obmedziť na transformácie spĺňajúce pre ľubovoľné dva stavy sústavy nie podmienku

$$\langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle$$

ale slabšiu podmienku

$$|\langle \psi' | \varphi' \rangle|^2 = |\langle \psi | \varphi \rangle|^2 \quad (7)$$

Podľa Wignerovej vety, ktorú tu nebudeme dokazovať, transformácie (1) spĺňajúce slabšiu podmienku (7) sú dané (až na výber fáz stavov) buď unitárnymi, alebo antiunitárnymi operátormi. V praktických aplikáciách sa s antiunitárnymi operátormi stretávame iba pri časovej inverzii. Zatiaľ sa teda obmedzíme iba na transformácie stavov pomocou unitárnych operátorov.

Doteraz sme sa zaujímali o transformácie stavov v určitom okamihu t_0 . V kvantovej mechanike majú veľmi dôležitú úlohu tie transformácie, ktoré nemenia časový vývoj sústavy. Nazývame ich transformáciami symetrie, alebo stručnejšie, symetriami. Pri týchto transformáciách sa pôvodný stav $|\varphi\rangle$ a transformovaný stav $|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$ vyvíjajú v čase podľa rovnakej pohybovej rovnice. Túto formuláciu možno spresniť:

Transformáciu danú od času nezávislým unitárnym operátorom U nazývame symetriou ak (v Schrödingerovom obraze) platí schéma

$$\begin{array}{ccc} |\varphi(t_0)\rangle & \xrightarrow{U} & |\varphi'(t_0)\rangle \\ e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \downarrow & & \downarrow e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \\ |\varphi(t)\rangle & \xrightarrow{U} & |\varphi'(t)\rangle \end{array} \quad (8)$$

Fyzikálny obsah tejto schémy je nasledujúci. Ak zo stavu $|\varphi(t_0)\rangle$ prejdeme transformáciou U do stavu $|\varphi'(t_0)\rangle$ a stav $|\varphi'(t_0)\rangle$ necháme vyvíjať sa v čase podľa Schrödingerovej rovnice s hamiltoniánom H , dostaneme v čase t ten istý výsledný stav, ako keď necháme najprv stav $|\varphi(t_0)\rangle$ vyvíjať sa v čase a potom v čase t urobíme transformáciu U . Nájdeť teraz podmienku, ktorú musí spĺňať operátor U ak má byť uvažovaná transformácia symetriou. Podmienka daná schémou (8) zrejme hovorí:

$$e^{-iH(t-t_0)/\hbar} U |\varphi(t_0)\rangle = U e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\varphi(t_0)\rangle \quad (9)$$

pričom ľavá strana odpovedá postupu „doprava“ a „dolu“ podľa šípok v (8) a pravá postupu „dolu“ a potom „doprava“. Pretože žiadame splnenie (9) pre ľubovoľné $|\varphi(t_0)\rangle$ musia sa rovnať operátory stojace pred $|\varphi(t_0)\rangle$ na oboch stranách rovnice. Pre infinitezimálne $\Delta t = t - t_0$ však platí

$$\exp(-iH\Delta t/\hbar) \doteq 1 - iH\Delta t/\hbar$$

a z (9) dostávame podmienku

$$[1 - iH\Delta t/\hbar]U = U[1 - iH\Delta t/\hbar]$$

ktorá je ekvivalentná požiadavke

$$[H, U] = 0 \quad (10)$$

Ekvivalentné odvodenie podmienky (10) dostaneme nasledujúcim spôsobom. Nech $|\varphi(t)\rangle$ je riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = H|\varphi(t)\rangle \quad (11)$$

Násobením zľava operátorom U a vsunutím $U^\dagger U = 1$ na pravú stranu dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U|\varphi(t)\rangle = UH U^\dagger U|\varphi(t)\rangle \quad (12)$$

Výraz $U|\varphi(t)\rangle = |\varphi'(t)\rangle$ označuje transformovaný stavový vektor, ktorý podľa (12) spĺňa rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi'(t)\rangle = UHU^+ |\varphi'(t)\rangle \quad (13)$$

Ak žiadame – a to je len preformulovanie schémy (8) – aby $|\varphi'(t)\rangle$ spĺňalo tú istú SchR ako $|\varphi(t)\rangle$ dostaneme podmienku

$$H = UHU^+ \quad (14)$$

Po vynásobení (14) operátorom U sprava dostaneme ihneď podmienku (10).

Transformácia vyjadrená operátorom U je teda symetriou práve vtedy, ak operátor U komutuje s hamiltoniánom H , alebo – čo vidno zo zápisu (10) v tvare (14) – ak sa hamiltonián pri tejto transformácii nemení.

Vo funkcionálnej analýze sa dokazuje, že každý unitárny operátor U možno vyjadriť v tvare²¹¹

$$U = \exp(iA) \quad (15)$$

kde A je hermitovský operátor.

Ak U komutuje s H , potom bude s H komutovať aj A dané vzťahom (15), t. j.

$$[H, A] = 0 \quad (16)$$

Ak U je nezávislé od času, potom takým bude aj A . Hermitovský operátor A zodpovedá určitej fyzikálnej veličine. Pre jej strednú hodnotu v stave $|\psi(t)\rangle$ podľa článku 3.3.

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle \quad (17)$$

a podmienka (16) ukazuje, že \bar{A} sa s časom nemení. Hovoríme, že fyzikálna veličina A sa s časom zachováva, alebo že je integrálom pohybu.²¹²

Vidíme teda, že každá symetria sústavy implikuje istý zákon zachovania. To je jedna z príčin, pre ktoré je určenie symetrií určitej fyzikálnej sústavy zvlášť dôležité. Často totiž možno vyriešiť danú úlohu iba na základe zákonov zachovania, bez toho, že by sme skúmali podrobnosti dynamiky študovaného problému. V praxi sa nezriedka stáva, že symetrie sústavy sú známe aj vtedy, ak mechanizmus interakcie nepoznáme (vieme, že H komutuje s určitými operátormi, bez toho, že by sme poznali presný tvar H). Výsledky vyplývajúce priamo z existencie symetrií sú potom oveľa spoľahlivejšie ako ďalšie predpovede založené napríklad na modeloch dynamického správania sa sústavy.

13.2 GRUPY TRANSFORMÁCIÍ A ICH REPREZENTÁCIE

V tejto učebnici sme sa doteraz zaoberali podrobnejšie iba s transformáciami sústavy pri rotáciách. Tieto transformácie fyzici najčastejšie používajú a pri hľadaní iných transformácií ich používajú ako model, alebo východisko pre zovšeobecnenie. Jednou z dôležitých vlastností rotácií je to, že tvoria grupu, t. j. zložením dvoch rotácií dostaneme transformáciu, ktorú môžeme opísať jedinou rotáciou. Všetky transformácie, s ktorými sa v aplikáciách stretávame tvoria tiež grupy. V tomto článku si preto najprv pripomenieme základné vlastnosti grúp, potom zavedieme pojem reprezentácie grupy a napokon doplníme niektoré tvrdenia, ktoré v prvej časti článku zámerne neformulujeme v najvšeobecnejšom tvare.

Z matematického hľadiska množinu G nazývame grupou²¹³, ak pre každé dva jej prvky je definovaný ich súčin, ktorý je tiež prvkom G a platí:

1. pre všetky $a, b, c \in G$ je násobenie asociatívne, t. j.

$$(ab)c = a(bc)$$

²¹¹ Čitateľ si ľahko dokáže sám opačné tvrdenie: Ak A je hermitovský, potom U daný vzťahom (15) je unitárny.

²¹² Platí aj silnejšie tvrdenie (dôkaz prenecháme čitateľovi): Ak sa v čase t_0 sústava nachádza s pravdepodobnosťou $p_n = |\langle \xi_n | \psi(t_0) \rangle|^2$ $\langle \varphi | \psi \rangle$ vo vlastnom stave $|\xi_n\rangle$ operátora A : $A|\xi_n\rangle = A_n|\xi_n\rangle$, potom sa p_n s časom nemení. Pri dôkaze je vhodné najprv predpokladať nedegenerované spektra operátorov A, H zapísať $p_n(t) = \langle \xi_n | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \xi_n \rangle$ a pri skúmaní časovej derivácie $p_n(t)$ využiť to, že A, H majú spoločné vlastné vektory. Potom možno prejsť k overeniu všeobecného prípadu.

²¹³ Z teórie grúp existuje obsiahla literatúra. Z monografií orientovaných na aplikácie vo fyzike odporúčame napríklad Hammermeshovu knihu [21], alebo Barut, A. – Raczka, J. Theory of group representations and applications. PWN, Varšava 1977.

2. existuje jednotkový prvok $e \in G$ taký, že pre každé $a \in G$ platí

$$ea = ae = a$$

3. ku každému prvku $a \in G$ existuje inverzný prvok $a^{-1} \in G$ taký, že platí

$$aa^{-1} = a^{-1}a = e$$

Ako príklad možno uviesť grupu rotácií. Pod prvkom grupy chápeme maticu²¹⁴ typu 3×3 $\mathbf{R}(\mathbf{n}, \mathcal{G})_{ik}$; $i, k = 1, 2, 3$, kde \mathbf{n} je os rotácie a \mathcal{G} je uhol rotácie, pričom súradnice určitého bodu (x_1, x_2, x_3) sa pri rotácii transformujú podľa vzťahu

$$x_i \rightarrow x'_i = \mathbf{R}(\mathbf{n}, \mathcal{G})_{ik} x_k$$

a cez opakovaný index na pravej strane sčítujeme od 1 po 3. Pod zložením dvoch rotácií daných dvojicami $(\mathbf{n}_1, \mathcal{G}_1)$, $(\mathbf{n}_2, \mathcal{G}_2)$ chápeme transformáciu

$$x_i \rightarrow x''_i = \mathbf{R}(\mathbf{n}_2, \mathcal{G}_2)_{ik} \mathbf{R}(\mathbf{n}_1, \mathcal{G}_1)_{kn} x_n$$

Dá sa ukázať, že zloženie dvoch rotácií je možné vyjadriť ako jedinú rotáciu. Skladanie rotácií je vždy asociatívne, jednotkovým prvkom je identická transformácia a inverznou k danej rotácii $\mathbf{R}(\mathbf{n}, \mathcal{G})$ je rotácia okolo tej istej osi o rovnaký uhol v opačnom smere, t. j. rotácia $\mathbf{R}(\mathbf{n}, -\mathcal{G})$.

Ešte jednoduchším príkladom je grupa rotácií v rovine, napr. grupa rotácií okolo osi z. Predpokladáme, že čitateľ sa sám presvedčí o tom, že všetky tri už uvedené požiadavky sú v tomto prípade splnené.

Ak G je určitá grupa transformácií sústavy, potom každému jej prvku $g \in G$ je priradený určitý unitárny operátor $\mathbf{U}(g)$ a stavy sústavy sa transformujú podľa vzťahu

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = \mathbf{U}(g)|\varphi\rangle \quad (1)$$

Pri rotáciách je každý prvok g grupy rotácií daný napríklad trojicou Eulerových uhlov $g \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ a príslušný operátor $\mathbf{U}(g)$ má tvar

$$\mathbf{U}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha J_z) \exp(-i\beta J_y) \exp(-i\gamma J_z)$$

Zloženiu dvoch transformácií zodpovedá vynásobenie príslušných operátorov: ak prvku $g_1 \in G$ je priradený operátor $\mathbf{U}(g_1)$ a prvku $g_2 \in G$ operátor $\mathbf{U}(g_2)$, potom zloženej transformácii (najprv g_1 a potom g_2) odpovedá

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = \mathbf{U}(g_1)|\varphi\rangle$$

$$|\varphi'\rangle \rightarrow |\varphi''\rangle = \mathbf{U}(g_2)|\varphi'\rangle$$

teda

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi''\rangle = \mathbf{U}(g_2)\mathbf{U}(g_1)|\varphi\rangle \quad (2)$$

Súčinu $g_1 g_2$ odpovedá ale prvok $h \in G$, $h = g_2 g_1$ a tomuto je priradený unitárny operátor

$$\mathbf{U}(h) = \mathbf{U}(g_2 g_1) \quad (3)$$

Často sa stáva, že platí

$$\mathbf{U}(g_2 g_1) = \mathbf{U}(g_2)\mathbf{U}(g_1) \quad (4)$$

hoci fyzikálna interpretácia teórie pripúšťa aj všeobecnejší vzťah medzi $\mathbf{U}(g_2 g_1)$, $\mathbf{U}(g_2)$ a $\mathbf{U}(g_1)$. Zatiaľ budeme predpokladať platnosť (4) a k všeobecnému prípadu sa vrátíme až na konci článku.

Ak platí vzťah (4), potom množina operátorov $\mathbf{U}(g)$ priradených všetkým prvkom $g \in G$ tvorí tiež grupu, o ktorej hovoríme, že je reprezentáciou grupy G . Jednotkovému prvku $e \in G$ je priradený jednotkový operátor $\mathbf{U}(e) = \mathbf{1}$, a prvku g^{-1} je priradený operátor $\mathbf{U}^{-1}(g)$. Ak sa obmedzíme iba na situácie, keď všetky operátory $\mathbf{U}(g)$ sú unitárne, hovoríme o unitárnych reprezentáciách. V aplikáciách sa ale spravidla

²¹⁴ Rotáciu možno opísať buď osou rotácie \mathbf{n} a uhlom \mathcal{G} , alebo trojicou Eulerových uhlov α, β, γ . Predpokladáme, že čitateľ je už na základe kapitoly 11 spriatelený s obidvoma opismi.

stretávame iba s unitárnymi reprezentáciami a preto v ďalšom budeme pod reprezentáciou rozumiť iba unitárnu reprezentáciu.

Vo fyzike pojem reprezentácie chápeme obvykle v ešte užšom zmysle. Ak v Hilbertovom priestore stavov sústavy, v ktorom pôsobia operátory $\mathbf{U}(g)$ priradené prvkom grupy G zvolíme bázu $\{|\varphi_i\rangle\}$, potom sú operátorom \mathbf{U} priradené matice

$$\langle \varphi_i | \mathbf{U}(g) | \varphi_k \rangle \quad (5)$$

Ak operátory $\mathbf{U}(g)$ tvoria reprezentáciu grupy G , t. j. ak zobrazenie

$$g \rightarrow \mathbf{U}(g) \quad (6)$$

zachováva grupové vlastnosti; potom aj matice $U_{ik}(g)$ dané vzťahom (5) tvoria pri priradení

$$g \rightarrow U_{ik}(g) \quad (7)$$

reprezentáciu grupy G . Súčinu dvoch prvkov grupy G je priradený príslušný súčin matíc, t. j.

$$g_1 g_2 \rightarrow U_{is}(g_1) U_{sk}(g_2) \quad (8)$$

S reprezentáciou grupy pomocou matíc sme sa už stretli pri rotáciách a pred tým, než by sme pokračovali ďalej si to pripomenieme. Nech $|j, m\rangle$ pri pevnom j a pri $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ sú vlastné vektory operátorov momentu hybnosti

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle \quad (9)$$

$$J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

Rotácii danej Eulerovými uhlami (α, β, γ) je priradený operátor

$$\mathbf{U}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha J_z) \exp(-i\beta J_y) \exp(-i\gamma J_z) \quad (10)$$

a tomuto je v báze $|j, m\rangle$ priradená rotačná matica

$$\mathbb{D}_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m | \mathbf{U}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m' \rangle \quad (11)$$

Dvom po sebe idúcim rotáciám je priradený súčin príslušných rotačných matíc.

Teraz sa oboznámime s pojmom ireducibilnej reprezentácie, ale predtým si musíme ešte zaviesť pojem ekvivalentných reprezentácií.

Nech G je teda istá grupa s prvkami g_1, g_2, \dots a nech zobrazenie

$$g \rightarrow U_{ik}(g) \quad i, k = 1, 2, \dots, n \quad (12)$$

je jej reprezentácia pomocou unitárnych matíc typu $n \times n$. Nech ďalej \mathbf{S} je unitárna matica typu $n \times n$. Ľahko sa presvedčíme o tom, že zobrazenie

$$g \rightarrow U'_{ik}(g) = (S^+)_{ij} U_{jr}(g) S_{rk} = (\mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g) \mathbf{S})_{ik} \quad (13)$$

je tiež reprezentáciou grupy G . Pretože v pôvodnom priradení je súčinu $g_1 g_2$ priradený súčin matíc $\mathbf{U}(g_1) \mathbf{U}(g_2)$, máme

$$g_1 g_2 \rightarrow \mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g_1) \mathbf{U}(g_2) \mathbf{S} = \mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g_1) \mathbf{S} \mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g_2) \mathbf{S} = \mathbf{U}'(g_1) \mathbf{U}'(g_2)$$

a vidíme, že aj v novom priradení je súčinu prvkov priradený súčin príslušných matíc. Podobne sa presvedčíme o tom, že jednotkovému prvku je podľa (13) priradená jednotková a inverznému prvku inverzná matica.

Prechod medzi reprezentáciami

$$\mathbf{U}(g) \rightarrow \mathbf{U}'(g) = \mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g) \mathbf{S} \quad (14)$$

nazývame podobnostnou transformáciou a reprezentácie $\mathbf{U}(g)$, $\mathbf{U}'(g)$ viazané vzťahom (14) nazývame ekvivalentnými.

Podobnostná transformácia má jednoduchý obsah. Uvažujme reprezentáciu (12), pričom matice $U_{ik}(g)$ sú dané výrazmi

$$U_{ik}(g) = \langle \varphi_i | \mathbf{U}(g) | \varphi_k \rangle \quad (15)$$

pričom $\{|\varphi_k\rangle\}$ je určitou bázou v priestore stavov. Ak v tomto priestore zvolíme novú bázu $\{|\varphi'_n\rangle\}$ viazanú so starou podľa

$$|\varphi'_n\rangle = S_{mn}|\varphi_m\rangle$$

kde \mathbf{S} je unitárna matica; potom v tejto novej báze budú operátorom $\mathbf{U}(g)$ priradené matice

$$U'_{ik} = \langle \varphi'_i | \mathbf{U}(g) | \varphi'_k \rangle = S_{mi}^* \langle \varphi_m | \mathbf{U}(g) | \varphi_s \rangle S_{sk} = (\mathbf{S}^+ \mathbf{U}(g) \mathbf{S})_{ik} \quad (16)$$

Podobnostná transformácia (14) teda odpovedá zmene bázy v uvažovanom priestore stavov. Reprerentácie možno v istom zmysle aj skladať. Nech

$$g \rightarrow A_{ij}(g) \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$

je reprezentáciou grupy G $n \times n$ rozmernými maticami a

$$g \rightarrow B_{rs}(g) \quad r, s = 1, 2, \dots, m$$

je reprezentáciou pomocou $m \times m$ rozmerných matíc. Potom môžeme vytvoriť jednoducho novú reprezentáciu maticami typu $(m+n) \times (m+n)$, pričom každému prvku priradíme maticu²¹⁵

$$\mathbf{C}(g) = \begin{pmatrix} A(g) & 0 \\ 0 & B(g) \end{pmatrix} \begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \quad (17)$$

Podobne by sme mohli postupovať ďalej a pridať ďalšiu reprezentáciu. Matica $\mathbf{C}(g)$ by sa potom skladala z blokových matíc, pričom nenulové by boli iba bloky v diagonále.

Ak (17) platí pre všetky prvky g , hovoríme, že reprezentácia $\mathbf{C}(g)$ sa redukuje na reprezentácie $\mathbf{A}(g)$ a $\mathbf{B}(g)$. Tu $\mathbf{C}(g)$ nazývame reducibilnou reprezentáciou.

Podstatnú vlastnosť reducibilnej reprezentácie vidno z nasledujúcej úvahy. Vektory bázy v priestore, v ktorom pôsobia matice $\mathbf{C}(g)$ možno vybrať v tvare

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

$e_1 \quad e_2 \quad \dots \quad e_n \quad e_{n+1} \quad \dots \quad e_{n+m}$

kde bodky označujú nuly, vodorovná čiara oddeľuje prvých n miest (iný význam nemá) a pod každým vektorom sme napísali jeho „názov“. Transformácie bázy maticami $\mathbf{C}(g)$ prevádzajú vektory e_1, \dots, e_n (a ich lineárne kombinácie) zas iba na lineárne kombinácie týchto vektorov a rovnaké tvrdenie platí i pre vektory e_{n+1}, \dots, e_{n+m} . Celý priestor je takto rozdelený na dva podpriestory, ktoré sa pri pôsobení matíc $\mathbf{C}(g)$ navzájom „nemiešajú“.

Túto vlastnosť matíc $\mathbf{C}(g)$ možno „zamaskovať“ tým, že prejdeme od pôvodnej bázy $\{e_i\}$, k novej báze $\{e'_i\}$ tak, že e'_i budú lineárnymi kombináciami všetkých pôvodných vektorov e_i . Matice $\mathbf{C}'(g)$ už potom nebudú mať blokovo-diagonálny tvar (17). Takáto transformácia ale nezmení podstatnú vlastnosť matíc $\mathbf{C}(g)$ – priestor stavov bude stále rozdelený na dve časti, ktoré sa pri transformáciách maticami $\mathbf{C}'(g)$ nemiešajú, iba vyjadrenie báz pre tieto podpriestory (časti) bude komplikovanejšie. Pojem reducibilnej reprezentácie preto zavádzame všeobecnejšie.

Nech $g \rightarrow \mathbf{D}(g)$ je reprezentácia grupy G maticami $\mathbf{D}(g)$. Ak možno pomocou podobnostnej transformácie $\mathbf{D}(g) \rightarrow \mathbf{S}^+ \mathbf{D}(g) \mathbf{S}$ previesť všetky matice $\mathbf{D}(g)$ na tvar (17), pričom $n \neq 0$, $m \neq 0$ hovoríme, že reprezentácia $\mathbf{D}(g)$ je reducibilná. Ak to nemožno urobiť, hovoríme, že $\mathbf{D}(g)$ je ireducibilnou reprezentáciou grupy G . Úloha, nájsť všetky ireducibilné reprezentácie istej grupy, je dobre definovaný matematický problém a jeho riešenie je známe pre širokú triedu grúp, dôležitú pre fyzikálne aplikácie.

²¹⁵ Pre maticu $\mathbf{C}(g)$ platí $C_{ij} = A_{ij}$ pre $1 \leq n, j \leq n$ a $C_{ij} = B_{i-n, j-n}$ pre $n+1 \leq i, j \leq n+m$. Ostatné prvky \mathbf{C} sú nulové.

Význam ireducibilných reprezentácií snáď najpriamejšie vidno pri analýze degenerácie energetického spektra v prípade symetrie istej fyzikálnej sústavy. Ak transformácia, ktorej sú priradené operátory $U(g)$ je symetriou, potom U komutuje s hamiltoniánom (pozri (1.10)).

Ak je stav $|\psi\rangle$ vlastným stavom H

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (19)$$

potom aj stav

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (20)$$

bude vlastným stavom, prislúchajúcim tej istej vlastnej hodnote. Skutočne

$$H|\psi'\rangle = HU|\psi\rangle = UH|\psi\rangle = UE|\psi\rangle = EU|\psi\rangle = E|\psi'\rangle \quad (21)$$

Vlastné vektory operátora H prislúchajúce danej vlastnej hodnote E tvoria podpriestor \mathcal{P}_E Hilbertovho priestoru \mathcal{P} všetkých stavov sústavy. Ak je sústava symetrická voči grupe symetrie G (t.j. operátory $U(g)$ pre $g \in G$ komutujú s H), potom sa podľa (21) vektory z \mathcal{P}_E transformujú opäť na vektory z \mathcal{P}_E . Ak v priestore \mathcal{P}_E zavedieme bázu $\{|\psi_n\rangle\}$, potom pre ľubovoľné $|\psi_n\rangle$ a pre každé g platí

$$U(g)|\psi_n\rangle = |\psi_m\rangle\langle\psi_m|U(g)|\psi_n\rangle = U_{mn}|\psi_m\rangle \quad (22)$$

(suma cez opakované m) a matice $U_{ij}(g)$ tvoria reprezentáciu grupy G . Ortogonálny systém vlastných vektorov H prislúchajúcich k danej vlastnej hodnote E takto tvorí bázu reprezentácie grupy symetrie, pričom reprezentácia je spravidla ireducibilná.²¹⁶

Tento výsledok je dôležitý najmä v situáciách, keď nepoznáme presný tvar hamiltoniánu, ale máme informáciu o degenerácii energetických hladín. Z počtu degenerovaných stavov možno často uhádnuť symetriu hamiltoniánu a toto je dôležitým vodidlom pri snahe o jeho presnejšie určenie.

Predchádzajúce úvahy, samozrejme, nenaznačujú, že každý vlastný stav hamiltoniánu musí byť viacnásobne degenerovaný. Každá grupa má totiž aj triviálnu jednorozmernú reprezentáciu, v ktorej každému $g \in G$ priradíme jednotku, t. j. maticu typu 1×1 a stav, ktorý sa podľa tejto reprezentácie transformuje nemá viacnásobnú degeneráciu. V prípade rotačnej grupy je takýmto stavom guľová funkcia $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = (4\pi)^{-1/2}$, ktorá sa pri rotáciách nemení.

Upozorníme ešte, že v prípade, že daná hladina je nedegenerovaná, potom stav (vlnová funkcia) má takú istú symetriu ako hamiltonián. (Napríklad vlnová funkcia Y_{00} je sféricky symetrická.) Po formálnej stránke je to vyjadrené tým, že príslušný stav je vlastným stavom operátora symetrie.

Napokon sa vrátíme ešte k otázke priradenia operátorov $U(g)$ jednotlivým elementom grupy g . Pri diskusii na začiatku článku sme predpokladali, že pre ľubovoľný stav sústavy platí

$$U(g_2g_1)|\varphi\rangle = U(g_2)U(g_1)|\varphi\rangle \quad (23)$$

pričom na pravej strane máme výsledok dvoch postupne vykonaných transformácií odpovedajúcich elementom g_1, g_2 a na ľavej máme jedinú transformáciu odpovedajúcu súčinu g_2g_1 . V kvantovej mechanike je ale stav daný lúčom v Hilbertovom priestore, teda stavový vektor je určený s presnosťou na multiplikačný fázový faktor. Namiesto rovnice (4) teda stačí požadovať splnenie podmienky

$$U(g_1g_2) = e^{i\alpha(g_1, g_2)}U(g_1)U(g_2) \quad (24)$$

kde fáza $\alpha(g_1, g_2)$ závisí od elementov g_1, g_2 . Vo väčšine prípadov možno vhodným výberom fáz stavov dosiahnuť to, aby sme od (24) prešli k (4). Potom, tak ako vyššie, hovoríme, že priradenie $g \rightarrow U(g)$ je reprezentáciou grupy G . Ak platí len všeobecnejší vzťah (24), hovoríme o projektívnej reprezentácii.

Fázových faktorov $\exp(i\alpha(g_1, g_2))$ sa v skutočnosti nemôžeme zbaviť ani pri reprezentáciách grupy rotácií odpovedajúcich poločíselnému spinu. Dve po sebe idúce rotácie okolo osi z o uhol π odpovedajú

²¹⁶ Ak sa stane, že systém vlastných vektorov H príslušných k danej hodnote E tvorí bázu reducibilnej reprezentácie, potom to obvykle značí, že systém má v skutočnosti vyššiu symetriu. Toto je aj prípad atómu vodíka, ale bližšie sa tu s touto otázkou nebudeme zaoberať.

identickej transformácii. V prípade stavu so spinom 1/2 sú ale tieto dve rotácie opísané súčinom

$$e^{-\pi\sigma_z/2} e^{\pi\sigma_z/2} = e^{-\pi\sigma_z} = (\cos \pi)\mathbf{1} - i\sigma_z \sin \pi = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Pri rotácii o 2π okolo osi z (alebo hocijakej inej osi) sa teda zmení znamienko spinoru.²¹⁷

13.3 LIEOVE GRUPY

Vo fyzikálnych aplikáciách patrí význačná úloha Lieovým grupám. Naznačíme tu stručne ich vlastnosti, nebudeme sa však snažiť ani o rigoróznosť ani o systematický výklad, pôjde nám viac-menej o intuitívne pochopenie podstaty problému.²¹⁸

Lieove grupy sú nekonečné topologické grupy, v ktorých možno zaviesť diferencovateľné súradnice. Prakticky to znamená, že prvky grupy možno označiť pomocou niekoľkých reálnych parametrov (súradníc). Zadanie týchto parametrov určuje jednoznačne prvok grupy. Grupa je topologická, čo značí, že pre jej prvky sú definované pojmy ako limita postupnosti prvkov a podobne, pričom parametrizácia grupy je spojitá, čo znamená, že dva prvky, ktorých parametre sa málo odlišujú sú „blízke“ (v zmysle topológie na grupe). Ak ide o r -parametrickú grupu (čo značí, že prvok grupy je jednoznačne daný pomocou r reálnych parametrov), potom pre prvky grupy zavádzame označenie napr.

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r) \in G \quad (1)$$

alebo skrátene

$$g(\alpha_i) \in G \quad (2)$$

Parametre prvku grupy, ktorý je súčinom iných dvoch prvkov môžeme vyjadriť pomocou parametrov týchto prvkov, t. j. ak

$$g(\gamma_1, \dots, \gamma_r) = g(\alpha_1, \dots, \alpha_r)g(\beta_1, \dots, \beta_r) \quad (3)$$

potom

$$\gamma_i = f_i(\alpha_1, \dots, \alpha_r, \beta_1, \dots, \beta_r) \quad (4)$$

kde f_i sú funkcie, o ktorých predpokladáme, že sú spojitú a (nekonečne) diferencovateľné.

V tomto článku sa ďalej obmedzíme iba na skúmanie grúp operátorov (reprezentácií grúp transformácií, o ktoré sa zaujímate). Skrátene budeme preto namiesto o reprezentácii grupy hovoriť jednoducho iba o grupe.

Na základe skúseností s momentom hybnosti a rotáciami vieme, že je užitočné študovať najprv infinitezimálne transformácie, t. j. také, ktoré sa len infinitezimálne líšia od transformácie totožnosti (od jednotkového operátora). Parametrizáciu prvkov grupy možno vždy vybrať tak, že jednotkovému operátoru odpovedajú nulové hodnoty všetkých parametrov, teda

$$U(0, 0, 0, \dots, 0) = \mathbf{1}$$

Pre infinitezimálnu transformáciu potom s presnosťou do prvého rádu máme

$$U(d\alpha_1, \dots, d\alpha_r) = \mathbf{1} - \sum_{i=1}^r iA_i d\alpha_i \quad (5)$$

kde A_i sú vhodné operátory, ktoré nazývame generátormi grupy transformácií. Faktor i vo vzťahu (5) je konvenciou zvolenou preto, že pri takejto definícii sú generátory A_i hermitovskými operátormi.

²¹⁷ Reprezentácie, ktoré sme našli v kapitole o momente hybnosti, nie sú, presne povedané, reprezentáciami grupy rotácií, ale jej pokrývajúcej grupy $SU(2)$. O týchto veciach tu ale podrobnejšie hovoriť nebudeme.

²¹⁸ O Lieových grupách existuje obsiahla matematická literatúra. Nie vždy sa však terminológia bežne používaná vo fyzikálnej literatúre kryje s tou, s ktorou sa možno stretnúť v matematických monografiách.

Vyplýva to z faktu, že operátor U musí byť unitárny. S presnosťou do prvého rádu musí platiť

$$\mathbf{1} = U^+U = \left(\mathbf{1} + i \sum_{i=1}^r A_i^+ d\alpha_i \right) \left(\mathbf{1} - i \sum_{i=1}^r A_i d\alpha_i \right) = \mathbf{1} + i \sum_{i=1}^r (A_i - A_i^+) d\alpha_i$$

a dostávame podmienku $A_i = A_i^+$.

Infinitezimálne transformácie v Lieovej grupe môžeme teda zapísať v tvare (5). Metódami diferenciálneho počtu sa dá ukázať, že podobne ako sme videli v prípade rotácií, aj vo všeobecnom prípade sa i konečné transformácie dajú parametrizovať (aspoň v istom okolí jednotkového prvku) v tvare²¹⁹

$$U(\alpha_1, \dots, \alpha_r) = \exp(-i \sum A_i \alpha_i) \quad (6)$$

Podobným postupom ako v prípade rotácií možno na základe vzťahu (6) ukázať, že generátory spĺňajú komutačné vzťahy

$$[A_i, A_k] = i \sum_l f_{ik}^l A_l \quad (7)$$

kde f_{ik}^l sú vhodné čísla a nazývajú sa štruktúrne konštanty. Dá sa ukázať, že pri zvolenej parametrizácii prvkov Lieovej grupy, štruktúrne konštanty nezávisia od konkrétnej reprezentácie a charakterizujú samotnú grupu.²²⁰

Pre klasifikáciu reprezentácií majú dôležitú úlohu kvadratické Casimirove operátory. Sú to operátory vytvorené ako „kvadratické kombinácie“ generátorov, t. j. operátory typu

$$F = \sum_{m,n} g_{mn} A_m A_n$$

kde g_{mn} sú vhodné koeficienty volené tak, aby operátor F komutoval so všetkými generátormi. Význam Casimirových operátorov spočíva v tom, že v rámci ireducibilnej reprezentácie sú úmerné jednotkovému operátoru, t. j. všetky vektory patriace do danej reprezentácie prislúchajú k rovnakej vlastnej hodnote Casimirovho operátora. Ireducibilné reprezentácie potom možno klasifikovať pomocou vlastných hodnôt Casimirových operátorov. V prípade grupy rotácií s generátormi J_x, J_y, J_z je (i keď sme to tak nenazývali) Casimirovým operátorom $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$.

Pre spojité grupy symetrií platia všetky tvrdenia, ktoré sme v predchádzajúcich článkoch tejto kapitoly uviedli pre prípad ľubovoľnej grupy. Zastavíme sa bližšie iba pri súvisi symetrií so zákonmi zachovania, ktorý možno sformulovať nasledovne:

Ak hamiltonián sústavy je invariantný voči r -parametrickej grupe symetrií, potom pre sústavu platí r nezávislých zákonov zachovania, pričom zachovávajúcim sa veličinám odpovedajú (v kvantovomechanickom zmysle ako operátory priradené veličine) generátory grupy.

Dôkaz tohto tvrdenia je jednoduchý, ak si uvedomíme, že transformácie z grupy možno vyjadriť v tvare (6), čo je analogický výraz ako (1.15). Potom už ľahko prideme k zákonom zachovania analogickým (1.17).

13.4 TRANSLÁCIE V ČASE A V PRIESTORE. ZACHOVANIE ENERGIE A HYBNOSTI

Jednoduchým príkladom transformácie fyzikálnej sústavy je jej translácia (posunutie) v priestore. Fyzikálne je táto transformácia definovaná tak, že prístroje, pripravujúce stavy, premiestnime (pri zachovaní ich orientácie) na iné miesto v priestore – posunieme ich o vektor \mathbf{a} . Našou úlohou je teraz „uhádnuť“, aký operátor prislúcha takejto transformácii.²²¹ Odpoveď je takmer zrejماً v súradnicovej reprezentácii pre prípad jednej bezspinovej častice.

²¹⁹ Vzťah (6), samozrejme, platí iba pre určitú špeciálnu voľbu parametrov.

²²⁰ Prítom viacero grúp, ktoré sú lokálne homomorfné môže mať rovnaké štruktúrne konštanty. Tieto grupy sa líšia topologickými vlastnosťami.

²²¹ Translácie v priestore tvoria grupu: vykonanie dvoch translácií po sebe sa dá nahradiť jedinou transláciou.

Uvažujme *pre* jednoduchosť posunutie o vzdialenosť ε v smere osi x . Ak bol stav pôvodnej sústavy daný vlnovou funkciou $\psi(x, y, z)$, potom posunutému stavu bude zodpovedať funkcia $\psi'(x, y, z)$, ktorá v bode (x, y, z) bude taká istá, aká bola funkcia ψ v bode $(x - \varepsilon, y, z)$. Platí teda

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x - \varepsilon, y, z) \quad (1)$$

Pre infinitezimálne ε môžeme pravú stranu v (1) rozvinúť do Taylorovho radu a ponechať len lineárne členy. Dostaneme

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z) = \left(1 - i \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathbf{p}_x \right) \psi(x, y, z) \quad (2)$$

kde $\mathbf{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ je operátor x -ovej zložky hybnosti. Transláciu o konečnú vzdialenosť v smere osi x si možno predstaviť ako zloženú z infinitezimálnych transformácií. Ak by sme postupovali obdobne ako pri rovniciach (11.2.13), dostali by sme pre transláciu o vzdialenosť a v smere osi x vyjadrenie

$$\psi'(x, y, z) = \exp\left(-i \frac{a}{\hbar} \mathbf{p}_x\right) \psi(x, y, z) \quad (3)$$

V analógii so vzťahom (3) potom predpokladáme, že i vo všeobecnom prípade ľubovoľnej fyzikálnej sústavy platí pre jej transláciu o vektor \mathbf{a} :

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \exp -i \frac{\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{\hbar} |\psi\rangle \quad (4)$$

kde $\hat{\mathbf{P}}$ je operátor celkovej hybnosti sústavy. Ak sústava je translačne invariantná, t. j. ak operátory hybnosti komutujú s hamiltoniánom, potom sa vektor hybnosti bude zachovávať. Zachovanie hybnosti teda súvisí bezprostredne s translačnou invariantnosťou.

Spomenieme na tomto mieste ďalší dôležitý zákon zachovania, a to zachovania energie, ktorý súvisí s invariantnosťou voči transláciám v čase. Translácie v čase sú transformácie, ktoré nezodpovedajú presne diskusii v prvom článku, kde sme uvažovali transformácie sústavy v danom okamihu. Fyzikálne si možno transláciu v čase názorne predstaviť tak, že prístroj pripravujúci stav sústavy „zapneme“ o dobu τ neskôr ako v pôvodnom prípade. Pre transformovaný stav potom platí

$$|\psi'(t)\rangle \rightarrow |\psi(t - \tau)\rangle \quad (5)$$

Operátor translácie v čase, definovaný vzťahom

$$|\psi'(t)\rangle \rightarrow \mathbf{U} |\psi(t)\rangle \quad (6)$$

nájdeme ľahko, ak si opäť všimneme infinitezimálnu transformáciu

$$|\psi'(t)\rangle \rightarrow |\psi(t - \varepsilon)\rangle = \left(1 - \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \right) |\psi(t)\rangle = \left(1 + i \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathbf{H} |\psi(t)\rangle \right) \quad (7)$$

kde sme využili Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle$$

Operátor translácie v čase bude (pre $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0!$)

$$\mathbf{U}(\tau) = \exp\left(+i \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathbf{H} \tau\right)$$

Ak hamiltonián nezávisí explicitne od času, bude invariantnosti voči transláciám v čase (hamiltonián triviálne komutuje sám so sebou) zodpovedať zákon zachovania energie.

13.5 PRIESTOROVÁ A ČASOVÁ INVERZIA

Dôležitou symetriou mnohých kvantovomechanických sústav je priestorová inverzia. Názorná predstava o transformácii priestorovej inverzie je o niečo ťažšia ako v doteraz diskutovaných prípadoch. Transformácie, ktoré sme zatiaľ skúmali sme si mohli predstaviť ako transformácie, ktoré vykonáme s (makroskopickými) prístrojmi „pripravujúcimi stavy“ ako s celkom (t.j. napríklad hotový prístroj „uchopíme“ a otočíme). Namiesto toho by sme však mohli skonštruovať (podľa rovnakého výrobného predpisu) identický prístroj v otočenej pozícii. Pri transformácii priestorovej inverzie môžeme použiť iba túto druhú predstavu, t. j. prístroj pripravujúci priestorovo inverzné stavy treba osobitne „skonštruovať“ podľa „výrobného predpisu“ zostaveného na základe výrobného predpisu pôvodného prístroja. Aby sme mohli tento „nový výrobný predpis“ špecifikovať (hoci len intuitívne), pozrieme sa napred, čo je to priestorová inverzia v klasickej fyzike, potom špecifikujeme jej kvantovomechanický význam a k transformácii prístrojov pripravujúcich stavy sa vrátíme až na konci článku.

Uvažujme klasickú sústavu n bodových častíc bez vonkajších väzieb. Polohy častíc označíme $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ a predpokladáme, že vzájomná interakcia i -tej a j -tej častice je daná potenciálom $V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$. Lagrangeova funkcia sústavy je:

$$L = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) - \frac{1}{2} \sum_i \sum_j' V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (1)$$

kde \sum_j' značí súčet s vynechaním člena $j = i$ a bodky znamenajú derivácie podľa času. Z Eulerových-Lagrangeových rovníc

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\frac{1}{2} \nabla_i \sum_k \sum_l V_{kl}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

vidno, že spolu s každým riešením $\{\mathbf{r}_i(t)\}_1^n$ bude riešením aj $\{\mathbf{r}'_i(t)\}_1^n$, ak

$$\mathbf{r}'_i(t) = -\mathbf{r}_i(t) \quad (3)$$

Hovoríme, že riešenie $\{\mathbf{r}'_i(t)\}_1^n$ vzniklo z pôvodného riešenia $\{\mathbf{r}_i(t)\}_1^n$ priestorovou inverziou a že sústava opísaná Lagrangeovou funkciou (1) je invariantná voči priestorovej inverzii.

Energia H , celková hybnosť \mathbf{P} a celkový moment hybnosti \mathbf{L} sú dané známymi vzťahmi

$$H = \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j' V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

$$\mathbf{P} = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i, \quad \mathbf{L} = \sum_i m_i \mathbf{r}_i \times \dot{\mathbf{r}}_i$$

Pri transformácii (3) sa uvedené veličiny zrejme transformujú podľa vzťahov

$$H \rightarrow H' = H, \quad \mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P}' = -\mathbf{P}, \quad \mathbf{L} \rightarrow \mathbf{L}' = \mathbf{L} \quad (4)$$

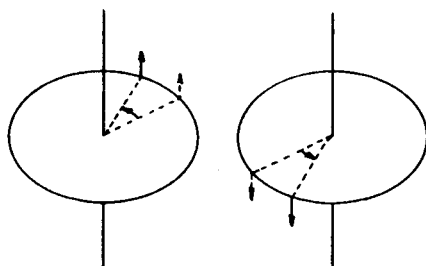
Výrazy H' , \mathbf{P}' a \mathbf{L}' sú energia, hybnosť a moment hybnosti príslušné k riešeniu $\{\mathbf{r}'_i(t)\}$. Vektory, ktoré pri priestorovej inverzii menia znamienko, nazývame polárnymi vektormi (napr. \mathbf{P}), tie, ktoré znamienko nezmenia (napr. \mathbf{L}) nazývame axiálnymi. Transformáciu (3) si možno názorne predstaviť ako zrkadlenie, ale nie v obvyklom zmysle ako zrkadlenie voči rovine, ale voči bodu – začiatku súradnicovej sústavy. Pohyb transformovanej sústavy vyzerá ako zrkadlový (v uvedenom zmysle) obraz pohybu pôvodnej sústavy. Špeciálne je dobre si uvedomiť názorný význam vzťahu $\mathbf{L}' = \mathbf{L}$. Môžeme si predstaviť napríklad rotujúci disk a jeho priestorovo inverzný obraz (voči stredu disku). Na obr. 13.1 je táto situácia nakreslená. Aby bol obrázok názornejší, na disku sú postavené dva predmety (šípky). Z toho, aká je poloha týchto predmetov na inverznom obraze vidno, že inverzný obraz rotuje v rovnakom zmysle ako pôvodný a odpovedá mu teda rovnaký moment hybnosti.

Pre úplnosť si ešte všimneme čo sa deje v prípade, že ide (stále o klasický) pohyb nabitých častíc vo vonkajšom elektromagnetickom poli. Pohybová rovnica jednej častice vo vonkajšom poli je daná vzťahom pre Lorentzovu silu

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (5)$$

Ak (definitóricky) predpokladáme, že pri priestorovej inverzii sa náboj častice nemení, potom je podľa (5) zrejmé, že pohybové rovnice budú splnené aj po transformácii (3) ak súčasne transformujeme aj vonkajšie polia podľa vzťahu

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{E}'(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{E}(-\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{B}'(\mathbf{r}, t) = +\mathbf{B}(-\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6)$$



Obr. 13.1

Čitateľ sa môže ľahko presvedčiť, že transformované polia \mathbf{E}' a \mathbf{B}' opäť spĺňajú Maxwellove rovnice, ak (v súlade s predpokladom o nemennosti náboja) na pravých stranách rovníc sa hustota náboja ρ nezmení a hustota prúdu \mathbf{j} zmení pri priestorovej inverzii znamienko, t. j. $\rho'(\mathbf{r}, t) = \rho(-\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{j}'(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{j}(-\mathbf{r}, t)$.

Na základe korešpondencie s klasickým prípadom potom priestorovou inverziou nazývame takú transformáciu sústavy

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \mathbf{U}_P |\psi\rangle \quad (7)$$

pri ktorej platia transformačné vzťahy typu (4), (6) pre stredné hodnoty. Pre bezspinovú časticu žiadame teda

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \hat{\mathbf{r}} | \psi' \rangle &= -\langle \psi | \hat{\mathbf{r}} | \psi \rangle \\ \langle \psi' | \hat{\mathbf{p}} | \psi' \rangle &= -\langle \psi | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle \\ \langle \psi' | \mathbf{H} | \psi' \rangle &= \langle \psi | \mathbf{H} | \psi \rangle \\ \langle \psi' | \mathbf{L} | \psi' \rangle &= \langle \psi | \mathbf{L} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

Pripomeňme pritom, že v pohybových rovniciach kvantovej mechaniky vystupujú namiesto intenzít elektromagnetického poľa príslušné potenciály. Transformácii (6) zodpovedajú transformácie potenciálov podľa vzťahu

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(-\mathbf{r}, t) \\ \varphi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \varphi'(\mathbf{r}, t) = +\varphi(-\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (9)$$

Dve po sebe nasledujúce priestorové inverzie sú ekvivalentné transformácii identity, preto žiadame, aby platilo

$$\mathbf{U}_P \mathbf{U}_P = \mathbf{1} \quad (10)$$

Okrem podmienky (10) predpokladáme, že operátor \mathbf{U}_P je unitárny, t. j. platí

$$\mathbf{U}_P \mathbf{U}_P^\dagger = \mathbf{U}_P^\dagger \mathbf{U}_P = \mathbf{1} \quad (11)$$

Na základe (10) sa možno ľahko presvedčiť o tom, že vlastnými hodnotami operátora \mathbf{U}_P môže byť len +1 alebo -1. Naozaj ak pre stav $|\psi\rangle$ platí

$$\mathbf{U}_P |\psi\rangle = \eta |\psi\rangle$$

potom podľa (10)

$$|\psi\rangle = \mathbf{U}_P \mathbf{U}_P |\psi\rangle = \mathbf{U}_P \eta |\psi\rangle = \eta \mathbf{U}_P |\psi\rangle = \eta^2 |\psi\rangle$$

a odtiaľ dostaneme $\eta^2 = 1$.

Zo vzťahov (10) a (11) je súčasne vidieť, že platí $\mathbf{U}_P = \mathbf{U}_P^+$ teda operátor \mathbf{U}_P je hermitovský. Zodpovedá preto určitej fyzikálnej veličine (nemajúcej klasický analóg), ktorú voláme priestorová parita. V prípade, že transformácia priestorovej inverzie je symetriou sústavy, priestorová parita sa zachováva.

Tvar operátora priestorovej parity treba spravidla v každom konkrétnom prípade osobitne preskúmať. Ako príklad si uvedieme prípad jednej bezspinovej častice²²² v skalárnom vonkajšom potenciáli. Všimneme si pritom iba súradnicovú reprezentáciu; stav teda bude reprezentovať vlnová funkcia

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (12)$$

Explicitným výpočtom sa možno presvedčiť o tom, že podmienky (8), (10), (11) spĺňa operátor \mathbf{U}_P definovaný vzťahom

$$\psi'(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{U}_P | \psi \rangle = \psi(-\mathbf{r}) \quad (13)$$

Všimnime si bližšie prípad sféricky symetrického potenciálu.

Príslušné vlnové funkcie majú tvar

$$\Phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (14)$$

kde $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sú sférické funkcie. Pri inverzii $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ sa sférické súradnice zmenia nasledovne

$$\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi, \quad r \rightarrow r$$

Z definície sférických funkcií vyplýva (pozri článok 4.9)

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (15)$$

a preto platí

$$\Phi_{nlm}(-\mathbf{r}) = (-1)^l \Phi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Parita stavu s orbitálnym momentom hybnosti l je teda $(-1)^l$.

Niekedy je užitočné považovať sústavy zložené z viacerých častíc za jedinú „časticu“, najmä vtedy, keď sa štruktúra častice neprejavuje (napríklad pri opise rozptylu α -častíc na jadrách v Rutherfordovom experimente).

V prípadoch, keď sa štruktúra častice navonok bezprostredne neprejavuje, môžeme pozorovať dôsledky vnútorného (orbitálneho) pohybu subčastíc ako vnútorný moment hybnosti (spin) častice. Tento fakt sa potom odrazí aj na transformačných vlastnostiach vlnovej funkcie častice pri rotáciách. Podobne sa musí prejaviť i parita súvisiaca s orbitálnym pohybom subčastíc pri transformáciách priestorovej inverzie. Hovoríme potom o vnútornej parite opisovanej zloženej častice. Podľa toho, či vnútorná parita je +1 alebo -1 transformuje sa vlnová funkcia podľa vzťahov

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = +\psi(-\mathbf{r}) \quad (16)$$

alebo

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = -\psi(-\mathbf{r})$$

Upozorníme však, že v prípade zápornej vnútornej parity nemôžeme ešte z tohto faktu usudzovať na „zloženosť“ častice, môže ísť o „pravú“ vnútornú paritu -1.

²²² S vnútornou paritou rovnou +1 (pozri diskusiu nižšie).

Vráťme sa ešte k problému fyzikálnej realizácie priestorovoinverzného stavu.²²³ Takýto stav budeme musieť pripraviť pomocou prístroja, ktorý je skonštruovaný ako inverzný („zrkadlový“) obraz pôvodného prístroja pripravujúceho stavu, t. j. napríklad namiesto skrutičky s pravotočivým závitom treba použiť skrutičku s ľavotočivým závitom a pod. Treba si však uvedomiť, že nie v každej situácii vystačíme s takýmito „zmenami vo výrobnom postupe“ na makroskopiskej úrovni. V niektorých situáciách môže byť podstatné, aby napríklad organické molekuly, ktoré stáčajú rovinu polarizovaného svetla doľava, boli nahradené (chemicky) rovnakými molekulami, ktoré stáčajú túto rovinu doprava. Niet apriórneho dôvodu predpokladať, že sa to vždy (aspoň teoreticky) dá realizovať. V skutočnosti to ani nie je vždy možné: napríklad neutrína vyskytujúce sa v prírode sú len „ľavotočivé“ (t. j. priemet spinu na smer ich pohybu je $-1/2$). Ak vo funkcii uvažovaného „prístroja“ majú podstatnú úlohu neutrína, potom príslušný inverzný prístroj nemožno skonštruovať, lebo by sme museli použiť pravotočivé neutrína, ktoré neexistujú.²²⁴ Znamená to potom, že transformácia priestorovej inverzie hoci matematicky sformulovateľná, sa nedá fyzikálne realizovať. V tomto prípade priestorová inverzia neexistuje ani ako transformácia, a teda nemôže byť ani symetriou.

Skutočnosť, že svet nie je úplne symetrický voči zámene ľavého na pravé sa prejavuje navonok ako nezachovanie parity v slabých interakciách. Tento fakt bol teoreticky predpovedaný T. D. Leeom a C. N. Yangom a experimentálne overený v pokusoch C. S. Wu v roku 1956. Peknú diskusiu o nezachovaní parity možno nájsť v už viackrát citovaných Feynmanových prednáškach.

Na záver si všimneme ešte jednu zaujímavú symetriu – časovú *inverziu*. Tento názov už je ustálený, ale výstižnejšie by bolo hovoriť o obrátení pohybu. Začneme s diskusiou obrátenia pohybu v klasickej mechanike.

Riešenie pohybových rovníc (2) je jednoznačne určená zadaním začiatočných podmienok

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t=0) &= \mathbf{r}_{i0} \\ \dot{\mathbf{r}}_i(t=0) &= \mathbf{v}_{i0} \end{aligned} \quad (17)$$

pričom toto riešenie je určené jednoznačne tak pre časy $t > 0$ ako pre časy $t < 0$.

Ak namiesto podmienok (17) zvolíme začiatočné podmienky

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'_i(t=0) &= \mathbf{r}_{i0} \\ \dot{\mathbf{r}}'_i(t=0) &= -\mathbf{v}_{i0} \end{aligned} \quad (18)$$

dostaneme zas jednoznačne určené riešenie rovníc (2). Toto riešenie označíme ako $\mathbf{r}'_i(t)$. Riešenia $\mathbf{r}_i(t)$ a $\mathbf{r}'_i(t)$ navzájom súvisia vzťahom

$$\mathbf{r}'_i(t) = \mathbf{r}_i(-t) \quad (19)$$

Vzťah (19) je dôsledkom nasledujúcej vlastnosti rovníc (2): ak $\mathbf{r}_i(t)$ je riešením (2), potom aj $\mathbf{r}'_i(t) = \mathbf{r}_i(-t)$ je riešením (2). Formálne to vidno z toho, že rovnice (2) sa nezmenia pri zámene²²⁵ $t \rightarrow t' = -t$.

Názorná interpretácia vzťahu (19) je jednoduchá. Predstavme si, že priebeh riešenia $\mathbf{r}_i(t)$ pre $-t_1 < t < 0$ máme zachytený na filme. Ak tento film pustíme v obrátenom smere (od konca k začiatku) uvidíme presne to isté ako keby sme pustili filmový záznam riešenia $\mathbf{r}'_i(t)$ pre $0 < t < t_1$. Riešenie $\mathbf{r}'_i(t)$ nazývame časovou inverziou riešenia $\mathbf{r}_i(t)$.

Vzťah medzi riešeniami $\mathbf{r}_i(t)$ a $\mathbf{r}'_i(t)$ môžeme opísať aj nasledujúcim spôsobom, podobným tomu, ktorý použijeme neskôr v kvantovej mechanike. Stav sústavy častíc v klasickej mechanike je daný súradnicami a hybnosťami všetkých častíc. Výraz $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ budeme na chvíľu nazývať stavom sústavy. *T*-obráteným (alebo *T*-invertovaným) stavom k $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ nazveme stav $(\mathbf{r}'_i, \mathbf{p}'_i)$, pričom

$$(\mathbf{r}'_i, \mathbf{p}'_i) \equiv T(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) = (\mathbf{r}_i, -\mathbf{p}_i) \quad (20)$$

Ak riešenie $\mathbf{r}_i(t)$ pohybových rovníc (2) prebieha istou postupnosťou stavov, potom riešenie $\mathbf{r}'_i(t)$ viazané s $\mathbf{r}_i(t)$ vzťahom (19) prebieha v opačnom poradí postupnosťou *T*-obrátených stavov. Stručne

²²³ Nasledujúcu diskusiu treba chápať ako jednoduchý „myšlienkový experiment“.

²²⁴ Prinajmenej neboli doteraz pozorované a nevystupujú ani v teórii slabých interakcií, ktorá je považovaná za štandardnú. To pravda, neznamená, že neexistujú teórie špekulatívnejšieho charakteru, v ktorých sa vyskytujú pravotočivé neutrína.

²²⁵ Hovoríme tiež, že pohybové rovnice (2) sú invariantné voči inverzii času. Fyzikálnym vyjadrením tejto formálnej skutočnosti je vzťah (19) medzi riešeniami $\mathbf{r}_i(t)$ a $\mathbf{r}'_i(t)$.

je to znázornené v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{ccc} (\mathbf{r}_i(\tau), \mathbf{p}_i(\tau)) & (\mathbf{r}'_i(\tau), \mathbf{p}'_i(\tau)) & = T(\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau)) \\ \vdots & & \\ (\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0)) & (\mathbf{r}'_i(0), \mathbf{p}'_i(0)) & = T(\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0)) \\ \vdots & & \\ (\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau)) & (\mathbf{r}'_i(-\tau), \mathbf{p}'_i(-\tau)) & = T(\mathbf{r}_i(\tau), \mathbf{p}_i(\tau)) \end{array}$$

kde na ľavej strane máme postupnosť stavov, ktorou smerom odspodu nahor prebieha riešenie $\mathbf{r}_i(t)$, napravo máme postupnosť stavov, ktorou tiež smerom odspodu nahor prechádza riešenie $\mathbf{r}'_i(t)$. Pri každom zo stavov riešenia $\mathbf{r}'_i(t)$ sme zapísali aj stav, s ktorým je $\mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{r}'_i(t)$ združený T -obrátením.

Vzťah riešení $\mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{r}'_i(t)$ spĺňajúcich (19) má dôležitú vlastnosť, ktorú možno povýšiť na definíciu invariantnosti sústavy voči obráteniu pohybu (invariantnosť voči inverzii času). Táto vlastnosť je znázornená v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{ccc} (\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0)) & \xrightarrow{T} & (\mathbf{r}'_i(0), \mathbf{p}'_i(0)) = T(\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0)) \\ \uparrow \text{ pohybové} & & \downarrow \text{ pohybové} \\ \text{rovnice (2)} & & \text{rovnice (2)} \\ (\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau)) & \xrightarrow{T} & (\mathbf{r}'_i(\tau), \mathbf{p}'_i(\tau)) = T(\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau)) \end{array} \quad (21)$$

Nech v čase $t = -\tau$ je stavom sústavy $(\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau))$. Tento stav dáva určité začiatočné podmienky pre rovnice (2). Rovnice (2) spolu s týmito začiatočnými podmienkami určujú jednoznačne riešenie $\mathbf{r}_i(t)$. Sledujúc časový vývoj riešenia (ľavá strana schémy) prídeme v čase $t = 0$ k stavu $(\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0))$. Pomocou T -obrátenia stavu prejdeme od $(\mathbf{r}_i(0), \mathbf{p}_i(0))$ k stavu $(\mathbf{r}'_i(0), \mathbf{p}'_i(0))$. Tento stav určuje isté začiatočné podmienky pre rovnice (2). Príslušné riešenie označíme ako $\mathbf{r}'_i(t)$. Po čase τ týmto riešením prídeme k stavu $(\mathbf{r}'_i(\tau), \mathbf{p}'_i(\tau))$. Ak je tento stav rovný T -invertovanému začiatočnému stavu $(\mathbf{r}_i(-\tau), \mathbf{p}_i(-\tau))$ hovoríme, že sústava je invariantná voči obráteniu pohybu (invariantná voči inverzii času). V klasickej mechanike je táto požiadavka splnená. Poznamenajme, že schéma (21) je len formálnym prepisom toho, čo sme vraveli o vzťahu riešení $\mathbf{r}_i(t)$ a $\mathbf{r}'_i(t)$ v texte medzi rovnicami (19) a (20) v ktorom sme hovorili o púšťaní filmov s obidvoma riešeniami.

V kvantovej mechanike postupujeme pri skúmaní obrátenia pohybu analogicky. Budeme sa zaoberať len tým najjednoduchším prípadom – jednou bezspinovou časticou v poli s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$. Najprv zavedieme operátor T prevádzajúci ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ na stav $|\psi'\rangle$, ktorý je T -obrátením stavu $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = T|\psi\rangle \quad (22)$$

V analógii s (20) žiadame, aby pre ľubovoľný stav $|\psi\rangle$ platilo

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \hat{r} | \psi' \rangle &= \langle \psi | \hat{r} | \psi \rangle \\ \langle \psi' | \hat{p} | \psi' \rangle &= -\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (23)$$

Po dosadení (22) do (23) dostávame pre operátor T podmienky

$$\begin{aligned} T^+ \hat{r} T &= \hat{r} \\ T^+ \hat{p} T &= -\hat{p} \end{aligned} \quad (24)$$

Navyše žiadame, aby operátor T nemenil absolútnu hodnotu skalárneho súčinu

$$|\langle T\psi_1 | T\psi_2 \rangle| = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \quad (25)$$

pre ľubovoľné $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$. Vďaka (25) sa nemení pri T -obrátení ani norma stavu: $\langle T\psi | T\psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$.

Najprirodzenejšie by bolo tak ako pri iných symetriách aj tu žiadať, aby T bolo unitárnym lineárnym operátorom. Ale to nie je možné. Predpokladajme, že existuje lineárny unitárny operátor T , spĺňajúci podmienky (24). Násobme vzťah (predpokladáme $\hbar = 1$)

$$x p_x - p_x x = i \quad (26)$$

zľava T^+ a sprava T . Dostaneme tak

$$T^+ x T T^+ p_x T - T^+ p_x T T^+ x T = T^+ i T \quad (27)$$

Po využití (24) a $T^+ i T = i$ máme z (27)

$$-x p_x + p_x x = i \quad (28)$$

čo protirečí (26).

Na uvedené protirečenie nenarazíme, ak za T volíme antiunitárny operátor. Uvedme si najprv niekoľko vlastností takýchto operátorov. Operátor T nazývame antilineárnym ak platí

$$T \alpha |\psi\rangle = \alpha^* T |\psi\rangle$$

$$T(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = T|\psi\rangle + T|\varphi\rangle$$

pre ľubovoľné stavy $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ a ľubovoľné komplexné číslo α . Pre antilineárne operátory môžeme prirodzene definovať operáciu hermitovského združenía. Operátor T^+ nazývame hermitovsky združeným k antilineárnemu operátoru T ak pre ľubovoľné stavy $|\psi\rangle, |\Phi\rangle$ platí

$$\langle \Phi' | \psi \rangle = \langle \Phi | T^+ |\psi\rangle^* \quad \text{kde } |\Phi'\rangle = T|\Phi\rangle$$

Lahko sa dá ukázať, že operátor T^+ je opäť antilineárny. Antilineárny operátor T sa nazýva antiunitárny ak platí

$$T T^+ = T^+ T = 1$$

Lahko vidno, že pre antiunitárny operátor T ostáva vzťah (25) v platnosti. Ak predpokladáme, že operátor T -inverzie je antiunitárny, potom na pravej strane vo vzťahu (27) dostaneme

$$T^+ i T = T^+ T i^* = -i$$

a namiesto vzťahu (28) dostaneme už konzistentne

$$-x p_x + p_x x = -i$$

V x -reprezentácii operátor T -obrátienia definujeme vzťahom

$$\psi'(r) = T \psi(r) = \psi^*(r)$$

a podľa predchádzajúcej definície platí $T^+ = T$. Lahko sa presvedčíme, že tento operátor spĺňa všetky požadované vlastnosti. Zmena znamienka v druhej z rovníc (24) pochádza z toho, že v x -reprezentácii $p_i = -i\hbar \partial/\partial x$, a $T^+ i T = -i$. Pre skalárny súčin nájdeme

$$\langle T\Phi | T\psi \rangle = \int (T\Phi)^* T\psi \, dx = \int \Phi \psi^* \, dx = \langle \psi | \Phi \rangle = \langle \Phi | \psi \rangle^*$$

Teraz sformulujeme kritérium invariantnosti kvantovomechanickej sústavy voči T -inverzii. Nech v čase $t = -\tau < 0$ je sústava v stave $|\psi(-\tau)\rangle$. Necháme sústavu vyvíjať sa v čase podľa Schrödingerovej rovnice do času $t = 0$ a prideme tak k stavu $|\psi(0)\rangle = \exp(-iH\tau/\hbar)|\psi(-\tau)\rangle$. Teraz urobme T -inverziu stavu a dostaneme tým stav $|\psi'(0)\rangle = T|\psi(0)\rangle$. Tento stav sa bude s časom meniť podľa Schrödingerovej rovnice a v čase $t = \tau$ budeme mať stav

$$|\psi'(\tau)\rangle = \exp(-iH\tau/\hbar)|\psi'(0)\rangle$$

Ak je tento stav T -inverziou stavu $|\psi(-\tau)\rangle$, z ktorého sme vyšli a ak toto platí pre každý stav $|\psi(-\tau)\rangle$, hovoríme, že sústava je invariantná voči T -inverzii. Postup je znázornený v nasledujúcej schéme

$$\begin{array}{ccc} |\psi(0)\rangle & \xrightarrow{T} & |\psi'(0)\rangle = T|\psi(0)\rangle \\ e^{-iH\tau/\hbar} \uparrow & & \downarrow e^{-iH\tau/\hbar} \\ |\psi(-\tau)\rangle & \xrightarrow{T} & |\psi'(-\tau)\rangle = e^{-iH\tau/\hbar}|\psi(-\tau)\rangle \end{array} \quad (30)$$

Ak je sústava invariantná voči T -inverzii musíme dostať postupom: (začíname vľavo dolu) „nahor, doprava, dolu“ rovnaký výsledok ako jediným krokom doprava.

Schéma (30) je analógiou podobnej schémy v klasickej mechanike (21) a je blízka k všeobecnej schéme (1.8). Fyzika za touto schémou je rovnaká ako príklad s púšťaním filmov. V kvantovej mechanike však vývoj stavu nemôžeme „filmovať“ lebo hocijaké meranie by menilo stav sústavy.

Požiadavka invariantnosti sústavy voči T -inverzii je podľa predchádzajúceho ekvivalentná podmienke

$$|\psi'(-\tau)\rangle \equiv e^{-iH\tau/\hbar} T e^{iH\tau/\hbar} |\psi(-\tau)\rangle = T |\psi(-\tau)\rangle$$

a pretože to má platiť pre každé $|\psi(-\tau)\rangle$ máme odtiaľ po elementárnej úprave

$$T^+ e^{-iH\tau/\hbar} T e^{iH\tau/\hbar} = \mathbf{1} \quad (31)$$

Pretože $T^+ iHT = -iT^+ HT$ môžeme prepísať (31) do tvaru

$$e^{+i(T^+HT)\tau/\hbar} e^{-iH\tau/\hbar} = \mathbf{1} \quad (31')$$

z čoho máme hneď (stačí vziať infinitezimálne T)

$$T^+ HT = H \quad (32)$$

Ak platí (32) potom je (31') splnené pri ľubovoľnom τ .

Pre jedinú časticu v poli s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ je stav častice daný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r})$ a T je operátorom komplexného zdruzenia $T\psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})$. Výraz $T^+HT = H$ je operátorom komplexne združeným k H . Požiadavka (32) potom vedie k $H^* = H$. Pre uvažovaný prípad jednej častice

$$H = -\frac{\hbar}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \quad (33)$$

a skutočne platí $H^* = H$. Sústava je teda invariantná voči T -inverzii.

Ak $\psi(\mathbf{r}, t)$ je riešením Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (34)$$

potom riešením, ktoré prebieha v opačnom poradí postupnosť T -inverzných stavov je

$$\psi'(\mathbf{r}, t) \equiv T\psi(\mathbf{r}, -t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (35)$$

Lahko sa presvedčíme o tom, že $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ je skutočne riešením Schrödingerovej rovnice (34). Stačí urobiť komplexné zdruzenie (34) a formálnu zámenu $t \rightarrow t' = -t$.

Vzťah medzi riešeniami $\psi(\mathbf{r}, t)$ a $\psi'(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$ je takto rovnaký ako vzťah medzi riešeniami $\mathbf{r}_i(t)$ a $\mathbf{r}'_i(t) = \mathbf{r}_i(-t)$ v klasickej fyzike.

13.6 ZHRNUTIE

Transformácii fyzikálnej sústavy zodpovedá v Hilbertovom priestore stavov transformácia stavového vektora

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \mathbf{U}|\psi\rangle$$

kde \mathbf{U} je unitárny (resp. antiunitárny) operátor transformácie. V prípade, že operátor transformácie komutuje s hamiltoniánom

$$[\mathbf{U}, \mathbf{H}] = 0$$

hovoríme, že transformácia je symetriou sústavy. Prítomnosť symetrie vedie na zákon zachovania veličiny \mathbf{A} definovanej vzťahom

$$\mathbf{U} = \exp(-i\mathbf{A})$$

V prípade, že uvažujeme grupu transformácií, potom operátory \mathbf{U} priradené jednotlivým transformáciám tvoria reprezentáciu grupy na Hilbertovom priestore stavov.

V prípade grupy symetrie stacionárne stavy prislúchajúce určitej vlastnej hodnote energie tvoria bázu reprezentácie tejto grupy.

V prípade Lieovej grupy môžeme príslušné operátory parametrizovať v tvare

$$U(\alpha_1, \dots, \alpha_r) = \exp(-i\sum A_i \alpha_i)$$

kde α_i sú parametre Lieovej grupy a hermitovské operátory A_i sú generátory grupy, spĺňajúce komutačný vzťah

$$[A_i, A_j] = i\sum f_{ij}^l A_l$$

kde f_{ij}^l sú štruktúrne konštanty grupy.

Symetria voči r -parametrickej Lieovej grupe vedie na r zákonov zachovania veličín A_i .

13.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Ukážte, že ak lineárny operátor zachováva normu vektorov, potom zachováva aj skalárny súčin
Návod: preskúmajte transformáciu vektorov typu $|\Phi\rangle + \lambda|\psi\rangle$ kde λ je vhodné číslo.
- Ukážte, že spinové stavy dvoch častíc so spinom $1/2$ v báze $|s_1, s_{z1}, s_2, s_{z2}\rangle$ tvoria reducibilnú reprezentáciu grupy rotácií. Ukážte, že v báze $|j, m, s_1, s_2\rangle$ sa táto reprezentácia rozpadne na dve ireducibilné reprezentácie. Určte ich rozmer.
Návod: pripomeňte si článok o CG koeficientoch z 11 kapitoly.
- Ukážte, že ireducibilná reprezentácia abelovskej grupy (t. j. grupy, v ktorej grupová operácia je komutatívna) je nevyhnutne jednorozmerná.
- Ak je sústava invariantná voči priestorovej inverzii a jej hamiltonián má nedegenerované spektrum, potom všetky stacionárne stavy majú určitú paritu. Dokážte toto tvrdenie.
- Sústava je opísaná hamiltoniánom invariantným voči rotáciám okolo osi z . Nech v tejto sústave existuje stacionárny stav $|\psi\rangle$ s energiou E . Ukážte, že sústava má aj stacionárny stav s rovnakou energiou s nulovým priemetom momentu hybnosti na os z .
Návod: symbolom $R_z(\varphi)|\psi\rangle$ označme stav, ktorý dostaneme zo stavu $|\psi\rangle$ rotáciou o uhol φ okolo osi z . Preskúmajte stav

$$|\Phi\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi R_z(\varphi)|\psi\rangle$$

- Ukážte, že štruktúrne koeficienty grupy rotácií ε_{ijk} môžeme chápať ako generátory určitej (trojrozmernej) reprezentácie tejto grupy v tomto zmysle:
Zaveďme tri matice J_1, J_2, J_3 s maticovými elementmi

$$(J_i)_{jk} = \varepsilon_{ijk}$$

potom sa dá ukázať, že matice J_i spínajú príslušné komutačné vzťahy.

- V klasickej mechanike sa ťažisko izolovanej sústavy viacerých (interagujúcich) častíc pohybuje rovnomerne priamočiari. Sformulujte a dokážte kvantovomechanický analóg tohto tvrdenia.
Návod: Využite Ehrenfestove vety a fakt, že takáto sústava je translačne invariantná.
- Ukážte, že Maxwellove rovnice sú invariantné voči transformácii priestorovej parity danej vzťahmi (5.6).
- Helicita častice je definovaná ako priemet spinu častice do smeru jej hybnosti – po formálnej stránke je jej teda v p -priestore priradený operátor

$$h = \mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{p}}/|\mathbf{p}|$$

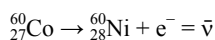
Ako sa helicita transformuje pri P -inverzii?

- Aká je „vnútorná parita“ častice s „vnútorným“ momentom hybnosti 1, ak ide v skutočnosti o viazaný stav
 - dvoch bezspinových častíc,
 - dvoch častíc so spinom $1/2$ v tripletnom stave,
 - dvoch častíc so spinom $1/2$ v singletnom stave.
- Interakciu dvoch neutrónov pri nízkych energiách možno opísať potenciálom, ktorý je skalár voči rotáciám sústavy a závisí od vzájomnej vzdialenosti $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ dvoch neutrónov, od ich spinov $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$ a od orbitálneho momentu hybnosti \mathbf{L} . Niektoré členy, ktoré by mohli prispievať k takémuto potenciálu sú

$$V_1(\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{L} V_2(\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{L} V_3(\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \mathbf{r} V_4(\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) V_5(\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) V_6(\mathbf{r})$$

Ktoré z potenciálov $V_i(\mathbf{r})$ musia byť nulové, ak sú silné interakcie invariantné voči P -inverzii?

- V klasickej experimente profesorky Wu a spolupracovníkov (prvé experimentálne potvrdenie nezachovania parity v slabých interakciách) bol študovaný rozpad jadra ${}^{60}_{27}\text{Co}$ v silnom vonkajšom magnetickom poli pri nízkej teplote. Toto jadro má spin $5/2$ a pomerne veľký magnetický moment. Nízke teploty sú potrebné na to, aby istá časť jadier bola orientovaná. Elektróny z rozpadu



vyletovali prevažne proti smeru vonkajšieho magnetického poľa. Tento fakt dokázal neinvariantnosť slabých interakcií voči priestorovej inverzii. Prečo?

14 ELEKTROMAGNETICKÉ POLE AKO SÚSTAVA OSCILÁTOROV

14.1 ÚVOD

Historicky bol prvým objaveným zákonom kvantovej fyziky Planckov vzťah pre spektrálne rozdelenie intenzity žiarenia čierneho telesa. Planck sám odvodil svoj zákon poloempirickým spôsobom, my sa už budeme opierať o vybudovaný aparát kvantovej teórie. Základná myšlienka, ktorú budeme prezentovať, pochádza od Debye, ktorý rozpracoval starší Ehrenfestov návrh.

Narazíme pritom na otázku kvantového opisu voľného elektromagnetického poľa. Tematicky táto problematika už spadá pod pojem kvantovej teórie poľa. Ukážeme si však, že konceptuálne nejde o nič nového: vystačíme s bežnými postulátmi kvantovej mechaniky, hoci aplikovanými na sústavu s nekonečným počtom stupňov voľnosti. Pretože opis elektromagnetického poľa je technicky pomerne komplikovaný, objasníme najprv základnú myšlienku na „cvičnom príklade“, na kvantovomechanickom opise kmitov pružného kontinua, konkrétne pozdĺžnych kmitov tyče. Ukážeme, že klasicky možno stav kmitajúcej tyče opísať pomocou takých „zovšeobecnených súradníc“, pre ktoré platia pohybové rovnice rovnaké ako pre systém nezávislých harmonických oscilátorov. Prechod ku kvantovomechanickému opisu je potom jednoduchý – stačí prejsť ku kvantovomechanickému opisu u tohto ekvivalentného systému oscilátorov – a to je jednoduchá úloha.

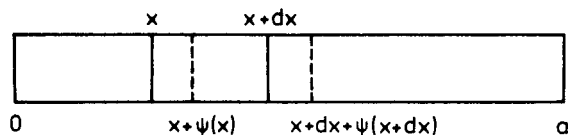
Ukážeme si tiež, že rovnaké výsledky možno dosiahnuť i formálnejším (ale menej názorným) spôsobom. Formálne sa postupuje tak, že opíšeme klasicky kmity tyče pomocou hamiltonovského formalizmu a potom použijeme silný aparát kanonického kvantovania²²⁶, pravda, s nevyhnutnými formálnymi modifikáciami zohľadňujúcimi fakt, že ide o systém s nekonečným počtom stupňov voľnosti.

V ďalšom článku uvidíme, že rovnaký postup možno použiť i v prípade elektromagnetického poľa, ktoré možno opísať ako systém nezávislých oscilátorov. Na základe takéhoto formalizmu prideme až k Planckovmu vzťahu pre žiarenie čierneho telesa.

Na viacerých miestach sa v tejto kapitole stretne s kreačnými a anihilačnými operátormi, ktoré už poznáme z opisu harmonického oscilátora. Všetky aspekty použitia takéhoto formalizmu, najmä však interpretačné otázky, sa vyjasnia až v nasledujúcej kapitole, kde zavedieme Fokov priestor a spomenieme sekundárne kvantovanie.

14.2 POZDĹŽNE KMITY TYČE. KLASICKÝ OPIS

V tomto článku si pripomenieme základné princípy lagrangeovského prístupu k opisu kmitov kontinua.



Obr. 14.1

Budeme sa zaoberať iba konkrétnym prípadom pozdĺžnych kmitov pružnej tyče dĺžky a . Označme ρ dĺžkovú hustotu tyče, S jej prierez a E modul pružnosti. Vyberme si určitý úsek tyče dĺžky dx , medzi bodmi x , $x + dx$ (obr. 14.1). Výchylku z rovnovážnej polohy v mieste x a čase t označme $\psi(x, t)$.

Kinetická energia sledovaného úseku tyče pri pohybe je potom zrejme $dT = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 dx$. Pri výchylke

²²⁶ Kanonické kvantovanie sme opisali v článku 8.5.

z rovnovážnej polohy sa úsek tyče deformuje, jeho dĺžka sa zmení z hodnoty dx na $dx' = ((x + dx) + \psi(x + dx)) - (x + \psi(x))$.

Relatívne predĺženie teda bude

$$\varepsilon = \frac{dx' - dx}{dx} = \frac{\psi(x + dx) - \psi(x)}{dx} = \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Potenciálna energia úseku dlhého dx pri relatívnom predĺžení ε je

$$dU = \frac{1}{2} SE \varepsilon^2 dx = \frac{1}{2} SE \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 dx$$

Lagrangeova funkcia bude vyjadrená ako obvykle rozdielom kinetickej a potenciálnej energie.

$$L = \int_0^a \left\{ \frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} SE \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 \right\} dx \quad (1)$$

Podintegrálny výraz sa nazýva hustotou lagrangiánu \mathcal{L} :

$$L = \int_0^a \mathcal{L} \left(\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx \quad (2)$$

Ďalší postup je opäť štandardný: použije sa variačná metóda a požaduje sa stacionárnosť účinku

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0 \quad (3)$$

Sústava má nekonečný počet stupňov voľnosti: funkcia $\psi(x, t)$ pri fixnom t reprezentuje „nekonečný počet súradníc“ (hodnoty funkcie pre všetky x). Pri variácii si treba uvedomiť, že hľadáme závislosti od času; v tomto kontexte je x vo funkcii $\psi(x, t)$ parametrom označujúcim bod kontinua, ktorého časový opis sledujeme. Názonejšie by možno bolo označenie $\psi_x(t)$. Variácia $\delta\psi(x, t)$ potom bude značiť zmenu funkčného predpisu závislosti od času pri zvolenom x . Variácie robíme za obvyklých podmienok, t. j. stavy v čase t_1 a t_2 sa predpokladajú dané preto

$$\delta\psi(x, t_1) = \delta\psi(x, t_2) = 0 \quad (4)$$

Pri okrajových podmienkach pripustíme aj riešenia s

$$\delta\psi(0, t) \neq 0 \quad (5)$$

$$\delta\psi(a, t) \neq 0 \quad (6)$$

Pri variácii hustoty lagrangiánu dostaneme (symbolom $\dot{\psi}$ označujeme $\partial\psi/\partial t$):

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta\psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta\dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \delta \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (7)$$

Ďalej využijeme vzťahy

$$\delta\dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t} \delta\psi \quad \delta \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \delta\psi \quad (8)$$

ktoré sú vlastne definíciou $\delta\dot{\psi}$ a $\delta(\partial\psi/\partial t)$ pri zámene $\psi \rightarrow \psi + \delta\psi$. Výraz, ktorý získame dosadením (8) do (7) upravíme ešte s využitím vzťahov

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \frac{\partial}{\partial t} \delta\psi = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta\psi \right] - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) \cdot \delta\psi \quad (9a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \delta \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \delta \psi \right] - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \cdot \delta \psi \quad (9b)$$

Po dosadení do výrazu pre variáciu účinku prvé členy na pravých stranách vzťahov (9a) a (9b) vypadnú vzhľadom na (5), (4), (6). Z rovnice (3) takto máme

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^a dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} \right] \delta \psi = 0 \quad (10)$$

Vzhľadom na to, že pri extrémnej účinku musí platiť (10) pri ľubovoľnom $\delta \psi$, dostávame odtiaľ Eulerovu-Lagrangeovu pohybovú rovnicu

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0 \quad (11)$$

Po dosadení dostaneme pre náš konkrétny lagrangián (1) pohybovú rovnicu

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{ES}{\rho} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0 \quad (12)$$

čo je vlnová rovnica, opisujúca vlnenie šíriace sa s fázovou rýchlosťou v :

$$v^2 = \frac{ES}{\rho} \quad (13)$$

V klasickej mechanike sústav s konečným počtom stupňov voľnosti je lagrangián funkciou súradníc q_1, \dots, q_n a ich časových derivácií $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n$.

Hybnosť kanonicky združenú k súradnici q_i definujeme vzťahom

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (14)$$

a hamiltonián sústavy zavádzame ako

$$H = \sum p_i \dot{q}_i - L \quad (15)$$

V prípade kontinua máme spojito nekonečnú množinu „súradníc“ $\psi(x)$ pre všetky x z intervalu $(0, a)$. Podobne spojito nekonečná bude aj množina hybností kanonicky združená k týmto súradniciam. Hybnosť $\pi(x)$ potom nazývame hustotou hybnosti a definujeme ju vzťahom²²⁷

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}(x)} \quad (16)$$

V našom prípade

$$\pi(x) = \rho \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Hustotu hamiltoniánu potom definujeme vzťahom, ktorý je zovšeobecnením (15)

$$\mathcal{H} = \pi(x) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathcal{L} \quad (17)$$

²²⁷ Na prvý pohľad snáď nevidno, že (16) je prirodzeným zovšeobecnením (14). Pekný a presvedčivý spôsob ako sa o tom presvedčiť spočíva v rozbití celého priestoru na malé objemové elementy ΔV , čím prideme k diskretným „súradniciam“. Postup je použitý napr. v známej Schiffovej učebnici [8].

Pre hamiltonián sústavy máme

$$H = \int_0^a \mathcal{H} dx = \int_0^a \left[\pi(x) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathcal{L} \right] dx \quad (18)$$

14.3 KMITY TYČE AKO SÚSTAVA OSCILÁTOROV

Od klasického lagrangeovského formalizmu predchádzajúceho článku by sme teraz mohli prejsť ku kvantovému opisu pozdĺžnych kmitov tyče pomocou kanonického kvantovania. Zatiaľ to neurobíme, ku kvantovému opisu sa dostaneme názornejšou a z hľadiska interpretácie užitočnou cestou tak, že najprv vyjadríme kmity tyče pomocou iných súradníc, v ktorých je problém ekvivalentný sústave nezávislých oscilátorov.

V predchádzajúcom článku sme (klasický) stav tyče reprezentovali pomocou výchylky $\psi(x, t)$ každého *dĺžkového elementu* tyče. Nevýhodou tohto zavedenia súradníc je to, že susedné elementy tyče sa vzájomne ovplyvňujú, čo je vyjadrené tým, že v rovniciach vystupuje $d\psi/dx$. Keby sme prešli k diskretným premenným tak, že by sme uvažovali úseky tyče malej, ale konečnej dĺžky, dostali by sme pre tieto úseky systém pohybových rovníc rovnaký ako pre sústavu viazaných oscilátorov. Pre každý takýto systém sa dá prejsť k novým zovšeobecneným súradniciam, vzhľadom na ktoré už dostaneme pohybové rovnice nezávislých oscilátorov.²²⁸ Voľba vhodných súradníc je v našom prípade intuitívne zrejma: treba rozložiť výchylku $\psi(x, t)$ do úplného systému funkcií opisujúcich stacionárne vlastné kmity tyče. Z teórie Fourierových radov je známe, že „ľubovoľnú“ funkciu možno vyjadriť v tvare

$$\psi(x) = A_0 \frac{1}{\sqrt{a}} + \sum_k A_k \sqrt{\frac{2}{a}} \cos kx + \sum_k B_k \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx \quad (1)$$

kde k môže nadobúdať iba hodnoty dané periodickými okrajovými podmienkami

$$k = \frac{2\pi}{a} n \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1a)$$

Pri každom k by sme mali písať aj index n , ale budeme ho vynechávať a sumovanie v (1) bude označovať sumu cez hodnoty k povolené podmienkou (1a). Koeficienty A_0, A_k, B_k potom jednoznačne určujú funkciu $\psi(x)$ a môžeme ich chápať ako nové „súradnice“ pre opis klasického stavu tyče. Časová závislosť funkcie $\psi(x, t)$ potom bude reprezentovaná ako časová závislosť týchto koeficientov. Všimnime si ešte fyzikálny význam prvého člena v rozvoji (1). Je to člen nezávislý od x , reprezentuje homogénne posunutie tyče, teda posunutie tyče ako celku. Tento pohyb nás teraz nezaujíma, preto člen pre A_0 budeme v ďalšom vynechávať. Budeme teda pracovať iba s funkciami, pre ktoré platí

$$\int_0^a \psi(x) dx = 0 \quad (2)$$

t. j. reprezentujúcimi také výchylky, ktoré nemia polohu ťažiska tyče.

Pohybové rovnice pre $A_k(t), B_k(t)$ nájdeme ľahko, ak vyjadríme hamiltonián (2.18) pomocou týchto premenných. Po dosadení z (1) do (2.18) dostaneme²²⁹ (už pre prípad $A_0 = 0$)

$$H = \sum_k \left\{ \frac{1}{2} \rho \dot{A}_k^2 + \frac{1}{2} \rho v^2 k^2 A_k^2 \right\} + \sum_k \left\{ \frac{1}{2} \rho \dot{B}_k^2 + \frac{1}{2} \rho v^2 k^2 B_k^2 \right\} \quad (3)$$

kde bodka značí deriváciu podľa času.

Na pravej strane je skutočne súčet výrazov, ktoré sú presne rovnaké ako vyjadrenia pre energiu lineárneho harmonického oscilátora. Ako je dobre známe, energia takéhoto oscilátora kmitajúceho s kruhovou frekvenciou ω je

$$H_{\text{osc}} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (4a)$$

²²⁸ Pozri napr. L. D. Landau – E. M. Lifšic: *Mechanika*. Nauka, Moskva 1973, § 23.

²²⁹ Technicky je úprava vzťahov jednoduchá a využíva ortonormálnosť systému harmonických funkcií.

Výrazy na pravej strane (3) majú presne túto štruktúru. Ak vyberieme jeden z členov, napríklad

$$H(A_k, \dot{A}_k) = \frac{1}{2} \rho \dot{A}_k^2 + \frac{1}{2} \rho v^2 k^2 A_k^2 \quad (4b)$$

vidíme, že (4b) odpovedá oscilátoru kmitajúceho s kruhovou frekvenciou

$$\omega_k = vk \quad (4c)$$

Zo vzťahu (3) je tiež zrejmé, že oscilátory sú navzájom nezávislé. Znamená to, že jednotlivé harmonické kmity tyče sa navzájom neovplyvňujú a môžeme ich vybudiť nezávisle na sebe. Prechod do k -priestoru teda podstatne zjednodušil úlohu. Jedinou hodnotou k zodpovedá v x -priestore kolektívny pohyb elementov tyče, vytvárajúci stojatú vlnu.

Vyjadrenie (3) nám aj naznačuje ako máme kvantovať sústavu. Ako súradnicu oscilátora (4b) vyberieme A_k a príslušná hybnosť podľa analógie s oscilátorom (4a) bude

$$\mathfrak{P}_k = \rho \dot{A}_k \quad (5)$$

Pomocou súradnice A_k a hybnosti \mathfrak{P}_k prepíšeme hamiltonián (4b) do tvaru

$$H(A_k, \mathfrak{P}_k) = \frac{1}{2\rho} \mathfrak{P}_k^2 + \frac{1}{2} \rho \omega_k^2 A_k^2 \quad (6)$$

Pri prechode do kvantovej mechaniky sa A_k, \mathfrak{P}_k stanú operátormi a budú spĺňať komutačný vzťah

$$[A_k, \mathfrak{P}_k] = i\hbar \quad (7)$$

ktorý je presným analógom komutačného vzťahu

$$[x, p] = i\hbar \quad (7')$$

pre súradnicu a hybnosť lineárneho harmonického oscilátora (4a).

Podobne ako v (5) môžeme zaviesť aj hybnosť kanonicky združenú so súradnicou B_k :

$$\mathfrak{B}_k = \rho \dot{B}_k$$

Príslušný hamiltonián bude analógom (6) a pri prechode do kvantovej mechaniky sa B_k, \mathfrak{B}_k stanú operátormi a budú spĺňať vzťah analogický k (7). Vzhľadom na to, že jednotlivé oscilátory vystupujúce v (3) sú nezávislé, budú operátory súvisiace s rôznymi oscilátormi navzájom komutovať. Preto dostávame systém komutačných vzťahov

$$\begin{aligned} [A_k, A_{k'}] &= [B_k, B_{k'}] = [\mathfrak{P}_k, \mathfrak{P}_{k'}] = [\mathfrak{B}_k, \mathfrak{B}_{k'}] = 0 \\ [A_k, \mathfrak{B}_{k'}] &= i\hbar \delta_{kk'}, \quad [B_k, \mathfrak{P}_{k'}] = i\hbar \delta_{kk'} \\ [A_k, B_{k'}] &= [A_k, \mathfrak{P}_{k'}] = [B_k, \mathfrak{B}_{k'}] = [\mathfrak{P}_k, \mathfrak{B}_{k'}] = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Možné hodnoty energie sústavy danej v rámci kvantovej mechaniky vzťahmi (3) a (8) poznáme aj bez výpočtu. Je to totiž sústava nezávislých oscilátorov kmitajúcich s kruhovými frekvenciami (4c) a celková energia preto bude

$$E(n_{A1}, n_{B1}, \dots, n_{Ak}, n_{Bk}, \dots) = \sum_k \left\{ \hbar \omega_k \left(n_{Ak} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_k \left(n_{Bk} + \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (9)$$

Energia pritom závisí od „obsadzovacích čísel“ n_{Ak}, n_{Bk} jednotlivých oscilátorov. Tieto čísla určujú, v ktorom kvantovom stave sa oscilátor nachádza.

Vzťah (9) ukazuje hneď jednu typickú črtu kvantovania sústav s nekonečným počtom stupňov voľnosti. Ak totiž položíme všetky $n_{Ak} = n_{Bk} = 0$, dostaneme z (9)

$$E(0, \dots, 0, \dots) = \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_k = \frac{1}{2} \sum_k \hbar vk$$

čo je divergentný (nekonečný) výraz.

Dôvod je jednoduchý. Každý oscilátor má svoju energiu základného stavu, nazývanú – poeticky, ale nie celkom presne – aj energiou nulových kmitov. Táto energia je práve $\hbar\omega/2$. Ak máme v sústave nekonečný počet oscilátorov, je táto energia daná divergentným výrazom. Fyzikálne to ale nie je tragédia, lebo energia sústavy je vždy určená až na aditívnu konštantu. Preto môžeme túto energiu nulových kmitov od celkovej energie odčítať a zbaviť sa tak členov s $1/2$ v (9).

Pozrime sa teraz na otázku kanonického kvantovania v prípade kontinua. Výsledok – kvantovú formuláciu už poznáme. Pokúsime sa nájsť ako sa k nemu dopracovať priamo z klasického lagrangeovského formalizmu, bez „medzikroku“ cez systém oscilátorov.

V kvantovej formulácii sú výchylke $\psi(x)$ i hustote hybnosti $\pi(x)$ (pozri (2.16)) priradené operátory. Podľa (1), (2.16) a (5) dostaneme

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_k A_k \sqrt{\frac{2}{a}} \cos kx + \sum_k B_k \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx \\ \pi(x') &= \sum_k \hat{p}_k \sqrt{\frac{2}{a}} \cos kx' + \sum_k \hat{q}_k \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx'\end{aligned}\quad (10)$$

Pomocou (8) sa možno presvedčiť, že je splnený komutačný vzťah

$$[\pi(x), \psi(x')] = i\hbar \sum_k \left(\frac{2}{a} \cos kx \cdot \cos kx' + \frac{2}{a} \sin kx \cdot \sin kx' \right)$$

Výraz na pravej strane je špeciálnym prípadom súčtu typu

$$\sum_n \Phi_n(x)\Phi_n(x')$$

kde $\{\Phi_n\}$ tvorí úplný ortonormovaný systém.²³⁰ Podľa kap. 7 je tento výraz rovný $\delta(x - x')$. Takto máme

$$[\psi(x), \pi(x')] = i\hbar \delta(x - x') \quad (11)$$

Vzťah (11) je analógom kanonického komutačného pravidla typu²³¹

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

pre prípad kontinua.

Pri kanonickom kvantovaní kontinua sa teda dá postupovať tak, že vychádzajúc z klasického hamiltoniánu nahradíme v ňom pole²³² $\psi(x)$ i k nemu kanonicky združenú hustotu hybnosti operátormi a definičtoricky požadujeme splnenie podmienky (11). Potom prípadne môžeme urobiť rozvoj typu (10) a na základe (11) odvodiť komutačné vzťahy (8).

Postup cez kanonický formalizmus má všeobecnejší charakter, môžeme ho aplikovať na ľubovoľnú teóriu poľa, kým nahradenie dynamiky pomocou systému nezávislých oscilátorov sa podarí len pre systém s lagrangianom kvadratickým v poliach.

Napokon ešte prepíšeme operátor poľa (v našom prípade vlastne operátor posunutia) $\psi(x)$ na iné, častejšie používané, vyjadrenie. Toto nové vyjadrenie bude mať dve vlastnosti: namiesto rozkladu do „stojatých“ vln typu $\sin kx$, resp. $\cos kx$ bude teraz $\psi(x)$ rozložené do „bežiacich vln“ $\exp(ikx)$, $\exp(-ikx)$ a vo vzťahu k jednotlivým oscilátorom bude používať nie súradnicu a hybnosť, ale príslušné kreačné a anihilačné operátory.

Ako je známe z teórie lineárneho harmonického oscilátora s hamiltoniánom (4a), je užitočné zaviesť kreačné a anihilačné operátory a , a^+ vzťahmi (pozri článok 10.7)

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \quad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad (12)$$

²³⁰ Ide, pravdaže o úplný systém na priestore funkcií spĺňajúcich podmienku (2). Vzťah (11) striktné vzaté, platí iba vtedy, ak dôsledne kvantujeme aj translačný pohyb tyče ako celku, potom sa v (10) objavajú aj členy A_0/\sqrt{a} , B_0/\sqrt{a} . Touto otázkou sa podrobnejšie nebudeme zaoberať.

²³¹ Pozri poznámku pod čiarou pred rovnicou (15) predchádzajúceho článku.

²³² Veličinám typu $\psi(x)$ sa zvykne hovoriť polia.

Tieto vzťahy možno jednoducho obrátiť

$$\mathbf{x} = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^+), \quad \mathbf{p} = i \left(\frac{\hbar m \omega}{2} \right)^{1/2} (\mathbf{a}^+ - \mathbf{a}) \quad (13)$$

Pripomeňme si tiež, že operátory \mathbf{a} , \mathbf{a}^+ spĺňajú komutačný vzťah

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] = \mathbf{1} \quad (14)$$

a hamiltonián (4a) možno pomocou nich prepísať na tvar

$$H_{\text{osc}} = \hbar\omega \left(\mathbf{a}^+ \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (15)$$

Vďaka komutačnému pravidlu (14) má operátor $\mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a}$ vlastné hodnoty $0, 1, 2, \dots$

V analógii k (13) zavedme anihilačné a kreačné operátory pre jednotlivé oscilátory opísané súradnicami \mathbf{A}_k , resp. \mathbf{B}_k .

Z porovnania rovníc (3), (4a) a (6) vidno, že analógom operátorov \mathbf{a} , \mathbf{a}^+ budú $\boldsymbol{\alpha}_k$, $\boldsymbol{\alpha}_k^+$, $\boldsymbol{\beta}_k$, $\boldsymbol{\beta}_k^+$.

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_k &= \left(\frac{\hbar}{2\rho v k} \right)^{1/2} (\boldsymbol{\alpha}_k + \boldsymbol{\alpha}_k^+), & \mathbf{B}_k &= \left(\frac{\hbar}{2\rho v k} \right)^{1/2} (\boldsymbol{\beta}_k + \boldsymbol{\beta}_k^+) \\ \hat{p}_k &= \left(\frac{\hbar \rho v k}{2} \right)^{1/2} (\boldsymbol{\alpha}_k - \boldsymbol{\alpha}_k^+), & \hat{p}_k &= i \left(\frac{\hbar \rho v k}{2} \right)^{1/2} (\boldsymbol{\beta}_k - \boldsymbol{\beta}_k^+) \end{aligned} \quad (16)$$

Pričom komutačné vzťahy (8) vedú k tomu, že platí

$$[\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k^+] = \delta_{kk}, \quad [\boldsymbol{\beta}_k, \boldsymbol{\beta}_k^+] = \delta_{kk} \quad (17)$$

a ostatné komutátory sú nulové.

Teraz ideme postupne prepísať vyjadrenie $\psi(x)$ pomocou kreačných a anihilačných operátorov.

V prvom kroku vyjadríme funkcie $\cos(kx)$ a $\sin(kx)$ a (10) pomocou $\exp(ikx)$ a $\exp(-ikx)$. Po tejto jednoduchej úprave dostaneme

$$\psi(x) = \sum_{k>0} \frac{1}{\sqrt{2a}} \{ [\mathbf{A}_k - i\mathbf{B}_k] e^{ikx} + [\mathbf{A}_k + i\mathbf{B}_k] e^{-ikx} \} \quad (18)$$

pričom sme zase vynechali nulový mód a obmedzili sme sa tým iba na kmity odpovedajúce neposunutému hmotnému stredu. Vyznačili sme tiež explicitne to, že sčítujeme iba cez kladné hodnoty k . Podľa vzťahov (16) teraz vyjadríme \mathbf{A}_k , \mathbf{B}_k pomocou operátorov $\boldsymbol{\alpha}_k$, $\boldsymbol{\alpha}_k^+$, $\boldsymbol{\beta}_k$, $\boldsymbol{\beta}_k^+$. Dostaneme tak

$$\psi(x) = \sum_{k>0} \left(\frac{\hbar}{2\rho 2\rho v k} \right)^{1/2} \{ [\boldsymbol{\alpha}_k + \boldsymbol{\alpha}_k^+ - i\boldsymbol{\beta}_k - i\boldsymbol{\beta}_k^+] e^{ikx} + [\boldsymbol{\alpha}_k + \boldsymbol{\alpha}_k^+ + i\boldsymbol{\beta}_k + i\boldsymbol{\beta}_k^+] e^{-ikx} \}$$

Definujme nové operátory

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\alpha}_k - i\boldsymbol{\beta}_k) &= \mathbf{a}_k & \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\alpha}_k^+ + i\boldsymbol{\beta}_k^+) &= \mathbf{a}_k^+ \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\alpha}_k + i\boldsymbol{\beta}_k) &= \mathbf{a}_{-k} & \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\alpha}_k^+ - i\boldsymbol{\beta}_k^+) &= \mathbf{a}_{-k}^+ \end{aligned} \quad (19)$$

a prepíšme $\psi(x)$ do tvaru

$$\psi(x) = \sum_{k>0} \left(\frac{\hbar}{2\rho 2\rho v k} \right)^{1/2} \{ (\mathbf{a}_k + \mathbf{a}_{-k}^+) e^{ikx} + (\mathbf{a}_{-k} + \mathbf{a}_k^+) e^{-ikx} \}$$

V tomto výraze celý súčet rozdelíme na dva členy

$$\psi(x) = \sum_{k>0} \left(\frac{\hbar}{2\rho 2\rho v k} \right)^{1/2} [\mathbf{a}_k e^{ikx} + \mathbf{a}_k^+ e^{-ikx}] + \sum_{k>0} \left(\frac{\hbar}{2\rho 2\rho v k} \right)^{1/2} [\mathbf{a}_{-k} e^{-ikx} + \mathbf{a}_{-k}^+ e^{ikx}]$$

a v druhom člene urobíme zámenu $k \rightarrow -k$. Takto máme

$$\psi(x) = \sum_k \left(\frac{\hbar}{2a\rho v |k|} \right)^{1/2} [\mathbf{a}_k e^{ikx} + \mathbf{a}_k^+ e^{-ikx}] \quad (20)$$

pričom sčítujeme už cez všetky, t. j. kladné i záporné hodnoty k . Vzťah je užitočný preto, že nové operátory $\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_k^+$ sú tiež kreačnými a anihilačnými operátormi. Vyplýva to z vyjadrenia (19) a z komutačných vzťahov (17). Ľahko sa totiž presvedčíme o tom, že platí

$$[\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_{k'}^+] = \delta_{kk'} \quad [\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_{k'}] = 0 \quad [\mathbf{a}_k^+, \mathbf{a}_{k'}^+] = 0 \quad (21)$$

pre všetky k , teda pre kladné i záporné. Odporúčame čitateľovi, aby tieto vzťahy explicitne preveril.

Ľahko sa presvedčíme tiež o dvoch nasledujúcich dôležitých veciach:

Po prvé, v pôvodných kreačných a anihilačných operátoroch mal hamiltonián celej sústavy tvar

$$\mathbf{H} = \sum_{k>0} \hbar\rho k \left(\boldsymbol{\alpha}_k^+ \boldsymbol{\alpha}_k + \frac{1}{2} \right) + \sum_{k>0} \hbar\rho k \left(\boldsymbol{\beta}_k^+ \boldsymbol{\beta}_k + \frac{1}{2} \right) \quad (22)$$

pričom sa sčítavalo len cez kladné hodnoty k . Ak tu vyjadríme $\boldsymbol{\alpha}_k^+, \boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\beta}_k^+, \boldsymbol{\beta}_k$ pomocou operátorov $\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_k^+$ použitím vzťahu (19) dostaneme

$$\mathbf{H} = \sum_k \hbar\rho |k| \left(\mathbf{a}_k^+ \mathbf{a}_k + \frac{1}{2} \right) = \sum_k \hbar\omega_k \left(\mathbf{a}_k^+ \mathbf{a}_k + \frac{1}{2} \right) \quad (23)$$

pričom už sčítujeme cez všetky hodnoty k .

Po druhé, fyzikálny význam operátorov $\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k^+, \boldsymbol{\beta}_k, \boldsymbol{\beta}_k^+$ je jasný z ich zavedenia. Operátor $\boldsymbol{\alpha}_k^+$ je kreačným operátorom pre jedno kvantum s energiou $\hbar\omega_k = \hbar vk$ a v súradnicovej reprezentácii mu odpovedá vlnová funkcia úmerná $\cos(kx)$ lebo táto súvisí s daným typom kmitu.

Pýtame sa teraz na to, aký je fyzikálny význam operátora \mathbf{a}_k^+ . Intuitívne očakávame, že vďaka vzťahu

$$\mathbf{a}_k^+ = \boldsymbol{\alpha}_k^+ + i\boldsymbol{\beta}_k^+$$

bude tento operátor kreaovať superpozíciu kmitov odpovedajúcich superpozícii vlnovej funkcie typu $\cos(kx)$ kreovanej operátormi $\boldsymbol{\alpha}_k^+$ a vlnovej funkcie $\sin(kx)$ kreovanej operátorom $\boldsymbol{\beta}_k^+$. Pretože $\cos(kx) + i \sin(kx) = \exp(ikx)$, bude operátor \mathbf{a}_k^+ kreačným operátorom pre kvantum energie s vlnovou funkciou $\sim \exp(ikx)$.

Hovoríme aj, že ide o kvázičasticu – fonón. „Časticový“ charakter stavu $\mathbf{a}_k^+|0\rangle$, kde $|0\rangle$ je základný stav kontinua bude zrejmejší až v nasledujúcej kapitole, kde ukážeme, že na opis mnohočasticových stavov môžeme použiť po formálnej stránke rovnaký aparát.

Doteraz sme sa pri kvantovom opise kontinua zaujímali o jediný časový okamih. Ak chceme opísať časový vývoj, musíme vybrať niektorý z tzv. obrazov.

V Schrödingerovom obraze operátory nezávisia od času a časová závislosť je len vo vlnových funkciách. V Heisenbergovom obraze operátory závisia od času a ich časová závislosť je daná vzťahom

$$\dot{\mathbf{C}} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{C}] \quad (24)$$

kde \mathbf{C} je ľubovoľný operátor. Pozrime sa teraz na časovú závislosť operátorov $\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_k^+$. Vyberme napríklad operátor \mathbf{a}_q . Ak do (24) za \mathbf{C} dosadíme \mathbf{a}_q , za \mathbf{H} dosadíme (23) a využijeme to, že \mathbf{a}_q komutuje s $\mathbf{a}_k^+ \mathbf{a}_k$

pre $k \neq q$ dostaneme

$$\dot{\mathbf{a}}_q = \frac{i\omega_q}{\hbar} [\mathbf{a}_q^+ \mathbf{a}_q, \mathbf{a}_q] = -i\omega_q \mathbf{a}_q \quad (25)$$

Odtiaľ máme

$$\mathbf{a}_q(t) = e^{-i\omega_q t} \mathbf{a}_q(0) \equiv e^{-i\omega_q t} \mathbf{a}_q \quad (26a)$$

Podobne by sme pre $\mathbf{a}_q^+(t)$ dostali

$$\mathbf{a}_q^+(t) = e^{-i\omega_q t} \mathbf{a}_q^+ \quad (26b)$$

Zhrňme teda na záver: kvantový opis kontinua vychádza z tých istých princípov ako kvantovanie sústav s konečným počtom stupňov voľnosti. Ak lagrangián sústavy je kvadratický výraz z polí a ich derivácií, dá sa úloha upraviť na jednoduchý problém kvantovania sústavy nezávislých oscilátorov.

14.4 ELEKTROMAGNETICKÉ POLE AKO SÚSTAVA OSCILÁTOROV

V tomto článku si ukážeme, že na voľné elektromagnetické pole sa môžeme tiež pozerat' ako na sústavu nezávislých oscilátorov. Veci budú z technickej stránky trochu komplikovanejšie ako v predchádzajúcom článku, ale základná myšlienka bude rovnaká: potenciály poľa rozložíme do úplnej sústavy „nezávislých kmitov“ a ukážeme, že do výrazu pre celkovú energiu elektromagnetického (ďalej často len EM) poľa vstúpi tieto koeficienty ako súradnice nezávislých lineárnych harmonických oscilátorov.

Kvôli zjednodušeniu odvolávok zhrňme tu najprv základné vzťahy pre EM pole.

V bežnom označení je pole budené prúdom \mathbf{j} a hustotou náboja ρ dané Maxwellovými rovnicami

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{j} \quad (2)$$

Vo vákuu platí

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (3)$$

kde $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{C}^2 \text{N}^{-1} \text{m}^{-2}$ a $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{kgmC}^{-2} = 1,257 \cdot 10^{-6} \text{kgmC}^{-2}$. Rýchlosť svetla vo vákuu je

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \doteq 3 \cdot 10^8 \text{ms}^{-1} \quad (4)$$

Prvé dve Maxwellove rovnice (1) sú automaticky splnené ak \mathbf{E} , \mathbf{B} vyjadríme pomocou potenciálov \mathbf{A} , φ nasledovne

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5)$$

Ak (5) dosadíme do Maxwellových rovníc (2) dostaneme rovnice

$$-\square \varphi + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho \quad (6)$$

$$-\square \mathbf{A} + \nabla \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = \mu_0 \mathbf{j} \quad (7)$$

kde \square je D'Alambertov operátor $\square = (1/c^2) \partial^2 / \partial t^2 - \Delta$. Potenciály \mathbf{A} , φ nie sú dané jednoznačne

intenzitami \mathbf{E} , \mathbf{B} . Transformácia

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (8)$$

kde $\Lambda = \Lambda(\mathbf{r}, t)$ je ľubovoľná skalárna funkcia, nemení \mathbf{E} , \mathbf{B} . V učebniciach teórie EM poľa sa ukazuje, že funkciu $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ možno vždy vybrať tak, aby platila *Lorentzova podmienka*

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (9)$$

ktorá podstatne zjednodušuje rovnice (6) a (7). Pre voľné EM pole, t. j. pole pri nulovom ρ i \mathbf{j} možno vybrať funkciu $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ dokonca tak, aby platilo (9) a navyše aby $\varphi(\mathbf{r}, t) = 0$.

Pre voľné EM pole teda máme

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (10)$$

kde pole \mathbf{A} spĺňa pohybovú rovnicu

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} + \Delta \mathbf{A} = 0 \quad (11)$$

a dodatočnú podmienku

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (12)$$

Celková energia EM poľa v objeme V je daná výrazom

$$H = \int_V dV \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) \quad (13)$$

kde podintegrálna funkcia reprezentuje hustotu energie.

Ukážeme si teraz, že voľné EM pole je po formálnej stránke ekvivalentné systému nezávislých oscilátorov. Pomocou vzťahov (10) prepíšeme H do tvaru

$$H = \int_V dV \left[\frac{1}{2} \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (14)$$

Potenciál $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ rozložíme do radu

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} q_{\alpha}(t) \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (15)$$

kde index α zahŕňa trojicu indexov $\alpha = (\mathbf{k}, i, j)$ a funkcie $\mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{r})$ majú tvar

$$A_{(\mathbf{k}, i, 1)} = \sqrt{\frac{2}{V \varepsilon_0}} \mathbf{e}_i \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

$$A_{(\mathbf{k}, i, 2)} = \sqrt{\frac{2}{V \varepsilon_0}} \mathbf{e}_i \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (16)$$

stavom s $\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ v (16) neodpovedajú nezávislé stavy.

Index i môže nadobúdať dve hodnoty $i = 1, 2$ a každej z nich prislúcha jednotkový polarizačný vektor \mathbf{e}_i . Vektory polarizácie môžu byť iba dva, pretože v dôsledku podmienky (12) a lineárnej nezávislosti funkcií v (16) musí \mathbf{e}_i spĺňať požiadavku $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{k} = 0$. Pre dané \mathbf{k} vyberieme $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ ako dva jednotkové vektory kolmé na \mathbf{k} i na seba navzájom.

Podobne ako v predchádzajúcom článku budú vlnové vektory \mathbf{k} také, aby bola splnená podmienka periodickosti, t. j. pre \mathbf{A} platí $\mathbf{A}(x + L, y, z) = \mathbf{A}(x, y, z)$ a podobne pre ostatné zložky polohového vektora \mathbf{r} . Pri tomto výbere môžu zložky \mathbf{k} nadobúdať iba hodnoty

$$\mathbf{k}_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad n_i = \text{celé číslo} \quad (17)$$

a funkcie

$$\sqrt{\frac{2}{V}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad \sqrt{\frac{2}{V}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

tvoria úplný ortonormovaný systém funkcií v objeme V , pod ktorým si predstavíme kocku s hranou L . Faktor $1/\varepsilon_0$ sme do funkcií (16) pridali kvôli zjednodušeniu niektorých výrazov v ďalšom.

Pred tým, ako by sme dosadzovali (15) do (14) je užitočné presvedčiť sa o tom, že platí

$$\int_V \mathbf{A}_\alpha(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_\beta(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{\varepsilon_0} \delta_{\alpha\beta} \quad (18)$$

kde pre $\alpha \equiv (\mathbf{k}, i, j)$, $\beta = (\mathbf{k}', i', j')$ je symbol $\delta_{\alpha\beta}$ definovaný vzťahom

$$\delta_{\alpha\beta} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{i, i'} \delta_{j, j'}$$

Pomocou vzťahu (18) vypočítame rýchlo integrál z prvého člena v hranatej zátvorke v (14). Na výpočet integrálu z druhého člena budeme potrebovať integrály

$$I_{\alpha\beta} = \int_V (\nabla \times \mathbf{A}_\alpha(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_\beta(\mathbf{r})) dV \quad (19)$$

Výraz pod integrálom najprv upravíme pomocou vzťahov známych z vektorovej analýzy²³³

$$(\nabla \times \mathbf{A}_\alpha) \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_\beta) = \nabla \cdot [\mathbf{A}_\alpha \times (\nabla \times \mathbf{A}_\beta)] + \mathbf{A}_\alpha \cdot [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}_\beta)]$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}_\beta) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}_\beta) - \nabla^2 \mathbf{A}_\beta$$

na tvar

$$(\nabla \times \mathbf{A}_\alpha) \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_\beta) = \nabla \cdot [\mathbf{A}_\alpha \times (\nabla \times \mathbf{A}_\beta)] + \mathbf{A}_\alpha \cdot \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}_\beta) - \mathbf{A}_\alpha \cdot \nabla^2 \mathbf{A}_\beta \quad (20)$$

Pri integrovaní cez objem V bude sa integrál z prvého člena na pravej strane (20) rovnať nule, možno ho totiž Gaussovou vetou previesť na integrál po povrchu objemu V a tento integrál bude nulový v dôsledku periodičnosti funkcií \mathbf{A}_α , \mathbf{A}_β . Druhý člen na pravej strane (20) dá tiež nulu, lebo pre funkcie \mathbf{A}_α , \mathbf{A}_β platí podmienka (12) a $\nabla \cdot \mathbf{A}_\beta = 0$. Pri integráli z ostatného člena na pravej strane si najprv treba všimnúť, že podľa (16) pre každú z funkcií \mathbf{A} platí

$$\nabla^2 \mathbf{A}_\alpha = -k^2 \mathbf{A}_\alpha$$

Takto dostaneme

$$\int_V (\nabla \times \mathbf{A}_\alpha) \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_\beta) dV = k^2 \int_V \mathbf{A}_\alpha \cdot \mathbf{A}_\beta dV$$

Tým sme problém upravili na prípad (18) a máme

$$I_{\alpha\beta} = \int_V (\nabla \times \mathbf{A}_\alpha) \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_\beta) dV = \frac{k^2}{\varepsilon_0} \delta_{\alpha\beta} \quad (21)$$

Teraz už máme všetko pripravené pre to, čo sa chystáme urobiť. Dosadíme rozklad (15) do (14), využijeme (18) a (21) a dostaneme

$$H = \sum_\alpha \frac{1}{2} (\dot{q}_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 q_\alpha^2), \quad \omega_\alpha = kc \quad (22)$$

čím sme naozaj vyjadrili energiu EM poľa v objeme V ako súčet energií klasických oscilátorov. Pretože vieme, aký je vzťah medzi lagrangianom a hamiltonianom oscilátora, môžeme napísať rovno lagrangian celej sústavy:

$$L = \sum_\alpha \frac{1}{2} (\dot{q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 q_\alpha^2) \quad (23)$$

Vidíme tiež, že lagrangian dostaneme zmenou znamienka pri druhom člene, čo odpovedá zmene

²³³ O správnosti takýchto a podobných vzťahov sa najjednoduchšie presvedčíme tak, že všetky vektorové súčiny (vrátane rotácií) rozpiseme pomocou úplne antisymetrického tenzora ε_{ijk} a využijeme potom známe vzťahy pre $\sum_i \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn}$ a pod.

znamienka pri druhom člene v kvantovej zátvorke v (14) a to zas odpovedá zmene znamienka pri druhom člene v (13). Teda lagrangián EM poľa v objeme V je

$$H = \int_V \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 - \mu_0 \mathbf{H}^2) dV = \int_V \left[\frac{1}{2} \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] dV \quad (24)$$

pričom ostatná rovnosť platí prirodzene iba v kalibrácii s $\varphi = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, ktorú tu používame. Pri formálnom budovaní teórie EM poľa sa často vychádza z (24) a Maxwellove rovnice dostávame ako Eulerove-Lagrangeove rovnice tohto systému, podobne ako sme to podrobnejšie prediskutovali v predchádzajúcom článku pre pozdĺžne kmity tyče. Tu sa tým ale zaoberať nebudeme a vrátíme sa k nezávislým oscilátorom v (22) a (23).

Klasická pohybová rovnica pre súradnicu oscilátora sa rýchlo dostane z (23). Všeobecne platí

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = + \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}$$

a v našom prípade máme odtiaľ

$$\ddot{q}_\alpha = -\omega_\alpha^2 q_\alpha \quad (25)$$

čo je dobre známa pohybová rovnica pre harmonický oscilátor. Mohli by sme ju dostať aj priamo dosadením rozkladu (15) do (11) a využitím lineárnej nezávislosti funkcií $\mathbf{A}_\alpha(\mathbf{r})$.

Doteraz sme hovorili iba o klasickej teórii. Ak však máme klasický systém vyjadrený ako systém skladajúci sa z nezávislých lineárnych harmonických oscilátorov môžeme ho rýchlo opísať pomocou kvantovej mechaniky. Stačí zaviesť hybnosti p_α kanonicky združené so súradnicami q_α , zmeniť q_α, p_α z čísel na operátory a žiadať splnenie komutačných vzťahov

$$[p_\alpha, q_\beta] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta} \quad (26)$$

Pre jednotlivé oscilátory takto dostaneme ako prípustné hodnoty energie $\hbar\omega(n_\alpha + 1/2)$.

Dalej by sme zas mohli zaviesť kreačné a anihilačné operátory pre jednotlivé oscilátory, tak ako sme to robili v predchádzajúcom článku, vyjadriť pomocou nich koeficienty q_α v rozklade (15) a napokon prísť ku kreačným a anihilačným operátorom pre postupné vlny $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. Všetko by bolo úplne rovnaké, iba by sme mali komplikovanejšie indexy.²³⁴ Výsledok by bol

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \left(\frac{\hbar}{2V\varepsilon_0\omega_k} \right)^{1/2} [\mathbf{a}_\alpha e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{a}_\alpha^+ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}] \mathbf{e}_i$$

kde operátory $\mathbf{a}_\alpha, \mathbf{a}_\beta^+$ spĺňajú komutačný vzťah

$$[\mathbf{a}_\alpha, \mathbf{a}_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta} \quad (28)$$

Pri prechode do Heisenbergovho obrazu by sme dostali, tiež ako v predchádzajúcom článku

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_\alpha(t) &= \mathbf{a}_\alpha e^{-i\omega_\alpha t} \\ \mathbf{a}_\alpha^+(t) &= \mathbf{a}_\alpha^+ e^{i\omega_\alpha t} \end{aligned} \quad (29)$$

Bez podrobnejšej analýzy uveďme, že stav $\mathbf{a}_\alpha^+ |0\rangle$, kde $|0\rangle$ je základný stav poľa (t. j. „vákuum“) zodpovedá jednofotónovému stavu. Ide o fotón s energiou $E_\alpha = \hbar\omega_\alpha = \hbar kc$, hybnosťou $\mathbf{p}_\alpha = \hbar \mathbf{k}$ a polarizáciou danou vektorom \mathbf{e} .

²³⁴ Trocha opatrnosti treba pri počítaní stavov. V báze kde za základné kmity vyberáme stojaté vlny $\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, $\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ musíme z dvojice $\mathbf{k}, -\mathbf{k}$ vybrať iba jeden člen. Preto máme ku každému \mathbf{k} priradený iba jeden kmit, rovnako ako v báze $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$.

14.5 PLANCKOV ZÁKON PRE ŽIARENIE ČIERNEHO TELESA

Planckov zákon opisuje spektrálne rozdelenie hustoty energie EM žiarenia v dutine telesa zahriatom na teplotu T . Inými slovami: tento zákon ukazuje aká energia pripadá na objemovú jednotku a jednotkový interval kruhovej frekvencie ω . Z predchádzajúceho článku už vieme, že energiu EM žiarenia v istom objeme V môžeme vyjadriť ako súčet energií lineárnych harmonických oscilátorov. Pritom vieme, koľko je týchto oscilátorov a aké sú ich kruhové frekvencie. Ak na interval $\Delta\omega$ pripadá $n(\omega)\Delta\omega$ oscilátorov, potom ich celková energia bude rovná súčinu $n(\omega)\varepsilon_\omega(T)\Delta\omega$, kde $\varepsilon_\omega(T)$ je stredná hodnota energie oscilátora s kruhovou frekvenciou ω pri teplote T .

Pre spektrálnu hustotu energie $\rho(\omega)$ potom budeme mať

$$\rho(\omega) = \frac{n(\omega)\varepsilon_\omega(T)\Delta\omega}{V\Delta\omega} = \frac{n(\omega)\varepsilon_\omega(T)}{V} \quad (1)$$

Začneme z toho, že nájdeme $n(\omega)$. Jednotlivé oscilátory boli v predchádzajúcom článku číslované tromi kvantovými číslami: vlnovým vektorom \mathbf{k} , ktorého zložky nadobúdali hodnoty

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad i = 1, 2, 3, n_i \text{ celé} \quad (2)$$

polarizačným vektorom, ktorý mal pri danom \mathbf{k} dve možnosti $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ a napokon indexom, ktorý hovoril či je príslušný kmit sínusového alebo kosínusového typu. Kruhová frekvencia oscilátora bola daná vzťahom $\omega = kc$, kde $k = |\mathbf{k}|$. Podľa (2) je hustota oscilátorov v \mathbf{k} -priestore

$$\rho(\mathbf{k}) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Počet oscilátorov v intervale $(k, k + dk)$ je rovný povrchu gule s polomerom k násobenému hrúbkou vrstvy dk a hustotou $\rho(\mathbf{k})$. Ku každému \mathbf{k} ale patria dva kmity s rôznymi polarizáciami. Ako výsledok dostávame pre počet stavov v intervale $(k, k + dk)$

$$n(k) dk = 8\pi k^2 \rho(k) dk = \frac{8\pi k^2 V dk}{(2\pi)^3}$$

Počet oscilátorov na interval $(\omega, \omega + d\omega)$ vzhľadom na vzťah $k = \omega/c$ potom bude

$$n(\omega)d\omega = \frac{8\pi\omega^2 V d\omega}{(2\pi c)^3}$$

Vidíme hneď, že počet stavov je úmerný objemu V a po dosadení do (1) máme pre spektrálnu hustotu energie žiarenia

$$\rho(\omega) = \frac{8\pi\omega^2}{(2\pi c)^3} \varepsilon_\omega(T) \quad (3)$$

Ostáva nám teda už len nájsť strednú energiu oscilátora s kruhovou frekvenciou ω pri teplote T . Tento oscilátor môže byť v stavoch s energiou $0, \hbar\omega, 2\hbar\omega, \dots, n\hbar\omega, \dots$, pričom energiu počítame od energie základného stavu. Podľa štatistickej fyziky sústava, ktorá je v termodynamickovej rovnováhe s okolím, sa s pravdepodobnosťou

$$P(E) = C \exp(-E/kT) \quad (4)$$

nachádza v nedegenerovanom stave s energiou E . Vzťah (4) nazývame tiež Boltzmannovým rozdelením. Vo vzorci (4) k je Boltzmannova konštanta a C je normovací faktor, ktorý musíme zvoliť tak, aby $\sum P(E) = 1$. Preto bude $C = [\sum \exp(-E/kT)]^{-1}$. Pre strednú hodnotu energie sústavy pri danom T potom máme

$$\varepsilon_\omega(T) = \sum E_i P(E_i) = \frac{\sum E_i \exp(-E_i/kT)}{\sum \exp(-E_i/kT)}$$

Pre lineárny harmonický oscilátor máme $E_n = n\varepsilon_0 = n\hbar\omega$ a z predchádzajúceho vzťahu dostávame²³⁵

$$\varepsilon_\omega(T) = \frac{\sum_0^\infty n\varepsilon_0 \exp(-n\varepsilon_0\tau)}{\sum_0^\infty \exp(-n\varepsilon_0\tau)} \quad (5)$$

kde $\tau = 1/kT$. Pravú stranu (5) môžeme prepísať ako

$$\varepsilon_\omega(T) = -\frac{d}{d\tau} \ln \sum_0^\infty \exp(-n\varepsilon_0\tau) = -\frac{d}{d\tau} \ln \sum_0^\infty (e^{-\varepsilon_0\tau})^n$$

Súčet nekonečného radu v ostatnom člene ľahko nájdeme, lebo je to súčet geometrického radu $\sum_0^\infty a^n = 1/(1-a)$, kde $a = \exp(-\varepsilon_0\tau) < 1$.

Takto dostaneme

$$\varepsilon_\omega(T) = -\frac{d}{d\tau} \ln[1 - \exp(-\varepsilon_0\tau)]$$

a po derivovaní

$$\varepsilon_\omega(T) = \frac{\varepsilon_0}{e^{-\varepsilon_0/kT} - 1} = \frac{\hbar\omega}{e^{-\hbar\omega/kT} - 1} \quad (6)$$

Ak tento výsledok teraz dáme do rovnice (3), dostaneme Planckov zákon v tvare

$$\rho(\omega) = \frac{8\pi\hbar\omega^3}{(2\pi c)^3 [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]} \quad (7)$$

Poznamenajme ešte na záver, že naše počítanie stavov fakticky odpovedá Boseho-Einsteinovej štatistike. Keď sme EM pole opisali ako sústavu oscilátorov, potom stav s energiou $n\hbar\omega$ (energiu základného stavu berieme ako nulovú) považujeme prirodzene za jediný stav. Kvantá energie EM poľa môžeme ale považovať aj za „častice“ – fotóny a na stav s energiou $n\hbar\omega$ sa potom pozeráme ako na stav s n -fotónmi. Vidno teda, že fotóny chápeme ako nerozlišiteľné častice, lebo inakšie by tomuto odpovedalo ($n!$) stavov líšiacich sa navzájom permutáciami (neidentických) častíc. Podrobnejšie o tom ešte budeme hovoriť v nasledujúcej kapitole.

14.6 PLANCKOV ZÁKON A EINSTEINOVE VZŤAHY PRE ABSORPCIU A EMISIU ŽIARENIA

Ešte pred vznikom kvantovej mechaniky odvodil A. Einstein vo svojej klasickej práci z Planckovho zákona a základných predpokladov štatistickej fyziky vzťah medzi koeficientmi absorpcie, stimulovanej emisie a pravdepodobnosťou spontánnej emisie. Einsteinov argument sa zakladá na nasledujúcej úvahe.

Predstavme si sústavu skladajúcu sa z atómov v stave 2, atómov v stave 1 a z elektromagnetického poľa. Nech je celá sústava v termodynamickovej rovnováhe pri teplote T . Energie atómov v stavoch 1 a 2 označíme E_1 , E_2 a pre určitost' nech $E_2 > E_1$. Počet atómov v stavoch 1 a 2 označíme N_1 a N_2 a hustota energie žiarenia $\rho(\omega)$ je daná Planckovým zákonom.

Počet atómov v stave 2 sa bude meniť v dôsledku troch procesov:

1. Atómy zo stavu 2 prechádzajú spontánnou emisiou žiarenia do stavu 1. Z celkového počtu N_2 sa takto za jednotku času rozpadne $N_2 w$ atómov, kde w je pravdepodobnosť spontánneho prechodu (za jednotku času) atómu zo stavu 2 do stavu 1.

2. Stimulovanou emisiou prejde zo stavu 2 do stavu 1 za jednotku času $N_2 \rho(\omega) b_{12}$ atómov. Koeficient b_{12} sa líši iba konštantou úmernosti od koeficientu stimulovanej emisie pre prípad, keď na atóm dopadá rovinná monochromatická vlna. S týmto prípadom sme sa zaoberali podrobnejšie v kapitole 9. Pravdepodobnosť prechodu za jednotku času tam bola úmerná hustote prúdu energie dopadajúcej EM vlny

²³⁵ Od energie oscilátora sme odpočítali energiu nulových kmitov, pozri článok 14.3

a koeficientu stimulovanej emisie. Hustota prúdu energie na relevantnej kruhovej frekvencii $\omega = \omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ je ale zrejme úmerná $\rho(\omega)$ pri tomto ω .

3. Atómy v stave 1 môžu absorbovať žiarenie a prejsť do stavu 2. Počet takýchto prechodov za jednotku času je

$$N_1\rho(\omega)b_{21}$$

Pre časovú zmenu počtu atómov v stave 2 započítaním všetkých troch uvedených mechanizmov dostaneme :

$$\frac{dN_2}{dt} = \rho(\omega)b_{21}N_1 - \rho(\omega)b_{12}N_2 - N_2w \quad (1)$$

V rovnovážnom stave nesmie N_2 závisieť od času, preto $dN_2/dt = 0$. Rovnicu, ktorú takto dostaneme, vydelíme N_2 a využijeme to, že podľa Boltzmannovho rozdelenia použitého pre atómy platí

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{(E_2 - E_1)/kT} = e^{\hbar\omega/kT} \quad (2)$$

kde symbolom ω označujeme $(E_2 - E_1)/\hbar$.

Po naznačených úpravách z rovnice (1) máme

$$\rho(\omega)b_{21}e^{\hbar\omega/kT} - \rho(\omega)b_{12} - w = 0 \quad (3)$$

Pre vysoké teploty, teda v limite $T \rightarrow \infty$ sa hustota žiarenia zväčšuje. Na jednej strane to vidno priamo z Planckovho zákona a na druhej strane to vidíme aj intuitívne. Ak si totiž predstavíme EM pole ako sústavu oscilátorov, potom s rastúcou teplotou budú stále viac a viac obsadené vyššie excitované stavy týchto oscilátorov a stredná hodnota energie oscilátorov porastie. V limite $T \rightarrow \infty$ sú teda prvé dva členy v (3) obrovské a tretí je od nich oveľa menší. Zdôrazníme, že w nezávisí od teploty T . Pri $T \rightarrow \infty$ sa teda prvé dva členy musia skompenzovať navzájom. Vtedy tiež $\exp(\hbar\omega/kT) \rightarrow 1$ a máme odtiaľ

$$b_{12} = b_{21} \quad (4)$$

čo nám hovorí, že koeficient stimulovanej emisie je rovnako veľký ako koeficient stimulovanej absorpcie.²³⁶ Ak (4) dosadíme do (3), máme

$$b_{21}\rho(\omega)[e^{\hbar\omega/kT} - 1] = w \quad (5)$$

Pravá strana v tejto rovnici nezávisí od T , na ľavej strane b_{21} od T tiež nezávisí. Hustota energie žiarenia od T závisí a jej závislosť musí byť taká, že práve skompenzuje závislosť faktoru v hranatej zátvorke od T . Takto dostávame

$$\rho(\omega) = \frac{\varphi(\omega)}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (6)$$

kde $\varphi(\omega)$ závisí iba od ω , ale nie od T . V čase, keď Einstein túto prácu písal (1917), sa funkcia $\varphi(\omega)$ už dala určiť z dobre známeho limitného tvaru $\rho(\omega)$ pre veľké teploty (zákon Rayleigha a Jeansa). Einstein takto vlastne znova odvodil i Planckovu formulu. Ak ale do (5) dosadíme priamo Planckov zákon (5.7), dostaneme

$$w = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} b_{21} \quad (7)$$

čo je Einsteinov vzťah pre koeficient spontánnej emisie. Keby sme b_{21} vyjadrili pomocou koeficientu absorpcie určeného v kapitole 9, dostali by sme z rovnice (7) po niekoľkých úpravách vzťah

$$w = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{c^2} \alpha \left| \int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 dV \right| \quad (8)$$

²³⁶ Pre tento argument o veľkosti koeficientu stimulovanej emisie sa niekedy citovaný Einsteinov článok považuje za teoretický základ laserov. Einstein má v úvode článku ale ešte jednoduchší argument. Predstavme si oscilátor (nabitú časticu), ktorá kmitá s kruhovou frekvenciou ω . Na oscilátor dopadá EM vlna s tou istou frekvenciou. Ak elektrické pole vlny a kmit oscilátora sú vo fáze, oscilátor absorbuje energiu (absorpcia), ak majú opačné fázy oscilátor stráca energiu a odovzdáva ju poľu (stimulovaná emisia).

kde ψ_2 , ψ_1 sú vlnové funkcie atómu v stavoch 2 a 1 (koeficient b_{21} bol vyjadrený v dipólovom priblížení). Konštanta a v (8) je konštantou jemnej štruktúry.

Ako historickú odbočku ešte uveďme, že Dirac priamym spôsobom vypočítal koeficient w v práci, ktorá bola napísaná o 10 rokov po Einsteinovej a považuje sa za začiatok kvantovej teórie poľa. Dirac zapísal potenciál EM poľa v tvare ekvivalentnom (4.27) a interpretoval operátory \mathbf{a}_α , \mathbf{a}_α^+ ako kreačné a anihilačné operátory fotónu. Potom napísal výraz pre interakciu atómu a EM poľa a dosadil doň takýto zápis pre $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Ako výsledok dostal interakčný hamiltonián obsahujúci výrazy odpovedajúce kreácii a anihilácii fotónu pri atomárnych prechodoch a mohol spočítať aj koeficient spontánnej emisie. Podrobnejšie o tom ale v tejto učebnici hovoriť nebudeme.

Na záver je ťažko odpustiť si jednu nie celkom striktnu fyzikálnu poznámku. Keď sa hovorí o majstroch beletrie, rozoberajú sa ich diela a uvažuje sa nad tým, v čom spočíva genialita majstra. Vo fyzike sa to robí len zriedkavo a je to škoda.

Citovaná Einsteinova práca je nesporne geniálna a genialita je okrem iného v tom, že závažný a komplikovaný problém bol maximálne zjednodušený do klasicky čistej schémy myšlienkového experimentu, v ktorom bol Einstein majstrom a virtuózom. Myšlienkový (Gedanken-) experiment ťažko definovať, ale je to zhruba analýza fyzikálnej situácie, v ktorej ostanú podstatné črty problému a myšlienkový experiment skúma potom logickú konzistentnosť niekoľkých základných tvrdení. V tomto prípade to boli: Planckovo rozdelenie, Boltzmannov zákon a vzťahy pre absorpciu a emisiu žiarenia atómami. Einsteinova práca ukázala konzistentnosť vecí a navyše priviedla ku vzťahu (8).

V istom zmysle je Gedankenexperiment podobný skúmaniu logickej konzistentnosti axiémov v matematike, ale rozdiel je podstatný – fyzika nemá axiomatickú štruktúru, jej zákony platia len v istých situáciách²³⁷ a preto treba mať istú konkrétnu predstavu o fyzikálnej situácii, v ktorej konzistentnosť daných tvrdení skúmame.

Keby niekto myslel, že vo fyzike niet krásy, poézie, či umenia, nech si prečíta túto Einsteinovu prácu. Diela majstrov sú už raz také, že originál je vždy viac ako jeho výklad.

14.7 KVALITATÍVNA DISKUSIA VZŤAHU PRE SPONTÁNNU EMISIU

V predošlom článku sme uviedli vzťah (6.8) pre spontánnu emisiu fotónu a súčasný prechod atómu zo stavu 2 do stavu 1. Odvodenie bolo fakticky urobené v dvoch krokoch. V prvom (kap. 9) sme uviedli vzťahy pre absorpciu a stimulovanú emisiu svetla a v druhom sme na základe Einsteinovho myšlienkového experimentu našli vzťah medzi pravdepodobnosťami týchto procesov a spontánnou emisiou. Takéto odvodenie „okľukou“ trochu zakrýva samotný mechanizmus spontánnej emisie. Aby sme to trochu skompenzovali, uvedieme tu niekoľko kvalitatívnych a rozmerových argumentov, ktoré v istom zmysle vysvetľujú vzťah (6.8).

Aj tu bude diskusia rozdelená do dvoch častí. V prvej si pripomenieme vzťah pre energiu vyžarovanú klasickým oscilátorom, v druhej prídeme ku vzťahu (6.8).

Časová závislosť oscilujúceho dipólu je $\mathbf{d} = \mathbf{d}_0 \cos \omega t$. Intenzita vyžarovania je úmerná druhej mocnine zrýchlenia, teda do vzťahu pre intenzitu vstúpi faktor $|\ddot{\mathbf{d}}|^2 = \omega^4 d_0^2 \cos^2(\omega t)$. Dipólový moment d_0 je úmerný súčinu náboja a dĺžky: $d_0 = e l_0$, takže intenzita I bude úmerná $\omega^4 e^2 l_0^2 \cos^2(\omega t)$. Spolu s faktorom e^2 sa v SI sústave objaví aj faktor $(4\pi\epsilon_0)^{-1}$. Pretože sa zaujímame o intenzitu ustrednenú cez dobu oveľa väčšiu ako je doba kmitu, ustredníme výraz $\cos^2(\omega t)$ v čase a pre energiu vyžiarenú dipólom za jednotku času máme

$$W \sim \frac{\omega^4 e^2 l_0^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (1)$$

Rozmery jednotlivých veličín na pravej strane sú takéto

$$[\omega^4] = \text{s}^{-4}, \quad \left[\frac{\omega^4 e^2 l_0^2}{4\pi\epsilon_0} \right] = \text{energia} \cdot L, \quad [l_0] = L \quad (2)$$

²³⁷ Napr. Newtonove zákony sú presné, ale neplatia vnútri atómov, nerelativistickú kvantovú mechaniku nemôžeme použiť bez jej ďalšieho rozvinutia na zrážky elementárnych častíc pri energiách tak vysokých, že pri zrážke vznikajú nové častice a pod.

kde L označuje rozmer dĺžky a druhý z výrazov (2) sme našli podľa tvaru potenciálnej energie v elektrostatike. Celý rozmer pravej strany v (1) teda je

$$\left[\frac{\omega^4 e^2 l_0^2}{4\pi\epsilon_0} \right] = \frac{\text{energia}}{\text{čas}} \cdot \left[\frac{L}{\text{čas}} \right]^3$$

Správny rozmer ale je energia/čas, preto pravú stranu v (1) treba ešte deliť treťou mocninou rýchlosti. V Maxwellových rovniciach vystupuje iba rýchlosť svetla a preto očakávame, že správny vzorec pre energiu vyžarovanú dipólom za jednotku času bude

$$W \approx \frac{\omega^4}{c^3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} l_0^2 = \frac{\hbar\omega}{c^2} \omega^3 \alpha l_0^2 \quad (3)$$

kde $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ je konštanta jemnej štruktúry.

Teraz prejdeme k druhej časti argumentu. Začneme tým, že odhadneme čas, za ktorý kmitajúci dipól vyžiari jeden fotón. Takýto fotón má energiu $\hbar\omega$, lebo oscilátor kmitajúci s kruhovou frekvenciou ω vysiela žiarenie, ktoré má tiež túto frekvenciu. Výraz W udáva vyžiarenú energiu za jednotku času, teda

$$W = \frac{dE}{dt} \approx \frac{\Delta E}{\Delta t} = \frac{\hbar\omega}{\Delta t} \quad (4)$$

kde Δt je čas, za ktorý sa vyžiari jeden fotón. Zo vzťahov (3) a (4) máme

$$\frac{1}{\Delta t} \approx \frac{\omega^3}{c^2} \alpha l_0^2 \quad (5)$$

Potiaľ sme stále argumentovali v rámci klasickej fyziky, teraz však musíme nájsť kvantový analóg výrazu l_0^2 . Pre prechod atómu zo stavu 2 do stavu 1 hrá túto úlohu maticový element prechodu

$$I_0 \rightarrow = \int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 dV \quad (6)$$

Výraz $1/(\Delta t)$ je zrejme pravdepodobnosť spontánnej emisie za jednotku času Pomocou (5) a (6) takto prideme k výsledku

$$w = \frac{1}{\Delta t} \approx \frac{\omega^3}{c^2} \alpha \left| \int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 dV \right|^2 \quad (7)$$

ktorý po násobení faktorom 4/3 dá presný výsledok (6.8) z predchádzajúceho článku.

Kvalitatívny argument, ktorý sme tu použili, má prirodzene ďaleko ku korektnosti. Vo fyzike sa kvalitatívne argumenty používajú v dvoch kontextoch buď na „uhádnutie“ výsledku zatiaľ nevyriešeného problému, alebo na objasnenie výsledku získaného menej prehľadným spôsobom (a to bol aj náš prípad) Viacero pekných kvalitatívnych príkladov z kvantovej mechaniky možno nájsť v Migdalovej knižke.²³⁸

14.8 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite vlnovú dĺžku elektromagnetického žiarenia, na ktorú pripadá maximum hustoty energie žiarenia čierneho telesa s teplotou $T = 2,7$ K. Toto je zhruba teplota reliktového kozmického žiarenia, ktoré je vážnym experimentálnym argumentom pre vznik nám známej časti vesmíru z tzv. „veľkého výbuchu“ (big bang).
2. Odhadnite povrchovú teplotu slnka ak viete, že maximum vyžarovanej energie pripadá približne na vlnovú dĺžku $\lambda = 450$ nm v zelenej časti spektra. Predpokladajte, že intenzita v žiarení slnka je rozložená podľa vlnových dĺžok rovnako ako v spektre žiarenia čierneho telesa.
3. Vychádzajúc z Planckovho zákona nájdite hustotu energie žiarenia v dutine v telese zahriatom na teplotu T . Pri výpočte je užitočný integrál

$$\int_0^\infty x^3 [e^x - 1]^{-1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

²³⁸ Migdal, A. B. Kačestvennyje metody v kvantovoj teorii. Moskva, Nauka, 1975

4. Odhadnite z rozmerových a kvalitatívnych argumentov hustotu energie žiarenia v dutine v telese zahriatom na teplotu T .
Návod: Hustota energie ma rozmer energia (dĺžka)⁻³. Typickou energiou je vyraz kT , typickou dĺžkou je $\hbar c / (\text{energia})$, t. j. $\hbar c / kT$ Výsledok porovnajte s riešením predchádzajúceho príkladu
5. Vypočítajte strednú hustotu fotónov v žiarení v dutine telesa zahriateho na teplotu T .
Návod: Spektrálna hustota žiarenia je daná Planckovým zákonom, jeden fotón ma energiu $\hbar\omega$.
6. Odhadnite z rozmerových či kvalitatívnych argumentov strednú hustotu fotónov v žiarení čierneho telesa zahriateho na teplotu T .
Návod: Použite výsledok príkladu 4 a strednú hodnotu energie fotónu položte približne rovnú kT . Kedy je tento hrubý odhad aspoň radovo správny?
7. Aká je entropia objemovej jednotky žiarenia čierneho telesa pri teplote T ?
Návod: Predpokladajte, že pri $T = 0$ je entropia nulová a predstavte si, že dutinu o jednotkovom (stálom) objeme pomaly zahrievame z teploty $T_0 = 0$ na teplotu T .
8. Nájdite energiu vyžiarenú z plošnej jednotky povrchu zahriateho (čierneho) telesa s teplotou T (Stefanov zákon). Určite energiu vyžiarenú z 1 m^2 povrchu Slnka ak jeho žiarenie považujete za žiarenie čierneho telesa a viete, že povrchová teplota slnka je okolo 6000 K .
9. Určte špecifickú tepelnú kapacitu kryštálu v Einsteinovom modeli. V tomto modeli chápeme kryštál ako sústavu oscilátorov, pričom všetky oscilátory kmitajú s rovnakou kruhovou frekvenciou ω . Každému atómu pripisujeme tri takéto oscilátory – po jednom za kmitanie v smere každej z osí x, y, z .
Návod: Pre N atómov máme $3N$ oscilátorov s kruhovými frekvenciami ω . Na výpočet energie sústavy potrebujeme už len poznať strednú hodnotu energie oscilátora pri danej teplote T .
10. Odhadnite alebo spočítajte dobu života atómu vodíka v stave $2p$.
11. Atóm vodíka sa nachádza v stave $3p$. Aké prechody do stavov s nižšími energiami sú povolené v dipólovom priblížení?
12. Atóm vodíka sa nachádza v stave $3p$. Ako by ste počítali relatívnu pravdepodobnosť prechodu do stavov $2s$ a $1s$.

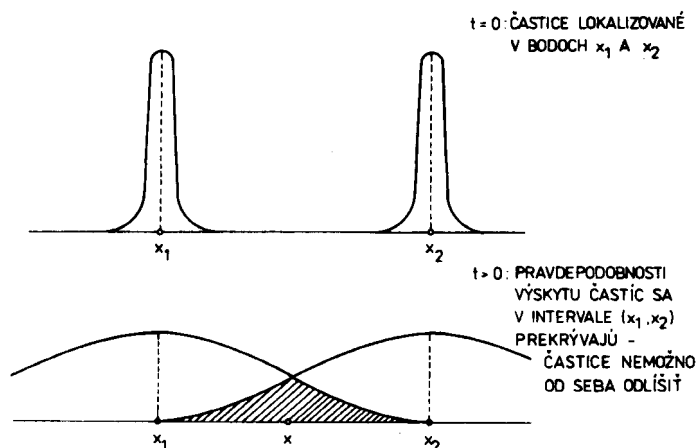
15 SÚSTAVY IDENTICKÝCH ČASTÍC

15.1 ÚVOD

Pri kvantomechanickom opise sústav, skladajúcich sa z viacerých „rovnakých“ častíc sa stretávame so zákonitosťami, ktoré nemajú klasický analóg.

V klasickej mechanike sa každá častica pohybuje po určitej dráhe (trajektórii) a tak aj častice, ktoré sú rovnaké (t.j. majú rovnaký spin, hmotnosť, náboj, magnetický moment, atď.) môžeme v princípe vždy rozlíšiť. Môžeme vždy povedať, že častica „1“ je tá, ktorá sa pohybovala po jednej určitej trajektórii, častica „2“ po druhej atď.

V kvantovej mechanike je situácia odlišná. Predstavme si dve rovnaké častice, opísané v čase $t = 0$ dvomi lokalizovanými a neprekrývajúcimi sa vlnovými balíkmi. Predpokladajme, že vzdialenosť centier balíkov je oveľa väčšia ako ich rozmery a častice teda môžeme rozlišovať. Vlnové balíky sa s rastúcim časom rozplývajú a v istom čase $t > 0$ sa už budú prekrývať (pozri obr. 15.1). Ak v tomto čase nájdeme časticu v bode x , nemôžeme – z principiálnych dôvodov – povedať, či je to častica, ktorá bola pôvodne lokalizovaná v okolí bodu x_1 alebo tá, ktorá bola v okolí bodu x_2 . Táto nemožnosť rozlíšenia nie je vecou našich neúplných znalostí, ale vlastnosťou samotnej dvojčasticovej sústavy.



Obr. 15.1

Prirodzene vzniká otázka: odkiaľ vieme, že dva elektróny (alebo dva protóny) sú „rovnaké“ v zmysle principiálnej totožnosti. Odpoveď je jednak v tom, že všetky merania veličín ako náboj, hmotnosť, magnetický moment a pod., urobené na rôznych elektrónoch dali – v rámci chýb merania – vždy tú istú hodnotu, a jednak v tom, že všetky dôsledky predpokladu o totožnosti a principiálnej nerozlíšiteľnosti dvoch elektrónov, či dvoch protónov zatiaľ súhlasia s experimentom.

V tejto kapitole si ukážeme tri rôzne možné spôsoby opisu viacčasticových sústav.

Začneme s opisom pomocou vlnových funkcií. V tomto prístupe častice spočiatku číslujeme, ale potom sa obmedzujeme na tie vlnové funkcie, ktoré v istom zmysle nezávisia od očíslovania častíc.

Potom prejdeme k opisu, v ktorom stav sústavy charakterizujeme len údajom o tom, koľko častíc sa v danom jednočasticovom stave nachádza. Na tejto úrovni je nutné zaviesť operátor počtu častíc v danom stave a je nanajvyšš prirodzené zaviesť aj operátory, ktoré kreujú, resp. anihilujú časticu v tomto stave. Potom môžeme zaviesť aj operátory $\hat{\psi}(x)$ resp. $\hat{\psi}^+(x)$ odpovedajúce anihilácii a kreácii častice v danom bode.

Napokon si ukážeme, že formalizmus pracujúci s kreačnými a anihilačnými operátormi a s operátormi $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^+(x)$ dostaneme aj vtedy, ak Schrödingerovu rovnicu považujeme za rovnicu klasického poľa a formálne ju prekvantujeme.

15.2 VLNOVÁ FUNKCIA SÚSTAVY IDENTICKÝCH ČASTÍC

Najprv sformulujeme to, čo o vlnovej funkcii sústavy identických častíc hovoria tie zákonitosti kvantovej mechaniky, s ktorými sme sa už podrobnejšie zaoberali, a potom uvedieme Pauliho princíp, ktorý je novým – od predchádzajúcich nezávislým – postulátom. Pre jednoduchosť začneme so sústavou dvoch identických bezspinových častíc vo vonkajšom poli. Hamiltonián sústavy bude mať tvar

$$H = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_1^2 + \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_2^2 + V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1)$$

kde $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ je potenciálna energia interakcie oboch častíc a význam ostatných členov je zrejmý. Tento hamiltonián sa nezmení, ak obe častice vymeníme. Aby sme túto vlastnosť opísali formálne, zavedme operátor výmeny častíc 1 a 2 vzťahom

$$P_{12}f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (2)$$

kde $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ je ľubovoľná funkcia dvoch premenných $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Všimnime si ďalej, že hamiltonián (1) je symetrický v indexoch „1“ a „2“. Preto je jedno, či na nejakú funkciu najprv pôsobíme operátorom P_{12} a potom hamiltoniánom (1) alebo naopak, najprv týmto hamiltoniánom a potom operátorom P_{12} . Platí teda

$$P_{12}Hf(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = HP_{12}f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Vzhľadom na to, že vzťah platí pre ľubovoľnú funkciu f , máme

$$P_{12}H = HP_{12} \quad (3a)$$

Z definičného vzťahu (2) možno ukázať, že operátor P_{12} je hermitovský:

$$P_{12} = P_{12}^+ \quad (3b)$$

Dve výmeny vykonané po sebe sú identitou

$$P_{12}P_{12} = 1 \quad (4)$$

a preto je operátor P_{12} aj unitárny. Po formálnej stránke je teda operátor P_{12} operátorom transformácie (výmeny častíc). Pretože podľa (3) komutuje s hamiltoniánom, je to operátor symetrie a zodpovedá nejakej zachovávajúcej sa veličine.

Zo vzťahu (4) vyplýva, že vlastné hodnoty operátora P_{12} sú len +1 a -1. Vlastné funkcie príslušné k hodnote +1 sú symetrické a k hodnote -1 antisymetrické vzhľadom na zámenu $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$.

Doteraz sme nikde nevyužili fakt, že ide o totožné častice. (Hamiltonián (1) by mohol zodpovedať i dvom časticiam, na ktoré daný vonkajší potenciál pôsobí rovnako, avšak v poli iného potenciálu by sa častice mohli správať odlišne, a tým by boli rozlíšiteľné.) Ak ide o naozaj totožné častice, potom transformáciou P_{12} nedostaneme nový stav, ale iba pôvodný. Pretože však stavový vektor je určený až na fázu, stačí žiadať, aby platilo

$$P_{12}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\alpha}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5)$$

Realistické stavy totožných častíc musia teda byť súčasne vlastnými stavmi operátora P_{12} . Podľa toho, čo sme povedali vyššie, to teda musia byť funkcie alebo symetrické, alebo antisymetrické. Pretože P_{12} je operátorom symetrie, príslušné vlastné hodnoty (+1 resp. -1) sa zachovávajú. Vlnová funkcia, na začiatku symetrická, ostane takou v priebehu celého časového vývoja. Podobne to platí aj o antisymetrickej vlnovej funkcii.

Predchádzajúca argumentácia sa dá zovšeobecniť aj na viacčasticové sústavy. Vlnovú funkciu budeme označovať ako $\Phi(1, 2, \dots, i, \dots, N)$, kde čísla označujú súradnice, napr. i označuje \mathbf{r}_i a ak máme častice so spinom, bude i označovať súradnicu aj spinovú premennú i -tej častice. Operátor P_{ik} bude operátorom výmeny i -tej a k -tej častice. Podobne ako v predchádzajúcom by sme najprv ukázali, že P_{ik} komutuje s Hamiltonovým operátorom sústavy identických častíc, potom by sme ukázali, že $P_{ik}P_{ik} = 1$

a prišli by sme k tomu, že vlastná funkcia H musí spĺňať podmienku

$$P_{ik}\Phi(1, 2, \dots, N) = \eta_{ik}\Phi(1, 2, \dots, N)$$

kde $\eta_{ik} = 1$ alebo $\eta_{ik} = -1$.

Pre nerozlišiteľné častice je prirodzené žiadať, aby faktor η_{ik} bol rovnaký pre zámenu ľubovoľných dvoch častíc.²³⁹ Tejto požiadavke vyhovujú iba dva typy vlnových funkcií a to buď funkcia úplne symetrická (pri nej $\eta_{ik} = 1$), alebo funkcia úplne antisymetrická (vtedy $\eta_{ik} = -1$).

Doterajšie úvahy však nehovoria nič o tom, či danú sústavu identických častíc treba opisovať symetrickou alebo antisymetrickou vlnovou funkciou, ani o tom, či náhodou tú istú sústavu netreba raz opisovať symetrickou a inokedy antisymetrickou vlnovou funkciou.

Analýza všetkých dostupných údajov ale hovorí jednoznačne, že:

Sústavy identických bozónov (t. j. častíc s celočíselným splnom) sú opísané vždy symetrickými a sústavy identických fermiónov (t. j. častíc s poločíselným spinom) vždy antisymetrickými vlnovými funkciami.

Toto tvrdenie – budeme ho nazývať zovšeobecneným Pauliho princípom – je novým a nezávislým postulátom nerelativistickej kvantovej mechaniky. Poznamenajme ešte, že „poločíselný“ znamená celé číslo plus jedna polovina, a že zovšeobecnený Pauliho princíp sa podarilo dokázať Paulimu zo všeobecných princípov lokálnej kvantovej teórie poľa.

Zatiaľ sa nenašiel ani jeden experimentálny fakt, ktorý by hovoril proti tomuto princípu. Naopak, vysvetlenie mnohých fyzikálnych javov, napr. stavby atómov a periodickej sústavy, supratekutosti ${}^4\text{He}$ a pod., spočíva na tomto princípe.

15.3 SYMETRICKÉ A ANTISYMETRICKÉ VLNOVÉ FUNKCIE

Ak hľadáme riešenie napríklad bezčasovej SchR pre systém totožných častíc, mali by sme sa podľa diskusie v predchádzajúcej časti obmedziť iba na priestor symetrických alebo antisymetrických vlnových funkcií. Technicky je však často výhodné hľadať riešenie bez tohto obmedzenia a až dodatočne ho symetrizovať alebo antisymetrizovať.

V tomto článku sa budeme zaoberať otázkou, ako sa konštruujú riešenia SchR s požadovanou symetriou. Začneme s dvojčasticovou sústavou, kde je situácia jednoduchá. Hamiltonián $H(1, 2)$ sa nemení pri zámene častíc. Ak $\Phi(1, 2)$ je vlastnou funkciou H s energiou E , tak $\Phi(2, 1)$ je ňou tiež. Symetrickú Φ_S a antisymetrickú Φ_A vlnovú funkciu dostaneme potom jednoducho

$$\Phi_S(1, 2) = A[\Phi(1, 2) + \Phi(2, 1)] \quad (1)$$

$$\Phi_A(1, 2) = B[\Phi(1, 2) - \Phi(2, 1)] \quad (2)$$

kde A, B sú normovacie konštanty. Ak pôvodné riešenie $\Phi(1, 2)$ bolo už symetrické, potom $\Phi_A = 0$ a podobne pre antisymetrické $\Phi(1, 2)$ bude $\Phi_S = 0$. Tento postup symetrizácie a antisymetrizácie riešení SchR možno zovšeobecniť aj na prípad sústavy N identických častíc. Nech P_ν je operátorom permutácie

$$(1, 2, \dots, N) \rightarrow (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N) \quad (3)$$

$$P_\nu\Phi(1, 2, \dots, N) = \Phi(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N)$$

a nech ψ je riešením bezčasovej SchR pre N -časticovú sústavu. Pre identické častice sa H nemení pri permutácii častíc, t. j.

²³⁹ Vzhľadom na to, že $P_{ik}P_{ik} = 1$ máme $\eta_{ik} = +1$ alebo $\eta_{ik} = -1$. Mohli by sme sa preto domnievať, že pre N častíc existujú vlnové funkcie, ktoré sú voči výmene niektorých častíc presne symetrické a voči výmene iných presne antisymetrické. Takých funkcií ale niet. Problém vidno už z jednoduchého prípadu funkcie $\Phi(x_1, x_2, x_3)$, od ktorej žiadame, aby $\Phi(a, b, c) = -\Phi(b, a, c)$, $\Phi(a, b, c) = \Phi(c, b, a)$, $\Phi(a, b, c) = \Phi(a, c, b)$. Pre túto funkciu máme

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = -\Phi(x_2, x_1, x_3) = -\Phi(x_3, x_1, x_2) = -\Phi(x_3, x_2, x_1) = -\Phi(x_1, x_2, x_3)$$

a funkcia je identicky nulová. Hlbšie zdôvodnenie vidno z teórie reprezentácií grupy permutácií (pozri napríklad učebnicu kvantovej mechaniky Landaua a Lifšica, špeciálne časť o identických časticiach, článok o Youngových schémach.)

$$P_\nu H = H P_\nu \quad (4)$$

a preto $P_\nu \Phi$ bude tiež riešením bezčasovej SchR príslušným k tej istej energii ako pôvodné Φ . Symetrické riešenie SchR potom bude

$$\Phi_S = A \sum_{\nu} P_\nu \Phi(1, 2, \dots, N) \quad (5)$$

V elementárnej algebre sa ukazuje, že každú permutáciu možno zložiť z postupných zámien (transpozícií) dvoch prvkov. Danú permutáciu možno dostať viacerými kombináciami transpozícií, ale počet transpozícií $n(\nu)$ bude vždy buď párny, buď vždy nepárny. Funkcia antisymetrická voči každej zámene dvoch častíc potom bude:

$$\Phi_A = B \sum_{\nu} [(-1)^{n(\nu)} P_\nu \Phi] \quad (6)$$

kde sčítujeme cez všetky permutácie a B je normovacia konštanta.

Predchádzajúca diskusia bola trochu akademická, pretože zväčša nepoznáme riešenie SchR pre Hamiltonov operátor sústavy N -častíc. Často ale poznáme približné riešenie získané istou, fyzikálne motivovanou aproximáciou. Zväčša táto aproximácia spočíva v nahradení problému jednoduchším. Napríklad pohyb elektrónu v atóme je veľmi komplikovanou úlohou. Akonáhle však nahradíme pôvodnú úlohu približnou, v ktorej sa každý z elektrónov pohybuje v poli jadra a (ustrednenom) poli ostatných elektrónov úloha sa dá riešiť. Podobne pri skúmaní elektrónov v kove sa často používa priblíženie, v ktorom sa každý elektrón pohybuje v poli jadier a v ustrednenom poli ostatných elektrónov. Z matematickej stránky toto priblíženie znamená, že pôvodný komplikovaný hamiltonián obsahujúci interakcie častíc nahradíme súčtom jednočasticových hamiltoniánov

$$H(1, 2, \dots, N) = T(1) + U(1) + T(2) + U(2) + \dots + T(N) + U(N) = \sum H(i) \quad (7)$$

kde $T(i)$ je operátor kinetickej energie i -tej častice a $U(i)$ je jej potenciálna energia.

Riešenie bezčasovej SchR s hamiltoniánom (7) môžeme písať v separovanom tvare

$$\Phi(1, 2, \dots, N) = \varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (8)$$

kde $\varphi_{n_i}(i)$ – tzv. jednočasticové vlnové funkcie – spĺňajú SchR.

$$H(i) \varphi_{n_i}(i) = \varepsilon_{n_i} \varphi_{n_i}(i), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

Kvôli jednoduchosti predpokladáme, že spektrum $H(i)$ je diskrétné a n_i je súbor kvantových čísel určujúcich stav i -tej častice. Vlastná hodnota hamiltoniánu H , odpovedajúca riešeniu (8), potom je

$$E = \sum_1^N \varepsilon_{n_i}$$

Vlnová funkcia (8) vo všeobecnosti nemá požadované vlastnosti symetrie. Symetrické a antisymetrické vlnové funkcie nájdeme podľa (5) a (6). Pre dvojčasticovú sústavu takto dostaneme

$$\Phi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) + \varphi_{n_1}(2) \varphi_{n_2}(1)] \quad n_1 \neq n_2 \quad (10)$$

$$\Phi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) - \varphi_{n_1}(2) \varphi_{n_2}(1)] = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) \end{vmatrix} \quad (11)$$

kde ostatný výraz označuje determinant. Obidve funkcie Φ_S , Φ_A sú normované na jednotku, ak pôvodné jednočasticové funkcie $\varphi_{n_i}(i)$, sú tiež takto normované a ak φ_{n_1} je ortogonálne na φ_{n_2} . Pre N nezávislých častíc takto dostaneme

$$\Phi_S(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (12)$$

kde sčítujeme cez všetky permutácie Výraz (12) je užitočný, ak sú všetky n_i navzájom rôzne. Ak sú

medzi nimi rovnaké, je užitočné písať

$$\Phi_S(1, 2, \dots, N) = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P' \varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (13)$$

kde Σ' na pravej strane znamená, že započítavame iba tie permutácie indexov, ktoré vedú k rôznym vlnovým funkciám Takýchto permutácií je $N!/(N_1! N_2! \dots)$, kde N_1, N_2, \dots sú počty rovnakých indexov spomedzi n_1, n_2, \dots, n_N .

Antisymetrickú vlnovú funkciu zapíšeme v tvare Slaterovho determinantu

$$\Phi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) & \dots & \varphi_{n_1}(N) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) & \dots & \varphi_{n_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{n_N}(1) & \varphi_{n_N}(2) & \dots & \varphi_{n_N}(N) \end{vmatrix} \quad (14)$$

Ak sú v (14) dve vlnové funkcie rovnaké, napr. $n_1 = n_2$, tak bude mať Slaterov determinant dva riadky rovnaké a Φ_A sa bude identicky rovnať nule. Odtiaľ vyplýva nasledujúce tvrdenie:

V prírode sa nemôžu vyskytnúť systavy, v ktorých by sa dva totožné fermióny nachádzali v rovnakom kvantovom stave.

Pri štúdiu štruktúry atómov sa najčastejšie vychádza v nultom priblížení zo stavu, v ktorom sa každý elektrón pohybuje v istom efektívnom, centrálne symetrickom poli. Stav elektrónu je potom určený štyrmi kvantovými číslami: hlavným n , orbitálnym l , magnetickým m a spinovým s_z . Z predchádzajúcej formulácie potom prichádzame k Paulino vylučovaciemu princípu:

Sústava elektrónov v atóme sa nemôže nachádzať v stave, v ktorom by dva elektróny mali rovnakú štvoricu kvantových čísel n, l, m, s_z .

Táto formulácia pochádza od W Pauliho (1924). Predchádzajúce práce, naznačujúce existenciu vylučovacieho princípu, napísal N. Bohr.

15.4 VLNOVÁ FUNKCIA DVOCH ELEKTRÓNOV. KLASIFIKÁCIA HLADÍN V ATÓME He. VÝMENNÁ INTERAKCIA

Ako jednoduchú ilustráciu predchádzajúceho formalizmu si v tomto článku bližšie všimnime vlnovú funkciu dvoch elektrónov v konkrétnom prípade atómu He. Ak zanedbáme spinovo-orbitálnu a spinovo-spinovú interakciu, bude hamiltonián závisieť od priestorových súradníc oboch elektrónov $H = H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Operátor celkového spinu $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ potom komutuje s hamiltoniánom a spinovú časť vlnovej funkcie môžeme vybrať ako vlastnú vlnovú funkciu dvojice komutujúcich operátorov

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2, \quad S_z = s_{1z} + s_{2z} \quad (1)$$

S touto otázkou sme sa už zaoberali v kapitole o momente hybnosti a vlnové funkcie môžeme priamo napísať

$$\chi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+}(1)\chi_{-}(2) - \chi_{-}(1)\chi_{+}(2)] \quad (2)$$

$$\chi_1^1 = \chi_{+}(1)\chi_{+}(2) \quad (3a)$$

$$\chi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+}(1)\chi_{-}(2) + \chi_{+}(2)\chi_{-}(1)] \quad (3b)$$

$$\chi_{-1}^1 = \chi_{-}(1)\chi_{-}(2) \quad (3c)$$

Označenie je štandardné, $\chi_{s_z}^s$ označuje spinovú vlnovú funkciu s celkovým spinom S a s priemetom S_z na os z . Jednočasticové spinové funkcie $\chi_{+}(i)$, $\chi_{-}(i)$ odpovedajú stavom, v ktorých spin i -tého elektrónu má priemet spinu $+1/2$, resp. $-1/2$ (v jednotkách \hbar) na os z .

Spinovú vlnovú funkciu (2) nazývame singletom a funkcie (3) tripletom. Názov pochádza z toho, že vo vonkajšom magnetickom poli sa hladina s celkovým spinom 1 štiepi na tri podhladiny líšiace sa priemetom spinu na smer magnetického poľa.

Pretože celková vlnová funkcia dvojelektrónovej sústavy musí byť antisymetrická, vlnové funkcie môžu mať jeden z nasledujúcich tvarov

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_0^0 \quad (4)$$

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_1^1 \quad \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_0^1 \quad \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{-1}^1 \quad (5)$$

kde Φ_S a Φ_A označuje symetrickú a antisymetrickú funkciu priestorových súradníc $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$.

V atóme hélia sa okolo jadra s nábojom $2e$ pohybujú dva elektróny. Hamiltonián sústavy (v uvedenom priblížení) je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e'^2}{r_1} - \frac{2e'^2}{r_2} + \frac{e'^2}{r_{12}} \quad (6)$$

kde $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Priestorová časť vlnovej funkcie spĺňa rovnicu

$$H\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (7)$$

pričom $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ je symetrická pre singletný a antisymetrická pre tripletný stav. Rovnica (7) s hamiltoniánom (6) sa nedá riešiť exaktne. Ťažkosť spôsobuje člen e'^2/r_{12} , ktorý závisí od súradníc oboch elektrónov a znemožňuje separáciu premenných. Tvar H priamo navádza na použitie poruchovej metódy s poruchou

$$H' = \frac{e'^2}{r_{12}} \quad (8)$$

Tento člen však v skutočnosti nie je malý v porovnaní s energiou elektrónov v poli jadra. Napriek tomu použitie poruchovej metódy poskytuje základnú informáciu o štruktúre energetických hladín atómu He (a hélia podobných iónov $\text{Li}^+, \text{Be}^{++}$). Presnejšie výsledky sa dostávajú pomocou variačnej metódy.

Vlnová funkcia Φ v nultom priblížení poruchovej metódy bude teda riešením rovnice

$$H_0\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_0\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (9)$$

kde H_0 je dané pravou stranou (6) bez posledného člena. Riešenie už teraz môžeme hľadať v separovanom tvare

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2) \quad (10)$$

Po separácii premenných v (9) dostaneme pre φ_1 a φ_2 SchR, ktoré sú úplne rovnaké ako SchR atómu vodíka, iba náboj jadra je $2e$ namiesto e . Každá z funkcií φ_1, φ_2 je teda riešením vodíku podobného atómu a je daná jednoznačne tromi kvantovými číslami: hlavným, orbitálnym a magnetickým. Platí:

$$\varphi_1(\mathbf{r}_1) = \varphi_n(\mathbf{r}_1) \quad \varphi_2(\mathbf{r}_2) = \varphi_m(\mathbf{r}_2) \quad (11)$$

kde symboly n, m zastupujú spomínané trojice kvantových čísel. Pre energiu E_0 platí

$$E_0 = E_n + E_m \quad (12)$$

kde E_n, E_m sú energie prislúchajúce vlnovým funkciám φ_n, φ_m . Symetrické a antisymetrické riešenia SchR (9) potom budú

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) + \varphi_n(\mathbf{r}_2)\varphi_m(\mathbf{r}_1)] \quad n \neq m \quad (13)$$

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) \quad \text{pre } n = m$$

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) - \varphi_n(\mathbf{r}_2)\varphi_m(\mathbf{r}_1)] \quad (14)$$

Pre $n = m$ je $\Phi_A \equiv 0$. Ak zanedbáme poruchu H' , majú singletné aj tripletné riešenia (13) a (14) rovnakú energiu danú vzťahom (12). Zapnutie poruchy H' sníma degeneráciu medzi tripletnými a singletnými stavmi. Korekcie k energii v singletnom a tripletnom stave označíme po rade ako ΔE_S , ΔE_A . Podľa bežných pravidiel poruchovej metódy ich nájdeme zo vzťahov

$$\begin{aligned}\Delta E_S &= \int \Phi_S^* H' \Phi_S d^3 r_1 d^3 r_2 \\ \Delta E_A &= \int \Phi_A^* H' \Phi_A d^3 r_1 d^3 r_2\end{aligned}\quad (15)$$

Použitie týchto vzťahov pre degenerovaný prípad je tu oprávnené, lebo porucha „nepremiešava“ singletné a tripletné stavy. Výraz $\int \Phi_A^* H' \Phi_S d^3 r_1 d^3 r_2$ sa rovná nule, pretože podintegrálna funkcia je antisymetrická voči zámene r_1 na r_2 .

Ak do (15) dosadíme vyjadrenia (13), dostaneme (pri $n + m$)

$$\begin{aligned}\Delta E_S &= B + A \\ \Delta E_A &= B - A\end{aligned}\quad (16)$$

kde

$$B = \int \varphi_n^*(r_1) \varphi_n(r_1) H' \varphi_m^*(r_2) \varphi_m(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (17)$$

$$A = \int \varphi_n^*(r_1) \varphi_m(r_1) H' \varphi_m^*(r_2) \varphi_n(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (18)$$

a pri úpravách sme využili to, že H' je reálnou symetrickou funkciou svojich argumentov.

Rovnica (16) platí iba pre $n \neq m$. Ak $n = m$, dostávame

$$\Delta E_S = B \quad n = m \quad (19)$$

Výraz B má jednoduchý fyzikálny význam, $\varphi_n^*(r_1) \varphi_n(r_1) = \rho_n(r_1)$ je hustotou pravdepodobnosti pre výskyt častice 1 v okolí bodu r_1 . Pre B potom dostávame

$$B = \int \rho_n(r_1) \frac{e'^2}{r_{12}} \rho_m(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (20)$$

čo je očakávaný výsledok: je to energia interakcie dvoch nábojov, rozložených v priestore s hustotami $\rho_n(r_1)$ a $\rho_m(r_2)$. Príspevok A – nazývaný *výmenným integrálom* alebo výmennou interakciou – nemá klasický analóg a je typickým kvantovomechanickým efektom, vyplývajúcim zo špecifických vlastností sústavy identických častíc.

Podrobnejšie výpočty tu nebudeme robiť, uvedieme iba výsledky a urobíme stručný komentár. Energie jednotlivých stavov budeme udávať ako násobky tzv. atómovej jednotky

$$E_a = \frac{e'^2}{a} = \frac{me'^4}{\hbar^2} \approx 27,21 \text{ eV}$$

kde a je Bohrov polomer atómu vodíka.

Základný stav atómu He je ten, pri ktorom sú oba elektróny (v neporušenom stave) v stavoch $1s$. Takýto stav má nutne symetrickú priestorovú časť vlnovej funkcie a je preto singletom Jeho energia aj s korekciou prvého rádu je

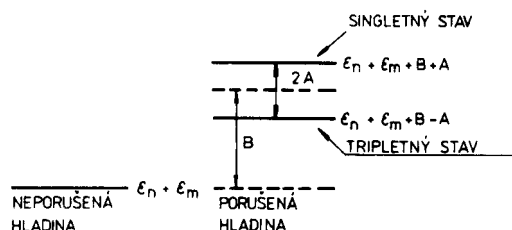
$$E[(1s)^2] = -\left(4 - \frac{5}{4}\right)$$

kde prvý člen na pravej strane odpovedá situácii bez poruchy, druhý je korekcia. V hranatej zátvorke sme naznačili prítomnosť dvoch elektrónov v stave $1s$. Prvý excitovaný stav má jeden elektrón v stave 1 v a druhý v stave $2s$ V tejto situácii už môžeme mať tripletný a singletný stav Príslušné energie aj s korekciou prvého rádu sú

$$E\left[\begin{array}{l} (1s)(2s), \text{ singlet} \\ \text{triplet} \end{array}\right] = -\frac{5}{2} + \frac{34}{81} \pm \frac{32}{729}$$

kde prvý člen odpovedá situácii bez poruchy, druhý člen je elektrostatickou korekciou B a posledný

predstavuje výmennú interakciu Vidíme, že tripletný stav má nižšiu energiu ako singlet Situácia je schematicky znázornená na obr 15.2.



Obr. 15.2

Poruchová metóda takto vedie k rozštiepeniu singletného a tripletného stavu Výmenný integrál²⁴⁰ A uprednostňuje paralelné usporiadanie oboch spinov (t. j. celkový spin rovný jednej) pri zadaných ostatných kvantových číslach Treba zdôrazniť, že sme nikde nezavádzali interakciu medzi spinmi alebo magnetickými momentmi elektrónov. Celý efekt vedúci k prednostne paralelnej orientácii spinov je dôsledkom spolupráce elektrostatickej interakcie a Pauliho princípu (antisymetrickosti vlnovej funkcie)

Analogický mechanizmus je zodpovedný aj za prednostne paralelnú orientáciu spinov elektrónov v niektorých pevných látkach, vedúcu k feromagnetickým vlastnostiam Toto vysvetlenie feromagnetizmu pochádza od Heisenberga.

Stavy atómu hélia sa teda rozpadajú do dvoch skupín. Jednu tvoria tripletné stavy s antisymetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. ortohélium), druhú singletné stavy so symetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. parahélium). Optické prechody medzi stavmi orto- a parahélia sú v dipólovom priblížení zakázané. Dipólový moment dvojelektrónovej sústavy $\mathbf{d} = -e(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ je symetrickou funkciou vzhľadom na zmenu \mathbf{r}_1 a \mathbf{r}_2 . Maticový element \mathbf{d} medzi stavmi $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ a $\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ bude potom identicky rovný nule. Prechody medzi orto- a parahéliom nie sú zakázané absolútne. Môžu ich spôsobiť napr. zrážky atómov alebo niektoré z interakcií, ktoré sme zanedbali. Pravdepodobnosť týchto prechodov je však malá.

15.5 OPIS N -ČASTICOVÝCH STAVOV POMOCOU OBSADZOVACÍCH ČÍSEL. KREAČNÉ A ANIHILAČNÉ OPERÁTORY

Doteraz sme n -časticové stavy opisovali pomocou vlnových funkcií. Išlo vlastne o opis v rámci určitej (konkrétne súradnicovej) reprezentácie. Aj keď v princípe s týmto opisom môžeme vystačiť, obmedziť sa naň nemusí byť vždy účelné. Súradnicová reprezentácia navyše nezodpovedá celkom „duchu“ mnohočasticového problému. Súradnice „jednotlivých častíc“ sú totiž číslované ako keby častice boli rozlíšiteľné. Hoci toto číslovanie je iba formálne (vlnové funkcie sú symetrické alebo antisymetrické, preto zmena očíslovania nehrá úlohu) predsa sa javí ako umelý a neprirodzený prvok opisu fyzikálnej sústavy identických častíc.

V tomto článku zavedieme všeobecnejší opis mnohočasticových systémov – reprezentáciu pomocou tzv. Fokovho priestoru. V tomto prístupe sa vyššie spomínaný nedostatok nevyskytuje, preto sa reprezentácia Fokovým priestorom zdá prirodzenejšia, hoci, ako ukážeme, je ekvivalentná opisu pomocou symetrických resp. antisymetrických vlnových funkcií.

Ako vždy pri prechode k inej reprezentácii, treba zvoliť určitú bázu, t. j. úplný systém stavov. Ako uvidíme neskôr, stačí sa zaoberať najprv systémom N neinteragujúcich (voľných) častíc. Ukáže sa totiž, že úplný systém stavov, ktorý zvolíme ako bázu v tomto prípade, vyhovuje ako báza i vo všeobecnejšej situácii pre systém interagujúcich častíc.

Budeme najprv skúmať sústavu N neinteragujúcich bozónov, ktoré si predstavíme uzavreté v objeme $V = L^3$ (napríklad v objeme tvaru kocky s hranou L). Pretože ide o systém voľných častíc, stacionárne

²⁴⁰ Označenie výmennej interakcie symbolom A pochádza zo slova „Austausch“, z čias, keď nemčina bola hlavným svetovým jazykom vo fyzike.

Výborne napísanú diskusiu o výmennej energii nájde čitateľ vo Feynmanových prednáškach z fyziky.

stavy celého systému možno skonštruovať jednoducho, ak budeme poznať tzv. jednočasticové stavy. Sú to stacionárne stavy, ktoré by mal rovnaký systém skladajúci sa z jedinej častice. Jednočasticové stavy dobre poznáme. Sú to harmonické rovinné vlny spĺňajúce určité okrajové podmienky²⁴¹ čo sú vlastne podmienky kladené na ich vlnové vektory \mathbf{k}_i . Zložky k_{1i}, k_{2i}, k_{3i} každého z vektorov \mathbf{k}_i sú totiž celočíselnými násobkami veličiny $2\pi/L$. Pre príslušné vlnové funkcie budeme používať stručné označenie $\psi_i(\mathbf{x})$ namiesto úplného symbolu $\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{x})$, hoci príležitostne používanie úplného symbolu nevylučujeme. Uvedieme si jednoduchý príklad. Napíšeme explicitne vlnovú funkciu trojčasticového stavu, v ktorom dve častice sa nachádzajú v (jednočasticovom) stave danom vektorom \mathbf{k}_1 a jedna častica je v stave s vlnovým vektorom \mathbf{k}_2 . Príslušná (symetrická) vlnová funkcia má zrejme tvar

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_3) + \psi_1(\mathbf{r}_3)\psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1) + \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_3)\psi_2(\mathbf{r}_2) \}$$

V ďalšom sa často stretne s vlnovými funkciami viacčasticových sústav, a aby sme sa vyhli nedorozumeniam, zavedieme už teraz označenia.

\mathbf{k}_i , skrátene len i	označuje kvantové čísla stavu jedinej častice
$n_{\mathbf{k}_i}$, skrátene len n_i	označuje počet častíc nachádzajúcich sa v stave i
$\alpha, \beta, \gamma, \dots$	číslujú jednotlivé častice, napríklad \mathbf{x}_n označuje polohový vektor α -tej častice atď.
$\psi_i(\mathbf{x}_\alpha)$	vlnová funkcia α -tej častice nachádzajúcej sa v stave i
$n_1 + n_2 + \dots = N$	súčet počtov častíc nachádzajúcich sa v jednotlivých stavoch sa rovná celkovému počtu častíc
$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$	symetrizovaná vlnová funkcia N -časticovej sústavy. V jednočasticovom stave i je n_i častíc.
$\mathbf{a}_{\mathbf{k}_i}$, skrátene \mathbf{a}_i	anihilačný operátor – znižuje počet častíc v stave i o jednotku
$\mathbf{a}_{\mathbf{k}_i}^+$, skrátene \mathbf{a}_i^+	kreačný operátor – zvyšuje počet častíc v stave i o jednotku

Vo všeobecnom prípade vlnovú funkciu stavu N -časticového systému, v ktorom sa n_1 častíc nachádza v stave danom vektorom \mathbf{k}_1 , n_2 častíc v stave danom \mathbf{k}_2 , ... možno vyjadriť v tvare

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P \psi_1(\mathbf{x}_\alpha) \dots \psi_2(\mathbf{x}_\beta) \dots \quad (1)$$

kde podobne ako v (3.13) sčítujeme len cez tie permutácie častíc, pri ktorých sa aspoň jedna častica dostane do iného jednočasticového stavu ako bola pred permutáciou. Celkový počet permutácií je $N!$, ale v $n_1!$ prípadoch častica α ostane v stave k_1 atď., takže počet uvažovaných permutácií je $N!/(n_1! n_2! \dots)$ a odtiaľ pochádza normovací faktor na pravej strane (1). Funkcia konštruovaná podľa (1) je normovaná na jednotku. Na pravej strane (1) sa totiž objavujú iba funkcie, ktoré sú navzájom ortogonálne.

Zápis vo vzťahu (1) nie je celkom výstižný, a preto sa pri ňom zastavíme ešte podrobnejšie. Jednočasticové stavy máme usporiadané a očíslované indexom i . Ak sú napríklad častice voľné, je každý stav i daný vlnovým vektorom \mathbf{k}_i , ktorého komponenty sú celočíselnými násobkami $2\pi/L$. Usporiadanie stavov možno urobiť napríklad takto: stav s $i = 1$ bude mať $\mathbf{k}_1 = (2\pi/L, 0, 0)$, stav s $i = 2$ bude mať $\mathbf{k}_2 = (0, 2\pi/L, 0)$, stav s $i = 3$ nech má $\mathbf{k}_3 = (0, 0, 2\pi/L)$, stav s $i = 4$ bude $(4\pi/L, 0, 0)$ atď. V stave i nech je n_i častíc. Niektoré z n_i budú ale nulové. Z postupnosti (n_1, n_2, \dots) môžeme tieto nulové prvky vypustiť a zostaviť podpostupnosť $(n_{i_1}, n_{i_2}, \dots)$. Na pravej strane v (1) sa potom, prirodzene objavia len tie stavy, v ktorých je n_i nenulové a rovnica (1) by mala byť podrobne zapísaná takto

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P \psi_{i_1}(x_{\alpha_1}) \dots \psi_{i_1}(x_{\alpha_{n_1}}) \psi_{i_2}(x_{\beta_1}) \dots \quad (1')$$

²⁴¹ Podrobnejšie pozri článok 2.2.

V situáciách keď budeme v ďalšom používať menej „indexovaný“ zápis (1), treba pod ním chápať presnejší zápis (1').

Všimnime si však – a v tom spočíva základná myšlienka reprezentácie vo Fokovom priestore – že na to, aby sme vedeli napísať explicitný tvar vlnovej funkcie stačilo, že sme poznali charakteristiku stavu obsiahnutú napríklad vo výraze: „dve častice sa nachádzajú v stave ψ_1 a jedna častica v stave ψ_2 “.

Ak teda zadáme obsadzovacie čísla, t. j. počty častíc nachádzajúcich sa v jednotlivých jednočasticových stavoch, je tým stav sústavy úplne určený.

Po formálnej stránke je potom výhodné zaviesť operátory, pomocou ktorých možno z určitého stavu „vyrobiť“ stav s niektorým obsadzovacím číslom o jednotku vyšším ako mal pôvodný stav.

Ukazuje sa, že v prípade bozónov majú tieto „zvyšovacie“ operátory všetky vlastnosti kreačných operátorov, s ktorými sme sa stretli pri harmonickom oscilátore. Zopakujme si preto stručne, že stavy oscilátora sme značili ako $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ pričom ich môžeme postupne konštruovať pôsobením kreačného operátora \mathbf{a}^+ na základný stav $|0\rangle$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \mathbf{a}^+|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+|0\rangle \\ &\vdots \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\mathbf{a}^+)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{a}^+|n-1\rangle \end{aligned}$$

takže všeobecne

$$\mathbf{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Ak ďalej zavedieme operátor $\mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a}$, máme $\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle$. Okrem operátora \mathbf{a}^+ používame aj operátor \mathbf{a} , pričom platí

$$\begin{aligned} [\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] &= 1 \\ \mathbf{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned}$$

Takto definované operátory \mathbf{a}, \mathbf{a}^+ sú navzájom hermitovsky združené, ako to už naznačujú použité symboly. Platí tiež

$$\langle n'|\mathbf{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}, \quad \langle n'|\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}$$

Ukážeme si teraz, ako možno použiť analogický formalizmus pri opise N-bozónovej sústavy. Označme symbolom

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

stav, v ktorom je n_i častíc v stave s kvantovými číslami \mathbf{k}_1 , n_2 častíc v stave s kvantovými číslami \mathbf{k}_2 atď. Zavedme ďalej – v analógii s lineárnym harmonickým oscilátorom operátory $\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+$, ktoré anihilujú resp. kreujú časticu v stave \mathbf{k}_i .

Stav, v ktorom nemáme žiadnu časticu, budeme označovať ako $|0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$. Stav, v ktorom máme jednu časticu v jednočasticovom stave s \mathbf{k}_1 bude $|1, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$ a pomocou operátora \mathbf{a}_1^+ môžeme písať

$$|1, 0, \dots\rangle = \mathbf{a}_1^+|0, 0, \dots\rangle$$

Stav s dvoma časticami v tomto jednočasticovom stave bude

$$|2, 0, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} \mathbf{a}_1^+ \mathbf{a}_1^+|0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$$

Pre operátory $\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+$ platia komutačné vzťahy²⁴²

$$[\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+] = \delta_{ij} \quad (2a)$$

$$[\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j] = 0 \quad [\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+] = 0 \quad (2b)$$

Tieto komutačné vzťahy sú rovnaké ako pre systém nezávislých oscilátorov. Platí potom

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ \mathbf{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \\ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} [\mathbf{a}_1^+]^{n_1} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} [\mathbf{a}_2^+]^{n_2} \dots \frac{1}{\sqrt{n_i!}} [\mathbf{a}_i^+]^{n_i} \dots |0, 0, 0, \dots\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

Zo stavov (3) možno, vytvorením všetkých možných konečných i nekonečných superpozícií, vybudovať Hilbertov priestor – tzv. Fokov priestor. Z hľadiska kvantovej mechaniky však stavom s rôznym celkovým počtom častíc $N = \sum_i n_i$ zodpovedajú stavy rôznych mechanických sústav. Hovoriť o superpozíciách takýchto stavov v rámci kvantovej mechaniky nemá vlastne zmysel. Špeciálne stav $|0, 0, 0, \dots\rangle$ sa v rámci kvantovej mechaniky nedá fyzikálne vôbec interpretovať – hovoriť v mechanickom zmysle o systéme bez častíc nemá zmysel. Celkový Fokov priestor má prirodzenú interpretáciu až v rámci kvantovej teórie poľa. My s ním budeme narábať iba ako s užitočným formálnym aparátom, v interpretačných otázkach sa nakoniec vždy obmedzíme len na príslušný podpriestor, zodpovedajúci danému fixnému počtu častíc.

Pomocou komutačných vzťahov (2) sa môžeme presvedčiť o tom, že stavy (3) tvoria ortonormovaný systém:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \quad (4)$$

Sústava stavov (3) teda tvorí bázu Fokovho priestoru. Tento systém stavov je úplným systémom pre kvantovomechanický opis sústavy N bozónov i v prípade, že ide o interagujúce častice. Poznamenajme ešte, že operátor $\mathbf{a}_i^+ \mathbf{a}_i = \mathbf{N}_i$ má význam operátora počtu častíc v i -tom jednočasticovom stave, t. j. platí

$$\mathbf{N}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (5)$$

Budeme sa teraz zaoberať otázkou súvisu Fokovho priestoru s formalizmom vlnových funkcií. Ak je doterajší postup konzistentný, potom stavu (3) musí zodpovedať stavová vlnová funkcia (1). Po formálnej stránke ide o vzťah medzi rôznymi reprezentáciami, takže musí platiť

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (6)$$

kde $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ označuje stav, v ktorom jedna častica sa nachádza v mieste \mathbf{x}_1 jedna častica v mieste \mathbf{x}_2 atď. Explicitnú konštrukciu tohto stavu uvedieme v článku 15.6. Čitateľ sa potom môže presvedčiť, že vzťahy (1) a (6) sú konzistentné. Nájdeme teraz vyjadrenie niektorých dôležitých operátorov vo Fokovom priestore. Začneme s tzv. jednočasticovými operátormi. Ako príklad uvedieme najprv hamiltonián voľných častíc. V jazyku vlnových funkcií je to

$$\mathbf{H} = \sum_{\rho=1}^N \mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho) \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho \quad (7)$$

Pretože funkcie $\psi_{k_i}(\mathbf{x}_\rho)$ sú vlastnými funkciami jednočasticového hamiltoniánu $\mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho)$, príslušnými k vlastným hodnotám $E_i = \hbar^2 \mathbf{k}_i^2 / 2m$, dostaneme z (1)

$$\int \psi_{n'_1 n'_2 \dots}^* \mathbf{H} \psi_{n_1 n_2 \dots} = \left[\sum_i E_i n_i \right] \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \dots$$

²⁴² Ak index i zastupuje trojicu (k_1, k_2, k_3) a index j trojicu (q_1, q_2, q_3) interpretujeme symbol δ_{ij} ako $\delta_{k_1 q_1} \delta_{k_2 q_2} \delta_{k_3 q_3}$.

Vo Fokovom priestore má rovnaké maticové elementy operátor

$$H = \sum_i E_i N_i = \sum_i E_i \mathbf{a}_i^+ \mathbf{a}_i \quad (8)$$

Výraz (8) je teda prekladom (7) do „jazyka“ Fokovho priestoru.

Uvažujme teraz všeobecný prípad tzv. jednočasticového operátora, ktorý vo formalizme vlnových funkcií má tvar

$$\mathbf{f} = \sum_{\rho} \mathbf{f}(\mathbf{x}_{\rho}) \quad (9)$$

Predstaviť si pod ním môžeme napríklad potenciálnu energiu častíc vo vonkajšom poli, potom $f(\mathbf{x}_{\rho}) = V(\mathbf{x}_{\rho})$. Zrátame jeho maticový element

$$\int \psi_{n'_1 n'_2 \dots}^* \mathbf{f} \psi_{n_1 n_2 \dots} dx_{\alpha} dx_{\beta} \quad (10)$$

a potom už ľahko nájdeme tvar operátora \mathbf{f} vo Fokovom priestore. Ak dosadíme (9) do (10) a využijeme (1), dostaneme výraz skladajúci sa z N -násobných integrálov, každý z nich sa dá vyjadriť ako súčin N jednoduchých integrálov, z ktorých jeden má tvar:

$$\int \psi_j^*(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \equiv f(j, i)$$

a ostatné sú typu

$$\int \psi_r^*(\mathbf{x}) \psi_s(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{rs}$$

Je teda zrejmé, že v (10) dostaneme nenulové príspevky iba vtedy, ak obsadzovacie čísla v stavoch vystupujúcich v (10) sú všetky rovnaké alebo sa líšia iba „preskokom“ jedinej častice do iného stavu, t. j. ak platí

$$(n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots, n'_j, \dots) = (n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots)$$

Podrobná analýza permutácií atď. vedie k výsledku

$$\int \psi_{n'_1, \dots, n'_i - 1, \dots, n'_j + 1, \dots}^* \mathbf{f} \psi_{n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots} = \sum_{j, i} f(j, i) \sqrt{n_i(n_i + 1)} \quad (11)$$

a pre diagonálne elementy dostaneme

$$\int \psi_{n_1, n_2, \dots}^* \mathbf{f} \psi_{n_1, n_2, \dots} = \sum_j \mathbf{f}(j, i) n_j \quad (12)$$

Vo Fokovom priestore má rovnaké maticové elementy operátor

$$F = \sum_{j, i} f(j, i) \mathbf{a}_j^+ \mathbf{a}_i \quad (13)$$

Možno sa o tom presvedčiť jednoduchým priamym výpočtom.

Vyjadrením (13) vieme preložiť každý jednočasticový operátor (9) z „jazyka“ vlnových funkcií do „jazyka“ Fokovho priestoru.

Analogický „preklad“ môžeme urobiť i pre tzv. dvojčasticový operátor, ktorý má vo formalizme vlnových funkcií tvar

$$V = \frac{1}{2} \sum \mathcal{V}(\mathbf{x}_{\rho}, \mathbf{x}_{\sigma}) \quad (14)$$

kde sčítujeme cez všetky dvojice súradníc a čiarka nad symbolom sčítovania znamená, že berieme len $\mathbf{x}_{\rho} \neq \mathbf{x}_{\sigma}$. Pod (14) si môžeme predstaviť potenciálnu energiu sústavy pochádzajúcu od dvojčasticových síl.

Postup by bol rovnaký ako vyššie. Najprv by sme našli maticové elementy V v jazyku symetrizovaných vlnových funkcií a potom by sme hľadali preklad V do jazyka Fokovho priestoru. Výpočet maticového elementu je pomerne zdĺhavý a pre čitateľa je užitočnejšie urobiť si jednoduché príklady pre sústavu s 2 či

3 časticami, ako sledovať všeobecný argument. Dobré je ale uvedomiť si, že v maticovom elemente V máme súčet členov $V(\mathbf{x}_\rho, \mathbf{x}_\sigma)$ a preto sa „koncový“ stav $\psi_{n_1, n_2, \dots}$ môže líšiť od „začiatočného“ iba tým, že sa zmenia kvantové čísla najviac dvoch častíc. Môžeme tiež povedať, že iba dve častice môžu zmeniť svoj stav, ostávajúcich $N - 2$ musí ostať v pôvodných stavoch.

Ako výsledok prekladu V do Fokovho priestoru dostaneme

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|V|kl \rangle a_i^+ a_j^+ a_k a_l \quad (15)$$

kde

$$\langle ij|V|kl \rangle \equiv \int \psi_i^*(\mathbf{x}_\rho) \psi_j^*(\mathbf{x}_\sigma) V(\mathbf{x}_\rho, \mathbf{x}_\sigma) \psi_k(\mathbf{x}_\rho) \psi_l(\mathbf{x}_\sigma) d\mathbf{x}_\rho d\mathbf{x}_\sigma \quad (16)$$

Vzhľadom na to, že v praktických úlohách sa zväčša vyskytujú len jednočasticové a dvojčasticové operátory, môžeme „prekladový slovník“ považovať za prakticky úplný a každý problém môžeme z jazyka vlnových funkcií preložiť do jazyka Fokovho priestoru ešte predtým ako by sme sa pokúšali ho riešiť.

Vzniká prirodzene otázka: načo je takýto preklad užitočný? Odpoveď, ktorú z predchádzajúceho ešte nevidno, je v tom, že preklad do Fokovho priestoru je v skutočnosti prekladom do jazyka kvantovej teórie póla. Po tom, čo sme sa v predchádzajúcej kapitole oboznámili s kvantovaním kmitov struny a opisom elektromagnetického poľa ako sústavy oscilátorov, to ani nie je prekvapujúce. Najprv sme zaviedli jednotlivé „oscilátory“, potom sme ich kvantovali a zavedením kreačných a anihilačných operátorov sme našli vyjadrenia pre operátory polí. Tu sme vlastne postupovali analogicky. Najprv sme vymenovali jednočasticové stavy a potom sme počet častíc v nich vyjadrili pomocou operátorov počtu častíc. Týmto spôsobom počet častíc v danom stave opisujeme veľmi podobne ako stupeň excitácie daného oscilátora.

V nasledujúcom článku si ukážeme, že analógiu možno dotiahnuť až do konca a opis sústavy s mnohými bozónmi viesť celkom v jazyku kvantovej teórie póla.

Doteraz sme hovorili iba o bozónoch, teraz si všimnime modifikácie potrebné pri opise sústavy fermiónov.

Začneme opäť s prípadom N neintegrujúcich fermiónov. Jednočasticové stavy sú v tomto prípade rovnaké ako pri bozónoch. Rozdiely sa prejavajú až pri konštrukcii viacčasticových stavov. Požiadavka antisymetrie vlnovej funkcie vedie k tomu, že v danom jednočasticovom stave sa môže nachádzať najviac jedna častica. Obsadzovacie čísla jednočasticových stavov teda môžu byť len 0 alebo 1.

Vo Fokovom priestore stavy teda môžeme označiť ako $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, pričom každá z hodnôt n_i je buď 0 alebo 1. Takéto stavy určite nemožno vybudovať z „prázdneho“ stavu $|0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$ pomocou kreačných a anihilačných operátorov spĺňajúcich komutačné vzťahy (2) typické pre lineárny harmonický oscilátor, lebo tieto vedú nevyhnutne k existencii obsadzovacích čísel väčších ako jedna.

V prípade bozónov bolo zavedenie kreačných a anihilačných operátorov veľmi užitočné. Definujeme preto takéto operátory i pre sústavu fermiónov a nájdeme, aké algebrické vzťahy musia tieto operátory spĺňať.

Pre jednoduchosť sa na začiatku obmedzme na jediný úplne určený stav fermiónu (charakterizovaný napríklad vlnovým vektorom \mathbf{k} a priemetom spinu $s_z = +1/2$), ktorý je v uvažovanej sústave buď „prázdny“ ($n = 0$, Fokov vektor $|0\rangle$) alebo „obsadený“ jedinou časticou ($n = 1$, Fokov vektor $|1\rangle$).

Pre kreačný a anihilačný operátor definujeme vzťahy

$$a^+|0\rangle = |1\rangle, \quad a|1\rangle = |0\rangle \quad (17)$$

Pretože vyššie obsadzovacie číslo ako 1 je pre fermióny zakázané Pauliho vylučovacím princípom, definujeme

$$a^+|1\rangle = 0, \quad a|0\rangle = 0 \quad (18)$$

Vzťahy (17) a (18) môžeme súhrnne zapísať v tvare

$$a^+|n\rangle = (1 - n)|1 - n\rangle, \quad a|n\rangle = n|1 - n\rangle; \quad n = 0, 1 \quad (19)$$

definujúcom reprezentáciu operátorov a^+ , a . Pretože pre $n = 0, 1$ platí $n^2 = n$, $(1 - n)^2 = 1 - n$, $n(1 - n) = 0$,

dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^+ \mathbf{a} |n\rangle &= n |n\rangle, & \mathbf{a} \mathbf{a}^+ |n\rangle &= (1 - n) |n\rangle \\ \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+ |n\rangle &= \mathbf{a} \mathbf{a} |n\rangle = n(1 - n) |n\rangle = 0 \end{aligned}$$

takže platia operátorové vzťahy

$$\mathbf{a} \mathbf{a}^+ + \mathbf{a}^+ \mathbf{a} = 1, \quad \mathbf{a}^2 = 0, \quad \mathbf{a}^{+2} = 0$$

ktoré možno zapísať v tvare

$$\{\mathbf{a}, \mathbf{a}^+\} = 1, \quad \{\mathbf{a}, \mathbf{a}\} = \{\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^+\} = 0 \quad (20)$$

kde $\{F, G\} \equiv FG + GF$ je antikomutátor.

Z antikomutačných vzťahov naopak vyplýva operátorový vzťah $\mathbf{N}^2 = (\mathbf{a}^+ \mathbf{a})^2 = \mathbf{a}^+ \mathbf{a} = \mathbf{N}$, ktorý obsahuje (ako dôsledok) pôvodný predpoklad, že obsadzovacie číslo n môže nadobúdať len hodnoty 0 a 1. Kým v prípade bozónov je algebra kreačných a anihilačných operátorov podobná prípadu harmonického oscilátora, pre fermióny sa dá nájsť iná analógia, a to opis spinu 1/2. Túto analógiu použili v prvých prácach o viacfermiónových stavoch Jordan a Wigner (1926 – 1927).

Priemet spinu na istú os tu môže nadobúdať iba dve hodnoty, čo je analógom dvoch možností $n = 0, 1$ pre dané obsadzovacie číslo. Stav s obsadzovacím číslom 0 môžeme považovať za analóg spinu „dolu“ a stav s obsadzovacím číslom 1 za analóg spinu „hore“. Takto máme

$$|1\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |0\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Kreačný a anihilačný operátor sú potom presným analógom zvyšovacieho a znižovacieho operátora J_+ a J_- :

$$\mathbf{a} \leftrightarrow J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}^+ \leftrightarrow J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N} \leftrightarrow J_+ J_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Čitateľ si môže overiť všetky predchádzajúce algebraické vzťahy v tejto maticovej reprezentácii. Vo všeobecnom prípade je báza tvorená vektormi

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (21)$$

kde $n_i = 0$ alebo 1 je obsadzovacie číslo i -tého jednočasticového stavu, charakterizovaného vlnovým vektorom \mathbf{k}_i a priemetom spinu s_{zi} . V zápise (21) sa predpokladá, že (konvenciou) zvolíme určité (fixné) poradie jednočasticových stavov a obsadzovacie čísla zapisujeme v (21) tak, aby to zodpovedalo tomuto poradiu. Kvantové čísla (\mathbf{k}_i, s_{zi}) nahradíme zas jednoduchším symbolom (i) a pod δ_j budeme chápať súčin

$$\delta_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j}^{(3)} \delta_{s_{zi} s_{zj}}$$

Operátor \mathbf{a}_i potom označuje anihilačný operátor príslušný k stavu s kvantovými číslami (\mathbf{k}_i, s_{zi}) .

Podľa vzťahu (20) postulujeme antikomutačné vzťahy

$$\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+\} = 1, \quad \{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j\} = \{\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+\} = 0 \quad (22)$$

Je samozrejmé, že nestačí iba postulovať komutačné relácie pre sústavu operátorov. Je treba tiež ukázať, že takéto operátory existujú. Ak by sme operátory $\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+$ reprezentovali operáciami

$$\mathbf{a}_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i) |n_1, \dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (23)$$

$$\mathbf{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, 1 - n_i, \dots\rangle$$

ktoré sú najjednoduchším zovšeobecnením operácií (19) na stavy (21), potom by síce boli splnené vzťahy (22) a takto definované operátory by mali aj všetky ďalšie vlastnosti nutné pre ich fyzikálnu interpretáciu (ako kreačných a anihilačných operátorov v i -tom jednočasticovom stave), ale operátory s rôznymi indexami i, j by navzájom komutovali. Ako si ukážeme o chvíľu, je účelné žiadať, aby pri

$i \neq j$ boli splnené antikomutačné vzťahy

$$\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j\} = \{\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+\} = \{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+\} = 0 \quad (24)$$

Spolu s pravidlami (22) ich možno zapísať jednotne v tvare

$$\begin{aligned} \{\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_s^+\} &= \delta_{r,s} \\ \{\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_s\} &= \{\mathbf{a}_r^+, \mathbf{a}_s^+\} = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Opäť prirodzene vzniká otázka existencie operátorov spĺňajúcich vzťahy (25) a otázka ako sa ich pôsobenie na stavy (21) líši od operácií (23). Odpoveď na prvú otázku je kladná a na druhú je jednoduchá: na pravých stranách rovníc (23) pribudnú len Fermiho faktory usporiadania $(-1)^{\nu_i}$, v ktorých $\nu_i = \sum_{j \subset i} n_j$ a symbol $j \subset i$ značí, že j predchádza i v (21) (t. j. podľa dohodnutého usporiadania). Stav (21) potom môžeme vytvoriť zo stavu $|0, 0, \dots\rangle$ podľa vzťahu

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = [\mathbf{a}_1^+]^{n_1} [\mathbf{a}_2^+]^{n_2} \dots |0, 0, \dots\rangle \quad (26)$$

Treba si tu všimnúť, že kreačné operátory na pravej strane vystupujú v poradí podľa „dohodnutého usporiadania“. Ak by sme ich napísali v inom poradí, zmenilo by sa v tomto vzťahu nanajvyš znamienko. Znamienko + pritom zodpovedá „dohodnutému poradiu“ a jeho párnym permutáciám, znamienko – prislúcha nepárnym permutáciám usporiadania.

Vráťme sa teraz k otázke účelnosti antikomutačných vzťahov (24). Ako ilustráciu si uvedieme príklad všeobecného stavu dvojfermiónovej sústavy. Tento stav môžeme zapísať ako superpozíciu vektorov $|0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle$ (obsadzovacie čísla 1 sú na i -tom a j -tom mieste). Ak koeficienty v takej superpozícii označíme $\varphi(i, j)$, dostaneme všeobecné vyjadrenie

$$|\Phi\rangle = \sum_{i < j} \varphi(i, j) |0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle \quad (27)$$

resp.

$$|\Phi\rangle = \sum_{i < j} \varphi(i, j) \mathbf{a}_i^+ \mathbf{a}_j^+ |0, 0, \dots\rangle \quad (28)$$

Vo vzťahoch (27), (28) sčítame iba cez usporiadané dvojice indexov $i < j$, aby sa vektory bázy $|0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle$ vyskytovali v súčtoch iba raz. Vo vzťahu (28) však možno jednoducho prejsť k sčítaniu cez všetky i, j nezávisle, ak využijeme antikomutačné vzťahy (22). Stačí dedefinovať funkciu $\varphi(i, j)$ (ktorá je zatiaľ vzťahom (27) definovaná len pre $i < j$) nasledovne:

$$\varphi(i, j) = \begin{cases} 0 & \text{pre } i = j \\ -\varphi(i, j) & \text{pre } i < j \end{cases} \quad (28')$$

potom už môžeme (28) zapísať v tvare

$$|\Phi\rangle = \sum_{i, j} \frac{1}{2} \varphi(i, j) \mathbf{a}_i^+ \mathbf{a}_j^+ |0, 0, \dots\rangle \quad (29)$$

kde už sčítame cez všetky i, j nezávisle. Voľba antikomutačných vzťahov (24) teda umožnila prejsť od sčítania cez usporiadané dvojice i, j na sčítanie cez nezávislé dvojice, pričom tak, že funkcia $\varphi(i, j)$, ktorá až na normalizačný faktor má zrejme význam vlnovej funkcie dvojfermiónovej sústavy v k -reprezentácii, je podľa (29) antisymetrická, ako to vyžaduje Pauliho princíp.

Vráťme sa ešte k prechodu od (28) ku (29). Vo vzťahu (28) sčítujeme len cez $i < j$ a $(i, j) \equiv (\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ je definovaná len na časti priestoru všetkých dvojíc $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$. Toto je analógiou systémov s väzbami v klasickej mechanike a hoci by sme mohli pracovať s takto zavedenými stavmi $|\Phi\rangle$, bolo by to často nepraktické. Po úplnom definovaní $\varphi(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ pomocou (28') pridáme ku vzťahu (29), v ktorom už sčítujeme cez všetky dvojice $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ bez obmedzení. Pre výpočty je toto „odstránenie väzby“ $i < j$ veľmi užitočné.

Čitateľ sa sám môže presvedčiť o tom, že pri zápise stavových funkcií v tvare (29) (a jeho zovšeobecnieniach na viacčasticové sústavy) zostávajú aj pre fermióny v platnosti tie vyjadrenia jedno- a

dvojčasticových operátorov vo Fokovom priestore, ktoré sme už odvodili pre sústavy bozónov. Postup dôkazu by bol obdobný ako v prípade bozónov. Využili by sme pri tom, že stavu

$$\mathbf{a}_{i1}^+ \mathbf{a}_{i2}^+ \dots \mathbf{a}_{iN}^+ |0, 0, \dots\rangle \quad (30)$$

zrejme prislúcha vlnová funkcia, daná Slaterovým determinantom

$$\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_1}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_1}(\mathbf{x}_N) \\ \psi_{i_2}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{i_N}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix} \quad (31)$$

O správnosti tohto vzťahu sa možno presvedčiť aj formálne. V nasledujúcom článku nájdeme vyjadrenie stavu $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ vo Fokovom priestore. Potom sa dá už ľahko overiť, že vlnová funkcia definovaná vzťahom

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{a}_{i_1}^+ \dots \mathbf{a}_{i_N}^+ |0, \dots\rangle$$

sa dá vyjadriť v tvare (31). Poznamenajme ešte, že znamienko v (31) je zafixované tým, že v (30) i (31) vystupujú jednočasticové stavy i_1, \dots, i_N v konvencii určenom poradí. Pretože však platia antikomutačné vzťahy (24), nemusíme túto konvenciu dodržiavať a stačí, aby poradie stavov v (30) a (31) bolo rovnaké. Výmena poradia dvoch jednočasticových stavov potom vedie v (30) k zmene znamienka stavu v dôsledku vzťahov (24) a v (31) v dôsledku toho, že determinant zmení znamienko pri výmene riadkov.

Poznamenajme ešte, že báza, ktorú sme fakticky konštruovali pre systém voľných fermiónov, tvorí úplný systém stavov i pre sústavu interagujúcich fermiónov.

Konštrukcia Fokovho priestoru, tak ako sme ju opísali, nie je jedinou možnosťou. Často je užitočné voliť za jej základ iný systém jednočasticových stavov. Tak napríklad ak uvažujeme sústavu vzájomne interagujúcich častíc, ktoré sa pohybujú navyše vo vonkajšom poli, potom za jednočasticové stavy môžeme voliť stacionárne stavy v tomto vonkajšom poli, vybudovať na ich základe Fokov priestor a v ďalšom brať interakciu častíc napríklad ako poruchu. Po formálnej stránke sa nič nemení, iba jednočasticové stavy už nebudú rovinné vlny, ale budú charakterizované inými kvantovými číslami.

15.6 SEKUNDÁRNE KVANTOVANIE

V tomto článku ukážeme, že opis mnohých častíc vo Fokovom priestore môžeme dostať priamo kvantovaním príslušného poľa. Nezačneme priamo s formalizmom, ale ukážeme najskôr, ako možno zaviesť operátor poľa a vyjadriť pomocou neho hamiltonián sústavy. Pri diskusii budeme uvažovať sústavu N bozónov.

Jednočasticové stavy sústavy sú opísané vlnovými funkciami²⁴³ $\psi_i(\mathbf{x})$ a vo Fokovom priestore sú tieto stavy kreované resp. anihilované operátormi \mathbf{a}_i^+ , \mathbf{a}_i , pričom tieto operátory spĺňajú vzťahy

$$[\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j] = 0, \quad [\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+] = 0, \quad [\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+] = \delta_{ij} \quad (1)$$

Definujme teraz operátor bozónového poľa $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ a operátor k nemu hermitovsky združený vzťahmi

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) \mathbf{a}_i \quad (2a)$$

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{x}) \mathbf{a}_i^+ \quad (2b)$$

Na pravých stranách v (2) sú operátory \mathbf{a}_i , \mathbf{a}_i^+ a funkcie $\psi_i(\mathbf{x})$, $\psi_i^*(\mathbf{x})$ majú úlohu koeficientov, závislých od \mathbf{x} . Fyzikálny význam operátora $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ spoznáme, keď nájdeme vlnovú funkciu, zodpovedajúcu stavu

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{y})|0\rangle = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \mathbf{a}_i^+ |0\rangle \quad (3)$$

kde $|0\rangle$ je stav bez častíc.

²⁴³ Index i tu zastupuje trojicu (k_1, k_2, k_3) súradníc vlnového vektora.

Keďže stavu $\mathbf{a}_i^+|0\rangle$ je priradená vlnová funkcia $\psi_i(\mathbf{x})$ bude superpozícii (3) priradená superpozícia vlnových funkcií $\psi_i(\mathbf{x})$ s rovnakými koeficientmi, t. j. vlnová funkcia²⁴⁴

$$\psi_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \psi_i(\mathbf{x}) = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

keď sme využili fakt, že ψ_i tvoria úplný systém. Vidíme, že stavu (3) zodpovedá funkcia „lokalizovaná“²⁴⁵ v bode \mathbf{y} . Operátor $\hat{\psi}^+(\mathbf{y})$ je teda operátorom kreácie častice v bode \mathbf{y} . Podobne $\hat{\psi}(\mathbf{y})$ je operátorom anihilácie častice v bode \mathbf{y} .

Komutačné vzťahy pre operátory $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{y})$ nájdeme ľahko. Napríklad

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = [\sum_i \mathbf{a}_i \psi_i(\mathbf{x}), \sum_j \mathbf{a}_j^+ \psi_j^*(\mathbf{y})] = \sum_{ij} \psi_i(\mathbf{x}) \psi_j^*(\mathbf{y}) [\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+] = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i^*(\mathbf{y}) = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

pričom sme využili komutačné vzťahy (1) a úplnosť systému $\psi_i(\mathbf{x})$. Podobne by sme ukázali, že platí:

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}^+(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (4)$$

Pomocou operátorov $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ môžeme formálne elegantne vyjadriť niektoré stavy a operátory vo Fokovom priestore, s ktorými sme sa stretli v predchádzajúcom článku. Stav N -časticovej sústavy, zodpovedajúci časticiam lokalizovaným v bodoch $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ bude

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_N) |0, 0, \dots\rangle$$

Teraz už môžeme urobiť to, čo sme sľúbili v predchádzajúcom článku za rovnicou (5.6). Výraz na pravej strane (5.6) môžeme podľa (5.3) a podľa predchádzajúcej rovnice zapísať ako

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, n_2, \dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} \dots \langle 0, 0, \dots | \hat{\psi}(\mathbf{x}_N) \dots \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1) (\mathbf{a}_1^+)^{n_1} (\mathbf{a}_2^+)^{n_2} \dots | 0, 0, \dots \rangle$$

Ak využijeme vyjadrenie $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ v tvare (2a) a komutačné vzťahy (1), dostaneme skutočne pre $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, n_2, \dots \rangle$ vyjadrenie (5.1). Podrobnosti prenechávame čitateľovi.

Jedno- a dvojčasticové operátory, t. j.

$$\mathbf{F} = \sum_{ij} f(j, i) \mathbf{a}_j^+ \mathbf{a}_i \quad (5)$$

kde

$$f(j, i) = \int \psi_j^*(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}$$

a

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2} \sum_{i, j, k, l} \langle i, j | \mathbf{V} | k, l \rangle \mathbf{a}_i^+ \mathbf{a}_j^+ \mathbf{a}_k \mathbf{a}_l$$

kde

$$\langle i, j | \mathbf{V} | k, l \rangle \equiv \int \psi_i^*(\mathbf{x}_\alpha) \psi_j^*(\mathbf{x}_\beta) \mathbf{V}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta) \psi_k(\mathbf{x}_\alpha) \psi_l(\mathbf{x}_\beta) d^3 \mathbf{x}_\alpha d^3 \mathbf{x}_\beta \quad (6)$$

môžeme vyjadriť v tvare

$$\mathbf{F} = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} \quad (5')$$

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\psi}^+(\mathbf{y}) \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \quad (6)$$

Skutočne, ak do (5') dosadíme vyjadrenia (2), pričom v $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ označíme sčítovací index ako j a v $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ ako i , dostaneme priamo (5). Rovnakým postupom ukážeme tiež, že zo (6') vyplýva (6). Sústava interagujúcich častíc vo vonkajšom poli má hamiltonián, ktorý je súčtom jednočasticových a dvojčasticových operátorov. Ak potenciálna energia častice vo vonkajšom poli je $U(\mathbf{x})$ a vzájomná interakcia

²⁴⁴ Poznamenajme k označeniu: \mathbf{x} je argument (premenná) vlnovej funkcie, \mathbf{y} je charakteristika (označenie) stavu (3).

²⁴⁵ Ide o „zovšeobecnený stav“ v zmysle, ktorý sme použili v 10. kapitole. Tu používaná terminológia nie je dostatočne rigorózna, ale pre dané účely je postačujúca.

časť je $V(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, máme pre hamiltonián vo Fokovom priestore vyjadrenie

$$H = \int d^3\mathbf{x} [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \quad (7)$$

Prvý člen na pravej strane môžeme prepísať využitím identity $f\Delta g = \nabla \cdot (f\nabla g) - \nabla f \cdot \nabla g$ a prevedením členu s divergenciou na povrchový integrál pomocou Gaussovej vety. Integrál cez vzdialený povrch kladieme rovný nule, lebo predpokladáme, že stavy, na ktoré (7) pôsobí, sú také, že ich vlnové funkcie v nekonečne vymiznú. Potom prvý člen v (7) bude

$$+ \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3\mathbf{x} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \nabla \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (7')$$

Pre sústavu fermiónov môžeme všetky predchádzajúce argumenty zopakovať s minimálnymi modifikáciami. Namiesto komutačných vzťahov (1) budeme mať antikomutačné vzťahy. Treba si ale uvedomiť, že v prípade fermiónov nie je jednočasticový stav určený úplne zadaním vlnového vektora \mathbf{k} , treba ešte špecifikovať priemet spinu s_z . Analógom bozónových operátorov podľa $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ potom budú viackomponentné operátory $\hat{\psi}_s(\mathbf{x})$, kde rôzne komponenty zodpovedajú rôznym priemetom spinu. Príslušné antikomutačné vzťahy budú mať tvar²⁴⁶:

$$\{\mathbf{a}_r(\mathbf{k}), \mathbf{a}_s(\mathbf{k}')\} = \{\mathbf{a}_r^\dagger(\mathbf{k}), \mathbf{a}_s^\dagger(\mathbf{k}')\} = 0, \quad \{\mathbf{a}_r(\mathbf{k}), \mathbf{a}_s^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{rs} \quad (8)$$

$$\{\hat{\psi}_r(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s(\mathbf{y})\} = \{\hat{\psi}_r^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{y})\} = 0 \quad (9)$$

$$\{\hat{\psi}_r^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{y})\} = \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta_{rs}$$

Na základe vzťahov (8), (9) si čitateľ môže sám dokázať, že vzťahy (2) – (7) majú pre fermióny presne analogický tvar ako pre bozóny s tým, že tam, kde v prípade bozónov je sčítanie resp. integrácia cez premenné \mathbf{k} alebo \mathbf{x} , je v prípade fermiónov ešte aj sčítanie cez komponenty prislúchajúce rôznej orientácii spinu.

Napokon ukážeme, že teória určená hamiltoniánom (7) a komutačnými vzťahmi (4) sa dá získať aj formálnym kvantovaním Schrödingerovej rovnice, chápanej ako rovnica klasického kontinua. Takéto kvantovanie nazývame sekundárnym (primárnym je zavedenie samotnej SchR) a o jeho fyzikálnom zmysle sa zmienime v závere článku.

V predchádzajúcej kapitole sme už uviedli schému kanonického kvantovania kontinua. Podľa nej musíme mať najprv hustotu lagranžiánu, z ktorej pomocou Eulerových-Lagrangeových rovníc dostaneme žiadanú pohybovú rovnicu kontinua; v našom prípade Schrödingerovu rovnicu. Eulerove-Lagrangeove rovnice sú

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} \right)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} = 0 \quad (10)$$

pre každú nezávislú komponentu podľa Φ_i .

Ukážeme najprv, že lagranžián, ktorý vedie na SchR, možno vybrať napríklad v tvare

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V \psi^* \psi \quad (11)$$

kde $\psi^*(\mathbf{x})$ je funkcia komplexne združená k $\psi(\mathbf{x})$ a $V(\mathbf{x})$ označuje potenciál. Zvoľme ψ a ψ^* ako dve nezávislé komponenty a dostaneme pohybové rovnice najprv pre variácie voči ψ^* :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = 0, \quad + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial \psi^* / \partial x_k)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k \psi, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = i\hbar \dot{\psi} - V \psi$$

²⁴⁶ Tu už vypisujeme explicitne všetky kvantové čísla.

a po dosadení do (10) dostaneme SchR

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi$$

Pohybové rovnice vyplývajúce zo stacionárnosti voči variáciám ψ budú

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi} = i\hbar \psi^*, \quad + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial(\partial \psi / \partial x_k)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k \psi^*, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \psi} = -V \psi^*$$

a dosadením do (10) prideme k rovnici komplexne zdruzenej k (12), takže formalizmus je konzistentný.

Pre hybnosti kanonicky združené k ψ , ψ^* máme

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^* \quad (13)$$

$$\pi^* = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0 \quad (14)$$

Rovnice (13) a (14) predstavujú istý problém pri aplikácii kanonického formalizmu, ktorý potrebujeme na to, aby sme mohli systém kvantovať. Ukazujú, že očakávané kanonické premenné ψ , ψ^* , π , π^* nie sú navzájom nezávislé, systém má fakticky menší počet stupňov voľnosti než by sme naivne očakávali. Z rovníc (13) a (14) je súčasne zrejmý i spôsob riešenia problému, za nezávislé kanonicky združené premenné stačí brať ψ ako „zovšeobecnenú súradnicu“ a π ako k nej „zovšeobecnenú hybnosť“. Hustotu hamiltoniánu sústavy potom dostaneme už podľa štandardného postupu:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\psi} - \mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + V \psi^* \psi \quad (15)$$

Pre celkovú energiu platí:

$$H = \int \mathcal{H} d^3 \mathbf{x} = \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + V \psi^* \psi \right\} \quad (16)$$

Doteraz sme stále hovorili o klasickom kontinuu. Ku kvantovej teórii tohto „Schrödingerovho kontinua“ prejdeme tak, že kanonicky združené veličiny π , ψ sa stanú operátormi spĺňajúcimi komutačný vzťah

$$[\hat{\pi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -i\hbar \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (17)$$

Vzhľadom na vzťah (13) to ale znamená

$$[\hat{\psi}^+(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -\delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (18)$$

Okrem toho budú platiť ešte komutačné vzťahy

$$[\hat{\psi}^+(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = 0 \quad (18b)$$

Lahko si môžeme všimnúť, že vzťahy (18), ktoré sme tu dostali sekundárnym kvantovaním „Schrödingerovho kontinua“ sú presne rovnaké ako vzťahy (4) odvodené vyššie pre operátory $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ zavedené celkom iným spôsobom, t. j. ako operátory anihilácie, resp. kreácie častice v danom bode \mathbf{x} . Doteraz sme vlastne ani nemali právo označovať tieto dve veci rovnakým symbolom $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, pretože sme $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ vo vzťahoch (2) a $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ pri kvantovaní SchR zavádzali logicky úplne nezávisle. Akonáhle sme však už dospeli ku vzťahom (18), môžeme prísť rýchlo aj ku kreačným a anihilačným operátorom a ku komutačným vzťahom (1). Stačí zapísať formálne rozklady (2) so zatiaľ neznámymi operátormi \mathbf{a}_i , \mathbf{a}_i^+ , dosadiť tieto rozklady do (18), násobiť to, čo takto dostaneme funkciami $\psi_i(\mathbf{x})\psi_i^*(\mathbf{x})$ a integrovať cez celý priestor v \mathbf{x} a v \mathbf{y} . Prideme tak priamo ku komutačným vzťahom (1) a tieto komutačné vzťahy už vedú k interpretácii \mathbf{a}_i ako anihilačného a \mathbf{a}_i^+ ako kreačného operátora (celkom rovnako ako pri diskusii lineárneho harmonického oscilátora v energetickej reprezentácii).

Identičnosť oboch formalizmov, t. j. Fokovho priestoru a sekundárneho kvantovania je úplná. Ak v hamiltoniáne sústavy danom vzťahom (16) chápeme $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^+$ ako operátory spĺňajúce komutačné vzťahy (18), dostaneme práve prvé dva členy v (7) s úpravou naznačenou v (7'). Celý hamiltonián (7) by sme dostali, keby sme do lagranžiánu 1 použitom pri zostavovaní Schrödingerovej rovnice pridali ešte člen rovný ostatnému členu v (7) so záporným znamienkom.

Vzniká ešte otázka fyzikálneho zmyslu Schrödingerovho kontinua, ktoré sme tu kvantovali. Otázku chápeme takto: Ak kvantujeme kmity struny, dostaneme kvantá týchto kmitov (nazývané fonónmi), ak kvantujeme elektromagnetické pole (t. j. opíšeme ho ako sústavu oscilátorov), dostaneme kvantá tohto poľa, t. j. fotóny. Pýtame sa na to, čo sme vlastne kvantovali, keď sme dostali ako kvantá poľa bozóny vo vonkajšom potencionáli? Odpoveď nie je jednoduchá, pretože v bežnej praxi sa nestretávame s klasickým Schrödingerovým kontinuumom, t. j. s makroskopickou veličinou opísanou riešením SchR. V extrémnych situáciách ale také sústavy existujú. Elektróny v supravodiči si napríklad v istom priblížení môžeme predstaviť ako pospájané do tzv. Cooperových párov, ktoré sú už bozónmi. Makroskopický stav supravodiča potom možno opísať vlnovou funkciou²⁴⁷, ktorá spĺňa SchR. Jednotlivé bozóny sú potom kvantami tohto makroskopického Schrödingerovho poľa. Podobná situácia vzniká vtedy, keď sa sústava bozónov pri nízkej teplote dostáva do jediného jednočasticového kvantového stavu, napr. atómy He⁴ pri nízkej teplote (Boseho-Einsteinova kondenzácia).

Doteraz sme hovorili iba o sekundárnom kvantovaní SchR pre sústavu bozónov. Pre sústavu fermiónov postupujeme úplne rovnako, iba pri uvádzaní vzťahov (17) a (18) použijeme namiesto komutátorov antikomutátory, takže dostaneme

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}_r(\mathbf{y}), \hat{\psi}_s^+(\mathbf{x})\} &= \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})\delta_{rs} \\ \{\hat{\psi}_r(\mathbf{y}), \hat{\psi}_s(\mathbf{x})\} &= \{\hat{\psi}_r^+(\mathbf{y}), \hat{\psi}_s^+(\mathbf{x})\} = 0\end{aligned}\tag{19}$$

Spôsobom naznačeným za rovnicou (18) odtiaľto, po použití rozkladov (2), pridáme k antikomutačným vzťahom (5.24).

15.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Napište explicitne vlnovú funkciu základného stavu atómu Li v priblížení, v ktorom zanedbávate interakciu elektrónov. Úlohu riešte dvomi spôsobmi: a) Slaterovým determinantom; b) tak, že napíšete $\Sigma(-1)^\eta f(x_1)g(x_2)h(x_3)$, sčítajte cez všetky permutácie (x_1, x_2, x_3) a číslo η položte rovné počtu transpozícií, ktorými sa od pôvodného poradia dostanete k danej permutácii.
- Predstavte si, že sa podarilo vyrobiť atóm Li, v ktorom sú všetky tri elektróny nahradené π^- -mezónmi. π^- -mezóny sú bozónmi s nulovým spinom, ich hmotnosť je asi $140 \text{ MeV}/c^2$.
 - Ako by vyzerala vlnová funkcia základného stavu takéhoto atómu pri zanedbaní vzájomnej elektrostatickej interakcie π^- -mezónov?
 - Ako by v tomto priblížení vyzerala vlnová funkcia prvého excitovaného stavu? Prediskutujte aj jej normalizáciu.
- Atóm uhlíka má šesť elektrónov: dva v stave $1s$, dva v stave $2s$ a dva v stave $2p$. Uvažujme teraz len tieto dva $2p$ elektróny. Každý z nich má $l = 1$ a $s = 1/2$. Ich celkový moment hybnosti môže byť teda $L = 0, 1, 2$ a ich celkový spin môže byť 0 alebo 1 . Sú všetky kombinácie (L, S) povolené Pauliho princípom? Pripomienka: Ak z dvoch vektorov vytvárame skalár alebo symetrický bezstopový tenzor, bude výsledok symetrický, ak vytvárame vektor, bude antisymetrický.
- Predstavte si molekulu vodíka H_2 ako dva protóny v určitých pevných polohách a dva elektróny pohybujúce sa v tomto poli. Navrhňte tvar vlnovej funkcie dvojelektrónovej sústavy pri zanedbaní vzájomnej interakcie elektrónov. Prediskutujte celkový spin dvojice elektrónov a porozmýšľajte o tom, aký celkový spin elektrónov bude mať asi molekula H_2 v základnom stave.
- Atómové jadro si vo veľmi hrubom priblížení môžeme predstaviť ako súbor neinteragujúcich nukleónov v trojrozmernej potenciálovej jame s istou hĺbkou $-V_0$ a istým polomerom R_0 . Naznačte, ako by ste v tomto zjednodušenom modeli konštruovali vlnovú funkciu jadra uhlíka v základnom stave!
- Dokážte, že stavy lineárneho harmonického oscilátora dané ako $|n\rangle = (n!)^{-1/2}(\mathbf{a}^+)^n|\psi_0\rangle$ tvoria ortonormovaný systém, ak základný stav $|\psi_0\rangle$ spĺňa podmienky $\mathbf{a}|\psi_0\rangle = 0$, $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$ a ak platí $[\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] = 1$.
- Uvažujte sústavu neinteragujúcich elektrónov. Kreačné a anihilačné operátory spĺňajú vzťahy: $\{\mathbf{a}^+(\mathbf{k}, s), \mathbf{a}(\mathbf{q}, s')\} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q})\delta_{ss'}$, a ostatné antikomutátory sú nulové. Zaveďte operátory $\mathbf{B}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathbf{a}^+(\mathbf{k}, \uparrow)\mathbf{a}^+(\mathbf{k}', \downarrow)$. Nájdite komutačný vzťah

$$[\mathbf{B}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'), \mathbf{B}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] = 0$$

²⁴⁷ Pozri diskusiu v poslednom článku posledného dielu Feynmanových prednášok z fyziky.

Prediskutujte fyzikálny význam operátorov $B^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ a stavov typu

$$b^+(\mathbf{p}, \varphi)|0\rangle \equiv \int \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{k}') B^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{q}) d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{k}' |0\rangle$$

Nájdite komutačné vzťahy operátorov typu $b^+(\mathbf{p}, \varphi)$ z predchádzajúceho výrazu.

8. Nech $\hat{\psi}_k(\mathbf{x})$ je operátor sekundárne kvantovaného bozónového poľa

$$\hat{\psi}_k(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{a}(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{x})$$

kde $\{\psi_k(\mathbf{x})\}$ je ortonormovaný súbor jednočasticových vlnových funkcií a kreačné a anihilačné operátory $\mathbf{a}^+(\mathbf{k})$, $\mathbf{a}(\mathbf{q})$ spĺňajú komutačný vzťah

$$[\mathbf{a}(\mathbf{q}), \mathbf{a}^+(\mathbf{k})] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$$

Ukážte, že platí

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

Interpretujte fyzikálne tento výsledok.

Návod: Začnite s tým, že uvážite strednú hodnotu predchádzajúceho komutátora vo vákuovom stave a potom vo všeobecnom n -časticovom stave.

9. Nájdite maticový element $\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | V | \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4 \rangle$ operátora V daného explicitne v texte za rovnicou (6.5). Stav $|\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle$ a $|\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4\rangle$ sú $|\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\rangle = \mathbf{a}^+(\mathbf{q}_1) \mathbf{a}^+(\mathbf{q}_2) |0\rangle$. Výpočet urobte pre fermióny i pre bozóny.

16 ZRÁŽKY ČASTÍC

16.1 ÚVOD

Podstatná časť informácie o štruktúre častíc a o ich interakciách pochádza z experimentálnych údajov o zrážkach častíc. Časť kvantovej mechaniky zaoberajúca sa popisom zrážok častíc sa niekedy nazýva *teóriou rozptylu*. Poznamenajme hneď, že pre zjednodušenie terminológie budeme objekty zúčastňujúce sa na zrážke nazývať *časticami* bez ohľadu na to, či ide o elementárne objekty, ako napr. elektrón alebo komplikovanejšie sústavy, ako atómy alebo jadrá.

V tejto kapitole sa zoznámime len s niekoľkými základnými metódami teórie rozptylu. Ďalšie podrobnosti či metódy čitateľ nájde v špeciálnej literatúre.

Na úvod si krátko zopakujeme to, čo už o rozptyle vieme zo siedmej kapitoly, povieme si niekoľko slov o vzťahu medzi laboratórnou sústavou a sústavou hmotného streda a pridáme terminologické poznámky.

Pri typickom zrážkovom experimente dopadá zväzok častíc, pohybujúci sa, povedzme, v kladnom smere osi z na časticu terčika. Pre zjednodušenie opisu volíme začiatok súradnicovej sústavy v mieste, kde sa nachádza častica terčika. Rozptýlenú časticu registrujeme detektormi umiestnenými okolo terčika. Najjednoduchší prípad pružného rozptylu je charakterizovaný diferenciálnym účinným prierezom $d\sigma/d\Omega$, ktorý je daný vzťahom

$$dn = \frac{d\sigma}{d\Omega} jN d\Omega \quad (1)$$

kde dn je počet rozptýlených častíc zachytených detektorom pokrývajúcim priestorový uhol $d\Omega$, j je hustota prúdu dopadajúcich častíc, N je počet častíc v terčiku. Vzťah (1) platí za predpokladu, že terčik je „tenký“ a pri interakcii dopadajúcej častice s terčikom nenastáva viacnásobný rozptyl.

Kvantovomechanický opis pružného rozptylu je nasledujúci. Ak je častica terčika ťažká, môžeme zanedbať jej „odraz“ pri interakcii a uvažujeme rozptyl dopadajúcej častice na statickom rozptylovom centre. Príslušná bezčasová SchR je

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Energiu častice môžeme vyjadriť ako $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, kde m je hmotnosť častice a k je absolútna hodnota vlnového vektora ďaleko od rozptylového centra. Ak ďalej položíme $V(\mathbf{r}) = (\hbar^2 / 2m) U(\mathbf{r})$, prepíšeme (2) na tvar

$$(\Delta + k^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

Riešenie odpovedajúce problému rozptylu má pri $r \rightarrow \infty$ tvar

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi) \quad (4)$$

kde prvý člen na pravej strane predstavuje rovinnú dopadajúcu vlnu a druhý člen je rozbiehavou vlnou. Diferenciálny účinný prierez je jednoducho viazaný s tzv. amplitúdou rozptylu $f(\vartheta, \varphi)$. Platí

$$\sigma(\vartheta, \varphi) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (5)$$

Pri riešení rovnice (3) je veľmi užitočný jej prepis pomocou (bezčasovej) Greenovej funkcie, ktorá je riešením rovnice

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6)$$

Táto rovnica nemá jednoznačné riešenie, to riešenie, ktoré obsahuje v asymptotike iba rozbiehavé vlny, označujeme ako $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Rovnica (3) spolu s požiadavkou na asymptotiku typu (4) je potom ekvivalentná integrálnej rovnici

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (7)$$

Greenova funkcia $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ má explicitný tvar

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k^2 + i\varepsilon - k'^2} d^3\mathbf{k}' \quad (8a)$$

kde $\varepsilon > 0$ označuje spôsob obchádzania singularitu pri integrovaní v komplexnej rovine. Explicitný výpočet v kapitole 7 viedol k výsledku

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8b)$$

Keby sme zmenili znamienko pri ε v rovnici (8a), dostali by sme Greenovu funkciu $G_-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, ktorá obsahuje na rozdiel od (8b) iba faktor $\exp[-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]$, čo pri $r \gg r'$ odpovedá iba zbiehavým sférickým vlnám.

Poruchovým riešením rovnice (7) sme prišli k výrazu pre amplitúdu rozptylu v Bornovej aproximácii

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-ik' \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{ik \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{k}' \quad (9a)$$

kde \mathbf{k} je vlnový vektor dopadajúcej častice a \mathbf{k}' je to isté pre rozptýlenú časticu.

Pri štúdiu nestacionárnej poruchovej teórie v kapitole 9 sme výraz pre Bornovu aproximáciu odvodili ešte raz, pričom sme vychádzali z vyjadrenia

$$W_{km} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{km}|^2 \rho(E_k) \quad (9b)$$

pre pravdepodobnosť prechodu zo stavu m do stavov k za jednotku času. Tu H'_{km} označuje maticový element poruchy medzi začiatočným a koncovým stavom a $\rho(E_k)$ je hustota stavov, t. j. počet koncových stavov na jednotkový energetický interval. Energia E_k je daná zákonom zachovania. Pre prípad pružného rozptylu na silovom centre s potenciálnou energiou $V(\mathbf{r})$ zo vzťahu (9b) dostaneme pre diferenciálny účinný prierez to isté, čo dostaneme ako druhú mocninu absolútnej hodnoty $f(\vartheta, \varphi)$ danej vzťahom (9a).

Keď sme vyššie hovorili o typickom rozptylovom experimente, používali sme laboratórnu sústavu, t. j. sústavu, v ktorej je častica terčiku pred zrážkou v pokoji. Z hľadiska teoretického opisu zrážky je laboratórna sústava jednoduchá iba vtedy, ak je častica terčika veľmi ťažká a rozptyl dopadajúcej častice môžeme opísať priamo SchR (2).

Ak sú hmotnosti oboch častíc porovnateľné, je pre teoretický opis rozptylu jednoduchšia sústava hmotného stredy. Z kapitoly 4 už vieme, že SchR pre dve častice s interakciou $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ závisiacou iba od relatívnej vzdialenosti častíc môžeme separovať zavedením súradnice hmotného stredy $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a relatívnej súradnice $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. SchR pre relatívnu súradnicu má rovnaký tvar ako jednočasticová SchR len namiesto hmotnosti častice vystupuje redukovaná hmotnosť $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$.

V sústave hmotného stredy preto platia všetky vzťahy už uvedené v tomto článku a riešením SchR (2) s asymptotikou (4) nájdeme diferenciálny účinný prierez v sústave hmotného stredy zrážajúcich sa častíc. Aby sme ho mohli porovnať s experimentálnymi údajmi, musíme ho previesť do laboratórnej sústavy. Vyberme osi oboch sústav navzájom rovnobežné; veličiny v sústave S^* (hmotného stredy) budeme označovať hviezdičkou, veličiny v sústave S (laboratórnej) nebudú mať zvláštny index.

Najprv nájdeme rýchlosť S^* voči S . Hmotný stred zrážajúcich sa častíc má v S súradnicu $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ a pohybuje sa rýchlosťou

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1\mathbf{v}_1}{m_1 + m_2}$$

pretože $\mathbf{v}_2 = 0$ v laboratórnej sústave. V ďalšom budeme predpokladať, že \mathbf{v}_1 má smer kladnej osi z .

Predpokladajme, že ako produkt zrážky vznikne častica pohybujúca sa v rovine x, z v laboratórnej sústave. Jej zložky rýchlosti označíme ako v_x, v_z . Pre vzťah medzi vyjadrením rýchlosti v S a S^* platí:

$$\begin{aligned}v_x &= v_x^* \\v_z &= v_z^* + \beta\end{aligned}$$

Po vynásobení hmotnosťou a zavedení označenia $p_x = mv_x = p \sin \vartheta, p_z = mv_z = p \cos \vartheta$, kde $p \equiv |\mathbf{p}|$, máme

$$\begin{aligned}p \sin \vartheta &= p^* \sin \vartheta^* \\p \cos \vartheta - m\beta &= p^* \cos \vartheta^*\end{aligned}$$

pričom označenie v S^* je zavedené rovnako ako v S .

Predelením predchádzajúcich rovníc dostaneme vzťah medzi ϑ a ϑ^*

$$\operatorname{tg} \vartheta^* = \frac{p \sin \vartheta}{p \cos \vartheta - m\beta} \quad (10)$$

a celkom analogickým postupom by sme získali vzťah

$$\operatorname{tg} \vartheta = \frac{p^* \sin \vartheta^*}{p^* \cos \vartheta^* + m\beta} \quad (11)$$

Diferenciálny účinný prierez je v oboch sústavách S aj S^* definovaný ako počet častíc rozptýlených do jednotkového priestorového uhla za jednotku času. Ak si priestorový uhol predstavíme ako veličinu experimentálne definovanú istým detektorom, vidíme, že počet častíc registrovaný detektorom musí byť rovnaký, nezávisle od toho²⁴⁸, či opisujeme experiment v sústave S alebo S^* . Príslušné priestorové uhly označíme ako

$$d\Omega = \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi, \quad d\Omega^* = \sin \vartheta^* \, d\vartheta^* \, d\varphi^*$$

a diferenciálny účinný prierez označíme ako $\sigma(\vartheta, \varphi)$ resp. $\sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*)$ (pozri tiež rovnicu (5)) a máme

$$\sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*) \sin \vartheta^* \, d\vartheta^* \, d\varphi^* = \sigma(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \quad (12)$$

Tu sme už využili vzťah $d\varphi = d\varphi^*$. Z rovnice (12) vyplýva

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \sigma^*(\vartheta^*, \varphi^*) \cdot \left| \frac{d \cos \vartheta^*}{d \cos \vartheta} \right| \quad (13)$$

Ostatný faktor v (13) môžeme spočítať explicitne pomocou vzťahov (10) alebo (11). Podrobnosti čitateľ nájde v špeciálnej literatúre²⁴⁹.

Napokon ešte terminologická poznámka. Doteraz sme podrobnejšie hovorili iba o pružnom rozptyle, t. j. o zrážke, pri ktorej sa nemení vnútorná štruktúra častíc. Veľmi často sa ale stáva, že ako výsledok zrážky sa objavia iné častice, ako boli tie, čo do zrážky vstupovali. V atómovej fyzike sa môžeme, napríklad, zaoberať so zrážkou elektrónu s atómom vodíka. Výsledkom zrážky môže byť opäť elektrón a atóm vodíka, alebo dva elektróny a protón, alebo elektrón a atóm vodíka v excitovanom stave. Tieto procesy môžeme zapísať nasledovne:



²⁴⁸ Pripomeňme si, že diferenciálny účinný prierez je definovaný vzťahom (1), v ktorom sa pri prechode zo sústavy S do S^* nemení dn (lebo je definované počtom „šľuknutí“ detektora), nemení sa N a nemení sa ani j (lebo j je úmerné relatívnej rýchlosti častíc $|v_1 - v_2|$ a hustote dopadajúceho zväzku).

²⁴⁹ Odporúčame Messiahovu učebnicu [10] alebo monografiu Baldin, A. M. – Goldanskij, V. I. – Rozentel, I. A.: Kinematika jaderných reakcij. Moskva, 1959, kde možno nájsť aj príslušné relativistické transformácie.

V jadrovej fyzike môžeme ako príklad vybrať zrážku protónu s jadrom deutéria. Podobne ako v (14) výsledky zrážky zapíšeme nasledovne:



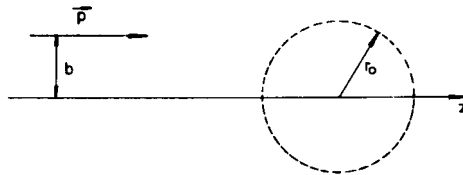
V jadrovej fyzike sa často zrážka nazýva reakciou a o jednotlivých procesoch hovoríme ako o *kanáloch reakcie*. Vo fyzike elementárnych častíc pri vysokých energiách je situácia ešte komplikovanejšia a pri danom type zrážky je mnoho možných konečných stavov.

16.2 ROZKLAD AMPLITÚDY ROZPTYLU DO PARCIÁLNYCH VĹN

Jadrové sily možno často úspešne aproximovať pomocou tzv. Yukawovho potenciálu

$$V(r) = g \frac{1}{r} \exp(-r/r_0) \quad (1)$$

kde $r_0 \approx 10^{-15}$ m. Jednoduchá poloklasická úvaha ukazuje, že pri rozptyle na takomto potenciáli hrá dôležitú úlohu iba niekoľko stavov s nízkymi hodnotami momentu hybnosti. Situácia je znázornená na obr. 16.1. Dopadajúca častica má hybnosť p a pohybuje sa rovnobežne s osou z vo vzdialenosti b od nej.



Obr. 16.1

Potenciál $V(r)$ je veľký iba pre $r \lesssim r_0$. Silové centrum teda ovplyvní pohyb častice len vtedy, ak $b < r_0$. Absolútna veľkosť momentu hybnosti je však daná – v našom klasickom priblížení – vzťahom $L = pb$, a preto možno poznateľnú interakciu očakávať len vtedy, ak

$$\begin{aligned} \hbar l &\leq \hbar k r_0 \\ l &\leq k r_0 \end{aligned} \quad (2)$$

Uvedme hneď jednoduchý odhad založený na tejto nerovnosti. Predstavme si rozptyl neutrónu na protóne, pričom hybnosť neutrónu je $p = 280$ MeV/c. Dosah jadrových síl je

$$r_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-15} \text{ m} \approx \frac{\hbar}{m_\pi c} \approx \frac{\hbar c}{m_\pi c^2} \approx \frac{\hbar c}{140 \text{ MeV}}$$

Podľa vzťahu (2) máme

$$l \lesssim \frac{1}{\hbar} p r_0 \approx 280 \text{ MeV}/(c\hbar) \cdot \frac{\hbar c}{140 \text{ MeV}} \approx 2$$

a pri rozptyle sa uplatnia len stavy s dvomi alebo tromi najnižšími hodnotami l .

Pri tomto odhade sme použili niekoľko elementárnych trikov z odhadov veličín jadrovej fyziky. Energia častíc v jadrovej fyzike sa najčastejšie vyjadruje v jednotkách MeV = 10^6 eV. Hybnosti častíc sa udávajú v jednotkách MeV/c. Je užitočné pamätať si hodnoty $m_\pi c^2 = 140$ MeV a $\hbar/m_\pi c \approx 1,4 \cdot 10^{-15}$ m, kde m_π je hmotnosť π -mezónu. To, že Comptonova vlnová dĺžka π -mezónu a dosah jadrových síl spolu tesne súvisia, nie je náhoda, výmeny π -mezónov majú podstatnú úlohu v jadrových silách a vzťahy (1), (3) sa objavujú už v klasickej Yukawovej práci, v ktorej bola predpovedaná existencia π -mezónov.

Vráťme sa však späť ku kvantovomechanickému opisu problému rozptylu pre krátkodosahové potenciály. Potrebujeme metódu, ktorá by amplitúdu rozptylu rozložila do stavov s daným l a potom potrebujeme nejakým spôsobom zahrnúť zmeny vznikajúce v stavoch s najnižším l v dôsledku interakcie.

Diskusiu budeme spočiatku viesť na veľmi kvalitatívnej úrovni a až neskôr sa vrátíme k matematickým otázkam.

To, čo potrebujeme, je nájsť riešenie rovnice (1.3) s asymptotikou (1.4).

Ako ešte spomenieme podrobnejšie neskôr, môžeme rovinnú vlnu $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \vartheta)$ rozložiť do úplného systému Legendreových polynómov $P_l(\cos \vartheta)$ a pre $r \rightarrow \infty$ potom platí

$$e^{ikz} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ikr} \quad (4)$$

Predstavme si teraz, že takáto rovinná vlna „dopadá“ na rozptylové centrum. Rovinná vlna $\exp(ikz)$ je vzťahom (4) vyjadrená ako superpozícia rozbiehavých a zbiehavých sférických vln, pričom prvé z nich sú tie, ktoré obsahujú faktor $\exp(ikr)$ a druhé faktor $\exp(-ikr)$. Intuitívne je jasné, že rozptylové centrum nemôže zmeniť zbiehavé sférické vlny a pri rozbiehavých môže zmeniť iba fázu. Predpokladáme totiž, že dopadajúca častica nemá spin a potenciál $V(r)$ je sféricky symetrický, preto zachováva moment hybnosti a absolútna hodnota amplitúdy zbiehavej a rozbiehavej vlny s daným l musia byť preto rovnaké.

V dôsledku interakcie sa teda asymptotika rovinatej vlny môže zmeniť iba nasledovne:

$$\psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ikr} \quad (5)$$

Riešenie SchR (1.2) musí mať teda tvar (5), pričom výrazy $\delta_l = \delta_l(k)$ sú zatiaľ bližšie neurčené reálne čísla – o tom ako ich určiť ešte budeme hovoriť. Výraz (5) môžeme prepísať do tvaru (1.4) tak, že každý faktor $\exp(2i\delta_l)$ zapíšeme ako

$$e^{2i\delta_l} = [e^{2i\delta_l} - 1] + 1$$

Výrazy v hranatých zátvorkách prispievajú do druhého člena na pravej strane (1.4) a jednotky prispievajú do rovinatej vlny $\exp(ikz)$. Pre amplitúdu rozptylu $f(\vartheta, \varphi)$ v (1.4) takto dostaneme

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \vartheta) \quad (6)$$

Niekedy využívame identitu

$$e^{2i\delta_l} - 1 = 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

a prepisujeme (6) do tvaru

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \vartheta) \quad (7)$$

Často sa používa tiež označenie

$$a_l(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) \quad (8)$$

príčom $a_l(k)$ sa nazýva *amplitúdou rozptylu* danej parciálnej vlny. Spravidla sa používa tradičná terminológia prebraná zo spektroskopie a parciálne vlny s $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ sa nazývajú postupne *s, p, d, f, g, h, ... parciálnymi vlnami*. Diferenciálny účinný prierez je daný vzťahom (1.5). Ak do tohto vzťahu dosadíme amplitúdu rozptylu danú rovnicou (7), máme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \vartheta) \right|^2 \quad (9)$$

Celkový účinný prierez dostaneme integrovaním (9) cez $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$. Ak využijeme podmienku ortonormovanosti Legendrových polynómov

$$\int_{-1}^1 P_n(z)P_m(z) dz = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm} \quad (10)$$

kde $z = \cos \vartheta$, $dz = -\sin \vartheta d\vartheta$, dostaneme

$$\sigma_0 = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (11)$$

Všimnime si, že možný príspevok k účinnému prierezu od l -tej parciálnej vlny je ohraňovaný hodnotou $4\pi(2l+1)/k^2$.

Amplitúdou rozptylu dopredu, alebo tiež amplitúdou dopredného rozptylu, nazývame výraz $f(\vartheta=0)$. Ak využijeme vzťah $P_l(1) = 1$ platný pre všetky l , dostaneme zo vzťahu (7) pre imaginárnu časť amplitúdy rozptylu dopredu vyjadrenie

$$\text{Im}f(\vartheta=0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (12)$$

Porovnaním s (11) dostaneme

$$\text{Im}f(\vartheta=0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_0 \quad (13)$$

Tento vzťah sa nazýva *optická teoréma*. Odvodili sme ju pre pružný rozptyl. Jej význam je však v tom, že platí i pre reakcie prebiehajúce viacerými kanálmi. Na ľavej strane (13) je v takom prípade amplitúda rozptylu dopredu v pružnom kanáli a napravo stojí účinný prierez celej reakcie, zahrňujúci aj prierezy nepružných procesov.

Všimnime si teraz modifikácie predchádzajúceho formalizmu spôsobené prítomnosťou nepružných procesov. Aby sme mali aj určitú konkrétnu predstavu, môžeme mať na mysli napríklad interakciu nabitého π -mezónu s ťažkým jadrom. V takejto situácii sa π -mezón môže na jadre pružne rozptýliť, ale môže byť jadrom aj „pohltený“, pričom dochádza ku komplikovanej jadrovej reakcii vedúcej k zložitým konečným stavom reakcie. Z hľadiska pružného kanálu reakcie je takto pohltený π -mezón „stratený“. Predchádzajúci formalizmus sa potom zmení v jedinom mieste: pri „prechode“ od rovinatej vlny (4) na vlnovú funkciu (5) sa nemusí zachovávať absolútna hodnota koeficientu pri danej parciálnej vlne a pre asymptotické vyjadrenie $\psi(\mathbf{r})$ dostávame

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\eta_l e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}] \frac{P_l(\cos \vartheta)}{2ikr}$$

kde η_l je reálne číslo spĺňajúce podmienku $0 \leq \eta_l \leq 1$. Toto číslo nazývame *elasticitou* danej parciálnej vlny.

Postupom ako predtým prídeme k vyjadreniu amplitúdy rozptylu v pružnom kanáli za prítomnosti nepružných procesov

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\eta_l e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \vartheta) \quad (14)$$

Teraz sa vrátime naspäť a ukážeme si najprv, ako možno dostať asymptotiku rozkladu rovinatej vlny použité v (4) a potom sa pozrieme na to, ako možno spočítať fázové posuny $\delta_l(k)$ pri rozptyle na potenciáli $V(r)$.

Ako už vieme z kapitoly 4, riešenie rovnice (1.2) pri sféricky symetrickom potenciáli $V(r)$ môžeme hľadať v separovanom tvare

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l,m} R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (16)$$

kde R_l spĺňa radiálnu SchR

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (17)$$

Poznamenajme hneď, že situácia sa tu trochu odlišuje od tej, s ktorou sme sa stretli v kapitole 4. Tam sme sa totiž zaoberali s riešeniami SchR pre viazané stavy, zatiaľ čo tu sa zaujímame o rozptylové stavy. Rozklad (16) je celkom všeobecným rozkladom funkcie $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ do úplného systému funkcií $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Výhodnosť tohto rozkladu pre náš prípad je v tom, že funkcie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sú vlastnými funkciami uhlovej časti Laplaceovho operátora $\nabla_{\vartheta, \varphi}^2$ vystupujúcej v rozklade ∇^2 do sférických súradníc. Vďaka tomuto a vďaka lineárnej nezávislosti sférických funkcií musí potom každá z funkcií $R_l(r)$ spĺňať rovnicu (17). V rovnici (17) je ešte užitočné urobiť úpravy spomínané medzi (1.2) a (1.3) a prepísať (17) do tvaru

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (18)$$

Teraz už môžeme prejsť k rozkladu rovinnej vlny $\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \vartheta)$. Táto funkcia je zrejme riešením rovnice (1.2) pri nulovom potenciáli. Navyše nezávisí od uhla φ , a preto v rozklade (16) sa objavia iba guľové funkcie, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sim P_l \cos \vartheta$. Preto môžeme písať

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \vartheta) \quad (19)$$

pričom funkcie $R_l(r)$ sú riešením (18) pri nulovom potenciáli. Táto rovnica je ale Besselovou diferenciálnou rovnicou a jej riešeniami sú funkcie $j_l(kr)$, $n_l(kr)$. Pritom $j_l(kr)$ nemá singularitu v začiatku, ale $n_l(kr)$ ju má. V rozklade (19) teda nebudú vystupovať $n_l(kr)$ a môžeme písať

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (20)$$

Ostáva nám ešte určiť koeficienty A_l ale to už je čisto technická otázka. Stačí napríklad násobiť (20) $P_l \cos \vartheta$, integrovať cez $\sin \vartheta d\vartheta$ a nájsť príslušný integrál v matematickej literatúre.²⁵⁰

Ako výsledok dostaneme

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (21)$$

Pre $r \rightarrow \infty$ využijeme asymptotické vlastnosti²⁵¹ Besselových funkcií (pozri Dodatok) a dostaneme vzťah (4).

Fázové posuny $\delta_l(k)$ možno v princípe určiť nasledujúcim spôsobom. Schrödingerova rovnica odpovedajúca rozptylu pri dopadajúcej rovinnej vlne $\exp(ikz)$ neobsahuje závislosť od φ v okrajovej podmienke a nebude túto závislosť obsahovať ani v riešení. Preto môžeme riešenie SchR hľadať v tvare

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \vartheta) \quad (22)$$

kde $R_l(r)$ je riešením rovnice (18). Túto rovnicu je ešte užitočné prepísať tak, že za $R_l(r)$ dosadíme podľa vzťahu

$$R_l(r) = \frac{1}{r} \Phi_l(r) \quad (23)$$

Pre $\Phi_l(r)$ takto dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\Phi_l'' + k^2 \Phi_l - \frac{l(l+1)}{r^2} \Phi_l - U(r) \Phi_l = 0 \quad (24)$$

²⁵⁰ Prakticky všetko čo treba, dá sa nájsť v Gradštejn, I. S. – Ryzik, I. M.: Tablicy integrálov, summ, rjadov i proizvedenij. Moskva, 1972, a v Bateman, H. – Erdélyi, A.: Higher Transcendental Functions. New York, 1953 (ruský preklad 1965).

²⁵¹ Potrebny vzťah je $j_l(kr) \rightarrow \frac{1}{x} \sin(x - l\pi/2)$ pre $x \rightarrow \infty$.

Podľa diskusie v kapitole 4 musíme vybrať to riešenie, ktoré je regulárne pre $r \rightarrow 0$. Pre $r \rightarrow 0$ domiňuje v (24) prvý a tretí člen a ľahko sa presvedčíme o tom, že pre malé r máme dve riešenia, pričom prvé je úmerné r^{l+1} a druhé r^{-l} . Hľadáme teda riešenie (24), spĺňajúce podmienku

$$\Phi_l(0) = 0$$

Predpokladajme, že sme takéto riešenie našli. Pretože sme zatiaľ použili iba jednu podmienku ($\Phi_l(0) = 0$), bude toto riešenie určené jednoznačne až na multiplikatívnu konštantu. Podľa predchádzajúceho kvalitatívneho výkladu sa máme zaujímať o asymptotické správanie získaného riešenia v oblasti $r \rightarrow \infty$. Pre veľké r môžeme v (24) zanedbať tretí a štvrtý člen (predpokladáme, že $U(r)$ je krátkodosahový potenciál). Dostaneme tak rovnicu

$$\Phi_l'' + k^2 \Phi_l = 0 \quad (25)$$

Naše riešenie bude teda v asymptotike spĺňať jednoduchú rovnicu (25), ktorej riešenia poznáme – sú to harmonické funkcie. Asymptotický tvar riešenia rovnice (24) teda musí byť

$$\Phi_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_l \sin(kr + \alpha_l)$$

kde α_l je fáza, ktorá je naším riešením jednoznačne zafixovaná. Neurčitost' riešenia sa prejaví iba na multiplikatívnej konštante C_l ale nie na fáze α_l . Pretože asymptotický tvar riešenia chceme porovnávať so vzťahom (5), ukazuje sa výhodné odseparovať z fázy α_l člen $\frac{l\pi}{2}$ a písať asymptotiku v tvare

$$\Phi_l(r) \rightarrow C_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(r)\right) \quad (26)$$

Zdôraznime, že fázové posuny δ_l sú jednoznačne určené riešením²⁵² rovnice (24) pri okrajovej podmienke $\Phi_l(0) = 0$.

Dosadením do (22) máme pre asymptotiku $\psi(r)$ vyjadrenie

$$\psi(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sum C_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(r)\right) P_l(\cos \vartheta) \quad (27)$$

Zatiaľ sme ešte nevyužili to, že sa zaujímate iba o riešenia, ktoré majú asymptotiku (1.4). Táto ďalšia požiadavka už odstraňuje nejednoznačnosť riešenia úplne. Vyplýva z nej, že neznámu multiplikačnú konštantu riešenia treba voliť tak, aby konštantu C_l v asymptotickom vyjadrení (27) bola rovná

$$C_l = \frac{1}{k} e^{i\pi/2} e^{i\delta_l}$$

Po dosadení do (27) dostaneme priamo vyjadrenie (5), ktoré sme už predtým používali.

16.3 ROZPTYL IDENTICKÝCH ČASTÍC

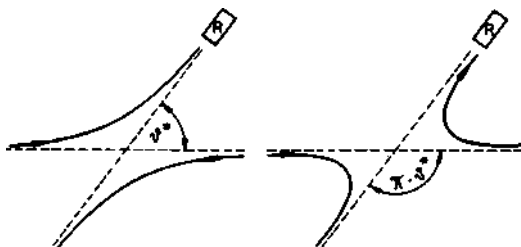
Formalizmus z predchádzajúceho článku treba trochu modifikovať, ak sa zaoberáme rozptylom dvoch identických častíc. Korektný opis dostaneme pri dôslednom používaní sekundárneho kvantovania, tu sa ale obmedzíme na intuitívny výklad dôsledkov identičnosti častíc. Predstavme si najprv rozptyl dvoch bezspinových identických častíc, napríklad $\alpha + \alpha \rightarrow \alpha + \alpha$ alebo $\pi^+ + \pi^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^+$. Predpokladajme, že poznáme potenciálnu energiu ich interakcie $V(r)$, a že sme, nerešpektujúc identitu častíc, našli už amplitúdu rozptylu $f(\mathcal{G}^*)$. Prístroje registrujúce rozptýlené častice však nemôžu rozlíšiť medzi procesom, pri ktorom sa dopadajúca častica rozptýli pod uhlom \mathcal{G}^* a procesom, pri ktorom sa rozptýli pod uhlom $\pi - \mathcal{G}^*$. Pritom rozptyl uvažujeme v sústave hmotného streda. Obidva procesy sú znázornené na

²⁵² Vidno to aj z nasledujúceho argumentu. V oblasti $r \rightarrow 0$ máme dve nezávislé riešenia, jedno sa správa ako r^{l+1} , druhé ako r^{-l} . Podobne pre $r \rightarrow \infty$ máme dve nezávislé riešenia, $\cos(kr)$ a $\sin(kr)$. Ak pre $r \rightarrow 0$ vyberieme jednu z možností, fixujeme tým superpozíciu $\cos(kr)$ a $\sin(kr)$ pri veľkých r . Pripomíname ešte, že uvažujeme len reálne riešenia.

obr. 16.2. Prvý z nich je opísaný amplitúdou $f(\mathcal{G}^*)$, druhý amplitúdou $f(\pi - \mathcal{G}^*)$. Obidva procesy sú koherentné, a preto výslednú amplitúdu, rešpektujúcu identitu častíc, dostaneme v tvare

$$F_S(\mathcal{G}^*) = f(\mathcal{G}^*) + f(\pi - \mathcal{G}^*) \quad (1)$$

kde index S označuje uskutočnenú symetrizáciu. Vlnová funkcia dvojice identických častíc s nulovým spinom v konečnom stave musí byť symetrická voči ich výmene. Táto výmena však odpovedá v sústave hmotného stredu zámene $\mathbf{r} \leftrightarrow -\mathbf{r}$, a to znamená $\mathcal{G}^* \leftrightarrow \pi - \mathcal{G}^*$. Odtiaľ dostávame znamienko + na pravej strane (1).



Obr. 16.2

Diferenciálny účinný prierez počítame podľa vzťahu

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega^*} = |F_S(\mathcal{G}^*)|^2 = |f(\mathcal{G}^*) + f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 \quad (2)$$

a pri výpočte celkového účinného prierezu používame vzťah

$$\sigma = \frac{1}{2} \int \frac{d\sigma_S}{d\Omega^*} d\Omega^* = \frac{1}{2} \int |f(\mathcal{G}^*) + f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 d\Omega^* \quad (3)$$

Faktor 1/2 na pravej strane zabraňuje dvojnásobnému započítaniu jednotlivých príspevkov. Tým, že sme symetrizovali amplitúdu rozptylu a teda aj vlnovú funkciu koncového stavu, rešpektovali sme identitu častíc. Potom ale stav, ktorý dostaneme zámene oboch častíc, už nie je novým fyzikálnym stavom. Zámene častíc ale odpovedá zámene $\mathcal{G}^* \rightarrow \pi - \mathcal{G}^*$ v symetrizovanej amplitúde rozptylu $F_S(\mathcal{G}^*)$. Vo vzťahu (3) by sme teda mali vypustiť faktor 1/2 a integrovať iba cez oblasť $0 \leq \mathcal{G}^* \leq \pi/2$. Vzhľadom na symetriu $F_S(\mathcal{G}^*)$ voči zámene $\mathcal{G}^* \rightarrow \pi - \mathcal{G}^*$ je to však to isté ako integrovať cez celý priestorový uhol a výsledok deliť dvomi tak, ako sme to urobili v (3).

Predchádzajúce vzorce platili pre rozptyl bozónov opísaných symetrickou vlnovou funkciou. Pre rozptyl fermiónov musíme zobrať do úvahy požiadavku antisymetričnosti vlnovej funkcie voči súčasnej zámene priestorových a spinových súradníc. Pre sústavu dvoch elektrónov máme napr. štyri možné vlnové funkcie

$$\begin{aligned} f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,1} \\ f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,0} \\ f_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{1,-1} \\ f_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{0,0} \end{aligned} \quad (4)$$

kde index A, resp. S označuje antisymetriu, resp. symetriu priestorovej vlnovej funkcie. Spinové vlnové funkcie χ_{s, s_z} sú symetrické pre $S = 1$ a pri $S = 0$ máme antisymetrickú vlnovú funkciu.

Ak sa dva elektróny nachádzajú v stave s antisymetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. *tripletný stav*), tak amplitúda rozptylu bude antisymetrická voči zámene $\mathcal{G}^* \leftrightarrow \pi - \mathcal{G}^*$ a pre diferenciálny účinný prierez dostaneme

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega^*} = |f(\mathcal{G}^*) - f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 = |F_A(\mathcal{G}^*)|^2 \quad (5)$$

kde amplitúda rozptylu $f(\mathcal{G})$ je opäť počítaná bez rešpektovania identity častíc.

Ak pri rozptyle elektrónov výsledná vlnová funkcia zodpovedá stavu s celkovým spinom rovnajúcim sa nule (tzv. *singletný stav*), tak je priestorová časť vlnovej funkcie symetrická a diferenciálny účinný prierez je daný vzťahom

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega^*} = |f(\mathcal{G}^*) + f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 = |F_s(\mathcal{G}^*)|^2 \quad (6)$$

Ak v experimente používame nepolarizovaný zväzok i terč a nemeríme ani priemety spinov v koncovom stave, potom zrejme počet prípadov, keď ide o rozptyl v singletnom a tripletnom stave, je daný jednoduchou štatistikou a pozorovaný účinný prierez bude daný vzťahom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega^*} = \frac{3}{4} |f(\mathcal{G}^*) - f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 + \frac{1}{4} |f(\mathcal{G}^*) + f(\pi - \mathcal{G}^*)|^2 \quad (7)$$

Faktory 3/4 a 1/4 odpovedajú tomu, že dvojelektrónová funkcia sa s pravdepodobnosťou 3/4 vyskytuje v tripletnom a s pravdepodobnosťou 1/4 v singletnom stave. Relatívnu váhu vidno z toho, že pri dvojelektrónových funkciách máme podľa (4) tri tripletné a jednu singletnú vlnovú funkciu.

Dôsledky symetrizácie vidno prakticky ihneď, ak za amplitúdu $f(\mathcal{G}^*)$ zoberieme napríklad amplitúdu rozptylu pre Rutherfordov rozptyl, spočítame diferenciálne účinné prierezy (5), (6), (7) a porovnáme ich s výsledkom získaným bez rešpektovania identičnosti častíc.

Poučný je tiež rozklad symetrickej a antisymetrickej amplitúdy $F_s(\mathcal{G}^*)$ a $F_A(\mathcal{G}^*)$ do parciálnych vln. Obidve tieto aplikácie prenecháme čitateľovi.

16.4 ROZPTYL ELEKTRÓNU NA ATÓME

Začneme s rozptylom elektrónu na najjednoduchšom atóme – atóme vodíka. Budeme tiež predpokladať, že v hrubom priblížení možno zanedbať identičnosť dopadajúceho elektrónu a elektrónu v atóme vodíka a že možno zanedbať všetky efekty spôsobené spinom elektrónov. Dopadajúci elektrón budeme nazývať elektrónom „1“ a elektrón v atóme vodíka bude mať číslo „2“. Našou úlohou je nájsť diferenciálny účinný prierez pre rozptyl elektrónu do priestorového uhla $d\Omega$ pri súčasnom prechode atómu zo základného stavu ψ_0 do určitého excitovaného stavu ψ_n .

Pri riešení úlohy používame nestacionárnu poruchovú metódu. Vlnová funkcia začiatočného stavu je

$$\psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} \psi_0(\mathbf{r}_2) \quad (1)$$

a vlnová funkcia konečného stavu je

$$\psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_1} \psi_n(\mathbf{r}_2) \quad (2)$$

Vo vzťahoch (1) a (2) je V normalizačný objem, $\hbar\mathbf{k}$ je hybnosť dopadajúceho a $\hbar\mathbf{k}'$ rozptýleného elektrónu. Absolútne hodnoty k , k' sú viazané zákonom zachovania energie

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + E_n \quad (3)$$

Podľa (1.9b) nestacionárna poruchová metóda pre pravdepodobnosť prechodu (za jednotku času) zo začiatočného stavu i do konečného stavu f dáva

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (4)$$

kde

$$H'_{fi} = \int \psi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H' \psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$$

Porucha H' odpovedá interakcii dopadajúceho elektrónu s atómom vodíka

$$H' = -\frac{e'^2}{r_1} + \frac{e'^2}{r_{12}} \quad (5)$$

Prvý člen reprezentuje interakciu dopadajúceho elektrónu s jadrom atómu vodíka, druhý opisuje interakciu oboch elektrónov. Po dosadení do výrazu H'_{fi} a jednoduchých úpravách dostaneme

$$H'_{fi} = \frac{1}{V} (-e'^2) \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_1} \frac{1}{r_1} d^3\mathbf{r}_1 \int \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 + \\ + \frac{1}{V} (-e'^2) \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_1} d^3\mathbf{r}_1 \int \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2$$

Ak stav ψ_n je excitovaným stavom, funkcie ψ_n, ψ_0 sú ortogonálne a integrál cez \mathbf{r}_2 v prvom člene na pravej strane je nulový. Druhý integrál je veľmi príbuzný tým, ktoré sme už vyčíslovali v kapitole 7 pri diskusii elektromagnetických formfaktorov. Namiesto premenných $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ použijeme premenné $\mathbf{r}_2, \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ a pomocou týchto premenných prepíšeme H'_{fi} do tvaru

$$H'_{fi} = \frac{e'^2}{V} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{r} d^3\mathbf{r} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_2} \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 \quad (6)$$

S prvým z týchto integrálov sme sa už stretli pri skúmaní amplitúdy rozptylu (v prvom Bornovom priblížení) na Coulombovom potenciáli, druhý integrál je trochu príbuzný atómovým formfaktorom, ale líši sa od nich tým, že teraz pod integrálom vystupujú dve rôzne vlnové funkcie atómu vodíka. Zavedme označenie

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$$

ktoré ukazuje, že \mathbf{q} je hybnosť prenesená od dopadajúceho elektrónu na atóm vodíka. Ďalej položíme

$$F_{n0}(\mathbf{q}) = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_2} \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 \quad (7)$$

Vyjadrenie pre H'_{fi} sa potom líši od Bornovej aproximácie pre rozptyl na Coulombovom potenciáli iba týmto faktorom a tým, že energia rozptýleného elektrónu nie je rovná energii dopadajúceho elektrónu, ale je daná vzťahom (3). Teraz môžeme s výrazom H'_{fi} daným rovnicou (6) urobiť všetko to, čo sme robili v kapitole 9 pri výpočte diferenciálneho účinného prierezu. Zmeny sú minimálne a uvedieme preto iba konečný výsledok

$$\frac{d\sigma_{n0}}{d\Omega} = |f_0(\mathbf{k}', \mathbf{k}) F_{n0}(\mathbf{q})|^2 \cdot \frac{k}{k'} = \left(\frac{d\sigma(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{d\Omega} \right)_R \cdot |F_{n0}(\mathbf{q})|^2 \cdot \frac{k'}{k} \quad (8)$$

V tomto výraze diferenciálny účinný prierez s indexom R označuje Rutherfordovu formulu, $|F_{n0}(\mathbf{q})|^2$ je druhá mocnina nepružného formfaktora a ostatný faktor k'/k pochádza z integrovania cez konečné stavy elektrónu a z výrazu pre hustotu prúdu dopadajúceho elektrónu. Hustota prúdu sa totiž objaví pri prechode od pravdepodobnosti prechodu k diferenciálnemu účinnému prierezu.

Vzťah (8) udáva pravdepodobnosť rozptylu dopadajúceho elektrónu do priestorového uhlu $d\Omega$ pri súčasnej excitácii atómu do stavu n . Pri odvodení vzťahu (8) sme mali stále na mysli n -tú excitovanú hladinu z diskrétného spektra. Pri veľmi vysokých energiách dopadajúceho elektrónu sú ale možné prechody atómu vodíka do spojitého spektra. Situácia odpovedá tomu, že dopadajúci elektrón sa nielen rozptýli, ale aj vyrazí elektrón z atómu vodíka. Pri takýchto procesoch v experimente sa spravidla určuje iba energia a smer rozptýleného elektrónu a vzťah (8) je užitočné prepísať ako

$$\frac{d\sigma_{n0}}{dE'd\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \sum_n |F_{n0}(q)|^2 \cdot \frac{k'}{k} \delta \left(E' + E_n - E_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad (9)$$

Analóg výrazu násobiaceho $(d\sigma/d\Omega)_R$ na pravej strane sa dnes často používa vo fyzike elementárnych častíc a nazýva sa štruktúrnou funkciou. V tomto kontexte je zvlášť zaujímavá analýza rozptylu vysokoenergetických elektrónov na atómoch s viacerými elektrónmi. Táto analýza je podrobne prevedená v klasickej učebnici Landaua a Lifšica [9] a veľmi pekný prehľad klasickej literatúry experimentálnej i teoretickej je vo Westovom článku.²⁵³

²⁵³ West, G. B.: Electron Scattering from Atoms, Nuclei and Nucleons. Physics Reports 18 (1975), s. 263-323.

Podstatným výsledkom analýzy je to, že pri veľmi vysokých energiách hlavným príspevkom k (9) je nekoherentný rozptyl dopadajúcich elektrónov na jednotlivých elektrónoch atómu. Nekoherentnosť a vysoká energia vedú k tomu, že dopadajúci elektrón sa rozptyľuje na viacerých bodových časticích a nie na spojitom rozdelení náboja v atóme.

Na podrobnejšiu analýzu tejto aktuálnej a zaujímavej otázky však nemáme v úvodnej učebnici dost miesta.

16.5 OPIS ROZPTYLU POMOCOU PROPAGÁTORA

Doteraz sme sa zaoberali s problémom rozptylu v bezčasovom formalizme. Teraz si ukážeme, ako možno rozptyl častice na silovom centre opísať v časovom formalizme a nájsť príslušný poruchový rozvoj. Budeme pritom používať Greenovu funkciu časovej Schrödingerovej rovnice, nazývanú tiež *propagátorom*.

Pri rozptyle častice na potenciáli sa zaujíame o riešenie časovej SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H_0 \psi(\mathbf{r}, t) + H'(t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

kde

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (2)$$

a porucha $H'(t)$ zodpovedá potenciálnej energii „zapnutej“ v časovom intervale $-T/2 < t < T/2$

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & -\infty < t < -T/2 \\ V(r) & -T/2 < t < T/2 \\ 0 & T/2 < t \end{cases} \quad (3)$$

Rovnicu (1) je užitočné zapísať v tvare

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = H'(t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

Pravú stranu v (4) môžeme označiť ako $f(\mathbf{r}, t)$ a prepísať (4) ešte raz

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

Rovnica (5) je nehomogénnou diferenciálnou rovnicou, pričom pravá strana hrá úlohu zdroja.

Riešenie rovnice (4), zodpovedajúce rozptylu častice na potenciáli, má mať z fyzikálnych dôvodov tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

kde

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) = C e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - i\omega t} \quad (7)$$

opisuje dopadajúcu rovinnú vlnu²⁵⁴ a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ zodpovedá rozptýlenej vlne. Štandardná metóda riešenia diferenciálnych rovníc s pravou stranou je metóda Greenových funkcií.

Greenovou *funkciou* rovnice (5) alebo *propagátorom* nazývame riešenie rovnice (5) príslušné k „zdroju“, ktorý je bodový v čase i v priestore. Je to teda riešenie rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (8)$$

kde H_0 pôsobí len na premennú \mathbf{r} .

²⁵⁴ Z hľadiska fyzikálnej interpretácie by bolo korektnšie opísať dopadajúcu vlnu vlnovým balíkom. Technicky je to ale zložitejšie a málo prehľadné. Ostaneme preto pri rovinnnej vlne. Vlnové balíky by sme dostali ako vhodné superpozície takýchto rovinných vlín.

Pomocou propagátora K_0 môžeme všeobecné riešenie nehomogénnej rovnice (5) zapísať v tvare

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \Phi_0(\mathbf{r}, t) + \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') f(\mathbf{r}', t') d^3 \mathbf{r}' dt' \quad (9)$$

kde $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$ je všeobecné riešenie homogénnej rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \Phi_0(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (10)$$

O tom, že (9) je riešením (5) sa presvedčíme rýchlo priamym dosadením (9) do (5) a využitím (8).

Samotnou rovnicou (8) nie je K_0 určené jednoznačne; treba ešte špecifikovať príslušné okrajové podmienky. Môžeme sa to pokúsiť urobiť tak, aby potom už ľubovoľné riešenie $\psi(\mathbf{r}, t)$ integrálnej rovnice (9) (pri vhodne zvolenom $\Phi_0(\mathbf{r}, t)$) spĺňalo okrajové podmienky (6). Je zrejmé, že to bude vtedy, ak $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ ako funkcia \mathbf{r}, t pri ľubovoľnom (fixovanom) \mathbf{r}', t' sa asymptoticky správa ako rozbiehavá vlna. Ako uvidíme v ďalšom, Greenovu funkciu s takýmto správaním dostaneme, ak žiadame splnenie podmienky príčinnosti

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad \text{pre } t < t' \quad (11)$$

Zo zápisu (9) vidno fyzikálny význam okrajovej podmienky (11). Vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r}, t)$ v čase t závisí podľa (11) len od zdrojov $f(\mathbf{r}', t')$ pre $t < t'$, a to je práve vyjadrením príčinného pôsobenia zdrojov.

V časovej SchR (4) hrá pravá strana úlohu zdroja $f(\mathbf{r}', t')$ a riešenie rovnice (4) môžeme preto zapísať v tvare (9), pričom namiesto $f(\mathbf{r}, t)$ píšeme $H'(t)\psi(\mathbf{r}, t)$. Dostaneme tak

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(t') \psi(\mathbf{r}', t') d^3 \mathbf{r}' dt' \equiv \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (12)$$

a význam $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ a $\Phi(\mathbf{r}, t)$ je daný rovnicami (6) a (7). Rovnica (12) je už zapísaná v tvare, ktorý umožňuje jej riešenie pomocou poruchového rozvoja. Postupovali by sme zas štandardným spôsobom: namiesto H' by sme napísali všade $\lambda H'$ a funkciu $\psi(\mathbf{r}, t)$ by sme rozložili do mocnín λ , pričom nultým členom rozvoja by bola dopadajúca vlna $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$. V prvom priblížení pre $\psi(\mathbf{r}, t)$ by sme takto dostali

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3 \mathbf{r}' dt' \quad (13)$$

Vzťah (13) nám už umožňuje nájsť amplitúdu rozptylu v najnižšom priblížení. Poruchu $H'(t)$ berieme v tvare (3) a vlnovú funkciu začiatočného stavu $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ pri normalizácii na konečný objem $V = L^3$ zvolíme takto

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega_i t} \quad (14)$$

kde \mathbf{k}_i je vlnový vektor dopadajúcej častice a $\omega_i = \hbar \mathbf{k}_i^2 / 2m$. Porucha je zapnutá v časovom intervale $-T/2 < t' < T/2$ a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou W_{fi} nájdeme pri $t > T/2$ časticu v stave opísanom vlnovou funkciou

$$\varphi_f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega_f t} \quad (15)$$

kde $\omega_f = \hbar \mathbf{k}_f^2 / 2m$. Amplitúdu tejto pravdepodobnosti označíme ako S_{fi} a podľa (13) pre ňu máme

$$S_{fi} = \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \int_{-T/2}^{T/2} dt' \varphi_f^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}', t') \quad (16)$$

Teraz potrebujeme urobiť dve veci: najprv musíme vypočítať S_{fi} , a potom dať toto S_{fi} do súvisu s diferenciálnym účinným prierezom. Pre výpočet S_{fi} potrebujeme poznať vyjadrenie $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$.

Explicitné vyjadrenie pre K_0 je

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \Theta(t - t') \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t - t')} \quad (17)$$

Na pravej strane sčítujeme cez úplný ortonormovaný systém vlastných funkcií H_0 .

$$H_0 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

a funkcia $\Theta(t - t')$ je definovaná vzťahom

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{pre } t \geq t' \\ 0 & \text{pre } t < t' \end{cases}$$

Vzhľadom na prítomnosť $\Theta(t - t')$ spĺňa (17) podmienku (11). Priamym dosadením (17) do (8) a využitím

$$\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') = \delta(t - t')$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

sa rýchlo presvedčíme o tom, že $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ dané rovnicou (17) je riešením rovnice (8).

Pri $t > t'$ platí

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\mathbf{f}}^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \varphi_{\mathbf{f}}^*(\mathbf{r}', t') \quad (18)$$

O správnosti tohto vzťahu sa presvedčíme priamym dosadením. Pri $t > t'$ podľa (17) s využitím (14) a (15) máme

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\mathbf{f}}^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{L^3}} \cdot e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r} + i\omega_f t} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}} t} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' + i\omega_{\mathbf{k}} t'} \quad (19)$$

Pretože

$$\int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{L^3} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}_f, \mathbf{k}}$$

dostávame z (19)

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\mathbf{f}}^*(\mathbf{r}, t) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}' + i\omega_f t'}$$

čo je práve (18). Poznamenajme, že čas t z výrazu (19) vypadol vďaka tomu, že v súčte cez \mathbf{k} ostalo len $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f$, a preto $(\omega_f - \omega_{\mathbf{k}} = 0)$.

Predchádzajúce odvodenie vzťahu (18) bolo trochu ťažkopádne. Ideu vidno jasnejšie zo zápisu stavov a operátorov v bezkoordinátnom formalizme. V ňom

$$\varphi_{\mathbf{f}}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_f, t \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_f \rangle e^{-i\omega_f t}$$

$$\varphi_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_i, t \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}_i \rangle e^{-i\omega_i t}$$

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle$$

Rovnica (18) v bezkoordinátnom formalizme je

$$e^{i\omega_f t} \langle \mathbf{k}_f | \left\{ \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-t')} \langle \mathbf{k} | \right\} = e^{i\omega_f t'} \langle \mathbf{k}_f |$$

a o správnosti tohto vzťahu sa presvedčíme okamžite, ak využijeme $\langle \mathbf{k}_f | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_f, \mathbf{k}}$.

Po využití (18) zo vzťahu (17) máme

$$S_{fi} = \int d^3 \mathbf{r}' \int_{-T/2}^{T/2} dt' \frac{1}{i\hbar} \varphi_f^*(\mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}', t') = S_{fi} = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{L^3} \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \int_{-T/2}^{T/2} dt' e^{-i(\omega_f - \omega_i)t'}$$

odkiaľ dostaneme

$$S_{fi} = \frac{1}{i\hbar L^3} V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2}$$

kde

$$V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \int e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{r} \quad (21')$$

Pravdepodobnosť prechodu zo stavu i do stavu f za celú dobu interakcie je daná druhou mocninou absolútnej hodnoty S_{fi} ,

$$W_{fi} = |S_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2 L^6} |V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)|^2 \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2} \cdot \frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2}$$

Pre veľké T platí

$$\frac{\sin[(\omega_f - \omega_i)T/2]}{(\omega_f - \omega_i)/2} \rightarrow 2\pi \delta(\omega_f - \omega_i)$$

Ak túto limitu urobíme v predposlednom člene v (22), potom posledný člen možno vyjadriť ako

$$\lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \frac{\sin[\Delta\omega T/2]}{\Delta\omega/2} \rightarrow T$$

a pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času dostávame

$$w_{fi} = \frac{W_{fi}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L^6} |V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (23)$$

K tomuto vzťahu pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času sme sa ale už raz dostali v kapitole 9 pri vyčíslňovaní Bornovskej aproximácie pre rozptyl na statickom potenciáli a prešli sme od neho k známemu výrazu pre diferenciálny účinný prierez

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \right|^2$$

Odporúčame čitateľovi, aby si skúsil spočítať ďalšie priblíženie k diferenciálnemu účinnému prierezu. Postupujeme pritom tak, že zoberieme do úvahy ďalší člen na pravej strane (12) a príslušný element S_{fi} , prepíšeme do tvaru

$$S_{fi} = -2\pi i \delta(E_f - E_i) V_{fi} \frac{1}{L^3}$$

Pre diferenciálny účinný prierez, tým istým postupom ako vyššie, dostaneme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} V_{fi} \right|^2$$

Napokon, kvôli úplnosti, ešte naznačíme výpočet explicitného tvaru propagátora $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$. Vydjeme z rovnice²⁵⁵ (17) a urobíme v nej substitúciu $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $\tau = t - t'$. Dostaneme tak

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp \left[i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - i \frac{\hbar k^2}{2m} \tau \right] \quad (24)$$

²⁵⁵ Od súčtu cez hodnoty \mathbf{k} povolené periodickou okrajovou podmienkou prejdeme v limite $L \rightarrow \infty$ k integrálu $(L^{-3} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (2\pi)^{-3} \int d^3 \mathbf{k} \dots$

Exponent upravíme pomocou identity

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \frac{\hbar k^2}{2m} \tau = -\frac{\hbar \tau}{2m} \left(\mathbf{k} - \frac{m}{\hbar \tau} \boldsymbol{\rho} \right)^2 + \frac{m}{2} \frac{\rho^2}{\hbar \tau}$$

a po dosadení tohto do (24) prejdeme k novej integračnej premennej $\mathbf{q} = \mathbf{k} - (m/\hbar \tau)\boldsymbol{\rho}$. Dostaneme tak

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \exp\left[i \frac{m}{2} \frac{\rho^2}{\hbar \tau} \right] \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \exp\left[-i \frac{\hbar \tau}{2m} \mathbf{q}^2 \right]$$

V ostávajúcom integráli urobíme ešte v zložkách q_x, q_y, q_z triviálne substitúcie

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} x, \dots$$

a dostaneme

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \exp\left[i \frac{m}{2} \frac{\rho^2}{\hbar \tau} \right] \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{2m}{\hbar} \right)^{3/2} I^3$$

kde I je Fresnelov integrál

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{i}}$$

Konečný výsledok je

$$K_0(\boldsymbol{\rho}, \tau) = \frac{\Theta(\tau)}{i\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3/2} \exp\left[i \frac{m}{2} \frac{\rho^2}{\hbar \tau} \right] \quad (25)$$

Fresnelove integrály možno nájsť v tabuľkách ako

$$\int_0^{\infty} \sin(x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}, \quad \int_0^{\infty} \cos(x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}$$

alebo si ich možno zrátať priamo. Najjednoduchšie je integrovať funkciu $\exp(z^2)$ po vhodnej kontúre v komplexnej rovine. Takouto kontúrou je napríklad táto: vyjdeme zo začiatku a ideme priamo nahor po imaginárnej osi až do bodu $(0, iR)$. Potom postupujeme 45 stupňov proti hodinovým ručičkám po obvodě kružnice s polomerom R a napokon sa vrátíme po priamke do začiatku. Takto vyjadříme Fresnelove integrály pomocou Laplaceovho, t. j. pomocou integrálu z $\exp(-x^2)$ od 0 po ∞ . Laplaceov integrál sa ráta najľahšie známym trikom: integrujeme $\exp(-x^2 - y^2)$ po celej rovine (x, y) raz v karteziánskych a raz v polárnych súradniciach. Porovnanie oboch výsledkov už vedie priamo k cieľu. Explicitné vyjadrenie pre propagátor takto je

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t')} \right]^{3/2} \exp\left[i \frac{m}{2} \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{\hbar (t-t')} \right] \quad (26a)$$

a v špeciálnom prípade $\mathbf{r}' = 0, t' = 0$ máme

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{\Theta(t)}{i\hbar} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right]^{3/2} \exp\left[i \frac{m}{2} \frac{r^2}{\hbar t} \right] \quad (26b)$$

Pozrime sa teraz bližšie na fyzikálny význam²⁵⁶ propagátora. V prípade (26b) propagátor určuje vlnovú funkciu spôsobenú zdrojom $\delta^3(\mathbf{r})\delta(t)$, pôsobiacim v začiatku súradnej sústavy za veľmi krátky časový úsek. Fourierovský rozklad $\delta^3(\mathbf{r})\delta(t)$ ukazuje, že v zdroji sú rovnomerne zastúpené všetky vlnové vektory a všetky frekvencie²⁵⁷.

²⁵⁶ Feynman R. P. – Hibbs A. R.: Quantum mechanics and path integrals McGraw-Hill, New York, 1965, kap. 3, § 1.

²⁵⁷ Klasickým analógom takéhoto zdroja je výbuch, v ktorom na všetky strany vyletujú častice so všetkými možnými rýchlosťami.

Výraz $\exp [imr^2/(2\hbar t)]$ v (26b) opisuje rozbiehavú sférickú vlnu²⁵⁸ a pri veľkom r a veľkom t sa vlnová dĺžka tejto vlny len pomaly mení. Dĺžku vlny pri určitom t a v určitej oblasti r nájdeme z podmienky

$$\frac{m(r + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mr^2}{2\hbar t} = 2\pi$$

pre $r \gg \lambda$ odtiaľ dostaneme

$$\lambda \approx \frac{2\pi\hbar}{m(r/t)}$$

V klasickej analógii odpovedá výrazu $m(r/t)$ hybnosť častice a pre λ máme

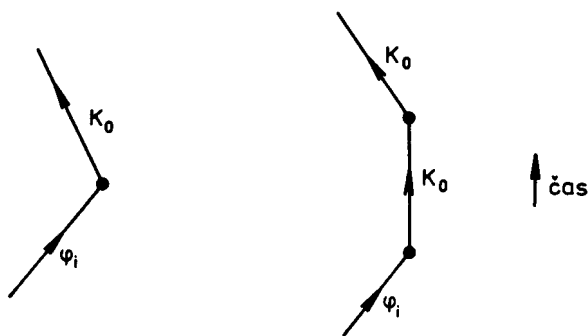
$$\lambda \approx \frac{2\pi\hbar}{p}$$

Exponent v (26b) nám teda hovorí, že z bodového zdroja prídu v čase t do oblasti s daným r častice s hybnosťou $p \approx m(r/t)$.

Vyššie členy poruchového radu (13) majú štruktúru, ktorú možno názorne fyzikálne interpretovať a znázorniť graficky pomocou Feynmanových diagramov²⁵⁹. Iteráciami (12) do druhého rádu dostávame

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) \approx & \varphi_i(\mathbf{r}, t) + \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H'(\mathbf{r}', t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' dt' + \\ & + \iint K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') H'(\mathbf{r}'', t'') K_0(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t') H'(\mathbf{r}', t') \varphi_i(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}'' dt'' d^3\mathbf{r}' dt' \end{aligned} \quad (27)$$

Druhý člen v súčte (27) interpretujeme takto: dopadajúca vlna $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ sa v bode \mathbf{r}' v čase t' rozptýli na poruche $H'(\mathbf{r}', t')$ a potom sa zas šíri voľne z bodu (\mathbf{r}', t') do bodu (\mathbf{r}, t) . Tomuto voľnému šíreniu sa častice odpovedá propagátor $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$. Integrovanie cez \mathbf{r}', t' ukazuje, že výsledná amplitúda je superpozíciou amplitúd pochádzajúcich z rozptylu v rôznych bodoch \mathbf{r}' v rôznych časoch t' .



Obr. 16.3

Tretí člen výrazu (27) odpovedá dvom „rozptylom“ na poruche. Medzi prvým a druhým rozptylom sa častice šíri voľne a po druhom rozptyle sa zas šíri voľne. Graficky je druhý a tretí člen znázornený na obr. 16.3, kde čiary označené ako φ_i sú priradené dopadajúcej vlně a čiary označené K_0 opisujú voľné šírenie sa častice. Lahko sa dá ukázať, že priradenie takýchto diagramov jednotlivým členom poruchového rozvoja je jedno-jednoznačné.

Propagátor K_0 vo vyjadrení (17) alebo v ekvivalentných vyjadreniach (24), (26) sme vyššie iba „uhádli“. Teraz, kvôli úplnosti, ešte uvidíme podrobnejší výpočet K_0 . Budeme hľadať riešenie rovnice

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \delta^3(\mathbf{r}) \delta(t) \quad (28)$$

²⁵⁸ Vlnoplocha s konštantnou fázou je daná vzťahom $mr^2/(2\hbar t) = \text{const}$ a s rastúcim t sa zrejme posúva k väčším hodnotám r , ide teda o rozbiehavú vlnu.

²⁵⁹ Feynmanove diagramy sú dnes asi najčastejšie používaným teoretickým nástrojom vo fyzike elementárnych častíc a v štatistickej fyzike.

a zovšeobecnenie na prípad $t' \neq 0$, $\mathbf{r}' \neq 0$ prenecháme čitateľovi. Výraz $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0)$ možno zapísať ako Fourierov integrál s neznámymi koeficientmi

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \int K(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (29a)$$

a δ -funkcie na pravej strane (28) môžeme vyjadriť známym spôsobom

$$\delta^3(\mathbf{r})\delta(t) = \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (29b)$$

pričom všetky integrály v (29) prebiehajú cez intervaly $(-\infty, \infty)$. Po dosadení (29a, b) do (28) a niekoľkých úpravách dostávame

$$K(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar \left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}^2}{2m} \right)}$$

a odtiaľ

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{\hbar} \int \int \frac{1}{\hbar \left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}^2}{2m} \right)} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (30)$$

Integrál cez ω ale nie je definovaný, lebo obsahuje singularitu pri $\omega = \hbar\mathbf{q}^2/2m$. Na druhej strane sme zatiaľ nevyužili okrajovú podmienku $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = 0$ pre $t < 0$. Podobne ako pri Greenových funkciách bezčasovej SchR, aj tu sa ukazuje, že spôsob obchádzania singularity tesne súvisí s okrajovými podmienkami. Ak obchádzanie singularity v (30) upravíme tak, že pól presunieme tesne pod reálnu os v premennej ω , máme

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{\hbar} \int d^3\mathbf{q} \int d\omega \frac{1}{\omega - \left(\frac{\hbar\mathbf{q}^2}{2m} - i\varepsilon \right)} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi}$$

a integrál už bude dobre definovaný. Pri $t > 0$ môžeme, vďaka faktoru $\exp(-i\omega t)$ uzavrieť integračnú kontúru veľkým polkruhom v dolnej polrovine komplexnej roviny ω a podľa vety o rezíduách vyjadriť integrál cez ω pomocou rezídua pólu v bode $\hbar\mathbf{q}^2/2m - i\varepsilon$. Dostaneme tak

$$K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0) = \frac{1}{i\hbar} \int d^3\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\hbar\mathbf{q}^2/2m t}, \quad t > 0$$

Pre $t < 0$ musíme integračnú kontúru uzavrieť veľkým polkruhom v hornej polrovine ω a vzhľadom na to, že v hornej polrovine niet singularít, bude pre záporné hodnoty t propagátor $K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{0}, 0)$ identicky rovný nule. Takto dostávame faktor $\Theta(t)$ a prichádzame priamo k (24).

S propagátorom sme sa stretli pri riešení nehomogénnej Schrödingerovej rovnice (5). Ukazuje sa však, že veľmi príbuzná funkcia sa objaví aj pri riešení Cauchyho úlohy pre homogénnu SchR. Úloha je formulovaná takto: pri $t > t'$ hľadáme riešenie SchR

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) - H_0 \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (31a)$$

spĺňajúce v čase t' začiatočnú podmienku

$$\psi(\mathbf{r}, t)|_{t'} = \Phi(\mathbf{r}) \quad (31b)$$

Úplný ortonormovaný systém vlastných funkcií H_0 označíme ako $\{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ a príslušné vlastné hodnoty budú $E_{\mathbf{k}}$. Funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ môžeme rozložiť do radu

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (32)$$

Riešením (31a) spĺňajúcim (31b) je zrejme vlnová funkcia

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t')/\hbar} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

kde koeficienty $\{C_{\mathbf{k}}\}$ nezávisia od času. Pre $t > t'$ môžeme s využitím (17) zapísať

$$\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \Phi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = i\hbar \int K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t') d^3\mathbf{r}' \quad (34)$$

kde integrujeme cez \mathbf{r}' ale nie cez t' .

Vzťah (34) je formálnym vyjadrením Huygensovho princípu pre Schrödingerovu rovnicu. Vlnovú funkciu v čase t dostaneme tak, že vlnovú funkciu v čase t' považujeme za „hustotu zdrojov“.

O správnosti (34) sa presvedčíme okamžite, ak (17) dosadíme do (34) a využijeme ortonormovanosť systému $\{\varphi_{\mathbf{k}}\}$. Pre opis časového vývoja systému sa však častejšie používa operátor

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t')/\hbar} \quad (35)$$

Pre $t > t'$ platí podľa predchádzajúceho

$$U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\hbar K_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$$

Vzhľadom na to, že U neobsahuje $\Theta(t-t')$, je riešením homogénnej SchR

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0$$

V rovnici (35) sme U zapísali v súradnicovej reprezentácii. Jeho všeobecný zápis je

$$U(t, t') = \sum_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle e^{-iE_{\mathbf{k}}(t-t')/\hbar} \langle \varphi_{\mathbf{k}}| = e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

a všeobecný zápis propagátora je

$$K_0(t, t') = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$$

16.6 ZHRNUTIE

Bez podrobnejšieho komentára zopakujeme prehľadne základné vzťahy.

Riešenie bezčasovej SchR, zodpovedajúce problému potenciálového rozptylu má pri $r \rightarrow \infty$ tvar

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi)$$

$f(\vartheta, \varphi)$ je amplitúda rozptylu, ktorá súvisí s diferenciálnym účinným prierezom podľa vzťahu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2$$

V Bornovej aproximácii platí

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

kde \mathbf{k} je vlnový vektor dopadajúcej a \mathbf{k}' vlnový vektor rozptylenej častice.

Rozklad do parciálnych vln (sféricky symetrický potenciál):

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \vartheta)$$

δ_l je fázový posun v l -tej parciálnej vlne. Totálny účinný prierez:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

Optická teoréma

$$\text{Im} f(\vartheta=0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_0$$

16.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite fázové posuny pre rozptyl častice na „tvrdej guli“ reprezentovanej potenciálom

$$V(r) = \infty \quad \text{pre } r < a$$

$$V(r) = 0 \quad \text{pre } r \geq a$$

Návod: Riešenie radiálnej SchR pre dané l musí v tejto situácii spĺňať podmienku $R_l(a) = 0$. Pre $r > a$ je riešenie dané superpozíciou sférickej Besselovej a Neumannovej funkcie

$$R_l(a) = A_l j_l(ka) + B_l n_l(ka)$$

Podmienka $R_l(a) = 0$ určuje podiel koeficientov A_l, B_l . Potom sa už ľahko určia fázové posuny.

2. Preskúmajte rozptyl častice na „tvrdej guli“ s polomerom a v limitnom prípade, keď vlnová dĺžka častice je oveľa väčšia ako rozmer gule: $k \ll 1/a$. Nájdite správanie sa fázových posunov v tomto limitnom prípade.

3. Nájdite fázové posuny pre rozptyl častice na potenciálovej jame

$$V(r) = -V_0 \quad \text{pre } r \leq a$$

$$V(r) = 0 \quad \text{pre } r > a$$

Návod: Postup riešenia je analogický k prvému príkladu. Radiálna SchR pre danú parciálnu vlnu vnútri jamy má riešenie (regulárne v okolí $r = 0$) $j_l(\kappa r)$, kde κ je dané podmienkou

$$\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0$$

Ak toto „zošijeme“ so všeobecným riešením mimo jamy, dostaneme rýchlo fázové posuny. Všimnite si opäť „prahové správanie“ fázových posunov, t. j. limitu $k \rightarrow 0$ (fyzikálne je to limita vlnových dĺžok λ podstatne väčších ako rozmery jamy).

4. Predpokladajte, že rozptyl dvoch bezspinových častíc prebieha v s -vlne. Nájdite pri danej energii dopadajúcej častice uhlové rozloženie rozptýlených častíc v laboratórnej sústave.

5. Uvažujte rozptyl dvoch bezspinových častíc pri energii, ktorá je taká nízka, že fázové posuny sú rôzne od nuly iba v parciálnych vlnách $l = 0, l = 1$. Nájdite uhlové rozloženie diferenciálneho účinného prierezu pomocou fázových posunov $\delta_0(k)$, $\delta_1(k)$ a všimnite si, či by bolo možné určiť fázové posuny z experimentálnych údajov o rozptyle. Nájdite hodnotu uhla rozptylu $\vartheta = \vartheta_0$, pri ktorej je diferenciálny účinný prierez minimálny. Prediskutujte podobne aj situácie, keď sú fázové posuny nenulové v parciálnych vlnách $l = 0, 1, 2$.

6. Pomalý neutrón sa rozptyľuje na jadre nachádzajúcom sa v bode \mathbf{r}_0 . Nájdite vlnovú funkciu neutrónu po rozptyle za predpokladu, že rozptyl prebieha len v s -vlne a fázový posun možno aproximovať vzťahom $\delta(k) = ak$.

7. Pomalé neutróny sa rozptyľujú na jadrách v pravidelnom kryštálovom usporiadaní. Polohy jadier sú

$$\mathbf{r}_n = n_1 \mathbf{d}_1 + n_2 \mathbf{d}_2 + n_3 \mathbf{d}_3$$

kde n_i sú celé čísla a \mathbf{d}_i sú základné vektory mriežky. Nájdite amplitúdu rozptylu neutrónu na kryštále za predpokladu, že rozptyl prebieha iba v s -vlne a možno použiť priblíženie $\delta(k) = ak$.

8. Nájdite amplitúdu rozptylu a diferenciálny účinný prierez rozptylu dvoch α -častíc pri rešpektovaní ich identičnosti. Amplitúdu rozptylu pre neidentické častice opište Rutherfordovou formulou. Rozložte amplitúdu rozptylu do parciálnych vln a prediskutujte, prečo sú amplitúdy niektorých parciálnych vln nulové.

9. Nájdite amplitúdu rozptylu a diferenciálny účinný prierez pre rozptyl dvoch elektrónov pri rešpektovaní identičnosti častíc. Uvažujte
- a) rozptyl v stave s celkovým spinom rovným jednej,
 - b) rozptyl v stave s celkovým spinom nulovým.
- Ako amplitúdu rozptylu bez rešpektovania identičnosti častíc berte Rutherfordovu formulu a v oboch prípadoch a), b) urobte rozklad amplitúdy rozptylu do parciálnych vln.
- Napokon
- c) nájdite diferenciálny účinný prierez pre rozptyl nepolarizovaných elektrónov.
10. Určte v Bornovej aproximácii diferenciálny a celkový účinný prierez pre nepružný rozptyl elektrónu na atóme vodíka. Využite výsledky článku 16.4 a spočítajte explicitne prípad, keď sa atóm vodíka excituje pri rozptyle zo stavu $1s$ do stavu $2s$.

17 GNOZEOLOGICKÉ OTÁZKY KVANTOVEJ MECHANIKY

17.1 ÚVOD

Klasická mechanika je kauzálnou a deterministickou teóriou. Kauzálna je v tom, že z presnej a úplnej informácie o stave sústavy v čase t_0 (z presne určených súradníc a hybností všetkých častíc sústavy v čase t_0) pohybové rovnice jednoznačne predpovedajú stav sústavy v čase $t \pm t_0$. Deterministická je v tom, že pri danom stave sústavy vieme jednoznačne určiť hodnotu ľubovoľnej veličiny (ktorú na tejto sústave možno merať) a túto hodnotu možno, aspoň v princípe, zmerať s ľubovoľnou presnosťou a bez toho, aby sme zmenili stav sústavy. Kvantová mechanika je kauzálna a indeterministická. Jej kauzálnosť je v tom, že z úplnej informácie o stave sústavy v čase t_0 , zachytenej v stavovom vektore $|\psi(t_0)\rangle$, môžeme pomocou časovej Schrödingerovej rovnice jednoznačne predpovedať stav sústavy v čase $t > t_0$. Úplnú informáciu o stave sústavy možno získať súčasným určením vlastných hodnôt určitého úplného súboru komutujúcich operátorov priradených istým fyzikálnym veličinám.

Pri danom stave sústavy $|\psi(t)\rangle$ kvantová mechanika nedáva jednoznačné predpovede pre výsledky presných meraní všetkých fyzikálnych veličín. Namiesto toho len určuje aké hodnoty danej veličiny možno pri presnom meraní nájsť a aké sú pravdepodobnosti pre nameranie jednotlivých hodnôt. V tom je indeterminizmus kvantovej mechaniky.

Podstatné rozdiely medzi klasickou a kvantovou mechanikou sú aj v chápaní procesu merania. V klasickej mechanike, ako sme už hovorili, možno v princípe zmerať ľubovoľnú fyzikálnu veličinu presne, bez toho, aby sme podstatne ovplyvnili stav sústavy. V kvantovej mechanike pri meraní vo všeobecnosti nastáva zmena stavu sústavy a túto zmenu nemožno urobiť ľubovoľne malou. Navyše, v klasickej fyzike možno interakciu medzi študovanou sústavou a meracím prístrojom opísať samotnou klasickou mechanikou, zatiaľ čo v kvantovej mechanike zmena stavu pri meraní nie je opísaná Schrödingerovou rovnicou.²⁶⁰

Indeterminizmus kvantovej mechaniky i jej opis procesu merania súvisia priamo s otázkami o možnostiach a úlohách fyzikálneho opisu prírody a tým aj s gnozeológiou (teóriou poznania).

V tejto kapitole podávame prehľad snáh fyzikov o hlbšie pochopenie indeterminizmu kvantovej mechaniky a mechanizmu procesu merania, t. j. procesu, pri ktorom sa z viacerých možných výsledkov realizuje iba jeden.

O gnozeologických otázkach kvantovej mechaniky, ležiacich na hranici fyziky a filozofie sa viedli dlhé a často vášnivé diskusie. Práce niektorých fyzikov sa čítajú ťažko, pretože v novej situácii si vytvorili nový, nie vždy ľahko zrozumiteľný jazyk. Niektorí filozofi zase polemizovali bez dostatočnej znalosti fyziky a ich argumentom potom tiež ťažko rozumieť.

Prevažná väčšina fyzikov, filozofujúcich fyzikov i filozofov uznáva dnes *kodanskú interpretáciu*²⁶¹ kvantovej mechaniky²⁶² vychádzajúcu z myšlienok Bohra, Heisenberga, Pauliho, Rosenfelda a ďalších. Nemožno však hovoriť o absolútnej jednote názorov a vo fyzike by to ani nebolo osožné. Autori tejto učebnice sú toho názoru, že kodanská interpretácia je v podstate správna a treba ju brať ako východisko pri analýze gnozeologických otázok kvantovej mechaniky.

V tejto kapitole sa najprv oboznámime s kodanskou interpretáciou a potom, pre úplnosť, uvedieme i názory, ktoré ju považujú za neúplnú. Zdôraznime ale, že pri serióznejšom štúdiu týchto otázok treba

²⁶⁰ O pokusoch opísať zmenu stavu pri meraní pomocou kvantovej mechaniky budeme ešte hovoriť v ďalšom.

²⁶¹ Názov je snáď nepresný ale ustálený. Fyzikálna teória sa skladá z matematického formalizmu a z jeho interpretácie. Termín interpretácia tu chápeme v užšom zmysle a rozumíme pod ním priradenie fyzikálneho významu matematickým pojmom, symbolom a vzťahom. V spojeniach ako „kodanská interpretácia kvantovej mechaniky“ chápeme termín „interpretácia“ v širšom zmysle, zhruba odpovedajúcom výstižnejšiemu spojeniu gnozeologické otázky kvantovej mechaniky.

²⁶² Namiesto o „kodanskej“ sa často hovorí o „ortodoxnej“ interpretácii kvantovej mechaniky. Obidva termíny budeme používať ako synonyma.

nevyhnutne čítať pôvodné práce, výklad z druhej ruky ich nemôže nahradiť – v najlepšom prípade poskytne čitateľovi určitú orientáciu²⁶³.

Poznamenajme ešte, že kvantová mechanika nemá žiadne problémy s „interpretáciou v užšom zmysle“ a pri jej praktickom používaní nevznikajú žiadne ťažkosti. V úvodnej učebnici kvantovej mechaniky sme sa „interpretácii v širšom zmysle“ mohli celkom vyhnúť. Ak však chápeme fyziku ako podstatnú časť súčasnej kultúry a civilizácie, potom gnozeologické otázky treba aspoň spomenúť.

17.2 BOHROVE NÁZORY. KODANSKÁ INTERPRETÁCIA

Gnozeologické problémy kvantovej mechaniky sa sústreďujú okolo dvoch tesne súvisiacich otázok. Pravdepodobnostnej interpretácie stavu a zmeny stavu sústavy pri meraní. Pripomeňme stručne typickú situáciu.

Najprv prvý prístroj pripraví v čase t_0 sústavu v stave $|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi_0\rangle$. Potom sa sústava vyvíja v čase podľa SchR a v čase t je v stave $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi\rangle$. V čase t meriame druhým prístrojom fyzikálnu veličinu B reprezentovanú operátorom B . Pravdepodobnosť namerať vlastnú hodnotu b operátora B je daná výrazom $|\langle b|\psi\rangle|^2$, kde $|b\rangle$ je vlastný vektor operátora B príslušný k vlastnej hodnote b . Táto schéma opisuje dokonale všetky doteraz urobené experimenty a pre praktické účely je celkom dostatočná. Pri hlbšom zamyslení sa však objavia viaceré otázky o tom, aký je vzťah pravdepodobnostných predpovedí kvantovej mechaniky a reálnych výsledkov meraní, čo sa stane so sústavou pri meraní, čo vlastne opisuje stavový vektor $|\psi\rangle$ a čo za celou schémou väzí. Niektoré z takýchto otázok sú: Je $|\psi\rangle$ opisom stavu danej sústavy, alebo je to len pojem charakterizujúci výsledky meraní? Ak nájdeme vlastnú hodnotu b je to objektívny fakt, alebo vnem pozorovateľa? Čo sa deje so sústavou, keď pri meraní prechádza zo stavu $|\psi\rangle$ do stavu $|b\rangle$? Opisuje $|\psi\rangle$ individuálnu sústavu, napr. atóm vodíka, alebo len súbor sústav, na ktorých merania prevádzame? Takéto a podobné otázky trápili fyzikov už pri vzniku kvantovej mechaniky a stali sa ešte naliehavšími po tom, čo sa ukázalo, že kvantová mechanika dokonale opisuje experimentálne výsledky atómovej fyziky a spoľahlivo predpovedá nové javy.

Prvou systematickou odpoveďou na celý tento okruh otázok bola kodanská interpretácia, v ktorej základnou zložkou boli názory Nielsa Bohra. S jeho jednotlivými formuláciami možno nesúhlasiť – najmä vtedy ak sú vytrhnuté z kontextu – ale celkový obraz vytvorený Bohrom je hlboko premyslený. Bohrova analýza sa opiera o niekoľko kľúčových myšlienok.

- A. Nutnosť opisu prístrojov klasickým jazykom.
- B. Nedeliteľnosť javu v kvantovej oblasti, tzv. kvantová celistvosť javu.
- C. Komplementarita.

Všimnime si ich teraz v uvedenom poradí.

A Opis prístrojov klasickým jazykom

Bohr prisudzoval veľký význam otázkam jazyka používaného pri opise kvantových javov. Experimentálne zariadenia pripravujúce mikroobjekty v určitých stavoch i zariadenia, pomocou ktorých prevádzame merania, musia byť opísané tak, aby experimenty bolo možné na základe tohto opisu postaviť znova a aby výsledky boli reprodukovateľné. Odtiaľto Bohr prišiel k záveru, že pri opise prístrojov treba používať jazyk klasickej fyziky. Toto, samozrejme neznamená, že by prístroj bol necitlivý na kvantové vlastnosti mikrosústav. Napríklad pri zhotovovaní fotografickej platne zadávame hrúbku sklenenej podložky a hrúbku a zloženie emulzie. Platňa, hoci opísaná takýmto klasickým jazykom je „citlivá“ na kvantové vlastnosti mikroobjektov – napríklad v tom, že registruje fotóny modrého svetla s väčšími energiami a neregistruje fotóny červeného svetla s menšími energiami.

Takýto pohľad na opis makroskopických sústav nie je celkom cudzí ani klasickej fyzike. V štatistickej fyzike, napríklad, charakterizujeme stav plynu v nádobe pomocou makroskopických, „klasických“ parametrov ako objem, tlak, teplota, vnútorná energia atď. a nesnažíme sa opísať stav plynu tak, že by sme zadávali polohy a hybnosti jednotlivých častíc. Stav plynu charakterizovaný makroskopickými „klasickými“ veličinami je reprodukovateľný, zatiaľ čo stav plynu opísaný pomocou polôh a hybností všetkých molekúl plynu by určite reprodukovateľný nebol. S makroskopickým prístrojom je to analogické,

²⁶³ Veľmi dobrý prehľad pôvodnej literatúry možno nájsť v článku De Witt, B. S. – Graham, R. N.: Amer. J. Phys. 39, 1971, s. 724

jeho opis pomocou klasických charakteristík umožňuje reprodukciu prístroja, zatiaľ čo prístroj opísaný vlnovou funkciou závislou od všetkých stupňov voľnosti prístroja by sa podľa tohto opisu prakticky nedal skonštruovať.

B Kvantová celistvosť javu

V každom experimente interaguje sústava, pre ktorú je kvantum prenesenej energie podstatné, s prístrojmi opísanými jazykom klasickej fyziky. Pri klasickej opise prístrojov je kvantum energie nepodstatné. Každú časť interagujúcich sústav (mikrosústava a prístroj) opisujeme takto iným jazykom. V tejto situácii Bohr trval na tom, aby celá sústava, skladajúca sa z mikrosústavy a z prístroja, bola chápaná ako jediný nedeliteľný celok. Pod termínom „jav“, ktorý sa často vyskytuje v Bohrových spisoch, treba chápať výsledok experimentu zahrňujúci aj opis celého experimentálneho zariadenia.

Toto chápanie „javu“ znamená, že elektrónu, atómu vodíka, či inej mikrosústave, možno pripisovať určité vlastnosti (hybnosť, polohu, energiu, ...) len v rámci opisu celého javu, zahrňujúceho aj opis experimentálneho zariadenia a nemožno hovoriť o vlastnostiach mikrosústavy „ako takej“ (vo filozofickej terminológii „an sich“) t. j. bez súčasného opisu celého experimentálneho zariadenia.

Bohrov názor tu možno podporiť dvoma argumentmi. Po prvé, vlastnosti elektrónu ako hybnosť a poloha vychádzajú z pojmov klasickej fyziky vytvorenej pri analýze pohybu makroskopických telies. Niet dôvodov predpokladať, že tieto pojmy možno všeobecne používať aj pre charakterizovanie stavu mikrosústavy. Makroskopický prístroj je ale konštruovaný tak, aby výsledky bolo možné opísať jazykom klasickej fyziky (pozri diskusiu v bode A), a preto môžeme výsledky interakcie mikrosústavy a prístroja opísať pomocou hybnosti, energie, či súradnice mikrosústavy.

Po druhé, ani nekvantovej fyzike nie je celkom cudzia myšlienka o nemožnosti opisu sústav samých o sebe bez vzťahu k okolitému svetu (filozofi hovoria „an sich“). Podľa Machovho princípu, ktorý zohral istú stimulujúcu úlohu pri vzniku všeobecnej teórie relativity, zotrvačná hmotnosť telesa nie je vlastnosťou tohto telesa samého o sebe, ale je daná jeho interakciou s rozložením hmotnosti vo vesmíre. Vo všeobecnej teórii relativity nemožno tiež uvažovať pohyb voľnej častice „an sich“, lebo „voľná“ častica sa pohybuje po geodetických čiarami v priestore, ktorého metrika je určená rozdelením hmotnosti.

Vo fyzike je známych veľa situácií, v ktorých vlastnosti častice závisia od toho v akom prostredí sa nachádza. Napr. elektrón v polovodiči má vďaka interakcii s prostredím inú efektívnu hmotnosť ako voľný elektrón a v elektrolyte sa elektrón môže spojiť s neutrálnym atómom na ión, čím vzniká častica s úplne inou hmotnosťou a s úplne iným rozložením náboja. Vždy ale možno nájsť situáciu, keď je elektrón voľný a vplyvy prostredia chápať ako isté zmeny k vlastnostiam voľného elektrónu. V Bohrovom chápaní mikroobjektov nemá zmysel hovoriť o mikroobjekte „an sich“, lebo takýto objekt s ničím neinteraguje a nijak sa neprejavuje a o jeho vlastnostiach sa dá hovoriť len v kontexte interakcie s určitým klasicky opísaným prístrojom.²⁶⁴

Bohrovi sa niekedy vyčítalo, že bol pozitivistom, práve pre dôraz na celistvosť a nedeliteľnosť „javu“. Táto námietka je ale neoprávnená. V pozitivizme je základom tiež elementárny „jav“, ale toto slovo má iný význam. Pozitivistický „jav“ je elementárnym vnemom pozorovateľa, Bohrov „jav“ je objektívnym výsledkom interakcie prístroja a mikrosústavy. Z pozitivistického hľadiska je Bohrov „jav“ niečím veľmi komplikovaným a vôbec nie elementárnym. Vidno to už z toho, že na opis prístroja je treba jazyk klasickej fyziky; existencia istej pojmovej štruktúry je teda pre Bohrov „jav“ nevyhnutná.

C Komplementarita

V klasickej fyzike meranie môže byť spojené s tak malým prenosom energie medzi meranou sústavou a prístrojom, že výmenu energie možno zanedbať. Sústavu možno chápať vždy ako jediný celok a možno jej prisúdiť určité vlastnosti bez ohľadu na to, že interaguje s inými sústavami, alebo meracím prístrojom. V kvantovej mechanike je situácia odlišná. Sústava spolu s experimentálnym zariadením tvorí jediný „jav“ a o vlastnostiach sústavy možno hovoriť len v súvislosti s istou experimentálnou situáciou.

Niet žiadnych dôvodov na to, aby o „javoch“ v mikrosústavách bolo možné hovoriť klasickým jazykom. Ukazuje sa však, že niektoré „javy“ (v Bohrovom zmysle) možno opísať tak, že hovoríme

²⁶⁴ Situáciu, kde lipnutie na možnosti rozumného opisu objektu „an sich“ komplikuje chápanie problému súrenormalizácie v kvantovej teórii poľa. Tam sme totiž „holému“ elektrónu („an sich“) nútení pripísať patologické vlastnosti – ale takýto „holý“ elektrón neexistuje.

o mikrosústave a priradíme jej určité klasické vlastnosti. Pritom jej ale nemožno pripísať všetky klasické vlastnosti, potrebné pre úplný opis analogickej sústavy v klasickej mechanike. Napríklad pri istých „javoch“ sa elektrón správa ako vlna, pri iných „javoch“ ako klasická častica.

Pod komplementaritou vo všeobecnosti rozumieme tvrdenie, podľa ktorého veličiny, potrebné na úplné opísanie sústavy v klasickej fyzike nemožno použiť bez obmedzení a súčasne pri opise kvantovej sústavy.

Ako príklad možno uviesť súradnicu a hybnosť, ktoré v klasickej mechanike úplne opisujú stav častice. Pre kvantovú sústavu je ich súčasné použitie obmedzené Heisenbergovým vzťahom neurčitosti. Mimochodom, v systéme Bohrových názorov by snáď bolo vhodnejšie hovoriť o princípe súčasnej nepoužiteľnosti klasických pojmov súradnice a hybnosti pre kvantovú sústavu.

Bohr často uvádzal ako príklad komplementaritu medzi opisom kvantovej sústavy pomocou klasického determinizmu a pomocou zákonov zachovania energie a hybnosti. V prvom prípade treba použiť zariadenie, ktoré spojito meria trajektóriu častice. Vtedy ale nemôžeme (na tom istom zariadení) merať súčasne hybnosť častice (a preto nemôžeme určiť presne ani jej energiu).

Pretože centrálnym pojmom Bohrovej interpretácie je nedeliteľný „jav“ a opis kvantovej sústavy je možný len v rámci princípu komplementarity, Bohr odmietal názorný opis kvantovej sústavy „o sebe“.

Mnohé nedorozumenia okolo Bohrových názorov a kodanskej interpretácie vznikajú vtedy, keď sa o mikrosústave hovorí ako o izolovanej a nedodržiava sa dôsledne Bohrovo chápanie „javu“. Pri obraznom opise kvantovej celistvosti javu sa potom používajú termíny ako „narušenie sústavy pozorovaním“, alebo „priradenie fyzikálnych vlastností atómovým objektom pozorovaním“, ktoré zdôrazňujú úlohu pozorovania a pozorovateľa a vedú k nedorozumeniam na filozofickej úrovni.

Pri čítaní Bohrových prác dostupných v ruskom preklade Bohrových zbraných spisov²⁶⁵ si treba dávať pozor na význam jednotlivých pojmov, menovite na používanie pojmu „jav“. Bohrov jazyk je potom trochu odlišný od toho, na ktorý sme zvyknutí z klasickej fyziky, kde vždy možno hovoriť o častiach sústavy ako o relatívne samostatných.

Práce ostatných autorov, zahrňovaných do „kodanskej interpretácie“ používajú spravidla jazyk bližší klasickej fyzike. Ukazuje sa, že o mikrosústave možno hovoriť konzistentne aj tak, že stavový vektor $|\psi\rangle$ označuje potenciálne možnosti a skutočný výsledok merania predstavuje realizáciu jednej z týchto možností (Heisenberg, Fok).

Všetky varianty kodanskej interpretácie považujú ale stavový vektor za úplný opis jedinej mikrosústavy a sú proti tomu, aby $|\psi\rangle$ opisovalo iba súbor mikrosústav. Rozhodnutie tu nemožno dostať experimentálne, lebo $|\psi\rangle$ vedie len k pravdepodobnostiam pre experimentálne výsledky a tie možno verifikovať len na súbore údajov. Spojenie $|\psi\rangle$ priamo s jedinou mikrosústavou možno motivovať nasledujúcimi argumentmi:

a) Bezčasová SchR $H|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$ určuje hodnoty energie jedinej mikrosústavy (napr. atómu vodíka),
b) argumenty založené na vzťahu neurčitosti ľahko vedú k odhadom energie základného stavu pre jednoduché sústavy (atóm vodíka, lineárny harmonický oscilátor). Vzťah neurčitosti tu tesne súvisí s opisom jedinej mikrosústavy.

c) výsledky interferenčných pokusov ukazujú, že každá častica dopadajúceho zväzku interferuje „sama so sebou“. Vlnová funkcia v tomto zmysle kontroluje správanie sa jedinej častice,

d) interpretácia $|\psi_k\rangle$ ako opisu súboru vedie prirodzene k teóriám so skrytými parametrami. Lokálne teórie so skrytými parametrami sú však v protiklade s experimentom, ako ešte uvedieme v ďalšom.

Dlhé a nevelmi plodné diskusie o filozofických otázkach kvantovej mechaniky v päťdesiatych rokoch boli ukončené autoritatívnym článkom²⁶⁶ V. A. Foka, v ktorom boli materialisticky formulované názory N. Bohra a ďalších autorov zahrňovaných do kodanskej školy²⁶⁷.

²⁶⁵ Bohr, N.: Izbrannyye naučnyje trudy I. a II. diel. Moskva, 1971, redakčný kolektív: I. E. Tamm, V. A. Fok, V. G. Kuznecov.

Zvlášť upozorňujeme čitateľa na Bohrov článok o diskusiách s Einsteinom o interpretácii kvantovej mechaniky. Zdá sa, že to bol „intelektuálny súboj storočia“. U nás je dostupný v ruskom preklade Bohrových zbraných spisov.

²⁶⁶ Slovenský preklad Fokovho článku je v zborníku Filozofické problémy súčasnej fyziky a astronómie, red. M. Petráš, R. Zajac, M. Zigo, Bratislava, 1962.

²⁶⁷ Heisenbergove názory možno nájsť v jeho knihe The Physical Principles of Quantum Theory. Chicago 1930, a v článkoch v zborníku Niels Bohr and the Development of Physics. ed. W. Pauli, London, 1955 (ruský preklad 1958) Niels Bohr, His Life and Work. Amsterdam, 1967 (ruský preklad 1967).

17.3 PARADOX EINSTEINA, PODOLSKÉHO A ROSENA

Podľa kodanskej interpretácie je vlnová funkcia úplným opisom individuálnej mikrosústavy. Einstein považoval kvantovú mechaniku za neúplnú teóriu. Ku konfrontácii názorov Bohra a Einsteina došlo najvýraznejšie pri diskusiách na Solvayských kongresoch²⁶⁸ a pri diskusii o *paradoxe Einsteina, Podolského a Rosena (EPR paradox)*,²⁶⁹ Pri diskusii sa ukázala konzistentnosť Bohrovej pozície, ale zároveň boli zdôraznené typické korelácie kvantových sústav, ktorým sa aj dnes venuje veľa pozornosti.

Článok Einsteina, Podolského a Rosena má názov: Možno považovať kvantovomechanický opis fyzikálnej reality za úplný? a autori sa snažia ukázať, že odpoveď na túto otázku je záporná.

Začneme tým, že uvedieme niektoré základné myšlienky EPR práce vo voľnom preklade.

„V úplnej fyzikálnej teórii je každému elementu realnosti priradený určitý element teórie. Dostatočnou podmienkou realnosti určitej fyzikálnej veličiny je možnosť predpovedať s určitosťou túto veličinu, bez toho, aby sme narušili sústavu... zdá sa nám, že od každej úplnej teórie treba požadovať nasledujúce: každý element fyzikálnej reality musí mať odraz vo fyzikálnej teórii. Toto budeme nazývať podmienkou úplnosti.“

Ďalej autori uvádzajú argumenty pre to, že kvantová mechanika nespĺňa túto podmienku úplnosti. Namiesto príkladov spomínaných EPR uvedieme tu príklad pochádzajúci od Bohma.

Predstavme si metastabilnú sústavu s nulovým spinom, skladajúcu sa z dvoch častíc so spinom 1/2. Spinová vlnová funkcia metastabilného stavu bude

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_z(+)v_z(-) - u_z(-)v_z(+)\} \quad (1)$$

kde $u_z(+)$ je spinor, opisujúci stav prvej častice s priemetom spinu na os z rovným $+1/2$. Spinory v sa vzťahujú na druhú časticu a ostatné označenie je zrejmé.

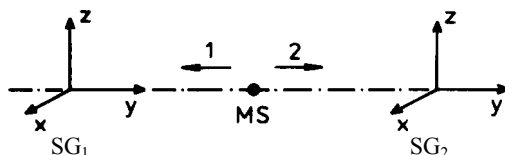
Výber osi z je ale ľubovoľný a vlnovú funkciu ψ môžeme zapísať viacerými spôsobmi odpovedajúcimi rôznym výberom osi pre kvantovanie priemetu spinu prvej a druhej častice. Keby sme napríklad za takúto os vybrali os x mohli by sme napísať ψ v tvare

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_x(+)v_x(-) - u_x(-)v_x(+)\} \quad (2)$$

Vyjadrenia (1) a (2) sú plne ekvivalentné. Môžeme sa o tom presvedčiť priamo, ak $u_x(+), u_x(-)$ atď. vyjadríme pomocou $u_z(+), u_z(-)$ atď. a dosadíme do (2). Dostaneme tak (1) a naopak. Podobne by sme mohli vyjadriť ψ pomocou spinorov s určitým priemerom na ľubovoľnú os n . Takto by sme dostali

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{u_n(+)v_n(-) - u_n(-)v_n(+)\} \quad (3)$$

Teraz prejdeme k argumentácii typu EPR. Predpokladajme, že po určitom čase sa metastabilná sústava rozpadne. Priemety spinov vyletujúcich častíc môžeme merať vhodne natočenými Sternovými-Gerlachovými prístrojmi (SG). Ak nehomogenita magnetického poľa má smer osi n , potom meriame priemet spinu do smeru n . (obr. 17.1)



Obr. 17.1 Pri rozpade metastabilného stavu MS a celkovým nulovým spinom vznikajú dve častice so spinom 1/2, pohybujúce sa smerom k Sternovým-Gerlachovým prístrojom SG₁, SG₂

²⁶⁸ Diskusie Bohra a Einsteina na Solvayských kongresoch sú zhrnuté v Bohrovom už citovanom článku.

²⁶⁹ Pôvodná práca je dostupná v III. dieli ruského vydania Einsteinových zohraných spisov. Einstein, A.: Sborníje naučných trudov. Moskva, 1967.

Ak meriame priemet spinu prvej častice do smeru z a nameriame hodnotu $+1/2$, vieme z rovnice (1), že častica 2 musí mať priemet spinu na os z rovný $-1/2$. Podstatné je ale to, že druhú časticu nameriame, hodnotu priemetu jej spinu do smeru z poznáme z informácie o stave ψ pred meraním a z merania priemetu spinu prvej častice. Toto je predpoveď štandardnej kvantovej mechaniky. Podľa svojho kritéria reálnosti EPR usudzujú, že existuje element reálnosti odpovedajúci priemetu spinu druhej častice do osi z .

Meranie toho istého rozpadu sme ale mohli urobiť aj tak, že by prístroj SG1 bol natočený v smere osi x . Ako výsledok merania priemetu spinu častice 1 by sme dostali, povedzme, hodnotu $1/2$ a bez toho, že by sme merali časticu 2 by sme vedeli, že priemet jej spinu na os x je $-1/2$.

Merania pritom môžeme uskutočňovať SG prístrojom vzdialeným 1 km alebo 100 km od oblasti, kde sa nestabilná sústava rozpadla a natočenie prístroja SG1 môžeme urobiť až po rozpade metastabilnej sústavy.²⁷⁰ EPR takto usudzujú, že zároveň existuje element reálnosti odpovedajúci priemetu spinu druhej častice na os x a element reálnosti odpovedajúci priemetu spinu tejto častice na os z . Opis spinu častice v kvantovej mechanike ale nepozná stav, pri ktorom by bol súčasne určený presne priemet spinu na os z i na os x . (Je to tým, že S_x , S_z nekomutujú a nemajú spoločný vlastný vektor).

EPR takto usudzujú, že kvantová mechanika nie je úplnou teóriou.

Na paradox EPR odpovedal Bohr v článku, ktorý čitateľ môže nájsť v II. diele ruského vydania Bohrových zobraňovaných spisov (str. 180). Bohr jednoznačne odmieta záver EPR a jeho analýza myšlienkového experimentu EPR vychádza zo základných myšlienok Bohrovej interpretácie, o ktorej sme už hovorili. Podľa Bohra treba za realitu v oblasti kvantových procesov považovať „jav“ v Bohrovom zmysle, teda opis celého experimentu zahrňujúci aj klasický opis prístrojov. Paradox EPR vzniká vtedy, ak kombinujeme do jediného obrazu reality dva rôzne „javy“ (t. j. dva rôzne experimenty). Každý z týchto experimentov odhaľuje jednu z dvoch komplementárnych stránok, ale nemôžeme urobiť experiment, ktorý by ukázal obidva tieto doplnujúce sa javy naraz. Uvedieme preklad časti z citovaného Bohrovho článku: „Paradox (EPR) v skutočnosti ukazuje len nevhodnosť zvyčajného hľadiska prírodnej filozofie na opis prírodných javov, s ktorými sa zaoberá kvantová mechanika. Pri každom experimente sa musíme vzdať jedného z dvoch aspektov fyzikálnych javov; tieto dva aspekty sa vzájomne dopĺňajú a ich spojenie je charakteristické pre klasickú fyziku. Voľnosť výberu medzi dvoma experimentálnymi postupmi znamená práve to, že sa musíme zastaviť pri jednom z postupov, umožňujúcim použitie jedného z dvoch dopĺňajúcich sa klasických pojmov...“

Podstata rozdielu medzi názormi EPR a Bohra je v tom, že EPR chápu dve priestorovo-oddelené časti, na ktoré sa nestabilná sústava rozpadla, ako dve nezávislé sústavy, zatiaľ čo Bohr ich obe zahrňa do jediného „javu“. Podľa Bohra nemožno potom o jednej z častíc-produktov rozpadu – hovoriť bez toho, aby sme hovorili aj o tom, čo sa meria na druhej častici.

Podrobnejšie charakterizáciu oboch stanovísk. Urobíme to vo forme diskusie medzi OKI (*obhajcom Kodanskej interpretácie*) a OEPR (*obhajcom EPR stanoviska*). Za názory OKI a OEPR nie sú samozrejme ani Bohr ani Einstein a spol. zodpovední. Diskusiu začne OKI tým, že podrobne opíše predpovede kvantovej mechaniky a vyloží stanovisko kodanskej interpretácie. OEPR nemá žiadnu podrobne rozpracovanú teóriu a bude pracovať ako kritik. Svoje stanovisko vyloží až ku koncu diskusie.

OKI: Podľa kvantovej mechaniky nie je na celom opísanom experimente nič zvláštneho. Spinová funkcia (1) je úplným opisom spinového stavu sústavy a možno z nej dostať predpovede pre všetky možné výsledky experimentov s meraním priemetov spinov. Experiment spočíva v tom, že SG1 natočíme do smeru n_1 a SG2 do smeru n_2 . V SG1 môžeme potom nameriť priemet spinu na n_1 rovný $+1/2$ alebo $-1/2$. Budeme hovoriť o spine „+“ a „-“. V SG2 je situácia analogická. Úlohou kvantovej mechaniky je predpovedať pre daný experiment, t. j. pre dané natočenie SG1, SG2 štyri čísla

$$P_{n_1 n_2}(+, +), P_{n_1 n_2}(+, -), P_{n_1 n_2}(-, +), P_{n_1 n_2}(-, -),$$

Prvé z nich určuje pravdepodobnosť pre to, že nájdeme „+“-priemety oboch spinov na smery n_1 , n_2 a podobné označenie používame aj pri ostatných výrazoch.

²⁷⁰ Prakticky by sa to dalo zariadiť nasledovne. Predpokladajme, že metastabilnú sústavu pripravíme v čase $t = 0$ a že jej doba života je τ . Pre $t \gg \tau$ bude sústava prakticky s istotou už rozpadnutá. Ak prístroj SG1 umiestnime do veľkej vzdialenosti d_1 od metastabilnej sústavy, $d_1 \gg c\tau$, potom je v časovom intervale $\tau \ll t \ll d_1/c$ sústava už rozpadnutá, ale častica 1 ešte nedoletela do prístroja SG1. Ak prístroj SG1 natáčame v tomto časovom intervale, robíme to už po rozpade sústavy a pred detekciou častice v SG1.

Nech pre určitost' \mathbf{n}_1 leží v rovine (x, z) pričom odchýlka od osi z je daná uhlom α_1 , podobne \mathbf{n}_2 leží v rovine (x, z) a odchýlka od smeru z je rovná α_2 .

Spinory odpovedajúce priemetom spinu „+“ a „-“ na smer \mathbf{n}_1 sú

$$\chi_{n_1}(+) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_1 \quad \chi_{n_1}(-) = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_1 \quad (3)$$

kde index 1 označuje spinový stav prvej častice. Spinová vlnová funkcia dvojčasticovej sústavy, ktorá vznikla rozpadom metastabilného stavu je

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \quad (4)$$

Priemetu spinu prvej častice na smer \mathbf{n}_1 a priemetu spinu druhej častice na smer \mathbf{n}_2 odpovedajú dva komutujúce operátory (pôsobia na rôzne premenné) a amplitúda pre súčasné nameranie spinov „+“ pre prvú i druhú časticu je

$$\begin{aligned} A_{n_1 n_2}(+, +) &= \chi_{n_1}^+(+) \otimes \chi_{n_2}^+(+) \psi = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_1}{2} & \sin \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_2}{2} & \sin \frac{\alpha_2}{2} \end{pmatrix}_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \cos \frac{\alpha_1}{2} \sin \frac{\alpha_2}{2} - \sin \frac{\alpha_1}{2} \cos \frac{\alpha_2}{2} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2} \right) \end{aligned}$$

Pravdepodobnosť $P_{n_1 n_2}(+, +)$ je daná druhou mocninou absolútnej hodnoty tohto výrazu

$$P_{n_1 n_2}(+, +) = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right) \quad (5a)$$

Analogicky dostaneme aj

$$P_{n_1 n_2}(-, +) = P_{n_1 n_2}(+, -) = \frac{1}{2} \cos^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right) \quad (5b)$$

$$P_{n_1 n_2}(-, -) = P_{n_1 n_2}(+, +) \quad (5c)$$

Ak nameriame v danom jednotlivom prípade hodnoty $(+, +)$ bude po meraní dvojčasticová sústava v stave $\chi_{n_1}(+)\chi_{n_2}(+)$ a podobne v ostatných troch prípadoch. Toto je úplná predpoveď kvantovej mechaniky pre daný experiment.

OEPR: V tomto opise mi chýba priestoročasový priebeh celého experimentu. Mohli by ste opísať z hľadiska ortodoxnej kvantovej mechaniky celý experiment ešte raz v usporiadaní, keď prístroj SG1 je o trochu bližšie k rozpadajúcemu sa metastabilnému stavu (MS) ako prístroj SG2, takže častica 1 dorazí k SG1 skôr ako častica 2 k prístroju SG2. Zaujímalo by ma najmä to, aký bude stav sústavy po meraní v SG1 a pred meraním v SG2.

OKI: Kvantová mechanika aj tu dáva jednoznačnú odpoveď. Pravdepodobnosť namerat' v stave ψ danom rovnicou (1) priemet „+“ pre spin prvej častice v SG1 je rovná 1/2. Nebudem to počítať podrobnejšie, vidno to z toho, že ψ , ktoré odpovedá nulovej hodnote celkového spinu je invariantné voči rotáciám a potom pravdepodobnosti pre nameranie priemetov spinu „+“ a „-“ pre prvú časticu v SG1 budú rovnaké. Ak v SG1 nameriame priemet spinu „+“ bude vlnová funkcia celej sústavy daná výrazom

$$C \chi_{n_1}(+) \otimes [\chi_{n_1}^+(+) \psi] \quad (6)$$

kde C je normovacia konštanta a vnútri hranatej zátvorke je skalárny súčin. Výraz v hranatej zátvorke

rozpíšeme podrobnejšie a spočítame. Dostaneme

$$\begin{aligned} & \left(\cos \frac{\alpha_1}{2}, \sin \frac{\alpha_1}{2} \right)_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \cos \frac{\alpha_1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \sin \frac{\alpha_1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \end{aligned}$$

Po dosadení do (6) a výbere $C = \sqrt{2}$ pre spinovú funkciu po nameraní „+“ v SG1 máme

$$\psi'_+ = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \quad (7a)$$

Keby sme v SG1 namerali spin „-“ dostali by sme rovnakým postupom vlnovú funkciu

$$\psi'_- = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \quad (7b)$$

Lahko sa možno presvedčiť o tom, že pravdepodobnosť namerat' v stave (7a) priemet spinu druhej častice do smeru \mathbf{n}_2 rovný „+“ je

$$\left| \left(\cos \frac{\alpha_2}{2}, \sin \frac{\alpha_2}{2} \right)_2 \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \right|^2 = \sin^2 \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2} \right)$$

a po násobení 1/2 za meranie priemetu spinu prvej častice v SG1 dostaneme práve (5a), teda to isté čo sme dostali pri súčasnom meraní oboch priemetov spinu. Zmena stavu spinu častice 2 pri meraní spinu prvej častice je nutná na konzistentnosť schémy kvantovej mechaniky, inak by sme meraniami urobenými po sebe nedostali to isté ako súčasným meraním. Pri súčasnom meraní počítame amplitúdu (pozri text za rovnicou (4)) ako $\chi_{n_1}^+(+) \chi_{n_2}^+(+) \psi$. Pri postupnom meraní vykonáme vlastne najprv jeden a potom druhý skalárny súčin, teda $\chi_{n_2}^+(+) [\chi_{n_1}^+(+) \psi]$. Kvôli konzistentnosti musí byť výraz v hranatej zátvorke úmerný vlnovej funkcii druhej častice po prvom meraní.

OEPR: Vidím, že pre pravdepodobnosti $P_{n_1 n_2}(+, +)$ atď. dostaneme to isté čo predtým. To, čo sa mi ale na Vašom výklade nepáči je toto. Porovnanie výsledkov (7a) a (7b) ukazuje jasne, že spinový stav častice 2 po meraní v SG1 a pred meraním v SG2 podstatne závisí od toho, čo sme namerali v SG1 pri meraní spinu častice 1. Navyše, po meraní priemetu na os \mathbf{n}_1 môže byť spinový stav častice 2

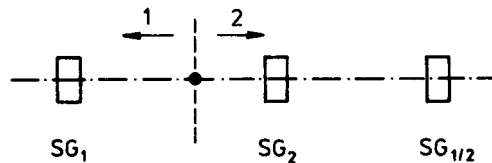
$$\text{bud' } \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \quad \text{alebo} \quad \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_1}{2} \\ \sin \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2 \quad (8)$$

a tieto dve možnosti sú dané natočením prístroja SG1. Experiment pritom môže byť usporiadaný tak (to ešte prediskutujeme neskôr, zatiaľ si budeme v tomto bode veriť), že žiadny signál pohybujúci sa rýchlosťou menšou alebo rovnou rýchlosti svetla nemôže výsledok merania v SG1 oznámiť pozorovateľovi pri SG2 predtým, ako k nemu priletí častica 2. Podľa Vášho vysvetlenia zmeranie priemetu spinu v SG1 okamžite zmení spinový stav častice 2 a toto sa mi akosi nepáči. Zmena spinového stavu častice 2 meraním v SG1 je aj podľa Vás evidentná. Pred meraním v SG1 bol spinový stav častice 2 opísaný maticou hustoty, ktorá má v diagonále vždy 1/2 a mimo diagonály nuly a po meraní je to jeden z dvoch stavov (8).

OKI: Z môjho hľadiska na tom nie je nič neprirodzeného. S analogickými situáciami sa stretávame všade v kvantovej mechanike. Uvažujme napríklad meranie polohy jedinej častice v stave opísanom stavovou vlnovou funkciou $\varphi(\mathbf{r})$. Ak detektorom zaregistrujeme časticu v malom okolí istého bodu \mathbf{r}_0 , vlnová funkcia sa zmení okamžite v celom priestore z $\varphi(\mathbf{r})$ na $\tilde{\varphi}(\mathbf{r})$, pričom $\varphi(\mathbf{r})$ môže byť rôzne od nuly v obrovskej priestorovej oblasti, zatiaľ čo $\tilde{\varphi}(\mathbf{r})$ je lokalizované v malom okolí bodu \mathbf{r}_0 . Keby $\varphi(\mathbf{r})$ bolo vlnením nejakého reálneho prostredia potom by toto bolo naozaj neprirodzené, ale $\varphi(\mathbf{r})$ nie je vlnením prostredia, je amplitúdou pravdepodobnosti. „Sťahovanie“ $\varphi(\mathbf{r})$ do okolia \mathbf{r}_0 nie je fyzikálny proces, pri ktorom sa prenáša energia. Pre dve častice je to analogické. Ak sú v stave so stavovou vlnovou funkciou $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ potom po nameraní prvej častice v okolí \mathbf{r}_0 sa pôvodná vlnová funkcia zmení na niečo ako $\tilde{\varphi}(\mathbf{r}_1)\int\tilde{\varphi}^*(\mathbf{r}_1)\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1$, kde $\tilde{\varphi}(\mathbf{r}_1)$ je lokalizovaná v malom okolí \mathbf{r}_0 . Meranie prvej častice zmenilo stav druhej častice. S priemetmi spinov je to celkom rovnaké. Zmeranie spinu prvej častice mení spinový stav druhej častice.

OEPR: Zmeny stavovej vlnovej funkcie pri meraní jej polohy sa mi nikdy nepáčili. Kvantová mechanika hovorí, že lokalizácia častice pri meraní *tu* vedie k okamžitej zmene vlnovej funkcie *tam*. Nepáči sa mi to, ale o paradoxnosti tejto situácie by som Vás asi nepresvedčil, lebo pre každého z nás môže vlnová funkcia intuitívne znamenať niečo iného. Ak máme ale dve častice so spinom 1/2, a meranie spinu jednej častice *tu* zmení okamžite spinový stav druhej častice *tam*, potom je to niečo, čo považujem naozaj za paradoxné. Teraz už meranie jednej reálnej veci (spinu) *tu* mení vlastnosti druhej reálnej veci (spinu) *tam* a to sa mi vidí neprirodzené.

OKI: Možno si nerozumieme v tom, čo chápeme pod pojмами *stav* a *vlastnosti*. Pre mňa sú to podstatne odlišné veci. Je pravdou, že v klasickej fyzike určenie stavu a určenie fyzikálnych veličín (t. j. fyzikálnych vlastností) je jedno a to isté. Ak poznám stav N -časticovej sústavy, t. j. súradnice a hybnosti všetkých častíc, potom poznám aj hodnoty všetkých fyzikálnych veličín sústavy. V kvantovej mechanike úplná informácia o stave vo všeobecnosti neumožňuje ešte hovoriť o hodnotách fyzikálnych veličín. Stav sústavy $|\psi\rangle$ určuje len amplitúdy pravdepodobnosti pre nameranie určitých hodnôt fyzikálnych veličín. Kým neprevedieme merania nemôžeme vo všeobecnosti povedať, že systém má určité vlastnosti. Preto tiež nemôžeme zmenu spinového stavu častice 2 meraním v SG1 chápať ako zmenu vlastnosti častice 2. Keby totiž meranie v SG1 menilo *vlastnosti* častice 2 považoval by som to tiež za nekonzistentnosť. Ale takej nekonzistentnosti v kvantovej mechanike niet. Predstavme si, že namiesto prístroja SG2 mám dva prístroje SG2 a SG2', ktoré sú rovnako natočené, a častica 2 preletí cez SG2 a potom cez SG2'. Vzdialenosti od MS nech sú také, že najprv meriame v SG2, potom v SG1 a potom v SG2' (pozri obr. 17.2). Keby v tejto konfigurácii výsledok v SG2' závisel od výsledku v SG1 bolo by to aj z môjho hľadiska patologické.



Obr. 17.2 Meranie priemetov spinu častíc 1 a 2. Najprv častica 2 prechádza cez SG₂, potom častica 1 cez SG₁ a napokon častica 2 prechádza cez SG₂'

Predpokladajme, že pri dvojčasticovom spinovom stave (4) zmeriame v SG2 priemet na os \mathbf{n}_2 rovný „+“. Po tomto meraní je spinový stav dvojčasticovej sústavy

$$\begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_2}{2} \\ \cos \frac{\alpha_2}{2} \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_2}{2} \\ \sin \frac{\alpha_2}{2} \end{pmatrix}_2 \quad (9)$$

pričom označenie je rovnaké ako vyššie. Keď teraz v stave (9) meriame v SG1 hocijaký priemet spinu častice 1, nezmeníme tým spinový stav častice 2. Preto výsledok v SG2' nebude vôbec závisieť od výsledku v SG1 (pozri obr. 17.2) a žiadne nekonzistentnosti nevznikajú. Je to tým, že v stave (9) už je spinová vlnová funkcia jednoduchým súčinom a nie superpozíciou takýchto súčinov ako v (4).

OEPR: Dobre, súhlasím s tým, že z Vášho hľadiska nemožno povedať, že meranie v SG1 mení „vlastnosti“ častice 2. Ale predsa len meranie v SG1 mení spinový stav častice 2. Mohli by ste bližšie vysvetliť, čo pod tým máte na mysli.

OKI: Stav častice 2 určuje amplitúdy pravdepodobnosti pre nameranie možných hodnôt fyzikálnych veličín častice 2. Zmena stavu častice 2 znamená zmenu týchto amplitúd. Na tom tiež nie je nič divného. Sústava skladajúca sa z častíc 1 a 2 je v stave, v ktorom sú stavy oboch častíc silne korelované. Ak nájdem 1 v určitom stave, potom to – vďaka tejto korelácii – musí zmeniť stav častice 2. Príčina tejto zmeny stavu častice 2 je v tom, že pôvodný stav zloženej sústavy obsahoval silné korelácie spinov 1 a 2.

OEPR: Vrátim sa trochu naspäť. Hovorili ste, že vo všeobecnosti nemôžeme hovoriť o určitých vlastnostiach sústavy ak poznáme jej stav (a neprevedieme meranie). Ale niekedy o vlastnostiach sústavy hovoriť môžeme. Nech napríklad vieme, že častica 2 sa nachádza v stave

$$\chi_{n_2(+)} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha_2}{2} \\ \sin \frac{\alpha_2}{2} \end{pmatrix}_2 \quad (10)$$

potom pri meraní priemetu spinu na smer \mathbf{n}_2 určite nájdeme hodnotu „+“. Prečo by sme nemohli o častici v stave (10) povedať – aj bez merania – že má priemet spinu na os \mathbf{n}_2 rovný „+“.

OKI: Áno, to by sme naozaj mohli povedať. Ale je dobre si uvedomiť, že je to dosť špeciálna situácia, lebo v stave (10) môžeme hovoriť o určitej hodnote priemetu spinu len ak ide o priemet na os danú uhlom α_2 . Pre priemet na žiadnu inú os to už neplatí.

OEPR: Predstavme si, teraz, že v stave (4) prevediem v SG1 meranie priemetu spinu na os \mathbf{n}_1 , danú uhlom α_1 , a nájdem hodnotu „+“. Častica 2 bude po meraní v stave

$$\begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha_1}{2} \\ \cos \frac{\alpha_1}{2} \end{pmatrix}_2$$

a bude mať – v predchádzajúcom zmysle – priemet spinu na os \mathbf{n}_1 rovný „-“. A túto informáciu som získal bez toho, že by som bol prevádzkal akékoľvek merania na častici 2.

OKI: Áno, na os \mathbf{n}_1 bude mať častica 2 určitý priemet spinu, ale pre žiadnu inú os už určitý priemet mať nebude.

OEPR: Teraz si predstavme, že sa rozhodnem inak a pred príchodom častice 1 natočím prístroj SG1 nie do smeru \mathbf{n}_1 , ale do smeru \mathbf{n}'_1 . Povedzme, že nameriam tiež hodnotu „+“. Tak ako vyššie viem zas, že častica 2 má určitú hodnotu priemetu spinu na os \mathbf{n}'_1 a pritom som zas na častici 2 žiadne merania nerobil.

OKI: Áno, aj to je podľa môjho názoru pravda.

OEPR: Natočenie prístroja SG1 do určitého smeru ale môžem urobiť až po rozpade metastabilného stavu. Neznamená to podľa Vás, že môžem súčasne hovoriť o určitých hodnotách priemetov spinu častice 2 na os \mathbf{n}_1 i na os \mathbf{n}'_1 ?

OKI: Určite nie. Na danej častici môžem previesť iba jeden z dvoch spomínaných experimentov. A výsledky dvoch takýchto experimentov urobených pri dvoch rôznych rozpadoch identických metastabilných stavov nemôžem kombinovať do jediného obrazu sústavy. V tomto je to to isté, ako keby sme na jednočasticovom stave s vlnovou funkciou $\varphi(\mathbf{r})$ raz zmerali polohu a raz hybnosť častice a na tomto základe tvrdili, že častica „v skutočnosti“ má súčasne aj ostrú hodnotu hybnosti aj ostrú hodnotu súradnice. Váš argument je rafinovaný v tom, že ani v jednom prípade ste merania neprevádzali na častici 2, ale na častici 1, ktorá je od 2 priestorovo vzdialená. Z môjho hľadiska to ale na podstate argumentu nič nemení pretože častice 1 i 2 sú časťou jedinej sústavy a v rámci tejto sústavy sú častice 1 a 2 korelované, takže ich nemôžeme považovať za dve nezávislé podsústavy jedinej zloženej sústavy. Táto korelácia je aj podstatnou časťou Vášho argumentu – inak by ste z merania na častici 1 nemohli usúdiť nič o stave častice 2.

OEPR: Einstein sa k diskusii s Bohrom o EPR paradexe vrátil ešte viackrát a v roku 1949 formuloval svoje stanovisko celkom jasne²⁷¹: „... Ale jedného predpokladu by sme sa mali, podľa môjho názoru, pridržať neochvejne: reálny, faktický stav sústavy nezávisí od toho, čo sa deje s druhou sústavou, ktorá je od uvažovanej priestorovo vzdialená.“

Narušuje kvantová mechanika túto Einsteinovu požiadavku (nazývanú tiež Einsteinovou separovateľnosťou)?

OKI: Po určitom upresnení možno tvrdiť, že kvantová mechanika skutočne naruša Einsteinovu požiadavku separovateľnosti – a to bez toho, aby vznikli akékoľvek nekonzistentnosti. Prvé spresnenie je v tom, že namiesto Einsteinovho termínu „reálny, faktický stav sústavy“ (ktorého obsah mi je nejasný) budeme hovoriť o kvantovomechanickom stave a namiesto o dvoch sústavách budeme hovoriť o dvoch podsústavách jedinej sústavy.

Zdá sa mi, že zmysel Einsteinovho termínu „reálny, faktický stav sústavy“ je intuitívne viazaný s klasickým chápaním stavu sústavy a pre takto chápané stavy by jeho požiadavka bola plne oprávnená. Nevidím ale dôvod, prečo by mala jeho požiadavka platiť i pre kvantovomechanické stavy.

Klasické chápanie pojmu „stav“ obsahuje skutočne intuitívny predpoklad o nezávislosti „stavu“ priestorovo vzdialených podsústav i predpoklad o existencii istých vlastností podsústav „an sich“, teda bez vzťahu k danému experimentu. Kvantovomechanický stav nemá vo všeobecnosti ani jednu z týchto vlastností. A to vidno už z diskusie oveľa jednoduchších situácií ako je EPR myšlienkový experiment.²⁷²

Pre Einsteina i pre Bohra, domnievam sa, existujú mikroobjekty celkom objektívne a nezávisle od nás. Ale status ich vlastností je iný. Pre Bohra a celú kodanskú interpretáciu môžeme o vlastnostiach mikroobjektov hovoriť len v kontexte určitého experimentu, zatiaľ čo Einsteinove termíny ako „reálny, faktický stav“ naznačujú existenciu vlastností mikroobjektov „an sich“. A v tom je koreň EPR paradoxu.

OEPR: Predsa len by som rád objasnil svoj pohľad na problém. Ak v súlade s požiadavkou Einsteinovej separovateľnosti žiadam, aby meranie priemetu spinu častice v SG1 neovplyvnilo „stav“ častice 2, potom dochádzam kombináciou dvoch experimentov s natočeniami SG2 prístrojov v smeroch n_1 a n'_1 k tomu, že častica 2 má zároveň ostrú hodnotu priemetov spinu na os n_1 i na os n'_1 . Kvantová mechanika existenciu takéhoto stavu neprípúšťa a odtiaľ usudzujem, že kvantová mechanika je neúplná teória. Predpokladám, že existujú akési „skryté parametre“ a pri určitej hodnote tohto skrytého parametra má častica 2 určitú ostrú hodnotu priemetu spinu i na os n_1 i na os n'_1 . Tieto parametre nepoznáme a nemáme ich pod kontrolou. Experimentálne výsledky vznikajú štatistickým ustredzením cez rôzne hodnoty skrytých parametrov. Predpokladám, že tieto výsledky by dali to isté, čo predpovede kvantovej mechaniky.

OKI: Z našej predchádzajúcej diskusie pripomínam len to, že podľa kvantovej mechaniky je Váš záver neoprávnený z dvoch dôvodov. Po prvé preto, že sa výsledky dvoch rôznych nekompatibilných experimentov kombinujú do jediného obrazu individuálneho javu a po druhé preto, že sa sústava skladajúca sa z dvoch korelovaných podsústav uvažuje ako dve izolované a nezávislé podsústavy.

Realizácia Vášho programu by, podľa mňa, viedla k teórii, ktorá by sa podstatne líšila od kvantovej mechaniky. A až po vybudovaní Vami obhajovanej alternatívnej teórie by sa jej predpovede dali porovnať s predpoveďami kvantovej mechaniky.

OEPR: Súhlasím s tým, že takáto alternatívna teória zatiaľ neexistuje a že pre ňu by bolo ťažké dosiahnuť vždy súhlas predpovedí s tým, čo predpovedá kvantová mechanika. Myslím si ale, že tomuto smeru by bolo žiaduce venovať pozornosť. Snáď by bolo vhodné zamerať sa najmä na korelácie priestorovo vzdialených častíc, kde je pohľad na problém z oboch strán podstatne odlišný.

OKI: Nemyslím si, že kvantová mechanika je konečným a definitívnym poznaním sveta. Určite bude časom nahradená hlbšou a úplnejšou teóriou a niektoré jej pojmy i zákony budú len priblížením k tej nasledujúcej teórii. A táto nová teória tiež určí oblasť platnosti kvantovej mechaniky. Ale nepredpokladám, že by tieto obmedzenia mali prísť z hlbšieho štúdia experimentov typu EPR. To že sústavám aj priestorovo vzdialeným môžeme priradiť určité hodnoty fyzikálnych veličín len v kontexte daného experimentu – a to je to, proti čomu sa EPR argument stavia – je presvedčivo potvrdené v mnohých

²⁷¹ Einstein, A.: Článok v knihe Albert Einstein – Philosopher – Scientist, editor P. A. Schilpp, Evanston, Illinois, 1949 (u nás dostupné v ruskom vydaní Einsteinových zohraných spisov).

²⁷² Ak v experimente s interferenciou elektrónov alebo fotónov prechádzajúcich dvoma štrbinami nemeríme priamo ktorou štrbinou častica prešla, nemôžeme tvrdiť, že prešla jednou alebo druhou štrbinou. A ako ukazujú Jánossyho experimenty spred vyše 20 rokov, toto platí aj vtedy, keď interferujúce zväzky sú od seba priestorovo veľmi vzdialené.

iných experimentoch (interferencia na dvoch štrbinách, všetky interferenčné pokusy v optike s „deleným lúčom“ a pod.). Skôr by som čakal, že oblasť platnosti kvantovej mechaniky bude v budúcnosti vymedzená dajakými, zatiaľ neznámymi javmi na malých vzdialenostiach a pri vysokých energiách. Domnievam sa tiež, že nová teória nebude návratom ku klasickému opisu sústav „an sich“, a že obmedzenia zmyslu, v ktorom môžeme hovoriť o vlastnostiach mikroobjektov ostanú v platnosti, alebo sa ešte prehĺbia. Ale toto už sú len špekulácie a snáď bude lepšie skončiť diskusiu konštatovaním principiálnej rôznosti názorov oboch strán.²⁷³

Napokon ešte poznámku o súvise zmeny stavu pri meraní s otázkami kauzality. Experiment možno určite postaviť tak, že signál s výsledkom merania z SG1 stačí doraziť k pozorovateľovi v SG2 ešte pred meraním (častice 1 a 2 sa pohybujú s rýchlosťami oveľa menšími ako je rýchlosť svetla a SG1 je oveľa bližšie k MS ako SG2). Ale možno ho postaviť aj tak, že takýto prenos informácie je nemožný (častice 1, 2 sa pohybujú rýchlosťou svetla). Kvantová mechanika v oboch prípadoch predpovedá tie isté výsledky (5) pre korelácie spinov. Je teda jasné, že príčinou týchto korelácií nie je akési kauzálne ovplyvňovanie častice 2 pred jej meraním v SG2 signálom o výsledku merania častice 1 v SG1. Príčina korelácií priemetov spinov je len v špecifickom tvare stavu (1), v ktorom sú už korelácie možných meraní priemetov spinov 1, 2 obsiahnuté.

17.4 SKRYTÉ PARAMETRE. BELLOVE NEROVNOSTI

Stanovisko EPR stimulovalo úvahy o skrytých parametroch a viedlo i k niekoľkým neúspešným pokusom o vybudovanie takýchto teórií. Tieto pokusy spravidla nadväzovali na staršie myšlienky L. de Broglieho o bodovej (a vlastne klasickej) častici pohybujúcej sa pod vplyvom vodiaceho poľa (vo francúzštine *l'onde pilote*). Snahou týchto pokusov bolo len reprodukovať niektoré výsledky kvantovej mechaniky.

Skutočne novým pohľadom na problém skrytých parametrov boli Bellove práce, v ktorých sa ukázalo, že v prípade korelácií spinov každá teória so skrytými parametrami spĺňajúca požiadavku Einsteinovej separability nevyhnutne vedie k istým nerovnostiam. A podstatné je to, že predpovede kvantovej mechaniky tieto nerovnosti narušujú.

Tým sa diskusia o teóriách so skrytými parametrami dostala z oblasti filozofických úvah do oblasti dostupnej experimentálnym testom.

V tomto článku si po niekoľkých úvodných poznámkach o skrytých parametroch ukážeme odvodenie Bellových nerovností.

Vo svojej známej monografii²⁷⁴ ([30] kap. IV. článok 2) von Neumann ukázal, že v rámci štandardnej kvantovej mechaniky nie sú možné stavy so skrytými parametrami. Presnejšie povedané: nie sú možné bezdisperzné stavy, t. j. stavy, v ktorých by všetky fyzikálne veličiny mali ostré hodnoty.

Základnú myšlienku dôkazu ilustrujme na príklade spinu elektrónu. Predpokladajme, že trom priemietom spinu na jednotlivé súradnicové osi odpovedajú operátory S_1, S_2, S_3 a priemetu spinu na os danú jednotkovým vektorom \mathbf{n} odpovedá operátor $\mathbf{S}(\mathbf{n}) = S_1 n_1 + S_2 n_2 + S_3 n_3$. Predpokladajme ďalej, že výsledkom merania môže byť iba vlastná hodnota príslušného operátora a že všetky operátory $\mathbf{S}(\mathbf{n})$ majú vlastné hodnoty $\pm 1/2$. Potiaľ sme boli stále v rámci štandardnej kvantovej mechaniky. Teraz urobme predpoklad o existencii skrytých parametrov. Istej hodnote λ takéhoto parametra odpovedá stav $|\psi(\lambda)\rangle$, pre ktorý musí súčasne platiť

$$S_1 |\psi(\lambda)\rangle = a_1 |\psi(\lambda)\rangle, \quad S_2 |\psi(\lambda)\rangle = a_2 |\psi(\lambda)\rangle$$

kde a_1, a_2 môžu nadobúdať len hodnoty $\pm 1/2$. Priemetu spinu do smeru $\mathbf{n}(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$ odpovedá ale operátor $\mathbf{S}' = (S_1 + S_2)/\sqrt{2}$ a pri jeho pôsobení na $|\psi(\lambda)\rangle$ dostávame

$$\mathbf{S}' |\psi(\lambda)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_1 + S_2) |\psi(\lambda)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 + a_2) |\psi(\lambda)\rangle$$

²⁷³ Autori sa pochtivo priznávajú k tomu, že diskusia nebola písaná celkom objektívne, lebo zastávajú v podstate stanovisko OKI. Stanovisko EPR sme sa ale snažili prezentovať tiež neskresleným spôsobom.

²⁷⁴ Von Neumannov dôkaz je pomerne náročný. Ľahšie čitateľnú analýzu problému možno nájsť v článku J. Albertsona: Amer. J. Phys. 29, 1961, s. 478

Tento $|\psi(\lambda)\rangle$ je vlastným vektorom s' a

$$a' = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + a_2)$$

je príslušnou vlastnou hodnotou. Žiadnym výberom $a_1 = \pm 1/2$, $a_2 = \pm 1/2$ nemôžeme doceliť, aby $a' = 1/2$ alebo $a' = -1/2$, čím sa dostávame do sporu s predpokladmi.

Von Neumannov dôkaz, podobne ako predchádzajúca ilustrácia vychádzali z predpokladu: ak A , B sú dva hermitovské operátory odpovedajúce fyzikálnym veličinám, potom aj k hermitovskému operátoru $aA + bB$, kde a , b sú reálne čísla prislúcha určitá fyzikálna veličina. Bellova analýza²⁷⁵ problému ukázala, že pri zavádzaní skrytých parametrov treba kvantovú mechaniku modifikovať a špeciálne treba modifikovať citovaný predpoklad. Príklad s meraním spinu však ukazuje, že takémuto predpokladu sa ťažko vyhnúť.

S pokusmi o formulácie teórií so skrytými parametrami sa v tejto učebnici nebudeme podrobnejšie zaoberať²⁷⁶ a prejdeme rovno k Bellovým nerovnostiam.²⁷⁷

Uvažujme zas Bohmovu verziu EPR myšlienkového experimentu s rozpadom metastabilného stavu (MS) s nulovým spinom na dve častice so spinom $1/2$. Usporiadanie experimentu je na obr. 17.1. Budeme uvažovať situáciu, keď každý z experimentátorov pri SG1 a SG2 môže natočiť svoj prístroj do jedného z troch smerov daných jednotkovými vektormi \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3 . Všetky tri vektory ležia v rovine (x, z) a sú charakterizované uhlami α_1 , α_2 , α_3 , ktoré vektory \mathbf{n}_i zvierajú s osou z . Výsledky experimentu budú charakterizované veličinami typu $P_{\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2}(+, +)$, $P_{\mathbf{n}_1\mathbf{n}_3}(+, -)$ atď. Prvá z týchto veličín udáva pravdepodobnosť toho, že pri natočení SG1 do smeru \mathbf{n}_1 a SG2 do smeru \mathbf{n}_2 nájdu obaja experimentátori priemet spinu „+“.

Predpokladajme teraz, že teória so skrytými parametrami je správna. To znamená, že po rozpade MS sú spinové stavy častíc 1 i 2 charakterizované určitou hodnotou skrytého parametra a tým aj určitými hodnotami priemetu spinu na smery \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3 v oboch SG prístrojoch. Schematicky je to znázornené v tabuľke

	SG1			SG2			
	\mathbf{n}_1	\mathbf{n}_2	\mathbf{n}_3	\mathbf{n}_1	\mathbf{n}_2	\mathbf{n}_3	
λ :	+	-	+	-	+	+	(1)
λ' :	+	+	-	-	-	+	
λ'' :	-	-	+	+	+	-	

Prvý riadok v tabuľke hovorí, že pri hodnote λ skrytého parametra nameriame s určitosťou v SG1 pri natočení do smeru \mathbf{n}_1 priemet „+“, pri natočení do smeru \mathbf{n}_2 priemet „-“, pri natočení do \mathbf{n}_3 priemet „+“ a zároveň pri tom istom individuálnom rozpade nameriame v SG2 prístroji natočenom do smeru \mathbf{n}_1 priemet „-“, atď. Podobne v druhom riadku máme vypísané výsledky, ktoré by sme dostali v SG2, SG2 pri rôznych natočeniach pri hodnote skrytého parametra rovnvej λ' .

Kvantová mechanika jednoznačne hovorí, že pri rovnobežných smeroch natočenia SG1 a SG2 existuje absolútna korelácia. Ak SG1 nameria priemet „+“, SG2 musí namerať priemet „-“. Pre prvý riadok schémy táto podmienka nie je splnená pri natočení v smere \mathbf{n}_3 , pre druhý a tretí riadok už je splnená. V ďalšom budeme predpokladať, že aj teória so skrytými parametrami spĺňa túto požiadavku a povolíme len stavy, ktoré ju spĺňajú.²⁷⁸ Potom už nemusíme údaje pod SG2 v schéme (1) ani vypisovať, ľahko si ich skonštruujeme podľa toho, čo nájdeme pod SG1. Označme teraz symbolom $p(+, -, +)$ pravdepodobnosť toho, že parameter λ nadobúda hodnotu, pri ktorej v SG1 pri natočení v smere \mathbf{n}_1 s určitosťou nájdeme „+“, v smere \mathbf{n}_2 s určitosťou „-“ a v smere \mathbf{n}_3 , s určitosťou „+“.

²⁷⁵ J. S. Bell: Revs. Mód. Phys. 38, 1966, s. 447.

²⁷⁶ Prehľad možno nájsť napr. v prácach: Bohm, D. – Bub J.: Revs. Mod. Phys. 38, 1966, s. 470. Friestadt H.: Nuovo Cim. Suppl. 5, 1957, s. 1., Gudder S. P.: J. Math. Phys. 11, 1970, s. 431, Bell J. S.: in Foundations of Quantum Mechanics. Proc. Int. School „Enrico Fermi“, Course 49, Academic Press, New York 1971, editor B. d'Espagnat. d'Espagnat: Conceptual Foundations of Quantum Mechanics. Reading, Mass., Benjamin 1976.

²⁷⁷ Bell, J. S.: Physics. I, 1965, s. 195. Clauser, J. F. a spol.: Phys. Rev. Lett. 23, 1969, s. 880. Wigner, E. P.: Amer. J. Phys. 38, 1970, s. 1005. D'Espagnat, B.: Scientific American. Nov. 1979, s. 158.

²⁷⁸ Teórie, ktoré túto požiadavku nespĺňajú sú vyvrátené výsledkami mnohých, už dávno vykonaných experimentov.

Pravdepodobnosť pre to, že pri natočení SG1 v smere \mathbf{n}_1 nájdeme „+“ a zároveň pri natočení SG2 do smeru \mathbf{n}_2 nájdeme tiež „+“ bude

$$P_{n_1 n_2}(+, +) = p(+, -, +) + p(+, -, -)$$

analogicky máme

$$P_{n_2 n_3}(+, +) = p(+, +, -) + p(-, +, -)$$

Odtiaľ ľahko dostaneme Bellovu nerovnosť

$$P_{n_1 n_3}(+, +) \leq P_{n_1 n_2}(+, +) + P_{n_2 n_3}(+, +) \quad (2)$$

Táto nerovnosť ale protirečí výsledkom kvantovej mechaniky. Skutočne, podľa (3.5) máme

$$P_{n_1 n_3}(+, +) = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right) \quad \text{atď.} \quad (3)$$

a nerovnosť (2) po dosadení výrazov (3) nadobúda tvar

$$\sin^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_3}{2} \right) \leq \sin^2 \left(\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_3}{2} \right) \quad (4)$$

Vyberme napríklad $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 45^\circ$, $\alpha_3 = 90^\circ$. Na ľavej strane máme 0,5 na pravej dvakrát $(0,3827)^2$ a nerovnosť (4) bude

$$0,5 \leq 0,293$$

čo zrejme nie je pravda. Evidentné je narušenie (4) pri malých rozdieloch $\alpha_1 - \alpha_2$, $\alpha_2 - \alpha_3$, kde $\sin x \approx x$. Pri $\alpha_3 > \alpha_2 > \alpha_1$ by sme v tomto priblížení mali zo (4)

$$(\alpha_3 - \alpha_1)^2 \leq (\alpha_3 - \alpha_2)^2 + (\alpha_2 - \alpha_1)^2$$

a to pri kladných $(\alpha_3 - \alpha_2)$ i $(\alpha_2 - \alpha_1)$ určite nie je pravda.

Výsledky možno jednoducho zhrnúť. Teórie so skrytými parametrami spĺňajúce Einsteinovu podmienku separability²⁷⁹ vedú pre korelácie meraní dvoch priemetov spinu k nerovnostiam (2), ktoré sú narušené predpoveďami kvantovej mechaniky. Podobné nerovnosti možno odvodiť tiež pre korelácie polarizácií dvoch fotónov pochádzajúcich z rozpadu pozitronia (nestabilného viazaného stavu elektrónu a pozitronu) a korelácie polarizácie fotónov pri kaskádnom rozpade metastabilných stavov atómov. Aj tu sú nerovnosti typu (2) v rozpore s predpoveďami kvantovej mechaniky.

Z predchádzajúceho teda vidno, že teórie so skrytými parametrami by pre korelácie spinov nutne museli viesť k výsledkom odlišným od predpovedí kvantovej mechaniky (3). Medzi pokusmi o teórie so skrytými parametrami a kvantovou mechanikou možno preto rozhodnúť na základe experimentu. V tom treba vidieť hlavný výsledok Bellových prác. Pozoruhodné je najmä to, že experiment môže rozhodnúť, hoci žiadna dôsledná teória so skrytými parametrami nebola zatiaľ vybudovaná. Snažiť sa o podrobnejšie vybudovanie takejto teórie by však malo zmysel iba vtedy, keby experimenty hovorili v prospech teórií so skrytými parametrami, alebo keby sa niekde ukázali odchýlky od predpovedí kvantovej mechaniky.

Táto situácia prirodzene, stimulovala experimentálne štúdium korelácií spinov v rozpadoch nestabilných sústav.

Jedným z prvých experimentov tohto typu bolo štúdium korelácií fotónov v kaskáde $6^1S_0 \rightarrow 4^1P_1 \rightarrow 4^1S_0$ atómu vápnika. Autori²⁸⁰ zhodnotili výsledky nasledovne: „... Zovšeobecnenie Bellových nerovností ukazuje, že existencia lokálnych²⁸¹ skrytých parametrov vedie k obmedzeniam na korelácie

²⁷⁹ Einsteinova podmienka separability žiada, aby spinový stav častice 2 nebol ovplyvnený meraním vykonaným na (priestorovo vzdialenej) častici 1. V teórii so skrytým parametrom je táto požiadavka splnená, lebo spinový stav oboch častíc (presnejšie: hodnoty priemetov ich spinov do smerov \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3) je v každom individuálnom rozpade presne daný hodnotou skrytého parametra. Meranie urobené na častici 1 nemení nič na spinovom stave častice 2. Z diskusie medzi OEPR a OKI v predchádzajúcom článku by ale malo byť jasné, že obsah pojmu „stav“ v kvantovej mechanike a v stanovisku EPR (v podstate totožnom so stanoviskami autorov všetkých pokusov o teórii so skrytými parametrami) je podstatne odlišný.

²⁸⁰ Freedman, S. J. – Clauser, J. F.: Phys. Rev. Letters 28, 1972, s. 938.

²⁸¹ To znamená: spĺňajúcich Einsteinovu podmienku separability.

polarizácií fotónov, ktoré protirečia predpovediam kvantovej mechaniky. Naše výsledky, v súhlase s kvantovou mechanikou narušujú tieto obmedzenia s vysokou štatistickou presnosťou a poskytujú tak silnú evidenciu proti lokálnym teóriám so skrytými parametrami.²⁸²

Tieto výsledky vyšli ďaleko za rámec diskusie EPR s N. Bohrom v tridsiatych rokoch. Einstein nespochybňoval výsledky kvantovej mechaniky, ale skôr vyjadroval presvedčenie o tom, že tie isté výsledky možno dostať v teórii, ktorá by spĺňala jeho podmienku separovateľnosti. Bellove nerovnosti a experimentálne výsledky o koreláciách polarizácií však ukázali, že lokálne teórie so skrytými parametrami protirečia experimentu. Einsteinov program o nahradení kvantovej mechaniky lokálnou teóriou so skrytými parametrami sa ukázal ako protirečiaci experimentu.

Zostala už len alternatíva – buď kvantová mechanika alebo nelokálna (a zrejme aj akauzálna) teória so skrytými parametrami.

Experimentálne práce stimulované Bellovými nerovnosťami majú aj svoju pozitívnu stránku – boli v nich presvedčivo potvrdené veľmi špecifické predpovede kvantovej mechaniky.

17.5 PARADOX SCHRÖDINGEROVEJ MAČKY

Bohrova interpretácia kvantovej mechaniky vždy rozlišuje medzi mikrosústavou (atóm, elektrón, molekula atď.) opisovanou kvantovou mechanikou a meracím prístrojom opisovaným klasickým jazykom. Problém je ale v tom, že veľkosť uvažovaných sústav môžeme zväčšovať prakticky spojíte, prechádzajúc postupne k väčším a väčším molekulám, alebo k sústavám molekúl a ďalej cez mikroorganizmy k väčším a väčším organizmom, alebo väčším a väčším telesám. Takto by sme od kvantovomechanického opisu mali postupne prejsť (cez vydelenie istých makroskopických premenných) ku klasickému opisu veľkých sústav. Teória takéhoto postupného prechodu zatiaľ nejestvuje, hoci bolo urobených niekoľko pokusov.²⁸³

Priame a nekritické použitie kvantovej mechaniky k makroskopickým telesám vedie k prekvapujúcim záverom, dobre reprezentovaným tzv. paradoxom Schrödingerovej mačky.²⁸⁴ Predstavme si nasledujúcu situáciu. Mačka je uzavretá v ocelevej nádobe, v ktorej je Geigerova trubica a nádoba s otravným plynom. V trubici sa nachádza rádioaktívny atóm s polčasom rozpadu 1 h. Pri rozpade atómu impulz vznikajúci v Geigerovej trubici otvorí uzáver na nádobe s plynom a usmrť mačku. Po uplynutí 1 h bude sústava v stave

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{ |I\rangle + |II\rangle \} \quad (1)$$

ktorý je superpozíciou stavov $|I\rangle$ a $|II\rangle$, pričom v stave $|I\rangle$ sa atóm ešte nerozpadol a mačka je živá a v stave $|II\rangle$ je atóm rozpadnutý a mačka mŕtva. Paradox je v tom, že v bežnom jazyku by každý povedal, že mačka je buď mŕtva, buď živá. Toto v kvantovej mechanike by odpovedalo matici hustoty

$$\rho = \frac{1}{2} \{ |I\rangle \langle I| + |II\rangle \langle II| \} \quad (2)$$

ale jednoznačný výsledok formalizmu kvantovej mechaniky je (1) a nie (2)

Treba zdôrazniť, že paradox nevedie k nesúhlasu s experimentom, pretože pri otvorení nádoby nájdeme podľa (1) i podľa (2) živú mačku s pravdepodobnosťou 1/2. Superpozícia dvoch stavov „živá mačka“ a „mŕtva mačka“ však pôsobí neprirodzene.

Zjednodušenie, ktoré sa tu použilo, spočíva v tom, že živá mačka je reprezentovaná jediným čistým stavom $|I\rangle$ a mŕtva mačka podobným čistým stavom $|II\rangle$. Bez teórie sústav veľkého počtu častíc sa k oprávnenosti týchto predpokladov nemožno kriticky vyjadriť.

²⁸² Ďalšie experimenty len potvrdili toto konštatovanie. Prehľad výsledkov možno nájsť v d'Espagnat, B.: Scientific American. Nov. 1979, s. 158. Najnovší experiment je opísaný v práci Aspect, A. – Grangier, P. – Roger, G.: Phys. Rev. Lett. 47, 1981, s. 460.

²⁸³ Jauch, J. M.: Helvetica Phys. Acta 37, 1964, s. 293 Jauch, J. M.: Foundations of Quantum Mechanics. New York, 1968. Danen, A. a spol.: Nucl. Phys. 1962, s. 297 Nuovo Cimento 44B, 1966, s. 119. George, C. – Prigogine, I. – Rosenfeld, L. Kong. Dansk. Vid. Selskab. Mat.-Fys. Medd. 38, 1972, s. 12 Prospero, G. M.: článok v knihe Foundations of Quantum Mechanics. New York, 1971, editor B. D'Espagnat.

²⁸⁴ Schrödinger, E. Naturwissenschaften 23, 1935.

Paradox Schrödingerovej mačky naznačuje, že z hľadiska „bežného zdravého rozumu“ je neprirodzené používať kvantovú mechaniku na opis makroskopických telies. Vo filozofickej terminológii ide o problém ontologického statusu makroskopických telies.

Poznamenajme ešte, že z hľadiska Bohrovej interpretácie je tu všetko v poriadku, mačka tu totiž slúži ako prístroj merajúci rozpad atómu a ako merací prístroj má byť opisovaná od začiatku do konca klasicky.

17.6 PROBLÉM MERANIA

V Bohrovej interpretácii je kvantová mechanika síce perfektne logicky konzistentnou teóriou, ale nie je univerzálna. Kvantová mechanika opisuje sústavy nie „samé o sebe“, ale v rámci interakcie s prístrojmi, ktoré pripravujú jednotlivé kvantové stavy a zaznamenávajú výsledky merania. V tomto zmysle je kvantová mechanika akosi „ponorená“ do klasickej fyziky.

Viaceri fyzici sa pokúsili o interpretáciu, v ktorej by kvantová mechanika bola univerzálnou teóriou. Táto úloha ale nie je jednoduchá. V prvom rade treba opísať aj meracie prístroje pomocou kvantovej mechaniky a potom treba opísať kvantovomechanicky i interakciu mikrosústavy s kvantovomechanicky opísaným prístrojom. Podľa názoru autorov sa tento problém doteraz nepodarilo uspokojivo vyriešiť a príliš zjednodušené riešenia vedú rýchlo k ťažkostiam.

Najprv tu opíšeme veľmi idealizovanú situáciu, ktorá jasne ilustruje problém a potom spomenieme ťažkosti, ktoré by pri uspokojivom riešení problému bolo treba riešiť.

Idealizovaný opis merania

Nech mikrosústava (častica), o ktorú sa zaujímame, môže byť len v dvoch kvantových stavoch opísaných vlnovými funkciami φ_1 , φ_2 (napr. spin hore a spin dolu). Merací prístroj budeme opisovať pomocou kvantovej mechaniky a budeme žiadať, aby mal (aspoň) tri možné stavy ψ_0 , ψ_1 , ψ_2 . Stav ψ_0 nech označuje začiatkový (nulový) stav prístroja pred interakciou s mikrosústavou. Ak častica je v stave φ_1 , potom pri interakcii s ňou prechádza prístroj do stavu ψ_1 a podobne ak je častica v stave φ_2 prejde merací prístroj do stavu ψ_2 . Pri interakcii častice a prístroja teda platí

$$\begin{aligned}\varphi_1 \psi_0 &\rightarrow \varphi_1 \psi_1 \\ \varphi_2 \psi_0 &\rightarrow \varphi_2 \psi_2\end{aligned}\tag{1}$$

Na ľavej strane máme stav pred interakciou, na pravej po nej. Šípka označuje vývoj stavu zloženej sústavy pri interakcii. Predpokladá sa, že tento proces je opísaný Schrödingerovou rovnicou a teda lineárnym unitárnym operátorom takže máme

$$\begin{aligned}\varphi_1 \psi_0 &\rightarrow \varphi_1 \psi_1 = \mathbf{U} \varphi_1 \psi_0 \\ \varphi_2 \psi_0 &\rightarrow \varphi_2 \psi_2 = \mathbf{U} \varphi_2 \psi_0\end{aligned}\tag{2}$$

Táto lineárnosť je nanajvýš podstatná a je zodpovedná za ťažkosti s problémom merania.

Nech sa teraz sústava pred meraním nachádza v stave $\alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2$, ktorý je superpozíciou stavov φ_1 , φ_2 . Prístroj je pred meraním zas v stave ψ_0 . Pretože meranie je opísané lineárnou SchR dostaneme po meraní príslušnú superpozíciu stavov

$$(\alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2) \psi_0 \rightarrow \mathbf{U}[\alpha_1 \varphi_1 \psi_0 + \alpha_2 \varphi_2 \psi_0] = \alpha_1 \varphi_1 \psi_1 + \alpha_2 \varphi_2 \psi_2\tag{3}$$

Ako výsledok merania sme teda dostali superpozíciu dvoch (makroskopických) stavov meracieho prístroja. To je ale zle, lebo pravá strana v (3) neodpovedá vykonanému meraniu. Ak napríklad ψ_1 odpovedá stavu prístroja, keď ručička ukazuje 1 a ψ_2 odpovedá stavu s ručičkou 2, potom pravá strana v (3) odpovedá superpozícii stavov s ručičkami v rôznych polohách.

Vykonanému meraniu by mal odpovedať nie čistý stav (3), ale matica hustoty

$$\rho = |\alpha_1|^2 \mathbf{P}[\varphi_1 \psi_1] + |\alpha_2|^2 \mathbf{P}[\varphi_2 \psi_2]\tag{4}$$

kde $\mathbf{P}[\varphi_1 \psi_1]$, $\mathbf{P}[\varphi_2 \psi_2]$ sú projekčné operátory na stavy zloženej sústavy a môžeme ich zapísať ako

$$\begin{aligned}
P[\varphi_1 \psi_1] &= |\varphi_1 \psi_1\rangle \langle \varphi_1 \psi_1| \\
P[\varphi_2 \psi_2] &= |\varphi_2 \psi_2\rangle \langle \varphi_2 \psi_2|
\end{aligned}
\tag{5}$$

Matica hustoty (4) označuje príslušnosť zloženej sústavy k štatistickému súboru a hovorí, že zložená sústava sa s pravdepodobnosťou $|\alpha_1|^2$ nachádza v (čistom) stave $\varphi_1 \psi_1$ a s pravdepodobnosťou $|\alpha_2|^2$ v stave $\varphi_2 \psi_2$. Prístroj má teda s pravdepodobnosťou $|\alpha_1|^2$ ručičku v polohe 1 a s pravdepodobnosťou $|\alpha_2|^2$ ručičku v polohe 2. Inak povedané, matica hustoty (4) ukazuje, že pri meraní mikrosústavy v stave $\alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2$ príde s pravdepodobnosťou $|\alpha_1|^2$ k redukcii vlnovej funkcie do stavu φ_1 , a s pravdepodobnosťou $|\alpha_2|^2$ do stavu φ_2 . Toto je presne to, čo predpovedá kvantová mechanika pri meraní veličiny, ktorej vlastné funkcie sú φ_1 a φ_2 .

Je ale oprávnené podozrenie, že do ťažkostí sme prišli preto, že opis meracieho prístroja tu bol príliš idealizovaný. Najjednoduchšia zmena je v tom, že budeme predpokladať, že prístroj je pred meraním nie v čistom stave ψ_0 , ale v stave opísanom maticou hustoty. Von Neumann a Wigner²⁸⁵ ale ukázali, že toto nezachráni situáciu a namiesto diskusie tohto výsledku nám bude stačiť i predchádzajúca jednoduchšia situácia.

Poznamenajme hneď, že merací prístroj s možnými kvantovými stavmi ψ_0, ψ_2, ψ_3 by sme mohli ďalej merať iným prístrojom so stavmi, povedzme ξ_0, ξ_2, ξ_3 , ale problém by sa vôbec nezmenil. Platilo by

$$\begin{aligned}
\psi_1 \xi_0 &\rightarrow \psi_1 \xi_1 = V \psi_1 \xi_0 \\
\psi_2 \xi_0 &\rightarrow \psi_2 \xi_2 = V \psi_2 \xi_0
\end{aligned}
\tag{6}$$

kde šípka označuje zmenu stavu pri interakcii oboch prístrojov a V je lineárny, unitárny operátor opisujúci túto interakciu.

Von Neumannova a Wignerova interpretácia zjednodušeného opisu merania

Predchádzajúci opis procesu merania bol príliš zjednodušený – o tom ešte bude reč. Ak ho ale zoberieme ako realistický, potom prichádzame takmer nevyhnutne k záverom, ku ktorým prišiel von Neumann a obhajoval ich aktívne Wigner.

Podľa von Neumanna je kvantová mechanika univerzálne platnou ale dualistickou teóriou. Zmena stavu pri meraní nie je opísaná Schrödingerovou rovnicou, ale prebieha podľa odlišného zákona. Von Neumann predpokladá, že redukcia vlnovej funkcie, t. j. prechod z ľavej strany (3) na pravú stranu (4) prebieha pri akte vnímania stavu sústavy vedomím pozorovateľa. Túto subjektivistickú interpretáciu je ťažké udržať, jednak preto, že pri známych metódach merania vznikajú permanentné a úplne objektívne záznamy výsledkov experimentu²⁸⁶ (škrvny na fotografických platniach, stopy častíc v bublinových a hmlových komorách, poklesy napätia na kondenzátoroch v Geigerových počítacoch a pod.) a jednak preto, že zatiaľ niet nijakých náznakov toho, že by vedomie bolo vybavené zvláštnou schopnosťou robiť redukciu stavu. Navyše pri takejto subjektivistickú interpretácii vznikajú ťažkosti s vysvetlením redukcie v prípade, keď jeden merací prístroj obzerajú dvaja pozorovatelia. Ťažkosti ortodoxnej von Neumannovej interpretácie sú podrobnejšie prediskutované v článku Shimonyho.²⁸⁷

U von Neumanna je vedomie pozorovateľa pri meraní nevyhnutné. Nie je ale celkom jasné, čo treba ešte ďalej zahrnúť do pojmu „pozorovateľ“. Keď napr. pozorujeme fotografickú platňu, môžeme (ale nemusíme) zahrnúť oko k pozorovateľovi. Von Neumannova teória nepriamych meraní²⁸⁸ ukazuje, že výsledky nezávisia od toho, kde presne vedieme hranicu medzi mikrosústavou a „pozorovateľom“.

Táto otázka sa ale vyskytuje aj v Bohrových a v Heisenbergových prácach o interpretácii kvantovej mechaniky. U Bohra je prístroj vždy opísaný klasicky a meraná sústava kvantovomechanicky. Pri zložitejšom procese (alebo zložitejšom prístroji) nie je však jasné, čo sa ešte má opisovať kvantovomechanicky

²⁸⁵ Wigner, E. P.: Amer. J. Phys. 31, (1963), s. 6. Fine, A.: Phys. Rev. D2, 1970, s. 2783 a literatúra tam citovaná.

²⁸⁶ Treba spravodlivo priznať, že pre zástancu ortodoxnej (von Neumannovej) interpretácie je tento dôvod nepresvedčivý. Podľa neho sa platňa nachádza v superpozícii stavov až do tej doby, kým nepríde pozorovateľ a kým jeho vedomie nevykoná redukciu stavu. Toto je ale filozoficky neudržateľné stanovisko, ktoré nie je ďaleko od tvrdenia, že strom neexistuje, ak sa naň práve nepozerám.

²⁸⁷ Shimony, A.: Amer. J. Phys. 31, 1963, s. 755.

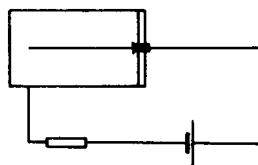
²⁸⁸ Naznačili sme ju vyššie, keď sme predpokladali, že prvý merací prístroj opísaný kvantovomechanicky, je sledovaný (pozorovaný) druhým, rovnako opísaným, prístrojom.

a čo už klasicky. Von Neumannov „pozorovateľ“ je takto subjektivistickým analógom Bohrovho klasicky opísaného meracieho prístroja. Ukazuje sa potom, že hranicu medzi mikrosústavou opísanou kvantovou mechanikou a vonkajším svetom opísaným klasicky môžeme síce ľubovoľne posúvať, ale nemôžeme ju odstrániť.²⁸⁹

Klasickou ukážkou problému je paradox Schrödingerovej mačky diskutovaný v predchádzajúcom článku a na riešenie problému merania je zrejme nutný realistický opis makroskopických telies (pozri práce citované na konci predchádzajúceho článku).

Problémy kvantovomechanického opisu meracích prístrojov

Skutočné meracie prístroje – aj tie najjednoduchšie – sú veľmi zložité makroskopické sústavy, ktoré majú niekoľko špecifických vlastností. Pre určitosť si tu pripomeňme Geigerov-Müllerov počítač, znázornený schematicky na obr. 17.3.



Obr. 17.3

Počítač je vlastne nádobou naplnenou plynom. V osi nádoby je kovová anóda a plášť je katódou. Keď nabitá častica prechádza cez nádobu obsahujúcu plyn, ionizuje niektoré neutrálne atómy či molekuly. Vonkajšie elektrostatické pole urýchľuje elektróny, ktoré vznikli pri ionizácii a tieto elektróny ionizujú ďalšie neutrálne atómy. Vzniká reťazová reakcia a počítač „šťukne“. Niektoré vlastnosti tohto meracieho prístroja, zväčša spoločné aj ďalším prístrojom sú nasledujúce:

- a) sústava je makroskopická,
- b) sústava je pôvodne v metastabilnom stave. Vidno to z toho, že primárna ionizácia môže vzniknúť i zrážkou dvoch atómov a vtedy počítač „zapracuje“ aj bez toho, aby nádobou prešla zvonku nabitá častica,
- c) makroskopická zmena je spôsobená zosilnením reťazovou reakciou,
- d) proces je ireverzibilný; keď počítač pracuje, uvoľňuje sa Joulovo teplo prechodom prúdu cez odpor,
- e) sústava nie je uzavretá; jednak preto, že napätie na elektródach je udržiavané vonkajším zdrojom a jednak preto, že Joulovo teplo je odoberané okolím. Toto platí pri makroskopických telesách celkom všeobecne, pretože rozdiely medzi energetickými hladinami sú v nich malé a nedá sa zaručiť tak dokonalá izolácia, aby tepelné žiarenie nespôsobovalo prechody medzi blízkymi energetickými hladinami. Ktoré z týchto vlastností majú podstatnú, či rozhodujúcu úlohu pri kvantovomechanickom opise procesu merania bude možné posúdiť až potom, keď sa podarí skonštruovať matematické modely procesu merania. Neizolovanosť meracích prístrojov bola zdôraznená v práci Zeha²⁹⁰, ich makroskopičnosť – modelovaná nekonečnosťou systému, napríklad v prácach Heppa a Bónu.²⁹¹ Problém ale nemožno považovať za uzavretý.

Poznámka ku kapitole 17. po 25 rokoch

Kvantová mechanika bola zrelou fyzikálnou teóriou už v tridsiatych rokoch 20. storočia a od tých čias sa na nej veľa nezmenilo. Aj preto nie je potrebné po 25 rokoch podstatne meniť úvodný učebný text.

Jedinou výnimkou sú snáď otázky interpretácie merania v kvantovej mechanike, vrátane problémov typu EPR paradox, a otázky o jej úplnosti.

Za posledných 25 rokov sa uskutočnilo veľa meraní na sústavách, ktoré sa skladajú zo silne korelovaných podsústav (podobné stavy ako pri EPR parodoxe) a vzniklo aj viacero teoretických prác k tejto problematike. Nebudeme sa tu pokúšať o ich podrobný prehľad, uvedieme tu len niekoľko mien a

²⁸⁹ Posúvanie hranice medzi mikrosústavou a meracím prístrojom sa niekedy nazýva aj psychofyzikálnym paralelizmom a o samotnej hranici sa občas hovorí ako o Heisenbergovom reze.

²⁹⁰ Zeh, H. D.: Foundations of Physics. 1, 1970, s. 69.

²⁹¹ Hepp, K.: Helv. Phys. Acta 45, s. 237 (1972). Bóna, P.: Acta Phys. Slov. 27, s. 101 (1977).

zdrojov, na ktorých by sa čitateľ v čase Wikipedie a vyhľadávačov ako Google a GoogleScholar mohol zachytiť. Mnohé zaujímavé experimenty na silne korelovaných stavoch (tzv. entangled states) uskutočnila skupina Antona Zeilingera z univerzity vo Viedni (predtým v Innsbrucku) a skupina Leonarda Mandela z univerzity v Rochestere (USA, štát New York). Všetky výsledky sú v súlade so štandardnou kvantovou mechanikou a často protirečia teóriám so skrytými parametrami. Značný záujem o tieto výsledky je motivovaný nielen ich významom pre interpretáciu kvantovej mechaniky, ale aj tým, že súvisia s možnosťou vytvorenia kvantových počítačov a s kvantovým kódovaním (kryptografiou). Na Slovensku sa štúdiu entanglovaných stavov úspešne venuje skupina profesora Vladimíra Bužeka na Fyzikálnom ústave Slovenskej akadémie vied.

Mnoho teoretických prác sa v uplynulých 25 rokoch sa zaujímalo o to, či sa dajú nájsť fyzikálne mechanizmy, ktoré sú zodpovedné za redukciu stavu (vlnovej funkcie) pri meraní.

Jedna škola, ku ktorej patria alebo patrili G. C. Ghirardi, A. Rimini, P. Pearle, J. S. Bell a ďalší vychádzala z predpokladu, že štandardná kvantová mechanika nie je úplná teória a že v Schrödingerovej rovnici majú byť aj ďalšie členy, ktoré súvisia s redukciou stavu úri meraní. Články v tomto duchu možno nájsť v špeciálnom čísle časopisu Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 40, rok 2007.

Druhá škola zastáva názor, že za redukciu vlnovej funkcie pri meraní je zodpovedná interakcia makroskopického meracieho prístroja s okolím. Sústava skladajúca sa z meraného mikroobjektu a meracieho prístroja potom nie je izolovaná a interakciou s okolím vznikne po čase stav opísaný maticou hustoty a nie vlnovou funkciou. Do tohto prúdu patria autori: W. Zurek, W. Unruh, H. D. Zeh, E. Joos, C. Kiefer a ďalší.

Niektoré experimenty skupín, ktoré viedli A. Zeilinger a S. Haroche hovoria v prospech tohto pohľadu.

Pokus o zhrnutie: experimenty typu EPR paradoxu hovoria v prospech štandardnej kvantovej teórie a najlepším súčasným kandidátom na vysvetlenie redukcie vlnovej funkcie pri meraní je interakcia prístroja s okolím. Obidva problémy však ešte potrebujú nejaký čas na úplné objasnenie. Stavy obsahujúce silne korelované podsústavy (entangled states) veľmi pravdepodobne zohrajú dôležitú úlohu v kvantovej informatike.

DODATOK A

NIEKTORÉ ŠPECIÁLNE FUNKCIE MATEMATICKEJ FYZIKY

V tomto dodatku podáme stručný prehľad niektorých špeciálnych funkcií matematickej fyziky. Obmedzíme sa pritom len na definície a uvedenie niektorých základných vlastností. Podrobnosti nájde čitateľ v literatúre.²⁹²

A1 EULEROVA GAMA FUNKCIA

Definícia:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad \text{pre } \operatorname{Re} z > 0 \quad (1)$$

Takto definovanú funkciu $\Gamma(z)$ možno analyticky predĺžiť tak, aby bola analytická v celej komplexnej rovine s výnimkou bodov $z = -l$ ($l = 0, 1, 2, \dots$), v ktorých má jednoduché póly s rezíduami $(-l)!$

Dôležitý vzťah:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (2)$$

Niektoré špeciálne hodnoty:

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad \text{pre } n \text{ prirodzené}$$

$$\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) = -2\sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^n} (2n-1)!!$$

A2 HERMITOVE POLYNÓMY

Definícia:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}) \quad \text{pre } n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Hermitove polynómy sú riešením diferenciálnej rovnice

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n \right] H_n(x) = 0$$

²⁹² Veľmi dobrou príručkou je napr. Bateman, H. – Erdélyi, A.: Higher Transcendental Functions. New York, 1953 (ruský preklad 1965). Prehľad najdôležitejších vzťahov možno nájsť i v knihe Gradstejn, I. S. – Ryzik, I. M.: Tablici integrálov, summ, rjadov i proizvedenij. Nauka, Moskva 1971.

Generujúca funkcia:

$$\exp(-t^2 + 2tx) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} H_k(x) \quad (3)$$

Vzťah ortogonality:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \pi \delta_{mn} \quad (4)$$

Parita:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$$

Špeciálne prípady:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \\ H_{2n}(0) &= (-1)^n 2^n (2n - 1)!! \\ H_{2n+1}(0) &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

A3 LEGENDREOVE POLYNÓMY A PRIDRUŽENÉ LEGENDREOVE FUNKCIE

Definícia:

Legendreove polynómy:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Pridružené Legendreove funkcie:²⁹³

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad (2)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, 1, 2, \dots, l, \quad -1 \leq x \leq 1$$

Diferenciálna rovnica:

$$\left[(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] P_l^m = 0 \quad (3)$$

Generujúca funkcia:

$$(2m - 1)!! (1 - x^2)^{m/2} \frac{t^m}{(1 - 2tx + t^2)^{m+1/2}} = \sum_{l=m}^{\infty} t^l P_l^m(x) \quad (4)$$

Špeciálne:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2tx + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(x) \quad (5)$$

²⁹³ U niektorých autorov sa definícia pridružených Legendreových funkcií líši faktorom (-1).

Vzťah ortogonality:

$$\int_{-1}^1 P_k^m(x) P_l^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{kl} \quad (6)$$

Špeciálne:

$$\int_{-1}^1 P_k(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{kl} \quad (7)$$

Parita:

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x)$$

Špeciálne prípady:

$$P_l^0(x) = P_l(x)$$

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x \quad (8)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(3x^3 - x)$$

A4 LAGUERREOVE POLYNÓMY

Definícia:²⁹⁴

$$L_n^0(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \quad (1)$$

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}^0(x) \quad k, n = 0, 1, 2, \dots$$

Diferenciálna rovnica:

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (k+1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n^k(x) = 0 \quad (2)$$

Generujúca funkcia:

$$\frac{\exp(-xt/(1-t))}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{(n+k)!} L_n^k(x) \quad (3)$$

Vzťah ortogonality :

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = \frac{[(n+k)!]^3}{n!} \delta_{mn} \quad (4)$$

Špeciálne prípady:

$$L_0^0(x) = 1, \quad L_0^1(x) = 1, \quad L_0^2(x) = 2, \dots, L_0^m(x) = m!$$

²⁹⁴ Pri definícii Laguerreových polynómov sú medzi rôznymi autormi značné odchýlky v normovaní a v terminológii.

$$L_1^0(x) = 1 - x, \quad L_1^1(x) = 4 - 2x, \quad L_1^2(x) = 18 - 6x$$

$$L_2^0(x) = 2 - 4x + x^2, \quad L_2^1(x) = 18 - 18x + 3x^2, \quad L_2^2(x) = 144 - 96x + 12x^2$$

A5 CYLINDRICKÉ FUNKCIE

Definícia:

Cylindrickými funkciami sa nazývajú riešenia $Z_\nu(z)$ Besselovej diferenciálnej rovnice

$$\frac{d^2 Z_\nu}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dZ_\nu}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) Z_\nu = 0$$

Špeciálnymi riešeniami sú Besselove funkcie $J_\nu(z)$, Neumannove funkcie $N_\nu(z)$ a Hankelove funkcie $H_\nu^{(1)}(z)$, $H_\nu^{(2)}(z)$:

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+\nu}}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \quad \text{pre } |\arg z| < \pi \quad (2)$$

$$N_\nu(z) = \frac{1}{\sin \nu \pi} [\cos(\nu \pi) J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)] \quad \text{pre } \nu \text{ nie celé, } |\arg z| < \pi \quad (3)$$

$$N_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} N_\nu(z) \quad \text{pre } n \text{ celé}$$

$$H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z)$$

$$H_\nu^{(2)}(z) = J_\nu(z) - iN_\nu(z)$$

Niekoľko užitočných vzťahov:

$$zZ_{\nu-1}(z) + zZ_{\nu+1}(z) = 2\nu Z_\nu(z)$$

$$Z_{\nu-1}(z) - Z_{\nu+1}(z) = 2 \frac{d}{dz} Z_\nu(z)$$

$$\frac{d}{dz} J_0(z) = -J_1(z)$$

$$J_2(z) = \frac{2}{z} J_1(z) - J_0(z), \quad \int J_\nu(\xi x) J_\nu(\xi x') \xi d\xi = \frac{1}{x} \delta(x-x')$$

Asymptotické správanie pre x reálne, $x \rightarrow \infty$:

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left[x - \frac{\pi \nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$N_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin \left[x - \frac{\pi \nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right]$$

$$H_\nu^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \exp \left[i \left(x - \frac{\pi \nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right]$$

$$H_\nu^{(2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \exp \left[-i \left(x - \frac{\pi \nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right]$$

Správanie sa v okolí začiatku $x \rightarrow 0$:

$$J_\nu(x) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \quad \text{pre } x \rightarrow 0$$

A6 SFÉRICKÉ BESSELOVE FUNKCIE

Definícia:

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z)$$

$$n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+\frac{1}{2}}(z)$$

l , celé

$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + i n_l(z)$$

$$h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - i n_l(z)$$

sférické Besselove funkcie spĺňajú diferenciálnu rovnicu

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} + 1 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] f_l(x) = 0$$

Špeciálne prípady

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad h_0^{(1)}(x) = \frac{-ie^{+ix}}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x} - \frac{\sin x}{x}, \quad h_1^{(1)}(x) = -ie^{+ix} \left(\frac{1}{x^2} - \frac{i}{x} \right)$$

Asymptotické správanie pre x reálne, $x \rightarrow \infty$:

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{l\pi}{2} \right)$$

$$n_l(x) \approx -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{l\pi}{2} \right)$$

Správanie v okolí začiatku $x \rightarrow 0$:

$$j_l(x) \approx \frac{1}{(2l+1)!!} x^l$$

$$n_l(x) \approx -\frac{(2l+1)!!}{2l+1} \frac{1}{x^{l+1}}$$

Wronskián

$$x^2 \left[n_l(x) \frac{d}{dx} j_l(x) - j_l(x) \frac{d}{dx} n_l(x) \right] = 1$$

DODATOK B

FYZIKÁLNE KONŠTANTY

$$\hbar = 1,054\,588\,7 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6,582\,173 \cdot 10^{-22} \text{ MeVs}$$

$$c = 2,997\,924\,58 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$m_e = 9,109\,534 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0,511\,003\,4 \text{ MeV}/c^2$$

$$m_p = 1,672\,648 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 938,279\,6 \text{ MeV}/c^2$$

$$e = 1,602\,189\,2 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\hbar c = 3,161\,158 \cdot 10^{-26} \text{ Jm} = 1,973\,285\,8 \cdot 10^{-13} \text{ MeVm}$$

$$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137,036\,04 \text{ (konštanta jemnej štruktúry)}$$

$$N = 6,022\,045 \cdot 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$$

$$k = 1,380\,662 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1} = 1/11\,604,50 \text{ eVK}^{-1} \text{ (Boltzmannova konštanta)}$$

$$\lambda_e = \hbar/(m_e c) = 3,861\,590\,5 \cdot 10^{-13} \text{ m (Comptonova vlnová dĺžka elektrónu)}$$

$$a_1 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2) = 0,529\,177\,06 \cdot 10^{-10} \text{ m (Bohrov polomer)}$$

$$R = m_e e^4 / ((4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2) = 13,605\,804 \text{ eV}$$

$$\mu_B = e\hbar/(2m_e) = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1} = 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eVT}^{-1} \text{ (Bohrov magnetón)}$$

$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$$

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$$

LITERATÚRA

- [1] MARX, G.: *Úvod do kvantové mechaniky*. Praha, 1965.
- [2] FERMI, E.: *Notes on Quantum Mechanics*. Chicago, 1960, ruský preklad 1965.
- [3] BORN, M.: *Atomic Physics*. London. 1963, ruský preklad 1965.
- [4] BOHM, D.: *Quantum Theory*. New York, 1952, ruský preklad 1961.
- [5] HEBER, G. – WEBER, G.: *Grundlagen der modernen Quantenphysik*. Leipzig, 1956.
- [6] SOMMERFELD, A.: *Atombau und Spektrallinien I. – II.* Braunschweig, 1951, ruský preklad, 1956.
- [7] BLOCHINCEV, D. I.: *Základy kvantové mechaniky*. Praha, 1955.
- [8] SCHIFF, L. I.: *Quantum Mechanics*. New York, 1955, ruský preklad, 1957.
- [9] LANDAU, L. D. – LIFŠIC, E. M.: *Kvantovaja mechanika*. Moskva, 1963.
- [10] MESSIAH, A.: *Quantum Mechanics*. Amsterdam, 1961.
- [11] PAULI, W.: Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik. *Handbuch der Physik Bd. V/1*. Berlin, 1958.
- [12] BETHE, H. A. – SALPETER, E. E.: *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms*. Berlin, 1957.
- [13] BETHE, H. A.: *Intermediate Quantum Mechanics*. New York, 1964.
- [14] DIRAC, P. A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, 1958.
- [15] KAEMPFFER, E.: *Concepts in Quantum Mechanics*. New York, 1965.
- [16] FEYNMAN, R. P. – HIBBS, A. R.: *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York, 1965, ruský preklad, 1968.
- [17] FEYNMAN, R. P. – LEIGHTON, R. – SANDS, M.: *The Feynman Lectures on Physics*. New York, 1963, ruský preklad, 1965.
- [18] Von NEUMAN, J.: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin, 1932.
- [19] MACKAY, G. W.: *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. New York, 1963.
- [20] WIGNER, E. P.: *Group Theory and its Applications*. New York, 1959.
- [21] HAMMERMESH, M.: *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Reading, 1964, ruský preklad, 1966.
- [22] HEINE, V.: *Group Theory in Quantum Mechanics*. London, 1960.
- [23] GOLDBERGER, M. L. – WATSON, K. M.: *Collision Theory*. New York, 1965.
- [24] MOTT, N. F. – MASSEY, H. S.: *The Theory of Atomic Collisions*. Oxford, 1965.
- [25] MERZBACHER, E.: *Quantum Mechanics*. New York, 1970.
- [26] JORDAN, T. F.: *Linear Operators for Quantum Mechanics*. New York, 1969.
- [27] PARK, D.: *Introduction to Strong Interactions*. New York, 1966.
- [28] HEISENBERG, W.: *The Physical Principles of the Quantum Theory*. New York, 1949.
- [29] ACHIEZER, A. I. – BERESTECKIJ, V. B.: *Kvantovaja elektrodinamika*. Moskva, 1969.
- [30] ČERNÝ, V. – LICHARD, P. – PÍŠŮT, J. – PREŠNAJDER, P.: *Zbierka úloh z kvantovej mechaniky*. Bratislava, 1985.
- [31] DIRAC, P. A. M.: *Lectures on Quantum Mechanics*. New York, 1964.
- [32] ŠILOV, G. J.: *Matematická analýza*. Bratislava, 1974.
- [33] FORMÁNEK, J.: *Úvod do kvantové teórie*. Praha : Academia, 1983.)
- [34] DAVYDOV, A. S.: *Kvantová mechanika*. Praha : SPN, 1978.

REGISTER

- absorpcia žiarenia 197
- amplitúda rozptylu 173, 330, 335
- antikomutátor 319
- aproximácia, Bornova 172, 203
- atóm He 310
- atóm vodíka 115
- , Bohrov model 12

- balík, vlnový** 32
- báza Hilbertovho priestoru 211, 216
- , –, spojitá 220
- bozón 308
- bra- vektor 212

- častica viazaná na úsečku 55, 58, 62
- častice, identické 306
- číslo, kvantové 21, 23, 25, 117
- číslo, obsadzovacie 313

- diagram, Feynmanov** 343
- distribúcia 166
- degenerácia 119
- determinant, Slaterov 321
- doba života 203, 237
- dublet, sodíkový 267

- elasticita rozptylu 332
- emisia, stimulovaná 301
- , spontánna 302, 303
- energia, Fermiho 25
- , ionizačná 12
- nulových kmitov 293

- fermión** 308
- fonón 295
- formalizmus, kanonický 186, 187, 290
- formfaktor, nepružný 176
- formula, Rutherfordova 174
- fotón 11, 17, 301
- funkcia, delta –, Diracova 160
- , Greenova 93, 168
- , sférická 112
- , štruktúrna 337
- , vlnová 30, 46
- , –, radiálna 117
- funkcionál 162, 166
- , lineárny 166

- generátor grupy** 277
- grupa 272
- , Lieova 277
- rotácii 273

- Hamiltonián** 65
- hodnota, stredná 58, 59, 140
- , vlastná 70
- hustota energie 198
- lagranžianu 289
- prúdu 198
- hypotéza, de Broglieho 8, 18
- , interpretácia, Bohrova 80
- , Bornova 28
- kvantovej mechaniky 348
- , Schrödingerova 27
- vlnovej funkcie 27

- invariantnosť, kalibračná 183, 189
- inverzia, časová 280
- , priestorová 280

- jama, potenciálová 97, 101
- jav, fotoelektrický 17
- , kvadratický Starkov 257, 260
- , lineárny Starkov 257, 260
- , Zeemanov 267
- jednotky, atómové 43

- koeficient absorpcie 97, 301
- koeficient stimulované] emisie 301
- spontánne] emisie 303
- koeficienty, Clebshove-Gordanove 247
- , Wignerove 249
- komplementarita 350
- komutačné pravidlo, kanonické 293
- konštanta jemnej štruktúry 266
- konštanty štruktúrne 278
- konvergencia 208
- , slabá 208
- korekcie, relativistické 264
- kvantovanie energie 11, 97
- , kanonické 186
- , sekundárne 321
- kvázičastica 295

- matica, hermitovská** 111, 217
- hustoty 232
- , Pauliho 130, 145
- , rotačná 247
- unitárna 145, 218
- , Wignerova 247
- mechanika, maticová 228
- , vlnová 228
- meranie času 231
- metóda, poruchová, nestacionárna 192
- , –, rozptylové stavy 158
- , –, stacionárna 148
- , –, prvý rád 148
- , –, –, druhý rád 149
- , –, –, degenerované stavy 151
- metóda, variačná 183
- mikroskop, Heisenbergov 81
- moment hybnosti 109, 239
- moment prechodu, dipólový 255, 303
- multiplikátor, Lagrangeov 155

nerovnosť, Schwarzova 208
 nerovnosti, Bellove 359
 nezávislosť, lineárna 209
 norma vektora 208
 normovanie na delta funkciu 219
 normovanie vlnovej funkcie 28

obrátenie pohybu 283
 obraz, Heisenbergov 230
 –, interakčný 231
 obraz, Schrödingerov 230
 odchýlka, stredná kvadratická 57
 operátor, anihilačný 225, 293
 –, antiunitárny 285
 –, Casimirov 278
 –, dvojčasticový 317
 – energie 65
 –, hermitovský 67, 211
 –, hermitovský združený 210
 –, jednočasticový 316
 –, kreačný 225, 293
 – momentu hybnosti 65, 239
 –, ohraničený 210
 –, projekčný 211
 –, spojitý 210
 – symetrie 271
 –, tenzorový 253
 – transformácie 270
 –, unitárny 211
 –, vlastná hodnota 68, 211
 –, vlastná funkcia 68, 211
 –, znižovací 244
 –, zvyšovací 244
 oscilátor, harmonický 102, 225

paradox EPR 352
 parameter, skrytý 359
 parita 282
 –, nezachovanie 287
 –, vnútorná 282
 pokus Francka a Hertza 13
 – Davissona a Germera 18
 – Sterna a Gerlacha 23
 polarizovateľnosť atómu 259
 pomer, gyromagnetický 23
 porucha, periodická 194
 postuláty vlnovej mechaniky 83
 postupnosť, cauchyovská 209
 potenciál, Yukavov 174, 330
 potenciály elektromagnetického poľa 180, 296
 pravdepodobnosť prechodu 194
 pravidlo, Fermiho „zlaté“ 197
 –, výberové 201
 prechod cez bariéru 104
 priblíženie, Bornovo 172, 203
 –, dipólové 201
 prierez, účinný 159, 327
 priestor, duálny 209
 –, Fokov 313, 316
 priestor Hilbertov 209, 212
 – hybností 48
 –, separabilný 209
 –, vektorový 207
 princíp korešpondencie 49
 princíp, Pauliho 24

princíp, Pauliho, zovšeobecnený 308
 – superpozície 30
 –, vylučovací 310
 projekcia, ortogonálna 211
 projektor 211
 propagátor 93, 338

reprezentácia, ekvivalentná 274
 – grupy 274
 –, ireducibilná 275
 –, p - 222
 –, projektívna 276
 –, x - 222
 rotácia, pasívny zmysel 242
 – sústavy 239
 rovnica Eulerova-Lagrangeova 290
 – kontinuity 86
 –, Pauliho 182
 –, Schrödingerova 52
 rovnice Maxwellove 296
 rozdelenie, kanonické 234
 –, mikrokanonické 234
 rýchlosť, fázová 49
 –, grupová 50

singlet 311, 312
 spektrum, spojité 218
 spin elektrónu 22, 24, 125
 –, precesný pohyb 137
 – v magnetickom poli 135
 spinor 127
 stav, rozptylový 94
 stav, stacionárny 54, 91
 –, viazaný 94
 súbor, štatistický 234
 súčin, direktný 252
 –, skalárny 208, 209
 sústava hmotného stredu 328, 329
 sústava, laboratórna 328, 329
 symetria 270, 272

šírka hladiny 203
 štruktúra, hyperjemná 264
 –, jemná 265

transformácia, Fourierova 216, 220
 –, kalibračná 189
 translácia v čase 278
 – v priestore 278
 triplet 311, 312
 –, Gelfandov 222

uhly, Eulerove 246

väzba LS 262
 vektor, bra- 212
 –, ket- 212
 –, vlastný 213
 veličiny atómovej fyziky 14, 43
 veta, Cauchyho 167
 –, Wignerova 271
 –, Wignerova-Eckartova 254
 vety, Ehrenfestove 90
 vlna, parciálna 331
 vývoj stavu, časový 229

vzťah neurčitosti 32, 78
– – pre t a E 231

zákon, Planckov 301
zátvorky, Poissonove 89
zmena pri meraní stavu 73