

Kvantová mechanika

M. Gintner

1 Motivácia

1.1 Úspechy fyziky do konca 19. storočia

Klasická fyzika 19. storočia bola veľmi úspešná vo vysvetlení a popísaní väčšiny vtedy známych javov:

Klasická mechanika Pohyby pozemských a nebeských telies. Lagrangeov a Hamiltonov formalizmus.

Elektrodynamika Zjednotený opis elektrických a magnetických javov. Maxwellove rovnice.

Termodynamika Tepelné stroje.

Štatistická mechanika Odvodenie zákonov termodynamiky aplikovaním štatistických zákonov na predstavy o diskretnej štruktúre hmoty.

1.2 Žiarenie dokonale čierneho telesa

Podľa klasickej fyziky je objemová hustota energie u tepelného žiarenia na jednotku vlnovej dĺžky dokonale čierneho telesa (**Rayleigh–Jeans zákon**)

$$\frac{du}{d\lambda} = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}. \quad (1)$$

Toto sa zhoduje s experimentom len pre veľké vlnové dĺžky λ . Celková vyžiarená energia je úmerná integrálu $\int_0^\infty (du/d\lambda)d\lambda$, ktorý ale diverguje pre $\lambda \rightarrow 0$.

Planckova hypotéza: steny dokonale čierneho telesa nevyžarujú elmag. žiarenie kontinuálne, ale po dávkach – *kvantách* – o veľkosti

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad (2)$$

kde $\nu = c/\lambda$ je frekvencia, $\omega = 2\pi\nu$ je uhlová frekvencia. Táto hypotéza vedie na

$$\frac{du}{d\lambda} = \frac{8\pi hc/\lambda^5}{\exp(\frac{hc}{kT\lambda}) - 1}, \quad (3)$$

ktorej priebeh sa zhoduje s experimentálnou krivkou. Rayleigh-Jeansov zákon (1) dostaneme ako limitný prípad výrazu (3) pre veľké vlnové dĺžky, $\lambda \rightarrow \infty$. Číselnú zhodu s experimentálnou krivkou dosiahneme, keď

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}. \quad (4)$$

1.3 Fotoelektrický jav

Energia elektrónov vyrazených z kovu nezávisí od intenzity svetla, ale od jeho farby (frekvencie ω). Einsteinovo vysvetlenie (1905): Svetlo je kvantované ako v Planckovej hypotéze. Každý elektrón v kove dokáže pohltiť len jedno kvantum svetla o energii $\hbar\omega$. Kinetická energia vyletujúceho elektrónu je potom daná rovnicou

$$E_{kin} = \hbar\omega - A, \quad (5)$$

kde A je tzv. *výstupná práca*, čiže hĺbka potenciálovej jamy, z ktorej sa elektrón musí dostať, aby mohol opustiť kov. Toto správanie naznačuje, že kvantovanosť svetla nie je dôsledok špeciálneho produkčného mechanizmu stien dokonale čierneho telesa, ale podstatná vlastnosť elektromagnetického žiarenia samotného.

1.4 Comptonov jav

Pozorovanie rozptylu RTG žiarenia na voľných (slabo viazaných) elektrónoch (A. Compton, 1923). Podľa klasickej elektrodynamiky sa λ pri rozptyle nezmení. Experimentálne pozorovanie je, že $\lambda' > \lambda$. Zhodu s experimentom dostaneme, ak rozptyl RTG žiarenia prebieha ako pružná zrážka relativistickej častice, ktorá má nulovú hmotnosť a energiu $E = h\nu = hc/\lambda$, s voľným elektrónom. Vysvetlenie Comptonovho javu nielen potvrdzuje, že elmag. žiarenie je energeticky kvantované, ale navyiac sa tieto kvantá správajú ako súdržné častice s nulovou hmotnosťou. Tieto častice dostali názov *fotóny*.

1.5 Stabilita atómu

Rutherford začiatkom 20. storočia (1911—13) zistil, že atóm sa skladá z malého veľmi ťažkého jadra s kladným elektrickým nábojom, okolo ktorého obiehajú oveľa ľahšie záporne nabité elektróny (*Planetárny model*). Elektrón k jadru viaže prítiažlivá Coulombova sila medzi jadrom a elektrónom. Podľa klasickej elektrodynamiky elektrický náboj pri zrýchlenom pohybe vyžaruje elmag. žiarenie. Elektrón by mal teda pri obehú okolo jadra strácať energiu vyžarovaním elmag. žiarenia, v dôsledku čoho by padol na jadro za menej ako 10^{-5} s. Toto je v očividnom rozpore s pozorovanou realitou stability atómov, z ktorých sa skladá svet okolo nás.

1.6 Atómové spektrá

Energia elektrónu v Planetárnom modeli atómu je podľa klasickej fyziky

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 + V(r), \quad (6)$$

kde

$$V(r) = -\frac{Qq_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (7)$$

Qq_e je náboj jadra, q_e je náboj elektrónu. Ak elektrón vzdialíme nekonečne ďaleko od jadra, jeho potenciálna energia je nulová. Ak elektrón obieha okolo jadra, jeho celková energia je záporná, ale inak môže byť ľubovoľná. Túto energiu v absolútnej hodnote nazývame *väzbovou energiou*. Je to práve energia, ktorú musíme elektrónu dodať, aby sme ho od väzby k jadru oslobodili.

Aby sa voľný elektrón mohol naviazať na kladne nabitú jadro, musí sa dostatočne znížiť jeho celková energia. Na základe predstáv o fotónoch a ich vlastnostiach, ktoré boli pozorované vo

vyššie spomenutých experimentoch, je rozumné predpokladať, že uvoľnená energia bude nesená jedným fotónom reprezentujúcim svetlo s vlnovou dĺžkou $\lambda = hc/\Delta E$, kde ΔE je zmena energie elektrónu. Podobne sa dá očakávať, že vyžiarením fotónu môže dochádzať k zmenám energie už viazaných elektrónov. Absorbovaním energie fotónu elektrónom by zase bolo možné energiu viazaného elektrónu zvýšiť, prípadne elektrón od jadra úplne odtrhnúť. Všimnime si však, že z týchto predstáv nevyplýva nijaké obmedzenie na veľkosť zmien energie elektrónu v elektrostatickom poli atómového jadra v dôsledku pohltienia alebo vyžiarovania fotónu. Očakávali by sme preto, že každý atóm bude vyžarovať a pohlcovať fotóny všetkých vlnových dĺžok.

Koncom 19. storočia boli v spektrách Slnka a hviezd pozorované série tmavých čiar, ktoré znamenali absenciu istých vlnových dĺžok. Podobné čiary boli pozorované v laboratóriách v spektre bieleho svetla, ktoré bolo prepustené cez nádobu s plynom. Poloha tmavých čiar v spektre jednoznačne súvisela s chemickým zložením plynu. Na druhej strane, elektrická výbojka naplnená rovnakým plynom vyžarovala svetlo vlnových dĺžok, ktoré práve zodpovedali tmavým čiarám v predošlom prípade. Tieto pozorovania naznačovali, že atómy každého prvku dokážu vyžarovať a absorbovať elektromagnetické žiarenie len istých vlnových dĺžok, a že toto spektrum je pre daný prvok charakteristické. Takýto diskretný súbor vlnových dĺžok by mohol vzniknúť, keby elektróny v atómoch mohli nadobúdať len diskretnú sadu energií. Dôvod k takémuto správaniu elektrónov v atómoch však klasická fyzika neposkytuje.

1.7 Bohrov model atómu vodíka

Na preklopenie rozporov medzi zákonmi klasickej fyziky a pozorovaným správaním atómov dánsky fyzik Niels Bohr sformuloval (1913) tri postuláty, ktorých aplikovaním bolo možné opísať vtedy známe vlastnosti atómu vodíka:

1. Atóm sa môže nachádzať len v stavoch s diskretnými hodnotami energií;
2. Pri prechode elektrónu medzi diskretnými stavmi sa vyžiari (pohlť) práve jeden fotón s frekvenciou ν danou vzťahom

$$|E' - E| = h\nu;$$

3. Elektrón v atóme sa môže pohybovať len po tých kruhových trajektóriách, pri ktorých je jeho moment hybnosti

$$L = N\hbar, \quad N = 1, 2, 3, \dots;$$

Pomocou tohoto modelu bolo možné správne spočítať vodíkové spektrum. Jeho kvantitatívne predpovede však zlyhávali pri všetkých zložitejších atómoch.

1.8 Franck-Hertzov pokus

V roku 1913 Franck a Hertz strieľali elektróny s energiou E do nádoby so zriedeným plynom. Vyletujúce elektróny na druhej strane nádoby mali diskretné rozdelené energie E, E', E'', \dots . Hodnoty $E - E', E - E'', \dots$ zodpovedali energiám fotónov zo spektier atómov použitého plynu.

2 Nahliadnutie za (kvantovú) oponu

2.1 Rozmerová analýza – ako a prečo to funguje

Skúsenosť nás učí, že náš svet je poznateľný po častiach. Napriek tomu, že si to bežne neuvedomujeme, nie je to triviálny fakt. Nepoznáme princíp, ktorý by bránil aj takému usporiadaniu reality, v ktorej by na predpovedanie priebehu ľubovoľného javu bola potrebná detailná znalosť stavu celého nášho vesmíru¹. Napriek tomu Isaac Newton dokázal spočítať pohyb planét okolo Slnka, aj keď nemal žiadne znalosti o elektromagnetickom poli, o elementárnych časticiach, či o rozpínaní vesmíru.

Toto je ilustrácia našej skúsenosti, že každý doteraz skúmaný jav v našom vesmíre zjavne súvisel len s malým počtom iných skutočností. Pohyb Mesiaca okolo Zeme dokážeme opísať, ak poznáme hmotnosť Zeme a vzájomnú vzdialenosť týchto dvoch telies. Na základe týchto skutočností spolu so znalosťou univerzálnej gravitačnej konštanty dostaneme pomerne presný opis pohybu Mesiaca. Isté malé nepresnosti dokážeme odstrániť, ak zvažíme aj vplyv Slnka a ostatných planét Slnčnej sústavy. Drvivá väčšina javov prebiehajúcich v tomto vesmíre však nemá pozorovateľný vplyv na pohyb Mesiaca okolo Zeme. Na druhej strane je ale celkom možné, že vplyv celého vesmíru na tento alebo hociktorý iný jav je efektívne zosumarizovaný do hodnôt základných fyzikálnych konštánt. Toto ale nie je (a ešte asi dlho nebude) v našich silách overiť priamym pozorovaním, nakoľko nedokážeme prevádzať experimenty s celým vesmírom.

Základným aspektom poznávacej práce fyzikov je teda zisťovanie skutočností, ktoré sú pre daný jav dôležité. Poznateľnosť sveta po častiach sa v matematickej rovine prejavuje tak, že veličiny charakterizujúce skúmaný jav typicky závisia len na malom počte iných veličín. Zvyčajne veličina každého druhu má pre daný jav len jedného dôležitého zástupcu (jednu dôležitú hmotnosť, jednu dôležitú dĺžku, jednu dôležitú rýchlosť, atď.) Tieto veličiny musia byť skombinované takým spôsobom, aby sme dostali správne jednotky pre výslednú veličinu. Pokiaľ do vzorca vstupujú veličiny s rôznymi jednotkami, potom doň vstupujú v súčinoch a mocninách. Na tejto úvahe je založená metóda *rozmerovej analýzy*: vytipujeme si veličiny dôležité pre daný jav a tieto skombinujeme do jedného výrazu tak, aby sme dostali správnu jednotku pre hľadanú veličinu.

Rozmerová analýza nie je “zaručený recept” na hľadanie zákonov fyziky. Určite nedokáže identifikovať bezrozmerné konštanty, ktoré sú často vo fyzikálnych výrazoch prítomné. Skúsenosť ale ukazuje, že sa tieto konštanty nezvyknú dramaticky líšiť od jednotky a tak vztáhy odvodené metódou rozmerovej analýzy dávajú často prinaajmenšom dobré rádové odhady a správne funkčné závislosti. V tejto kapitole sa pokúsime využiť rozmerovú analýzu na identifikáciu javov, ktoré sú podstatné pre vysvetlenie stavby atómu.

2.2 Príklady použitia rozmerovej analýzy v klasickej fyzike

2.2.1 Perióda matematického kyvadla

Uvažujme matematické kyvadlo: na závese dĺžky l je malá guľička hmotnosti m . Chceme nájsť dobu kmitu T .

Tip na dôležité veličiny, ktoré by mohli ovplyvňovať správanie sa kyvadla: dĺžka l , hmotnosť m a ak kyvadlo visí pri zemskom povrchu, potom gravitačné zrýchlenie g . V nasledujúcej tabuľke

¹Otázkou samozrejme ostáva, či by v takomto vesmíre bol možný vznik inteligencie a rozvoj poznávania.

zosumarizujeme údaje o jednotkách uvedených veličín

veličina	jednotka	rozmer
l	m	m
m	kg	kg
g	$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
T	s	s

(8)

Funkčná závislosť T na l, m, g má tvar

$$T = l^\alpha m^\beta g^\gamma, \quad (9)$$

kde α, β, γ sú neznáme konštanty. Výsledné jednotky na pravej aj ľavej strane rovnice (9) sa musia zhodovať, čiže

$$[T] = [l]^\alpha [m]^\beta [g]^\gamma, \quad (10)$$

kde ako $[x]$ sme označili rozmer veličiny x . Keď dosadíme jednotky z tabuľky (8) do (10), dostaneme

$$\text{s} = \text{m}^{\alpha+\gamma} \cdot \text{kg}^\beta \cdot \text{s}^{-2\gamma}. \quad (11)$$

Porovnaním ľavej a pravej strany tejto rovnice nájdeme, že $\alpha = 1/2$, $\beta = 0$ a $\gamma = -1/2$. To znamená, že na základe dimenzionálnej analýzy sme našli, že

$$T = \sqrt{\frac{l}{g}}. \quad (12)$$

Oproti správne mu vzťahu

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \quad (13)$$

sa vzťah (12) líši bezrozmernou konštantou 2π . Náš odhad sa teda od presného výsledku líši skoro faktorom sedem. To nie je ale až také zlé, keď si uvedomíme, že líšiť sa dá aj faktorom milión alebo aj podstatne viac. Čo je ale najdôležitejšie, rozmerovou analýzou sme dostali správnu závislosť na premenných (prišli sme napríklad na to, že doba kmitu nezávisí na m , hoci sme túto veličinu do našich pôvodných úvah zahrnuli). Navyiac sme číselne dostali správny rádo vý odhad výsledku. To je rozhodne výborný zisk pri tak malej investícii.

2.2.2 Doba obehu Zeme okolo Slnka

Na prvý pohľad sa tu zdá byť situácia pre rozmerovú analýzu príliš komplikovaná. V hre je totiž viac ako jedna dôležitá hmotnosť, hmotnosť Zeme m_Z a hmotnosť Slnka m_S . Pri pozornom postupe však zistíme, že toto je len zdanlivý problém.

Pre pohyb Zeme okolo Slnka je zrejme dôležitá hmotnosť samotnej Zeme ako i sila, ktorá na Zem pôsobí (viď 2. Newtonov zákon). Sila F , ktorou pôsobí Slnko na Zem, závisí od vzdialenosti r Zeme od Slnka a od gravitačných nábojov Slnka a Zeme, ktoré označíme g_S a g_Z , takže

$$F = \kappa \frac{g_S g_Z}{r^2}. \quad (14)$$

Dôležité veličiny a ich jednotky zosumarizujeme v nasledovnej tabuľke

veličina	jednotka	rozmer
m_Z	kg	kg
r	m	m
$\kappa g_S g_Z$	$\text{N} \cdot \text{m}^2$	$\text{kg} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-2}$
T	s	s

(15)

Keď dosadíme jednotky z tabuľky do rozmerovej rovnice

$$[T] = [\kappa g_S g_Z]^\alpha [m_Z]^\beta [r]^\gamma, \quad (16)$$

dostaneme

$$\text{s} = \text{kg}^{\alpha+\beta} \cdot \text{m}^{3\alpha+\gamma} \cdot \text{s}^{-2\alpha}. \quad (17)$$

Táto rovnica je splnená, ak $\alpha = -1/2$, $\beta = 1/2$ a $\gamma = 3/2$. Takže

$$T = r^{3/2} \sqrt{\frac{m_Z}{\kappa g_S g_Z}}. \quad (18)$$

Podľa *princípu ekvivalencie* je gravitačný náboj úmerný (pri vhodnej voľbe jednotiek rovný) hmotnosti telesa. Keď teda dosadíme do (18) vzťahy $g_S = m_S$ a $g_Z = m_Z$, dostaneme

$$T = r^{3/2} \sqrt{\frac{1}{\kappa m_S}}. \quad (19)$$

Toto sa líši od presného výsledku opäť iba bezrozmerným faktorom 2π

$$T = 2\pi r^{3/2} \sqrt{\frac{1}{\kappa m_S}}. \quad (20)$$

Niektoré závery ohľadom pohybu planét okolo Slnka sa dajú z rozmerovej analýzy získať presne. Napríklad Keplerov zákon pre pomer obežných dôb dvoch planét

$$\left(\frac{T_1}{T_2}\right)^2 = \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^3 \quad (21)$$

dostaneme aj z rovnice (19), pretože v podiele obežných dôb sa spoločné konštanty vykrátia.

2.3 Hľadanie veličín, ktoré sú dôležité pre fyziku atómu

Typický rozmer atómu je $a \approx 10^{-10}$ m. Horný odhad tohoto čísla urobil už v 18. storočí Benjamin Franklin pomocou experimentu s olejom. Rozlial 5 cm³ oleja na vodnú hladinu. Vďaka povrchovým napätiam sa olej na vode snaží rozlialiť na čo najväčšiu plochu, ktorá je limitovaná tým, že hrúbka olejovej vrstvy nemôže byť menšia ako veľkosť molekúl oleja. Franklinov olej sa rozlial na plochu 0,2 ha. To znamená, že hrúbka olejovej vrstvy bola okolo $2,5 \times 10^{-9}$ m.

Keď poznáme typický rozmer atómu, môžeme rozmerovú analýzu použiť na hľadanie veličín, ktoré majú určujúci vplyv na veľkosť atómov. Na začiatok budeme konzervatívni a pozrime sa, aký odhad veľkosti atómu by sme dostali použitím veličín a konštánt klasickej fyziky 19. storočia.

Pri Planetárnom modeli (ako už samo meno naznačuje) je situácia analogická ako pri obiehaní planét okolo Slnka. Očakávame preto, že podstatnými veličinami budú hmotnosť elektrónu m_e a elektrické náboje elektrónu a jadra v súčine $e^2 \equiv q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$. Rovnica

$$[a] = [m_e]^\alpha [e^2]^\beta \quad (22)$$

vedie na

$$m = \text{kg}^{\alpha+\beta} \cdot \text{m}^{3\beta} \cdot \text{s}^{-2\beta}. \quad (23)$$

Táto rovnica však nemá pre α, β riešenie, čo ani nie je prekvapujúce, keď si uvedomíme, že ani Slnčná sústava nemá svoj typický rozmer, ktorý by bol určený prítlačivosťou Slnka a hmotnosťou planét. Ľubovoľne ťažké planéty (alebo umelé družice) si môžu obiehať okolo Slnka v ľubovoľnej vzdialenosti.

Ak sme teda neuspeli pri vysvetľovaní veľkosti atómu s klasickou fyzikou 19. storočia, musíme sa poobzerať po nejakých novinkách na trhu. A v dobe, o ktorej je reč, sa vynorili hneď dve nové konštanty; rýchlosť svetla c a Planckova konštanta \hbar . Skúsme to najskôr s rýchlosťou svetla. Táto konštanta by zrejme vstúpila do hry, ak by elektrón v atóme bol relativistický objekt a ak by vysvetlenie veľkosti atómu malo korene v relativistických javoch. Jednotky a hodnoty dôležitých veličín zhrnieme v nasledujúcej tabuľke.

veličina	jednotka	rozmer	hodnota
m_e	kg	kg	$9,1 \times 10^{-31}$
$e^2 \equiv q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$	$\text{N} \cdot \text{m}^2$	$\text{kg} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-2}$	$2,3 \times 10^{-28}$
c	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	3×10^8
a	m	m	?

(24)

Rozmerovou analýzou odvodíme pre a vzorec

$$a = \frac{e^2}{m_e c^2}. \quad (25)$$

Po dosadení číselných hodnôt dostaneme

$$a \approx 3 \times 10^{-15} \text{ m}. \quad (26)$$

Táto hodnota je o 5 rádov menšia ako je typický rozmer atómu. Zdá sa teda, že relativistické efekty nie sú zodpovedné za veľkosti atómov.

Skúsme to teraz s Planckovou konštantou

veličina	jednotka	rozmer	hodnota
m_e	kg	kg	$9,1 \times 10^{-31}$
$e^2 \equiv q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$	$\text{N} \cdot \text{m}^2$	$\text{kg} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-2}$	$2,3 \times 10^{-28}$
\hbar	$\text{J} \cdot \text{s}$	$\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$1,1 \times 10^{-34}$
a	m	m	?

(27)

Z rozmerovej analýzy dostaneme

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}, \quad (28)$$

čo po dosadení číselných hodnôt dá rozmer

$$a \approx 0,4 \times 10^{-10} \text{ m.} \quad (29)$$

Toto číslo už splňa naše očakávania. Mohlo by to znamenať, že sa nám podarilo identifikovať kľúčové veličiny pre výpočet rozmeru atómu a že novým fundamentálnym parametrom fyziky mikrosвета na úrovni atómov je Planckova konštanta \hbar .

Zaujímavé bude tiež získať odhad pre typické rýchlosti a energie elektrónu v atóme. Z rozmerovej analýzy dostaneme

$$v = \frac{e^2}{\hbar} \approx 2 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \approx 0,007c \quad (30)$$

a²

$$E = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} \approx 4 \times 10^{-18} \text{ J} \approx 25 \text{ eV.} \quad (31)$$

Vidíme, že typická rýchlosť elektrónu v atóme je veľmi malá v porovnaní s rýchlosťou svetla. To je v súlade s predošlým zistením, že c nie je dôležitým parametrom pre opis atómu. Odhad typickej energie dáva tiež uspokojujúcu hodnotu, keď zväžíme, že väzbová energia elektrónu v atóme vodíka je 13,5 eV.

Vidíme, že vďaka rozmerovej analýze sme dostali najzákladnejšiu predstavu o javoch a číslach, ktoré budú dôležité pre vybudovanie skutočnej teórie schopnej opísať svet na úrovni jednotlivých atómov. Z doteraz zistného môžeme povedať, že v tejto novej teórii bude veľmi dôležitú úlohu zohrávať Planckova konštanta a že pri jej budovaní budeme asi nútení prekročiť hranice platnosti klasických fyzikálnych teórií 19. storočia.

²1 eV je energia, ktorú získa elektrón, keď ho urýchlíme potenciálovým rozdielom 1 V. Menovite 1 eV = $1,602 \times 10^{-19}$ J.

3 Kvantové (časticové) vlastnosti svetla

3.1 Hybnosť fotónu

Experimenty a zistenia, ktoré sme opísali vyššie, sú dostatočnou motiváciou, aby sme sa začali vážne zaoberať predstavou, že svetlo³ sa skladá z fotónov s energiou

$$E = \hbar\omega. \quad (32)$$

Tento vzťah zväzuje dva v klasickej fyzike nezlúčiteľné pojmy: energiu častice a frekvenciu vlnenia. Alternatívnym parametrom k frekvencii, ktorý tiež charakterizuje vlnové procesy, je vlnová dĺžka λ . V prípade svetla je $\omega = 2\pi\nu = 2\pi c/\lambda$, takže pre energiu fotónu máme

$$E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}. \quad (33)$$

Viditeľné svetlo má vlnové dĺžky v intervale $400 \text{ nm} < \lambda < 700 \text{ nm}$. Tomu zodpovedajú energie fotónov 1,8 eV pre červené svetlo až 3,1 eV pre fialové svetlo.

Keďže sa fotóny pohybujú rýchlosťou svetla⁴, sú to relativistické častice a pre ich popis je nevyhnutné použiť Špeciálnu teóriu relativity. Podľa nej sa rýchlosťou svetla môžu pohybovať len častice s nulovou hmotnosťou. Hmotnosť fotónu by teda mala byť nulová.

Koncom 19. storočia ruský fyzik Lebedev zmeral tlak svetla. Tlak je sila pôsobiaca na jednotku plochy a sila, podľa Newtona, vzniká pri odovzdávaní hybnosti. To znamená, že svetlo musí mať okrem energie aj hybnosť. Ak sa svetlo skladá z fotónov, prirodzene vzniká otázka, akú veľkú hybnosť prenáša jeden fotón. Relativistický vzťah medzi energiou a hybnosťou častice je

$$E^2 = m^2c^4 + \vec{p}^2c^2. \quad (34)$$

Keďže pre fotón je $m = 0$, potom hybnosť fotónu je

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (35)$$

Pri opise šírenia vlnenia sa zavádza veličina, ktorá obsahuje nielen informáciu o vlnovej dĺžke, ale aj o smere šírenia. Je to *vlnový vektor*

$$\vec{k} \equiv \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}, \quad (36)$$

kde \vec{n} je jednotková normála k vlnoploche definujúca smer šírenia vlnenia v danom mieste. Ak súčasne \vec{n} označíme jednotkový vektor v smere pohybu fotónu, $\vec{n} = \vec{p}/|\vec{p}|$, potom skombinovaním vzťahov (35) a (36) dostaneme pre hybnosť jedného fotónu

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (37)$$

³Pojem *svetlo* budeme v tomto texte používať ako synonymum pre elektromagnetické žiarenie.

⁴Zrejme v tomto ohľade nemajú veľmi na výber. Ako "reprezentantom svetla" im povinnosť pohybovať sa rýchlosťou c vyplýva takpovediac "zo zákona".

3.2 Dvojštrbinový experiment s fotónmi

Od Newtona sa v klasickej fyzike vinie spor o tom, či svetlo má povahu časticovú alebo vlnovú. Od polovice 19. storočia sa zdalo, že spor bol definitívne vyriešený v prospech vlnenia. Vlnovú podstatu nezvratne potvrdzovali javy ako difrakcia a interferencia. Vyvrcholením bolo, keď Maxwell riešením svojich rovníc ukázal, že svetlo je elektromagnetické vlnenie.

Uvažujme klasický experiment s monochromatickým svetlom na dvojštrbine. Zdroj Z monochromatického svetla s vlnovou dĺžkou λ svieti na nepriehľadné rovinné tienidlo S s dvoma úzkymi štrbinami 1 a 2, ktorých vzdialenosť je porovnateľná s vlnovou dĺžkou svetla. V istej vzdialenosti za týmto tienidlom je ďalšie rovinné tienidlo T, na ktoré dopadá svetlo, ktoré prešlo cez štrbiny. Dôkazom vlnovej podstaty svetla z pohľadu klasickej fyziky je fakt, že svetlo, ktoré prejde cez štrbinu 1, interferuje so svetlom, ktoré prešlo cez štrbinu 2. To sa prejaví na tienidle T vznikom interferenčných prúžkov: svetlých a tmavých miest, ktoré predstavujú miesta s rôznou intenzitou dopadajúceho svetla.

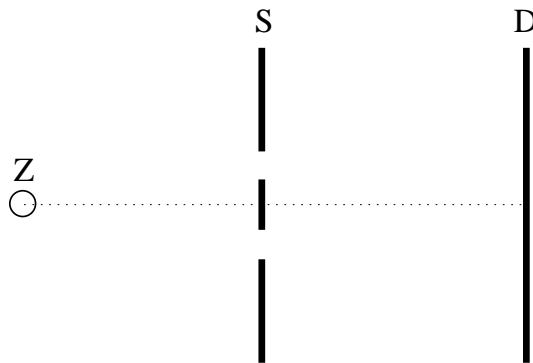


Figure 1: Schéma usporiadania štrbinového experimentu.

Tento efekt nezávisí od podstaty vlnenia — rovnako by sme ho pozorovali pri zvukových vlnách alebo vlnách na vodnej hladine — a je notoricky známy z vlnovej mechaniky ako interferencia vlnenia. Interferencia vlnenia je dôsledkom princípu superpozície: ak na jedno miesto dorazia dve vlnenia, potom výsledkom je ich súčet. Aby platil princíp superpozície, musí byť pohybová rovnica vlnenia lineárnou diferenciálnou rovnicou.

Pripomeňme si v stručnosti, ako v dôsledku skladania vlnení vzniká interferenčný obrazec, ktorý pozorujeme na tienidle. Vieme, že intenzita vlnenia je priamo úmerná jeho amplitúde. Pre zjednodušenie života budeme predpokladať, že konštanta úmernosti je rozná jednej. To znamená, že ak amplitúda vlny prichádzajúcej z otvoru 1 je v mieste x tienidla T rovná komplexnému číslu $a_1 e^{i\varphi_1}$ a amplitúda vlny prichádzajúcej z otvoru 2 je v tomto istom mieste komplexné číslo $a_2 e^{i\varphi_2}$, pozorované intenzity od každej vlny samostatne (keď by sme zakryli jeden z otvorov) sú

$$I_1 = a_1^2, \quad I_2 = a_2^2. \quad (38)$$

Keď sú obidve štrbiny otvorené, dostaneme na tienidle T v danom mieste intenzitu

$$I_{12} = |a_1 e^{i\varphi_1} + a_2 e^{i\varphi_2}|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2), \quad (39)$$

ktorá, ako vidíme, nie je obyčajným súčtom intenzít od jednotlivých otvorov.

Ak pripustíme, že sa svetlo skladá z fotónov, vzniká prirodzená otázka, ako interpretovať toto pozorovanie na fotónovej úrovni. Z pohľadu klasickej fyziky nemá zmysel hovoriť o interferencii častíc. Predstavme si, že fotón je časticou klasickej fyziky (napr. hmotný bod), ktorú vystreľujeme zo zdroja Z smerom na tienidlo T s náhodným rozptylom, ktorý je v mieste T väčší ako vzdialenosť oboch štrbín. Časť fotónov vyslaných zdrojom by bola zachytených už tienidlom S . Fotón, ktorý by prenikol niektorou zo štrbín, dopadne na tienidlo T . Pri klasickej častici by sme očakávali, že rozloženie bodov dopadu na T bude sústredené v oblastiach, ktoré sú priamkovými projekciami zdroja cez štrbiny na tienidlo T . Ak ešte zvážime, že niektoré častice mohli naraziť na okraje štrbín a tak zmeniť pôvodný smer svojho pohybu, tak môžeme očakávať malé percento bodov dopadu aj za hranicami týchto oblastí.

Na opis rozloženia bodov dopadu môžeme zaviesť pravdepodobnosť dopadu v danom mieste nasledovným spôsobom. Rozdelíme si tienidlo T na veľké množstvo malých plôšok rovnakej veľkosti. Potom pravdepodobnosť, že vyžiarený fotón dopadne do danej plôšky definujeme ako $P = n/N_Z$, kde N_Z je počet všetkých fotónov, ktoré boli vyžiarené zo zdroja Z a n je počet fotónov, ktoré dopadli do danej plôšky. V prípade, že by fotón bola klasická častica, očakávame, že pravdepodobnosť pri oboch otvorených štrbinách je

$$P_{12} = P_1 + P_2, \quad (40)$$

kde P_1 a P_2 sú pravdepodobnosti, ktoré dostaneme, keď jedna zo štrbín je zatvorená. Keďže každý fotón nesie rovnaké kvantum energie, intenzita svetla na danom mieste je úmerná hustote fotónov, $I_{12} \sim P_{12}$. Rovnica (40) je ale v rozpore s pozorovanou závislosťou (39) a teda fotóny nie je možné popisovať ako častice klasickej fyziky.

4 Kvantové (vlnové) vlastnosti elektrónu

4.1 Dvojštrbinový experiment s elektrónmi

V roku 1927 Davisson a Germer ostreľovali monokryštál prúdom monoenergetických elektrónov. Podľa klasických predstáv by sme očakávali, že jednotlivé elektróny budú interagovať s atómami v kryštále v závislosti od ich individuálnych relatívnych polôh. Výsledkom by mal byť viacmenej chaotický rozptyl elektrónov. Davisson s Germerom však pozorovali, že miesta dopadu rozptýlených elektrónov vytvárajú na tienidle interferenčné obrazce. Pritom interferencia je jav, ktorý je vyhradený výlučne pre vlnové procesy.

Davissonov-Germerov experiment naznačuje, že sa elektrón, podobne ako fotón, nespráva podľa zákonov klasickej fyziky. Podobne ako pri fotóne, i tu pozorujeme v jeho správaní vlnové aspekty. Preto bude zaujímavé uskutočniť aj s elektrónom experiment na dvojštrbine, pri ktorom tienidlo S s dvoma štrbinami⁵ umiestnime medzi zdroj elektrónov Z a detektorovú stenu T. Elektróny na tienidle môžeme detekovať napríklad pomocou malého GM počítacza. Počas experimentu budeme zaznamenávať polohy detekovaných elektrónov, keď jedna alebo druhá zo štrbín bude zatvorená a vyniesieme závislosť P_1 a P_2 na x . Keď obidve štrbiny otvoríme, budeme svedkami úplne rovnakého správania sa elektrónov, ako sme pozorovali pri fotónoch. Ukáže sa, že P_{12} nie je rovné $P_1 + P_2$, ale dostaneme rozloženie bodov korešpondujúce interferenčnému obrazcu (39). V analógii s interferenciou svetla by sme tento jav vedeli opísať keby sa pohyb elektrónov riadil nasledovnými dvoma princípmi

1. **Pravdepodobnosť detekcie elektrónu v danom bode tienidla je úmerná druhej mocnine absolútnej hodnoty komplexného čísla, ktoré budeme nazývať amplitúdou pravdepodobnosti.** Označme amplitúdu pravdepodobnosti, že elektrón vyžiarený zdrojom Z detekujeme v bode x tienidla T ako⁶ $\langle x|Z \rangle$. Symbol v pravej časti tejto “amplitúdovej zátvorky” označuje *meraný stav*, v ktorom sa fyzikálny systém nachádza. Symbol v ľavej časti označuje *nameraný výsledok*. Pravdepodobnosť detekcie elektrónu v bode x na tienidle T sa dá pomocou amplitúdy $\langle x|Z \rangle$ napísať ako

$$P = |\langle x|Z \rangle|^2 \quad (41)$$

2. **Nech sa elektrón môže dostať do bodu x tienidla T N nezávislými spôsobmi. Nech každému spôsobu zodpovedá amplitúda pravdepodobnosti $\langle x|Z \rangle_i$, $i = 1, \dots, N$. Potom výsledná amplitúda pre detekciu elektrónu v bode x je daná súčtom týchto amplitúd**

$$\langle x|Z \rangle = \sum_{i=1}^N \langle x|Z \rangle_i. \quad (42)$$

V našom dvojštrbinovom experimente môžeme identifikovať dva zásadné spôsoby, ako sa elektrón dostane zo zdroja Z do bodu x : cez štrbinu 1 a cez štrbinu 2. Nech tomu zodpovedajú amplitúdy $\langle x|Z \rangle_1 = a_1 \exp(i\varphi_1)$ a $\langle x|Z \rangle_2 = a_2 \exp(i\varphi_2)$. Pomocou týchto amplitúd vieme spočítať pravdepodobnosti detekcie elektrónu v bode x ak je jedna zo štrbín zatvorená ako

$$P_1 = |\langle x|Z \rangle_1|^2 = a_1^2, \quad P_2 = |\langle x|Z \rangle_2|^2 = a_2^2. \quad (43)$$

⁵Budeme predpokladať, že vzdialenosť a rozmery štrbín sú zvolené tak, aby sa mohla prejaviť vlnová stránka pohybu elektrónu.

⁶Táto symbolika môže teraz pôsobiť trochu zvláštne, ale neskôr sa ukáže ako veľmi praktická.

Ak obidve štrbiny necháme otvorené, potom nevieme povedať, ktorou z nich detekovaný elektrón prešiel a teda podľa druhého princípu je pravdepodobnosť jeho detekovania v bode x rovná

$$P_{12} = |\langle x|Z\rangle_1 + \langle x|Z\rangle_2|^2 = P_1 + P_2 + \underbrace{2\sqrt{P_1P_2}\cos(\varphi_1 - \varphi_2)}_{\text{interferenčný člen}}. \quad (44)$$

Vidíme, že aj pri distribúcii elektrónov dostávame interferenčný obrazec analogický s (39).

Ako sme diskutovali už pri fotónoch, keď elektróny chápeme ako klasické guľičky, potom je veľmi ťažké vysvetliť takéto správanie. Navyiac rovnaký interferenčný obrazec dostaneme aj vtedy, keď je zväzok elektrónov emitovaných zo zdroja Z taký riedky, že na dráhe medzi Z a T sa v každom okamihu nachádza najviac jeden elektrón. To vylučuje možnosť, že pozorované správanie elektrónov je dôsledkom ich vzájomného ovplyvňovania sa počas letu.

V snahe pochopiť zvláštne správanie sa elektrónov pokúsime sa dozvedieť viac o tom, čo sa deje s elektrónom, keď letí medzi zdrojom a tienidlom. Za týmto účelom upravíme náš dvojštrbinový experiment. Ku každej štrbine postavíme zdroj svetla a detektor fotónov. Ak bude cez niektorú štrbinu prelietať elektrón a zrazí sa s fotónom, fotón zmení smer svojho letu a dopadne do fotónového detektora pri danej štrbine. Tak sa dozvieme, cez ktorú štrbinu elektrón preletel.

Takto modifikovaný experiment spustíme najskôr len s jednou otvorenou štrbinou, napr. štrbinou 1. Budeme na ňu svietiť takým silným⁷ svetlom, aby sa žiaden prelietavajúci elektrón nevyhol zrážke s fotónom. Po mnohonásobnom opakovaní experimentu (registrácii veľkého množstva elektrónov na T) môžeme spočítať pravdepodobnosť, že elektrón preletí otvorenou štrbinou ako $P_{Z \rightarrow 1} = n_1/N_Z$, kde N_Z je počet elektrónov vyžiarených zdrojom a n_1 je počet fotónov detekovaných fotónovým detektorom pri danej štrbine. Ak by sme poznali zodpovedajúcu amplitúdu pravdepodobnosti $\langle 1|Z\rangle$, potom by sme túto pravdepodobnosť mohli vyjadriť ako

$$P_{Z \rightarrow 1} = |\langle 1|Z\rangle|^2. \quad (45)$$

Keď elektrón preletí štrbinou 1, dopadne na tienidlo T . Pravdepodobnosť, že elektrón detekovaný v štrbine nájdeme v bode x dostaneme z nášho experimentu ako $P_{1 \rightarrow x} = n/n_1$, kde n je počet elektrónov detekovaných v malom okolí bodu x . Túto pravdepodobnosť by sme mohli vyjadriť pomocou amplitúdy $\langle x|1\rangle$ ako

$$P_{1 \rightarrow x} = |\langle x|1\rangle|^2. \quad (46)$$

To, že sa elektrón zo zdroja dostane do štrbiny 1 a odtiaľ do bodu x , sú na seba nadväzujúce udalosti, kde prvá podmieňuje druhú. Výslednú pravdepodobnosť $P_1 = |\langle x|Z\rangle_1|^2$, že elektrón zo Z nájdeme v x , môžeme teda vyjadriť pomocou (45) a (46) nasledovným spôsobom

$$P_1 = P_{1 \rightarrow x}P_{Z \rightarrow 1} = \langle x|1\rangle\langle 1|Z\rangle. \quad (47)$$

Na základe tohoto pozorovania môžeme sformulovať tretie pravidlo pre amplitúdy pravdepodobnosti:

3. **Nech amplitúda pravdepodobnosti, že elektrón zo zdroja Z detekujeme v štrbine 1 je $\langle 1|Z\rangle$. Nech amplitúda pravdepodobnosti, že elektrón zo štrbiny 1 bude detekovaný v bode x tienidla T je $\langle x|1\rangle$. Potom amplitúdu pravdepodobnosti, že elektrón zo zdroja Z bude detekovaný v bode x (štrbina 2 je zatvorená), môžeme vyjadriť ako**

$$\langle x|Z\rangle_1 = \langle x|1\rangle\langle 1|Z\rangle. \quad (48)$$

⁷Ako sme už diskutovali, intenzita svetla podľa fotónovej hypotézy súvisí s veľkosťou toku fotónov.

Analogicky, ak je zatvorená štrbina 1 a otvorená štrbina 2, potom

$$\langle x|Z \rangle_2 = \langle x|2 \rangle \langle 2|Z \rangle. \quad (49)$$

Pozrime sa teraz na situáciu, keď sú otvorené obidve štrbiny a fotónmi detekujeme každý prechod elektrónu štrbinou. Zo zdroja budeme opäť vystreľovať po jednom elektróne a do našich záznamov o mieste detekcie na tienidle T pridáme aj číslo štrbiny, cez ktorú príslušný elektrón preletel. Očakávame, že tento pokus by mohol vnieť viac svetla do pochopenia zvláštneho správania elektrónov! Avšak vyhodnotenie výsledkov tohoto merania nás značne sklame: interferenčný obrazec zmizol a výsledná distribúcia elektrónov na tienidle zodpovedá súčtu distribúcií z každej štrbiny

$$P_{12} = P_1 + P_2. \quad (50)$$

Teraz síce vieme o každom elektróne povedať, ktorou štrbinou preletel, ale stratili sme samotný jav, ktorý nám mala táto dodatočná informácia pomôcť pochopiť. Avšak po krátkom zamyslení prideme na to, že výsledok (50) je len priamym dôsledkom elementárnej logiky. Ak o každom elektróne vieme povedať, ktorou štrbinou preletel, potom $P_{12} = (n_1 + n_2)/N_Z$ musí byť súčtom $P_1 = n_1/N_Z$ a $P_2 = n_2/N_Z$.

Dokážeme pochopiť, prečo sa pozorovaním prechodu elektrónov cez štrbiny stratil interferenčný obrazec? Asi nás rýchlo napadne, že elektrón pri zrážke s fotónom tiež zmení smer svojho letu a preto sa zmení aj miesto jeho dopadu⁸. Hľadáme teda spôsob ako minimalizovať toto narušenie dráhy elektrónu. Môžeme svietiť slabším svetlom. To ale znamená menej fotónov. Nastane situácia, že nie každý elektrón prelietavajúci cez štrbinu sa zrazí s fotónom. Na tienidle budeme mať bodky po elektrónoch, ktoré preleteli štrbinou 1, po elektrónoch, ktoré preleteli štrbinou 2 a tiež po takých, o ktorých nevieme povedať, ktorou štrbinou leteli. Zistíme, že elektróny, ktoré sa zrazili s fotónom, stále vytvárajú obrazec $P_1 + P_2$, zatiaľčo elektróny bez zrážky s fotónom vytvárajú interferenčný obrazec. To by bolo pochopiteľné: fotónov je síce menej, ale ich energia neklesla znížením intenzity svetla. Ak sa teda fotón zrazí s elektrónom, ušetrí mu stále rovnako silný “kopanec” a rovnako naruší pôvodný obrazec na tienidle.

Silu “kopanca” od fotónu môžeme znížiť tak, že zväčšíme vlnovú dĺžku použitého svetla. Čím väčšia vlnová dĺžka, tým slabší “kopanec”, tým menej by mal byť narušený pozorovaný interferenčný obrazec na tienidle. Je toto cesta ako sa dozvedieť viac o “interferenčnom” správaní elektrónu? Nuž, musíme čitateľa sklamať. I v tomto prípade narazíme na problém. So zväčšovaním vlnovej dĺžky síce zmeňujeme veľkosť odovzdanej hybnosti, ale tiež znižujeme aj rozlišovaciu schopnosť svetla. O detekovaných fotónoch, ktorých vlnová dĺžka sa priblíži svojou hodnotou vzdialenosti medzi oboma štrbinami, nebudeme vedieť povedať, od ktorej štrbiny prišli a teda stratíme informáciu o tom, ktorou štrbinou dotýčný elektrón naozaj preletel.

Vyzerá to tak, akoby sa v tomto prípade proti nám príroda spikla. A naozaj je to tak, avšak nie len v tomto prípade. Ukazuje sa, že v prírode existuje principiálne obmedzenie na našu schopnosť súčasne merať s ľubovoľnou presnosťou hodnoty niektorých veličín. A tiež, že meranie zásadne ovplyvňuje meraný systém. Tieto obmedzenia sú veľmi malé a preto ich nepozorujeme v každodennom živote a neobjavujú sa ani v zákonoch klasickej fyziky. Keď však začneme študovať svet na atómových rozmeroch, musíme ho zobrať na vedomie. Tieto obmedzenia sa podľa nášho súčasného chápania nedajú obísť⁹, čo bolo potvrdené aj vo všetkých doterajších experimentoch.

⁸To je samozrejme klasická úvaha, ale nie je neprírodné očakávať, že interakcia elektrónov s fotónmi bude mať vplyv aj na amplitúdu pravdepodobnosti.

⁹Mohlo by sa zdať, že to nie je nič nové, že aj v klasickej fyzike malo každé meranie nejaký vplyv na meraný

Ukazuje sa teda, že získanie informácie o tom, ktorou štrbinou elektrón preletel, zásadne zmenilo výsledok dvojštrbinového experimentu. Na základe tejto skúsenosti je preto vhodné doplniť **2. pravidlo** o amplitúdach pravdepodobnosti: **Amplitúdy sa budú sčítovať len vtedy, ak na základe nášho merania nebudeme vedieť rozlíšiť, ktorou štrbinou elektrón preletel.** V takom prípade je výsledná amplitúda pravdepodobnosti detekcie elektrónu na T v bode x rovná

$$\langle x|Z \rangle = \langle x|Z \rangle_1 + \langle x|Z \rangle_2 = \langle x|1 \rangle \langle 1|Z \rangle + \langle x|2 \rangle \langle 2|Z \rangle = \sum_{i=1,2} \langle x|i \rangle \langle i|Z \rangle. \quad (51)$$

Tento výsledok sa dá zovšeobecniť na prípad, keď medzi zdroj Z a tienidlo T vložíme viacero dosiek s rôznymi počtami štrbín. Pridajme napríklad k pôvodnej doske s dvoma štrbinami 1 a 2 ešte jednu dosku s troma štrbinami A, B, C. Potom amplitúdu pravdepodobnosti, že elektrón nájdeme v bode x môžeme poskladať z nasledovných častí

$$\langle x|Z \rangle = \sum_{j=A,B,C} \sum_{i=1,2} \langle x|j \rangle \langle j|i \rangle \langle i|Z \rangle. \quad (52)$$

Takto by sme mohli pokračovať, pričom vloženie každej ďalšej dosky by bolo reprezentované vloženíím člena typu $\sum_k |k \rangle \langle k|$, kde sčítovanie prebieha cez všetky štrbiny v danej doske.

Nesmieme stratit' zo zreteľa, že všetky uvedené vzt'ahy vyjadrujú len pravidlá skladania amplitúd pravdepodobnosti, ale nehovoria nič o tom, ako tieto amplitúdy vypočítat'. Tieto formálne vzt'ahy nás však môžu navigovať k nájdeniu správneho matematického jazyka, ktorý by mohol umožniť sformulovanie teórie mikrosveta.

Predpokladáme, a ďalšie experimenty to potvrdzujú, že naše tri pravidlá o amplitúdach pravdepodobnosti sa neobmedzujú len na správanie sa elektrónov a fotónov v dvojštrbinovom experimente. Pokúsime sa teda našu skúsenosť z tohoto experimentu zovšeobecniť a preformulovať tieto tri pravidlá v obcejšej podobe:

1. **Nech je fyzikálny systém v stave S. Pravdepodobnosť namerania výsledku V v tomto fyzikálnom systéme je rovná $|\langle V|S \rangle|^2$, kde $\langle V|S \rangle$ je komplexné číslo nazývané amplitúda pravdepodobnosti.**
2. **Ak časový vývoj systému z daných počiatkových podmienok Z formálne rozčleníme na m nezávislých paralelných spôsobov, pre ktoré amplitúdy pravdepodobnosti namerania výsledku V sú $\langle V|Z \rangle_i$, $i = 1, \dots, m$, potom celková amplitúda pravdepodobnosti namerania výsledku V je**

$$\langle V|Z \rangle = \sum_{i=1}^m \langle V|Z \rangle_i.$$

Ak do experimentu zahrnieme merania, ktoré nám umožnia rozlíšiť, ktorým z týchto spôsobov sa systém z počiatkových podmienok Z naozaj vyvíjal (a ponecháme všetky možnosti otvorené), potom pravdepodobnosť namerania výsledku V je

$$P(V|Z) = \sum_{i=1}^m |\langle V|Z \rangle_i|^2.$$

fyzikálny systém. Zásadný rozdiel ale spočíva v tom, že podľa klasickej fyziky sme verili, že nám nič nebráni tento vplyv ľubovoľne minimalizovať. QM však tvrdí, že v prírode existujú objektívne hranice zväčšovania presnosti a že meranie vo všeobecnosti zásadne mení meraný systém.

3. Nazvime “udalosťou” nameranie výsledku V na systéme, ktorého stav sa vyvíjal z počiatočných podmienok Z . Ak nejakú udalosť rozčleníme na postupnosť na seba nadväzujúcich podudalostí, potom výsledná amplitúda tejto udalosti sa dá napísať ako súčin amplitúd jednotlivých podudalostí

$$\langle V|Z\rangle = \langle V|A_m\rangle\langle A_m|A_{m-1}\rangle \dots \langle A_3|A_2\rangle\langle A_2|A_1\rangle\langle A_1|Z\rangle,$$

kde A_1, A_2, \dots, A_m zohrávajú striedavo úlohu meraných výsledkov aj počiatočných podmienok pre jednotlivé podudalosti.

4.2 Vlnová dĺžka elektrónu

V roku 1924 francúzsky fyzik Louis de Broglie vyslovil hypotézu, podľa ktorej je každému voľnému elektrónu s hybnosťou \vec{p} priradená rovinná vlna $\exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)]$. Vzhľadom na opísané podobnosti v správaní sa fotónov a elektrónov nás neprekvapí, že de Broglie zvolil

$$\vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p}, \quad \omega = \frac{1}{\hbar}E. \quad (53)$$

Vlnová dĺžka elektrónu s hybnosťou \vec{p} teda je

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}. \quad (54)$$

Tu je dobré si uvedomiť, že z de Broglieho hypotézy nie je vôbec jasné, čo si pod de Broglieho vlnou predstaviť. Aká je jej fyzikálna podstata. Len predpokladáme, že táto vlna akýmsi spôsobom riadi pohyb elektrónu.

Prirodzene vzniká otázka, čo dosadiť za E v (53). Je to celková relativistická energia elektrónu $E = mc^2$ (a \vec{p} relativistická hybnosť)? Alebo sa táto de Broglieho hypotéza vzťahuje len na klasické ($v \ll c$) elektróny, takže E je povedzme kinetická energia $E = p^2/2m$? Je fakt, že všetky naše pozorovania, ktoré viedli k hypotéze (53), sa týkali nerelativistických elektrónov. V atóme vodíka, pri Davisson-Germerovom experimente, pri interferencii na dvojštrbine, tam všade mali elektróny rýchlosti omnoho menšie ako rýchlosť svetla. Na základe týchto pokusov nevieme nič o tom, ako by sa správali relativistické elektróny a teda nemáme ani priamu podporu pre de Broglieho hypotézu. Na strane druhej však (53) je súčasťou hypotézy o symetrii medzi elektrónmi a fotónmi. Hypotézy, ktorá navrhuje, že fotóny aj elektróny majú spoločnú podstatu a podliehajú rovnakému opisu. Lenže fotóny sú čisto relativistické častice a teda E v ich opise musí byť relativistická. V záujme uvedenej analógie je preto prirodzené predpokladať, že aj v prípade elektrónov rovnice (53) sú relativistické.

Napriek tomu sa v QM budeme zaoberať len časticami pri nerelativistických rýchlostiach (energiách) a samotná QM, ktorú tu sformulujeme, bude nerelativistickou teóriou. To znamená, že oblasť jej platnosti bude ohraničená len na rýchlosti malé v porovnaní s rýchlosťami svetla. Je preto užitočné pozrieť sa na to, aká je súvislosť parametrov \vec{k} a ω de Broglieho vlny s veličinami, ktoré charakterizujú pohyb elektrónu v nerelativistickom režime. Pre hybnosť v limite $v \ll c$ platí

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \xrightarrow{v \ll c} mv, \quad (55)$$

takže správnu vlnovú dĺžku elektrónu pri malých rýchlostiach dostaneme, keď v (53) dosadíme aj nerelativistickú hybnosť. Trochu zložitejšia je situácia s energiou. Tam pre voľný elektrón platí

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} = mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} \xrightarrow{v \ll c} mc^2 + \frac{p^2}{2m} = mc^2 + E_{kin}, \quad (56)$$

kde E_{kin} je klasická kinetická energia elektrónu. To znamená, že frekvencia elektrónu je

$$\omega = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{p^2}{2m\hbar}. \quad (57)$$

Očividne teda ani pri malých rýchlostiach nemôžeme pri výpočte frekvencie de Broglieho vlny ignorovať relativistický príspevok mc^2/\hbar , ktorý je oveľa väčší ako druhý člen v (57). Ako však neskôr uvidíme, prítomnosť prvého člena v (57) nemá vplyv na fyzikálne merateľné výsledky v QM.

Aby sme získali predstavu o konkrétnych číslach, skúsme spočítať vlnovú dĺžku elektrónov v televíznej obrazovke. Tieto elektróny sú urýchľované typickým napätím okolo 10 kV. Pri tom jeden elektrón nadobudne kinetickú energiu $E_{kin} = 10 \text{ keV}$, čo je $1,6 \times 10^{-15} \text{ J}$. Keďže ide o nerelativistickú energiu, hybnosť elektrónu je

$$p = \sqrt{2m_e E_{kin}} = \sqrt{2 \times 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 1,6 \times 10^{-15} \text{ J}} \approx 5,4 \times 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}. \quad (58)$$

Tomu zodpovedá vlnová dĺžka

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{ J s}}{5,4 \times 10^{-23} \text{ kg m s}^{-1}} \approx 1,2 \times 10^{-11} \text{ m} = 1,2 \times 10^{-2} \text{ nm}. \quad (59)$$

Vidíme, že vlnová dĺžka elektrónov v TV obrazovke je omnoho menšia ako vlnová dĺžka viditeľného svetla. Očakávame, že vlnové vlastnosti elektrónov sa prejavujú pri interakcii so štruktúrami, ktorých rozmer bude porovnateľný s vlnovou dĺžkou uvažovaných elektrónov. Keďže sa v televíznej obrazovke takéto malé štruktúry nenachádzajú, neprejavujú sa ani vlnové vlastnosti elektrónov. Iná však bola situácia pri rozptyle elektrónov na monokryštale, kde typické rozmery atómov, ako aj ich vzdialenosti, sú rádovo 10^{-10} m .

Ak je de Broglieho hypotéza krok správnym smerom k opisu tohoto sveta, potom by mala platiť nielen pre elektróny, ale pre akékoľvek objekty nezávisle na ich hmotnostiach a rozmeroch. Takže v princípe by sa vlnové vlastnosti mali prejavovať aj keby sme strieľali na dvojstrbinu napríklad brokami. Ako je teda možné, že v tomto prípade nevidíme interferenčný obrazec? Nuž ak urobíme zodpovedajúce výpočty pre broky, zistíme, že vzhľadom na extrémne malú vlnovú dĺžku “brokových vln” sa maximá a minimá interferenčného obrazca striedajú na veľmi malých vzdialenostiach. Oveľa menších ako je naša schopnosť rozlíšiť polohu broku. Takže rozloženie hustoty brokov na tienidle, ktoré by sme namerali, kopíruje len “obálku” jednotlivých maxim interferenčného obrazca.

Rozmerové škály objektov a javov, s ktorými máme osobnú skúsenosť prostredníctvom našich zmyslov a ktoré viac-menej zamestnávali fyzikov do konca 19. storočia, boli oveľa väčšie ako de Broglieho vlnové dĺžky. Podčiarknime, že faktorom, ktorý rozhoduje o veľkosti týchto vlnových dĺžok, je hodnota Planckovej konštanty. Jej malosť odsúva pozorovateľné kvantové efekty do oblasti mikrosvetla.

4.3 Bohrova interpretácia de Broglieho vlny

De Broglieho vlny sú súčasťou snáh o vysvetlenie podivného “vlnového” správania sa elektrónov, ktoré sme rozoberali v dvojstrbinovom experimente. Videli sme, že podobné správanie vykazujú aj fotóny a ako sa ukazuje, ide o univerzálnu vlastnosť všetkých hmotných objektov. Hypotéza Louis de Broglieho nám síce umožnila robiť kvantitatívne odhady vlnovo-časticových efektov,

ale nevysvetľuje pôvod ani podstatu de Broglieho vlny. Nepodáva ani systematický výklad jej vlastností: nevieme, ako sa bude táto vlna správať, keď na elektrón bude pôsobiť nejaká sila.

Schrödinger vyslovil hypotézu, že de Broglieho vlna predstavuje rozloženie hmotnosti častice v priestore. Že totiž elektrón nie je malá tuhá guľička, ale “hmotná vlna”. Slabinou tejto predstavy je, že každý priestorovo lokalizovaný vlnový rozruch sa v neohraničenom priestore a ponechaný sám na seba s časom rozplýva do šírky. Takže to, čo by spočiatku vyzeralo ako hmotný bod, by postupom času mohlo narásť do ľubovoľných rozmerov, či dokonca stratit’ svoju priestorovú integritu vytvorením viacerých oddelených lokálnych maxím.

Fungujúce vysvetlenie podstaty de Broglieho vlny, ktoré je akceptované podnes, sformuloval dánsky fyzik Niels Bohr. Podľa Bohra, **na úplné zadanie stavu elektrónu potrebujeme poznať amplitúdu pravdepodobnosti lokalizácie elektrónu pre každý bod priestoru.** To znamená, že potrebujeme poznať akúsi komplexnú funkciu polohy $\psi(\vec{r})$. V našej špeciálnej symbolike by sme mohli túto amplitúdu označiť ako $\langle \vec{r} | \psi \rangle$. Je to amplitúda pravdepodobnosti, že elektrón, ktorý sa nachádza v stave označenom písmenom ψ , bude nájdený na mieste \vec{r} . Jedna technická poznámka: vzhľadom na spojitý charakter množiny možných polôh lokalizácie elektrónu v priestore je $|\psi(\vec{r})|^2$ hustotou pravdepodobnosti. Pravdepodobnosť lokalizácie elektrónu v nejakom konečnom priestorovom objeme by sme dostali integrovaním tohoto výrazu cez uvedený objem. Pre infinitezimálny objem $d^3\vec{r} = dx dy dz$ je daná výrazom

$$dP = |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}. \quad (60)$$

Funkcia $\psi(\vec{r})$ sa zvykne nazývať *vlnovou funkciou*.

Pre elektrón v ľubovoľnom stave musí platiť, že ak ho budeme hľadať v každom bode priestoru, potom ho určite nájdeme. Matematicky túto podmienku vyjadruje tzv. *normalizačná podmienka*, ktorú musí vlnová funkcia spĺňať

$$\int |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1, \quad (61)$$

kde integrujeme cez celý trojrozmerný priestor. Táto podmienka znamená, že pravdepodobnosť nájdenia daného elektrónu niekde vo vesmíre je rovná jednej.

Podľa Bohra vlnová funkcia nesie najúplnejšiu možnú informáciu o stave elektrónu. Nemôžeme o stave elektrónu vedieť viac, než čo nám o ňom hovorí vlnová funkcia. Vo všeobecnosti je teda principiálne vylúčené, aby sme vedeli povedať, kde elektrón nájdeme. Pre dané miesto (oblasť) dokážeme predpovedať iba pravdepodobnosť, s ktorou tam elektrón bude lokalizovaný.

Nemusíme azda diskutovať o tom, že stav elektrónu sa môže s časom meniť (ak by to tak nebolo, nemali by sme sa vo fyzike prakticky čím zaoberať). To ale znamená, že sa s časom môže meniť vlnová funkcia, ktorá tento stav opisuje. Zo skúsenosti vieme, že časový vývoj fyzikálnych systémov závisí od vonkajších podmienok (napr. pôsobiacich síl), v ktorých sa systém nachádza. Principiálnou otázkou každej fyzikálnej teórie je nájdenie pohybovej rovnice, ktorej riešením je časový vývoj fyzikálnych systémov opísaných touto teóriou. V klasickej mechanike je časový vývoj polohy a rýchlosti hmotného bodu riešením Newtonovej pohybovej rovnice $d^2\vec{r}/dt^2 = \vec{F}/m$. V QM potrebujeme nájsť pohybovú rovnicu, ktorej riešením by bol časový vývoj vlnovej funkcie. de Broglieho rovinná vlna popisujúca pohyb voľného elektrónu s danou hybnosťou v sebe obsahuje aj informáciu o jej časovom vývoji. Ak by ale na takýto elektrón, ktorý by bol v nejakom okamihu popísaný vlnovou funkciou $\exp(i\vec{k}\vec{r})$, začali pôsobiť nejaké sily, potom sa dá očakávať, že by sa zmenil práve časový vývoj tohoto stavu. Akým spôsobom, to budeme vedieť, keď budeme poznať pohybovú rovnicu.

Keďže vlnová funkcia je amplitúdou pravdepodobnosti, mali by pre ňu platiť naše tri pravidlá, ktoré sme sformulovali pri dvojštrbinovom experimente. Nech je stav elektrónu prechádzajúceho cez štrbinu 1 opísaný vlnovou funkciou ψ_1 a stav elektrónu prechádzajúceho cez štrbinu 2 opísaný vlnovou funkciou ψ_2 . Ak nevieme v našom experimente rozlíšiť, ktorou štrbinou elektrón naozaj prešiel, potom je pravdepodobnosť jeho nájdenia v bode \vec{r} daná vlnovou funkciou

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{N}[\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})], \quad (62)$$

kde N je tzv. *normalizačná konštanta*, ktorú určíme z normalizačnej podmienky pre $\psi(\vec{r})$. Vzťah (62) by mal byť splnený v každom časovom okamihu. Ak sú teda $\psi_1(\vec{r}, t)$ a $\psi_2(\vec{r}, t)$ časové vývoje stavov elektrónu prechádzajúceho štrbinami 1 alebo 2, potom musí byť možným časovým vývojom aj ich súčet alebo obecnjšie lineárna kombinácia. Hovoríme, že vlnové funkcie spĺňajú *princíp lineárnej superpozície*. Takúto vlastnosť majú riešenia lineárnej diferenciálnej rovnice: ak je riešením ψ_1 aj ψ_2 , potom je riešením aj ich lineárna kombinácia. Tak dostávame dôležité obmedzenie na vlastnosti hľadanej pohybovej rovnice.

Na základe týchto skutočností je zrejmé, že vlnové funkcie sa skutočne správajú ako vlny: šíria sa priestorom a lineárne sa skladajú. Z pohľadu Bohrovej interpretácie však nejde o šírenie rozruchovej materiálnej povahy, ale o **matematické objekty charakterizujúce stav elektrónu**.

Čo sa však stane, ak elektrón, ktorý sa nachádzal v stave $\psi(\vec{r})$ nájdeme pomocou detektora elektrónov na nejakom konkrétnom mieste \vec{r}_0 ? Detektor mohol lokalizovať elektrón vtedy, ak ψ mala v \vec{r}_0 nenulovú hodnotu. Ak teda existovala nenulová, nie nevyhnutne 100%-ná, pravdepodobnosť jeho výskytu v \vec{r}_0 . Avšak v okamihu, keď detektor “cvakol”, vieme naisto, že elektrón sa nachádza práve tam. To ale znamená, že sa od toho okamihu musí nachádzať v úplne inom stave popísanom úplne inou vlnovou funkciou. Funkciou, ktorá je nenulová len vo vnútri objemu detektora. Táto úvaha ilustruje ďalšie pravidlo Bohrovej interpretácie QM: **Meraním konkrétnej fyzikálnej veličiny sa skokom zmení stav fyzikálneho systému tak, že v novom stave bude meraná fyzikálna veličina nadobúdať nameranú hodnotu so 100%-nou istotou**.

Spočiatku fyzici akceptovali Bohrovu predstavu len veľmi ťažko. Newtonovská mechanika dávala jednoznačnú predpoveď polohy a rýchlosti telesa pri známych počiatkových podmienkach¹⁰ a pôsobiacich silách. V klasickej fyzike vystupovala náhoda len ako dôsledok nedostatku informácií. Bohrova interpretácia však zavádza do opisu prírody náhodu ako fundamentálny, neodstrániteľný efekt.

4.4 Vlastnosti vlnového balíka

Podľa Bohrovej interpretácie je de Broglieho rovinná vlna

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp(i\vec{k}\vec{r} - i\omega t), \quad (63)$$

príkladom vlnovej funkcie pre voľný elektrón v stave, v ktorom má hybnosť $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Pretože $|\exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)]| = 1$, je pravdepodobnosť nájdenia takéhoto elektrónu v každom bode priestoru a v každom časovom okamihu rovnaká¹¹. Toto konštatovanie je nečakané a zarážajúce, ale tým sa ešte prekvapenia nekončia. Podľa klasickej fyziky má elektrón v každej mysliteľnej situácii,

¹⁰V klasickej mechanike je stav hmotného bodu úplne zadaný, ak je daná jeho poloha \vec{r} a rýchlosť \vec{v} . Ak poznáme stav hmotného bodu v nejakom okamihu a ak poznáme sily naň pôsobiace, potom vieme jednoznačne predpovedať jeho stav v ľubovoľnom inom čase.

¹¹Pozorný čitateľ si isto všimol, že funkcia (63) nedokáže splniť normalizačnú podmienku (61). Takýto integrál cez celý trojrozmerný Euklidov priestor je divergentný pre ľubovoľné nenulové A . Našťastie však ide len o technickú

v každom svojom stave, v ktorom sa môže nachádzať, nejakú jednu konkrétnu hybnosť. Podľa našich nových predstáv je každému stavu elektrónu s hybnosťou $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ priradená rovinná vlna $\exp(i\vec{k}\vec{r})$. Tým však nie sú vyčerpané všetky možné stavy elektrónu! Ved', ako sme diskutovali aj v predošlej časti, sú veľmi bežné a prirodzené situácie, keď je elektrón lokalizovaný v nejakej konečnej oblasti. Tento stav však nie je opísateľný rovinnou vlnou $\exp(i\vec{k}\vec{r})$. Akú má však elektrón hybnosť v týchto "zostávajúcích" stavoch? Ved' všetky mysliteľné hodnoty hybnosti už boli obsadené rovinnými vlnami!

Pozrime sa teda na vlnovú funkciu zodpovedajúcu "lokalizovanému" elektrónu. T.j. na takú, kde dominantná časť príspevku $|\psi|^2$ do integrálu (61) pochádza z nejakej konečnej oblasti priestoru. Takejto vlnovej funkcii sa zvykne hovoriť *vlnový balík*. Ak elektrón "žije" v nekonečne veľkom trojrozmernom priestore, potom túto vlnovú funkciu môžeme napísať ako Fourierov integrál cez celý trojrozmerný priestor vektorov \vec{k}

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int a(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3\vec{k}. \quad (64)$$

Všimnime si, že faktor $\exp(i\vec{k}\vec{r})$ zodpovedá rovinnnej vlne v čase $t = 0$. Potom tento integrál je vlastne lineárnou kombináciou rovinných vln v čase $t = 0$, pričom $a(\vec{k})$ je váhový koeficient určujúci príspevok tej-ktorej rovinnnej vlny. Z teórie Fourierovho integrálu vyplýva, že funkciu $a(\vec{k})$ môžeme vyjadriť ako inverzný Fourierov integrál k (64)

$$a(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3\vec{r}, \quad (65)$$

kde integrujeme cez celý trojrozmerný priestor.

Keďže rovinná vlna reprezentuje stav elektrónu s hybnosťou $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, funkcia $\psi(\vec{r})$ je superpozíciou stavov s rôznymi hybnosťami. V našej špeciálnej symbolike pre amplitúdy pravdepodobnosti môžeme rovinnú vlnu v čase nula označiť ako $\langle \vec{r} | \psi_k(t = 0) \rangle$. Potom vzťah (64) môžeme prepísať nasledovne

$$\langle \vec{r} | \psi(t = 0) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int a(\vec{k}) \langle \vec{r} | \psi_k(t = 0) \rangle d^3\vec{k}. \quad (66)$$

Tým sme samozrejme nedostali nič nové, len sme opticky zvýraznili, že vzťah (64) predstavuje spomínanú superpozíciu amplitúd. Z pohľadu druhého pravidla pre amplitúdy pravdepodobnosti sa tento zápis dá interpretovať nasledovne: Pri lokalizácii elektrónu v bode \vec{r} nemeráme jeho hybnosť. Keďže nemáme informáciu o hybnosti, musíme sčítať príspevky od všetkých amplitúd s konkrétnou hybnosťou dávajúcich možnosť nájsť elektrón v bode \vec{r} . Relatívne príspevky týchto amplitúd môžu byť rôzne veľké v závislosti od hodnoty váhovej funkcie $a(\vec{k})$.

Pokiaľ je váhová funkcia $a(\vec{k})$ nenulová aspoň pre dve rôzne hodnoty \vec{k} , je prirodzené špekulovať, že hybnosť elektrónu v tomto stave je "rozmazaná" v podobnom zmysle ako poloha. To znamená, že v takomto stave by sme mohli v opakovaných experimentoch namerať rôzne hodnoty hybnosti.

komplikáciu, kvoli ktorej nie je potrebné opustiť základnú Bohrovu koncepciu. Ako je táto technická komplikácia ošetrená matematicky, ukážeme neskôr. Nateraz len poznamenáme, že rovinné vlny (63) sú len asymptotickým opisom reality. Reprezentujú stav, ktorý sa vo vesmíre nikdy nerealizuje. Vesmír nie je nekonečný v priestore a čase a každý elektrón niekedy niekde vznikol. Jeho súčasný stav sa môže rovinnnej vlne veľmi blížiti, rovinnou vlnou v skutočnosti nie je. Rovinné vlny však majú správne matematické vlastnosti pre také rozšírenie priestoru možných stavov elektrónu, ktoré nenaruší základnú koncepciu kvantovej mechaniky, ale vnesie do tejto teórie idealizáciu, ktorá zjednoduší úvahy a výpočty. Pre rovinnú vlnu je integrál z $|\psi|^2$ cez konečný objem konečný a v súlade s Bohrovou interpretáciou zostáva mierou pravdepodobnosti nájdenia elektrónu v danom objeme.

V individuálnom meraní dostaneme niektorú z hodnôt, pre ktorú je koeficient $a(\vec{k})$ nenulový a to s pravdepodobnosťou, ktorá závisí na hodnote $a(\vec{k})$. Rozpíšme normalizačnú podmienku (61) s použitím rozkladu do rovinných vln (64). Dostaneme¹²

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} |a(\vec{k})|^2 d^3\vec{k}. \quad (67)$$

Posledný výraz v tejto rovnici je prirodzené interpretovať ako celkovú pravdepodobnosť, že elektrón nameriame nejakú ľubovoľnú hybnosť $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Z toho vyplýva, že distribučná funkcia pre pravdepodobnosť namerania k je daná funkciou $|a(\vec{k})|^2$.

Uvažujme napríklad elektrón v jednom rozmere, ktorého stav je popísaný Gaussovou funkciou

$$\psi(x) = N \exp\left(-\frac{x^2}{2L^2}\right). \quad (68)$$

Parameter L reguluje šírku Gaussovej funkcie. Faktor N je normalizačná konštanta, ktorú dostaneme z podmienky

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad N^2 = \frac{1}{L\sqrt{\pi}}. \quad (69)$$

Vlnové funkcie (68) pre tri rôzne hodnoty parametra L sú na obrázku 2. Rozklad funkcie $\psi(x)$

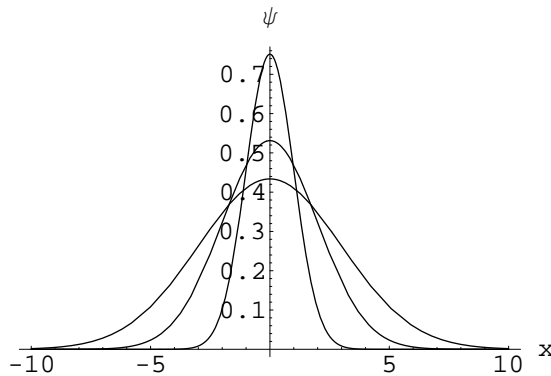


Figure 2: Vlnové funkcie (68) pre tri rôzne hodnoty parametra L , ktorý reguluje šírku píku. Hodnota $L = 1$ zodpovedá najužšiemu, $L = 2$ strednému a $L = 3$ najširšiemu píku.

cez rovinné vlny je

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk. \quad (70)$$

Potom pre váhovú funkciu $a(k)$ dotaneme

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx = \frac{\sqrt{L}}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{k^2 L^2}{2}\right) \quad (71)$$

Tri prípady funkcie $a(k)$ zodpovedajúce práve vlnovým funkciám na obrázku 2 sú zobrazené na obrázku 3. Vidíme, že čím presnejšie vymedzíme polohu elektrónu, tým rozmazanejšia je jeho

¹²Pri odvádzaní vzťahu (67) musíme využiť matematické vzťahy pre Fourierov integrál a Diracovu delta funkciu, ktoré čitateľ môže nájsť v Dodatkoch 9.1 a 9.2.

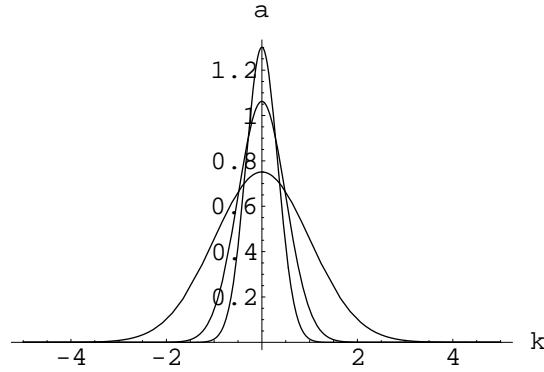


Figure 3: Váhové funkcie $a(k)$ zodpovedajúce trom vlnovým funkciám z obrázku 2. Najužší pík zodpovedá $L = 3$, stredný $L = 2$ a najširší $L = 1$, opačne ako pri vlnovej funkcii (68).

hybnosť a naopak. Hodnoty k sú symetricky “rozmazané” okolo $k_0 = 0$. V tomto zmysle by sa dalo povedať, že vlnová funkcia (68) opisuje stav elektrónu v jeho pokojovej sústave.

Predstavme si, že budeme celú situáciu sledovať zo vzťahovej sústavy, ktorá sa voči “pokojovej” pohybuje rýchlosťou $-V$ a to v okamihu, keď sa počiatky a súradnicové osi oboch sústav prekrývajú. Ak v “pokojovej” sústave nameriame hybnosť elektrónu p , v “pohybujúcej sa” to bude $p' = p + m_e V$. V pôvodnej distribúcii sa každý vlnový vektor k pretransformuje na $k' = k + K$, kde $K \equiv m_e V / \hbar$. Rozdelenie $a'(k)$ vlnových vektorov v “pohybujúcej sa” sústave dostaneme, keď si uvedomíme, že hodnota, ktorú funkcia a' priradí vlnovému vektoru k' je rovnaká, ako hodnota, ktorú funkcia a priradí vlnovému vektoru k , čiže $a'(k') = a(k)$. Odtiaľ

$$a'(k') = a(k' - K) = \frac{\sqrt{L}}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}(k' - K)^2 L^2\right]. \quad (72)$$

Vidíme, že $a'(k)$ už na rozdiel od $a(k)$ nie je symetrická vzhľadom na nulu, ale okolo K . Po dosadení $a'(k)$ do (70) dostaneme vlnovú funkciu nášho elektrónu z pohľadu pohybujúcej sa sústavy

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a'(k) e^{ikx} dk = \psi(x) e^{iKx}. \quad (73)$$

Všimnime si, že prechodom do pohybujúcej sa vzťahovej sústavy sa nič nezmenilo na distribúcii pravdepodobnosti výskytu elektrónu, pretože

$$|\psi'(x)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (74)$$

Vlnová funkcia $\psi(\vec{r})$ opisuje stav elektrónu v nejakom časovom momente. Ako sa však bude vlnová funkcia vyvíjať v čase? Už sme sa zmieňovali, že časový vývoj vlnovej funkcie musí spĺňať lineárnu diferenciálnu rovnicu a že v tom prípade platí, že ak nájdeme nejaké riešenia tejto rovnice, potom riešením bude aj ich ľubovoľná lineárna kombinácia. Ak uveríme de Broglieovi, tak nateraz poznáme časový vývoj stavu voľného elektrónu s definovanou hybnosťou: je daný rovinnou vlnou (63). To ale znamená, že vieme predpovedať časový vývoj hocijakej vlnovej funkcie (64), pokiaľ táto opisuje stav voľného elektrónu. Dostaneme

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) d^3\vec{k}, \quad (75)$$

kde

$$\psi_k(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(\vec{k})t)} \quad (76)$$

je vlnová funkcia voľného elektrónu s hybnosťou $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Závislosť $\omega(\vec{k})$ má pre voľný nerelativistický elektrón tvar

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\vec{p}^2}{2m\hbar} = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar}{2m} \vec{k}^2. \quad (77)$$

Otestujme si to na našom jednorozmernom prípade gaussovského rozdelenia (68), keď $a(k)$ je daná vzťahom (71). Ak táto vlnová funkcia opisuje voľný elektrón, potom pre jej časový vývoj dostaneme¹³

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{imc^2t/\hbar} \frac{1}{\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{L}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} e^{-(L^2 + i\frac{\hbar}{m}t)k^2/2} dk \\ &= e^{imc^2t/\hbar} \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{L + i\Lambda}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{L^2 + \Lambda^2}\right) \exp\left(\frac{i\Lambda}{2L} \frac{x^2}{L^2 + \Lambda^2}\right), \quad \Lambda \equiv \frac{\hbar t}{mL}. \end{aligned} \quad (78)$$

Tomu zodpovedá hustota pravdepodobnosti

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{L^2 + \Lambda^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{L^2 + \Lambda^2}\right). \quad (79)$$

Všimnime si, že relativistický príspevok mc^2/\hbar k frekvencii de Broglieho vlny nemá žaden vplyv na pravdepodobnosť výskytu elektrónu, nakoľko $|\exp(imc^2t/\hbar)| = 1$. Toto je ilustrácia komentára k rovnici (57). Časový vývoj $|\psi(x, t)|^2$ je zobrazený na obrázku 4. Vidíme, že pravdepodobnosť

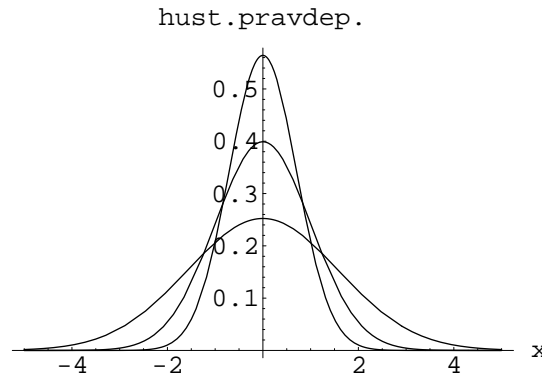


Figure 4: Časový vývoj $|\psi(x, t)|^2$ pre voľný elektrón podľa vzťahu (79). Najužší pík zodpovedá počiatočnému stavu v čase $t = 0$, širší pík času $t = 1$ a najširší času $t = 2$. Ostatné parametre v $\psi(x, t)$ boli zvolené nasledovne: $L = 1$ a $\hbar/m = 1$.

výskytu lokalizovaného voľného elektrónu sa s časom rozmazáva do celého priestoru. Na druhej strane rozmazanie hybnosti s časom klesá.

¹³Použitie približného vzťahu (77) v integráli (78) nie je korektné, nakoľko integrujeme podľa k od $-\infty$ do $+\infty$ a to zahŕňa aj relativistické hodnoty hybnosti. Avšak súčasťou integrandu je funkcia $a(k)$, ktorá má podobu Gaussovej funkcie s maximom v $k = 0$ a s polšírkou $1/L$. Výsledok integrovania je preto v dobrom priblížení závislý len od príspevkov z oblasti $|k| < 3/L$. Môžeme predpokladať, že L sme zvolili tak, aby v uvedenej oblasti dostatočne dobre platil práve vzťah (77).

Pokúsme sa uhádnuť pohybovú rovnicu, podľa ktorej prebieha časový vývoj vlnovej funkcie pre voľný elektrón. Časovou deriváciou rovinnej vlny (76) dostaneme

$$\frac{\partial \psi_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i\omega(\vec{k})\psi_k(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar}E(\vec{k})\psi_k(\vec{r}, t), \quad (80)$$

kde závislosť $E(\vec{k})$ je obsiahnutá v rovnici (77). Rovnica (80) určuje iba časový vývoj rovinnej vlny s hybnosťou \vec{k} a neurčuje priestorovú závislosť vlnovej funkcie. Pohybová rovnica by preto mala byť parciálnou diferenciálnou rovnicou, ktorá bude obsahovať aj derivácie podľa priestorových súradníc. Prepíšme teda rovnicu (80) v tvare

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = \hat{H}_{kin} \psi_k, \quad (81)$$

kde \hat{H}_{kin} je súradnicový diferenciálny operátor, ktorý má každej rovinnej vlne priradiť ju samu násobenú zodpovedajúcou kinetickou energiou elektrónu

$$\hat{H}_{kin} \psi_k = E(\vec{k})\psi_k. \quad (82)$$

Lahko si overíme, že vyhovujúci tvar operátora \hat{H}_{kin} je

$$\hat{H}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2, \quad (83)$$

kde v kartézskych súradniciach je

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (84)$$

Rovinné vlny $\psi_k(\vec{r}, t)$ sú teda riešeniami pohybovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_k. \quad (85)$$

V súlade s našim očakávaním je to lineárna parciálna diferenciálna rovnica, takže jej riešeniami sú nielen funkcie ψ_k , ale aj ich všetky možné lineárne kombinácie v tvare (75) a tiež diskrétné súčty typu $\sum_k c_k \psi_k$. Túto rovnicu sme odvodili ako priamy dôsledok pojmového aparátu, ktorý bol zavedený na opísanie správania sa elektrónu a fotónu v dvojštrbinovom experimente. Táto rovnica nepredstavuje zásadný poznatok v tom zmysle, že je len natolko dobrá a užitočná, nakoľko zavedený pojmový aparát zodpovedá realite. Testom našich teoretických predstáv by bola konfrontácia nejakých nových predpovedí s experimentom.

4.5 Stredné hodnoty meraných veličín

Povedali sme, že ak sa v mikrosвете pokúšame detekovať polohu elektrónu v priestore, vo všeobecnosti nevieme predpovedať, kde ho nájdeme. Podobne, ak sa budeme pokúšať zmerať jeho hybnosť, nevieme predpovedať hodnotu, ktorú nameriame. Ak budeme v identických experimentoch opakovanne merať niektorú z týchto veličín, dostaneme rôzne hodnoty. V limite nekonečného počtu identických meraní bude rozloženie týchto hodnôt pre daný fyzikálny stav charakteristické. To znamená, že daný stav by sme mohli popísať pomocou distribúcie nameraných hodnôt jednej alebo viacerých veličín.

Z hľadiska teoretického popisu informáciu o takejto distribúcii v sebe nesie vlnová funkcia: explicitne je v nej prítomná informácia o distribúcii polohy častice. Početnosť detekovania elektrónu v objeme $d^3\vec{r}$ je úmerná veličine $|\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$. Ako sme však už videli, vlnová funkcia v sebe nesie aj informáciu o distribúcii hybnosti: pravdepodobnosť namerania hybnosti v objeme $d^3\vec{k}$ je $|a(\vec{k})|^2 d^3\vec{k}$.

Keď poznáme teoretickú distribúciu nameraných hodnôt v danom fyzikálnom stave, môžeme spočítať ich strednú hodnotu. Tak napríklad stredná hodnota polohy elektrónu v stave $\psi(\vec{r})$ je rovná

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}. \quad (86)$$

Veličina, ktorá charakterizuje “rozmazanie” nameraných polôh elektrónu pri opakovaných meraniach toho istého stavu, je stredná kvadratická odchylka od strednej hodnoty

$$(\delta\vec{r})^2 = \langle (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \rangle = \langle \vec{r}^2 - 2\vec{r}\langle \vec{r} \rangle + \langle \vec{r} \rangle^2 \rangle = \langle \vec{r}^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle^2, \quad (87)$$

kde

$$\langle \vec{r}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}^2 |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}. \quad (88)$$

Podobnou cestou vieme spočítať strednú hodnotu akejkoľvek fyzikálnej veličiny, ktorá závisí len od polohy

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}. \quad (89)$$

Analogicky k (86) môžeme vyjadriť strednú hodnotu hybnosti v tomto stave pomocou funkcie $a(\vec{k})$, ktorú môžeme chápať ako amplitúdu pravdepodobnosti v hybnostnom priestore. Potom

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \cdot \langle \vec{k} \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{k} |a(\vec{k})|^2 d^3\vec{k}. \quad (90)$$

O niečo ťažšou je však úloha vyjadriť $\langle \vec{p} \rangle$ pomocou vlnovej funkcie $\psi(\vec{r})$. Aby sme si zjednodušili život pri nasledovných výpočtoch, urobíme ich pre jednorozmerný prípad.

$$\langle p \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx' dx \psi^*(x') \psi(x) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k e^{ik(x-x')} dk \right] \quad (91)$$

Integrál v hranatej zátvorke môžeme upraviť nasledovne

$$[\dots] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i \frac{d}{dx} \right) e^{ik(x-x')} dk = \left(-i \frac{d}{dx} \right) \delta(x-x'). \quad (92)$$

Po dosadení (92) do (91) a integrácii *per partes* dostaneme

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' dx \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \delta(x-x') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{p} \psi(x), \end{aligned} \quad (93)$$

kde sme zadefinovali diferenciálny operátor

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (94)$$

ktorý budeme nazývať *operátor hybnosti*. Vzťah (93) udáva návod ako vypočítať strednú hodnotu hybnosti elektrónu, ktorý sa nachádza v stave $\psi(x)$. Rovnakým postupom, ibaže s opakovaným použitím *per partes*, sa dá ukázať, že¹⁴

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x), \quad \hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (95)$$

Pri znalosti $\langle p \rangle$ a $\langle p^2 \rangle$ vieme kvantifikovať “rozmazanie” hybnosti v stave popísanom vlnovou funkciou $\psi(x)$. Za týmto účelom spočítame strednú kvadratickú odchylku od strednej hodnoty hybnosti, tak, ako sme to urobili pri polohe v (87)

$$(\delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2. \quad (96)$$

Keď zapôsobíme operátorom \hat{p} na rovinnú vlnu $\psi_k(x)$, dostaneme

$$\hat{p} \psi_k(x) = p \psi_k(x), \quad p = \hbar k. \quad (97)$$

Vidíme, že pôsobením operátora \hat{p} na rovinnú vlnu dostaneme p -násobok rovinatej vlny. Vzťah (97) je previazaný s veľmi dôležitou skutočnosťou. Dá sa ukázať, že **len pre tie vlnové funkcie, ktoré spĺňajú rovnicu (97), je $(\delta p)^2 = 0$** . To znamená, že len v stavoch popísaných týmito vlnovými funkciami, obdržíme pri každom meraní hybnosti tú istú hodnotu. Bezprostredným dôsledkom tejto skutočnosti je aj to, že v experimente môžeme namerať len tie hodnoty hybnosti, ktoré sú riešením rovnice (97).

Dôkaz: V prvom kroku ukážeme platnosť implikácie “Eq. (97) \Rightarrow $(\delta p)^2 = 0$ ”. Využijúc (97) ľahko dostaneme, že

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_k^*(x) \hat{p} \psi_k(x) = \hbar k = p$$

a tiež

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_k^*(x) \hat{p}^2 \psi_k(x) = (\hbar k)^2 = p^2.$$

Keď tieto výsledky dosadíme do (96), dostaneme $(\delta p)^2 = 0$. Dokázat’ obrátenú implikáciu “ $(\delta p)^2 = 0 \Rightarrow$ Eq. (97)” bude o niečo pracnejšie. Pomocou *per partes* a zväziac, že $\langle p \rangle$ je reálne číslo, vieme ukázať nasledujúce pomocné vzťahy

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\hat{p}\psi(x))^* (\hat{p}\psi(x)),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) 2\hat{p} \langle p \rangle \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\langle p \rangle \psi(x))^* (\hat{p}\psi(x)) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\hat{p}\psi(x))^* (\langle p \rangle \psi(x)),$$

S ich pomocou dostaneme

$$0 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) (\hat{p} - \langle p \rangle)^2 \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx [(\hat{p} - \langle p \rangle)\psi(x)]^* [(\hat{p} - \langle p \rangle)\psi(x)].$$

Pravá strana tejto rovnice je rovná nule práve vtedy, keď $\hat{p}\psi(x)$ bude $\langle p \rangle$ -násobkom vlnovej funkcie $\psi(x)$

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

¹⁴Usilovnému čitateľovi prenechávame iniciatívu vo vyjadrení $\langle p^n \rangle$ a odporúčame zamyslieť sa nad prípadom $\langle f(p^n) \rangle$.

Koniec dôkazu.

Zovšeobecnenie získaných výsledkov na trojrozmerný prípad je priamočiare. Za všetko uvedieme aspoň výraz pre operátor hybnosti

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (98)$$

Porovnaním (98) s (83) dostaneme

$$\hat{H}_{kin} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2. \quad (99)$$

Potom vzhľadom na (95) je stredná hodnota kinetickej energie elektrónu v stave $\psi(x)$ rovná

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r})\hat{H}_{kin} \psi(\vec{r}). \quad (100)$$

4.6 Elektrón v silovom poli

Pripomeňme si, že na základe de Broglieho hypotézy sme skúmaním vlastností vlnového balíka prišli k záveru, že pohybová rovnica pre vlnovú funkciu voľného elektrónu by mala mať tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{kin} \psi(\vec{r}, t), \quad (101)$$

kde \hat{H}_{kin} je daná vzt'ahom (99). Prirodzenou a zásadnou je však otázka, ako vyzerá pohybová rovnica elektrónu, na ktorý pôsobí nejaká sila. Ak by sa podarilo nájsť úspešnú odpoveď na túto otázku v kontexte doteraz budovaného pojmového aparátu, dostali by sme do rúk silný argument v prospech správnosti nášho postupu.

Pokúsme sa teda rovnicu (101) zovšeobecniť aj na prípad, keď na elektrón pôsobí sila. Pozornému čitateľovi už iste napadlo najprirodzenejšie zovšeobecnenie rovnice (101). Pripomeňme, že pre operátor \hat{H}_{kin} majú významné postavenie voľnoelektrónové stavy s jednoznačnou energiou (rovinné vlny). Pre tieto stavy platí

$$\hat{H}_{kin}\psi_k = E(k)\psi_k, \quad \langle E \rangle = E(k), \quad E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}.$$

Pre voľný elektrón je $E(k)$ nielen kinetickou, ale súčasne aj celkovou energiou fyzikálneho systému. Keď si toto uvedomíme, prirodzene sa ponúka myšlienka, že zovšeobecnením rovnice (101) aj na prípad keď pôsobí sila, je nahradit' operátor \hat{H}_{kin} diferenciálnym operátorom, ktorý by zodpovedal celkovej energii systému. Operátor pre kinetickú energiu má nasledovnú korešpondenciu s klasickým výrazom

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \hat{H}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad (102)$$

to znamená, že hybnosť v klasickom výraze bola nahradená operátorom hybnosti (94). Zo vzt'ahov (86) a (89) vidíme, že úlohu operátorov pre \vec{r} a $f(\vec{r})$ hrajú v zmysle vyjadrenia strednej hodnoty pomocou integrálu typu (93) samotné veličiny \vec{r} a $f(\vec{r})$. Potom v prípade konzervatívnych síl, ktoré sa dajú vyjadriť pomocou potenciálnej energie ako $\vec{F}(\vec{r}) = -\text{grad } V(\vec{r})$, dostaneme postupom analogickým so (102) nasledovný tvar operátora celkovej energie

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (103)$$

Tento operátor budeme nazývať *Hamiltonovým operátorom* alebo krátko *Hamiltoniánom*. Týmto spôsobom sme sa dopracovali k pohybovej rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r}, t), \quad (104)$$

ktorá by mala popisovať časový vývoj stavu aj pre elektrón, na ktorý pôsobí konzervatívna sila. Či je táto rovnica správna alebo nie sa ukáže, až keď skonfrontujeme jej predpovede pre konkrétne fyzikálne systémy s výsledkami experimentálnych meraní. Dopredu prezradíme, že toto je skutočne tá správna pohybová rovnica kvantovej mechaniky a ako taká nesie aj meno svojho objaviteľa Erwina Schrödingera.

Než sa pokúsime túto rovnicu riešiť pre konkrétne fyzikálne systémy, pozrime sa na niektoré jej všeobecné vlastnosti. Predovšetkým medzi jej riešeniami môžeme nájsť množinu stavov, ktoré spĺňajú vzťah analogický s (82)

$$\hat{H}\psi_E(\vec{r}, t) = E\psi_E(\vec{r}, t). \quad (105)$$

Podobne ako v prípade hybnosti v časti 4.5, i tu môžeme overiť, že toto sú stavy s jednoznačne definovanou energiou rovnou práve hodnote E ($\langle E \rangle = E$, $(\delta E)^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 0$) a preto ich budeme nazývať *vlastné stavy* Hamiltonovho operátora. Keď dosadíme (105) do (104), dostaneme rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E(\vec{r}, t)}{\partial t} = E\psi_E(\vec{r}, t),$$

ktorá má riešenie v tvare

$$\psi_E(\vec{r}, t) = \phi_E(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar). \quad (106)$$

Funkcie ϕ_E nájdeme riešením rovnice (105) pre vlastné stavy

$$\hat{H}\phi_E(\vec{r}) = E\phi_E(\vec{r}). \quad (107)$$

Vo všeobecnosti rovnica (107) nemusí mať riešenie pre každú hodnotu energie E . Tie hodnoty, pre ktoré riešenie má sa nazývajú *vlastnými hodnotami* Hamiltonovho operátora. Keďže systém pri meraní fyzikálnej veličiny skokom prejde do stavu, ktorý zodpovedá nameranej hodnote, nemôžeme namerať hodnotu, ktorá nezodpovedá žiadnemu stavu. Konkrétnym stavom však zodpovedajú len vlastné hodnoty energie a teda **pri meraní energie môžeme namerať len vlastné hodnoty energie**.

Vlastné stavy Hamiltoniánu $\psi_E(\vec{r}, t)$ sa nazývajú tiež *stacionárne stavy*. Fyzikálny systém, ktorý sa nachádza v stacionárnom stave v ňom pri zachovaní vonkajších podmienok zotrúva nekonečne dlho. Časový vývoj stacionárneho stavu vlastne mení len jeho fázu, čo nemá fyzikálne merateľné dôsledky. Napríklad, v tomto stave sa s časom nemení rozloženie pravdepodobnosti výskytu elektrónu a následne ani stredné hodnoty polohy, hybnosti a energie. Skutočne, pravdepodobnosť nájdenia elektrónu v objeme $d^3\vec{r}$ je

$$dP = |\psi_E(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = |\phi_E(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}. \quad (108)$$

Pre všetky menované stredné hodnoty platí

$$\langle O \rangle = \int \psi_E^*(\vec{r}, t) \hat{O} \psi_E(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \int \phi_E^*(\vec{r}) e^{iEt/\hbar} \hat{O} \phi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} d^3\vec{r} = \int \phi_E^*(\vec{r}) \hat{O} \phi_E(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (109)$$

kde \hat{O} postupne reprezentuje operátor polohy, hybnosti, energie, alebo hociktorý iný operátor, ktorý neobsahuje deriváciu podľa času.

V prípade voľného elektrónu je $\hat{H} = \hat{H}_{kin}$ a rovinné vlny sú stacionárnymi stavmi pre všetky hodnoty $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Spektrum vlastných hodnôt Hamiltoniánu zahŕňa všetky¹⁵ reálne čísla, pričom $E = \vec{p}^2/2m$. To znamená, že v stavoch, v ktorých sa môže nachádzať voľný elektrón, nie je vylúčené nameranie žiadnej hodnoty energie. Všimnime si však ešte jednu vlastnosť energetického spektra voľného elektrónu. Viacero vlastných stavov zodpovedá tej istej vlastnej hodnote energie. Menovite sú to všetky rovinné vlny, ktorých \vec{k} má rovnakú veľkosť. O takýchto vlastných stavoch Hamiltoniánu hovoríme, že sú *degenerované*.

Vzhľadom na to, že rovnica (104) je lineárnou diferenciálnou rovnicou, je jej riešením aj ľubovoľná superpozícia stacionárnych stavov. Stredné hodnoty polohy, hybnosti a energie pre takúto lineárnu superpozíciu však už nie sú vo všeobecnosti nezávislé na čase.

Existencia stacionárnych stavov je dobrou správou pre vyriešenie otázky stability atómov, ktorú sme sformulovali už na začiatku. Z pohľadu klasickej fyziky bolo zotrvanie elektrónu na obežnej dráhe okolo jadra záhadou. Jeho zakrivený pohyb mal podľa klasickej elektrodynamiky spôsobovať stratu energie elektrónu elektromagnetickým žiarením a jeho pád na jadro vo veľmi krátkom čase. Avšak podľa vyššie uvedených záverov, ak by sa elektrón nachádzal vo vlastnom stave Hamiltoniánu atómu, potom v tomto stave zotrúva nekonečne dlho. Ak ho budeme chcieť z tohoto stavu dostať, budeme zrejme musieť nejakým spôsobom modifikovať pôvodný fyzikálny systém, aby stav elektrónu už nebol stacionárnym stavom nového Hamiltonovho operátora. Napríklad pridaním vonkajšieho elektromagnetického poľa.

4.7 Viazané a rozptylové stavy

Pozrime sa teraz na vlastnosti riešení rovnice pre vlastné stavy a vlastné hodnoty Hamiltoniánu. Aby sme si zjednodušili život, opäť môžeme prejsť k jednorozmernému prípadu. Získané závery budú ľahko zovšeobecniteľné do troch rozmerov.

Rovnica (107) má v jednom rozmere tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_E(x)}{dx^2} + V(x)\phi_E(x) = E\phi_E(x) \quad (110)$$

Dá sa ukázať, že ak potenciálna energia $V(x)$ má minimum, $V_{min} \equiv \min_{x \in \mathcal{R}} V(x)$, potom

$$E > V_{min}. \quad (111)$$

Ukážeme si to. Z rovnice (110) dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* \frac{d^2\phi_E}{dx^2} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* V \phi_E dx = E \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* \phi_E dx}_1.$$

Vzhľadom na normovanosť ϕ_E je integrál na pravej strane rovný jednej. Ďalej sa dá ukázať, že

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* V \phi_E dx > V_{min}.$$

Čo sa týka prvého člena na ľavej strane rovnice, ten upravíme pomocou *per partes* nasledovne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_E^* \frac{d^2\phi_E}{dx^2} dx = \underbrace{\left[\phi_E^* \frac{d\phi_E}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty}}_0 - \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\phi_E}{dx} \right|^2 dx}_{>0}.$$

¹⁵Relativistické energie by si vyžadovali zvláštnu diskusiu.

Prvý člen na pravej strane je rovný nule kvôli $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi_E(x) = 0$ a druhý člen je kladný. Keď toto všetko zoberieme do úvahy, dostaneme práve nerovnosť (111). Vlastné stavy Hamiltoniánu majú teda vždy väčšiu hodnotu ako minimum potenciálnej energie.

Pozrime sa teraz na asymptotické správanie vlnových funkcií stacionárnych stavov, keď $|x| \rightarrow \infty$. Diferenciálna rovnica (110) musí byť splnená pre každé x a teda aj pre ľubovoľne veľké $|x|$. Uvažujme situáciu, keď

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) \equiv V(\infty) \quad (112)$$

a keď

$$V(x) < V(\infty), \quad \forall x. \quad (113)$$

Tomu napríklad zodpovedá elektrostatický potenciál bodového náboja. Potom existujú dva druhy riešení rovnice (110) vzhľadom na ich správanie sa pri $x \rightarrow \pm\infty$.

1. $V_{min} < E < V(\infty)$:

V takomto prípade môžeme rovnicu v oblasti $|x| \rightarrow \infty$ prepísať v tvare

$$\frac{d^2 \phi_E}{dx^2} = \kappa^2 \phi_E, \quad \kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(\infty) - E]}. \quad (114)$$

Jej riešenia majú tvar $\phi_E(x) \propto \exp(\pm \kappa x)$. Ak zoberieme do úvahy požiadavku normovateľnosti vlnovej funkcie, potom

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \phi_E(x) \propto \exp(\kappa x), \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \phi_E(x) \propto \exp(-\kappa x) \quad (115)$$

Inak povedané, v tomto prípade sú vlnové funkcie ϕ_E v nekonečných exponenciálne utlmené a teda dominantná časť pravdepodobnosti výskytu elektrónu musí byť niekde na konečnom intervale súradnice x .

2. $E > V(\infty)$:

V takomto prípade môžeme rovnicu v oblasti $|x| \rightarrow \infty$ prepísať v tvare

$$\frac{d^2 \phi_E}{dx^2} = -\kappa^2 \phi_E, \quad \kappa \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(\infty)]}. \quad (116)$$

Riešenia tejto rovnice majú tvar $\phi_E \propto \exp(\pm i\kappa x)$. Z týchto riešení nie je možné zostaviť funkciu, ktorá by konvergovala k nule pre veľké $|x|$. Vážnym dôsledkom je, že tieto funkcie nie je možné normovať na jednotku. Pripomíname, že presne s takouto situáciou sme sa už stretli pri rovinných vlnách. Rovnako ako tam poznamenávame, že vzniknutý problém s normovaním sa dá riešiť pomocou tzv. normovania na Diracovu delta-funkciu. Podrobne sa s týmto problémom vysporiadame neskôr, v rámci zavedenia formálneho matematického aparátu kvantovej mechaniky. Nateraz nás bude zaujímať len fyzikálna interpretácia riešení pre $E > V(\infty)$. Asymptotika

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi_E(x) \propto \exp(\pm i\kappa x) \quad (117)$$

znamená, že pravdepodobnosť, že častica bude nájdená je v ľubovoľnej vzdialenosti nezanedbateľná. Inými slovami, v tomto prípade sa nedá hovoriť o lokalizácii elektrónu v konečnom intervale.

Stacionárne stavy s $E < V(\infty)$ nazývajú *viazané* a stacionárne stavy s $E > V(\infty)$ budeme nazývať *rozptylové*. Môžeme tu vystopovať analógiu s klasickou mechanikou. Ak sa klasické teleso pohybuje v poli prítlačlivej sily (čomu zodpovedá potenciálna energia daná vzťahmi (112),

(113)), potom pohyby, ktoré môže teleso v tomto poli vykonávať, sa dajú rozdeliť do dvoch kategórií podľa toho, či je celková energia menšia alebo väčšia ako $V(\infty)$. Ak je menšia, potom sa teleso môže pohybovať len v konečnej oblasti priestoru, v ktorej platí $E > V(x)$. Takýto pohyb nazývame *finitný*. V druhom prípade má teleso dost' energie na to, aby sa vzdialilo do nekonečna a takéto pohyby nazývame *infinítne*.

Ako príklad si môžeme uviesť pohyb telies v gravitačnom poli Slnka. Planéty majú celkovú energiu zápornú a sú k Slnku viazané. Pohybujú sa len po dráhach (elipsy), ktoré sa celé nachádzajú v konečnej vzdialenosti od Slnka. Naproti tomu objekty (napríklad kozmické sondy), ktorých celková energia je nezáporná, sa budú pohybovať po dráhach, ktoré siahajú až do nekonečna (parabola, hyperbola).

4.8 Spojitosť vlnových funkcií a ich derivácií

Rovnicu (110) pre stacionárne stavy v jednom rozmere môžeme prepísať do tvaru

$$\frac{d^2\phi_E(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\phi_E(x). \quad (118)$$

Z tejto rovnice môžeme vyvodit' nasledovné závery o spojitosti jej riešení:

1. Ak $V(x)$ je spojitá funkcia alebo má konečnú nespojitost' v izolovaných bodoch, potom z rovnice (118) vyplýva, že pre každé x existuje $d^2\phi_E/dx^2$. To si ovšem vyžaduje spojitost' $d\phi_E/dx$ a $\phi_E(x)$ pre všetky x .
2. Ak $V(x)$ má nekonečnú nespojitost' (skok) v bode x_0 , potom spojitost' v tomto bode požadujeme len od samotnej vlnovej funkcie $\phi_n(x)$, nie od jej derivácie.

4.9 Elektrón viazaný na úsečke

Potom, čo sme preskúmali všeobecné vlastnosti Schrödingerovej rovnice (104), môžeme sa pokúsiť nájsť pomocou nej riešenie nejakého jednoduchého problému. Predstavme si elektrón, ktorý sa môže vyskytovať len v konečnej jednorozmernej oblasti. Môžeme si ju predstaviť ako úsečku na osi x so súradnicami v intervale $(0, L)$. Elektrón sa v žiadnom prípade nemôže vyskytovať mimo túto oblasť. Toto sa dá preformulovať aj tak, že sa elektrón nachádza v nekonečne hlbokéj potenciálovej jame

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 & \text{oblasť I} \\ 0, & x \in (0, L) & \text{oblasť II} \\ \infty, & x > L & \text{oblasť III} \end{cases} \quad (119)$$

Pokúsme sa nájsť stacionárne stavy a možné energie systému. Za týmto účelom musíme nájsť spektrum príslušného Hamiltoniánu, ktoré je riešením rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi(x) = E\phi(x). \quad (120)$$

V oblasti I a III táto rovnica môže byť splnená len ak $\phi^I(x) = \phi^{III}(x) = 0$. V oblasti II je $V(x) = 0$, takže $\phi^{II}(x)$ je riešením rovnice

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi^{II}(x) = -k^2\phi^{II}(x), \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0. \quad (121)$$

Riešenie má tvar

$$\phi^{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad (122)$$

kde A a B sú voľné parametre. Tieto určíme z okrajových podmienok. Keďže vlnová funkcia má byť spojitá na celom intervale, musí byť

$$\phi^I(0) = \phi^{II}(0), \quad \phi^{II}(L) = \phi^{III}(L). \quad (123)$$

Odtiaľ dostaneme, že $A = 0$ a $kL = n\pi$, kde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Priestorová časť vlnovej funkcie má teda tvar

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ B \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), & x \in \langle 0, L \rangle \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (124)$$

kde B určíme z normovacej podmienky. Prípady $n = 0$ zodpovedá žiadnemu elektrónu na úsečke a prípady $\pm n$ sa od seba líšia len fázou, takže sú fyzikálne nerozlíšiteľné. Preto v (124) je $n = 1, 2, 3, \dots$. Keďže $k = p/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$, dostaneme z podmienky $kL = n\pi$ hodnoty energie, ktoré zodpovedajú jednotlivým vlnovým funkciám

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2. \quad (125)$$

Všimnime si, že energia elektrónu na úsečke, ktorú môžeme namerat', nadobúda len diskkrétne hodnoty. To je priamy dôsledok okrajových podmienok, z ktorých vyplynulo obmedzenie na parameter k . Jednotlivé povolené energie narastajú ako štvorec prirodzených čísel a sú nepriamo úmerné štvorcu šírky potenciálovej jamy.

Keď nakoniec skombinujeme nájdenú priestorovú časť vlnovej funkcie so známou časovou závislosťou stacionárneho stavu, dostaneme vlnové funkcie stacionárnych stavov v tvare

$$\psi_n(x, t) = \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar). \quad (126)$$

4.10 Energetické spektrum atómu vodíka

Prvým kľúčovým testom správnosti predpokladov a postupov, ktoré nás dovedli až sem, bude výpočet energetického spektra atómu vodíka. Pripomeňme si, že atómy vodíka emitujú, resp. pohlcujú svetlo len istých vlnových dĺžok. Toto pozorovanie by sme vedeli vysvetliť, ak:

- vnútorná energia atómu vodíka môže nadobúdať len niektoré diskkrétne hodnoty E_1, E_2, E_3, \dots ;
- k zmene tejto energie môže dochádzať vyžiarením alebo pohltitím jedného fotónu, ktorého vlnová dĺžka λ je daná rovnicou

$$\frac{hc}{\lambda} = |E_n - E_m|, \quad (127)$$

kde E_m je počiatočná a E_n koncová energia atómu vodíka.

Takže stojíme pred úlohou spočítať vlastné energie vodíkového Hamiltonovho operátora a pomocou rovnice (127) ich porovnať s pozorovanými vlnovými dĺžkami.

Budeme predpokladať, že v atóme vodíka elektrón "obieha" okolo nekonečne ťažkého jadra a že táto väzba je dôsledkom elektrostatickej príťažlivej sily medzi nimi. Jadro atómu vodíka je

tvorené jedným protónom a preto elektrický náboj jadra je $-q_e$, keď q_e je náboj elektrónu. Potom Hamiltonov operátor pre elektrón v atóme vodíka má tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}, \quad e^2 \equiv \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (128)$$

kde m_e je hmotnosť elektrónu a r vzdialenosť od jadra. Možné energie atómu vodíka nájdeme, keď vyriešime rovnicu $\hat{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$. Riešenie tejto diferenciálnej rovnice nie je z matematického hľadiska úplne jednoduchá záležitosť a vyžaduje isté skúsenosti. Preto sa najskôr pokúsime o riešenie analogického problému v jednom rozmere.

4.10.1 Jednorozmerný prípad

Uvažujeme nasledovný Hamiltonov operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{e^2}{|x|}. \quad (129)$$

Pre potenciálnu energiu v tomto Hamiltoniáne platí $\forall x : V(x) < V(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ a $V(x \rightarrow 0) = -\infty$. To znamená, že viazaným stavom bude prislúchať záporná energia, $E < 0$, a rozptylovým nezáporná, $E \geq 0$. Diferenciálna rovnica $\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$ pre vlastné stavy a energie Hamiltoniánu sa dá upraviť do tvaru

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = -\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{|x|}\right)\phi(x). \quad (130)$$

Zaujímať sa o riešenia prislúchajúce viazaným stavom. Okrem toho, že im pri danom potenciály zodpovedá záporná energia, príslušné vlnové funkcie musia pre $x \rightarrow \pm\infty$ dostatočne rýchlo konvergovať k nule. Pozrime sa na asymptotiku riešení rovnice (130). Pre veľké x môžeme zanedbať druhý člen v zátvorke na pravej strane tejto rovnice, takže dostaneme

$$|x| \rightarrow \infty : \quad \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \alpha^2\phi(x), \quad \alpha \equiv \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}}, \quad E < 0. \quad (131)$$

Obecné riešenie tejto rovnice má tvar

$$|x| \rightarrow \infty : \quad \phi(x) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{-\alpha x}. \quad (132)$$

Keď zvažíme požiadavku konverencie v nekonečných, potom fyzikálne vyhovujúce riešenia rovnice (130) musia mať nasledovnú asymptotiku

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \phi(x) \propto e^{+\alpha x}, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \phi(x) \propto e^{-\alpha x}. \quad (133)$$

Riešenia rovnice (130) budeme hľadať v tvare

$$\phi(x) = g(x) \exp(\mp \alpha x), \quad (134)$$

kde horné znamienko platí pre $x > 0$, dolné pre $x < 0$ a $g(x)$ je ľubovoľná funkcia. Po dosadení takejto funkcie do (130) dostaneme diferenciálnu rovnicu pre $g(x)$

$$g''(x) \mp 2\alpha g'(x) \pm \frac{\beta}{x}g(x) = 0, \quad \beta \equiv \frac{2m_e e^2}{\hbar^2}, \quad (135)$$

kde čiarkami je označená derivácia podľa x . Táto rovnica sa našťastie dá vyriešiť rozložením $g(x)$ do mocninného radu

$$g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n. \quad (136)$$

Potom

$$g'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1}, \quad g''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1) x^{n-2} = \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+1} (n+1) n x^{n-1}. \quad (137)$$

Po dosadení (136) a (137) do (135) dostaneme

$$\sum_{n=1}^{\infty} [n(n+1)a_{n+1} \mp (2\alpha n - \beta)a_n] x^{n-1} = 0. \quad (138)$$

Táto rovnica musí byť rovná nule pre $\forall x$, čo bude splnené vtedy, keď koeficient pri každej mocnine bude nulový. Z tejto podmienky dostaneme rekurentný vzťah pre a_n

$$a_{n+1} = \pm \frac{2\alpha n - \beta}{n(n+1)} a_n \quad (139)$$

Pre dostatočne veľké n tento vzorec konverguje k

$$a_{n+1} = \pm \frac{2\alpha}{n} a_n = \frac{(\pm 2\alpha)^n}{n!} a_1, \quad n \gg 1. \quad (140)$$

Takže pre funkciu $g(x)$ cez rozvoj (136) dostávame

$$g(x) \approx a_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\pm 2\alpha x)^n}{n!} \approx a_1 \exp(\pm 2\alpha x), \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (141)$$

Keď dosadíme posledný vzťah do (134), dostaneme

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} a_1 e^{\pm 2\alpha x} e^{\mp \alpha x} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} a_1 e^{\pm \alpha x} = \infty, \quad (142)$$

čo je pre viazané stavy neprípustná asymptotika.

Jediný spôsob, ako sa vyhnúť tejto zlej asymptotike, je urobiť rad (136) konečným v počte jeho členov. Exponenciálna funkcia v (134) totiž v kritických limitách "preváži" každý polynóm konečného rádu. Z rekurentného vzťahu (139) vidíme, že rad (136) bude mať konečný počet členov práve vtedy, keď hodnota parametra α bude taká, že pre nejaké prirodzené n bude splnená rovnica

$$2\alpha n = \beta. \quad (143)$$

Lenže α je funkciou energie. Možnými vlnovými funkciami a energiami vlastných viazaných stavov Hamiltonovho operátora sú teda také riešenia rovnice $\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$, ktoré spĺňajú podmienku (143) pre nejaké prirodzené číslo n . Po dosadení za α a β do tejto podmienky dostaneme vzťah pre možné hodnoty energie Hamiltonovho operátora (129)

$$E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (144)$$

Čitateľa musíme upozorniť, že týmto sme zatiaľ len obmedzili množinu všetkých možných hodnôt energie, ale nedokázali, že každá z hodnôt (144) je vlastnou hodnotou. Museli by sme ešte dokázať, že ku každej tejto hodnote naozaj existuje vlnová funkcia $\phi(x)$ spĺňajúca rovnicu (130). To tu ale nebudeme robiť, keďže našim hlavným cieľom bola hlavne demonštrácia matematických postupov, ktoré použijeme na zrávanie energetického spektra atómu vodíka. Ale to sa budeme musieť vrátiť do troch rozmerov.

4.10.2 Trojrozmerný prípad

Kedže potenciálna energia v (128) závisí len na $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, Hamiltonov operátor nezmení svoj tvar, keď budeme atóm vodíka popisovať v ľubovoľne pootočenej súradnicovej sústave. Vďaka tejto sférickej symetrii je výhodne pri riešení rovnice $\hat{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$ prejsť od kartézskych súradníc (x, y, z) k sférickým súradniciam (r, θ, φ)

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (145)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad (146)$$

$$z = r \cos \theta. \quad (147)$$

Operátor ∇^2 má v sférických súradniciach nasledovný tvar

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\phi) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (148)$$

Kedže má skúmaný fyzikálny systém (a teda aj riešená diferenciálna rovnica) sférickú symetriu, skúsme začať hľadaním sféricky symetrických riešení

$$\phi(\vec{r}) = \phi(r). \quad (149)$$

Keď dosadíme (148) a (149) do $\hat{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$, dostaneme diferenciálnu rovnicu pre $\phi(r)$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \phi. \quad (150)$$

Túto rovnicu môžeme ešte prepísať do tvaru

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) f(r), \quad (151)$$

kde $f(r) = r\phi(r)$. Všimnime si podobnosť tejto rovnice s rovnicou (130).

Budeme sa zaujímať o riešenia prislúchajúce viazaným stavom. To znamená, že vzhľadom na charakter potenciálu budú mať tieto stavy zápornú energiu. Navyše budeme musieť vybrať také riešenia rovnice (150), resp. (151), ktoré majú asymptotiku viazaných stavov. Pre veľmi veľké r môžeme zanedbať druhý člen v zátvorke na pravej strane rovnice (151). Dostaneme

$$r \rightarrow \infty : \quad \frac{d^2 f(r)}{dr^2} = \alpha^2 f(r), \quad \alpha \equiv \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}}, \quad E < 0. \quad (152)$$

Obecné riešenie tejto rovnice má tvar

$$r \rightarrow \infty : \quad f(r) = r\phi(r) = C_1 e^{\alpha r} + C_2 e^{-\alpha r}. \quad (153)$$

Keď zvažíme požiadavku konverencie v nekonečne, potom musíme položiť $C_1 = 0$. Preto budeme hľadať riešenie v tvare

$$f(r) = g(r) \exp(-\alpha r), \quad (154)$$

kde $g(r)$ je ľubovoľná funkcia spĺňajúca rovnicu

$$g''(r) - 2\alpha g'(r) + \frac{\beta}{r} g(r) = 0, \quad \beta = \frac{2m_e^2}{\hbar^2}. \quad (155)$$

Pozornému čitateľovi iste neuniklo, že sa táto situácia začala náramne podobať na to, čo sme riešili už v jednorozmernom prípade. Preto môžeme využiť tam nadobudnuté skúsenosti. Keď $g(r)$ budeme hľadať v tvare mocninného radu

$$g(r) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^n, \quad (156)$$

dostaneme pre koeficienty a_n podmienku

$$a_{n+1} = \frac{2\alpha n - \beta}{n(n+1)} a_n. \quad (157)$$

Kvôli dosiahnutiu správnej asymptotiky budeme musieť požadovať, aby rad (156) mal iba konečný počet členov, čo sa dá zabezpečiť iba ak bude pre nejaké n splnená podmienka

$$2\alpha n = \beta.$$

Z tejto podmienky potom dostaneme vzt'ah pre možné hodnoty energie

$$E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (158)$$

Pripomíname, že obmedzená množina prípustných energií je priamym dôsledkom okrajových podmienok (v našom prípade asymptotiky pre $r \rightarrow \infty$) kladených na vlnové funkcie.

4.10.3 Porovnanie s experimentom

Vlnové dĺžky svetla vyžarovaného (pohlcovaného) atómom vodíka vytvárajú na spektrálnom diagrame zoskupenia čiar, ktorým sa zvykne hovoriť *série*. Najdôležitejšie série majú svoje názvy podľa fyzikov, ktorí ich objavili a študovali. Tak napríklad máme Lymanovu sériu, Balmerovu sériu, Ritz-Paschenovu sériu a niektoré ďalšie. Namerané hodnoty niektorých vlnových dĺžok, ktoré prislúchajú týmto sériám v spektre atómu vodíka, sú uvedené v nasledovnej tabuľke:

Lyman $\lambda[\text{nm}]$	Balmer $\lambda[\text{nm}]$	Ritz-Paschen $\lambda[\text{nm}]$
97.3	377.1	1093.8
102.6	379.8	1281.8
121.6	383.5	1875.1
	388.9	
	397.0	
	410.2	
	434.0	
	486.1	
	656.3	

(159)

Vidíme, že Lymanova séria leží v ultrafialovej oblasti elektromagnetického žiarenia, Balmerova séria zodpovedá viditeľnému svetlu a Ritz-Paschenova séria je v ultrafialovej časti spektra.

Aby sme mohli porovnať správnosť nášho výsledku s experimentom, je užitočné vyčísliť nasledovnú konštantu

$$\varepsilon_R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV} \approx 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}, \quad (160)$$

ktorá sa zvykne nazývať aj *Rydbergova energia*. Vzťahy (127) a (158) predpovedajú, že atóm vodíka by mal vyžarovať svetlo s vlnovými dĺžkami

$$\lambda(n, m) = \frac{2\pi\hbar c}{\varepsilon_R} \frac{1}{\left|\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right|} = \frac{91.18 \text{ nm}}{\left|\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right|}. \quad (161)$$

Niektoré hodnoty vypočítané podľa tohoto vzťahu sú uvedené v nasledujúcej tabuľke:

m	$\lambda(1, m)$ [nm]	$\lambda(2, m)$ [nm]	$\lambda(3, m)$ [nm]
1		121.6	102.6
2	121.6		656.5
3	102.6	656.5	
4	97.3	486.3	1875.7
5	95.0	434.2	1282.2
6	93.8	410.3	1094.1
7	93.1	397.1	1005.2
8	92.6	389.0	954.9
9	92.3	383.7	923.2
10	92.1	379.9	901.8

(162)

Porovnanie hodnôt v obidvoch tabuľkách vedie k potešiteľnému záveru, že dokážeme vysvetliť spektrum atómu vodíka. Výrazne sa tým posilňuje nádej, že naše doterajšie predpoklady a úvahy nie sú len prázdny (aj keď sofistikovaný) špekuláciou a že má zmysel skúsiť na ich základe sformulovať konzistentnú vedeckú teóriu mikrosвета, ktorú budeme nazývať kvantová mechanika. A o tom budú nasledujúce kapitoly.

5 Dvojhadinový systém

Pokúsime sa vybudovať formalizmus teórie mikrosveta, ktorá sa nazýva kvantová mechanika. Začneme štúdiom správania najjednoduchšieho kvantového¹⁶ fyzikálneho systému, v ktorom meraná fyzikálna veličina môže nadobúdať len dve rôzne hodnoty. Prototypom takéhoto fyzikálneho systému je *spin* elektrónu, ktorého prejavy a vlastnosti boli prvýkrát pozorované v Stern-Gerlachovom experimente.

5.1 Stern-Gerlachov experiment

- Stern a Gerlach (1921);
- meranie dipólového magnetického momentu atómu striebra;

Usporiadanie experimentu:

V Stern-Gerlachovom (SG) prístroji je medzi dvomi pólovými nadstavcami vytvorené časovo konštantné magnetické pole $\vec{B}(\vec{r})$, ktoré smeruje od jedného nadstavca k druhému a jeho veľkosť závisí len od vzdialenosti k nadstavcom; od jedného k druhému veľkosť poľa narastá. Takéto pole môžeme zapísať nasledovne

$$\vec{B}(\vec{r}) = B(r_{\parallel}) \cdot \vec{b}_0, \quad (163)$$

kde \vec{b}_0 je jednotkový vektor v smere magnetického poľa, ktorý nezávisí od \vec{r} a

$$r_{\parallel} = \vec{r} \cdot \vec{b}_0 \quad (164)$$

je priemet (súradnica) vektora \vec{r} do smeru magnetického poľa. Pre konkrétnosť budeme predpokladať, že veľkosť magnetického poľa narastá v smere \vec{b}_0 , čo je vyjadrené v podmienke

$$\frac{dB}{dr_{\parallel}} > 0. \quad (165)$$

Ak smer \vec{b}_0 stotožníme s osou z , potom r_{\parallel} udáva z -ovú súradnicu, $r_{\parallel} = z$. Magnetické pole má potom nenulovú len z -ovú zložku, ktorej veľkosť závisí len na z : $dB(z)/dz > 0$.

Cez SG prístroj, kolmo na magnetické pole \vec{B} , prechádza zväzok atómov striebra s náhodne orientovanými magnetickými dipólovými momentami. Po prejení SG prístrojom atómy dopadnú na tienidlo, kde v mieste dopadu zanechajú stopu.

Predpoveď klasickej fyziky:

Na elektricky neutrálne atómy pôsobí v magnetickom poli nulová Lorentzova sila. Atóm s nenulovým magnetickým momentom $\vec{\mu}$ interaguje s magnetickým poľom. Energia atómu v poli \vec{B} je $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Sila pôsobiaca na atóm je

$$\vec{F} = -\nabla W = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \nabla[(\vec{\mu} \cdot \vec{b}_0)B] = (\vec{\mu} \cdot \vec{b}_0)(\nabla B). \quad (166)$$

Po krátkej úprave sa dá ukázať, že

$$\nabla B(r_{\parallel}) = \frac{dB}{dr_{\parallel}} \vec{b}_0. \quad (167)$$

¹⁶Prívlastkom *kvantový* tu máme na mysli taký fyzikálny systém, ktorý bude explicitne vykazovať vlastnosti charakteristické pre objekty mikrosveta.

Potom

$$\vec{F} = \mu_{\parallel} \left(\frac{dB}{dr_{\parallel}} \vec{b}_0 \right), \quad (168)$$

kde μ_{\parallel} je priemet (súradnica) magnetického dipólového momentu v smere \vec{b}_0

$$\mu_{\parallel} = \vec{\mu} \cdot \vec{b}_0. \quad (169)$$

Zo (168) vidíme, že sila pôsobí pozdĺž magnetického poľa: keď $\mu_{\parallel} > 0$, je to v smere poľa, keď $\mu_{\parallel} < 0$, je to proti smeru poľa.

Ak os z smeruje nahor pozdĺž poľa \vec{B} , potom μ_{\parallel} bude z -ovou zložkou μ_z magnetického momentu atómu. Pôsobením sily (168) sa atómy v SG prístroji vychýlia v kladnom smere z . Zátvorka v (168) je daná dizajnom SG prístroja. Jediná premenná veličina, od ktorej závisí veľkosť výchylky atómu, je priemet $\vec{\mu}$ do smeru \vec{b}_0 . Tento môže nadobúdať hodnoty

$$-|\vec{\mu}| \leq \mu_z \leq +|\vec{\mu}|. \quad (170)$$

Z toho vyplýva, že po zapnutí magnetického poľa sa stopa na tienidle rozšíri v z -ovom smere na pruh so stredom v $z = 0$. Atómy s $\mu_z > 0$ sa odchýlia smerom nahor ($z > 0$) a atómy s $\mu_z < 0$ sa odchýlia smerom nadol ($z < 0$).

Ako sa zmení situácia, ak SG prístroj otočíme okolo osi atómového zväzku o 180° ? Naivne by sme mohli očakávať, že potom atómy s $\mu_z > 0$ sa budú vychyľovať nadol a atómy s $\mu_z < 0$ nahor. Ale toto nezodpovedá skutočnosti. Je potrebné uvedomiť si, že smery 'nahor' a 'nadol' nie sú v priestore ničím výnimočné a mohli by sme ich pokojne vzájomne zameniť. Ak by sme napríklad vykonali náš experiment u protinožcov niekde v Austrálii, jeho výsledok musí byť rovnaký. V samotnom experimente v skutočnosti existuje význačný smer a to smer magnetického poľa \vec{B} . Výsledky experimentu musia byť rovnaké u nás aj v Austrálii práve vzhľadom na tento význačný smer. Keď cez SG prístroj bude prechádzať atóm s $\vec{\mu} \cdot \vec{b}_0 > 0$, bude sa podľa (168) vychyľovať v smere \vec{b}_0 . (A to musí platiť aj v Austrálii.) Ak bude $\vec{\mu} \cdot \vec{b}_0 < 0$, potom sa atóm vychýli proti smeru \vec{b}_0 . Keď to celé zvážime, musíme prísť k záveru, že ak SG prístroj otočíme okolo osi atómového zväzku o 180° , atómy s $\mu_z > 0$ sa budú stále odchýľovať nahor a atómy s $\mu_z < 0$ nadol. Analýza tejto situácie by nám mala pomôcť uvedomiť si, že SG prístroj meria relatívnu orientáciu $\vec{\mu}$ voči \vec{B} na základe relatívnej orientácie výchylky zväzku voči \vec{B} . Pri našom dizajne SG prístroja to znamená, že ak sa zväzok vychýli v smere (proti smeru) \vec{B} , potom magnetický moment atómu $\vec{\mu}$ je orientovaný v smere (proti smeru) \vec{B} , t.j. $\mu_{\parallel} > 0$ ($\mu_{\parallel} < 0$).

Pozorovanie:

Pri vypnutom magnetickom poli dopadá zväzok atómov na tienidlo v bode $z = 0$. Po zapnutí \vec{B} sa na tienidle objavia dve oddelené stopy so súradnicami $(y_+, z_+) = (0, \Delta z)$ a $(y_-, z_-) = (0, -\Delta z)$. Vyzerá to tak, že sa pôvodný zväzok atómov pri prechode SG prístrojom rozštiepil na dva zväzky, ktoré ležia v rovine (x, z) .

Rozšírenie experimentu:

- do cesty jednému z rozštiepených zväzkov postavíme ďalší SG prístroj (SG'), pričom x' bude smer prichádzajúceho zväzku a z' smer magnetického poľa v SG' ;
- rovina (x', z') je totožná s rovinou (x, z) ;
- pri prechode cez SG' sa zväzok nerozštiepi, len vychýli;

- rovnaký výsledok pri oboch zväzkoch;

Možná interpretácia:

- veličina (parameter), od ktorej závisí zmena smeru pohybu atómov striebra v SG prístroji môže nadobúdať len dve hodnoty, pravdepodobne symetrické voči nule;
- medzi atómami Ag, ktoré vstupovali do SG, sa vyskytovali nositelia jednej aj druhej hodnoty spomínanej veličiny;
- v SG sa atómy rozdelili do dvoch zväzkov v závislosti od hodnoty tejto veličiny. V každom zväzku za SG už bola hodnota tejto veličiny jednoznačne daná a preto prechod cez SG' nespôsobil ďalšie rozštiepenie zväzku;
- očakávaná korešpondencia medzi zákonmi klasickej fyziky a zákonmi mikrosвета vedú k hypotéze¹⁷, že za rozštiepenie je skutočne zodpovedná interakcia magnetického dipólového momentu atómu Ag s magnetickým poľom v SG. Plus je potrebné pridať klasickej fyzikou nevysvetliteľný predpoklad, že z -ová zložka tohoto magnetického momentu, μ_z , môže nadobúdať len dve hodnoty, $\pm\mu$.

Kvantový opis:

Ako by vyzeral kvantový opis takejto situácie? Vyžiarený atóm Ag je v nejakom stave ψ , ktorý sa bude vyvíjať v čase; nech mu zodpovedá vlnový balík veľmi malých rozmerov pohybujúci sa po dráhe zväzku dost' rýchlo na to, aby jeho rozmazanie bolo zanedbateľné. Amplitúda pravdepodobnosti, že atóm nájdeme v čase t v bode \vec{r} , je $\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$. Označme čas vyžiarovania atómu ako t_1 , čas prechodu cez SG ako t_2 , a čas dopadu na tienidlo ako t_3 . V čase $t_1 < t < t_2$ nepoznáme hodnotu veličiny μ_z a preto amplitúdu $\psi(\vec{r}, t)$ môžeme vyjadriť ako lineárnu superpozíciu amplitúd zodpovedajúcich konkrétnym hodnotám $\mu_z = \pm\mu$. Označme tieto amplitúdy ako $\psi_+(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi_+(t) \rangle$ a $\psi_-(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi_-(t) \rangle$. Potom

$$\psi(\vec{r}, t) = c_+ \psi_+(\vec{r}, t) + c_- \psi_-(\vec{r}, t), \quad (171)$$

kde c_{\pm} sú komplexné čísla majúce úlohu váhových koeficientov určujúcich zastúpenie dvoch rôznych hodnôt μ_z v danej vlnovej funkcii. Vzhľadom na okolnosti experimentu očakávame, že keď by sme merali polohu atómu pred jeho vstupom do SG ($t_1 < t < t_2$), nepozorovali by sme súvislosť medzi priestorovým rozložením jeho výskytu a hodnotou μ_z . To znamená, že priestorové závislosti $\psi_+(\vec{r}, t)$ a $\psi_-(\vec{r}, t)$ sú rovnaké.

Magnetické pole v SG vychýli pohyb vlnovej funkcie $\psi_+(\vec{r}, t)$ smerom nahor a pohyb $\psi_-(\vec{r}, t)$ smerom nadol. Od okamihu $t = t_2$ bude teda priestorová a časová závislosť $\psi_+(\vec{r}, t)$ iná ako $\psi_-(\vec{r}, t)$. V čase $t = t_3$ sa obidve funkcie dostanú do oblasti tienidla. Pri zanedbateľných rozmeroch funkcií $\psi_{\pm}(\vec{r}, t_3)$ platí

$$|\langle \vec{r}_+ | \psi_+(t_3) \rangle| = |\langle \vec{r}_- | \psi_-(t_3) \rangle| = 1, \quad \langle \vec{r}_- | \psi_+(t_3) \rangle = \langle \vec{r}_+ | \psi_-(t_3) \rangle = 0, \quad (172)$$

kde \vec{r}_{\pm} sú polohy hornej a dolnej stopy atómov striebra na tienidle.

Pravdepodobnosť, že atóm Ag bude detekovaný tienidlom v čase $t < t_3$, je prakticky nulová, pretože v tomto čase je hodnota vlnovej funkcie (171) v oblasti tienidla zanedbateľná. Situácia sa zmení v čase t_3 . Aká je pravdepodobnosť, že v tomto okamihu bude atóm detekovaný v \vec{r}_+ alebo \vec{r}_- ? Odpoveď dostaneme pomocou (172)

$$P_+ = |\psi(\vec{r}_+, t_3)|^2 = |c_+|^2, \quad P_- = |\psi(\vec{r}_-, t_3)|^2 = |c_-|^2. \quad (173)$$

¹⁷Okrem toho, že takáto hypotéza by bola v súlade so spomínaným princípom korešpondencie, súčasne patrí k najjednoduchším vysvetleniam. Vždy je prirodzené začať testovať hypotézy od tých jednoduchších.

Poloha detekcie atómu na tienidle je korelovaná so zastúpením hodnoty μ_z vo vlnovej funkcii (171). Zmeraním polohy atómu na tienidle súčasne zmeriame aj μ_z . Takže SG spolu s tienidlom slúžia ako prístroj na meranie μ_z . Meraním početnosti výskytu atómov Ag v bode \vec{r}_+ , resp. \vec{r}_- , dostaneme pravdepodobnosť namerania $+\mu$, resp. $-\mu$. SG experiment je príkladom merania kvantového systému, v ktorom fyzikálna veličina môže nadobúdať len dve rôzne hodnoty.

5.2 Od amplitúdy pravdepodobnosti k stavovému vektoru

Uvažujme kvantový fyzikálny systém, v ktorom veličina M môže nadobúdať len dve hodnoty: m_1 a m_2 . Amplitúdy pravdepodobnosti, že v stave ψ nameriame m_1 , resp. m_2 , sú $\langle 1|\psi\rangle$ a $\langle 2|\psi\rangle$. Hodnoty $m_{1,2}$ nazývame *vlastnými hodnotami* veličiny M a stavy, v ktorých nameriame tieto hodnoty so 100%-nou pravdepodobnosťou budeme nazývať jej *vlastnými stavmi*.

Priestorové rozloženie pravdepodobnosti nájdenia takéhoto systému je dané vlnovou funkciou $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle$. Vlnovými funkciami pre vlastné stavy veličiny M sú amplitúdy $\langle \vec{r}|1\rangle$ a $\langle \vec{r}|2\rangle$. Ak sme nezmerali veličinu M , potom amplitúda nájdenia systému v bode \vec{r} je vo všeobecnosti lineárnou superpozíciou amplitúd zodpovedajúcich jednotlivým vlastným hodnotám M

$$\langle \vec{r}|\psi\rangle = c_1\langle \vec{r}|1\rangle + c_2\langle \vec{r}|2\rangle, \quad (174)$$

kde $c_{1,2}$ sú komplexné čísla určujúce veľkosť príspevku jednotlivých vlastných vlnových funkcií.

Doteraz sme, v súlade s Bohrovou interpretáciou, matematicky popisovali fyzikálne stavy práve pomocou špeciálnej triedy amplitúd pravdepodobnosti, pomocou vlnových funkcií. Matematický popis fyzikálneho stavu bol previazaný s meraním fyzikálnej veličiny, menovite polohy. Aj keď takýto prístup cez vlnové funkcie umožňuje sformulovať zákony kvantovej mechaniky a úspešne prevádzať praktické výpočty, je interpretačne nie celkom uspokojivý. Ak veríme, že fyzikálny systém existuje v nejakom stave nezávisle na tom, či a čo budeme na ňom merať, potom základným objektom popisu v kvantovej mechanike by nemala byť amplitúda pravdepodobnosti, ale práve fyzikálny stav. Lenže aký matematický objekt zodpovedá fyzikálnemu stavu v kvantovej mechanike? To nie je až také zložité tipovať. Vlnové funkcie, ktoré dokážu reprezentovať fyzikálne stavy, spĺňajú princíp superpozície. Je preto prirodzené očakávať, že rovnaký princíp musí platiť aj pre samotné stavy: lineárna kombinácia fyzikálnych stavov je opäť fyzikálny stav. Takúto vlastnosť majú prvky vektorového priestoru a preto každému fyzikálnemu stavu priradíme *stavový vektor* z vektorového priestoru fyzikálnych stavov daného fyzikálneho systému.

Vektory sa zvyknú označovať šípkou, ale my zvolíme symboliku, ktorá korešponduje s našou špeciálnou notáciou¹⁸ pre amplitúdy pravdepodobnosti. Vo vzťahu (174) $\langle \vec{r}|$ označuje meranú veličinu a zvyšná časť symbolizuje meraný stav. Je preto prirodzené označiť stavový vektor stavu ψ ako $|\psi\rangle$. Potom rovnica (174) v jazyku stavových vektorov má tvar

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle, \quad (175)$$

kde $|1\rangle$ a $|2\rangle$ sú vektory priradené vlastným stavom veličiny M . Z definície vlastných stavov vyplýva, že $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ a $\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0$, kde druhá séria rovníc vyjadruje fakt, že pravdepodobnosť namerania m_1 , resp. m_2 , v stave $|2\rangle$, resp. $|1\rangle$, je rovná nule.

Symbol $\langle i|\psi\rangle$ označuje amplitúdu namerania m_i v stave $|\psi\rangle$. Keďže nameraním hodnoty m_i sa systém dostane do stavu $|i\rangle$, možno symbol $\langle i|\psi\rangle$ interpretovať aj ako amplitúdu toho, že systém,

¹⁸Azda je toto už vhodné miesto čitateľovi prezradiť, že túto notáciu zaviedol Dirac.

ktorý je v stave $|\psi\rangle$, bude “nájdenný” v stave $|i\rangle$. Takáto interpretácia vedie k tomu, že pre každý vektor $|\psi\rangle$ musí platiť $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Potom pre vlastné vektory budeme požadovať

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0. \quad (176)$$

Toto nabáda k predstave, že vektory $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ tvoria ortonormálnu bázu na 2-dim komplexnom vektorovom priestore V so skalárnym súčinom. Skalárny súčin medzi stavovými vektormi $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ by mal byť definovaný tak, aby jeho hodnota bola rovná amplitúde pravdepodobnosti, že systém v stave $|\psi\rangle$ bude nájdenný v stave $|\phi\rangle$

$$(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle, \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in V. \quad (177)$$

Tento vzťah umožňuje priradiť dobre definovaný matematický objekt aj nameranému stavu $\langle\phi|$. Symbol $\langle\phi|$ môžeme chápať ako *lineárnu formu*¹⁹ na V , priradenú vektoru $|\phi\rangle$ tak, že je splnený vzťah (177). Dirac nazval symbol $\langle |$ *bra-vektor* a symbol $| \rangle$ *ket-vektor*. Tieto názvy sú inšpirované anglickým slovom *bracket* (zátvorka); zložením bra- a ket-vektora vznikne “bracket” $\langle | \rangle$.

5.3 Skalárny súčin a norma na komplexnom vektorovom priestore

Teraz na chvíľu odbočíme a pozrieme sa podrobnejšie na niektoré matematické otázky, na ktoré sme narazili v predošlom texte alebo sa s nimi budeme zaoberať v najbližšom čase. Začneme s definíciou *skalárneho súčinu* na komplexnom vektorovom priestore. Takýto skalárny súčin je zobrazenie $V \times V \rightarrow \mathcal{C}$ s nasledujúcimi vlastnosťami pre $\forall \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in V, \alpha \in \mathcal{C}$:

1. $(\vec{a}, \vec{b} + \alpha\vec{c}) = (\vec{a}, \vec{b}) + \alpha(\vec{a}, \vec{c})$ *linearita v druhom argumente*
2. $(\vec{a}, \vec{b}) = (\vec{b}, \vec{a})^*$ *symetria*
3. $(\vec{a}, \vec{a}) > 0, \quad \forall \vec{a} \neq \vec{0}$ *pozitívna definitnosť*

Komplexný vektorový priestor so skalárnym súčinom nazývame *unitárnym*.

Z prvých dvoch vlastností skalárneho súčinu vyplýva jeho *anti-linearita* v prvom argumente:

$$(\vec{a} + \alpha\vec{b}, \vec{c}) = (\vec{a}, \vec{c}) + \alpha^*(\vec{b}, \vec{c}).$$

Ďalej môžeme ukázať, že

$$(\vec{a}, \vec{a}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{a} = \vec{0}.$$

Pre komplexný skalárny súčin platí *Schwarzova nerovnosť*:

$$|(\vec{a}, \vec{b})|^2 \leq (\vec{a}, \vec{a})(\vec{b}, \vec{b}), \quad \forall \vec{a}, \vec{b} \in V.$$

Dôkaz:

Zadefinujme vektor

$$\vec{x} = \vec{a} - \frac{(\vec{b}, \vec{a})}{(\vec{b}, \vec{b})} \vec{b}.$$

¹⁹Lineárna forma na vektorovom priestore V je lineárne zobrazenie $V \rightarrow \mathcal{R}$, resp. $V \rightarrow \mathcal{Z}$. Všetky lineárne formy na danom vektorovom priestore tvoria tiež vektorový priestor, ktorý sa nazýva *duálnym* vektorovým priestorom, \tilde{V} .

Je to vlastne priemet vektora \vec{a} na smer kolmý k \vec{b} a ležiaci v rovine definovanej vektormi \vec{a} a \vec{b} . Ľahko ukážeme, že pre vektor \vec{x} platí

$$(\vec{b}, \vec{x}) = 0.$$

Vzhľadom na vlastnosti skalárneho súčinu je $(\vec{x}, \vec{x}) \geq 0$. Keď do tejto nerovnosti dosadíme definíciu vektora \vec{x} , dostaneme

$$0 \leq (\vec{x}, \vec{x}) = (\vec{a}, \vec{a}) - \frac{|(\vec{b}, \vec{a})|^2}{(\vec{b}, \vec{b})}.$$

Jednoduchou úpravou potom dospejeme k Schwarzovej nerovnosti

$$|(\vec{b}, \vec{a})|^2 \leq (\vec{a}, \vec{a})(\vec{b}, \vec{b}).$$

Koniec dôkazu.

Na vektorovom priestore môžeme zaviesť *normu vektora*. Takýto vektorový priestor potom nazývame *normovaným*. Norma je zobrazenie $V \rightarrow \mathcal{R}$ s nasledujúcimi vlastnosťami pre $\forall \vec{a}, \vec{b} \in V, \alpha \in \mathcal{C}$:

1. $\|\vec{a}\| > 0, \quad \forall \vec{a} \neq \vec{o}$ *pozitívna definitnosť*
2. $\|\alpha \vec{a}\| = |\alpha| \cdot \|\vec{a}\|$ *linearita*
3. $\|\vec{a} + \vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| + \|\vec{b}\|$ *trojuholníková nerovnosť*

Z prvých dvoch vlastností vyplýva

$$\|\vec{a}\| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{a} = \vec{o}.$$

Ortogonalná báza, ktorej bázové vektory majú jednotkovú dĺžku, sa nazýva *ortonormálna*.

Na unitárnom vektorovom priestore môžeme prirodzene zaviesť normu pomocou skalárneho súčinu

$$\|\vec{a}\| \equiv \sqrt{(\vec{a}, \vec{a})}.$$

Bolo by potrebné sa presvedčiť, že takýto výraz má naozaj vlastnosti normy.

5.4 Ďalšie vlastnosti stavového vektora

Definičný vzťah (177) umožňuje odvodiť základné pravidlá pre počítanie s bra- a ket-vektormi. Uvidíme, že na Diracovu zátvorku sa bez zmien prenesú vlastnosti skalárneho súčinu a preto sa pri výpočtoch zväčša môžeme dívať na ňu ako na symbol skalárneho súčinu.

Dohodneme sa, že lineárnu kombináciu ket-vektorov $|\psi\rangle + \alpha|\phi\rangle$ môžeme v prípade výhodnosti zapísať aj v kompaktnejšej forme $|\psi + \alpha\phi\rangle$. Ak ket-vektorom $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ zodpovedajú bra-vektory $\langle\psi|$ a $\langle\phi|$, aký je bra-vektor zodpovedajúci uvedenej lineárnej kombinácii? Označme ho $\langle\psi + \alpha\phi|$. Potom pre ľubovoľné $|\eta\rangle$ platí

$$\langle\psi + \alpha\phi|\eta\rangle = (|\psi + \alpha\phi\rangle, |\eta\rangle) = (|\psi\rangle + \alpha|\phi\rangle, |\eta\rangle) = (|\psi\rangle, |\eta\rangle) + \alpha^*(|\phi\rangle, |\eta\rangle) = \langle\psi|\eta\rangle + \alpha^*\langle\phi|\eta\rangle.$$

Z toho vyplýva, že

$$\langle\psi + \alpha\phi| = \langle\psi| + \alpha^*\langle\phi|. \tag{178}$$

Podobne môžeme odvodiť nasledovné vzťahy pre Diracovu zátvorku

$$\langle \psi | \alpha \phi \rangle = \alpha \langle \psi | \phi \rangle, \quad \langle \alpha \psi | \phi \rangle = \alpha^* \langle \psi | \phi \rangle, \quad (179)$$

$$\langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (180)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (181)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle \text{ je nulový vektor}, \quad (182)$$

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle, \quad (183)$$

kde $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V, \alpha \in \mathcal{C}$.

Keďže sme na priestore stavových vektorov definovali skalárny súčin, môžeme pomocou neho zaviesť aj normu

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (184)$$

Všimnime si, že norma vektora sa nezmení, ak ho vynásobíme fázovým faktorom $\exp(i\alpha)$, kde α je ľubovoľné reálne číslo. Vzhľadom na to, že pre všetky stavové vektory platí $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, potom tiež $\| |\psi\rangle \| = 1$. To znamená, že stavy fyzikálnej sústavy sú opísané stavovými vektormi s jednotkovou dĺžkou, tzv. *normovanými vektormi*. Každý vektor môžeme normovať podľa schémy

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{|\psi\rangle}{\| |\psi\rangle \|} = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}}. \quad (185)$$

Každý vektor $|\psi\rangle \in V$ môžeme zapísať ako lineárnu kombináciu vlastných vektorov veličiny M , ktoré, vzhľadom na (176), tvoria ortonormálnu bázu priestoru V . To znamená

$$|\psi\rangle = \alpha_1 |1\rangle + \alpha_2 |2\rangle. \quad (186)$$

Koeficient α_i dotaneme, keď vzťah (186) vynásobíme bra-vektorom $\langle i |$

$$\alpha_i = \langle i | \psi \rangle, \quad i = 1, 2. \quad (187)$$

Z tohoto vzťahu je tiež zrejmé, že $|\alpha_1|^2$ a $|\alpha_2|^2$ udávajú pravdepodobnosti, že v stave $|\psi\rangle$ nameriame hodnoty m_1 a m_2 veličiny M . Inými slovami pravdepodobnosti, že systém bude nájdený v stave $|1\rangle$ alebo $|2\rangle$. Z normovacej podmienky $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ (ale aj z interpretačného kontextu) vyplýva, že

$$|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1. \quad (188)$$

Keď dosadíme (187) do (186), dostaneme

$$|\psi\rangle = |1\rangle \langle 1 | \psi \rangle + |2\rangle \langle 2 | \psi \rangle = \left(\sum_{i=1,2} |i\rangle \langle i| \right) |\psi\rangle.$$

Z porovnania prvého a posledného výrazu v tejto rovnici vyplýva, že objekt v okrúhlych zátvorkách musí zodpovedať jednotkovému operátoru²⁰

$$\sum_{i=1,2} |i\rangle \langle i| = \hat{\mathbf{I}}. \quad (189)$$

²⁰Pripomeňme, že operátorom na vektorovom priestore V nazývame zobrazenie $V \rightarrow V$, ktoré vektoru priradí vektor.

Toto je splnené vtedy, keď sumujeme cez všetky vektory bázy vektorového priestoru. V obrátenom zmysle by sme túto rovnicu mohli chápať aj ako test toho, či máme k dispozícii všetky bázové vektory. Preto sa rovnica (189) zvykne nazývať aj *podmienkou úplnosti* systému ortonormovaných vektorov $\{|i\rangle\}_{i=1}^N$.

Čo dostaneme, ak by sme v (189) nesumovali cez všetky vektory bázy? Ukazuje sa, že

$$\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{P}_2 = |2\rangle\langle 2| \quad (190)$$

sú *projekčné* operátory, ktoré robia projekciu ľubovoľného vektora $|\psi\rangle \in V$ do smeru $|1\rangle$, resp. $|2\rangle$

$$\hat{P}_1|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle = \alpha_1|1\rangle, \quad \hat{P}_2|\psi\rangle = |2\rangle\langle 2|\psi\rangle = \alpha_2|2\rangle.$$

Ľahko sa dá ukázať, že operátory \hat{P}_1 a \hat{P}_2 spĺňajú všeobecné vlastnosti projekčných operátorov

$$\hat{P}_1 + \hat{P}_2 = \hat{\mathbf{I}}, \quad \hat{P}_{1,2}^2 = \hat{P}_{1,2}, \quad \hat{P}_1\hat{P}_2 = \hat{P}_2\hat{P}_1 = 0. \quad (191)$$

5.5 Stredné a vlastné hodnoty fyzikálnych veličín

Predstavme si, že sme na systéme v stave $|\psi\rangle$ vykonali veľmi (nekonečne) veľa meraní veličiny M . Hodnotu m_1 sme dostali N_1 -krát a hodnotu m_2 N_2 -krát. To znamená, že pri jednotlivom akte merania je pravdepodobnosť namerania hodnoty m_1 rovná $P_1 = N_1/N$ a pravdepodobnosť namerania hodnoty m_2 je rovná $P_2 = N_2/N$, kde $N = N_1 + N_2$. Stredná hodnota veličiny M , ktorú dostaneme na základe týchto opakovaných meraní, je

$$\langle M \rangle = \frac{N_1 m_1 + N_2 m_2}{N_1 + N_2} = P_1 m_1 + P_2 m_2. \quad (192)$$

Ak by sme vedeli, v akom stave $|\psi\rangle$ sa fyzikálny systém nachádza, vedeli by sme strednú hodnotu veličiny M predpovedať s využitím (187)

$$\langle M \rangle = m_1 |\alpha_1|^2 + m_2 |\alpha_2|^2. \quad (193)$$

Pri vlnových funkciách sme našli spôsob výpočtu strednej hodnoty polohy, hybnosti a energie pomocou diferenciálnych operátorov priradených týmto veličinám. Naviac sme prišli k záveru, že vo fyzikálnom experimente sa dajú namerat' len vlastné hodnoty týchto operátorov. Vychádzajúc z tejto skúsenosti, priradíme veličine M lineárny²¹ operátor \hat{M} taký, aby platilo

$$\begin{aligned} \hat{M}|1\rangle &= m_1|1\rangle, \\ \hat{M}|2\rangle &= m_2|2\rangle. \end{aligned} \quad (194)$$

Aj v tomto prípade zavedieme štandardné názvoslovie: $|i\rangle$ sú vlastné vektory a m_i zodpovedajúce vlastné hodnoty veličiny (operátora) \hat{M} . Fyzikálne veličiny, ktoré sa dajú merať, sa v kvantovej mechanike zvyknú nazývať *pozorovateľné*.

Pozrime sa, čomu je rovná amplitúda²² $\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle$. Z rovníc (194) a ortonormality vektorov $|i\rangle$ dostaneme

$$\langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = (\alpha_1^* \langle 1| + \alpha_2^* \langle 2|) \hat{M} (\alpha_1 |1\rangle + \alpha_2 |2\rangle) = m_1 |\alpha_1|^2 + m_2 |\alpha_2|^2. \quad (195)$$

²¹Pre každý lineárny operátor \hat{A} platí: $\hat{A}|\psi + \alpha\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \alpha\hat{A}|\phi\rangle$.

²²Zápis $\langle \psi | \hat{X} | \phi \rangle$ je ekvivalentný zápisu $\langle \psi | \hat{X} \phi \rangle$. Z toho tiež vyplýva, že $\langle \psi | \hat{X} | \phi \rangle^* = \langle \hat{X} \phi | \psi \rangle$.

Porovnaním (195) s (193) dospejeme k záveru, že strednú hodnotu veličiny M v stave $|\psi\rangle$ vieme pomocou operátora \hat{M} vyjadriť nasledovným spôsobom

$$\langle M \rangle = \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle. \quad (196)$$

Netreba azda diskutovať o tom, že meraná veličina, a teda aj jej stredná hodnota, musia byť reálne čísla, $\langle M \rangle \in \mathcal{R}$. To znamená, že $\langle M \rangle = \langle M \rangle^*$. Prepíšme túto rovnicu pomocou (196)

$$\langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle^*. \quad (197)$$

Súčasne ale, pravá strana je rovná $\langle \hat{M} \psi | \psi \rangle$, takže

$$\langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = \langle \hat{M} \psi | \psi \rangle. \quad (198)$$

Všimnime si, že ak (197) platí pre stavové (normované) vektory, potom platí pre všetky vektory z daného vektorového priestoru.

Ukážeme, že z $\langle M \rangle = \langle M \rangle^*$ vyplýva obecnější podmienka. Rovnica (197) musí byť splnená pre každý vektor $e^{ia}|\psi_1\rangle + e^{ib}|\psi_2\rangle$, kde $|\psi_{1,2}\rangle$ sú ľubovoľné stavové vektory a a, b sú ľubovoľné reálne čísla. Po malých úpravách dostaneme

$$e^{i(b-a)}[\langle \psi_1 | \hat{M} | \psi_2 \rangle - \langle \psi_2 | \hat{M} | \psi_1 \rangle^*] = e^{i(a-b)}[\langle \psi_1 | \hat{M} | \psi_2 \rangle^* - \langle \psi_2 | \hat{M} | \psi_1 \rangle].$$

Keďže voľba parametrov a a b je nezávislá od výberu vektorov $|\psi_{1,2}\rangle$, táto rovnica môže byť splnená pre ľubovoľné a, b len vtedy, keď výrazy v hranatých zátvorkách budú rovné nule. Pretože ide o vzájomne komplexne združené výrazy, môžeme túto požiadavku splniť jednou rovnicou

$$\langle \psi_1 | \hat{M} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{M} | \psi_1 \rangle^*. \quad (199)$$

Pravú stranu môžeme tiež prepísať pomocou

$$\langle \psi_2 | \hat{M} | \psi_1 \rangle^* = \langle \hat{M} \psi_1 | \psi_2 \rangle. \quad (200)$$

Lineárny operátor spĺňajúci vzťah (199) sa nazýva *Hermitov operátor*. Prišli sme teda k záveru, že pozorovateľným v kvantovej mechanike sú priradené hermitovské operátory.

Nie každý lineárny operátor je však hermitovský. Vo všeobecnosti, ak k danému lineárnemu operátoru \hat{A} existuje operátor \hat{B} taký, že pre obecné vektory $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ je $\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{B} | \psi \rangle$, potom operátor \hat{B} nazývame *hermitovskými združeným* k \hat{A} a značíme \hat{A}^\dagger

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle. \quad (201)$$

Ekvivalentná podoba tohoto vzťahu je

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | \phi \rangle. \quad (202)$$

Aký bra-vektor $\langle \phi' |$ priradíme ket-vektoru $|\phi'\rangle \equiv \hat{A}|\phi\rangle$? Keď ľavú stranu rovnice (201) prepíšeme v tvare $\langle \hat{A}\phi | \psi \rangle = \langle \phi' | \psi \rangle$ a porovnáme s pravou stranou (201), prídeme k záveru, že

$$|\phi'\rangle = \hat{A}|\phi\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \phi' | = \langle \phi | \hat{A}^\dagger. \quad (203)$$

Podobne sa dajú ukázať nasledovné vlastnosti operácie hermitovského združenia

$$(\alpha \hat{A})^\dagger = \alpha^* \hat{A}^\dagger, \quad (204)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \quad (205)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger, \quad (206)$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}. \quad (207)$$

Operátor \hat{A} je hermitovský práve vtedy, keď $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

Pozrime sa bližšie na vlastnosti hermitovských operátorov. Sformulujeme a dokážeme tri vety o hermitovských operátoroch.

1. Všetky vlastné hodnoty hermitovského operátora sú reálne čísla.

Dôkaz:

Nech \hat{A} je hermitovský operátor a $|a_i\rangle$ jeho vlastné vektory²³ zodpovedajúce vlastným hodnotám a_i

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad i = 1, 2.$$

Odtiaľ

$$\underbrace{\langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle}_{\langle A \rangle_i} = a_i \underbrace{\langle a_i | a_i \rangle}_{>0}.$$

Keďže stredná hodnota hermitovského operátora je reálne číslo, sú reálne aj vlastné hodnoty a_i .

2. Vlastné vektory hermitovského operátora prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám sú ortogonálne.

Dôkaz:

Z rovnice pre vlastné vektory vyplývajú vzťahy

$$\langle a_2 | \hat{A} | a_1 \rangle = a_1 \langle a_2 | a_1 \rangle, \quad \underbrace{\langle a_1 | \hat{A} | a_2 \rangle^*}_{\langle a_2 | \hat{A} | a_1 \rangle} = a_2 \underbrace{\langle a_1 | a_2 \rangle^*}_{\langle a_2 | a_1 \rangle}.$$

Odcítaním týchto dvoch rovníc dostaneme

$$0 = (a_1 - a_2) \langle a_2 | a_1 \rangle.$$

Keďže $a_1 \neq a_2$, je

$$\langle a_2 | a_1 \rangle = 0.$$

Vzhľadom na to, že $|a_i\rangle \neq |0\rangle$, vektory $|a_1\rangle$ a $|a_2\rangle$ sú vzájomne ortogonálne.

3. Všetky vlastné vektory hermitovského operátora tvoria bázu vektorového priestoru. (teoréma úplnosti)

Namiesto dôkazu ponúkame čitateľovi, aby si premyslel nasledovné tvrdenie. Ak v žiadnom mysliteľnom stave, v ktorom sa môže daný fyzikálny systém ocitnúť, nenameriame takú hodnotu veličiny A , ktorá by nebola vlastnou hodnotou operátora \hat{A} , potom je každý fyzikálny stav daného systému vyjadriteľný ako lineárna superpozícia vlastných vektorov operátora \hat{A} .

Definujme *komutátor* dvoch operátorov \hat{A} a \hat{B} nasledovne

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (208)$$

Komutátory majú nasledovné vlastnosti

1.

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}; \quad (209)$$

²³Z definície medzi vlastné vektory nepatrí nulový vektor.

2. *Jacobiho identita:*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0; \quad (210)$$

3. **Ak $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, potom operátory \hat{A} a \hat{B} majú spoločné vlastné vektory;**

Dôkaz:

Nech $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$. Potom

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle$$

To ale znamená, že vektor $\hat{B}|a_i\rangle$ je tiež vlastným vektorom operátora \hat{A} prislúchajúcim vlastnej hodnote a_i . Ak \hat{A} má nedegenerované spektrum, potom $\hat{B}|a_i\rangle$ musí byť násobkom vektora $|a_i\rangle$, čiže

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle,$$

kde b_i je príslušný koeficient úmernosti. Z tejto rovnice je zrejmé, že b_i je súčasne vlastná hodnota operátora \hat{B} prislúchajúca jeho vlastnému vektoru $|a_i\rangle$.

4. **Ak \hat{A} a \hat{B} majú spoločné všetky vlastné vektory a ak tieto tvoria úplný systém, potom $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.**

Dôkaz:

Nech $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ a $\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle$. Potom pre všetky $|a_i\rangle$ platí

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = a_i b_i |a_i\rangle, \quad \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i b_i |a_i\rangle.$$

Odtiaľ vyplýva, že $[\hat{A}, \hat{B}]|a_i\rangle = |0\rangle$. Potom ale

$$[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = |0\rangle$$

pre všetky vektory $|\psi\rangle$, ktoré sú lineárnou kombináciou vektorov $|a_i\rangle$. Ak vektory $|a_i\rangle$ tvoria úplný systém, t.j. bázu daného vektorového priestoru, potom $[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = |0\rangle$ pre všetky vektory vektorového priestoru a teda $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Poznamenaajme, že vety 3 a 4 platia aj v prípade degenerovaných spektier.

5.6 Princíp neurčitosti

Uvažujme fyzikálny systém v stave $|\psi\rangle$ a dve pozorovateľné A a B . Opakovaným meraním týchto veličín v stave $|\psi\rangle$ dostaneme pre každú z nich súbor čísel pozostávajúci z vlastných hodnôt týchto veličín. Relatívne zastúpenie jednotlivých vlastných hodnôt v týchto súboroch bude závisieť na meranom stave. Stredné hodnoty každej z veličín budú rovné

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad \langle B \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle.$$

Rozptyl nameraných hodnôt charakterizuje stredná kvadratická odchylka od strednej hodnoty

$$(\delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \quad (\delta B)^2 = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2.$$

Vo všeobecnosti sú $(\delta A)^2$ a $(\delta B)^2$ nenulové; to znamená, že v danom stave nie sú hodnoty veličín A a B dané jednoznačne. Príslušné stredné kvadratické odchylky charakterizujú veľkosť “rozmazania” týchto veličín v tomto stave. Prirodzene sa ponúka otázka, či pre daný fyzikálny systém existujú stavy, v ktorých hodnoty veličín A a B sú súčasne určené s rozptylom menším než nejaké

dopredu stanovené číslo alebo či dokonca existuje stav, v ktorom $(\delta A)^2 = (\delta B)^2 = 0$. Ukazuje sa, že odpoveď závisí na hodnote komutátora $[\hat{A}, \hat{B}]$.

Uvažujme dve pozorovateľné A a B , ktoré majú spoločný systém vlastných stavov $\{|a_i\rangle\}$, čiže $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Nech $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$, $\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle$. Nech sa fyzikálny systém nachádza v stave $|a_i\rangle$. Ak zmeriame v tomto stave veličinu A , dostaneme so 100%-nou pravdepodobnosťou hodnotu a_i . Ak by sme zmerali v tom istom stave $|a_i\rangle$ aj veličinu B , so 100%-nou pravdepodobnosťou nameriame hodnotu b_i . To znamená, že $(\delta A)^2 = (\delta B)^2 = 0$. Toto ale určite neplatí pre netriviálne lineárne kombinácie stavov $|a_i\rangle$, ktoré sú podľa princípu superpozície tiež možnými fyzikálnymi stavmi nášho systému. Inak povedané, ak $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, potom síce vo väčšine stavov danej fyzikálnej sústavy sú $(\delta A)^2$ a $(\delta B)^2$ rôzne od nuly, ale existujú aj stavy, v ktorých obidve veličiny A a B nadobúdajú jednoznačne stanovené hodnoty. V týchto stavoch opakovanie experimentu vždy povedie na rovnaké²⁴ hodnoty veličín A a B .

To čo v kvantovej mechanike platí len pre vlastné stavy komutujúcich operátorov, v klasickej fyzike predpokladáme pre ľubovoľné fyzikálne veličiny merané na ľubovoľnom fyzikálnom systéme v ľubovoľnom stave. V klasickej fyzike predpokladáme, že nech sa fyzikálny systém nachádza v hocikakom stave, hodnoty všetkých fyzikálnych veličín sú jednoznačne dané. Pri opakovanom vykonaní toho istého experimentu síce neočakávame, že vždy nameriame tú istú hodnotu, ale túto nejednoznačnosť chápeme len ako dôsledok nedokonalosti našich prístrojov a zmyslov. Nepresnosť spôsobená touto nedokonalosťou sa prejavuje v rozptyle (stredná kvadratická odchylka) nameranej hodnoty danej veličiny pri opakovaní experimentu. Klasická fyzika však nekladie principiálne prekážky tomu, aby sme ľubovoľne zlepšovali presnosť našich meraní na všetkých veličinách meraných v danom stave fyzikálneho systému.

Toto však neplatí obecně pre kvantovú mechaniku. Nech operátory \hat{A} a \hat{B} nemajú spoločný systém vlastných vektorov, t.j. nech $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. V tom prípade, ak sa fyzikálny systém nachádza v stave $|a_i\rangle$, nameriame síce zodpovedajúcu hodnotu veličiny A so 100%-nou pravdepodobnosťou, $(\delta A)^2 = 0$, ale opakovaným meraním veličiny B v tomto istom stave dostaneme $(\delta B)^2 > 0$, pretože vektor $|a_i\rangle$ je netriviálnou lineárnou kombináciou vlastných vektorov operátora \hat{B} .

Toto pozorovanie je základom *princípu neurčitosti*, ktorý platí v kvantovej mechanike a na rozdiel od bežného sveta okolo nás má v mikrosvete neprehliadnuteľné dôsledky. Ide zhruba o to, že pre daný fyzikálny systém neexistujú fyzikálne stavy, v ktorých by “rozmazanie” meraných hodnôt dvoch nekomutujúcich veličín bolo pre obidve veličiny ľubovoľne malé. Ak nájdeme stavy, v ktorých sa znižuje “rozmazanie” pre jednu z nekomutujúcich veličín, narastá “rozmazanie” pre druhú z nich a naopak. Tento princíp má presnú matematickú formuláciu. Ak A a B sú dve fyzikálne veličiny popisujúce jeden fyzikálny systém, potom

$$\delta A \cdot \delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|, \quad (211)$$

kde $\delta X = (\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2)^{1/2}$ je stredná kvadratická odchylka veličiny X od jej strednej hodnoty $\langle X \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle$ v stave $|\psi\rangle$.

Dôkaz:

Keďže \hat{A} a \hat{B} sú hermitovské operátory, sú $\langle A \rangle$ a $\langle B \rangle$ reálne čísla. Potom aj $\hat{A} - \langle A \rangle$ a $\hat{B} - \langle B \rangle$ sú hermitovské operátory. Vzhľadom na to môžeme vykonať nasledovnú úpravu

$$(\delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi_A | \psi_A \rangle,$$

kde $|\psi_A\rangle = (\hat{A} - \langle A \rangle)|\psi\rangle$. Obdobne $(\delta B)^2 = \langle \psi_B | \psi_B \rangle$, kde $|\psi_B\rangle = (\hat{B} - \langle B \rangle)|\psi\rangle$. Pomocou

²⁴V rámci presnosti merania.

Schwarzovej nerovnosti dostaneme

$$(\delta A)^2(\delta B)^2 = \langle \psi_A | \psi_A \rangle \langle \psi_B | \psi_B \rangle \geq |\langle \psi_A | \psi_B \rangle|^2.$$

Súčin dvoch hermitovských operátorov sa dá napísať v tvare²⁵ $\hat{X}\hat{Y} = \frac{1}{2}\{\hat{X}, \hat{Y}\} + \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{Y}]$. Operátory $\{\hat{X}, \hat{Y}\}$ a $\frac{1}{i}[\hat{X}, \hat{Y}]$ sú hermitovské, takže ich stredné hodnoty v ľubovoľnom stave sú reálne čísla. Označme teraz $\hat{X} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle$ a $\hat{Y} \equiv \hat{B} - \langle B \rangle$. Potom

$$\langle \psi_A | \psi_B \rangle = \langle \psi | \hat{X}\hat{Y} | \psi \rangle = \frac{1}{2} \underbrace{\langle \psi | \{\hat{X}, \hat{Y}\} | \psi \rangle}_{\in \mathcal{R}} + \frac{i}{2} \underbrace{\langle \psi | \frac{1}{i}[\hat{X}, \hat{Y}] | \psi \rangle}_{\in \mathcal{R}},$$

takže

$$|\langle \psi_A | \psi_B \rangle|^2 = \frac{1}{4} \underbrace{\langle \psi | \{\hat{X}, \hat{Y}\} | \psi \rangle^2}_{\geq 0} + \frac{1}{4} \underbrace{\langle \psi | \frac{1}{i}[\hat{X}, \hat{Y}] | \psi \rangle^2}_{\geq 0} \geq \frac{1}{4} \langle \psi | \frac{1}{i}[\hat{X}, \hat{Y}] | \psi \rangle^2.$$

Vzhľadom na to, že $[\hat{X}, \hat{Y}] = [\hat{A}, \hat{B}]$, môžeme písať

$$\delta A \cdot \delta B \geq |\langle \psi_A | \psi_B \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \frac{1}{i}[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|,$$

čím sme dokázali platnosť princípu neurčitosti (211).

Princíp neurčitosti sme dokázali pre ľubovoľné dva hermitovské operátory \hat{A} a \hat{B} . I z neho vidíme, že pokiaľ $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, je $\delta A \cdot \delta B \geq 0$, čiže dajú sa nájsť stavy daného fyzikálneho systému, v ktorých δA a δB nadobúdajú ľubovoľne malé hodnoty, včítane nulových.

Aplikujme teraz princíp neurčitosti na konkrétny prípad operátorov, s ktorými sme sa stretli pri vlnových funkciách. Predpokladáme, že diferenciálne operátory, ktoré boli v prípade vlnových funkcií priradené fyzikálnym veličinám, sú reprezentantmi hermitovských operátorov na vlnových funkciách, ktoré sú obrazom stavových vektorov. Ako operátor polohy v jednom rozmere bola identifikovaná samotná súradnica, $\hat{x} = x$, a operátor pre x -ovú zložku hybnosti má tvar $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$. Spočítajme teraz komutátor $[\hat{x}, \hat{p}_x]$. Pre ľubovoľnú vlnovú funkciu $\psi(x)$ platí

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = \left[x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x \right] \psi(x) = i\hbar\psi(x).$$

Odtiaľ vyplýva, že

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (212)$$

To znamená, že operátory \hat{x} a \hat{p}_x nekomutujú a teda neexistujú stavy, v ktorých by boli súčasne jednoznačne dané hodnoty x aj p_x . Keď dosadíme (212) do (211), dostaneme *Heisenbergov princíp neurčitosti*

$$\delta x \cdot \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (213)$$

Obdobne dostaneme

$$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \delta y \cdot \delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (214)$$

a

$$[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \delta z \cdot \delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (215)$$

Na strane druhej, ľahko odvodíme, že

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0. \quad (216)$$

²⁵Definujme *antikomutátor* $\{\hat{X}, \hat{Y}\} \equiv \hat{X}\hat{Y} + \hat{Y}\hat{X}$.

5.7 Maticové reprezentácie

Nech $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$ je rozklad vektora $|\psi\rangle$ v ortonormálnej báze $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ vlastných vektorov operátora \hat{M} . Vidíme, že pri fixovanej báze je daný vektor jednoznačne zadaný koeficientami c_1 a c_2 . Týmto koeficientom tiež hovoríme súradnice vektora $|\psi\rangle$ v báze $\{|1\rangle, |2\rangle\}$. Vektor $|\psi\rangle$ môžeme teda v danej báze reprezentovať stĺpcovou maticou obsahujúcou príslušné súradnice

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (217)$$

Pôsobením lineárneho operátora \hat{A} sa zobrazí vektor $|\psi\rangle$ na $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$. Vo fixovanej báze je toto zobrazenie definované, ak vieme, ako sa budú transformovať súradnice vektora $|\psi\rangle$

$$d_i \equiv \langle i|\phi\rangle = \langle i|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{j=1}^2 \langle i|\hat{A}|j\rangle \langle j|\psi\rangle = \sum_{j=1}^2 A_{ij}c_j, \quad (218)$$

kde $A_{ij} \equiv \langle i|\hat{A}|j\rangle$. Pri odvodení tohoto vzťahu sme použili trik²⁶ s vložením jednotkového operátora $\sum_{j=1}^2 |j\rangle\langle j|$. Vidíme teda, že pôsobenie lineárneho operátora \hat{A} je reprezentované maticou A_{ij}

$$\hat{A} \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}. \quad (219)$$

Transformácia (218) v maticovej podobe má tvar

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (220)$$

Vyjadreniam stavových vektorov a lineárnych operátorov pomocou matíc (217) a (219) hovoríme *maticová reprezentácia*.

Ukážme si, ako sa pomocou súradníc realizuje skalárny súčin (Diracova zátvorka) dvoch vektorov, napríklad už spomenutých $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$

$$\langle \phi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 \langle \phi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 d_i^* c_i = (d_1^*, d_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (221)$$

Potom tiež

$$\langle \phi|\hat{B}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \langle \phi|i\rangle \langle i|\hat{B}|j\rangle \langle j|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 d_i^* B_{ij} c_j = (d_1^*, d_2^*) \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (222)$$

Hľadanie vlastných vektorov a vlastných hodnôt operátora \hat{A} znamená v maticovej reprezentácii riešenie maticovej rovnice

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \quad (223)$$

²⁶Tento trik je však možné použiť len ak \hat{A} je lineárny operátor.

kde v_i sú súradnice vlastného vektora a λ zodpovedajúca vlastná hodnota. Túto maticovú rovnicu môžeme upraviť do tvaru

$$\begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (224)$$

Vidíme, že ide o sústavu dvoch lineárnych homogénnych rovníc o dvoch neznámych v_1, v_2 . Navyiac nie sú úplne určené koeficienty týchto rovníc, pretože nepoznáme λ . Koeficient λ je však určujúci prvok pri stanovení determinantu matice v (224). Ak je tento determinant rôzny od nuly, potom táto sústava rovníc bude mať iba triviálne riešenie $v_1 = v_2 = 0$. Ak sme už spomínali, toto z definície nepovažujeme za vlastný vektor. Netriviálne riešenie dostaneme iba vtedy, keď determinant bude rovný nule

$$\left\| \begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda \end{pmatrix} \right\| = (A_{11} - \lambda)(A_{22} - \lambda) - A_{12}A_{21} = 0. \quad (225)$$

Ide o kvadratickú rovnicu v λ a teda má maximálne dve riešenia. Pre každé riešenie λ môžeme potom nájsť zodpovedajúce v_1 a v_2 . Z rovnice (224) je zrejmé, že ak riešením pre dané λ bude nejaká dvojica (v_1, v_2) , potom ním bude aj dvojica (kv_1, kv_2) , kde k je ľubovoľné číslo. Koeficient k môžeme fixovať požiadavkou, aby vektor (v_1, v_2) bol normovaný, $v_1^2 + v_2^2 = 1$.

Ak budeme uvažovať maticovú reprezentáciu špeciálne operátora \hat{M} , pre ktorý $|1\rangle$ a $|2\rangle$ sú vlastné vektory zodpovedajúce vlastným hodnotám m_1 a m_2 , dostaneme

$$M_{ij} = \langle i | \hat{M} | j \rangle = m_i \delta_{ij} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix}. \quad (226)$$

To znamená, že lineárnym operátorom v báze ich vlastných vektorov zodpovedá diagonálna matica s vlastnými hodnotami na diagonále.

Nájdime maticu, ktorá zodpovedá hermitovsky združenému operátoru k \hat{A}

$$A_{ij}^\dagger = \langle i | \hat{A}^\dagger | j \rangle = \langle j | \hat{A} | i \rangle^* = A_{ji}^*.$$

To znamená, že operátor \hat{A}^\dagger je reprezentovaný transponovanou a komplexne združenou maticou k matici, ktorá reprezentuje operátor \hat{A}

$$\hat{A}^\dagger \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}. \quad (227)$$

V prípade, že \hat{A} je hermitovský operátor, musí platiť $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Z rovnosti matíc (219) a (227) vyplýva, že matica reprezentujúca hermitovský operátor musí mať tvar

$$\hat{A} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} r_1 & z \\ z^* & r_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & \Re(z) + i\Im(z) \\ \Re(z) - i\Im(z) & r_2 \end{pmatrix}, \quad (228)$$

kde r_1, r_2 sú reálne čísla a $z = \Re(z) + i\Im(z)$ je komplexné číslo. Na zadanie 2×2 hermitovskej matice teda potrebujeme štyri nezávislé reálne parametre na rozdiel od ôsmich reálnych parametrov pre

obecnú 2×2 komplexnú maticu. Každú 2×2 hermitovskú maticu možno vyjadriť ako lineárnu kombináciu jednotkovej matice $\mathbf{I}^{(2)} = \text{diag}(1, 1) \equiv \sigma_0$ a *Pauliho matíc*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (229)$$

Naozaj²⁷, ak (a_0, a_1, a_2, a_3) sú štyri reálne parametre, potom

$$\sum_{i=0}^3 a_i \sigma_i = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \quad (230)$$

je hermitovská matica. Všimnime si, že stopy všetkých Pauliho matíc sú nulové, zatiaľčo $\text{Tr}(\sigma_0) = \text{Tr} \mathbf{I} = 2$.

Vzhľadom na špeciálne postavenie Pauliho matíc (bázové vektory) v priestore všetkých 2×2 hermitovských matíc, mohlo by byť užitočné nájsť ich vlastné hodnoty a vektory. Začnime s prvou Pauliho maticou. Čitateľ sa ľahko presvedčí, že platí

$$\sigma_1 : \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ -b \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} b \\ -b \end{pmatrix}, \quad (231)$$

kde a, b sú ľubovoľné komplexné čísla rôzne od nuly. Vlastné vektory sú ortogonálne, ako sa dá od hermitovskej matice očakávať

$$(a^*, a^*) \begin{pmatrix} b \\ -b \end{pmatrix} = 0.$$

Ak zvolíme $a = b = 1/\sqrt{2}$, vlastné vektory budú normované. Pre druhú Pauliho maticu nájdeme

$$\sigma_2 : \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ ia \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} a \\ ia \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ -ib \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} b \\ -ib \end{pmatrix}, \quad (232)$$

kde $a, b \in \mathcal{C} \setminus \{0\}$. Opäť

$$(a, ia)^* \begin{pmatrix} b \\ -ib \end{pmatrix} = 0$$

a normované vlastné vektory dostaneme, keď napríklad $a = b = 1/\sqrt{2}$. Ostáva tretia Pauliho matica

$$\sigma_3 : \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}, \quad (233)$$

kde $a, b \in \mathcal{C} \setminus \{0\}$. Aj tieto vektory sú ortogonálne a najjednoduchšia voľba pre normované vlastné vektory je $a = b = 1$. Vidíme, že každá z Pauliho matíc má dve vlastné hodnoty ± 1 a k tomu prislúchajúce dva vlastné vektory. To je v súlade so skutočnosťou, že ide o hermitovské operátory na dvojrozmernom vektorovom priestore stavov.

²⁷Podľa (230) Hermitove 2×2 matice tvoria štvorrozmerný reálny vektorový priestor a $\{\mathbf{I}^{(2)}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ tvoria bázu tohoto priestoru. Tento vektorový priestor si ale nesmieme mýliť s dvojrozmerným priestorom stavov, na ktorom operátor reprezentovaný maticou (230) pôsobí.

Štvrtým vektorom v báze priestoru 2×2 hermitovských matic je jednotková matica. Nechali sme si ju na záver, pretože svojimi vlastnosťami sa od Pauliho matic trochu odlišuje. Už sme poznamenali, že má odlišnú stopu. Teraz si ukážeme, že odlišnosti sa týkajú aj vlastných hodnôt a vektorov. Na ich nájdenie potrebujeme vyriešiť rovnicu

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (234)$$

Tento systém homogénnych rovníc bude mať netriviálne riešenie, len ak

$$\left\| \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 0 \\ 0 & 1 - \lambda \end{pmatrix} \right\| = (1 - \lambda)^2 = 0.$$

Táto kvadratická rovnica má len jeden dvojnásobný koreň, $\lambda = 1$. Na druhej strane vlastným vektorom je každý vektor z dvojrozmerného priestoru stavov. V takejto situácii hovoríme, že vlastná hodnota $\lambda = 1$ je *degenerovaná*. Spomedzi vlastných vektorov jednotkovej matice môžeme vybrať práve dva, ktoré budú navzájom kolmé, napr. $(a, 0)^T$ a $(0, b)^T$. Preto hovoríme o *dvojnásobnej degenerácii* príslušnej vlastnej hodnoty. Keď chceme mať tieto vlastné vektory normované, tak môžeme zvoliť $(1, 0)^T$ a $(0, 1)^T$. Na tomto príklade vidíme, že i v prípade degenerovanej vlastnej hodnoty je možné takýmto spôsobom naplniť obsah tvrdenia, že hermitovské operátory majú navzájom kolmé vlastné vektory.

5.8 Prechod do inej bázy

Unitárnym nazveme lineárny operátor \hat{A} , ktorý spĺňa podmienku

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = 1. \quad (235)$$

V maticovej reprezentácii má táto podmienka tvar

$$\sum_{j=1}^2 A_{ij} A_{kj}^* = \delta_{ik}, \quad (236)$$

kde $A_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle$ a $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ je ortonormálna báza.

Uvažujme na dvojrozmernom vektorovom priestore dve ortonormálne bázy, $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ a $\{|1'\rangle, |2'\rangle\}$. Vektory čiarkovanej bázy sa dajú vyjadriť pomocou vektorov nečiarkovanej bázy a naopak

$$|i'\rangle = \sum_{j=1}^2 |j\rangle \langle j | i'\rangle = \sum_{j=1}^2 U_{ji} |j\rangle, \quad (237)$$

kde transformačná matica U má tvar

$$U_{ij} \equiv \langle i | j'\rangle. \quad (238)$$

Keď potom uvažujeme súradnice vektora $|\psi\rangle$ v nečiarkovanej a čiarkovanej báze, $c_i = \langle i | \psi\rangle$ a $c'_i = \langle i' | \psi\rangle$, dostaneme transformačný vzťah

$$c'_i = \langle i' | \psi\rangle = \sum_{j=1}^2 \langle i' | j\rangle \langle j | \psi\rangle = \sum_{j=1}^2 \langle j | i'\rangle^* \langle j | \psi\rangle = \sum_{j=1}^2 U_{ji}^* c_j = \sum_{j=1}^2 U_{ij}^\dagger c_j. \quad (239)$$

Maticu U_{ij} môžeme chápať ako nečiarkovanú maticovú reprezentáciu takého operátora \hat{U} , ktorý vektoru $|i\rangle$ priraduje vektor $|i'\rangle$

$$|i'\rangle = \hat{U}|i\rangle. \quad (240)$$

Potom z rovníc (238) a (240) dostaneme

$$U_{ij} = \langle i|j'\rangle = \langle i|\hat{U}|j\rangle. \quad (241)$$

Operátor \hat{U} je unitárny, rovnako ako matica U_{ij} , ktorá ho reprezentuje

$$(UU^\dagger)_{ik} = \sum_{j=1}^2 U_{ij}U_{kj}^* = \sum_{j'=1}^2 \langle i|j'\rangle \langle j'|k\rangle = \langle i|k\rangle = \delta_{ik}. \quad (242)$$

V čiarkovanej báze zodpovedá operátoru \hat{M} matica $M'_{ij} = \langle i'|\hat{M}|j'\rangle$. Z nečiarkovanej reprezentácie operátora \hat{M} ju dostaneme pomocou unitárnej transformačnej matice U definovanej v (238)

$$M'_{ij} = \langle i'|\hat{M}|j'\rangle = \sum_{k=1}^2 \sum_{\ell=1}^2 \langle i'|k\rangle \langle k|\hat{M}|\ell\rangle \langle \ell|j'\rangle = \sum_{k=1}^2 \sum_{\ell=1}^2 U_{ki}^* M_{k\ell} U_{\ell j} \quad (243)$$

alebo v symbolickom tvare

$$M' = U^\dagger M U. \quad (244)$$

Všimnime si, že sa pri transformácii (244) zachováva stopa matice reprezentujúcej operátor \hat{M}

$$\text{Tr } M' = \text{Tr}(U^\dagger M U) = \text{Tr}(M U U^\dagger) = \text{Tr } M. \quad (245)$$

To znamená, že v ľubovoľnej ortonormálnej báze bude mať matica reprezentujúca operátor \hat{M} rovnakú stopu. Jej hodnota bude rovná súčtu vlastných hodnôt operátora \hat{M} .

5.9 Kvantovo-mechanický opis magnetického momentu v SG experimente

Už v úvodnom opise SG experimentu sme načrtli kvantovú interpretáciu pozorovaných výsledkov. Podľa nej má z -ová zložka magnetického momentu, označme ju μ_z , nadobúdať pri meraní len dve hodnoty: $\pm\mu$. Nech je veličina μ_z priradený hermitovský operátor $\hat{\mu}_z$ a nech jeho normované vlastné stavy prislúchajúce vlastným hodnotám $+\mu$ a $-\mu$ sú $|1\rangle$ a $|2\rangle$

$$\hat{\mu}_z|1\rangle = +\mu|1\rangle, \quad \hat{\mu}_z|2\rangle = -\mu|2\rangle. \quad (246)$$

Potom maticová reprezentácia M_z operátora $\hat{\mu}_z$ v báze jeho vlastných vektorov má tvar

$$\hat{\mu}_z \rightarrow M_z = \begin{pmatrix} +\mu & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix} = \mu\sigma_3, \quad (247)$$

kde σ_3 je tretia Pauliho matica. Preto aj $\text{Tr } M_z = 0$ a preto aj vlastné vektory $\hat{\mu}_z$ v tejto báze majú tvar

$$|1\rangle \rightarrow \vec{v}_{3+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \rightarrow \vec{v}_{3-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (248)$$

Lahko overíme, že diagonálne prvky matice M sú naozaj jej vlastnými hodnotami

$$\begin{pmatrix} +\mu & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\mu \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} +\mu & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (249)$$

Každý stav $|\psi\rangle$, v ktorom sa atóm striebra môže nachádzať, môžeme napísať ako lineárnu kombináciu $|1\rangle$ a $|2\rangle$: $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$. Nech P_1 je pravdepodobnosť, že v tomto stave nameriame SG prístrojom vlastnú hodnotu $+\mu$ a P_2 pravdepodobnosť, že nameriame $-\mu$. Potom

$$P_1 = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |(1,0)^* \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}|^2 = |c_1|^2.$$

Analogicky dostaneme $P_2 = |c_2|^2$. Spočítajme ešte strednú hodnotu operátora $\hat{\mu}_z$ v stave $|\psi\rangle$

$$\langle \psi|\hat{\mu}_z|\psi\rangle = (c_1, c_2)^* \begin{pmatrix} +\mu & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = +\mu|c_1|^2 + (-\mu)|c_2|^2 = \mu(P_1 - P_2).$$

Pootočme SG(z) prístroj tak, že os z prejde v dôsledku tejto rotácie na z' . V novej polohe bude SG(z') prístroj namiesto μ_z merať z' -ovú zložku magnetického momentu, μ'_z . Zodpovedajúci hermitovský operátor označme $\hat{\mu}'_z$ a jeho vlastné stavy $|1'\rangle$ a $|2'\rangle$

$$\hat{\mu}'_z|1'\rangle = +\mu|1'\rangle, \quad \hat{\mu}'_z|2'\rangle = -\mu|2'\rangle \quad (250)$$

Aj tieto vlastné stavy tvoria ortonormálnu bázu. Preto prechod medzi vlastnými vektormi operátora $\hat{\mu}_z$ a operátora $\hat{\mu}'_z$ je daný unitárnym operátorom podľa vzťahu (240). Keď tento transformačný vzťah dosadíme do (250) a celú rovnicu ešte vynásobíme zľava operátorom \hat{U}^\dagger , dostaneme

$$\hat{U}^\dagger \hat{\mu}'_z \hat{U} |i\rangle = \pm \mu \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{\mathbf{I}} |i\rangle = \pm \mu |i\rangle, \quad (251)$$

kde \pm závisí od toho, či $i = 1$ alebo 2 . Toto je ale rovnica pre vlastné hodnoty a stavy operátora $\hat{\mu}_z$, takže

$$\hat{U}^\dagger \hat{\mu}'_z \hat{U} = \hat{\mu}_z, \quad \text{resp.} \quad \hat{\mu}'_z = \hat{U} \hat{\mu}_z \hat{U}^\dagger. \quad (252)$$

V maticovej reprezentácii v báze $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ môžeme druhú rovnicu (252) prepísať v tvare

$$(M'_z)_{ij} \equiv \langle i|\hat{\mu}'_z|j\rangle = \sum_{k=1}^2 \sum_{\ell=1}^2 \langle i|\hat{U}|k\rangle \langle k|\hat{\mu}_z|\ell\rangle \langle \ell|\hat{U}^\dagger|j\rangle = \sum_{k=1}^2 \sum_{\ell=1}^2 U_{ik} (M_z)_{k\ell} U_{\ell j}^\dagger,$$

čo v kompaktnom maticovom zápise vyzerá ako

$$M'_z = U M_z U^\dagger. \quad (253)$$

Vidíme, že rotácia prístroja je v kvantovej mechanike reprezentovaná unitárnym operátorom, ktorý transformuje zodpovedajúci operátor (pozorovateľnú) podľa vzťahu (252). V prípade SG experimentu bude zrotovaný SG prístroj merať priemet magnetického momentu do nového smeru z' .

Nech $M(\vec{n})$ je matica reprezentujúca operátor priemetu magnetického momentu do ľubovoľného smeru definovanému jednotkovým vektorom \vec{n} . Takéto meranie sa dá uskutočniť SG prístrojom

orientovaným do smeru \vec{n} . Matica $M(\vec{n})$ je samozrejme hermitovská. Môžeme ju dostať unitárnou transformáciou z matice M_z , ktorá reprezentuje meranie priemetu magnetického momentu do smeru z . Keďže M_z má nulovú stopu a unitárna transformácia zachováva stopu matice, aj $M(\vec{n})$ bude mať nulovú stopu. To znamená, že sa hermitovská matica $M(\vec{n})$ musí dať vyjadriť ako lineárna kombinácia troch Pauliho matíc

$$M(\vec{n}) = \mu \sum_{i=1}^3 a_i(\vec{n}) \sigma_i, \quad (254)$$

kde $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ sú tri neznáme reálne parametre, ktoré závisia od smeru \vec{n} . Explicitné násobenie sumy koeficientom μ sa nám ukáže ako výhodné v ďalších úpravách. Porovnaním (254) s (247) dostaneme, že keď je $\vec{n} = (0, 0, 1)$, potom $\vec{a} = (0, 0, 1)$.

Vlastné hodnoty matice $M(\vec{n})$ pre ľubovoľný smer \vec{n} musia byť $\pm\mu$. Vyplýva to z toho, že žiadny smer v priestore nie je preferovaný. Ak fyzici budú robiť SG experimenty na rôznych miestach našej planéty, dostanú rovnaké rozštiepenie zväzku atómov, hoci jednotlivé SG prístroje budú voči sebe zrotované. Na základe tohoto poznatku dostaneme podmienku na vektor \vec{a} v rovnici (254). Vlastné hodnoty matice $M(\vec{n})$ musia spĺňať rovnicu (225), ktorá v našom prípade vedie na

$$a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1. \quad (255)$$

Akým priemetom zodpovedajú iné voľby parametrov \vec{a} ? Ako rozcvičku si vezmime $\vec{a} = (0, 0, -1)$. Dostaneme maticu

$$\begin{pmatrix} -\mu & 0 \\ 0 & +\mu \end{pmatrix} = -M_z. \quad (256)$$

Táto matica má rovnaké vlastné vektory a vlastné stavy ako M_z , ale prehodilo sa ich vzájomné priradenie. To znamená, že ak meriame priemet magnetického momentu pomocou SG prístroja, ktorý zodpovedá matici (256), nameriame v stave²⁸ $|1\rangle$ hodnotu $-\mu$ a v stave $|2\rangle$ vlastnú hodnotu $+\mu$. Keď si uvedomíme, že znamienka pred μ sú zviazané s relatívnou orientáciou magnetického momentu $\vec{\mu}$ voči magnetickému poľu v SG prístroji, prideme k záveru, že matica $-M_z$ reprezentuje meranie priemetu magnetického momentu do smeru $-z$. Takéto meranie sa dá vykonať, keď pôvodný SG prístroj otočíme o 180° . I v tomto prípade môžeme teda konštatovať, že $\vec{n} = \vec{a} = (0, 0, 1)$. Čitateľom odporúčame ako cvičenie nájsť tvar unitárnej transformačnej matice U , ktorá podľa (253) transformuje maticu M_z na $-M_z$. Odpoveď sa nachádza v poznámke pod čiarou²⁹.

Pozrime sa teraz na to, akým priemetom magnetického momentu zodpovedajú matice, ktoré sú μ -násobkami prvej a druhej Pauliho matice. Zadefinujeme nasledovné špeciálne prípady matíc $M(\vec{n})$

$$\vec{a} = (1, 0, 0) : \quad M_1 \equiv \mu\sigma_1, \quad (257)$$

$$\vec{a} = (0, 1, 0) : \quad M_2 \equiv \mu\sigma_2. \quad (258)$$

²⁸Pripomeňme, že stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ sú vlastnými stavmi matice M_z , vid' (248).

²⁹Hľadaná transformačná matica má tvar

$$U = \begin{pmatrix} 0 & \exp(i\varphi_1) \\ \exp(i\varphi_2) & 0 \end{pmatrix},$$

kde $\varphi_{1,2}$ sú ľubovoľné reálne čísla. Ak budeme navyše požadovať, aby matica U transformovala $(1, 0)^T$ na $(0, 1)^T$ a naopak, potom

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} : \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{U} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Najst' ich vlastné vektory a hodnoty matíc M_1 a M_2 nebude problém, keďže poznáme vlastné vektory a hodnoty Pauliho matíc. Vlastné hodnoty sú v každom prípade $\pm\mu$ a vlastné vektory sú

$$M_1 : \quad \vec{v}_{1+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_{1-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (259)$$

$$M_2 : \quad \vec{v}_{2+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_{2-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (260)$$

Položme si teraz otázku: s akou pravdepodobnosťou nameriame $\mu_z = \pm\mu$, ak sa atóm vchádzajúci do SG prístroja nachádza v niektorom zo stavov (259), (260)? Odpoveď vieme ľahko spočítať. Tak napríklad pravdepodobnosť, že ak do SG prístroja vletí atóm v stave \vec{v}_{1+} , tak pravdepodobnosť namerania $\mu_z = +\mu$ je

$$P(3+, 1+) = |\vec{v}_{3+} \cdot \vec{v}_{1+}|^2 = \left| (1, 0)^* \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}.$$

Obdobne spočítame pravdepodobnosti aj pre ďalšie kombinácie stavov. Číselné výsledky sú v nasledujúcej tabuľke:

i	1+	1-	2+	2-	
$P(3+, i)$	0.5	0.5	0.5	0.5	(261)
$P(3-, i)$	0.5	0.5	0.5	0.5	

To znamená, že ak sa atóm striebra nachádza v ktoromkoľvek z vlastných stavov matíc M_1 a M_2 , nameriame pre z -ový priemet magnetického momentu hodnoty $+\mu$ aj $-\mu$ s rovnakou pravdepodobnosťou. Z pohľadu výsledkov merania tejto veličiny sú smery 'nahor' aj 'nadol' symetrické; žiaden z týchto smerov nie je nameranou pravdepodobnosťou preferovaný. Je preto prirodzené predpokladať, že matice M_1 a M_2 zodpovedajú priemtom magnetického momentu do smerov, voči ktorým sú kladné a záporné hodnoty osi z symetrické. Toto platí o všetkých smeroch kolmých na os z . Nazvime smery zodpovedajúce maticiam M_1 a M_2 ako osi³⁰ 1 a 2.

Je zrejmé, že podmienka kolmosti voči osi z nedefinuje jednoznačne polohu osí 1 a 2. V snahe dozvedieť sa viac o polohe týchto osí, poďme sa pozrieť na ich vzájomný vzťah podobným spôsobom, ako sme to urobili voči osi z . To znamená, spočítajme pravdepodobnosti, že nameriame priemet $+\mu$ alebo $-\mu$ pozdĺž osi 1, ak sa atóm nachádza vo vlastnom stave matice M_2 . Získané výsledky sú uvedené v nasledujúcej tabuľke

i	2+	2-	
$P(1+, i)$	0.5	0.5	(262)
$P(1-, i)$	0.5	0.5	

Rovnakou argumentáciou ako v prípade hodnôt (261) dospejeme k záveru, že osi 1 a 2 sú navzájom kolmé. Osi 1, 2 a 3 teda tvoria ortogonálnu súradnicovú sústavu. Je prirodzené pomenovať osi 1 a 2 ako x a y . To potom znamená, že aj v prípade (257) a (258) môžeme položiť $\vec{n} = \vec{a}$. Toto spolu s (255) vedie k záveru, že matica, ktorá zodpovedá operátoru priemtu magnetického momentu do smeru \vec{n} , má v reprezentácii básových vektorov operátora priemtu na os z tvar

$$M(\vec{n}) = \mu \sum_{i=1}^3 n_i \sigma_i = \mu \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{+i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad (263)$$

³⁰Os z by sme potom mohli označovať aj ako os 3 a maticu M_z ako M_3 .

kde jednotkový vektor v sférických súradniciach má tvar $\vec{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$.

5.10 Súvislosť medzi magnetickým momentom a momentom hybnosti. Spin elektrónu.

Magnetický moment atómu sa skladá z magnetického momentu jadra a z magnetických momentov elektrónov v obale. Ukazuje sa, že príspevok jadra je v porovnaní s príspevkami elektrónov zanedbateľný. Magnetický moment elektrónového obalu sa v princípe skladá z dvoch zložiek: vlastného magnetického momentu každého elektrónu a z magnetického momentu indukovaného orbitálnym pohybom elektrónov okolo jadra. Pri klasickom opise elektrón obiehajúci rýchlosťou v po kružnici o polomere r vytvára elektrický prúd

$$I = \frac{ev}{2\pi r}. \quad (264)$$

Magnetický dipólový moment takejto prúdovej slučky je

$$|\vec{\mu}| = I \cdot S = \frac{evr}{2} = \frac{e}{2m} |\vec{L}|, \quad (265)$$

kde za S sme dosadili plochu kružnice πr^2 a \vec{L} je orbitálny moment hybnosti elektrónu. Pomer medzi magnetickým momentom a momentom hybnosti, s ktorým je tento magnetický moment previazaný, za zvykne nazývať *gyromagnetickým pomerom*. Z rovnice (265) vidíme, že v prípade klasickej prúdovej slučky generovanej pohybujúcim sa elektrickým nábojom je gyromagnetický pomer rovný

$$\frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{L}|} = \frac{e}{2m}. \quad (266)$$

Napriek tomu, že vzťah (266) bol odvodený klasickým spôsobom, je platný aj pre gyromagnetický pomer medzi priemetmi magnetického momentu a momentu hybnosti, ktoré súvisia s orbitálnym pohybom elektrónov okolo jadra

$$\frac{\mu_z}{L_z} = \frac{e}{2m}. \quad (267)$$

Atóm striebra má v základnom stave niekoľko úplne zaplnených elektrónových vrstiev a jeden valenčný elektrón. Celkový moment hybnosti, a teda aj magnetický moment, úplne zaplnených elektrónových vrstiev je nulový. Valenčný elektrón sa nachádza v stave s nulovým orbitálnym momentom hybnosti. Magnetický moment atómu striebra v základnom stave je teda tvorený len vlastným (interným) magnetickým momentom jedného elektrónu³¹. Stern a Gerlach vykonali svoj experiment pri nízkej teplote, aby atómy v zväzku boli v základnom stave. V SG experimente s atómami striebra teda meriame zložku interného magnetického momentu elektrónu. Ako sme zistili, priemet vlastného magnetického momentu elektrónu môže nadobúdať dve hodnoty $\pm\mu$. Zmeraná číselná hodnota μ je

$$\frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \times 10^{-24} \text{ J/T} \quad (268)$$

a táto konštanta sa zvykne nazývať *Bohrov magnetón* μ_B .

Existenciu vlastného magnetického momentu elektrónu potvrdzujú aj ďalšie experimenty. Predovšetkým štúdiom *jemnej štruktúry* spektier atómov, ktorá je dôsledkom vzájomnej interakcie

³¹Podobná situácia nastáva napríklad aj pri atóme vodíka alebo sodíka. SG experiment bol vykonaný aj s týmito prvkami a získané výsledky súhlasia s kvantovým opisom experimentu.

orbitálneho a vlastného magnetického momentu elektrónov v obale. Ale tiež pozorovanie spektier atómov vo vonkajšom elektrickom (*Starkov jav*) a magnetickom (*Zeemanov jav*) poli.

Vzt'ah (265) ukazuje súvislosť medzi orbitálnym momentom hybnosti nabitej častice a ním generovaným magnetickým momentom. Je preto prirodzené špekulovať, či aj vlastný magnetický moment elektrónu nie je previazaný s momentom hybnosti.

Einsteinov-de Haasov experiment (1915): železná tyč na tenkom vlákne je vložená do cievky. Po zapnutí elektrického prúdu vzniknuté magnetické pole usporiada magnetické momenty atómov do jedného smeru. Ak sú tieto magnetické momenty previazané s momentami hybnosti atómov, zmení sa tým celkový moment hybnosti tyče. Zo zákona zachovania momentu hybnosti vyplýva, že táto zmena musí byť kompenzovaná natočením tyče ako celku.

Týmto experimentom bol zmeraný gyromagnetický pomer medzi elementárnymi magnetickými momentami μ_z , ktoré sú natáčané vonkajším magnetickým poľom, a momentami hybnosti s_z , s ktorými sú tieto magnetické momenty previazané. Pomer μ_z/s_z sa od (266) líšil faktorom 2 a má hodnotu

$$\frac{\mu_z}{s_z} = \frac{e}{m}. \quad (269)$$

Odlíšnosť gyromagnetického pomeru nás vedie k predstave, že veličina s_z nie je orbitálny moment hybnosti, ale vlastný moment hybnosti elektrónu. Veličina μ_z je veľkosť z -ovej zložky vlastného magnetického momentu elektrónu, ktorý sa prejavil aj v SG experimente. Vlastný moment hybnosti, ktorý sa nazýva *spin*, má elektrón nachádzajúci sa v ľubovoľnom stave a je jeho charakteristikou v rovnakom zmysle ako jeho hmotnosť a elektrický náboj.

Prvotná mechanická predstava, že elektrón je nabitá guľička, ktorej rotácia generuje magnetický moment, nie je v súlade s pozorovaniami.

Spin elektrónu je čisto kvantová veličina, ktorá nemá klasický analóg. V súlade s výsledkami SG experimentu, priemet spinu do zvoleného smeru môže nadobúdať iba dve hodnoty, $\pm s_z$. Porovnaním (268) a (269) dostaneme

$$s_z = \frac{\hbar}{2}. \quad (270)$$

Operátor z -ovej zložky spinu dostaneme z operátora $\hat{\mu}_z$, keď uvážime (269) a (270). Platí

$$\hat{\mu}_z = \frac{e}{m} \hat{S}_z, \quad (271)$$

takže môžeme využiť všetky úvahy, ktoré sme urobili ohľadom operátora $\hat{\mu}_z$. Napríklad, v báze jeho vlastných stavov operátoru \hat{S}_z zodpovedá 2×2 matica

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z. \quad (272)$$

5.11 Úplný opis stavu kvantového systému

V klasickej mechanike bol okamžitý stav hmotného bodu daný špecifikovaním hodnôt stavových veličín. Napríklad v prípade hmotného bodu bol jeho stav jednoznačne určený zadaním jeho polohy (tri súradnice) a rýchlosti (tri zložky). Keď poznáme stav fyzikálnej sústavy v danom okamihu, vieme pomocou riešenia pohybovej rovnice predpovedať aj budúci vývoj stavu.

Vieme, že v kvantovej mechanike je okamžitý stav fyzikálnej sústavy zadaný stavovým vektorom. To je ale dosť neurčitá predstava. Takže konkrétnejšie: aké čísla potrebujeme poznať, aby sme vedeli, v akom stave sa nachádza fyzikálny systém? Ukazuje sa, že pre daný fyzikálny

systém existuje konečný počet nezávislých fyzikálnych veličín³², ktorých operátory medzi sebou komutujú, t.j. majú spoločné vlastné stavy. Takémuto maximálnemu systému nezávislých komutujúcich pozorovateľných hovoríme, že je **úplný**. Samozrejme, ako sme už viackrát videli, nie všetky pozorovateľné, o ktorých má v tom-ktorom prípade zmysel hovoriť, navzájom komutujú. Ukazuje sa, že **na úplný popis stavu v kvantovej mechanike potrebujeme poznať hodnoty všetkých pozorovateľných z nejakého úplného systému**.

Pri kvantových fyzikálnych systémoch nesmieme zabudnúť na to, že ak meriame nejakú veličinu a systém nie je vo vlastnom stave tejto veličiny, potom sa zmení stav systému. Jednotlivá nameraná hodnota potom bude charakterizovať stav, ktorý meraním vznikol a nie meraný stav.

Ak si ako fyzikálny systém zoberieme elektrón v trojrozmernom priestore, potom príkladmi úplných systémov pozorovateľných sú tri priestorové súradnice a z -ový priemet spinu alebo tri zložky hybnosti a z -ový priemet spinu. Zodpovedajúce stavové vektory však už nepatria do dvojrozmerného vektorového priestoru, ale do vektorového priestoru s podstatne viac rozmermi.

5.12 Rozšírenie na n -hladinový systém. Hilbertov priestor.

Všetko, čo sme povedali a odvodili pre dvojhladinové fyzikálne systémy je priamočiaro rozšíriteľné aj na n -hladinové systémy. T.j. na také, kde pozorovateľné môžu nadobúdať n rôznych hodnôt a priestor stavových vektorov je n -rozmerný.

Ukazuje sa, že vektorový priestor stavových vektorov musí mať niektoré špeciálne vlastnosti a nazýva sa *Hilbertovým priestorom*.

5.12.1 Hilbertov priestor

Uvažujme normovaný vektorový priestor V a v ňom postupnosť vektorov $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^{\infty}$. Táto postupnosť konverguje k vektoru $\vec{x} \in V$, ak pre každé $\varepsilon > 0$ existuje n také, že pre všetky $i > n$ je

$$\|\vec{x} - \vec{x}_i\| \leq \varepsilon.$$

Cauchyho postupnosťou nazveme takú postupnosť $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^{\infty}$ z V , že pre každé $\varepsilon > 0$ existuje n také, že pre všetky $i, j > n$ je

$$\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\| \leq \varepsilon.$$

Nie každá Cauchyho postupnosť konverguje, pretože niekedy jej limita leží mimo uvažovaný vektorový priestor. Vektorový priestor V sa nazýva *úplným*, ak každá Cauchyho postupnosť jeho prvkov konverguje, t.j. jej limita leží vo V .

Hilbertov priestor \mathcal{H} je **úplný unitárny** vektorový priestor.

Jedným z postulátov kvantovej mechaniky je tvrdenie, že **stavové vektory sú prvkami Hilbertovho priestoru**.

³²Uvažujeme samozrejme také fyzikálne veličiny, ktoré má zmysel na danom systéme merať.

6 Formalizmus pre operátory so spojitým spektrom

6.1 Poloha elektrónu

Operátor polohy označme \hat{x} . Pre jednoduchosť uvažujme jednorozmerný prípad

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (273)$$

kde $x \in (-\infty, +\infty)$. Operátor \hat{x} musí byť samozrejme hermitovský. Stav $|x\rangle$ reprezentuje elektrón, ktorý sa nachádza v mieste so súradnicou x . Každý súradnici zodpovedá vlastný vektor ortogonálny ku všetkým ostatným

$$\langle x|x'\rangle = 0, \quad x \neq x'. \quad (274)$$

Bázových vektorov je nekonečne veľa; množina s mohutnosťou reálnych čísel. Hilbertov priestor je zodpovedajúco nekonečnorozmerný.

Amplitúda pravdepodobnosti, že elektrón, ktorý je v stave $|\psi\rangle$, nájdeme v bode x , je

$$\langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x). \quad (275)$$

Funkcia $\psi(x)$ reprezentuje súradnice vektora $|\psi\rangle$ v báze vlastných vektorov $|x\rangle$ operátora súradnice — *súradnicová reprezentácia*. Funkcia $\psi(x)$ sa nazýva *vlnová funkcia*.

Ak je vlnová funkcia normalizovaná na jednotku

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \langle \psi| \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx \right) |\psi\rangle. \quad (276)$$

Aby $\langle \psi|\psi\rangle = 1$, musí byť

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = \hat{\mathbf{I}}. \quad (277)$$

Ukážeme, že za týchto predpokladov sú stavy $|x\rangle$ normalizované na Diracovu δ -funkciu

$$\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \psi(x) dx. \quad (278)$$

Porovnaním ľavej a pravej strany rovnice (278) dostaneme

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x). \quad (279)$$

“Matica” reprezentujúca operátor \hat{x} v súradnicovej báze

$$\langle x'|\hat{x}|x\rangle = x\langle x'|x\rangle = x\delta(x - x'). \quad (280)$$

Podľa očakávania, je diagonálna: nenulové sú len elementy, pre ktoré $x = x'$. Stredná hodnota polohy v stave $|\psi\rangle$ je

$$\langle \psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx dx' \langle \psi|x\rangle \langle x|\hat{x}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \int dx dx' \psi(x)x'\delta(x - x')\psi(x') = \int x|\psi(x)|^2 dx. \quad (281)$$

Zovšeobecnenie do troch rozmerov: v experimente sa zatiaľ nenašli obmedzenia na možnosť súčasne presne zmerať všetky tri súradnice x, y, z . V QM to znamená, že im zodpovedajúce operátory majú spoločné vlastné stavy

$$\hat{x}|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle, \quad (282)$$

$$\hat{y}|\vec{r}\rangle = y|\vec{r}\rangle, \quad (283)$$

$$\hat{z}|\vec{r}\rangle = z|\vec{r}\rangle, \quad (284)$$

kde $\vec{r} = (x, y, z)$, a teda že navzájom komutujú

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{z}] = [\hat{z}, \hat{x}] = 0. \quad (285)$$

Tri rovnice (282) – (284) môžeme zapísať kompaktne ako

$$\hat{r}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \quad (286)$$

Normovanie stavov $|\vec{r}\rangle$ je na δ -funkciu

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta^3(\vec{r}' - \vec{r}) = \delta(x' - x)\delta(y' - y)\delta(z' - z) \quad (287)$$

a jednotkový operátor

$$\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| d^3\vec{r} = \hat{\mathbf{I}}. \quad (288)$$

Vlnová funkcia

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (289)$$

reprezentuje súradnice vektora $|\psi\rangle$ v báze vlastných vektorov operátora \hat{r} .

6.2 Hybnosť elektrónu

Situácia je pre hybnosť formálne úplne analogická ako pre polohu. Opäť pre jednoduchosť uvažujme jednorozmerný prípad. Operátor hybnosti označme \hat{p} .

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (290)$$

kde $p \in (-\infty, +\infty)$. Operátor \hat{p} je hermitovský. Stav $|p\rangle$ reprezentuje elektrón, ktorý má hybnosť p . Každý hybnosti zodpovedá vlastný vektor ortogonálny ku všetkým ostatným. Bázových vektorov je nekonečne veľa; množina s mohutnosťou reálnych čísel. Hilbertov priestor je zodpovedajúco nekonečnorozmerný.

Stavy $|p\rangle$ sú normované na δ -funkciu, takže

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p' - p) \quad (291)$$

a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| dp = \hat{\mathbf{I}}. \quad (292)$$

Amplitúda pravdepodobnosti, že elektrónu, ktorý je v stave $|\psi\rangle$, nameriame hybnosť p , je

$$\langle p | \psi \rangle \equiv a(p). \quad (293)$$

Funkcia $a(p)$ reprezentuje súradnice vektora $|\psi\rangle$ v báze vlastných vektorov $|p\rangle$ operátora hybnosti — *hybnostná reprezentácia*. Z normovanosti vektora $|\psi\rangle$ dostaneme

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int dp \langle \psi | p \rangle \langle p | \psi \rangle = \int |a(p)|^2 dp. \quad (294)$$

Amplitúda $\langle x | p \rangle \equiv \psi_p(x)$ je vlnovou funkciou elektrónu s hybnosťou p . Podľa de Broglieho hypotézy je to rovinná vlna

$$\langle x | p \rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (295)$$

kde koeficient pred exponenciálnou funkciou sme dostali z podmienky normovanosti funkcie $\psi_p(x)$. Ukážeme, ako ľubovoľnú vlnovú funkciu vyjadríme pomocou rovinných vln

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} a(p) e^{ipx/\hbar}. \quad (296)$$

Dostali sme, že $a(p)$ je Fourierov obraz vlnovej funkcie $\psi(x)$. Všimnime si tiež, že

$$\langle p'|p\rangle = \int dx \langle p'|x\rangle \langle x|p\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i(p-p')x/\hbar} = \delta(p-p'), \quad (297)$$

čo je v súlade s normalizačnou podmienkou (291).

Maticový tvar operátora \hat{p} v p -reprezentácii je

$$\langle p'|\hat{p}|p\rangle = p\delta(p'-p). \quad (298)$$

Stredná hodnota hybnosti v stave $|\psi\rangle$ je

$$\langle \psi|\hat{p}|\psi\rangle = \int dp p |a(p)|^2. \quad (299)$$

Teraz nájdeme maticový tvar operátora \hat{p} v x -reprezentácii

$$\langle x'|\hat{p}|x\rangle = \int dp dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|\hat{p}|p\rangle \langle p|x\rangle = \int \frac{dp dp'}{2\pi\hbar} p e^{i(p'x'-px)/\hbar} \delta(p'-p),$$

kde po preintegrování podľa p' dostaneme

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{ip(x'-x)/\hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(x'-x)/\hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x'-x).$$

Takže sme dostali

$$\langle x'|\hat{p}|x\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x'-x). \quad (300)$$

Strednú hodnotu hybnosti elektrónu v stave $|\psi\rangle$ vyjadríme v súradnicovej reprezentácii nasledovne

$$\begin{aligned} \langle \psi|\hat{p}|\psi\rangle &= \int dx' dx \langle \psi|x'\rangle \langle x'|\hat{p}|x\rangle \langle x|\psi\rangle = i\hbar \int dx' dx \psi^*(x') \left(\frac{\partial}{\partial x} \delta(x'-x) \right) \psi(x) \\ &= -i\hbar \int dx' dx \psi^*(x') \delta(x'-x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \int dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x). \end{aligned} \quad (301)$$

Zovšeobecnenie do troch rozmerov je úplne analogické ako pri polohe: v experimente sa zatiaľ nenašli obmedzenia na možnosť súčasne presne zmerať všetky tri zložky hybnosti p_x, p_y, p_z . V QM to znamená, že im zodpovedajúce operátory majú spoločné vlastné stavy

$$\hat{p}_x |\vec{p}\rangle = p_x |\vec{p}\rangle, \quad (302)$$

$$\hat{p}_y |\vec{p}\rangle = p_y |\vec{p}\rangle, \quad (303)$$

$$\hat{p}_z |\vec{p}\rangle = p_z |\vec{p}\rangle, \quad (304)$$

kde $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$, a teda že navzájom komutujú

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0. \quad (305)$$

Tri rovnice (302) – (304) môžeme zapísať kompaktno ako

$$\hat{p}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle. \quad (306)$$

Normovanie stavov $|\vec{p}\rangle$ je na δ -funkciu

$$\langle\vec{p}'|\vec{p}\rangle = \delta^3(\vec{p}' - \vec{p}) = \delta(p'_x - p_x)\delta(p'_y - p_y)\delta(p'_z - p_z) \quad (307)$$

a jednotkový operátor

$$\int |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| d^3\vec{p} = \hat{\mathbf{I}}. \quad (308)$$

Vlnová funkcia

$$a(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle \quad (309)$$

reprezentuje súradnice vektora $|\psi\rangle$ v báze vlastných vektorov operátora \hat{p} .

6.3 Operátory v súradnicovej reprezentácii

Výsledok pôsobenia \hat{x} na ψ , $\hat{x}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, v jazyku vlnových funkcií

$$\psi'(x) = \langle x|\psi'\rangle = \langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{x}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = x\psi(x). \quad (310)$$

Obdobne, ak namiesto operátora \hat{x} budeme uvažovať \hat{p} a $\hat{p}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$, potom v jazyku vlnových funkcií dostaneme

$$\psi'(x) = \langle x|\psi'\rangle = \langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x). \quad (311)$$

Vidíme, že pôsobenie operátora \hat{A} na stavový vektor $|\psi\rangle$ je na vlnových funkciách reprezentované pôsobením nejakého diferenciálneho operátora \hat{A}_x a to tak, že musí platiť nasledovný “štvorec zobrazení”

$$\begin{array}{ccc} |\psi\rangle & \xrightarrow{\hat{A}} & |\psi'\rangle \\ \downarrow & & \downarrow \\ \psi(x) & \xrightarrow{\hat{A}_x} & \psi'(x) \end{array} \quad (312)$$

čo inak zapísané znamená, že

$$\langle x|\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}_x\langle x|\psi\rangle. \quad (313)$$

Špeciálne operátoru \hat{x} je na priestore vlnových funkcií priradené násobenie súradnicou x , operátoru \hat{p} je priradený diferenciálny operátor³³ $(-i\hbar\partial_x)$.

Ukážeme, že reprezentácia operátora, ktorá spĺňa (312), zachováva štruktúru skladania operátorov, t.j. súčinu $\hat{B}\hat{A}$ zodpovedá na priestore vlnových funkcií súčin $\hat{B}_x\hat{A}_x$. Majme teda okrem operátora \hat{A} aj operátor \hat{B} a jeho reprezentanta \hat{B}_x , ktoré tiež spĺňajú “štvorec zobrazení” (312). Nech

$$|\psi_B\rangle = \hat{B}|\psi_A\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle,$$

potom

$$\psi_B(x) = \langle x|\psi_B\rangle = \langle x|\hat{B}|\psi_A\rangle = \hat{B}_x\langle x|\psi_A\rangle = \hat{B}_x\langle x|\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}_x\hat{A}_x\langle x|\psi\rangle = \hat{B}_x\hat{A}_x\psi(x).$$

³³Použili sme skrátené označenie derivácie $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$

Vďaka tomu, že reprezentácia operátorov na vlnových funkciách zachováva štruktúru skladania operátorov, vzťahy medzi operátormi, ku ktorým sa dopracujeme na úrovni tejto reprezentácie, budú platné obecné. Ako príklad využitia tejto skutočnosti môžeme pomocou znalosti diferenciálnych operátorov pre súradnicu a hybnosť odvodiť všeobecnú hodnotu ich komutátora, pretože podľa vyššiepovedaného platí

$$[\hat{x}, \hat{p}] = [x, -i\hbar\partial_x]. \quad (314)$$

Nech $f(x)$ je ľubovoľná diferencovateľná funkcia. Potom

$$[x, -i\hbar\partial_x]f(x) = -i\hbar\partial_x f(x) + i\hbar\partial_x(xf(x)) = i\hbar f(x).$$

Keďže tento vzťah platí pre ľubovoľnú $f(x)$, je $[x, -i\hbar\partial_x] = i\hbar$ a teda

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (315)$$

Nakoniec nájdeme vzťah medzi reprezentantom $\hat{\mathcal{A}}_x$ operátora \hat{A} na vlnových funkciách a “matricovým elementom” $\langle x'|\hat{A}|x\rangle$. Platí

$$\hat{\mathcal{A}}_x\psi(x) = \langle x|\hat{A}|\psi\rangle = \int dx' \langle x|\hat{A}|x'\rangle\psi(x').$$

Porovnaním prvého a posledného výrazu dostaneme

$$\langle x|\hat{A}|x'\rangle = \delta(x - x')\hat{\mathcal{A}}_{x'}. \quad (316)$$

6.4 Zhrnutie

Uvažujme dva Hilbertove priestory, $\mathcal{H}^{(N)}$ a $\mathcal{H}^{(\mathcal{R})}$. Jeden, $\mathcal{H}^{(N)}$, je konečnorozmerný alebo nekonečnorozmerný so spočítateľnou bázou $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{(N, \infty)}$ a druhý, $\mathcal{H}^{(\mathcal{R})}$, je nekonečnorozmerný, ktorého báza je množina mohutnosti reálnych čísel, napríklad $\{|x\rangle\}_{x \in (-\infty, +\infty)}$. Nech $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ sú na jednotku normovateľné vektory z jedného alebo druhého priestoru. Nech \hat{A} je operátor pôsobiaci v jednom alebo druhom priestore. V nasledujúcej tabuľke ukážeme porovnanie navzájom si zodpovedajúcich objektov a vzťahov v jednom a druhom Hilbertovom priestore.

$\mathcal{H}^{(N)}$	$\mathcal{H}^{(\mathcal{R})}$
$\langle e_i e_j\rangle = \delta_{ij}$	$\langle x x'\rangle = \delta(x - x')$
$\sum_{i=1}^N e_i\rangle\langle e_i = \hat{\mathbf{I}}$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x\rangle\langle x = \hat{\mathbf{I}}$
$c_i = \langle e_i \psi\rangle$	$\psi(x) = \langle x \psi\rangle$
$d_i = \langle e_i \phi\rangle$	$\phi(x) = \langle x \phi\rangle$
$\sum_{i=1}^N c_i ^2 = 1$	$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) ^2 dx = 1$
$A_{ij} = \langle e_i \hat{A} e_j\rangle$	$\delta(x - x')\hat{\mathcal{A}} = \langle x \hat{A} x'\rangle$
$\langle A\rangle = \langle \psi \hat{A} \psi\rangle$ $= \sum_{i,j=1}^N c_i^* A_{ij} c_j$	$\langle A\rangle = \langle \psi \hat{A} \psi\rangle$ $= \int \int dx dx' \psi^*(x)\langle x \hat{A} x'\rangle\psi(x')$ $= \int dx \psi^*(x)\hat{\mathcal{A}}_x\psi(x)$
$\langle \phi \psi\rangle = \sum_{i=1}^N d_i^* c_i$	$\langle \phi \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(x)\psi(x)$

7 Časový vývoj kvantového stavu

7.1 Operátor časového vývoja

Doteraz sme sa zaoberali popisom stavu systému v danom okamihu. Podstatnou je otázka, ako sa mení stav systému s časom

$$|\psi(t_1)\rangle \longrightarrow |\psi(t_2)\rangle, \quad t_2 > t_1.$$

Zavedieme *operátor časového vývoja* stavu $\hat{U}(t_2, t_1)$

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle \quad (318)$$

Operátor $\hat{U}(t_2, t_1)$ opisuje vývoj stavu z okamihu t_1 do okamihu t_2 pokiaľ v tomto časovom intervale nie je na opisovanom systéme vykonané žiadne meranie.

Z obecných úvah sa dajú odvodiť niektoré vlastnosti operátora \hat{U} . Vektory $|\psi(t_1)\rangle$ a $|\psi(t_2)\rangle$ sú normalizované, čiže platí

$$\langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle = \langle\psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle.$$

Nakoľko súčasne

$$\langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle = \langle\psi(t_1)|\hat{U}^\dagger(t_2, t_1)\hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

operátor $\hat{U}(t_2, t_1)$ musí byť **unitárny**

$$\hat{U}^\dagger(t_2, t_1)\hat{U}(t_2, t_1) = \hat{\mathbf{I}}. \quad (319)$$

Za predpokladu, že systém v časovom intervale (t_1, t_3) nemerame, potom časový vývoj daný operátorom $\hat{U}(t_3, t_1)$ musí viesť na rovnaký výsledok ako postupnosť dvoch naväzujúcich časových vývojev, $\hat{U}(t_2, t_1)$ a $\hat{U}(t_3, t_2)$, kde $t_1 < t_2 < t_3$:

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1). \quad (320)$$

Toto pravidlo **skladania** je druhá vlastnosť, ktorú spĺňa operátor časového vývoja $\hat{U}(t, t')$.

Tretou vlastnosťou operátora $\hat{U}(t, t')$ je jeho **diferencovateľnosť podľa t**. Experimentálna skúsenosť nám hovorí, že fyzikálne systémy sa vyvíjajú v čase spojitou. To znamená, že stavové veličiny systému v dvoch veľmi blízkych časových intervaloch sa od seba líšia len veľmi málo. Budeme to predpokladať aj o QM systémoch, ktorých časový vývoj nie je narušený meraním. Spojitý časový vývoj je teda opísaný diferencovateľným operátorom $\hat{U}(t, t')$. Takýto operátor sa dá rozvinúť do mocninného radu podľa časového intervalu

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbf{I}} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0) \cdot (t - t_0) + \mathcal{O}\left((t - t_0)^2\right), \quad (321)$$

kde operátor $\hat{H}(t_0)$ nazveme *Hamiltonovým operátorom*. Z unitarity $\hat{U}(t, t_0)$ vyplýva, že operátor $\hat{H}(t_0)$ je hermitovský

$$\hat{\mathbf{I}} = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbf{I}} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}^\dagger - \hat{H}) \cdot (t - t_0) + \mathcal{O}\left((t - t_0)^2\right).$$

Odtiaľ pre Hamiltonov operátor platí

$$\hat{H}^\dagger(t) = \hat{H}(t). \quad (322)$$

7.2 Schrödingerova rovnica

Keď operátorovú rovnicu (321) aplikujeme na stav $|\psi(t_0)\rangle$, po istých úpravách dostaneme

$$\frac{|\psi(t)\rangle - |\psi(t_0)\rangle}{t - t_0} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0)|\psi(t_0)\rangle + \mathcal{O}(t - t_0).$$

V limite $t \rightarrow t_0$ obdržíme diferenciálnu rovnicu pre časový vývoj stavu $|\psi(t)\rangle$, ktorá sa nazýva *Schrödingerovou rovnicou*

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle. \quad (323)$$

Toto je pohybová rovnica kvantovej mechaniky tak ako Newtonov zákon sily je pohybovou rovnicou klasickej mechaniky. Radi by sme čitateľa varovali pred nesprávnym pocitom, že sme Schrödingerovu rovnicu (SchR) odvodili. Predovšetkým v postupe, ktorým sme sa dopracovali k SchR, bolo urobených niekoľko predpokladov, ktoré síce vyzerali rozumne a prirodzene, ale nemuseli byť správne. Ich oprávnenosť sa overí až tým, ako bude “fungovať” SchR. No a po druhé, v tejto chvíli nevieme skoro nič o Hamiltonovom operátore $\hat{H}(t)$, ktorý v SchR vystupuje. Je akurát jasné, že jeho podoba je kľúčovým komponentom SchR, ktorý bude určovať časový vývoj kvantového systému a že tento operátor nesie informáciu o vlastnostiach opisovaného systému. Podobne aj Newtonov zákon sily v klasickej mechanike je len formálna rovnica, pokiaľ nepoznáme konkrétny tvar pôsobiacej sily. *Určenie časového vývoja kvantového stavu teda závisí od nájdenia správneho tvaru Hamiltonovho operátora.*

Preskúmame ďalšie vlastnosti Hamiltonovho operátora. Keďže je hermitovský, môže zodpovedať pozorovateľnej veličine. Pozrime sa na časový vývoj strednej hodnoty tejto veličiny v stave $|\psi(t)\rangle$. S využitím SchR dostaneme

$$\partial_t\langle H \rangle = \partial_t\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|(\partial_t\hat{H}(t))|\psi(t)\rangle. \quad (324)$$

Odtiaľ vyplýva, že ak \hat{H} nezávisí explicitne na čase, potom

$$\partial_t\langle H \rangle = 0. \quad (325)$$

To znamená, že v takomto prípade sa $\langle H \rangle$ nemení s časom (zachováva sa) pri ľubovoľnom možnom časovom vývoji vlnovej funkcie.

Uvažujme nejaký hermitovský operátor $\hat{A}(t)$. Závislosť jeho strednej hodnoty v stave $|\psi(t)\rangle$ na čase je

$$\partial_t\langle A \rangle = \partial_t\langle\psi(t)|\hat{A}(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|(\partial_t\hat{A}(t))|\psi(t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[\hat{H}(t), \hat{A}(t)]|\psi(t)\rangle. \quad (326)$$

Ak operátor \hat{A} nezávisí explicitne na čase, potom platí tvrdenie

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \implies \quad \partial_t\langle A \rangle = 0. \quad (327)$$

Ak \hat{A} komutuje s \hat{H} , potom sa stredná hodnota $\langle A \rangle$ v ľubovoľnom stave nemení s časom (zachováva sa).

7.3 Schrödingerova rovnica v x -reprezentácii

Nech $\hat{\mathcal{H}}_x$ je diferenciálny operátor reprezentujúci Hamiltonov operátor na vlnových funkciách. Potom rovnicu (323) môžeme sprojektovať na vlastný stav $|x\rangle$ operátora polohy (pre jednoduchosť uvažujeme jednorozmerný prípad)

$$i\hbar\partial_t\langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_x\langle x|\psi(t)\rangle.$$

SchR má teda v jazyku vlnových funkcií tvar

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_x\psi(x,t). \quad (328)$$

V časti 4.4 o vlastnostiach vlnového balíka sme zistili, že v prípade voľného elektrónu operátor $\hat{\mathcal{H}}_x$ je operátorom kinetickej energie $E_k = p^2/2m$

$$\hat{\mathcal{H}}_x = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2, \quad (329)$$

kde za operátor hybnosti \hat{p} sme dosadili jeho diferenciálnu reprezentáciu na vlnových funkciách $-i\hbar\partial_x$. Na základe tejto skúsenosti a skúsenosti o zachovávaní sa $\langle H \rangle$ je prirodzené vysloviť hypotézu, že operátor \hat{H} zodpovedá celkovej energii systému. Táto hypotéza sa ukázala správna. Presnejšie povedané, Hamiltonov operátor zodpovedá klasickej Hamiltonovej funkcii pokiaľ sa dá sformulovať klasický opis fyzikálneho systému. Napriek tomuto poznatku sa ukázalo, že nájdenie Hamiltonovho operátora nie je vždy jednoduchou záležitosťou. Niekedy napríklad veličiny a matematické objekty potrebné na opis mikrosвета nemajú analógy v klasickej fyzike (spin).

Uvažujme situáciu, keď klasický Hamiltonián fyzikálneho systému má tvar

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (330)$$

Recept na získanie zodpovedajúceho Hamiltonovho operátora je v zásade jednoduchý: v rovnici (330) nahradzte $H \rightarrow \hat{H}$, $x \rightarrow \hat{x}$ a $p \rightarrow \hat{p}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (331)$$

Na vlnových funkciách tomu zodpovedá diferenciálny operátor

$$\hat{\mathcal{H}}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x). \quad (332)$$

Poznamenajme, že aj diferenciálna reprezentácia $\hat{\mathcal{H}}_x$ Hamiltonovho operátora sa v literatúre zvyčajne označuje ako \hat{H} .

Zovšeobecnenie celej tejto časti do troch rozmerov je zrejmé

$$\hat{\mathcal{H}}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}), \quad (333)$$

kde $\vec{r} = (x, y, z)$ a $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$.

8 Záver? Nie, začiatok!

Aj keď v tomto bode sme sa dostali k záveru jednosemestrálnej prednášky, pre ktorú tieto poznámky boli spísané, vôbec to neznamena, že sme vyčerpali aj samotnú tému prednášky. V skutočnosti sa nám prinajlepšom podarilo iba uviesť základné myšlienky formalizmu kvantovej mechaniky. Až na malé náznaky neostal priestor na to, aby sme ilustrovali použitie tohoto formalizmu na takých základných fyzikálnych systémoch ako je konečná potenciálová jama, potenciálová bariéra, harmonický oscilátor, atď. Dúfame ale, že tieto poznámky umožnia čitateľom pokračovať v štúdiu kvantovej mechaniky z iných zdrojov.

Pre väčšiu prehľadnosť uvedieme na záver sumár postulátov, na ktorých je formalizmus kvantovej mechaniky vybudovaný a ktoré boli sformulované a vysvetlené v predošlom texte.

8.1 Postuláty kvantovej mechaniky

Opierajúc sa o skúsenosti, ktoré sme nadobudli v predošlých kapitolách pri opise voľného elektrónu, sformulujeme princípy, na ktorých je vybudovaná kvantová mechanika.

1. Stav QM systému je úplne popísaný normovaným vektorom $|\psi\rangle$ Hilbertovho priestoru.

Ilustrácia: Množina komplexných funkcií $\psi(x, y, z)$, pre ktoré je integrál cez celý Euklidovský priestor $\int |\psi(x, y, z)|^2 dV$ konečný, tvorí komplexný vektorový priestor. Výraz typu $\int \phi^* \psi dV$ spĺňa vlastnosti skalárneho súčinu na tomto priestore, ktorý je navyše úplný. Tieto funkcie reprezentujú prvky Hilbertovho priestoru.

2. *Princíp superpozície:* Ak $|\psi_A(t)\rangle$ a $|\psi_B(t)\rangle$ sú riešeniami pohybovej rovnice kvantového systému, potom aj ich (komplexná) lineárna kombinácia je riešením tejto pohybovej rovnice.

Interferencia bola jedným z kľúčových javov, pomocou ktorých sa prejavili kvantové vlastnosti mikrosveta. Podmienkou interferencie je však platnosť princípu superpozície medzi možnými riešeniami pohybovej rovnice. Z princípu superpozície vyplýva, že pohybová rovnica kvantového systému musí byť lineárna.

3. Každé merateľnej fyzikálnej veličine je priradený *lineárny hermitovský* operátor. Tomuto operátoru sa zvykne hovoriť *pozorovateľná*.

Strednú hodnotu fyzikálnej veličiny A vo fyzikálnom systéme, ktorý je v stave $\psi(x)$ spočítame výrazom typu $\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx$, kde \hat{A} je hermitovský operátor priradený veličine A . Operátor je hermitovský, aby jeho vlastné hodnoty, ktoré zodpovedajú meraným hodnotám príslušnej veličiny, boli reálne čísla.

4. Meraním fyzikálnej veličiny dostaneme jednu z vlastných hodnôt príslušajúceho operátora. Kvantový systém sa pritom okamžite dostane do stavu, ktorý je vlastným stavom tohoto operátora príslušajúcim nameranej vlastnej hodnote.

5. Ku každej pozorovateľnej existuje maximálny súbor navzájom nezávislých pozorovateľných, ktoré medzi sebou komutujú. Tento súbor sa nazýva *úplný súbor operátorov (pozorovateľných)*. Dá sa ukázať, že všetky operátory úplného súboru majú rovnaké vlastné stavy. Zadaním hodnôt všetkých veličín úplného systému dostaneme úplný opis vlastného stavu úplného súboru operátorov.

6. Veličina

$$P = |\langle \phi | \psi \rangle|^2 \quad (334)$$

udáva pravdepodobnosť, že systém, ktorý sa nachádza v stave $|\psi\rangle$, sa meraním ocitne v stave $|\phi\rangle$.

9 Dodatky

9.1 Diracova delta-funkcia

Diracova delta-funkcia $\delta(x)$ je definovaná vzt'ahom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x) dx = f(0), \quad (335)$$

kde $f(x)$ je definovaná na $(-\infty, \infty)$ a spojitá v $x = 0$. Špeciálne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (336)$$

Intuitívna predstava: Z (335) vyplýva, že $\delta(x) = 0$ pre $x \neq 0$ a $\delta(x) \neq 0$ pre $x = 0$. Keďže podľa (336) je pod $\delta(x)$ konečná plocha, musí byť $\delta(0) = \infty$. Zhrnuté

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases} \quad (337)$$

Diracova delta-funkcia nie je teda regulárna funkcia. Ide o tzv. *zovšeobecnenú* funkciu alebo *distribúciu*. Diracova delta-funkcia nemá matematicky dobre definovaný zmysel sama o sebe, ale len v kontexte funkcionálu (335).

Vlastnosti Diracovej delta-funkcie:

1. Nech L je kladné reálne číslo. Potom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x) dx = \int_{-L}^{+L} f(x)\delta(x) dx; \quad (338)$$

2. Nech a je reálne číslo. Potom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a) dx = f(a); \quad (339)$$

3. Nech k je reálne číslo rôzne od nuly. Potom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(kx) dx = \frac{1}{|k|}f(0). \quad (340)$$

Toto sa formálne dá zapísať v tvare

$$\delta(kx) = \frac{1}{|k|}\delta(x). \quad (341)$$

Špeciálny prípad je rovnica $\delta(-x) = \delta(x)$.

4. Nech $x_i (i = 1, \dots, n)$ sú nulové body funkcie $y(x)$, t.j. $y(x_i) = 0$, ale také, že $y'(x_i) \neq 0$. Potom platí

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(y(x)) dx = \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{|y'(x_i)|}. \quad (342)$$

Formálne sa to dá zapísať v tvare

$$\delta(y(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x-x_i)}{|y'(x_i)|}. \quad (343)$$

5. Derivácia Diracovej δ -funkcie:

Tak ako samotná δ -funkcia, aj jej derivácia má zmysel len ako súčasná podintegrálneho výrazu. S použitím *per partes* môžeme napísať

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{\partial}{\partial x} \delta(x) dx = [f(x)\delta(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f(x)}{\partial x} \delta(x) dx. \quad (344)$$

Prvý člen na pravej strane je vzhľadom na vlastnosti δ -funkcie rovný nule. Takže nám ostalo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{\partial}{\partial x} \delta(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f(x)}{\partial x} \delta(x) dx. \quad (345)$$

Toto môžeme zapísať ako formálne pravidlo

$$\frac{\partial}{\partial x} \delta(x) = -\delta(x) \frac{\partial}{\partial x}, \quad (346)$$

kde derivácia na pravej strane pôsobí na zvyšok podintegrálneho výrazu sprevádzajúceho pod integrálom deriváciu δ -funkcie.

Zovšeobecnenie Diracovej delta-funkcie do viac rozmerov:

$$\delta^3(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z). \quad (347)$$

Potom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}) \delta^3(\vec{r}) d^3x = f(0). \quad (348)$$

9.2 Fourierov integrál

Nech $f(x)$ je funkcia, ktorá je

1. definovaná na $(-\infty, +\infty)$;
2. po častiach spojitá s deriváciou na intervaloch spojitosti;
3. absolútne integrovateľná, t.j. $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)| dx < \infty$.

Potom vo všetkých bodoch spojitosti ju môžeme reprezentovať *Fourierovým integrálom*

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk. \quad (349)$$

Funkcia $a(k)$ sa nazýva *Fourierov obraz* funkcie $f(x)$ a dostaneme ju

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (350)$$

Keď dosadíme (350) do (349), dostaneme

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk \right] dx'. \quad (351)$$

Porovnaním (351) s (349) dostaneme

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \quad (352)$$

Vidíme teda, že Diracova delta-funkcia je fourier-obrazom *jednotky*.

Zadefinujme funkciu

$$g_m(x) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-m}^m e^{ikx} dk = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(mx)}{x} \quad (353)$$

a tiež

$$g(x) \equiv \lim_{m \rightarrow \infty} g_m(x). \quad (354)$$

Pre $\forall m > 0$ je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_m(x) dx = 1. \quad (355)$$

Ďalej

$$\lim_{x \rightarrow 0} g_m(x) = \frac{m}{\pi}, \quad (356)$$

takže

$$\lim_{x \rightarrow 0} g(x) = \infty. \quad (357)$$

Nakoniec z vlastností Fourierovho integrálu vyplýva

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x) dx = f(0). \quad (358)$$

Vidíme, že Diracova delta-funkcia sa dá chápať tiež ako limita postupnosti funkcií $g_m(x)$. Situácia pre tri rôzne m je zobrazená na obrázku 5.

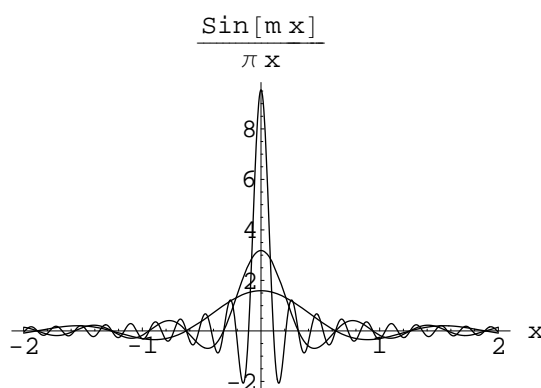


Figure 5: Funkcia $g_m(x)$ pre tri rôzne hodnoty parametra m . Graf s najnižším píkcom pri $x = 0$ zodpovedá hodnote $m = 5$, graf so stredným píkcom hodnote $m = 10$ a graf s najvyšším píkcom zodpovedá $m = 30$.

Systém funkcií

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad k \in (-\infty, +\infty), \quad (359)$$

tvorí bázu na priestore funkcií $f(x)$. Táto báza je *ortonormovaná* v zmysle

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(k - k'). \quad (360)$$

9.3 Prechod k jednotkám $\hbar = c = 1$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

9.4 Komplexný vektorový priestor

Vektorový (lineárny) priestor V je množina prvkov (vektory), na ktorej je definované ich sčítanie a ich násobenie komplexným číslom tak, že platí:

1. $\forall \vec{a}, \vec{b} : \vec{a} + \vec{b} \in V$;
2. $\forall \vec{a}, \vec{b} : \vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$;
3. $\forall \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} : (\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c} = \vec{a} + (\vec{b} + \vec{c})$;
4. $\exists! \vec{o}, \forall \vec{a} : \vec{a} + \vec{o} = \vec{a}$;
5. $\forall \vec{a}, \exists \vec{b} : \vec{a} + \vec{b} = \vec{o}$;
6. $\forall \vec{a}, \forall \alpha : \alpha \vec{a} \in V$;
7. $\forall \vec{a} : 1 \cdot \vec{a} = \vec{a}$;
8. $\forall \vec{a}, \forall \alpha, \beta : \alpha(\beta \vec{a}) = (\alpha\beta)\vec{a}$;
9. $\forall \vec{a}, \forall \alpha, \beta : (\alpha + \beta)\vec{a} = \alpha\vec{a} + \beta\vec{a}$;
10. $\forall \vec{a}, \vec{b}, \forall \alpha : \alpha(\vec{a} + \vec{b}) = \alpha\vec{a} + \alpha\vec{b}$;

kde $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{o} \in V$ a $\alpha, \beta \in \mathcal{C}$ (komplexné čísla).

Uvedieme niekoľko príkladov komplexných vektorových priestorov:

- Množina n -tíc komplexných čísel $\vec{z} = (z_1, \dots, z_n)$, kde súčet je definovaný ako

$$\vec{x} + \vec{y} = (x_1 + y_1, \dots, x_n + y_n)$$

a násobenie komplexným číslom

$$\alpha(z_1, \dots, z_n) = (\alpha z_1, \dots, \alpha z_n).$$

- Množina $n \times n$ komplexných matíc so štandardne definovaným maticovým sčítaním a násobením komplexným číslom.
- Množina všetkých komplexných funkcií jednej reálnej premennej, ktoré sú definované na intervale $(-\infty, +\infty)$ a pre ktoré integrál

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$$

je konečný. Sčítovanie funkcií a ich násobenie komplexným číslom je definované štandardne.

Vektory $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ sú *lineárne nezávislé*, ak rovnica

$$\alpha_1 \vec{a}_1 + \dots + \alpha_n \vec{a}_n = 0$$

má pre $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ iba triviálne riešenie $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 0$. V opačnom prípade sú vektory $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ *lineárne závislé*. Výraz na ľavej strane riešenej rovnice sa nazýva *lineárnou kombináciou* vektorov $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$. V *Einsteinovej sumačnej konvencii* to môžeme zapísať ako $\alpha_i \vec{a}_i$.

Minimálny počet lineárne nezávislých vektorov \vec{e}_i , pomocou ktorých vieme vyjadriť ľubovoľný vektor \vec{a} z priestoru V v tvare $\vec{a} = \alpha_i \vec{e}_i$, udáva *rozmer* priestoru V , $\dim V$. Množina vektorov $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^{\dim V}$ sa nazýva *bázou* vektorového priestoru V .

V prípade, že $\dim V = \infty$, ide o *nekonečno-rozmerný* priestor. Príkladom je priestor všetkých polynómov v komplexnej premennej z ; $P_m(z) \equiv \alpha_0 + \alpha_1 z + \dots + \alpha_m z^m$, kde $m = 1, 2, 3, \dots$. Súčet dvoch polynómov a ich násobenie komplexným číslom sú definované štandardne. Bázou je množina navzájom nezávislých polynómov $\{1, z, z^2, z^3, \dots\}$ s nekonečným počtom prvkov.

Na komplexnom vektorovom priestore môžeme zaviesť *komplexný skalárny súčin*. Takýto vektorový priestor potom nazývame *unitárnym*. Komplexný skalárny súčin je zobrazenie $V \times V \rightarrow \mathcal{C}$ s nasledujúcimi vlastnosťami pre $\forall \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in V, \alpha \in \mathcal{C}$:

1. $(\vec{a}, \vec{b} + \alpha \vec{c}) = (\vec{a}, \vec{b}) + \alpha (\vec{a}, \vec{c})$ *linearita* v druhom argumente
2. $(\vec{a}, \vec{b}) = (\vec{b}, \vec{a})^*$ *symetria*
3. $(\vec{a}, \vec{a}) > 0, \quad \forall \vec{a} \neq \vec{0}$ *pozitívna definitnosť*

Z prvých dvoch vlastností skalárneho súčinu vyplýva jeho *anti-linearita* v prvom argumente:

$$(\vec{a} + \alpha \vec{b}, \vec{c}) = (\vec{a}, \vec{c}) + \alpha^* (\vec{b}, \vec{c}).$$

Ďalej môžeme ukázať, že

$$(\vec{a}, \vec{a}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{a} = \vec{0}.$$

Pre komplexný skalárny súčin platí *Schwarzova nerovnosť*:

$$|(\vec{a}, \vec{b})|^2 \leq (\vec{a}, \vec{a})(\vec{b}, \vec{b}), \quad \forall \vec{a}, \vec{b} \in V.$$

Príklady komplexného skalárneho súčinu na komplexných vektorových priestoroch:

- Na množine n -tíc komplexných čísel:

$$(\vec{a}, \vec{b}) = a_i^* b_i \quad (i = 1, \dots, n),$$

kde a_i a b_i sú komponenty vektorov \vec{a} a \vec{b} .

- Na množine všetkých kvadraticky integrovateľných komplexných premenných jednej reálnej premennej:

$$(\psi, \phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \phi(x) dx.$$

Ak pre dva nenulové vektory $\vec{a}, \vec{b} \in V$ platí

$$(\vec{a}, \vec{b}) = 0,$$

potom hovoríme, že sú navzájom *ortogonálne*. Báza $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^n$ vektorového priestoru V sa nazýva *ortogonálna*, keď

$$(\vec{e}_i, \vec{e}_j) = 0, \quad \forall i \neq j.$$

Na vektorovom priestore môžeme zaviesť *normu vektora*. Takýto vektorový priestor potom nazývame *normovaným*. Norma je zobrazenie $V \rightarrow \mathcal{R}$ s nasledujúcimi vlastnosťami pre $\forall \vec{a}, \vec{b} \in V, \alpha \in \mathcal{C}$:

1. $\|\vec{a}\| > 0, \quad \forall \vec{a} \neq \vec{o}$ *pozitívna definitnosť*
2. $\|\alpha\vec{a}\| = |\alpha| \cdot \|\vec{a}\|$ *linearita*
3. $\|\vec{a} + \vec{b}\| \leq \|\vec{a}\| + \|\vec{b}\|$ *trojuholníková nerovnosť*

Z prvých dvoch vlastností vyplýva

$$\|\vec{a}\| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{a} = \vec{o}.$$

Ortogonálna báza, ktorej bázové vektory majú jednotkovú dĺžku, sa nazýva *ortonormálna*.

Na unitárnom vektorovom priestore môžeme prirodzene zaviesť normu pomocou skalárneho súčiny

$$\|\vec{a}\| \equiv \sqrt{(\vec{a}, \vec{a})}.$$

Uvažujme rozklad vektora \vec{a} v báze $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^n$:

$$\vec{a} = a_i \vec{e}_i.$$

Ak uvažovaná báza je ortogonálna, potom

$$a_i = \frac{(\vec{e}_i, \vec{a})}{(\vec{e}_i, \vec{e}_i)}.$$

Ak uvažovaná báza je ortonormálna, pričom norma je definovaná pomocou skalárneho súčiny, potom

$$a_i = (\vec{e}_i, \vec{a}).$$

Lineárna forma na V je zobrazenie $f : V \rightarrow \mathcal{C}$, ktoré je lineárne

$$\forall \vec{a}, \vec{b} \in V, \forall \alpha \in \mathcal{C} : \quad f(\alpha\vec{a} + \vec{b}) = \alpha f(\vec{a}) + f(\vec{b}).$$

Množina všetkých lineárnych foriem na V tvorí vektorový priestor, označme ho \tilde{V} . Priestor \tilde{V} sa nazýva *duálnym* k V . Prvky priestoru \tilde{V} sa zvyknú nazývať aj *kovektory*. Priestor \tilde{V} má rovnakú dimenziu ako priestor V . Pre fixované $\vec{a} \in V$ a pre $\forall f \in \tilde{V}$ dostávame zobrazenie $\tilde{V} \rightarrow \mathcal{C}$, ktoré je lineárnou formou na \tilde{V} . Dá sa ukázať, že duálny priestor k \tilde{V} je V : $\tilde{\tilde{V}} = V$.

Môžeme definovať zobrazenie $g : V \times \tilde{V} \rightarrow \mathcal{C}$, ktoré každému $\vec{a} \in V$ a každému $f \in \tilde{V}$ priradí komplexné číslo $g(f, \vec{a}) \equiv f(\vec{a})$.

Nech V je unitárny vektorový priestor. Pomocou skalárneho súčiny môžeme každému vektoru $\vec{a} \in V$ priradiť lineárnu formu $\tilde{a} \in \tilde{V}$ tak, že

$$\tilde{a}(\vec{b}) \equiv (\vec{a}, \vec{b}), \quad \forall \vec{b} \in V.$$

Skalárny súčin teda indukuje zobrazenie $V \rightarrow \tilde{V}$.

Lineárny operátor na V je zobrazenie $\hat{O} : V \rightarrow V$, ktoré je lineárne

$$\forall \vec{a}, \vec{b} \in V, \forall \alpha \in \mathcal{C} : \quad \hat{O}(\alpha \vec{a} + \vec{b}) = \alpha \cdot \hat{O}\vec{a} + \hat{O}\vec{b}.$$

Pôsobenie operátora je jednoznačne dané, ak poznáme jeho pôsobenie na vektory bázy

$$\vec{a}' = \hat{O}\vec{a} = \hat{O}a_i \vec{e}_i = a_i(\hat{O}\vec{e}_i).$$

Ak V je unitárny priestor a \vec{e}_i vektory ortonormálnej bázy, potom súradnice vektora \vec{a}' dostaneme nasledovne

$$a'_i = (\vec{e}_i, \vec{a}') = a_j(\vec{e}_i, \hat{O}\vec{e}_j) = O_{ij}a_j,$$

kde

$$O_{ij} \equiv (\vec{e}_i, \hat{O}\vec{e}_j).$$

Vo fixovanej ortonormálnej báze je teda operátor \hat{O} jednoznačne reprezentovaný maticou O_{ij} .

Pre lineárny operátor \hat{O} na V je \vec{x} jeho *vlastný vektor* a λ jeho *vlastná hodnota* zodpovedajúca vektoru \vec{x} , ak je splnená rovnica

$$\hat{O}\vec{x} = \lambda\vec{x}.$$

Uvažujme normovaný vektorový priestor V a v ňom postupnosť vektorov $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^{\infty}$. Táto postupnosť konverguje k vektoru $\vec{x} \in V$, ak pre každé $\varepsilon > 0$ existuje n také, že pre všetky $i > n$ je

$$\|\vec{x} - \vec{x}_i\| \leq \varepsilon.$$

Cauchyho postupnosťou nazveme takú postupnosť $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^{\infty}$ z V , že pre každé $\varepsilon > 0$ existuje n také, že pre všetky $i, j > n$ je

$$\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\| \leq \varepsilon.$$

Nie každá Cauchyho postupnosť konverguje, pretože niekedy jej limita leží mimo uvažovaný vektorový priestor. Vektorový priestor V sa nazýva *úplným*, ak každá Cauchyho postupnosť jeho prvkov konverguje, t.j. jej limita leží vo V .

9.5 Hilbertov priestor a Diracov formalizmus

Hilbertov priestor \mathcal{H} je **úplný unitárny** vektorový priestor. Nasledovnú symboliku a terminológiu zaviedol Dirac. Tradičnému označeniu³⁴ vektora $\vec{a} \in \mathcal{H}$ zodpovedá Diracovo označenie $|a\rangle$ a názov *ket-vektor*. Kovektoru \tilde{a} z duálneho priestoru $\tilde{\mathcal{H}}$, ktorý je priradený vektoru \vec{a} prostredníctvom vzťahu

$$\tilde{a}(\vec{b}) \equiv (\vec{a}, \vec{b}), \quad \forall \vec{b} \in \mathcal{H}.$$

priradil Dirac symbol $\langle a|$, ktorý nazval *bra-vektor*. Nakoniec $\tilde{a}(\vec{b})$ nahradil symbolom $\langle a|b\rangle$, ktorý je ale z definície rovný skalárnemu súčinu vektorov $|a\rangle$ a $|b\rangle$

$$\langle a|b\rangle = (|a\rangle, |b\rangle).$$

Potom z vlastností skalárneho súčinu dostaneme

$$\langle a|\beta b + c\rangle = \beta \langle a|b\rangle + \langle a|c\rangle, \quad (361)$$

$$\langle \alpha a + b|c\rangle = \alpha^* \langle a|c\rangle + \langle b|c\rangle, \quad (362)$$

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*, \quad (363)$$

$$\langle a|a\rangle \geq 0. \quad (364)$$

³⁴Použitému napríklad v Dodatku 9.4.

Majme na Hilbertovom priestore ortonormálnu bázu $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$, kde $n = \dim \mathcal{H}$. Potom každý vektor $|a\rangle \in \mathcal{H}$ môžeme vyjadriť pomocou tejto bázy

$$|a\rangle = a_i |e_i\rangle, \quad (365)$$

kde a_i sú súradnice vektora $|a\rangle$ v danej báze. Tieto súradnice dostaneme z rovnice

$$a_i = \langle e_i | a \rangle. \quad (366)$$

Z rovníc (365) a (366) môžeme napísať

$$|a\rangle = \langle e_i | a \rangle |e_i\rangle = |e_i\rangle \langle e_i | a \rangle. \quad (367)$$

Nestratíme zo zreteľa, že cez i sa sčítuje. Porovnaním ľavej a pravej strany (367) dostaneme

$$\sum_{i=1}^n |e_i\rangle \langle e_i| = \hat{\mathbf{I}}, \quad (368)$$

kde $\hat{\mathbf{I}}$ je jednotkový operátor. Vsunutie jednotkového operátora v takejto podobe do upravovaného výrazu je častým a výhodným trikom ako rýchlo dospieť k hľadanému výsledku.

Normovaným nazveme vektor $|a\rangle$, pre ktorý $\langle a | a \rangle = 1$. Súradnice normovaného vektora spĺňajú nasledovný vzťah

$$1 = \langle a | a \rangle = a_i^* a_j \langle e_i | e_j \rangle = a_i^* a_i = \sum_{i=1}^n |a_i|^2. \quad (369)$$

Vo zvolenej báze sa pôsobenie lineárneho operátora na vektor, $\hat{O}|a\rangle = |a'\rangle$, dá vyjadriť maticovým násobením súradníc vektora maticou reprezentujúcou daný operátor

$$a'_i = \langle e_i | a' \rangle = \langle e_i | \hat{O} | a \rangle = a_j \langle e_i | \hat{O} | e_j \rangle = O_{ij} a_j, \quad (370)$$

kde

$$O_{ij} \equiv \langle e_i | \hat{O} | e_j \rangle. \quad (371)$$

Využívajúc trik s jednotkovým operátorom (368) môžeme lineárny operátor \hat{O} vyjadriť tiež v nasledovnom tvare

$$\hat{O} = \hat{\mathbf{I}} \hat{O} \hat{\mathbf{I}} = \underbrace{(|e_i\rangle \langle e_i|)}_{O_{ij}} \hat{O} (|e_j\rangle \langle e_j|) = O_{ij} |e_i\rangle \langle e_j|. \quad (372)$$

9.6 Hermitove operátory

Pozorovateľným v kvantovej mechanike zodpovedá špeciálna trieda lineárnych operátorov, tzv. *Hermitove operátory*. Aby sme mohli zaviesť Hermitove operátory, potrebujeme zdefinovať pojem *hermitovsky združeného operátora*. Hermitovsky združeným operátorom k operátoru \hat{O} nazveme operátor \hat{O}^\dagger taký, že pre $\forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$ platí

$$(\hat{O}^\dagger |a\rangle, |b\rangle) = (|a\rangle, \hat{O} |b\rangle), \quad (373)$$

kde zátvorky označujú skalárny súčin. Keď to prepíšeme podľa Diraca, dostaneme $\langle \hat{O}^\dagger a | b \rangle = \langle a | \hat{O} | b \rangle$. Vzhľadom na symetriu skalárneho súčinu môžeme ľavú stranu rovnice (373) prepísať ako $(|b\rangle, \hat{O}^\dagger |a\rangle)^*$, takže

$$(|b\rangle, \hat{O}^\dagger |a\rangle)^* = (|a\rangle, \hat{O} |b\rangle). \quad (374)$$

V Diracovom formalizme to je

$$\langle b|\hat{O}^\dagger|a\rangle^* = \langle a|\hat{O}|b\rangle \quad (375)$$

Operáciu *hermitovského združenía*, ktorá priraduje lineárnemu operátoru jeho hermitovsky združený náprotivok, sme označili symbolom “dýky”. Pre hermitovské združenie súčinu dvoch lineárnych operátorov platí

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (376)$$

Nech O_{ij} sú súradnice operátora \hat{O} v ortonormálnej báze $|e_i\rangle_{i=1}^n$. Potom súradnice hermitovsky združeného operátora \hat{O}^\dagger podľa (375) sú

$$O_{ij}^\dagger = O_{ji}^*. \quad (377)$$

Maticu hermitovsky združeného operátora teda dostaneme, keď maticu pôvodného operátora komplexne združíme a transponujeme.

Ako sa transformuje $\langle a|$, keď

$$|a\rangle \rightarrow |a'\rangle = \hat{O}|a\rangle? \quad (378)$$

Vzt'ah (378) je ekvivalentný tvrdeniu, že pre $\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$ platí

$$\langle x|a'\rangle = \langle x|\hat{O}|a\rangle. \quad (379)$$

Po komplexnom združení tejto rovnice dostaneme

$$\langle a'|x\rangle = \langle a|\hat{O}^\dagger|x\rangle, \quad (380)$$

čo je ekvivalentné identite

$$\langle a| \rightarrow \langle a'| = \langle a|\hat{O}^\dagger. \quad (381)$$

Lineárny operátor \hat{O} nazveme *Hermitovým*, ak pre $\forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$ platí

$$\langle b|\hat{O}|a\rangle^* = \langle a|\hat{O}|b\rangle. \quad (382)$$

Inými slovami, z porovnania (375) a (382), Hermitov operátor je totožný so svojim hermitovsky združeným operátorom

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O}. \quad (383)$$

Pre hermitovské operátory platí, že

- všetky ich vlastné hodnoty sú **reálne čísla**;
- vlastné vektory, ktoré prislúchajú rôznym vlastným hodnotám, sú navzájom **ortogonálne**;
- všetky vlastné vektory každého Hermitovho operátora na Hilbertovom priestore tvoria bázu tohoto priestoru (*teoréma úplnosti*).

Nie všetkým vlastným vektorom hermitovského operátora zodpovedajú rôzne vlastné hodnoty. Ak jedna vlastná hodnota prináleží d rôznym vlastným vektorom, hovoríme, že je táto vlastná hodnota d -krát *degenerovaná*.

Nech O_{ij} sú súradnice Hermitovho operátora \hat{O} v ortonormálnej báze $|e_i\rangle_{i=1}^n$. Potom, vzhľadom na (383), platí

$$O_{ji}^* = O_{ij}. \quad (384)$$

Odtiaľ bezprostredne vyplýva, že hermitovská matica má na hlavnej diagonále reálne čísla. Ak bázu $|e_i\rangle_{i=1}^n$ tvoria vlastné vektory operátora \hat{O}

$$\hat{O}|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle, \quad (385)$$

kde λ_i sú reálne vlastné hodnoty, potom

$$O_{ij} = \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle = \lambda_i\delta_{ij}. \quad (386)$$

Vidíme teda, že v báze vlastných vektorov je matica O_{ij} diagonálna, pričom diagonálne prvky sú tvorené vlastnými hodnotami operátora \hat{O} . V tejto báze ho môžeme tiež vyjadriť v tvare

$$\hat{O} = \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|. \quad (387)$$

9.7 Unitárne operátory

Uvažujme dve ortonormálne bázy $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ a $\{|f_i\rangle\}_{i=1}^n$. Označme súradnice vektora $|a\rangle$ v týchto bázach ako a_i^e a a_i^f

$$a_i^e = \langle e_i|a\rangle, \quad a_i^f = \langle f_i|a\rangle. \quad (388)$$

Vložením jednotky v tvare (368) ľahko odvodíme transformačný vzťah medzi súradnicami a_i^e a a_i^f

$$a_i^f = \langle f_i|a\rangle = \langle f_i|e_j\rangle\langle e_j|a\rangle = U_{ij}a_j^e, \quad (389)$$

kde sme zadefinovali transformačnú maticu U s komponentami

$$U_{ij} = \langle f_i|e_j\rangle. \quad (390)$$

Prechod medzi bazami $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ a $\{|f_i\rangle\}_{i=1}^n$

$$|f_i\rangle = U_{ij}^*|e_j\rangle, \quad |e_i\rangle = U_{ji}|f_j\rangle. \quad (391)$$

Aj hermitovský operátor \hat{O} je v rôznych bazách reprezentovaný rôznymi maticami

$$O_{ij}^e = \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle, \quad O_{ij}^f = \langle f_i|\hat{O}|f_j\rangle. \quad (392)$$

Do druhej z týchto rovníc dosadíme jednotkové operátory tvorené vektormi bázy $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ a dostaneme transformačný vzťah medzi maticovými vyjadreniami operátora \hat{O} v jednotlivých bazách

$$O_{ij}^f = \langle f_i|(|e_k\rangle\langle e_k|)\hat{O}(|e_\ell\rangle\langle e_\ell|)|f_j\rangle = U_{ik}O_{k\ell}^e U_{j\ell}^*. \quad (393)$$

Transformačná matica U_{ij} spĺňa vzťah

$$U_{ij}U_{kj}^* = \langle f_i|e_j\rangle\langle e_j|f_k\rangle = \langle f_i|f_k\rangle = \delta_{ik}. \quad (394)$$

Maticy spĺňajúce (394) sa nazývajú *unitárne*. V kompaktnom tvare môžeme túto podmienku zapísať v tvare

$$UU^\dagger = \mathbf{I}. \quad (395)$$

Maticy U spĺňajúce takúto podmienku sa nazývajú *unitárne*.

Unitárne matice sú vo zvolenej báze reprezentantmi unitárnych operátorov. Operátor \hat{U} nazveme *unitárnym*, ak pre $\forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle a|\hat{U}^\dagger\hat{U}|b\rangle = \langle a|b\rangle. \quad (396)$$

Toto je ekvivalentné operátorovej identite

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{\mathbf{I}}. \quad (397)$$

Z rovnice (396) vyplýva, že ak transformujeme súčasne unitárnym operátorom vektory $|a\rangle$ aj $|b\rangle$, ich skalárny súčin sa nezmení. Čitateľ sa ľahko presvedčí, že, pre konkrétnu bázu, z rovnice (397) dostaneme (394).

V konečnorozmernom Hilbertovom priestore tvoria vlastné vektory unitárneho operátora úplnú bázu. Jeho vlastné hodnoty majú tvar $e^{i\phi}$, kde $\phi \in \mathcal{R}$.

9.8 Operátorové funkcie

Operátorovými funkciami budeme nazývať funkcie operátorov. Takéto funkcie môžeme definovať dvoma spôsobmi:

1. Nech \hat{A} je Hermitov lineárny operátor na \mathcal{H} . Nech a_i sú jeho vlastné hodnoty

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

a nech $f(z)$ je komplexná funkcia na komplexných číslach, $f: \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$. Potom operátorovou funkciou $f(\hat{A})$ nazveme výraz

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_i f(a_i)|a_i\rangle\langle a_i|; \quad (398)$$

2. Nech \hat{A} je Hermitov lineárny operátor na \mathcal{H} a $f(z)$ komplexná funkcia na komplexných číslach, $f: \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$, s mocninným rozvojom v tvare

$$f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} f_k z^k.$$

Potom operátorovou funkciou $f(\hat{A})$ nazveme výraz

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} f_k \hat{A}^k. \quad (399)$$

Ukážeme, že obidve definície sú ekvivalentné. Vychádzajúc z druhej definície, môžeme napísať

$$f(\hat{A}) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} f_k \hat{A}^k = \sum_{k=1}^{\infty} f_k \left(\sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i| \right)^k. \quad (400)$$

Využívajúc ortonormálnosť vlastných vektorov Hermitovho operátora \hat{A} dá sa ukázať, že $(\sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|)^k = \sum_i (a_i)^k |a_i\rangle\langle a_i|$. Keď to dosadíme do vzťahu (400), dostaneme

$$f(\hat{A}) = \sum_i \left(\sum_k f_k a_i^k \right) |a_i\rangle\langle a_i| = \sum_i f(a_i) |a_i\rangle\langle a_i|, \quad (401)$$

čo je práve prvá definícia operátorovej funkcie.

Definícia *operátorovej derivácie* operátorovej funkcie: Nech $f(z)$ a $g(z)$ sú komplexné funkcie komplexnej premennej také, že

$$g(z) = \frac{df(z)}{dz}.$$

Potom operátorovou deriváciou operátorovej funkcie $f(\hat{A})$ podľa operátora \hat{A} nazveme operátorovú funkciu $g(\hat{A})$,

$$\frac{df(\hat{A})}{d\hat{A}} = g(\hat{A}). \quad (402)$$

Definícia *parametrickej derivácie* operátora: Nech $\hat{A}(s)$ je operátor, ktorý závisí na reálnom parametri s . Potom parametrickou deriváciou operátora \hat{A} podľa parametra s je definovaná ako

$$\frac{d\hat{A}}{ds}(s) \equiv \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\hat{A}(s + \Delta s) - \hat{A}(s)}{\Delta s}. \quad (403)$$

Nech operátory \hat{A} a \hat{B} závisia na parametri s . Platí

$$\frac{d\hat{A}\hat{B}}{ds}(s) = \frac{d\hat{A}}{ds}(s)\hat{B}(s) + \hat{A}(s)\frac{d\hat{B}}{ds}(s). \quad (404)$$

Pre každý unitárny operátor \hat{U} môžeme nájsť hermitovský operátor \hat{H} taký, že

$$\hat{U} = e^{i\hat{H}}. \quad (405)$$

Definícia *komutátora* dvoch operátorov:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (406)$$

Platí

1.

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}; \quad (407)$$

2. Jacobiho identita:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0; \quad (408)$$

3. Ak $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, potom operátory \hat{A} a \hat{B} majú spoločné vlastné vektory;

4. Nech $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{\mathbf{I}}$. Nech $f(\hat{A})$ je operátorová funkcia. Potom

$$\frac{df(\hat{A})}{d\hat{A}} = [\hat{B}, f(\hat{A})]; \quad (409)$$

5. Pre všetky operátory \hat{A} , \hat{B} platí

$$e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \dots \quad (410)$$