

FEYNMANOVY

PŘEDNÁŠKY Z FYZIKY

s řešenými příklady

3/3

FEYNMAN • LEIGHTON • SANDS

EX
G
M
E
N
I

FEYNMANOVY PŘEDNÁŠKY Z FYZIKY

FRAG
MENT

PRAHA 2002

**Richard P. Feynman
Robert B. Leighton
Matthew Sands**

**FEYNMANOVY
přednášky z fyziky
s řešenými příklady**

Published by arrangement with Addison Wesley Longman, Inc.
© California Institute of Technology, USA, 1965
ISBN 0-201-02118-8-P (anglická verze, 3. vydání, 1966)

All rights reserved. This book, or parts thereof may not be reproduced in any form without written permission of the copyright holder.

Obálka a grafická úptava: Marek Jodas
Odborná korektura: Doc. Ing. Ivan Štoll, CSc.
Řešení příkladů a cvičení: Doc. Ing. Ivan Štoll, CSc.
Vydalo nakladatelství FRAGMENT,
Humpolecká 1503, Havlíčkův Brod
jako svou 481. publikaci
Vytiskla CENTA spol. s r.o.
1. vydání, 2002

České vydání © FRAGMENT, 2002
© Marek Jodas, 2002
© Ivan Štoll, 2002

Všechna práva vyhrazena. Žádná část této knihy nesmí být reprodukována a rozšiřována žádnou formou bez písemného souhlasu majitelů práv.

ISBN 80-7200-421-2 (česká verze, 1. vydání, 2002)

FEYNMANOVY

**PŘEDNÁŠKY
Z FYZIKY**
s řešenými příklady

3/3

FEYNMAN • LEIGHTON • SANDS

FRAG
MENT

Teorie kvantové mechaniky, velký triumf fyziky dvacátého století, je stará už téměř 40 let,¹⁾ ale přesto od nás studenti v úvodním kurzu (pro mnohé zároveň i posledním) dostávají pouze letmou zmínku týkající se této ústřední části našich poznatků o fyzikálním světě. Zasloužili by si, abychom se k nim zachovali lépe. Tyto přednášky jsou pokusem seznámit je s hlavními a základními myšlenkami kvantové mechaniky způsobem, který bude, doufejme, srozumitelný. Přístup s jakým se tu setkáte, je neobvyklý a z velké části jsme jej brali jako experiment. Když jsem viděl, jak snadno si někteří studenti k němu našli cestu, myslím, že měl úspěch. Samozřejmě zůstalo místo pro vylepšení, které zajisté přijde, jen co získáme větší zkušenosti s výukou. Najdete zde zachycení prvního takového pokusu.

Ve dvouletém sledu Feynmanových přednášek z fyziky, které proběhly od srpna 1961 do května 1963 v rámci úvodního kurzu fyziky na Kalifornském technickém institutu, byly kvantové mechanické pojmy zavedeny vždy, když byly pro pochopení popisovaného jevu nezbytné. Kromě toho, posledních 12 přednášek druhého roku bylo věnováno promyšlenějšímu úvodu do některých koncepcí kvantové mechaniky. Jak se přednášky chýlily ke konci, bylo zřejmé, že na kvantovou mechaniku nezbylo dost času. Při přípravě látky jsme neustále zjišťovali, že s těmi základními prostředky, které jsme si osvojili, lze prodiskutovat i jiná důležitá a zajímavá témata. Taktéž jsme měli strach, že příliš stručné pojednání o Schrödingerově vlnové funkci, které bylo zahrnuto ve dvanácté přednášce, nebude poskytovat dostatečné přemostění k tradičnějším přístupům, s jakými se studenti doufejme setkají v mnoha jiných knihách. Proto jsme se rozhodli rozšířit kurz o dalších sedm přednášek; ty jsme měli pro posluchače druhého ročníku v květnu 1964. Částečně jsme doplnili a navázali na látku, kterou jsme do té doby probrali.

Do tohoto dílu jsme zahrnuli přednášky z obou let, přičemž jsme trochu upravili jejich následnost. Kromě toho, dvě přednášky, které původně sloužily studentům prvního ročníku jako úvod do kvantové mechaniky, byly přeneseny z dílu I (kapitoly 37 a 38) a zařazeny na začátek, aby tato kniha tvořila samostatný celek, relativně nezávislý na předchozích dvou.²⁾ Několik myšlenek o kvantování momentu hybnosti (včetně diskuze o Sternově-Gerlachově experimentu) jsme zmínili v kapitolách 34 a 35 2. dílu; předpokládáme, že čtenář je s nimi seznámen.

Tento soubor přednášek se od samého začátku snaží objasnit nejzákladnější a nejobecnější rysy kvantové mechaniky. V prvních kapitolách se přímo zabýváme myšlenkami týkajícími se amplitudy pravděpodobnosti, interference amplitud, abstraktním označováním stavu, superpozicí (skládáním) a rozkládáním stavů – od první chvíle používáme diracovskou symboliku. Ve všech případech uvádíme myšlenky společně s podrobnou diskuzí vybraných konkrétních příkladů – ve snaze dát fyzikálním myšlenkám co možná nejreálnější podobu. Dále následuje časová závislost stavů včetně stavů s přesně určenou hodnotou energie a získané poznatky se hned využívají ke zkoumání dvouhadinových soustav. Podrobný rozbor amoniakového maseru nám poskytuje vhodný rámec pro úvod do teorie absorpce záření a indukovaných přechodů. Přednášky dále pokračují uvažováním o složitějších systémech, které vede k diskuzi o šíření elektronů v krystalu a k poměrně vyčerpávajícímu zpracování kvantové mechaniky momentu hybnosti. Náš úvod do kvantové mechaniky končí kapitolou 20: debatou o Schrödingerově vlnové funkci a její diferenciální rovnici spolu s řešením pro atom vodíku.

Poslední kapitolu tohoto dílu jsme neměli v úmyslu do našeho kurzu zařadit. Je to seminář o supravodivosti, podaný ve stejném duchu jako oddechové lekce prvních dvou dílů s úmyslem

1) Psáno v roce 1964 (pozn. red.)

2) V českém vydání tyto kapitoly neopakujeme a odkazujeme na 1. díl Feynmanových přednášek. (pozn. red.)

odkryt studentům širší pohled na vztahy, které se učí, směrem k obecnému fyzikálnímu rozhledu. Feynmanův epilog slouží jako tečka za celou třídílnou sérií.

Jak jsme vysvětlili již v předmluvě k dílu 1, tyto přednášky byly pouze jednou stránkou programu pro vytvoření nového úvodního kurzu, uskutečňovaného na Kalifornském technickém institutu pod vedením Výboru pro úpravu kurzů fyziky (Robert Leighton, Victor Neher a Matthew Sands). Program mohl být realizován díky finančnímu příspěvku Fordovy nadace. Při technických podrobnostech souvisejících s přípravou tohoto dílu nám pomáhalo mnoho lidí: Marylou Clayton, Julie Curio, James Hartle, Tom Harvey, Martin Israel, Patricia Preuss, Fanny Warren a Barbara Zimmerman. Profesori Gerry Neugebauer a Charles Wilts přispěli velkou měrou k přesnosti a jasnosti vysvětlované látky tím, že pozorně zrecenzovali téměř celý rukopis.

Příběh kvantové mechaniky, který zde najdete, však patří Richardu Feynmanovi. Naše práce nevyjde nazmar, podaří-li se nám přenést na jiné alespoň část toho intelektuálního vzrušení, které jsme sami zažili, když jsme jej osobně sledovali, jak odvíjí myšlenky ve svých Přednáškách z fyziky.

PROSINEC 1964, MATTHEW SANDS

Třetí díl Feynmanových přednášek z fyziky, který vychází v českém překladu poprvé, je věnován nejhlubší a nejpoetičtější oblasti fyziky, fyzice kvantové. Byl přeložen z 3. amerického vydání (Addison – Wesley 1966) s přihlédnutím k vydáním ve slovenském a ruském jazyce. Podobně jako u prvních dvou dílů je doplněn úlohami, které tvoří součást kurzu, s uvedením výsledků a stručných návodů k řešení.

Kvantová fyzika obvykle není součástí základního kurzu fyziky na vysokých školách a na fyzikálních fakultách se probírá až ve vyšších ročnících s použitím formálně náročného matematického aparátu. Feynman měl však za to, že studenti by se měli seznámit s kvantovou fyzikou co nejdříve. Již ve druhém ročníku předestřel studentům úplně nový svět, obraz a filozofii přírody na atomové úrovni, s amplitudami, pravděpodobnostmi a vlnami, těžko pochopitelnými a uchopitelnými částicemi. Sami fyzikové byli kdysi nad tímto chováním přírody zaraženi a kladli si otázky, zda takové částice – vlny jsou vůbec hmotné. Setká-li se částice s antičásticí, obě zmizí, zaniknou, a na jejich místě se objeví fotony, které nemají žádnou klidovou hmotnost. A přece, jak říká Feynman, je sporné, co je vlastně hmotnější, materiálnější, zda fotony nebo výchozí částice. Je fascinující, že při vši neuchopitelnosti a rozplynulosti částic mikrosvěta a prázdnotě prostoru uvnitř atomu vznikají tak pevné struktury, které tvoří náš solidní svět.

Feynman volí obrácený postup než je obvyklé. Začíná experimenty a představami o prostorovém kvantování, o stacionárních stavech a časovém vývoji systémů, používá ilustrace z oblasti organické chemie, jaderné a částicové fyziky, krystalů a polovodičů a ukazuje jak všechny tyto jevy mají společný základ v kvantových vlastnostech přírody. Teprve později se dopracovává k používání vlnových funkcí a matematického formalizmu kvantové fyziky. Ve Feynmanově době začala kvantová fyzika vydávat i první plody praktických aplikací, které měnily a dále mění náš svět – tranzistory, lasery, supravodiče – a i jim se Feynman věnuje.

Podobně jako u prvních dvou dílů Přednášek, ani třetí díl není možno považovat za učebnici v běžném smyslu a přináší užitek teprve alespoň trochu připravenému čtenáři. Feynman sám přiznává, že neměl zkušenosti s výukou základního kurzu fyziky a to co se jemu zdálo samozřejmé a průhledné, bylo nad síly velké části jeho studentů. Ale, jak říká v doslovu, dva nebo tři tucty studentů sledovaly jeho přednášky s nadšením a vzrušovalo je velké dobrodružství poznání. Bylo by zajímavé dnes zjistit, jaká byla další životní dráha těchto dvou nebo tří tuctů Feynmanových studentů a jak sami přispěli k pokroku vědy. Ale i když čtenář nebude pronikat v celé šíři a hloubce do detailů Feynmanových úvah, určité v nich najde inspiraci, uvědomí si nové souvislosti a pocítí vzrušení nad vlnobitím pravděpodobnosti, které se tají pod pevnou kůrou našeho světa.

BŘEZEN 2002, IVAN ŠTOLL

- 1 AMPLITUDY PRAVDĚPODOBNOSTI**
 - 1.1 Zakony skládání amplitud /11
 - 1.2 Dvojitřbinový interferenční obrazec /16
 - 1.3 Rozptyl na krystalu /18
 - 1.4 Identické částice /21
- 2 IDENTICKÉ ČÁSTICE**
 - 2.1 Boscho částice a Fermiho částice /29
 - 2.2 Stav se dvěma Boscho částicemi /32
 - 2.3 Stav s n Boscho částicemi /35
 - 2.4 Emise a absorpce fotonů /37
 - 2.5 Spektrum absolutně černého tělesa /39
 - 2.6 Tekuté helium /44
 - 2.7 Vylučovací princip /44
- 3 SPIN JEDNA**
 - 3.1 Filtrování atomů pomocí Sternova-Gerlachova přístroje /52
 - 3.2 Experimenty s profiltrovanými atomy /57
 - 3.3 Sternovy-Gerlachovy filtry uspořádané za sebou /59
 - 3.4 Bázové stavy /60
 - 3.5 Interferující amplitudy /62
 - 3.6 Aparát kvantové mechaniky /66
 - 3.7 Transformování do jiné báze /68
 - 3.8 Jiné situace /70
- 4 SPIN 1/2**
 - 4.1 Transformace amplitud /73
 - 4.2 Transformace do pootočené soustavy souřadnic /75
 - 4.3 Rotace kolem osy z /79
 - 4.4 Rotace o 180° a 90° kolem osy y /83
 - 4.5 Rotace kolem osy x /86
 - 4.6 Libovolné rotace /88
- 5 ZÁVISLOST AMPLITUD NA ČASE**
 - 5.1 Atomy v klidu. Stacionární stavy /94
 - 5.2 Rovnoměrný pohyb /97
 - 5.3 Potenciální energie. Zachování energie /100
 - 5.4 Síly. Klasická limita /104
 - 5.5 Precese částice se spinem $1/2$ /106
- 6 HAMILTONOVA MATICE**
 - 6.1 Amplitudy a vektory /111
 - 6.2 Rozklad stavových vektorů /113
 - 6.3 Jaké jsou bázové stavy tohoto světa? /117
 - 6.4 Jak se stavy mění s časem /119
 - 6.5 Hamiltonova matice /122
 - 6.6 Molekula amoniaku /123
- 7 AMONIAKOVÝ MASER**
 - 7.1 Stav molekuly amoniaku /129
 - 7.2 Molekula ve statickém elektrickém poli /134
- 7.3 Přechody v časově závislém poli /140**
- 7.4 Přechody při rezonanci /142**
- 7.5 Přechody mimo rezonanci /145**
- 7.6 Absorpce světla /146**
- 8 JINÉ DVOJHLADINOVÉ SOUSTAVY**
 - 8.1 Ion molekuly vodíku /150
 - 8.2 Jaderné síly /157
 - 8.3 Molekula vodíku /159
 - 8.4 Molekula benzenu /162
 - 8.5 Barviva /165
 - 8.6 Hamiltonián částice se spinem $1/2$ nacházející se v magnetickém poli /166
 - 8.7 Spinující elektron v magnetickém poli /169
- 9 DALŠÍ DVOJHLADINOVÉ SOUSTAVY**
 - 9.1 Pauliho spinové matice /174
 - 9.2 Spinové matice jako operátory /180
 - 9.3 Řešení rovnic pro dva stavy /184
 - 9.4 Polarizační stavy fotonu /185
 - 9.5 Neutrální kaon /189
 - 9.6 Zobecnění na soustavy s N stavy /198
- 10 HYPERJEMNÉ ROZŠTĚPENÍ V ATOMU VODÍKU**
 - 10.1 Bázové stavy soustavy dvou částic se spinem $1/2$ /204
 - 10.2 Hamiltonián základního stavu atomu vodíku /207
 - 10.3 Energetické hladiny /213
 - 10.4 Zeemanův jev /215
 - 10.5 Stav v magnetickém poli /219
 - 10.6 Projekční matice pro spin $1/2$ /222
- 11 POHYB ELEKTRONU V KRYSALOVÉ MŘÍŽCE**
 - 11.1 Stav elektronu v jednorozměrné mřížce /227
 - 11.2 Stav s přesně určenou hodnotou energie /230
 - 11.3 Stav závislé na čase /234
 - 11.4 Elektron v trojrozměrné mřížce /235
 - 11.5 Jiné stavy elektronu v mřížce /237
 - 11.6 Rozptyl na poruchách mřížky /238
 - 11.7 Zachycení na atomu příměsi v mřížce /241
 - 11.8 Amplitudy rozptylu a vázané stavy /242
- 12 POLOVODIČE**
 - 12.1 Elektrony a díry v polovodičích /246
 - 12.2 Příměsové polovodiče /251
 - 12.3 Hallův jev /254
 - 12.4 Polovodičové přechody /255
 - 12.5 Usměrnňování na polovodičovém přechodu /258
 - 12.6 Tranzistor /260
- 13 PŘIBLÍŽENÍ NEZÁVISLÝCH ČÁSTIC**
 - 13.1 Spinové vlny /263

- 13.2 Dvě spinové vlny /267
 - 13.3 Nezávislé částice /271
 - 13.4 Molekula benzenu /275
 - 13.5 Ještě trochu organické chemie /279
 - 13.6 Další použití tohoto přiblížení /
- 14 ZÁVISLOST AMPLITUD NA POLOZE**
- 14.1 Amplitudy na přímce /282
 - 14.2 Vlnová funkce /286
 - 14.3 Stav s přesně určenou hybností /289
 - 14.4 Normování stavů v proměnné x /291
 - 14.5 Schrödingerova rovnice /294
 - 14.6 Kvantované hladiny energie /297
- 15 SYMETRIE A ZÁKONY ZACHOVÁNÍ**
- 15.1 Symetrie /304
 - 15.2 Symetrie a zachování /308
 - 15.3 Zákony zachování /312
 - 15.4 Polarizované světlo /315
 - 15.5 Rozpad částice Λ^0 /317
 - 15.6 Shrnutí rotačních matic /323
- 16 MOMENT HYBNOSTI**
- 16.1 Elektrické dipólové záření /325
 - 16.2 Rozptyl světla /328
 - 16.3 Anihilace pozitronia /331
 - 16.4 Rotační matice pro libovolný spin /337
 - 16.5 Měřený spinu jádra /341
 - 16.6 Skládání momentů hybnosti /343
- 17 ATOM VODÍKU A PERIODICKÁ SOUSTAVA PRVKŮ**
- 17.1 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku /357
 - 17.2 Sféricky symetrická řešení /359
 - 17.3 Stav s úhlovou závislostí /364
 - 17.4 Obecné řešení pro vodík /369
 - 17.5 Vlnové funkce atomu vodíku /373
 - 17.6 Periodická soustava prvků /375
- 18 OPERÁTORY**
- 18.1 Operace a operátory /381
 - 18.2 Střední hodnoty energií /384
 - 18.3 Střední hodnota energie atomu /387
 - 18.4 Operátor polohy /389
 - 18.5 Operátor hybnosti /391
 - 18.6 Moment hybnosti /397
 - 18.7 Časová závislost středních hodnot /399
- 19 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE V KLASICKÉM KONTEXTU: SEMINÁŘ O SUPRAVODIVOSTI**
- 19.1 Schrödingerova rovnice v magnetickém poli /403
 - 19.2 Rovnice kontinuity pro pravděpodobnosti /406
 - 19.3 Dva druhy hybnosti /408
 - 19.4 Interpretace vlnové funkce /410
 - 19.5 Supravodivost /411
 - 19.6 Meissnerův jev /412
 - 19.7 Kvantování toku /415
 - 19.8 Dynamika supravodivosti /418
 - 19.9 Josephsonův jev /420
- VÝSLEDKY A NÁVODY K CVIČENÍM /429**
- REJSTŘÍK VYBRANÝCH POJMŮ A JMEN /435**

1 Amplitudy pravděpodobnosti

- 1.1 ZÁKONY SKLÁDÁNÍ AMPLITUD
- 1.2 DVOJŠTĚRBINOVÝ INTERFERENCEČNÍ OBRAZEC
- 1.3 ROZPTYL NA KRYSTALU
- 1.4 IDENTICKÉ ČÁSTICE

Přečtěte si znovu: kapitoly 37 a 38 1. dílu

1.1 ZÁKONY SKLÁDÁNÍ AMPLITUD

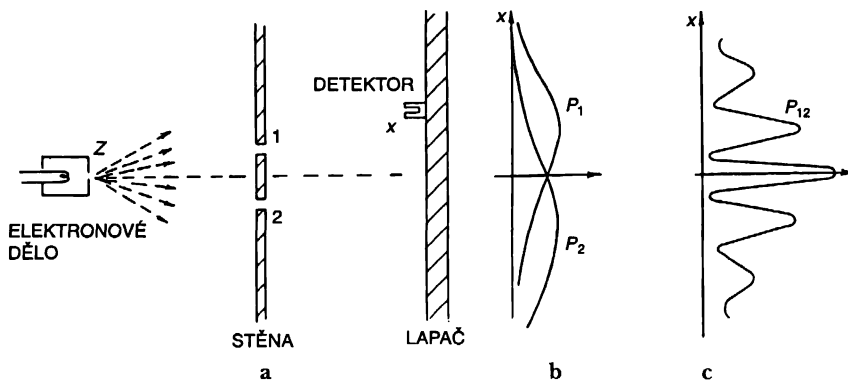
Když Schrödinger jako první objevil správné zákony kvantové mechaniky, napsal rovnici, která popisovala amplitudu nalezání částice v různých místech. Byla velmi podobná rovnicím klasické fyziky, které používali fyzici k popisu pohybu vzduchu ve zvukové vlně, k popisu šíření světla atd. Proto v počátcích kvantové mechaniky věnovali mnoho času na to, aby našli řešení této rovnice. V témže období, zejména díky Bornovi a Diracovi, začali chápat principiálně nové myšlenky kvantové mechaniky. V dalším období se ukázalo, že existuje mnoho věcí, které nejsou přímo obsaženy ve Schrödingerově rovnici, např. spin elektronu a různé relativistické jevy. Všechny přednášky z kvantové mechaniky tradičně začínají stejným způsobem – sledováním jejího historického vývoje od samého začátku. Student se nejdříve naučí mnohé z klasické mechaniky, aby mohl porozumět řešení Schrödingerovy rovnice. Pak věnuje hodně času hledání jejích různých řešení. Až po podrobném studiu této rovnice se dostává k „pokročilým“ statím o spinu elektronu.

Původně jsme si mysleli, že nejlepší cestou, jak uzavřít tyto přednášky z fyziky, bude ukázat způsob řešení rovnic klasické fyziky ve složitých situacích, jako je např. popis zvukových vln v ohraničených prostorech, popis vlastních kmitů elektromagnetického záření ve válcových dutinách atd. To byl původní záměr přednášek. Rozhodli jsme se však vzdát se svého úmyslu a místo toho podat úvod do kvantové mechaniky. Dospěli jsme k závěru, že to, co se obvykle označuje jako pokročilé části kvantové mechaniky, jsou ve skutečnosti poměrně jednoduché věci. Používaná matematika není vůbec složitá, obsahuje jednoduché algebraické operace a téměř žádné diferen-

ciální rovnice – nanejvýš snadno řešitelné. Jediný problém, který musíme přeskočit, je ten, že nejsme schopni *podrobně* popsat chování částic v prostoru. Proto se pokusíme o následující: Povíme vám o tom, co se obecně nazývá „pokročilé“ části kvantové mechaniky. Můžeme vás ujistit, že jsou to nejjednodušší – v hlubším slova smyslu – a zároveň i základní partie této teorie. Popravdě řečeno, je to pedagogický experiment. Pokud víme, nikdo předtím to takto neprovedl.

Máme samozřejmě problémy, neboť kvantově mechanické chování věcí je poměrně neobvyklé. Nikdo nemá zkušenosti z každodenního života, na základě nichž by si mohl udělat přibližnou a intuitivní představu o tom, co se stane. Tento předmět lze začít vysvětlovat dvěma způsoby: Buď popíšeme přibližným fyzikálním způsobem co se stane, bez určení přesných zákonů, nebo uvedeme přesné zákony v jejich abstraktním tvaru. Pak byste však vzhledem k jejich abstraktnosti nevěděli, co tyto zákony fyzikálně znamenají. Proto je tento druhý způsob neuspokojivý. První způsob zase zanechává nepříjemný pocit, neboť přesně nevíme, co je pravda a co ne. Sami nevíme, jak tento problém překonat. Všimněte si, že v kapitole 37 a 38 1. dílu se tento problém už objevil. První z těchto kapitol byla poměrně přesná, zatímco v druhé byl pouze přibližný popis základních rysů různých jevů. Pokusíme se tedy mezi těmito dvěma krajními případy najít zlatou střední cestu.

Na začátku této kapitoly se budeme zabývat některými kvantově mechanickými představami. Některá z tvrzení budou úplně přesná, jiná jen částečně. Po dobu výkladu bude velmi obtížné říci, která jsou která, ale když knihu dočtete do konce, při pohledu zpátky porozumíte, které části byly přesné a které byly vysvětleny pouze přibližně. Následující kapitoly už tak nepřesné nebudou. Jedním z důvodů, proč jsme usilovali o to být exaktní, bylo, abychom vám ukázali jednu z nejhezčích vlastností kvantové mechaniky – jak mnoho lze vyvodit z tak mála.



Obr. 1.1 Interferenční experiment s elektrony

Znovu začneme diskuzi o skládání *amplitud pravděpodobnosti*. Jako příklad použijeme pokus, popsany v kapitole 37 1. dílu a znázorněný na *obr. 1.1*. Máme zdroj Z částic, řekněme elektronů, pak následuje stěna se dvěma štěrbinami a za ní je detektor umístěný v nějakém místě x . Ptáme se: „Jaká je pravděpodobnost toho, že se částice objeví v místě x ?“ Náš *první obecný princip kvantové mechaniky* říká: *Pravděpodobnost* toho, že částice vypuštěná ze zdroje Z dopadne na místo x , lze kvantitativně vyjádřit jako druhou mocninu absolutní hodnoty komplexního čísla nazývaného *amplituda pravděpodobnosti* – v našem případě je to amplituda toho, že částice ze zdroje Z dopadne na místo x . S takovými amplitudami se budeme často setkávat, proto k vyjádření této myšlenky použijeme zkrácený zápis, zavedený Diracem, který je v kvantové mechanice obecně užíván.

Amplitudu pravděpodobnosti zapisujeme takto

$$\langle \text{částice dopadne do } x | \text{částice opustí } Z \rangle. \quad (1.1)$$

Jinak řečeno, dvojice závorek $\langle \rangle$ je znak ekvivalentní výrazu „amplituda toho, že“. Výraz *napravo* od svislé čáry udává *počáteční* podmínku a výraz *nalevo konečnou*. Někdy bude vhodné zkrátit zápis ještě víc a počáteční a konečné podmínky značit pouze písmeny. Například amplitudu (1.1) můžeme někdy zapsat jako

$$\langle x | Z \rangle. \quad (1.2)$$

Je třeba zdůraznit, že takováto amplituda je samozřejmě pouze číslo, a to *komplexní*.

V kapitole 37 1. dílu jsme už řekli, že existují-li dvě cesty, po nichž se částice může do detektoru dostat, výsledná pravděpodobnost není součtem obou pravděpodobností, ale je třeba ji zapsat jako druhou mocninu absolutní hodnoty součtu obou amplitud. Zjistili jsme, že jsou-li obě cesty otevřené, pravděpodobnost toho, že elektron do detektoru dopadne, je

$$P_{12} = |\varphi_1 + \varphi_2|^2. \quad (1.3)$$

Tento výsledek zapišme v našem novém označení. Nejdříve však uveďme *druhý obecný princip kvantové mechaniky*. Může-li částice dosáhnout daného stavu dvěma cestami, celková amplituda procesu je *součtem amplitud* obou jednotlivých cest uvažovaných odděleně. V novém označení píšeme

$$\langle x | Z \rangle_{\text{oba otvory otevřené}} = \langle x | Z \rangle_{\text{otvorem 1}} + \langle x | Z \rangle_{\text{otvorem 2}}. \quad (1.4)$$

Současně předpokládáme, že otvory 1 a 2 jsou dostatečně malé, takže říkáme-li, že elektron prochází otvorem, nemusíme diskutovat, kterou jeho částí. Mohli bychom samozřejmě každý otvor rozdělit na menší části s určitou amplitudou toho, že elektron projde vrchní nebo spodní částí atd. Budeme předpokládat, že otvor je dostatečně malý, a proto se s touto podrobností nemusíme trápit. To je jedna z nepřesností, o nichž jsme hovořili. Lze to provést i přesněji, ale v tomto stádiu to dělat nebudeme.

Nyní podrobněji popíšeme, co můžeme říci o amplitudě procesu, v němž elektron doletí do detektoru v místě x otvorem 1. Uděláme to pomocí našeho *třetího principu*. Prochází-li částice určitou cestou, lze pro tuto cestu napsat amplitudu jako *součin amplitudy* příslušné k části této cesty a *amplitudy* příslušné k jejímu zbytku. V uspořádání podle *obr. 1.1* je amplituda průchodu mezi Z a x otvorem 1 rovna amplitudě průchodu od Z k 1 násobené amplitudou průchodu z 1 do x

$$\langle x | Z \rangle_{\text{otvorem 1}} = \langle x | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle. \quad (1.5)$$

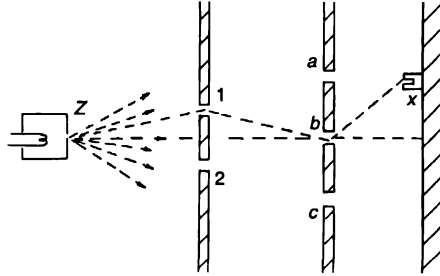
Tento výsledek opět není úplně přesný. Je třeba přidat ještě jeden faktor – amplitudu toho, že elektron projde otvorem v místě 1. V našem případě je to však jednoduchá šterbina, a proto bereme v úvahu jednotkový faktor.

Všimněte si, že je rovnice (1.5) napsána v opačném pořadí. Je třeba ji číst zprava doleva: „Elektron prochází od Z k 1 a potom od 1 k x “. Shrňme to: Následují-li události po sobě, tj. můžeme-li analyzovat cestu částice tím, že řekneme: koná toto, pak koná toto a pak tamto, výslednou amplitudu této cesty vypočteme postupným vynásobením amplitud všech po sobě

jdoucích událostí. Použijeme-li tento zákon, můžeme přepsat rovnici (1.4) takto

$$\langle x | Z \rangle_{\text{oba}} = \langle x | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle + \langle x | 2 \rangle \langle 2 | Z \rangle.$$

Nyní si ukážeme, že nám stačí pouze tyto principy, abychom mohli počítat mnohem složitější problémy – např. ten, který je znázorněn na *obr. 1.2*. Máme zde dvě stěny; jedna má dva otvory 1 a 2 a druhá tři – a , b , c .



Obr. 1.2 Složitější interferenční experiment

Za druhou stěnou je v místě x umístěn detektor a chceme vědět, jaká je amplituda pravděpodobnosti toho, že se tam částice dostane. Jeden způsob, jak to lze zjistit, je vypočítat superpozici nebo interferenci procházejících vln. Můžeme to však provést i tak, že řekneme, že existuje šest možných cest a sečteme jejich příslušné amplitudy. Elektron může projít otvorem 1, pak otvorem a a pak do x , nebo může projít otvorem 1, pak otvorem b a pak do x atd. Podle našeho druhého principu se amplitudy možných cest sčítají, proto musíme zapsat amplitudu průchodu od Z do x jako součet šesti jednotlivých amplitud. Z druhé strany můžeme na základě třetího principu každou z nich zapsat jako součin tří amplitud. Jedna z nich je např. amplituda průchodu od Z do 1 násobená amplitudou průchodu z 1 do a a ještě jednou násobená amplitudou průchodu z a do x . Celkovou amplitudu průchodu ze Z do x můžeme v našem zkráceném zápisu napsat

$$\langle x | Z \rangle = \langle x | a \rangle \langle a | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle + \langle x | b \rangle \langle b | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle + \dots + \langle x | c \rangle \langle c | 2 \rangle \langle 2 | Z \rangle.$$

Použitím sumačního znaku můžeme zápis zkrátit

$$\langle x | Z \rangle = \sum_{\substack{i=1,2 \\ \alpha=a,b,c}} \langle x | \alpha \rangle \langle \alpha | i \rangle \langle i | Z \rangle. \quad (1.6)$$

Abychom mohli pomocí těchto metod něco vypočítat, potřebujeme znát amplitudu přechodu z jednoho místa na druhé. Uvedeme příklad typické amplitudy. Neuvažujeme některé jevy, jako je polarizace světla nebo spin elektronu, ale kromě toho je to docela přesné. Děláme to proto, abyste uměli řešit problémy s různými kombinacemi otvorů. Představme si, že částice s určitou energií letí prázdným prostorem z místa r_1 do místa r_2 . Jinými slovy, máme volnou částici, na kterou nepůsobí žádné síly. Až na číselný faktor je amplituda přechodu z r_1 do r_2

$$\langle r_1 | r_2 \rangle = \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_{12}/\hbar}}{r_{12}}, \quad (1.7)$$

kde $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ a p je hybnost, která souvisí s energií E buď podle relativistické rovnice

$$p^2 c^2 = E^2 - (m_0 c^2)^2,$$

nebo nerelativistické rovnice

$$\frac{p^2}{2m} = \text{kinetická energie.}$$

Rovnice (1.7) říká, že částice má vlnové vlastnosti a že amplituda se šíří jako vlna s vlnovým číslem, které je rovno hybnosti dělené \hbar

V nejobecnějším případě bude amplituda a odpovídající pravděpodobnost obsahovat i čas. Ve většině těchto úvodních úvah budeme předpokládat, že zdroj neustále vysílá částice s danou energií, proto se nebudeme muset starat o čas. Obecně by nás mohly zajímat i jiné otázky. Předpokládejme, že částice opouští zdroj v určitém čase a v určitém místě P a chceme vědět, jaká je amplituda toho, že se dostane na určité místo, řekněme r , v nějakém pozdějším čase. Můžeme to symbolicky zapsat jako amplitudu $\langle r, t = t_1 | P, t = 0 \rangle$. Zřejmě to bude záviset na r i na t . Umístíme-li detektor na různých místech a budeme měřit v různých časech, dostaneme různé výsledky. Tato funkce r a t obecně vyhovuje diferenciální vlnové rovnici. V nerelativistickém případě je to např. Schrödingerova rovnice. Dostáváme vlnovou rovnici analogickou rovnici pro elektromagnetické vlny nebo zvukové vlny v plynu. Je třeba zdůraznit, že vlnová funkce, která vyhovuje rovnici, není podobná skutečně vlně v prostoru; takovou vlnu si nemůžeme představovat jako něco reálného, jako je tomu v případě zvukové vlny.

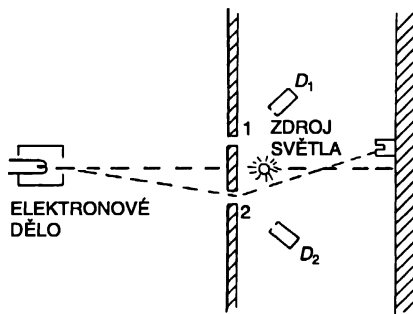
Uvažujeme-li o jedné částici, může to někoho svádět k představě „částicových vln“; to však není správná představa, neboť máme-li např. dvě částice, není amplituda toho, že najdeme jednu částici v r_1 a druhou v r_2 , jednoduchá vlna v trojrozměrném prostoru, ale závisí na šesti prostorových proměnných r_1 a r_2 . Budeme-li se např. zabývat dvěma nebo více částicemi, budeme potřebovat následující dodatečný princip: Pokud dvě částice neinteragují, bude amplituda toho, že jedna částice vykoná jednu věc a druhá něco jiného, součinem dvou amplitud – amplitud toho, že by to obě částice udělaly po svém. Je-li např. $\langle a | s_1 \rangle$ amplituda toho, že částice 1 projde z s_1 k a a $\langle b | s_2 \rangle$ amplituda toho, že částice 2 projde z s_2 k b , je amplituda toho, že se současně uskuteční obě události

$$\langle a | s_1 \rangle \langle b | s_2 \rangle.$$

Je třeba zdůraznit ještě jedno. Představme si, že nevíme, odkud částice (na obr. 1.2) k otvorům 1 a 2 v první stěně přichází. Bez ohledu na to můžeme předpovídat, co se stane za stěnou (např. jaká je amplituda dopadu do místa x) za předpokladu, že známe „dvě čísla“ amplitudu příchodu do otvoru 1 a amplitudu příchodu do otvoru 2. Jinak řečeno, právě proto, že se amplitudy po sobě následujících událostí násobí (jak ukazuje rovnice 1.6), všechno, co potřebujeme, abychom mohli v analýze pokračovat, jsou dvě čísla – v našem případě je to $\langle 1 | Z \rangle$ a $\langle 2 | Z \rangle$. Tato dvě komplexní čísla stačí k tomu, abychom mohli předpovědět celou budoucnost. A to je právě to, co kvantovou mechaniku dělá jednoduchou. V dalších kapitolách si ukážeme, jak se to dělá, máme-li danu počáteční podmínku dvěma (nebo několika) čísly. Tyto hodnoty samozřejmě závisí na tom, kde je umístěn zdroj a jaké vlastnosti přístroj má. Když je však známe, o těchto podrobnostech už nemusíme vědět nic.

1.2 DVOJŠTĚRBINOVÝ INTERFERENČNÍ OBRAZEC

Nyní se blíže podívejme na jev, který jsme do určité míry rozebrali v kapitole 37 1. dílu. Tentokrát použijeme pojem amplitudy v jeho plné kráse, abychom vám ukázali, jak se uplatňuje. Uvažujme stejný experiment jako na *obr. 1.1*, tentokrát však se zdrojem světla za oběma otvory (*obr. 1.3*).



Obr. 1.3 Experiment k určení otvoru, kterým prochází elektron

V kapitole 37 1. dílu jsme dospěli k tomuto zajímavému výsledku. Když jsme sledovali prostor za štěrbinou 1 a pozorovali jsme, že se tam rozptýlil foton, bylo x -ové rozdělení elektronů získané v koincidenci s těmito fotony stejné, jako kdyby byla štěrba 2 uzavřena. Celkové rozdělení elektronů pozorovaných buď po průchodu štěrbinou 1, nebo štěrbinou 2 bylo součtem samostatných rozdělení a zcela se lišilo od rozdělení, které jsme dostali, když byl zdroj světla vypnut. Tak to vypadalo přinejmenším tehdy, když jsme použili světlo dostatečně krátké vlnové délky. Byla-li vlnová délka větší, nemohli jsme si být jisti, u kterého otvoru rozptýl nastal a rozdělení se více podobalo případu se zhasnutým světlem.

Podívejme se, co se děje, použijeme-li náš nový zápis a principy skládání amplitud. Abychom zjednodušili zápis, můžeme označit amplitudu toho, že elektron projde do x otvorem 1, jako φ_1 , tj.

$$\varphi_1 = \langle x | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle.$$

Podobně φ_2 je amplituda toho, že se elektron dostane k detektoru otvorem 2

$$\varphi_2 = \langle x | 2 \rangle \langle 2 | Z \rangle.$$

To jsou amplitudy průchodu jednotlivými otvory k x , je-li světlo zhasnuto. Použijeme-li světlo, klademe si otázku: „Jaká je amplituda procesu, v němž na počátku vychází elektron ze zdroje Z a foton se uvolňuje ze zdroje světla L , na konci je elektron v místě x a foton vidíme štěrbinou 1?“ Předpokládejme, že foton za štěrbinou 1 pozorujeme detektorem D_1 (*obr. 1.3*) a podobný detektor používáme k počítání fotonů rozptýlených štěrbinou 2. Pak je možné mluvit o amplitudě toho, že foton bude zaregistrován v D_1 a elektron v x , a také o amplitudě toho, že foton bude registrován v D_2 a elektron v x . Pokusme se tyto amplitudy vypočítat.

Ačkoliv nepoužíváme správné matematické vztahy pro všechny členy, které se ve výpočtu vyskytují, jejich ideu pochopíte z následující diskuze. Zprv, máme amplitudu $\langle 1 | Z \rangle$ toho, že elektron vyjde ze zdroje k otvoru 1. Dále můžeme předpokládat, že existuje určitá amplituda

toho, že zatímco je elektron v otvoru 1, rozptýlí foton do detektoru D_1 . Tuto amplitudu označme a . Dále máme amplitudu $\langle x|1\rangle$ toho, že elektron projde ze štěrbinu 1 do detektoru elektronů v místě x . Amplituda toho, že elektron projde z Z do x štěrbinou 1 a rozptýlí foton do D_1 je pak

$$\langle x|1\rangle a \langle 1|Z\rangle.$$

Nebo podle našeho předcházejícího zápisu je to prostě $a\varphi_1$.

Taktéž existuje určitá amplituda toho, že elektron procházející štěrbinou 2 rozptýlí foton do detektoru D_1 . Řeknete si: „To není možné, jak se může rozptýlit do detektoru D_1 , když ten sleduje jen otvor 1?“ Je-li však naše vlnová délka dostatečně dlouhá, existují difrakční efekty, které to umožňují. Je-li zařízení dobře postaveno a použijeme fotony krátké vlnové délky, je amplituda rozptylu fotonu na elektronu u otvoru 2 a průchodu do detektoru 1 velmi malá. Aby byl však rozbor obecný, vezměme v úvahu, že tato amplituda vždy existuje a nazveme ji b . Pak je amplituda toho, že elektron projde štěrbinou 2 a rozptýlí foton do D_1 , rovna

$$\langle x|2\rangle b \langle 2|Z\rangle = b\varphi_2.$$

Amplituda toho, že najdeme elektron v místě x a foton v D_1 , je součtem dvou výrazů; každý z nich odpovídá možné cestě elektronu. A každý z nich se ještě skládá ze dvou členů; první, že elektron prošel otvorem, a druhý, že foton se na tomto elektronu rozptýlil do detektoru 1. Máme

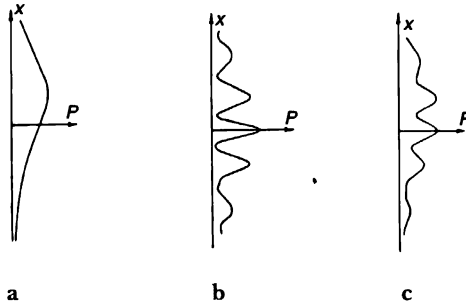
$$\left\langle \begin{array}{l} \text{elektron v } x \\ \text{foton v } D_1 \end{array} \middle| \begin{array}{l} \text{elektron z } Z \\ \text{foton z } L \end{array} \right\rangle = a\varphi_1 + b\varphi_2. \quad (1.8)$$

Podobný výraz můžeme dostat pro případ, kdy je foton registrován v druhém detektoru D_2 . Předpokládáme-li pro zjednodušení, že je systém symetrický, a bude amplituda pro foton v D_2 v případě, kdy elektron prochází otvorem 2 a b je amplituda pro foton v D_2 v případě, kdy elektron prochází otvorem 1. Odpovídající celková amplituda toho, že se foton objeví v D_2 a elektron v x , je

$$\left\langle \begin{array}{l} \text{elektron v } x \\ \text{foton v } D_2 \end{array} \middle| \begin{array}{l} \text{elektron z } Z \\ \text{foton z } L \end{array} \right\rangle = a\varphi_2 + b\varphi_1. \quad (1.9)$$

A to je vše. Snadno si můžeme spočítat pravděpodobnost pro různé situace. Předpokládejme, že chceme znát pravděpodobnost toho, že zaregistrujeme foton v D_1 a současně elektron v x . Dostaneme ji jako druhou mocninu absolutní hodnoty amplitudy dané rovnicí (1.8), totiž $|a\varphi_1 + b\varphi_2|^2$. Všimněme si tohoto výrazu podrobněji. Zaprvé, je-li b rovno nule (vyhovovalo by nám, kdyby přístroj pracoval právě tímto způsobem), odpověď je prostě $|\varphi_1|^2$ násobená faktorem $|a|^2$. To je rozdělení pravděpodobnosti, které bychom dostali pro případ jednoho otvoru (viz graf na obr. 1.4a). Na druhé straně, je-li vlnová délka velmi dlouhá, může být rozptýl do D_1 z otvoru 2 přibližně stejný jako z otvoru 1. Ačkoliv a a b mohou obsahovat určité fáze, uvažujme jednoduchý případ, že jsou fáze stejné. Je-li a prakticky rovno b , celková pravděpodobnost je $|\varphi_1 + \varphi_2|^2$ násobená $|a|^2$, neboť společný faktor a lze vytknout. Je to však rozdělení pravděpodobnosti, které bychom dostali i bez fotonů. Proto v případě velké vlnové délky (kdy nemá smysl detekovat foton) dostaneme původní křivku rozdělení, která ukazuje interferenční efekty (obr. 1.4b). V případě, že je detekce účinná jen částečně, nastává interference mezi velkou hodnotou φ_1 a malou hodnotou φ_2 a dostaneme střední rozdělení znázorněné na obr. 1.4c. Ani nemluvíme

o tom, že sledujeme-li registraci elektronů v x , v koincidenci s fotony v D_2 , dostaneme stejné výsledky. Pamatujete-li si diskuzi v kapitole 37 I. dílu, zjistíte, že tyto výsledky dávají kvantitativní popis toho, čím jsme se tam zabývali.



Obr. 1.4 Pravděpodobnost toho, že v experimentu podle obr. 1.3 zaregistrujeme elektron v místě x a současně foton v detektoru D : a) $b=0$, b) $b=a$, c) $0 < b < a$

Nyní bychom rádi zdůraznili jednu důležitou skutečnost, abyste se vyhnuli časté chybě. Předpokládejme, že vás zajímá pouze amplituda toho, že se elektron objeví v místě x bez ohledu na to, zda byl foton registrován v D_1 nebo D_2 . Sčítali byste amplitudy z rovnic (1.8) a (1.9)? Ne! *Nikdy nesčítejte amplitudy různých, rozlišitelných konečných stavů!* Když už je foton jednou registrován v některém z detektorů fotonů, můžeme vždy určit, která alternativa nastala, aniž bychom zasahovali do systému. Každá možnost má pravděpodobnost zcela nezávislou na druhé. Zopakujme si – nesčítejte amplitudy pro rozdílné *konečné* stavy (konečným myslíme ten okamžik, v němž nás zajímá *pravděpodobnost*, tedy, když je experiment dokončen). Sčítáme jen amplitudy pro dvě nerozlišitelné alternativy „uvnitř“ experimentu, které se vyskytly před dokončením procesu. Na konci procesu můžete říci, že se „nechcete dívat na foton“. To je vaše věc, ale ani pak amplitudy nesčítejte. Příroda neví, na co se díváte a na co ne, chová se tak, jak je jí určeno, ať už se unavujete záznamem údajů nebo ne. Proto v tomto případě sčítat amplitudy nesmíme. Nejdříve umocníme amplitudy všech možných různých konečných výsledků procesu a pak je sčítáme. Správný výsledek pro případ, že elektron je v x a foton buď v D_1 , nebo D_2 , je

$$\begin{aligned} & \left| \left\langle \begin{array}{l} \text{elektron v } x \\ \text{foton v } D_1 \end{array} \middle| \begin{array}{l} \text{elektron z } Z \\ \text{foton z } L \end{array} \right\rangle \right|^2 + \left| \left\langle \begin{array}{l} \text{elektron v } x \\ \text{foton v } D_2 \end{array} \middle| \begin{array}{l} \text{elektron z } Z \\ \text{foton z } L \end{array} \right\rangle \right|^2 = \\ & = |a\varphi_1 + b\varphi_2|^2 + |a\varphi_2 + b\varphi_1|^2. \end{aligned} \quad (1.10)$$

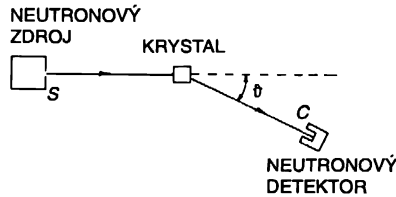
1.3 ROZPTYL NA KRYSTALU

V následujícím příkladu důkladně prostudujeme interferenci amplitud pravděpodobnosti. Všimneme si procesu rozptylu neutronů na krystalu. Předpokládejme, že máme krystal s velkým počtem periodicky uspořádaných atomů (s jádry v jejich středech), na který z dálky dopadá neutronový svazek. Jednotlivá jádra v krystalu můžeme označit indexem i , kde i je množina přirozených čísel $1, 2, 3, \dots, N$; N je celkový počet atomů. Úkolem je vypočítat pravděpodobnost

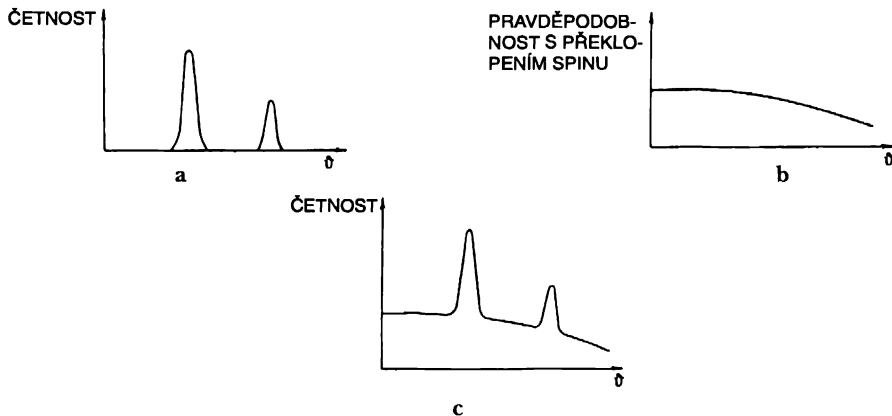
zaregistrování neutronu v detektoru, máme-li experiment uspořádan podle *obr. 1.5*. Pro každý jednotlivý atom i je amplituda toho, že neutron trečí detektor C , rovna amplitudě jeho přechodu ze zdroje S k jádru i násobené amplitudou rozptylu v krystalu a dále násobené amplitudou toho, že se dostane od i k detektoru C . Zapišeme to

$$\langle \text{neutron v } C | \text{neutron z } S \rangle_{\text{přes } i} = \langle C | \hat{i} \rangle a \langle i | S \rangle. \quad (1.11)$$

Při psaní této rovnice jsme předpokládali, že amplituda rozptylu a je stejná pro všechny atomy. Máme velký počet zjevně nerozlišitelných cest.



Obr. 1.5 Měření rozptylu neutronů na krystalu



Obr. 1.6 Četnost neutronů v detektoru jako funkce úhlu:

- pro jádra se spinem 0,
- pravděpodobnost rozptylu s překlopením spinu,
- pozorovaná četnost pro jádra se spinem 1/2

Nerozlišitelných proto, že nízkoenergetický neutron je rozptýlen na nukleonu, aniž by vysunul atom z jeho místa v krystalu – nezůstane tedy žádný záznam o rozptylu. Na základě předcházející diskuse je celková amplituda pro neutron v detektoru součtem členů (1.11) přes všechny atomy:

$$\langle \text{neutron v } C | \text{neutron z } S \rangle = \sum_{i=1}^N \langle C | \hat{i} \rangle a \langle i | S \rangle. \quad (1.12)$$

Protože sčítáme amplitudy rozptylu od atomů rozmístěných na různých místech v prostoru, budou mít amplitudy různé fáze, což způsobí charakteristický interferenční obrazec, který jsme

už analyzovali v případě rozptylu světla na mřížce. Intenzita neutronů jako funkce úhlu často v takovémto experimentu vykazuje obrovské změny – velmi ostré interferenční vrcholy, mezi nimiž není nic (*obr. 1.6a*). Avšak při některých druzích krystalů se to neprojevuje takovýmto způsobem a spolu se zmíněnými interferenčními vrcholy se objevuje obecné pozadí z rozptylu ze všech směrů. Pokusíme se objasnit důvody této zjevné záhady. Neuvažovali jsme totiž jednu důležitou vlastnost neutronu. Jeho spin je $1/2$, proto se může nacházet ve dvou stavech: Buď má spin směřující nahoru, řekněme kolmo na stránku s *obr. 1.5*, nebo dolů. Nemají-li jádra krystalu spin, nehraje spin žádnou roli. Mají-li však i jádra spin řekněme $1/2$, budeme pozorovat zmíněný rozmazaný rozptyl. Vysvětlení je následující.

Má-li neutron určitý směr spinu a jádro atomu má stejný spin, nemůže se spin v procesu rozptylu změnit. Mají-li neutron a jádro atomu navzájem opačné spiny, může rozptyl probíhat dvěma způsoby: Při jednom z nich zůstávají spiny nezměněné, při druhém se směry spinů vymění. Pravidlo, že suma spinů se nesmí měnit, je analogické našemu klasickému zákonu zachování momentu hybnosti. Tomuto jevu můžeme porozumět, budeme-li předpokládat, že všechna rozptylová jádra mají spiny orientované jedním směrem. Neutron se stejným směrem spinu se rozptýlí tak, že dostaneme očekávané ostré interferenční rozdělení. Co se však stane, když má neutron opačný spin? Pokud se rozptýlí bez překlopení spinu, proti předcházejícímu případu se nic nezmění. Pokud se však při rozptylu překlopí oba spiny, můžeme v principu zjistit, na kterém jádru rozptyl nastal, neboť to bude jediné jádro s opačným spinem. Dokážeme-li tedy říci, které jádro rozptylovalo, nač jsou nám ostatní atomy? Samozřejmě na nic. Rozptyl je přesně takový jako na jednom atomu.

Abychom tento efekt zahrnuli, je třeba pozměnit matematickou formulaci rovnice (1.12), jelikož jsme v ní stavy nepopsali úplně. Předpokládejme, že všechny neutrony ze zdroje mají spiny nahoru a všechny jádra krystalu mají spiny dolů. Od naší předcházející diskuze se to neliší. Označme a amplitudu toho, že rozptyl nastane bez překlopení spinu. Amplituda rozptylu na i -tém atomu bude samozřejmě rovna

$$\langle C_{\text{nahoru}}, \text{ v celém krystalu dolů} | S_{\text{nahoru}}, \text{ v celém krystalu dolů} \rangle = \langle C | i \rangle a \langle i | S \rangle.$$

Protože všechny spiny atomů jsou stále orientovány směrem dolů, není možné různé případy (různé hodnoty i) rozlišit. Je zřejmé, že neexistuje způsob, který by ukázal, na kterém atomu rozptyl nastal. V tomto procesu interferují všechny amplitudy.

Máme však jiný případ, kde je spin registrovaného neutronu orientován dolů, ačkoliv z S vycházel se spinem nahoru. V krystalu musel jeden ze spinů změnit orientaci na směr nahoru; necht to byl k -tý atom. Budeme předpokládat, že amplituda rozptylu s převrácením spinu je stejná pro každý atom; označme ji b . V reálném krystalu se objevuje jedna nepříjemná možnost a to, že otočený spin se přesune k nějakému jinému atomu; předpokládejme, že v našem případě je tato pravděpodobnost velmi malá. Amplituda rozptylu bude

$$\langle C_{\text{dolů}}, \text{ jádro } k \text{ nahoru} | S_{\text{nahoru}}, \text{ v celém krystalu dolů} \rangle = \langle C | k \rangle b \langle k | S \rangle. \quad (1.13)$$

Ptáme se, jaká je pravděpodobnost toho, že najdeme neutron se spinem dolů a k -té jádro se spinem nahoru. Odpověď: Pravděpodobnost je rovna druhé mocnině absolutní hodnoty této amplitudy, což je prostě $|b|^2$ násobené $|\langle C | k \rangle \langle k | S \rangle|^2$. Druhý člen je téměř nezávislý na poloze v krystalu a tím, že jsme použili druhou mocninu absolutní hodnoty, se odstraní všechny fáze. Pravděpodobnost rozptylu na kterémkoliv jádru v krystalu s překlopením spinu je

$$|b|^2 \sum_{k=1}^N |\langle C|k\rangle \langle k|S\rangle|^2,$$

což dává hladké rozdělení, jako je na *obr. 1.6b*.

Můžete namítnout: „Mně nezajímá, který atom má spin mířící nahoru.“ Vás to zajímat nemusí, ale příroda to ví a pravděpodobnost je taková, jak jsme uvedli: Nenastává žádná interference. Na druhé straně, ptáme-li se na pravděpodobnost toho, že spin je v detektoru orientován nahoru, zatímco všechny atomy mají spin dolů, musíme použít druhou mocninu absolutní hodnoty z výrazu

$$\sum_{i=1}^N \langle C|i\rangle a \langle i|S\rangle.$$

Protože členy této sumy mají fáze, ty interferují a dostáváme ostrý interferenční obraz. Provádíme-li experiment, v němž si nevšímáme spinu detekovaného neutronu, mohou se vyskytovat oba druhy událostí a jejich pravděpodobnosti se sčítají. Celková pravděpodobnost (nebo četnost) jako funkce úhlu je podobná křivce na *obr. 1.6c*.

Ještě jednou si zopakujme fyzikální stránku experimentu. Když lze *principiálně* rozlišit rozdílné *konečné stavy* (i když vás to nezajímá), dostaneme celkovou konečnou pravděpodobnost tak, že vypočítáme *pravděpodobnost* pro každý stav (ne amplitudu) a ty nakonec sečteme. Pokud *není ani principiálně možné* konečné stavy rozlišit, musíme nejdříve sečíst amplitudy pravděpodobností a až pak umocnit na druhou absolutní hodnotu, abychom dostali skutečnou pravděpodobnost. Zvláště je třeba uvědomit si toto: Kdybyste zobrazovali neutron jako vlnu, dostali byste stejné rozdělení pro rozptyl neutronu se spinem nahoru nebo se spinem dolů. Museli byste říci, že „vlna“ přišla od všech atomů a interferovala stejně jako u neutronu se stejnou vlnovou délkou a opačným spinem. My však víme, že tomu tak není. Takže, jak už jsme zmínili, musíme být opatrní, abychom nepřipisovali vlnám v prostoru příliš mnoho reálnosti. Užitečné jsou u některých problémů, ale ne u všech.

1.4 IDENTICKÉ ČÁSTICE

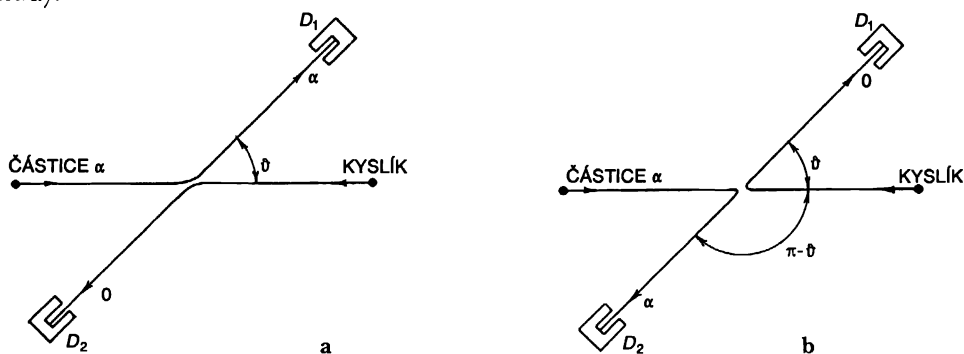
Experiment, který se chystáme popsat, ukazuje jeden z nádherných důsledků kvantové mechaniky. Opět obsahuje situaci, v níž může událost nastat dvěma různými *nerozlišitelnými* způsoby (podobně jak tomu bylo v předcházejícím experimentu), takže jako *vždy* v takovém případě nastává interference amplitud. Prostudujeme rozptyl jádra na jiném jádru při relativně nízké energii. Představme si částice α (které, jak víte, jsou jádru helia) jak bombardují např. kyslík. Abychom mohli reakci snáze analyzovat, budeme se na ni dívat z těžištové soustavy, v níž jádro kyslíku a částice α mají před srážkou a po ní přesně opačné směry rychlostí (viz *obr. 1.7a*). (Velikosti rychlostí jsou samozřejmě různé, protože hmotnosti se liší.) Také předpokládáme, že se energie zachovává a že energie srážky je dostatečně nízká, takže žádná částice se ani nerozbije, ani nezůstane v excitovaném stavu. Důvod, proč se částice navzájem vychylují, je v tom, že každá z nich nese kladný náboj; klasicky řečeno elektricky se odpuzují, když kolem sebe procházejí. Rozptyl nastane pro různé úhly s různými pravděpodobnostmi a nás zajímá, jaká je úhlová závislost těchto rozptylů. (Lze to samozřejmě vypočítat klasickým způsobem. Odpověď vyjde – a to je jedna z nejpozoruhodnějších náhod v kvantové mechanice – stejná jako při klasickém výpočtu. Je to zvláštní, neboť pro žádné jiné zákony silového působení to nevychází, kromě zákona síly klesající nepřímo úměrně čtverci vzdálenosti, takže jde opravdu o náhodu.)

Pravděpodobnost rozptylu do různých směrů lze měřit pomocí experimentu znázorněného na obr. 1.7a. Detektor v poloze 1 by mohl být zkonstruován tak, že by registroval jen částice α ; detektor v poloze 2 by registroval (pouze pro kontrolu) kyslík. (V laboratorní soustavě by detektory nebyly umístěny proti sobě, ale v těžištové budou.) Experiment je založen na měření závislosti pravděpodobnosti rozptylu pro různé úhly. Nazvěme $f(\vartheta)$ amplitudu rozptylu do detektoru umístěného pod úhlem ϑ ; $|f(\vartheta)|^2$ pak bude experimentálně určená pravděpodobnost.

Nyní bychom mohli sestavit další experiment, v němž by naše počítače reagovaly *buď* na částici α , *nebo* na jádro kyslíku. Je třeba zvážit, co se stane, nebudeme-li rozlišovat, které částice jsou registrovány v detektorech. Samozřejmě, letí-li kyslík pod úhlem ϑ , musí částice α letět na opačnou stranu pod úhlem $(\pi - \vartheta)$, jak je znázorněno na obr. 1.7b. Je-li tedy $f(\vartheta)$ amplituda rozptylu částice α pod úhlem ϑ , pak $f(\pi - \vartheta)$ je amplituda rozptylu kyslíku pod úhlem ϑ .³⁾ Takže pravděpodobnost, že se *některá* částice dostane do detektoru D_1 , je:

$$\text{Pravděpodobnost, že některá částice je v } D_1 = |f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2. \quad (1.14)$$

Všimněte si, že oba stavy jsou v principu rozlišitelné. V tomto experimentu je *nerozlišujeme*, ačkoliv bychom *mohli*. Na základě zmíněných diskuzí tedy musíme sčítat pravděpodobnosti, a ne amplitudy.



Obr. 1.7 Rozptyl částic α na jádrech kyslíku pozorovaný v těžištové soustavě

Uvedený výsledek je správný pro mnoho terčových jader: kyslík, uhlík, berylium, vodík. *Je však nesprávný* pro rozptyl částic α na částicích α . V případě, kdy jsou obě částice identické, se experimentální údaje neshodují s předpovědí (1.14). Například pravděpodobnost rozptylu pod úhlem 90° úhlem je přesně dvakrát větší, než předpovídá uváděná teorie, a nijak to nesouvisí s tím, že částice jsou jádry helia. Je-li terčem ^3H a nalétávají na něj částice α (^4He), nastává shoda. Pouze pro terč ^4He (tehdy jsou jeho jádra identická s nalétávajícími částicemi α) se závislost na úhlu mění zvláštním způsobem.

Možná, že už vidíte, na čem je vysvětlení založeno. Částice α se může dostat do detektoru dvěma způsoby: Nalétávající částice se buď rozptýlí pod úhlem ϑ , nebo se tato částice rozptýlí pod

³⁾ Obecně by měl být směr rozptylu popsán dvěma úhly: polárním úhlem φ a azimutálním úhlem ϑ . Pak bychom říkali, že jádro kyslíku rozptýleného do směru (ϑ, φ) znamená, že se částice α pohybuje směrem $(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$. Amplituda rozptylu je však při Coulombově rozptylu (i v mnoha dalších případech) na φ nezávislá. Proto amplituda toho, že kyslík letí ve směru ϑ , je stejná jako amplituda toho, že částice α letí ve směru $(\pi - \vartheta)$.

úhlem $(\pi - \vartheta)$. Dokážeme však říci, zda do detektoru vletěla nalétávající nebo terčová částice? Nedokážeme. V případě rozptylu částic α na částicích α existují dvě alternativy, které není možné rozlišit. Proto musíme nechat interferovat amplitudy pravděpodobností tím, že je sčítáme; pravděpodobnost toho, že najdeme v detektoru částici α , dostaneme umocněním jejich součtu:

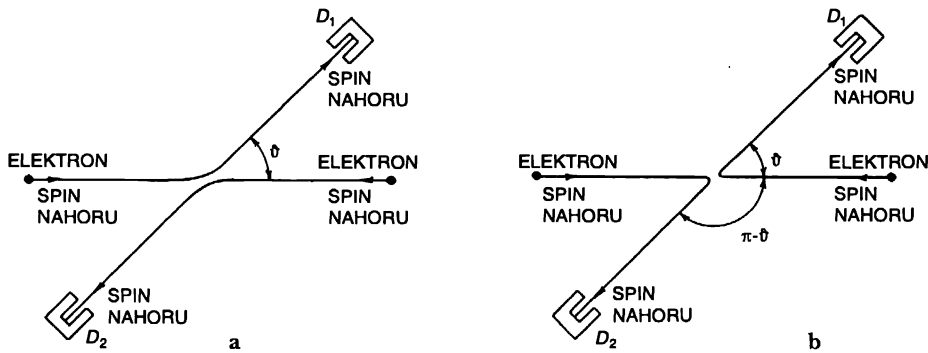
$$\text{Pravděpodobnost, že částice } \alpha \text{ je v } D_1 = |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2. \quad (1.15)$$

To je úplně jiný výsledek než v rovnici (1.14). Vezměme např. úhel $\pi/2$, pro nějž lze výsledek vypočítat snadno. Pro $\vartheta = \pi/2$ zjevně platí: $f(\vartheta) = f(\pi - \vartheta)$, takže pravděpodobnost v rovnici (1.15) je $|f(\pi/2) + f(\pi/2)|^2 = 4 |f(\pi/2)|^2$.

Na druhé straně, kdyby částice interferovaly, výsledek rovnice (1.14) by byl pouze $2 |f(\pi/2)|^2$. Proto dostaneme dvakrát víc rozptylů pod úhlem 90° , než bychom očekávali. Pravda, i při ostatních úhlech budou výsledky rozdílné. Přišli jsme tedy k neobvyklému závěru: Jsou-li částice identické, nastává cosi nového, co se neobjevuje tehdy, když jsou částice rozlišitelné. Při matematickém popisu musíte sčítat amplitudy alternativních procesů, tj. takových, kde si částice prostě vymění úlohy a dochází k interferenci.

Provedeme-li tentýž druh experimentu s rozptylem elektronů na elektronech nebo protonů na protonech, vše se zamotá ještě víc. Ani jeden z předcházejících výsledků není správný! Pro tyto částice musíme přizvat na pomoc nové, velmi neobvyklé pravidlo, které říká: Máme-li situaci, v níž si elektron při dosažení určitého bodu vymění svou totožnost s jiným, má nová amplituda *opačnou fázi* a interferuje se starou. Ano, interference nastává, ale se záporným znaménkem. Vyměníme-li částici α vstupující do detektoru, skládají se interferující amplitudy s kladným znaménkem. *V případě elektronů se interferující amplitudy výměny skládají se záporným znaménkem.* Až na jednu maličkost, o níž si nyní pohovoříme, správná rovnice pro elektrony v experimentu zobrazeném na obr. 1.8 je tato:

$$\text{Pravděpodobnost že } e \text{ je v } D_1 = |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2. \quad (1.16)$$

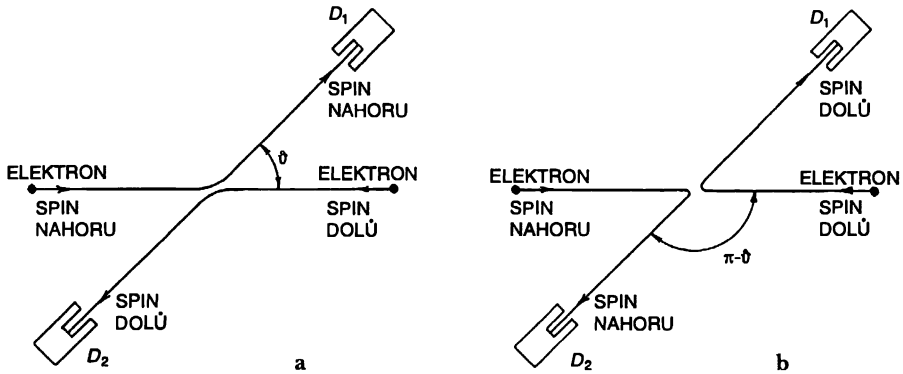


Obr. 1.8 Rozptyl elektronů na elektronech. Jsou-li spiny srážejících se elektronů paralelní, jsou procesy a) a b) nerozlišitelné

Toto tvrzení musíme upřesnit, neboť jsme neuvažovali spin elektronu (částice α spin nemají). Můžeme uvažovat, že spin elektronu směřuje vzhledem k rovině rozptylu buď nahoru nebo dolů. Je-li energie experimentu dostatečně malá, budou magnetické síly způsobené proudy malé a nebudou ovlivňovat spin. Budeme předpokládat, že v naší analýze tomu tak je, proto není možné, aby se spiny změnily během srážky. Ať už má elektron jakýkoliv spin, zůstane po celou dobu stejný. Je vidět, že máme mnoho možností. Nalétávající i terčová částice mohou mít oba spiny nahoru,

dolů nebo vzájemně opačné. Jsou-li oba spiny nahoru, jako na *obr. 1.8* (nebo dolů), najdeme je stejné i po srážce; *amplitudu* procesu dostaneme jako *rozdíl* amplitud dvou možností znázorněných na *obr. 1.8a* a *1.8b*. *Pravděpodobnost* zaregistrování elektronu v D_1 je pak dána rovnicí (1.16).

Předpokládejme však, že „nalétávající“ spin míří nahoru a „terčový“ spin dolů. Elektron vstupující do D_1 může mít spin nahoru nebo dolů a tím, že jej změříme, můžeme určit, zda pochází z bombardujícího svazku nebo z terče. Obě možnosti jsou znázorněny na *obr. 1.9a* a *1.9b*. Jsou principiálně rozlišitelné, a proto nenastane interference, ale pouze sčítání těchto dvou pravděpodobností. Stejný výsledek dostaneme pro obdobnou situaci, kdy spin na levé straně míří dolů a spin na pravé nahoru.



Obr. 1.9 Rozptyl elektronů s opačně orientovanými spiny

Vybereme-li elektrony náhodně (např. z wolframového vlákna vylétávají úplně nepolarizované), bude pravděpodobnost toho, že jednotlivý elektron vyletí se spinem nahoru nebo dolů stejná. Zajímáme-li se o měření spinu elektronů v nějakém místě experimentu, dostaneme to, co nazýváme *nepolarizovaný experiment*.

Tabulka 1.1 Rozptyl nepolarizovaných částic se spinem 1/2

Podíl případů	Spin částice 1 před srážkou	Spin částice 2 před srážkou	Spin částice v detektoru D_1	Spin částice v detektoru D_2	Pravděpodobnost
1/4	nahoru	nahoru	nahoru	nahoru	$ f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) ^2$
1/4	dolů	dolů	dolů	dolů	$ f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) ^2$
1/4	nahoru	dolů	nahoru	dolů	$ f(\vartheta) ^2$
			dolů	nahoru	$ f(\pi - \vartheta) ^2$
1/4	dolů	nahoru	nahoru	dolů	$ f(\pi - \vartheta) ^2$
			dolů	nahoru	$ f(\vartheta) ^2$
Celková pravděpodobnost = $\frac{1}{2} f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) ^2 + \frac{1}{2} f(\vartheta) ^2 + \frac{1}{2} f(\pi - \vartheta) ^2$.					

Výsledky tohoto experimentu se nejlépe vypočítají tak, že si vypíšeme všechny různé možnosti, což jsme udělali v *tabulce 1.1*. Pro každou rozlišitelnou alternativu je pravděpodobnost vypočtena *zvlášť*. Celková pravděpodobnost je pak součtem všech jednotlivých pravděpodobností. Všimněte si, že pro nepolarizovatelné svazky je výsledek pro úhel $\vartheta = \pi/2$ polovinou klasického výsledku s nezávislými částicemi. Chování identických částic má mnoho zajímavých důsledků; budeme je podrobněji zkoumat v další kapitole.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

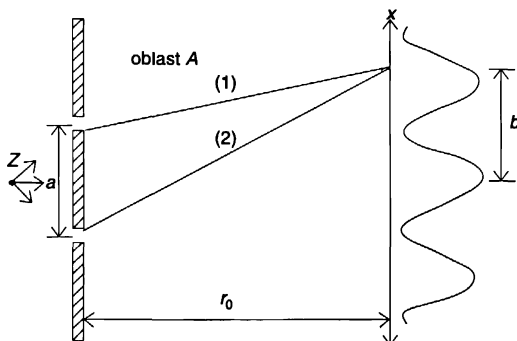
- 1.1 ■ V této kapitole je popsán myšlený pokus s interferencí elektronů na dvojštěrbíně. Podle interferenčního obrazce na obr. 1.1 můžeme odhadnout vlnovou délku λ spojenou s amplitudovými funkcemi φ_1 a φ_2 . Označme vzdálenost mezi středy štěrbin písmenem a .
- Čemu je rovna vlnová délka λ ?
 - Pomocí křivek pro P_1 a P_2 vypočítejte očekávanou hodnotu veličiny P_{12} ve středním maximu, v prvním postranním maximu a v prvních dvou minimech interferenčního obrazce. Porovnejte získané výsledky s křivkou P_{12} .
- 1.2 ■ Posuďte dvojštěrbinový interferenční pokus s elektrony uvažovaný v předchozí úloze za předpokladu, že vzdálenosti elektronového děla od štěrbin a štěrbin od stínítka jsou mnohem větší než vzdálenost mezi štěrbinami a šířka štěrbin je mnohem menší než tato vzdálenost. Odpovězte (pokud možno kvantitativně) na tyto otázky:
- Co se stane s interferenčním obrazcem P_{12} , posuneme-li elektronové dělo nahoru o vzdálenost D ?
 - Jak se změní interferenční obrazec, zdvojnásobíme-li vzdálenost mezi štěrbinami?
 - Co se stane, bude-li první štěrbina dvakrát širší než druhá?
- 1.3 ■ Na vrstvu polaroidu dopadá monochromatické světlo polarizované ve svislé rovině. „Osa propustnosti“ polaroidu svírá se svislým směrem úhel ϑ . Čemu je roven koeficient propustnosti polaroidu? Co udělá polaroid s jednotlivým dopadajícím fotonem?
- 1.4 ■ Svazek elektronů o energii 20 keV prochází tenkou polykrystalickou zlatou fólií a pak dopadá na fotografickou desku. Oblasti zčernání na desce mají podobu koncentrických prstenců se středy na ose svazku. Proč? Vypočítejte průměr prstenců, je-li vzdálenost mezi fólií a deskou rovna 10 cm.
- 1.5 ■ Vraťme se k obvyklému experimentu s interferencí na dvou štěrbinách (obr. 1.1). Jsou-li a_1 a a_2 dvě komplexní čísla rovná amplitudám pravděpodobnosti nalezení elektronů v první a druhé štěrbině, jak bude vypadat vzorec pro relativní intenzitu rozdělení elektronů na stínítku v závislosti na vzdálenosti x od středu? Počítejte v přiblížení malého x . Výsledek by měl být vyjádřen pomocí vzájemné vzdálenosti štěrbin a vzdálenosti štěrbin od stínítka.
- 1.6 ■ V difrakčním pokusu na obrázku mají částice vycházející ze zdroje hybnost p_0 , hmotnost m a rychlost v .

- Čemu je rovna vzdálenost b mezi hlavním a prvním vedlejším maximem? Uvažujte $r_0 \gg a, b$.
- Nechť se vnějším působením změní fáze pro horní cestu o $\delta\varphi_1$ a pro dolní cestu o $\delta\varphi_2$. Ukažte, že v tom případě se hlavní maximum posune o vzdálenost S danou výrazem

$$S = +(\delta\varphi_1 - \delta\varphi_2) \frac{r_0}{a} \frac{\hbar}{p_0}.$$

Je-li tedy veličina $\delta\varphi_1 - \delta\varphi_2$ pro všechny cesty stejná, posouvá se celý difrakční obrazec o vzdálenost S a můžeme říci, že všechny částice se odchyľují o tuto vzdálenost.

- Předpokládejme, že v oblasti A mají částice nevelkou potenciální energii, která je funkcí pouze



svislé souřadnice. Pak se hybnost částice $p(x)$ ve výšce x nad středovou čarou bude poněkud lišit od $p(0)$. Ukažte, že $p(x) = p(0) + \frac{m}{\rho(0)} [U(0) - U(x)]$.

Mění-li se $U(x)$ se vzdáleností pomalu, máme $p(x) = p(0) + Fx/v$, kde $F = -dU/dx$.

d) Za podmínek uvedených v bodě c) se budou hybnosti částic a jejich vlnové délky při pohybu po přímkách (1) a (2) vzájemně lišit. Ukažte, že fázový rozdíl pro horní a dolní cestu je roven

$$\delta\varphi_1 - \delta\varphi_2 = \frac{a}{2v} \frac{F}{\hbar} r_0.$$

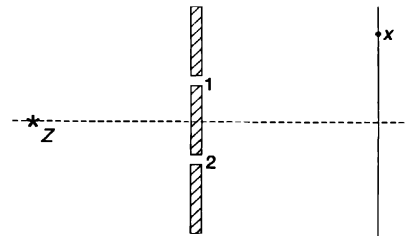
(Všimněte si, že střední svislá vzdálenost mezi těmito dvěma přímkami je rovna $a/2$.) Ukažte, že interferenční proužky se posouvají nahoru o vzdálenost $(1/2) T^2 (F/m)$, kde $T = r_0/v$ je doba průletu od štěrbinu ke stínítku (v klasickém smyslu). Vysvětlíte smysl tohoto výsledku.

1.7 ■ Elektron y se spinem $1/2$ vylétávají ze zdroje Z umístěného před destičkou se dvěma štěrbinami, jak je ukázáno na obrázku. Předpokládejme, že elektron, který dosáhl štěrbinu, jí proletí s amplitudou α , míří-li jeho spin vzhůru, a s amplitudou β , míří-li jeho spin dolů. Dále předpokládejme, že nelze rozlišit, kterou štěrbinou elektron prošel.

a) Jestliže všechny elektrony vylétající ze zdroje mají spin mířící vzhůru, vypočítejte rozdělení intenzit na stínítku v bodě x jako funkci α , β a amplitudy (x/Z) .

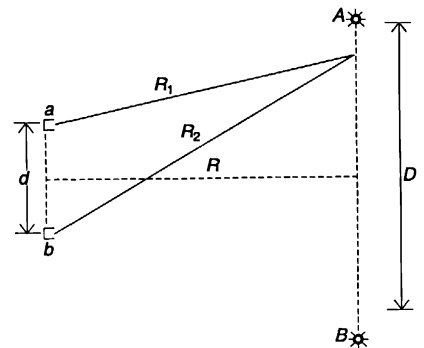
b) Jak se liší toto rozdělení od případu, kdy všechny vylétající elektrony mají spin mířící dolů za jinak stejných podmínek?

c) Čím se bude lišit interferenční obrazec od případu a), bude-li směr spinů náhodný a všechny ostatní podmínky pokusu budou zachovány?



1.8 ■ I když je to divné, někdy můžeme pozorovat výrazné interferenční jevy i tehdy, když jedna z „interferenčních možností“ má velmi malou pravděpodobnost. Ukažte, že při pokusu s interferencí na dvou štěrbinách, kdy pravděpodobnost průchodu jednou štěrbinou je 100krát menší než pravděpodobnost průchodu druhou z nich, je difrakční maximum stále o 50% vyšší než minimum.

1.9 ■ Vzdálenost nejbližších hvězd od Země je tak velká, že jejich průměr nelze určit ani pomocí nejlepších dnešních dalekohledů; jejich úhlová rozlišovací schopnost je nedostatečná vzhledem k úhlovým rozměrům hvězd. Průměr hvězd poprvé určil Michelson pomocí optického interferometru. Ale i přesnost této metody dostačuje právě jen pro nejbližší hvězdy. V roce 1956 navrhl Brown a Twiss novou metodu takových měření, kterou nazvali „metoda korelace intenzit“ [Nature, 178, 1046, (1956)]. Vyzkoušeli tuto metodu na hvězdě Sirius. Použili dva parabolické reflektory (zrcadla od starých projektorů) a do ohniska každého z nich umístili fotonásobič. Výstupy fotonásobičů byly propojeny koaxiálním kabelem s elektronickou aparaturou, která zaznamenávala střední hodnotu *součinu* proudů v obou fotonásobičích (takzvanou „korelační funkci“). Podle chování tohoto součinu v závislosti na vzdálenosti mezi zrcadly bylo možno určit úhlový průměr hvězdy. Mnoho fyziků tehdy zastávalo názor, že tato metoda není vhodná, protože světlo jsou vlastně fotony a každý foton dopadá buď na jedno nebo druhé zrcadlo, takže žádnou korelaci mezi proudy nemůžeme pozorovat.



Tento argument můžete vyvrátit rozбором následujícího idealizovaného pokusu. Dva malé zdroje světla, například dvě lampičky A a B umístíme ve velké vzdálenosti od počítačů fotonů a b. Geometrické uspořádání pokusu vidíme na obrázku. Počítače a b jsou zapojeny v režimu

coincidence, kdy je registrován počet případů za jednotku času p_{12} dopadu fotonů na oba detektory *současně* (tj. během krátkého časového intervalu). Nechť $\langle a|A \rangle$ je amplituda dopadu fotonu vyslaného zdrojem A na detektor a za časový úsek vymezený rozlišovací schopností aparatury. Potom $\langle a|A \rangle = c \exp(i\alpha_1)$, kde c je komplexní konstanta a $\alpha_1 = kR_1$ (R_1 je vzdálenost od A k a a k je vlnové číslo). Analogicky $\langle b|A \rangle = c \exp(i\alpha_2)$, kde $\alpha_2 = kR_2$ a R_2 je vzdálenost od A k b . Ukažte, že četnost koincidencí za jednotku času je úměrná $2 + \cos 2k(R_2 - R_1)$. Jak je možno použít tento výsledek k určení D , je-li známo R ? Zanedbejte skutečnost, že reálný proces je vlastně superpozicí mnoha takovýchto jednoduchých situací, protože světlo přichází ze všech bodů na povrchu hvězdy a nejen z krajních protilehlých bodů.

I dentické částice

- 2.1 BOSEHO ČÁSTICE A FERMIHO ČÁSTICE
- 2.2 STAVY SE DVĚMA BOSEHO ČÁSTICEMI
- 2.3 STAVY S n BOSEHO ČÁSTICEMI
- 2.4 EMISE A ABSORPCE FOTONŮ
- 2.5 SPEKTRUM ABSOLUTNĚ ČERNÉHO TĚLESA
- 2.6 TEKUTÉ HELIUM
- 2.7 VYLUČOVACÍ PRINCIP

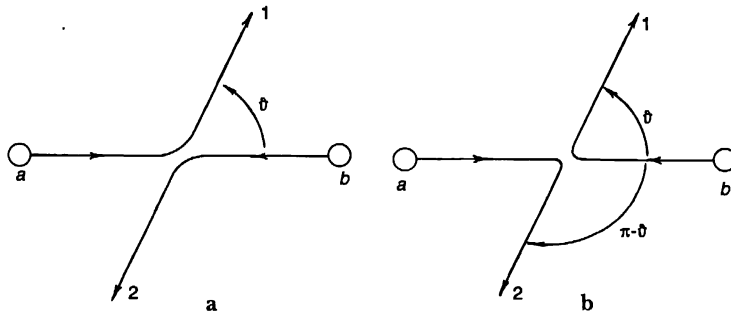
Přečtěte si znovu: o záření absolutně černého tělesa v kapitole 41, díl 1, Brownův pohyb a v kapitole 42, díl 1 Aplikace kinetické teorie.

2.1 BOSEHO ČÁSTICE A FERMIHO ČÁSTICE

V předcházející kapitole jsme se začali zabývat speciálními pravidly, podle nichž probíhá interference v procesech se dvěma *identickými* částicemi. *Identickými částicemi* rozumíme částice, které, podobně jako elektrony, není možné od sebe navzájem žádným způsobem odlišit. Vyskytují-li se v procesu dvě takovéto částice, vyměníme-li tu, která se dostala do detektoru, za jinou, dostaneme neodližitelnou alternativu, která stejně jako všechny případy nerozlišitelných možností interferuje s původním, nevyměněným uspořádáním. Amplituda události je pak dána součtem dvou interferujících amplitud; ale co je velmi zajímavé, v některých případech probíhá interference se *stejnou fází*, a v jiných *s opačnou*.

Předpokládejme, že zkoumáme srážku dvou částic a , při které se částice a rozptýluje směrem 1 a částice b do směru 2, jak je znázorněno na *obr. 2.1a*. Nechť $f(\vartheta)$ je amplituda tohoto procesu; pak je pravděpodobnost P_1 pozorování takovéto události úměrná $|f(\vartheta)|^2$. Samozřejmě, může se stát, že částice b bude směřovat do detektoru 1 a částice a do detektoru 2, jak ukazuje *obr. 2.1b*. Předpokládáme-li, že v tomto experimentu neexistují žádné významné směry definované spiny nebo něčím podobným, je pravděpodobnost tohoto procesu prostě $|f(\pi - \vartheta)|^2$, protože je to ekvivalentní prvnímu případu, v němž postavíme detektor pod úhlem $\pi - \vartheta$. Mohli byste se domnívat, že *amplituda* pro druhý proces je právě $f(\pi - \vartheta)$. Ale není to zcela nevyhnutelné, neboť

může obsahovat ještě libovolný fázový faktor. Jinak řečeno, amplituda by mohla mít tvar $e^{i\delta}f(\pi - \vartheta)$, který stále dává pravděpodobnost P_2 rovnou $|f(\pi - \vartheta)|^2$.



Obr. 2.1 Při rozptylu dvou identických částic jsou procesy a) a b) nerozlišitelné

Nyní se podívejme na to, co se stane, jsou-li a a b identické částice. Pak už není možné rozlišit dva různé procesy znázorněné na dvou částech obr. 2.1. Existuje amplituda toho, že *bud'* a , nebo b dopadne do detektoru 1, zatímco druhá částice vletí do detektoru 2. Tato amplituda je dána součtem amplitud pro dva procesy znázorněné na obr. 2.1. Nazveme-li první z nich $f(\vartheta)$, dostaneme pro druhou $e^{i\delta}f(\pi - \vartheta)$, kde je velmi důležitý fázový faktor, neboť se chystáme sčítat dvě amplitudy. Předpokládejme, že máme vynásobit amplitudu určitým fázovým faktorem vždy, když vyměníme úlohy dvou částic. Vyměníme-li je ještě jednou, objeví se násobící faktor opět. Tím se však dostaneme zpět k prvnímu procesu. Dvakrát aplikovaný fázový faktor nás musí přivést tam, kde jsme začali – jeho druhá mocnina musí být rovna 1. Jsou jen dvě možnosti: $e^{i\delta}$ je rovno buď $+1$, nebo -1 . Výměna přispívá k amplitudě vkladem buď s *týmž* znaménkem, nebo s *opačným*. V přírodě jsou realizovány oba případy, každý pro jinou skupinu částic. Částice interferující s *kladným* znaménkem se nazývají *Boseho částice* a ty, které interferují se *záporným* znaménkem, *Fermiho částice*. Mezi Boseho částice patří foton, mezony a graviton. Fermiho částice jsou: elektron, mion, neutrino, nukleony a baryony. Amplitudu rozptylu identických částic tedy dostaneme

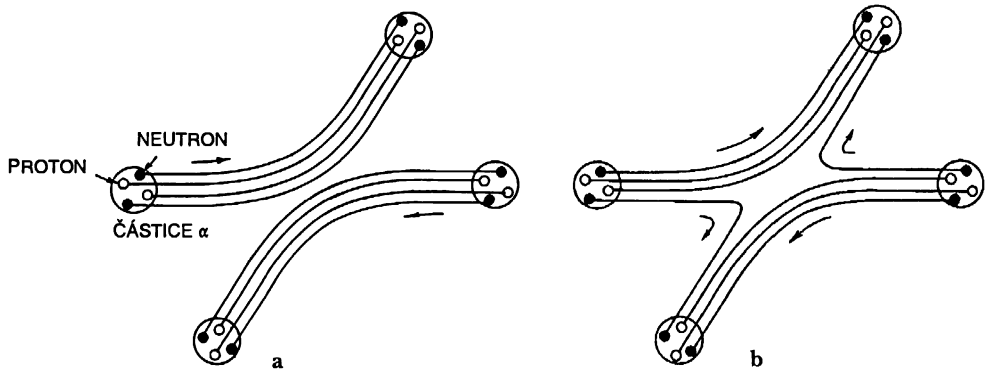
$$\text{pro Boseho částice ve tvaru:} \quad (\text{amplituda procesu}) + (\text{amplituda výměny}) \quad (2.1)$$

$$\text{pro Fermiho částice.} \quad (\text{amplituda procesu}) - (\text{amplituda výměny}). \quad (2.2)$$

Pro částice se spinem (např. elektrony) však do popředí vystupuje další komplikace. Musíme je nejen lokalizovat, ale také určit směr jejich spinů. Jen pro identické částice s *identickými spinovými stavy* platí, že jejich amplitudy interferují, pokud je navzájem vyměníme. Vzpomenete-li si na rozptyl nepolarizovatelných svazků, které jsou směsí různých spinových stavů, vidíte, že je třeba udělat pár výpočtů navíc.

Zajímavá situace vznikne tehdy, jsou-li spolu dvě nebo více částic těsně svázány. Vezměme si např. částici α , ta je složena ze 4 nukleonů: 2 neutronů a 2 protonů. Rozptylují-li se na sobě dvě částice α , připadá v úvahu několik možností. V době rozptylu se může objevit určitá amplituda, že jeden z neutronů přeskóčí z jedné částice α do druhé, zatímco jiný neutron udělá totéž v opačném směru, takže dvě částice α , které vyjdou na konci rozptylového procesu, nejsou ty původní; nastala mezi nimi výměna jednoho páru neutronů (obr. 2.2). Amplituda rozptylu s výměnou páru neutronů bude interferovat s amplitudou bez takovéto výměny, a to se záporným znaménkem, neboť se uskutečnila výměna dvou Fermiho částic. Na druhé straně, je-li vzájemná energie obou

částic α tak malá, že zůstanou dostatečně daleko od sebe (řekněme díky coulombovskému odpuzování), a pravděpodobnost výměny libovolných dvou vnitřních částic je taktéž nepatrná, můžeme v tomto případě považovat částici α za jednoduchý objekt a nelámat si hlavu nad její vnitřní stavbou. Za takovýchto okolností existují jen dva příspěvky k amplitudě rozptylu. Buď nenastane žádná výměna, nebo se v procesu rozptylu vymění všechny čtyři nukleony.



Obr. 2.2 Rozptyl dvou částic α . a) částice si ponechávají svou totožnost, b) v průběhu srážky nastává výměny neutronu

Jelikož i protony, i neutrony uvnitř částice α jsou Fermiho částice, změni výměna libovolného páru znaménko amplitudy rozptylu. Nedochází-li uvnitř částic α k žádným změnám, jejich vzájemná výměna představuje vlastně výměnu čtyř párů Fermiho částic. U každého páru dochází ke změně znaménka, takže jako konečný výsledek dostaneme, že amplitudy se skládají s kladným znaménkem. Částice α se chová jako Boseho částice.

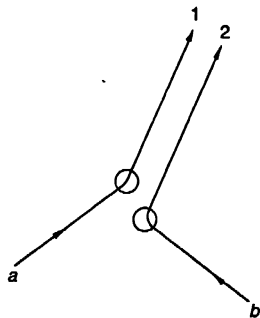
Platí tedy pravidlo, že složené objekty se za okolností, kdy je možné považovat je za jednoduché, chovají buď jako Fermiho, nebo jako Boseho částice v závislosti na tom, zda se skládají z lichého nebo sudého počtu Fermiho částic.

Všechny elementární Fermiho částice, které jsme zmínili (takové jako elektron, proton, neutron atd.), mají spin $j = 1/2$. Složíme-li dohromady několik takových částic a vytvoříme složený objekt, může být výsledný spin buď celočíselný, nebo poločíselný. Například běžný izotop helia ${}^4\text{He}$, který má dva protony a dva neutrony, má nulový spin, zatímco ${}^7\text{Li}$, skládající se ze tří protonů a čtyř neutronů, má spin $3/2$. Později se naučíme, jak se skládá moment hybnosti, a nyní jen zmíníme, že každý složený objekt s *poločíselným spinem* představuje *Fermiho částici* a každý složený objekt s *celočíselným spinem* zase *Boseho částici*.

Uvedené pravidlo přímo skýtá zajímavou otázku: Proč jsou částice s poločíselným spinem Fermiho částice, jejichž amplitudy se sčítají se záporným znaménkem, zatímco částice s celočíselným spinem jsou zase Boseho částice, jejichž amplitudy se sčítají se znaménkem kladným? Omlouváme se, že vám nemůžeme podat elementární vysvětlení. Důkaz vypracoval Pauli pomocí složitých tvrzení teorie relativity a kvantové teorie pole. Ukázal, že tato fakta jsou spolu nevyhnutelně svázaná, ale nám se nepodařilo najít způsob, kterým bychom mohli jeho zdůvodnění podat na elementární úrovni. Zdá se, že je to jedno z mála míst ve fyzice, kde existuje pravidlo, které lze postulovat velmi snadno, ale pro které nikdo nenašel jednoduché a snadné vysvětlení. Toto vysvětlení má totiž své kořeny hluboko v relativistické kvantové mechanice. Zřejmě to znamená, že ještě úplně nerozumíme jeho základnímu principu. Teď jej prostě přijmeme jako jeden ze zákonů tohoto světa.

2.2 STAVY SE DVĚMA BOSEHO ČÁSTICEMI

Nyní bychom rádi rozebrali zajímavý důsledek pravidla skládání pro Boseho částice. Týká se jejich chování, nemáme-li pouze jednu částici, ale několik. Blíže si všimneme situace, kdy se dvě Boseho částice rozptylují na dvou rozptylových centrech. Nebudeme se hlouběji zabývat podrobnostmi samotného mechanismu rozptylu. Zajímáme se jen o to, co se stane s rozptýlenými částicemi. Předpokládejme, že máme situaci jako na *obr. 2.3*. Částice *a* je rozptýlena do stavu 1 (*stavem* rozumíme daný směr a energii nebo nějakou jinou podmínku) a částice *b* do stavu 2. Necht' jsou stavy 1 a 2 téměř stejné. (Ve skutečnosti chceme zjistit, jaká je pravděpodobnost toho, že se obě částice rozptýlí do stejného směru nebo stejného stavu; nejlepší však bude, uvažíme-li nejdříve situaci, kdy jsou stavy téměř shodné, a z toho pak odvodíme, co se stane, jsou-li oba identické.)



Obr. 2.3 Dvojitý rozptyl do blízkých konečných stavů

Kdybychom měli pouze částici *a*, měla by určitou amplitudu rozptylu do směru 1, řekněme $\langle 1 | a \rangle$. Samotné částici *b* by zase příslušela amplituda $\langle 2 | b \rangle$ pro pohyb ve směru 2. Nejsou-li tyto částice identické, bude amplituda toho, že ve stejném čase nastanou oba rozptyly, rovna součinu

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle.$$

Pravděpodobnost takové události pak je

$$|\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle|^2,$$

což je též rovno

$$|\langle 1 | a \rangle|^2 |\langle 2 | b \rangle|^2.$$

Pro zkrácení zápisu položíme

$$\{\langle 1 | a \rangle\}^2 = a_1, \quad \{\langle 2 | b \rangle\}^2 = b_2.$$

Potom pravděpodobnost dvojitého rozptylu je

$$|a_1|^2 |b_2|^2.$$

Mohlo by se stát i to, že částice *b* je rozptýlena do směru 1, zatímco částice *a* se bude pohybovat směrem 2. Amplituda tohoto procesu bude

$$\langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle$$

a pravděpodobnost takové události je

$$|\langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle|^2 = |a_2|^2 |b_1|^2.$$

Představme si, že máme k dispozici jeden pár maličkých detektorů, které zachytávají rozptýlené částice. Pravděpodobnost P_2 , že najednou registrují obě částice, je dána součtem

$$P_2 = |a_1|^2 |b_2|^2 + |a_2|^2 |b_1|^2. \quad (2.3)$$

Nyní uvažujme, že směry 1 a 2 jsou velmi blízko sebe. Očekáváme, že a by se mělo spojitě měnit se vzdáleností, takže a_1 a a_2 se musí navzájem přibližovat, když se směry 1 a 2 dostanou těsně k sobě. Jsou-li dostatečně blízko, budou amplitudy a_1 a a_2 shodné. Můžeme položit $a_1 = a_2$ a obě označit společně a , podobně i $b_1 = b_2 = b$. Tak dostaneme

$$P_2 = 2 |a|^2 |b|^2. \quad (2.4)$$

Dále předpokládejme, že a a b jsou identické Boseho částice. Pak proces, v němž se a apohybuje směrem 1 a b směrem 2, není možné odlišit od obráceného procesu, kde a letí směrem 2 a b směrem 1. V tomto případě amplitudy pro dva různé procesy spolu mohou interferovat. Celková amplituda toho, že v každém ze dvou detektorů máme po jedné částici, je

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle + \langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle \quad (2.5)$$

a pravděpodobnost zaregistrování jednoho páru bude rovna druhé mocnině jejího modulu

$$P_2 = |a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 = 4 |a|^2 |b|^2. \quad (2.6)$$

Dostáváme výsledek, který říká, že je *dvakrát pravděpodobnější* najít dvě *identické* Boseho částice rozptýlené do téhož stavu, než dává výpočet provedený ze předpokladu, že obě částice jsou různé.

Ačkoliv stále uvažujeme, že obě částice jsou zaregistrovány různými detektory, není to podstatné, jak se můžeme přesvědčit pomocí následující úvahy. Představme si, že oba směry, 1 a 2, by přivedly částice do *jediného* malého detektoru umístěného v určité vzdálenosti. Směr 1 definujeme tak, že míří na elementární plošku dS_1 detektoru, a směr 2 zase na jeho povrchovou plošku dS_2 . (Předpokládáme, že detektor představuje plochu kolmou na směr rozptylu.) Nyní nemůžeme zadat pravděpodobnost toho, že částice poletí v přesně určeném směru nebo do *přesně určeného* bodu prostoru. Taková věc je nemožná – šance zaregistrovat libovolný přesný směr je nulová. Chceme-li být přesní, budeme muset definovat naše amplitudy tak, aby nám udávaly pravděpodobnost dopadu na *jednotku plochy* detektoru. Představme si, že bychom měli jen částici α ; ta by měla určitou amplitudu rozptylu ve směru 1. Definujeme $\langle 1 | a \rangle = a_1$ jako amplitudu toho, že se a rozptýlí na *jednotkovou plochu* detektoru ve směru 1. Jinými slovy, vybíráme měřítko pro a_1 a říkáme, že je „normované“, takže pravděpodobnost rozptylu částice α do *elementu plochy* dS_1 je dána vztahem

$$|\langle 1 | a \rangle|^2 dS_1 = |a_1|^2 dS_1. \quad (2.7)$$

Má-li náš detektor celkovou plochu ΔS , kterou necháme probíhat dS_1 , je celková pravděpodobnost toho, že se částice a rozptýlí do detektoru

$$\int_{\Delta S} |a|^2 dS_1. \quad (2.8)$$

Podobně jako předtím budeme vyžadovat, aby byl detektor dostatečně malý, takže amplituda a_1 se na povrchu detektoru podstatně nemění; a_1 je pak konstanta, kterou můžeme označit a . Pravděpodobnost toho, že se částice rozptýlí někam do detektoru, pak je

$$p_a = |a|^2 \Delta S. \quad (2.9)$$

Podobným způsobem dostaneme, že částice b (je-li osamocena) se rozptýlí do nějakého elementu plošky dS_2 s pravděpodobností

$$|b_2|^2 dS_2.$$

(Používáme dS_2 místo dS_1 , protože později budeme požadovat, aby a i b letěly v různých směrech.) Opět položíme b_2 rovno konstantě b ; pak pravděpodobnost zaregistrování částice b v detektoru určuje výraz

$$p_b = |b|^2 \Delta S. \quad (2.10)$$

Jsou-li přítomny obě částice, je pravděpodobnost toho, že a se rozptýlí do dS_1 a b do dS_2

$$|a_1 b_2|^2 dS_1 dS_2 = |a|^2 |b|^2 dS_1 dS_2. \quad (2.11)$$

Chceme-li získat pravděpodobnost rozptylu *obou* částic a i b do detektoru, integrujeme podle dS_1 a dS_2 přes celou plochu ΔS a dostaneme

$$P_2 = |a|^2 |b|^2 (\Delta S)^2. \quad (2.12)$$

Mimochodem si všimněme, že je to rovno právě součinu $p_a p_b$ přesně tak, jako kdybychom předpokládali, že částice a a b interagují na sobě nezávisle.

Jsou-li však částice identické, existují pro každý pár povrchových elementů dS_1 a dS_2 dvě nerozlišitelné možnosti. Alternativu, kdy částice a směřuje do dS_2 a částice b do dS_1 , není možné rozlišit od případu, v němž se pohybuje a do dS_1 a b do dS_2 , takže amplitudy těchto procesů spolu budou interferovat. (Když jsme měli před chvílí dvě *různé* částice, nestarali jsme se, kudy vešly do detektoru, ačkoliv *in principu* jsme to zjistit mohli, takže žádná interference nenastala. Pro identické částice to už nemůžeme zjistit ani principiálně.) Musíme proto psát, že dvě částice dopadnou na dS_1 a dS_2 s pravděpodobností

$$|a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 dS_1 dS_2. \quad (2.13)$$

Ale nyní, když integrujeme přes plochu detektoru, musíme být opatrní. Kdybychom nechali probíhat dS_1 a dS_2 celou plochou ΔS , započítali bychom každou část plochy *dvakrát*, jelikož

(2.13) obsahuje všechno, co se může přihodit libovolnému páru plošných elementů dS_1 a dS_2 .⁴⁾ Stejně můžeme integrál tímto způsobem vypočítat, provedeme-li opravu pro dvojnásobné započítání každé plošky dělením výsledku dvěma. Tak dostaneme, že pro identické Boseho částice je P_2 rovno

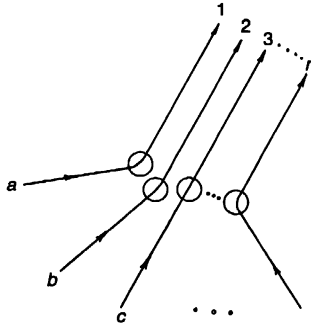
$$P_2 \text{ (Bose)} = \frac{4 |a|^2 |b|^2 (\Delta S)^2}{2} = 2 |a|^2 |b|^2 (\Delta S)^2. \quad (2.14)$$

Opět je to dvojnásobek toho, co jsme dostali v rovnici (2.12) pro rozlišitelné částice.

Představíme-li si na chvíli, že jsme se odněkud dozvěděli, že kanál b už poslal svou částici určitým směrem, můžeme říci, že druhá částice poletí v téměř směru s dvakrát větší pravděpodobností, než bychom očekávali z výpočtu pro nezávislou událost. Vlastností Boseho částic je, že je-li už jedna z nich v určitých podmínkách, je *pravděpodobnost* dostat do těch podmínek další, identickou částici dvakrát větší než v případě, že by tam první částice ještě nebyla. Tato skutečnost je často formulována takto: Je-li už jedna Boseho částice v daném stavu, je možné identickou částici na ni umístit s amplitudou $\sqrt{2}$ -krát větší, než kdyby tam první částice nebyla. (Z fyzikálního hlediska to není vhodný způsob, jak zformulovat toto pravidlo, ale uplatní-li se důsledně, dostaneme samozřejmě správný výsledek.

2.3 STAVY S n BOSEHO ČÁSTICEMI

Rozšíříme náš výsledek na situaci, v níž je přítomno n částic. Představme si případ znázorněný na obr. 2.4. Máme n částic a, b, c, \dots , které se rozptýlí a skončí ve směrech 1, 2, 3, ..., n . Všech n směrů míří do malého vzdáleného detektoru. Podobně jako v předcházející části normujeme všechny amplitudy tak, aby každá částice interagující samostatně vešla do plošného elementu dS detektoru s pravděpodobností $|\langle \rangle|^2 dS$.



Obr. 2.4 Rozptýl n částic do blízkých konečných stavů

Zprvė předpokládejme, že všechny částice jsou rozlišitelné. Potom pravděpodobnost toho, že zaregistrujeme n částic v n různých elementech povrchu současně, bude

$$|a_1 b_2 c_3 \dots|^2 dS_1 dS_2 dS_3 \dots \quad (2.15)$$

⁴⁾ V (2.11) udává výměna dS_1 a dS_2 jinou událost, takže oba plošné elementy by měly probíhat celou plochou detektoru. V (2.13) pracujeme s dS_1 a dS_2 jako s párem a zahrnujeme vše, co může nastat. Když integrály opět zahrnují všechno, co nastane, vymění-li se dS_1 a dS_2 , vše se počítá dvakrát.

Opět uvažujme, že amplitudy nezávisejí na tom, kde je ploška dS na detektoru umístěna (uvažujme malý detektor); označme je prostě a, b, c, \dots . Pravděpodobnost (2.15) dostane tvar

$$|a|^2 |b|^2 |c|^2 \dots dS_1 dS_2 dS_3 \dots \quad (2.16)$$

Zintegrujeme-li každou plošku dS přes povrch ΔS detektoru, dostaneme pro pravděpodobnost P_n (různé) zaregistrování n různých částic současně

$$P_n(\text{různé}) = |a|^2 |b|^2 |c|^2 \dots (\Delta S)^n. \quad (2.17)$$

Je to vlastně součin pravděpodobností, že každá částice vletí do detektoru samostatně. Všechny interagují nezávisle – pravděpodobnost, že jedna vejde do detektoru, nezávisí na tom, kolik jiných tam vstupuje zároveň s ní.

Nyní uvažujme, že všechny částice jsou identické bosony. Pro každou skupinu směrů 1, 2, 3, ... existuje mnoho nerozlišitelných možností. Kdyby byly částice např. jen tři, měli bychom tyto možnosti

$$\begin{array}{lll} a \rightarrow 1 & a \rightarrow 1 & a \rightarrow 2 \\ b \rightarrow 2 & b \rightarrow 3 & b \rightarrow 1 \\ c \rightarrow 3 & c \rightarrow 2 & c \rightarrow 3 \\ \\ a \rightarrow 2 & a \rightarrow 3 & a \rightarrow 3 \\ b \rightarrow 3 & b \rightarrow 1 & b \rightarrow 2 \\ c \rightarrow 1 & c \rightarrow 2 & c \rightarrow 1 \end{array}$$

Máme šest různých kombinací. Při n částicích existuje $n!$ různých, ale *nerozlišitelných* možností, pro něž musíme amplitudy sčítat. Pravděpodobnost toho, že zaregistrujeme n částic v n elementech povrchu, pak je

$$|a_1 b_2 c_3 \dots + a_1 b_3 c_2 \dots + a_2 b_1 c_3 \dots + a_2 b_3 c_1 \dots + \text{atd.} + \text{atd.}|^2 dS_1 dS_2 dS_3 \dots dS_n. \quad (2.18)$$

Ještě jednou předpokládejme, že všechny směry jsou tak blízko sebe, že můžeme položit $a_1 = a_2 = \dots = a_n = a$ a podobně pro b, c, \dots ; pravděpodobnost (2.18) pak získá tvar

$$|n! abc \dots|^2 dS_1 dS_2 \dots dS_n. \quad (2.19)$$

Zintegrujeme-li každou plošku dS přes plochu ΔS detektoru, započítá se možný součin elementů $n!$ -krát. Provedeme opravu vydělením $n!$ a dostaneme

$$P_n(\text{Bose}) = \frac{1}{n!} |n! abc \dots|^2 (\Delta S)^n$$

neboli

$$P_n(\text{Bose}) = n! |abc \dots|^2 (\Delta S)^n. \quad (2.20)$$

Porovnáme-li tento výsledek s rovnicí (2.17), vidíme, že pravděpodobnost zaregistrování n Boseho částic najednou je $n!$ -krát větší než v případě výpočtu za předpokladu, že všechny částice jsou rozlišitelné. Výsledek, který jsme dostali, můžeme shrnout takto

$$P_n(\text{Bose}) = n! P_n(\text{různé}). \quad (2.21)$$

V Boseho případě je tedy pravděpodobnost $n!$ -krát větší, než kdybychom vycházeli z předpokladu, že částice interagují nezávisle.

Lépe uvidíme, co to znamená, položíme-li si následující otázku: Jaká je pravděpodobnost toho, že se Boseho částice dostane do určitého stavu, v němž už je n jiných identických bosonů? Označme nově přidanou částici jako w . Máme-li $(n + 1)$ částic včetně w , získá rovnice (2.20) tvar

$$P_{n+1}(\text{Bose}) = (n + 1)! |abc \dots w|^2 (\Delta S)^{n+1}. \quad (2.22)$$

Můžeme to přepsat takto

$$P_{n+1}(\text{Bose}) = \{(n + 1) |w|^2 \Delta S\} n! |abc \dots|^2 (\Delta S)^n$$

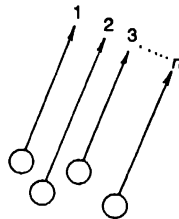
nebo

$$P_{n+1}(\text{Bose}) = (n + 1) |w|^2 \Delta S \cdot P_n(\text{Bose}). \quad (2.23)$$

Na tento výsledek se můžeme dívat takto: $|w|^2 \Delta S$ je pravděpodobnost toho, že dostaneme částici w do detektoru, kdyby nebyly přítomny žádné jiné částice; $P_n(\text{Bose})$ je šance, že už je tam n jiných bosonů. Rovnice (2.23) nám říká, že máme-li n identických Boseho částic, pravděpodobnost, že se ještě jedna částice ocitne v témže stavu, je $(n + 1)$ -krát větší než ta, kterou bychom vypočítali, kdyby tam žádné jiné částice nebyly. Přítomnost jiných částic zvyšuje pravděpodobnost pro další částici, že se zatoulá do jejich společnosti.

2.4 EMISE A ABSORPCE FOTONŮ

V naší dosavadní diskuzi jsme hovořili o procesu podobném rozptylu částic α . Ale to není podstatné; mohli jsme se stejně dobře zabývat o vzniku částic, např. při emisi světla. Při takovém procesu „vzniká“ foton. V tomto případě nepotřebujeme vstupující čáry na obr. 2.4; stačí jen uvažovat, že máme n atomů a, b, c, \dots emitujících světlo (obr. 2.5). Náš výsledek můžeme tedy zformulovat i takto: *Atom bude emitovat foton do určitého konečného stavu s pravděpodobností $n + 1$ -krát větší, existuje-li v tomto stavu n fotonů.*



Obr. 2.5 Vznik n fotonů v blízkých konečných stavech

Mnozí rádi uvádějí tento výsledek trochu jinak: říkají, že *amplituda* emise fotonu se zvětší $\sqrt{n+1}$ -krát, je-li přítomno už n fotonů. Samozřejmě, je to jen jiný způsob, jak říci tutéž věc, máme-li na paměti, že k získání pravděpodobnosti je třeba tuto amplitudu pouze umocnit na druhou.

V kvantové mechanice obecně platí, že amplituda přechodu z libovolného stavu φ do jiného libovolného stavu χ je komplexně sdružená s amplitudou přechodu z χ do φ

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \chi \rangle^* . \quad (2.24)$$

Toto pravidlo si více rozebereme trochu později, ale nyní budeme jen předpokládat, že platí. Můžeme je použít pro zjištění, jak se fotony rozptylují nebo absorbují z daného stavu. Víme, že amplituda toho, že se foton přidá k určitému stavu, řekněme i , v němž se už nachází n fotonů, je dána vztahem

$$\langle n+1 | n \rangle = \sqrt{n+1} a , \quad (2.25)$$

kde $a = \langle i | a \rangle$ je amplituda v případě, kdy jiné fotony přítomny nejsou. Použijeme-li rovnici (2.24), dostaneme pro amplitudu opačného přechodu (od $(n+1)$ fotonů k n fotonům) rovnici

$$\langle n | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} a^* . \quad (2.26)$$

Tento způsob se však mnohým příliš nezdá; lidé neradi přemýšlejí o přechodu od $(n+1)$ k n , ale vždy raději začínají s n fotony. Proto říkají, že pravděpodobnost absorpce fotonu, je-li jich n (jinými slovy přechod od n k $(n-1)$), je

$$\langle n-1 | n \rangle = \sqrt{n} a^* , \quad (2.27)$$

což je zajisté totéž jako rovnice (2.26). Nyní však vzniká další problém – zapamatovat si, kdy je třeba použít \sqrt{n} a kdy $\sqrt{n+1}$. Pomůže nám toto pravidlo: násobící faktor je vždy druhou odmocninou nejvyššího počtu přítomných fotonů, ať už je to před reakcí, nebo po ní. Rovnice (2.25) a (2.26) ukazují, že tento zákon je skutečně symetrický; nesymetricky pouze vypadá, napíšeme-li jej jako rovnici (2.27).

Nová uvedená pravidla mají mnoho fyzikálních důsledků. Popíšeme jeden z nich, týkající se emise světla. Představme si situaci, v níž máme fotony uzavřené v krabici; můžeme předpokládat, že místo stěn má zrcadla. Necht' je tam těch *fotonů* n , všechny ve stejném stavu (stejná frekvence, směr, polarizace), takže je není možné rozlišit, a navíc je tam ještě jeden atom schopný emitovat do tohoto stavu další foton. Pak pravděpodobnost, že jej opravdu emituje, je

$$(n+1) | a |^2 \quad (2.28)$$

a pravděpodobnost, že absorbuje foton, je

$$n | a |^2 , \quad (2.29)$$

kde $| a |^2$ je pravděpodobnost emise, kdyby tam žádné fotony nebyly. Těmito pravidly jsme se už trochu jinak zabývali ve 42. kapitole 1. dílu. Rovnice (2.29) říká: Pravděpodobnost toho, že atom *absorbuje* foton a přejde do vyššího energetického stavu, je úměrná intenzitě světla, které na něj

svítí. Einstein však jako první dokázal, že rychlost, jakou přejde atom do *nížšího* energetického stavu, má dvě části. Je to pravděpodobnost spontánního přechodu $|a|^2$ plus pravděpodobnost indukovaného přechodu $n|a|^2$, která je úměrná intenzitě světla, tj. počtu přítomných fotonů. Kromě toho, jak Einstein zjistil, jsou koeficienty absorpce a indukované emise stejné a souvisejí s pravděpodobností spontánní emise. To, co jsme si tu objasnili, znamená, že při měření intenzity světla množstvím přítomných fotonů (místo toho, abychom používali energii na jednotku plochy za jednotku času), jsou všechny koeficienty absorpce, indukované emise a spontánní emise stejné. To je obsah vztahu mezi Einsteinovými koeficienty A a B v 1. dílu, rovnice (42.18).

2.5 SPEKTRUM ABSOLUTNĚ ČERNÉHO TĚLESA

Naše pravidla pro Boseho částice bychom rádi použili k tomu, abychom si ještě jednou odvodili vztah pro spektrum absolutně černého tělesa (viz kapitola 42, díl 1.). Uděláme to tak, že zjistíme, kolik fotonů je v krabici, je-li v ní záření v tepelné rovnováze s atomy. Předpokládejme, že pro každou světelnou frekvenci ω existuje určitý počet N atomů, které mají dva energetické stavy lišící se o energii $\Delta E = \hbar\omega$ (obr. 2.6).



Obr. 2.6 Emise a absorpce fotonu s frekvencí ω

Stav s nižší energií nazýváme *základní* a s vyšší energií *excitovaný*. Nechť N_z a N_e jsou střední počty atomů v základním a excitovaném stavu; pak ze statistické mechaniky dostaneme, že v tepelné rovnováze při teplotě T

$$\frac{N_e}{N_z} = e^{-\Delta E/kT} = e^{-\hbar\omega/kT}. \quad (2.30)$$

Každý atom v základním stavu může absorbovat foton a přejít do excitovaného stavu. V rovnováze si musí být rychlosti těchto dvou procesů rovny. Tyto rychlosti jsou úměrné pravděpodobnosti pro danou událost a počtu přítomných atomů. Nechť \bar{n} je střední počet fotonů v daném stavu s frekvencí ω . Pak bude absorpční rychlost z tohoto stavu rovna $N_z \bar{n} |a|^2$ a emisní rychlost do tohoto stavu bude $N_e (\bar{n} + 1) |a|^2$. Položíme-li obě rychlosti sobě rovné, dostaneme

$$N_z \bar{n} = N_e (\bar{n} + 1). \quad (2.31)$$

Zkombinování s rovnicí (2.30) nám dá vztah

$$\frac{\bar{n}}{\bar{n} + 1} = e^{-\hbar\omega/kT},$$

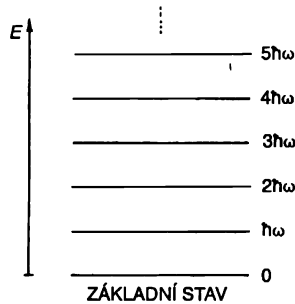
z něhož pro \bar{n} dostaneme

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}, \quad (2.32)$$

což je střední počet fotonů v libovolném stavu s frekvencí ω v dutině při tepelné rovnováze. Jelikož má každý foton energii $\hbar\omega$, je energie fotonů v daném stavu $\bar{n}\hbar\omega$, tj.

$$\frac{\hbar\omega}{e^{h\omega/kT} - 1}. \quad (2.33)$$

Podobnou rovnici jsme už jednou našli v jiné souvislosti (díl I, rovnice (41.15)). Vzpomeňme si, že pro harmonický oscilátor (řekněme závaží na pružince) jsou kvantově mechanické energetické hladiny ekvidistantní s krokem $\hbar\omega$, jak je znázorněno na *obr. 2.7*.



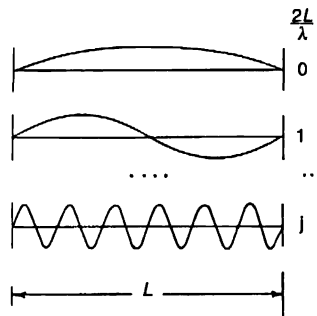
Obr. 2.7 Energetické hladiny harmonického oscilátoru

Nazveme-li energii n -té hladiny $n\hbar\omega$, zjistíme, že střední hodnota energie takového oscilátoru je taktéž dána vztahem (2.33). Tuto rovnici jsme však odvodili pro fotony počítáním částic a přišli jsme k téměř výsledku. To je jeden z úžasných divů kvantové mechaniky. Začneme-li uvažovat o určitém stavu nebo určité podmínce pro Boseho částice, které navzájem neinteragují (předpokládali jsme, že fotony na sebe navzájem nepůsobí), a pak uvažujeme, že do tohoto stavu můžeme přivést buď žádnou, nebo jednu, nebo dvě, ... až n částic, zjistíme, že takový systém se chová ve všech kvantově mechanických vztazích přesně tak jako harmonický oscilátor. Takovým oscilátorem rozumíme dynamický systém podobný závaží na pružině nebo stojaté vlně v rezonanční dutině. A proto je možné reprezentovat elektromagnetické pole fotony. Z jednoho pohledu můžeme analyzovat elektromagnetické pole v krabici nebo v dutině pomocí množství harmonických oscilátorů, díváme-li se podle kvantové mechaniky na každý druh kmitů jako na harmonický oscilátor. Z jiného, odlišného hlediska lze tutéž fyzikální skutečnost analyzovat pomocí identických Boseho částic. Výsledky obou přístupů jsou vždy v přesné shodě. Nelze nijak rozhodnout, zda máme ve skutečnosti popisovat elektromagnetické pole jako kvantovaný harmonický oscilátor nebo tím, že zadáme, kolik fotonů je v každém stavu. Obě hlediska se z matematické stránky ukazují jako identická. Takže v budoucnosti můžeme hovořit buď o počtu fotonů v krabici v daném stavu, nebo o čísle energetické hladiny spjaté s daným typem kmitů elektromagnetického pole. Jsou to dva způsoby, jak mluvit o jednom a tomtéž. Totéž platí i pro fotony ve volném prostoru. Jsou ekvivalentní oscilacím dutiny, jejíž stěny ustoupily do nekonečna.

Vypočítali jsme střední energii v libovolně zvoleném typu kmitů (modů) v krabici při teplotě T . Abychom odvodili zákon záření absolutně černého tělesa, potřebujeme už pouze jedno: Musíme vědět, kolik modů existuje při každé energii. (Předpokládáme, že pro každý mod existuje v krabici – nebo ve stěnách – několik atomů s takovými energetickými hladinami, které mohou vyažovat, takže každý z nich se může dostat do tepelné rovnováhy.) Zákon záření absolutně

černého tělesa se obvykle formuluje zadáním energie na jednotkový objem, kterou unáší světlo v malém frekvenčním intervalu od ω do $\omega + \Delta\omega$. Takže potřebujeme vědět, kolik v krabici existuje módů s frekvencemi v intervalu šířky $\Delta\omega$. Ačkoliv se tato potřeba v kvantové mechanice neustále vynořuje, je to čistě klasická otázka týkající se stojatých vln.

Odpověď budeme hledat jen pro pravouhlokrabicí. Totéž vyjde, je-li její tvar libovolný, ale v takovém obecném případě je výpočet velice obtížný. Taktéž se zajímáme pouze o krabici, jejíž rozměry jsou v porovnání s vlnovou délkou světla velmi velké. Pak existují miliardy a miliardy módů; v jakkoliv úzkém frekvenčním intervalu $\Delta\omega$ jich bude mnoho, takže můžeme hovořit o jejich průměrném počtu v libovolném $\Delta\omega$ při frekvenci ω . Začneme tím, že se zeptáme, kolik módů existuje v jednorozměrném případě – jako pro vlny na napnuté struně. Víme, že každý typ představuje sinusovou vlnu, která musí klesat k nule na obou koncích. Jinými slovy, na délku struny se musí uložit celočíselný počet půlvln, jak ukazuje *obr. 2.8*.



Obr. 2.8 Typy stojatých vln na úsečce

Raději používáme vlnové číslo $k = 2\pi/\lambda$ a nazveme-li k_j vlnovým číslem j -tého modu, máme

$$k_j = \frac{j\pi}{L}, \quad (2.34)$$

kde j je libovolné celé kladné číslo. Rozdíl δk mezi následujícími mody je roven

$$\delta k = k_{j+1} - k_j = \frac{\pi}{L}.$$

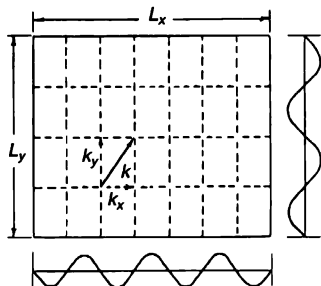
Pro nás je výhodné vybrat kL tak velké, že v malém intervalu Δk existuje mnoho módů. Označíme-li ΔN počet módů v intervalu Δk , pak

$$\Delta N = \frac{\Delta k}{\delta k} = \frac{L}{\pi} \Delta k. \quad (2.35)$$

Teoretičtí fyzici zabývající se kvantovou mechanikou obvykle raději říkají, že těchto módů je dvakrát méně; píšou

$$\Delta N = \frac{L}{2\pi} \Delta k. \quad (2.36)$$

Vysvětlíme proč. Raději přemýšlejí a pracují s postupnými vlnami – některými jdoucími doprava (s kladným k) a některými jdoucími doleva (se záporným k). Ale mod je *stojatá* vlna daná součtem dvou vln, z nichž každá běží jiným směrem. Jinými slovy každou stojatou vlnu považují za vlnu obsahující dva odlišné fotonové „stavy“. Takže rozumíme-li pod N počet fotonových stavů s daným k , kde k nyní probíhá kladné a záporné hodnoty, musíme vzít ΔN dvakrát menší. (Všechny integrály musíme nyní brát od $k = -\infty$ do $k = +\infty$ a celkový počet stavů až do libovolné dané absolutní hodnoty k vyjde správně.) Samozřejmě, takto nepopisujeme stojaté vlny moc dobře, ale mody počítáme konzistentním způsobem.



Obr. 2.9 Typy stojatých vln pro dvojrozměrný případ

Nyní rozšíříme naše výsledky na tři rozměry. Stojatá vlna v pravoúhlé krabici musí obsahovat celočíselný počet půlvln *podél každé osy*. Situace pro dva rozměry je znázorněna na obr. 2.9. Každý směr vlny a její frekvence jsou popsány vektorovým vlnovým číslem \mathbf{k} , jehož složky x , y , z musí vyhovovat rovnicím typu (2.33). Takže máme

$$k_x = \frac{j_x \pi}{L_x}, \quad k_y = \frac{j_y \pi}{L_y}, \quad k_z = \frac{j_z \pi}{L_z}.$$

Počet modů s k_x v intervalu Δk_x je tak jako předtím

$$\frac{L_x}{2\pi} \Delta k_x$$

a podobně pro Δk_y a Δk_z . Nazveme-li $\Delta N(\mathbf{k})$ počtem modů pro vektorové vlnové číslo \mathbf{k} , jehož x -ová složka leží mezi k_x a $k_x + \Delta k_x$, y -ová složka mezi k_y a $k_y + \Delta k_y$ a z -ová složka mezi k_z a $k_z + \Delta k_z$, máme

$$\Delta N(\mathbf{k}) = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z. \quad (2.37)$$

Součin $L_x L_y L_z$ je roven objemu krabice. Máme tedy důležitý výsledek, který říká, že pro vysoké frekvence (vlnové délky malé v porovnání s rozměry krabice) je počet modů v dutině krabice úměrný jejímu objemu V a „objemu v k -prostoru“ $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$. Tento výsledek se objevuje znova a znova v mnoha úlohách a vyplatí si jej pamatovat

$$dN(\mathbf{k}) = V \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (2.38)$$

Ačkoliv jsme to nedokazovali, platí, že nezávisí na tvaru krabice.

Uvedený vztah nyní využijeme k nalezení počtu fotonových módů pro fotony s frekvencemi v intervalu $\Delta\omega$. Zajímá nás jen energie různých módů, ne směr samotných vln. Rádi bychom našli počet módů v daném intervalu frekvencí. Ve vakuu souvisí velikost \mathbf{k} s frekvencí takto

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}. \quad (2.39)$$

Takže do frekvenčního intervalu $\Delta\omega$ padnou všechny mody příslušející vektorům \mathbf{k} s velikostí mezi k a $k + \Delta k$ nezávisle na směru. „Objem v k -prostoru“ mezi k a $k + \Delta k$ je sférická vrstva objemu $4\pi k^2 \Delta k$. Počet módů pak je

$$\Delta N(\omega) = \frac{4\pi k^2 \Delta k V}{(2\pi)^3}. \quad (2.40)$$

Protože se zajímáme o frekvence, provedeme substituci $k = \frac{\omega}{c}$ a dostaneme

$$\Delta N(\omega) = \frac{4\pi\omega^2 \Delta\omega V}{(2\pi)^3 c^3}. \quad (2.41)$$

Je tu ještě jedna komplikace. Hovoříme-li o modech elektromagnetické vlny, může každému vlnovému vektoru \mathbf{k} příslušet libovolná ze dvou polarizací (kolmé jedna na druhou). Jelikož tyto mody jsou nezávislé, musíme v případě světla jejich počet zdvojnásobit. A tak máme

$$\Delta N(\omega) = \frac{\omega^2 \Delta\omega V}{\pi^2 c^3} \text{ (pro světlo)}. \quad (2.42)$$

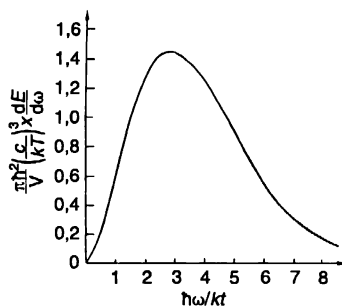
V rovnici (2.33) jsme ukázali, že každý mod (nebo každý „stav“) má v průměru energii

$$\bar{n}\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}.$$

Vynásobíme-li tento výraz počtem módů, dostaneme energii ΔE , kterou mají mody ležící v intervalu šířky $\Delta\omega$.

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \frac{\omega^2 \Delta\omega V}{\pi^2 c^3}. \quad (2.43)$$

To je zákon pro frekvenční spektrum záření absolutně černého tělesa, který jsme již našli v kapitole 41, díl 1. Spektrum je zakresleno na obr. 2.10.



Obr. 2.10 Frekvenční spektrum záření v dutině při tepelné rovnováze – spektrum absolutně černého tělesa

Nyní vidíme, že odpověď závisí na skutečnosti, že fotony jsou Boseho částice, které mají tendenci dostat se do téhož stavu (protože amplituda pro takové chování je velká). Vzpomeňme si: Bylo to Planckovo studium spektra absolutně černého tělesa (představující záhadu pro klasickou fyziku) a jeho objev vzorce v rovnici (2.43), které vedly k položení základů kvantové mechaniky.

2.6. TEKUTÉ HELIUM

Tekuté helium má při nízkých teplotách mnoho zvláštních vlastností, které, bohužel, nemůžeme pro nedostatek místa podrobně popsat. Mnohé z nich vyplývají ze skutečnosti, že heliový atom je Boseho částice. Jednou z těchto vlastností je to, že tekuté helium teče bez jakéhokoliv viskózního odporu. Ve skutečnosti představuje ideální „suchou“ vodu, o níž jsme hovořili v jedné z předcházejících kapitol (za předpokladu, že rychlosti jsou dostatečně malé). Příčina spočívá v tomto. Aby byla tekutina viskózní, musí existovat vnitřní ztráty energie; musí existovat nějaký způsob, aby se jedna část tekutiny mohla pohybovat jinak než zbytek. To znamená, že musí být možné dostat některé atomy do stavů různých od těch, v nichž se nacházejí atomy ostatní. Ale při dostatečně nízkých teplotách, kdy se tepelný pohyb stává velmi slabým, se všechny atomy snaží dostat do týchž podmínek. Takže pohybují-li se některé z nich jedním směrem, ostatní se snaží pohybovat se společně s nimi. Je to svým způsobem jistá strnulost ve vztahu k pohybu a je těžké tento pohyb rozbít na nepravidelné turbulentní části, jako by se to např. stalo s nezávislými částicemi. Takže v tekutině Boseho částic panuje silná tendence, aby všechny atomy přešly do téhož stavu, což vyjadřuje faktor $\sqrt{n+1}$, který jsme našli již dříve. (A v láhvi s tekutým heliem je n , samozřejmě obrovské číslo!) Tento společný pohyb se nevyskytuje při vysokých teplotách, protože v tom případě je tepelná energie dostatečná na to, aby mnohé atomy vyzvedla do vyšších stavů. Ale při dostatečně nízké teplotě najednou nastane okamžik, kdy se všechny heliové atomy snaží zaujmout tentýž stav. Helium se stává supratekutým. Mimochodem, tento jev se vyskytuje jen pro izotop helia s hmotnostním číslem 4. Pro izotop ^3He jsou jednotlivé atomy Fermiho částicemi a tekutina se chová normálním způsobem. Jelikož se supratekutost objevuje u ^4He , je to evidentně kvantově mechanický efekt způsobený příslušností částice α k Boseho částicím.

2.7 VYLUČOVACÍ PRINCIP

Fermiho částice se chovají zcela jinak. Podívejme se, co se stane, pokusíme-li se umístit dva fermiony do stejného stavu. Vrátime se k našemu původnímu příkladu a zeptáme se, jaká je

amplituda toho, že se dvě identické Fermiho částice rozptýlí do téměř stejného směru. Amplituda toho, že částice a poletí směrem 1 a částice b směrem 2, je

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle,$$

zatímco amplituda toho, že směry vyletujících částic se navzájem vymění, je

$$\langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle.$$

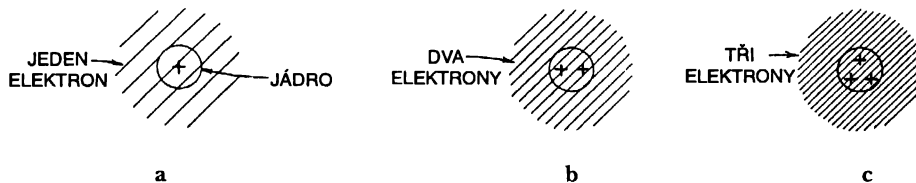
Jelikož jde o fermiony, je amplituda procesu dána rozdílem těchto dvou výrazů

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle - \langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle. \quad (2.44)$$

Je třeba říci, že směrem 1 rozumíme nejen určitý směr v prostoru, ale zahrnujeme do něj i danou orientaci spinu částice, a že směr 2 je téměř shodný se směrem 1 a odpovídá *těže* orientaci spinu. Pak jsou výrazy $\langle 1 | a \rangle$ a $\langle 2 | a \rangle$ téměř stejné. (To by nemuselo být nutné, kdyby stavy 1 a 2 vyletujících částic neměly stejný spin, protože by mohl existovat nějaký důvod, pro nějž by amplituda závisela na orientaci spinu.) Necháme-li nyní směry 1 a 2 přibližovat se jeden k druhému, bude celková amplituda v rovnici (2.44) rovna nule. Pro Fermiho částice je výsledek mnohem jednodušší než pro Boseho částice. Není totiž vůbec možné, aby se dva fermiony (jako např. dva elektrony) dostaly přesně do téhož stavu. Nikdy nenajdeme dva elektrony na téže místě se souhlasně orientovanými spiny. Dva elektrony nemohou mít tutéž hybnost a tutéž orientaci spinů. Nacházejí-li se na téže místě nebo v téže stavu pohybu, nezůstává jim nic jiného, než spinovat v navzájem opačném směru.

Jaké to má důsledky? Existuje mnoho nejpozoruhodnějších efektů, které jsou důsledkem faktu, že se dvě Fermiho částice nemohou dostat do téhož stavu. Ve skutečnosti všechny zvláštnosti materiálního světa závisejí na této podivuhodné skutečnosti. Všechna ta rozmanitost představená v periodické tabulce prvků, je ve své podstatě důsledkem tohoto jediného pravidla.

Samozřejmě nemůžeme říci, jak by vypadal svět, kdyby se toto pravidlo změnilo, neboť je část celkové stavby kvantové mechaniky; nelze říci, co vše by se změnilo, kdyby bylo pravidlo týkající se Fermiho částic jiné. Nicméně, pokusíme se představit, co by se stalo, kdyby tomu tak přece jen bylo.

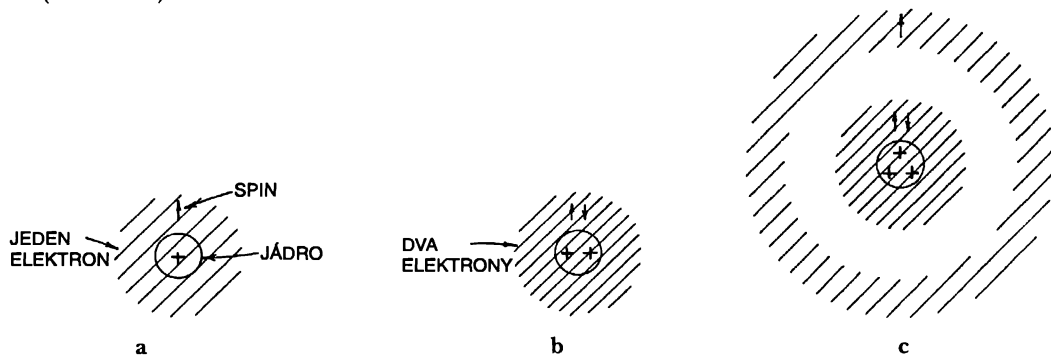


Obr. 2.11 Jak by mohly atomy vypadat, kdyby se elektrony chovaly jako Boseho částice

Zprvč můžeme ukázat, že každý atom by byl víceméně stejný. Začneme s atomem vodíku. Ten by nebyl postižen nijak zvlášť. Proton jádra by byl obklopen sféricky symetrickým elektronovým oblakem, jak ukazuje *obr. 2.11a*. Jak jsme popsali v kapitole 38 1. dílu, elektron je přitahován do středu, ale princip neurčitosti vyžaduje, aby nastala rovnováha mezi koncentrací v prostoru a koncentrací v prostoru hybnosti. Rovnováha znamená, že elektronové rozdělení charakterizuje určitá energie a rozmazání, které určují charakteristické rozměry vodíkového atomu.

Nyní mějme jádro se dvěma elementárními náboji, tj. jádro helia. Přitahovalo by dva elektrony; kdyby byly Boseho částicemi a kdybychom nebrali v úvahu jejich vzájemné elektrické odpuzování, oba by se k němu přimkly co nejbliž. Atom helia by mohl vypadat jako v části *b* na obrázku. Podobně atom lithia s jádrem nabitým třemi elementárními náboji by měl elektronové rozdělení přibližně takové, jaké je znázorněno v části *c* obr. 2.11. Každý atom by vypadal víceméně stejně: malý kulatý míček se všemi elektrony sedícími blízko jádra; nebyly by žádné směry a žádné složitosti.

Protože elektrony jsou Fermiho částice, skutečná situace je docela jiná. Pro atom vodíku se v podstatě nic nemění. Jediný rozdíl je v tom, že elektron má spin, který označujeme šipkou na obr. 2.12a. V případě atomu helia však nemůžeme umístit dva elektrony jeden na druhý. Ale okamžik, to je pravda jen v tom případě, mají-li souhlasně orientované spiny. Dva elektrony mohou zaujmout tentýž stav, jsou-li jejich spiny opačné. Takže ani atom helia nevypadá příliš odlišně. Vypadal by asi tak, jako v části *b* obr. 2.12. Situace se však radikálně změní v případě lithia. Kam můžeme umístit třetí elektron? Ten nemůže přijít na ostatní dva, neboť obě spinové orientace jsou už vyčerpány. (Vzpomeňme si: Pro elektron nebo libovolnou jinou částici se spinem $1/2$ existují jen dvě možné orientace spinu.) Třetí elektron nemůžeme umístit blízko místa, které zabírají první dva, takže musí zaujmout zvláštní pozici v nějakém jiném stavu více vzdáleném od jádra (obr. 2.12c).



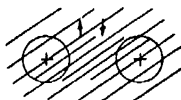
Obr. 2.12 Atomové konfigurace pro reálné elektrony Fermiho typu se spinem $1/2$

Probíráme to jen v hrubém přiblížení, neboť ve skutečnosti jsou všechny tři elektrony identické; nelze proto opravdu rozlišit, který je který. Náš obrázek je tedy jen ilustrační.

Nyní už začínáme chápat, proč budou mít různé atomy různé chemické vlastnosti. Protože třetí elektron v lithiu se nachází dál od jádra, je relativně volněji vázán. Je mnohem jednodušší odtrhnout elektron od lithia než od helia. Experiment ukazuje, že na ionizaci helia je třeba 25 eV, ale na ionizaci lithia jen 5 eV. To vysvětluje vazebnou schopnost atomu lithia. Směrové vlastnosti vazebné schopnosti jsou spjaty se strukturou vlnové funkce vnějšího elektronu, ale nyní nebudeme zabíhat do podrobností. Už zde lze zjistit důležitost *vylučovacího principu*. Ten říká, že žádné dva elektrony nemůžeme najít v přesně stejném stavu (včetně spinu).

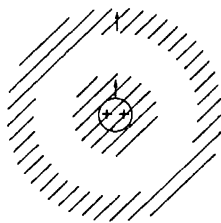
Vylučovací princip také nese odpovědnost za stabilitu látky v makroskopickém měřítku. Už dříve jsme vysvětlili, že jednotlivé atomy látky se nezhroutí díky principu neurčitosti; to však neobjasňuje, proč není možné stlačit k sobě dva vodíkové atomy libovolně blízko, proč se všechny protony neshluknou k sobě a kolem nich se nevytvoří jedna velká skvrna z elektronů. Odpověď, samozřejmě, zní, že jelikož se mohou nacházet na zhruba témže místě maximálně dva elektrony (s opačnými spiny), vodíkové atomy si od sebe musí udržovat odstup. Takže stabilita látky v makroskopickém měřítku je skutečně důsledkem fermionové podstaty elektronů.

Samozřejmě, že mají-li vnější elektrony dvou atomů spiny opačně orientovány, mohou se k sobě dostat blízko. Takovým způsobem ve skutečnosti vzniká *chemická vazba*. Ukazuje se, že dva sousední atomy mají nejmenší energii, nachází-li se mezi nimi elektron. Je to určitý druh elektrického přitahování dvou kladných jader k elektronu situovanému mezi nimi. Je možné dokonce umístit dva elektrony více méně mezi dvě jádra, jsou-li jejich spiny opačně orientovány. Tak vzniká nejsilnější chemická vazba. Silnější už neexistuje, protože vylučovací princip nedovoluje, aby v prostoru mezi atomy byly více než dva elektrony. Očekáváme, že molekula vodíku vypadá asi jako na *obr. 2.13*.



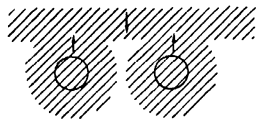
Obr. 2.13 Molekula vodíku

Zmiňme ještě jeden důsledek vylučovacího principu. Zajisté si pamatujete, že mají-li se oba elektrony v heliu nacházet blízko jádra, jejich spiny musí být nutně opačně orientovány. Předpokládejme, že bychom se pokusili vytvořit takovou situaci, v níž by měly spin orientovaný souhlasně; řekněme použitím nějakého neuvěřitelně silného magnetického pole, které by dokázalo uspořádat spiny do téhož směru. Pak by však tyto dva elektrony nemohly zaujmout totéž místo v prostoru. Jeden z nich by musel přejít do jiné geometrické pozice, jak naznačuje *obr. 2.14*. Elektron, umístěný dál od jádra, má menší vazebnou energii. Energie celého atomu je proto o něco vyšší. Jinými slovy, jsou-li spiny opačně orientovány, je vzájemné přitahování mnohem silnější.



Obr. 2.14 Helium s jedním elektronem ve vyšším energetickém stavu

Existuje zde tedy skutečná, obrovská síla, která se snaží uspořádat orientaci spinů vzájemně opačně, jsou-li dva elektrony blízko sebe. Chtějí-li se dva elektrony dostat na totéž místo, jejich spiny vyvíjejí snahu zorientovat se nesouhlasně. Tato síla, usilující o nasměrování spinů do navzájem opačného směru, je mnohem silnější než slabá síla působící mezi magnetickými momenty obou elektronů. Určitě si pamatujete, že když jsme hovořili o feromagnetismu, vznikla záhada, proč mají elektrony v různých atomech silnou tendenci uspořádat spiny paralelně. Ačkoliv ještě není vypracováno žádné kvantitativní vysvětlení, lze věřit tomuto procesu: Elektrony obklopující jádro jednoho z atomů interagují pomocí vylučovaného principu s vnějšími elektrony, které se osvobodily a putují po krystalu. Tato interakce nutí spiny volných elektronů zaujmout antiparalelní směr. Volné a vnitřní elektrony atomů mohou své spiny orientovat opačně jen v tom případě, kdy všechny vnitřní mají stejnou orientaci spinu (*obr. 2.15*). Je pravděpodobné, že právě pod vlivem vylučovacího principu působícího nepřímo přes volné elektrony vznikají silné uspořádávající síly zodpovědné za feromagnetismus.



Obr. 2.15 Pravděpodobný mechanismus ve feromagnetickém krystalu. Spiny vodivostních elektronů jsou antiparalelní se spiny nespárovaných vnitřních elektronů.

Zmiňme ještě jeden příklad vlivu vylučovacího principu. Už dříve jsme si řekli, že mezi neutronem a protonem působí stejně velké jaderné síly jako mezi protonem a protonem, nebo neutronem a neutronem. Proč se pak proton a neutron mohou udržet pohromadě a vytvořit jádro deuteria, zatímco jádro s pouze dvěma protony nebo pouze dvěma neutrony vůbec neexistuje? Skutečně, deuteron má vazebnou energii asi 2,23 MeV, ale odpovídající vazba mezi párem protonů, kterou by byl vytvořen izotop helia s hmotnostním číslem 2, není pozorována. Taková jádra neexistují. Kombinace dvou protonů nevytváří vázaný stav.

Odpověď je výsledkem dvou efektů: Zaprvé vylučovacího principu a zadruhé skutečnosti, že jaderné síly jsou jistým způsobem citlivé na orientaci spinu. Síla mezi neutronem a protonem je přitažlivá a trochu silnější, jsou-li spiny paralelní, než když jsou orientovány opačně. Ukazuje se, že rozdíl mezi těmito silami je dostatečně velký na to, aby deuteron mohl vzniknout pouze v případě, jsou-li spiny neutronu a protonu rovnoběžné; jsou-li antiparalelní, není vzájemné přitahování dostatečné (není dost silné) na vytvoření vázaného stavu. Jelikož neutron i proton mají spin $1/2$, který směřuje stejně, má deuteron spin 1. Víme však, že protonům není dovoleno, aby „seděly“ jeden na druhém, mají-li spiny orientované souhlasně. Kdyby neexistoval vylučovací princip, dva protony by mohly být spolu vázány; jelikož se však nemohou nacházet na tomtéž místě se stejnou orientací spinů, ${}^2\text{He}$ nemůže existovat. Protony by se mohly setkat i s opačnými spiny, ale v tom případě není vazebná energie dostatečná k vytvoření stabilního jádra, protože jaderné síly jsou u opačně orientovaných spinů příliš slabé na to, aby dokázaly vázat pár nukleonů. Přitažlivou sílu mezi neutrony a protony s opačnými spiny lze demonstrovat pomocí rozptylových experimentů. Podobné rozptylové experimenty se dvěma protony s paralelními spiny ukazují, že i mezi nimi existuje přitažlivá síla. Takže právě vylučovací princip pomáhá vysvětlit, proč může deuterium existovat, a ${}^2\text{He}$ ne.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 2.1 ■ Rozhlasová stanice vysílá signál o výkonu 1000 kW na frekvenci 1 MHz.
- Jaká je energie každého vyzářeného kvanta (v eV)?
 - Kolik kvant se vyzářuje během každé periody kmitů elektromagnetického pole? (Protože kvanta jsou bosony, je možný vysoký stupeň jejich koherence.)
- 2.2 ■ Intenzita záření absolutně černého tělesa $I(\omega)\Delta\omega$ v jednotce objemu a frekvenčním intervalu od ω do $\omega + \Delta\omega$ je dána Planckovým vzorcem.
- Jaký je průběh $I(\omega)$ při malých ω a při velkých ω ?
 - Na jaké frekvenci bude energie připadající na jednotkový frekvenční interval maximální?
 - Na jaké vlnové délce bude energie připadající na jednotkový interval vlnových délek maximální?
 - Odhadněte teplotu slunečního povrchu za předpokladu, že maximum intenzity jeho záření připadá na střed viditelného spektra.
- 2.3 ■ Odhadněte hodnotu indukce magnetického pole, které je třeba k uspořádání spinů dvou elektronů v atomu helia v témž směru. (Pokládejte atom helia přibližně za harmonický oscilátor se základní frekvencí odpovídající viditelnému světlu. V základním stavu atomu helia se oba elektrony nacházejí na nejnižší energetické hladině a jejich spiny míří opačně. Podle Pauliho vylučovacího principu k tomu, aby směry spinů obou elektronů byly stejné, musí jeden z nich postoupit na vyšší energetickou hladinu.)
- 2.4 ■ Než byly objeveny neutrony, předpokládalo se, že atomová jádra jsou tvořena protony a elektrony. Ukažte, že v takovém případě by atom dusíku N14 musel být bosonem. Experimentální údaje o jeho spektru však dokazují, že tento atom je fermion. To byl první argument pro nutnost existence nové jaderné částice. Ukažte, že hypotéza o neutronu řeší tento rozpor.
- 2.5 ■ Soustava atomů je v tepelné rovnováze se zářením. Každý atom má vedle základního stavu též dva excitované stavy s energiemi ΔE a $2\Delta E$. Přechody mezi základním a druhým excitovaným stavem (tj. na frekvenci $\omega = 2\Delta E/\hbar$) jsou zakázány. V základním stavu je N_0 atomů, v prvním excitovaném stavu N_1 atomů a ve druhém N_2 atomů.
- Vyjádřete poměry N_1/N_0 a N_2/N_1 pomocí středního počtu fotonů $\bar{n}(\omega)$ v daném stavu.
 - Najděte jednoduché vyjádření $\bar{n}(\omega)$ s uvážením toho, že fotony jsou bosony. Získaný výraz smí obsahovat pouze kombinaci $\Delta E/kT$.
 - Najděte přibližné výrazy pro $\bar{n}(\omega)$ ve dvou limitních případech $\hbar\omega \gg kT$ a $\hbar\omega \ll kT$.
- 2.6 ■ V laseru se velký počet atomů převádí hromadně do excitovaného stavu. Pak stačí malé množství světla určitého druhu, aby se indukoval lavinovitý přechod excitovaných atomů na nižší hladinu za vzniku velkého množství fotonů s přesně stejnou vlnovou délkou vyzářovaných v přesně stejném směru. Je naděje, že jednoho krásného dne někdo vytvoří podobné zařízení k vyzářování neutrin (částic s nulovou hmotností a spinem rovným 1/2)?
- 2.7 ■ Ukažte, že pro dvě netotožné neinteragující částice je pravděpodobnost toho, že jedna z nich se přemístí z a do b , a zároveň druhá se přemístí z c do d , je součin dvou činitelů P_{ab} a P_{cd} , kde P_{ab} je pravděpodobnost toho, že první částice se přemístí v nepřítomnosti druhé částice z a do b , a P_{cd} pravděpodobnost toho, že druhá částice se přemístí v nepřítomnosti první částice z c do d . Je předpoklad o tom, že částice nejsou totožné, podstatný?
- 2.8 ■ Deuteron je boson se spinem 1. Svazek deuteronů se proto může nacházet ve stavech $+1, 0, -1$. Nechť probíhá pokus, při němž jsou deuterony rozptylovány na deuterech. Nechť ϑ je úhel rozptylu, tj. úhel mezi směrem pohybu deuteronu před a po srážce v těžištvé soustavě. Jak

závisí pravděpodobnost registrace rozptýlených deuteronů na úhlu ϑ ? Předpokládejte, že směr spinu se v průběhu rozptylu nezmění a $f(\vartheta)$ je amplituda odchýlení o úhel ϑ .

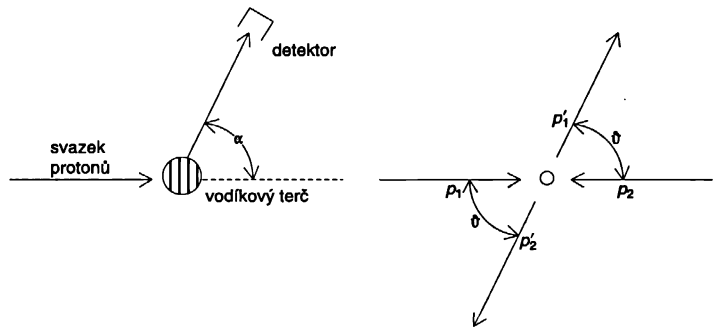
2.9 ■ Necht' $f_1(\vartheta)$ je amplituda rozptylu pionu na protonu a $f_2(\vartheta)$ na neutronu. Jak lze vyjádřit *pravděpodobnost* toho, že se pion rozptýlí na jádru helia pod úhlem ϑ pomocí pravděpodobností rozptylu na protonu a neutronu P_1 a P_2 ? Uvažujte dva případy:

- při zpětném rázu protonu nebo neutronu se jádro rozpadne,
- zpětný ráz je tak slabý, že jádro zůstane neporušeno. Můžete odhadnout, v kterém z těchto případů bude úhel rozptylu větší? Vaše odpověď by měla záviset na předpokladech učiněných při popisu případu a).

2.10 ■ Předpokládejme, že při pokusu s rozptylem svazek neutronů dopadá na neutronový terč. Detektor je nastaven tak, aby registroval neutrony rozptylované na úhel ϑ v těžištové soustavě. Necht' f je amplituda rozptylu neutronu na tento úhel beze změny orientace spinu a g amplituda tohoto rozptylu s převrácením spinu (v důsledku výměny směrů spinů s neutrony terče). Předpokládáme-li, že f a g nezávisí na ϑ , jaká bude pravděpodobnost registrace neutronu v těchto případech:

- spiny obou neutronů (rozptylovaného a rozptylujícího) míří ve směru osy $+z$;
- spiny neutronů svazku míří v kladném směru osy z a spiny neutronů terče v záporném směru;
- dopadající svazek není polarizován a terč je polarizován ve směru $+z$;
- svazek ani terč nejsou polarizovány;
- jak se změní odpověď na první otázku, bude-li terč tvořen polarizovanými protony, jsou-li si amplitudy rozptylu neutronů na neutronech a neutronů na protonech rovny? Předpokládejte, že detektor registruje neutrony a protony stejně efektivně.

2.11 ■ Svazek nerelativistických protonů prochází tenkým terčem z tekutého vodíku a rozptýlené protony se pak registrují pod určitým úhlem α vzhledem ke směru dopadajícího svazku. Proces rozptylu protonu na protonu můžeme analyzovat v těžištové soustavě, jak je ukázáno na obrázku.



Dva protony (p_1 a p_2) se pohybují proti sobě stejnými rychlostmi. Po srážce se dva protony (p'_1 a p'_2) rozlétají podél přímky, která svírá úhel ϑ s původním směrem. Zvolíme-li osu z ve směru kolmém k rovině rozptylu, bude pro každý proton projekce jeho spinu na tuto osu nabývat hodnot J_z rovných $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$. Budeme říkat, že v prvním případě spin míří nahoru, ve druhém dolů. Předpokládejme, že spiny obou protonů míří nahoru a že $f(\vartheta)$ je amplituda rozptylu protonu p_1 na úhel ϑ s jeho následnou registrací. Protože nemůžeme říci, který z protonů dopadl do detektoru, bude amplituda toho, že *nějaký* proton se rozptýlí pod úhlem ϑ rovna $f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)$. Znamení *minus* se objevuje proto, že protony jsou fermiony. Pravděpodobnost zaregistrování protonu pod úhlem ϑ je tedy rovna $|f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2$.

Předpokládejme nyní, že spin protonu p_1 míří nahoru a spin protonu p_2 dolů. Amplituda rozptylu částice p_1 ve směru detektoru *bez převrácení spinu* je rovna $f'(\vartheta)$ a *s převrácením spinu* $g(\vartheta)$. Amplituda rozptylu závisí na vzájemné orientaci spinů.

V tom případě můžeme zapsat amplitudu zaregistrování protonu se spinem mířícím vzhůru ve tvaru $f'(\vartheta) + g(\pi - \vartheta)$.

a) Jaký je vztah mezi ϑ a α ?

Jaká je amplituda zaregistrování protonu se spinem mířícím dolů, jestliže před rozptylem směřovaly spiny nalétajících protonů na opačné strany?

- b) Předpokládejme, že „obyčejný“ svazek nepolarizovaných protonů se rozptyluje na obyčejném nepolarizovaném terči a že detektor nereaguje na polarizaci. Čemu je rovna *pravděpodobnost* rozptylu na úhel ϑ ?
- c) Ukažte, že při $f' = f$ a $g = 0$ je rozptyl protonů s chaoticky orientovanými spiny vlastně směsí čistě fermionového rozptylu s amplitudou $f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)$ a čistě bosonového rozptylu s amplitudou $f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)$, takže výsledná pravděpodobnost rozptylu je $P = A |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2 + B |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2$.
Vypočítejte A a B .

- 2.12** ■ Předpokládejme, že N elektronů se nachází ve velmi velké nádobě s objemem V ve stavu s nejmenší možnou energií. Ukažte, že při zanedbání vzájemné interakce mezi elektrony je každá hladina v nádobě obsazena dvěma elektrony, přičemž hybnost odpovídající každé hladině,

$\hbar k = p$, je menší než veličina p_{\max} daná výrazem $N = \int_0^{p_{\max}} V \cdot 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}$. Čemu je rovna energie

E všech elektronů? Vyjádřete tuto vnitřní energii pomocí objemu nádoby a určete tlak tohoto tzv. degenerovaného elektronového plynu. Ukažte, že objem a tlak jsou vázány vztahem $PV^\gamma = \text{konst}$ a najděte γ .

- 2.13** ■ Látka tvořící hvězdy známé jako „bílé trpaslíci“ je stlačena tak silně, že na ni lze aplikovat teorii popsanou v předchozí úloze. Je-li ρ hustota hvězdné látky, pak $\rho/2m_p$ je počet protonů v 1 m^3 této látky (m_p je hmotnost protonu; předpokládáme, že jádra obsahují přibližně stejný počet protonů i neutronů). V rovnici k úloze 2.12 klademe $N/V = \rho/2m_p$.

Rovnice rovnováhy udržované gravitačními silami pro hvězdu z takové látky můžeme najít v knihách o astrofyzice a napsat je takto:

$$P = A \rho^{5/3}, \quad \frac{dP}{dr} = -\frac{G \rho M(r)}{r^2}, \quad \frac{dM(r)}{dr} = 4\pi \rho r^2$$

Můžete vysvětlit význam těchto rovnic a odvodit vzorec nebo najít číselnou hodnotu A ? Uvažujte, že celý tlak je vytvářen degenerovaným elektronovým plynem a vliv nukleonů se prakticky neuplatní (mimořádně proč?).

Spin jedna

- 3.1 FILTROVÁNÍ ATOMŮ POMOCÍ STERNOVA-GERLACHOVA PŘÍSTROJE
- 3.2 EXPERIMENTY S PROFILTROVANÝMI ATOMY
- 3.3 STERNOVY-GERLACHOVY FILTRY USPOŘÁDANÉ ZA SEBOU
- 3.4 BÁZOVÉ STAVY
- 3.5 INTERFERUJÍCÍ AMPLITUDY
- 3.6 APARÁT KVANTOVÉ MECHANIKY
- 3.7 TRANSFORMOVÁNÍ DO JINÉ BÁZE
- 3.8 JINÉ SITUACE

Přečtěte si znovu: kapitolu 35, díl 2, Paramagnetismus a magnetická rezonance

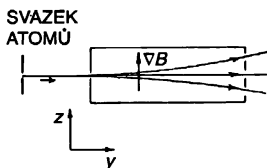
3.1 FILTROVÁNÍ ATOMŮ POMOCÍ STERNOVA-GERLACHOVA PŘÍSTROJE

V této kapitole začneme probírat skutečnou kvantovou mechaniku v tom smyslu, že popíšeme kvantově mechanický jev výlučně kvantově mechanickým způsobem. Nebudeme hledat žádná vysvětlení v klasické mechanice, ani se nepokusíme najít s ní nějaké spojitosti. Chceme hovořit o něčem novém novým jazykem. Konkrétní situace, kterou se vám chystáme přiblížit, je chování kvantového momentu hybnosti částice se *spinem 1*. Určitou dobu však nebudeme používat takové výrazy jako moment hybnosti nebo jiné pojmy klasické mechaniky. Právě tento příklad jsme si vybrali proto, že je poměrně jednoduchý, ačkoliv ne zcela triviální. Je dostatečně složitý na to, aby mohl sloužit jako model, který lze zobecnit na popis všech kvantově mechanických jevů. Ačkoliv se tedy zabýváme speciálním případem, všechny zákony, které zmiňujeme, lze ihned zobecnit, což nakonec i uděláme, abyste se obeznámili s *obecnými zákony kvantově mechanického popisu*. Začneme s jevem rozštěpení svazku atomů do tří samostatných paprsků v Sternově-Gerlachově experimentu.

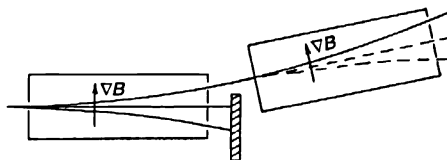
Zajisté si vzpomínáte, že máme-li nehomogenní magnetické pole vytvořené magnetem s ostrým pólovým hrotem, kterým necháme procházet svazek částic, může se tento svazek rozštěpit na několik částí; jejich počet závisí na konkrétním druhu atomu a jeho stavu. Vezměme atom, který dává tři svazky, a nazvěme jej částice se *spinem 1*. Sami si můžete rozebrat případy pro dva, pět, sedm svazků atd. – vše popíšete a tam, kde máme nyní tři výrazy, budeme mít dva, pět, sedm atd.

Představme si přístroj schématicky znázorněný na obr. 3.1. Svazek atomů (nebo částic libovolného druhu), kolimovaný několika štěrbinami, prochází nehomogenním polem. Řekněme, že se pohybuje ve směru osy y a že magnetické pole a jeho gradient směřují podél osy z . Díváme-li se ze strany vidíme, že svazek se štěpí ve vertikálním směru na tři části tak, jak ukazuje obrázek. Na výstupu z magnetu bychom mohli umístit malé počítače, které registrují počet částic v každém svazku za určitý čas. Nebo můžeme dvěma svazkům zahradit cestu a nechat projít jen třetí.

Předpokládejme, že zablokujeme dva spodní svazky a pouze horní necháme projít a pak vstoupit do druhého Sternova-Gerlachova přístroje stejného typu (obr. 3.2). Co se stane? Ve druhém přístroji už *nejsou* tři svazky, ale jen jeden.⁵⁾ To by bylo možné očekávat, kdybychom považovali druhý přístroj jen za prodloužení prvního. Atomy, které se vychylují směrem nahoru, se budou vychylovat tímž směrem i ve druhém magnetu.



Obr. 3.1 V experimentu Sterna-Gerlacha se atomy se spinem 1 štěpí na tři svazky.



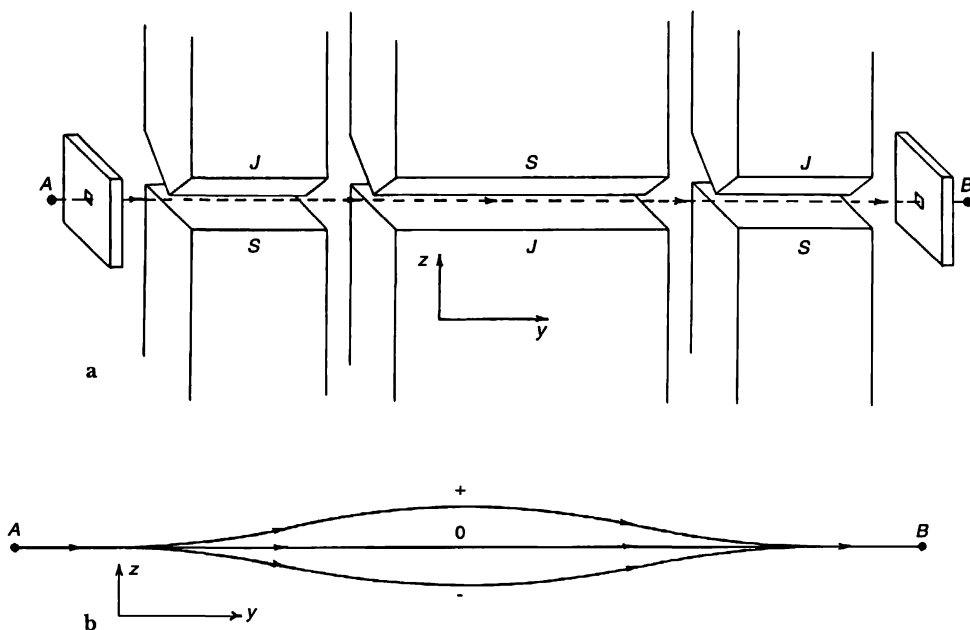
Obr. 3.2 Atomy jednoho svazku jsou nasměrovány do druhého, identického přístroje.

Vidíme, že první přístroj vytvořil svazek „čistých“ objektů – atomů, které se vychylují směrem nahoru v daném nehomogenním poli. Atomy vstupující do původního Sternova-Gerlachova přístroje jsou tří druhů a tyto tři skupiny si vybírají různé dráhy. Odfiltrováním všech druhů kromě jednoho můžeme připravit svazek, jehož budoucí chování v přístroji stejného typu je dáno a lze jej předpovídat. Takový svazek nazveme *filtrovaný* nebo *polarizovaný svazek*, nebo svazek, v němž jsou všechny atomy v *určitěm stavu*.

Pro naši další diskuzi bude výhodnější, budeme-li uvažovat trochu upravený přístroj Sternova-Gerlachova typu. Vypadá na první pohled složitěji, ale zjednoduší nám všechny úvahy. Konečně, jelikož jsou to jen myšlené experimenty, zkomplikování zařízení nás nebude stát ani haléf. (Mimochodem, všechny experimenty, které se nyní chystáme popsat, nikdo nikdy takovým způsobem neprováděl, ale ze zákonů kvantové mechaniky založených na jiných podobných pokusech víme, jak by dopadly. Skutečné experimenty jsou zpočátku obtížněji pochopitelné, takže raději popíšeme některé zidealizované, ale možné pokusy.)

⁵⁾ Předpokládáme, že úhly odklonění jsou velmi malé.

Na *obrázku 3.3a* je náčrt modifikovaného Sternova-Gerlachova přístroje, který bychom rádi použili. Skládá se z posloupnosti tří magnetů s velkým gradientem. První (nalevo) je běžný Sternův-Gerlachův magnet a štěpí vstupující svazek částic se spinem 1 na tři samostatné paprsky. Druhý magnet má tentýž průřez jako první, ale je dvakrát tak dlouhý a polarita jeho magnetického pole je opačná než v magnetu 1. Na atomové magnety působí v opačném směru a odklání je zpět k ose, jak ukazují trajektorie nakreslené ve spodní části obrázku.



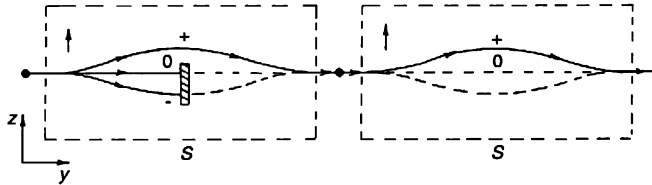
Obr. 3.3 a) Předpokládaná modifikace Sternova-Gerlachova přístroje, b) dráhy atomů se spinem 1

Třetí magnet je přesně takový jako první a spojuje tři svazky opět do jednoho, který prochází výstupním otvorem na ose. Nakonec si představme, že v místě A před vstupní štěrbinou máme mechanismus, který může přivést atomy z klidu do pohybu, a že za výstupním otvorem v místě B máme zpomalovací zařízení, které atomy opět přivádí do klidu. Není to podstatné, ale znamená to, že si v našem rozboru nebudeme muset lámat hlavu nad tím, abychom do něj zahrnuli nějaké pohybové efekty, když atomy vycházejí ven; takto se budeme moci soustředit jen na ty záležitosti, které souvisejí výlučně se spinem. Jediným účelem vylepšeného přístroje je přivést všechny částice do téhož místa s nulovou rychlostí.

Chceme-li realizovat experiment podobný tomu na *obr. 3.2*, je třeba nejdříve získat filtrovaný svazek částic, což můžeme nejjednodušeji provést umístěním kovové destičky do středu přístroje, která zastaví dva svazky, jak to ukazuje *obr. 3.4*. Necháme-li nyní procházet polarizované atomy druhým identickým přístrojem, všechny si vyberou horní dráhu, o čemž se lze přesvědčit tak, že opět vkládáme podobné destičky do cesty různým svazkům ve druhém filtru a sledujeme, zda částice procházejí, nebo ne.

První přístroj nazvěme S. (Chystáme se rozebrat všechny druhy kombinací přístrojů a abychom měli ve věci jasno, každý z nich nějak pojmenujeme.) Budeme říkat, že atomy, které se pohybují po horní trajektorii v S, jsou „ve stavu plus vzhledem k S“; ty, které půjdou střední cestou, jsou „ve

stavu nula vzhledem k S^+ a ty, jež si vyberou nejspodnější dráhu, jsou „ve stavu minus vzhledem k S^+ “. (Běžně bychom řekli, že z -ová složka momentu hybnosti byla $+1 \hbar, 0 \hbar$ a $-1 \hbar$, ale nyní takový způsob vyjadřování nepoužíváme.) Druhý přístroj na obr. 3.4 je orientován přesně tak jako první, takže profiltrované atomy se budou všechny pohybovat po horní trajektorii.



Obr. 3.4 Vylepšený Sternův-Gerlachův přístroj jako filtr

Kdybychom zablokovali cestu hornímu a spodnímu svazku v prvním přístroji a nechali projít jen stav nula, zvolily by si všechny profiltrované atomy v druhém přístroji střední dráhu. A kdybychom v prvním přístroji zastavili všechny svazky kromě nejspodnějšího, dostali bychom ve druhém přístroji pouze spodní paprsek. Můžeme říci, že ve všech případech náš první přístroj vytvořil profiltrovaný svazek v *čistém* stavu vzhledem k $S (+, 0, -)$ a my můžeme zjistit, o jaký stav jde tak, že propustíme atomy druhým identickým přístrojem.

Náš druhý přístroj můžeme upravit tak, aby propouštěl pouze atomy v určitém stavu (vkládáním stínítek, jako v prvním přístroji); stav vstupujícího svazku můžeme zjistit tak, že se díváme, zda něco vystupuje ze vzdálenějšího konce. Například odstíníme-li dvě spodní trajektorie ve druhém přístroji, projde 100% atomů; ale vložíme-li destičku do cesty horní trajektorii, neprojde dále nic.

Abychom si usnadnili diskuze podobného druhu, zavedeme zkrácený symbol, který bude představovat jeden vylepšený Sternův-Gerlachův přístroj. Označení

$$\left. \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad (3.1)$$

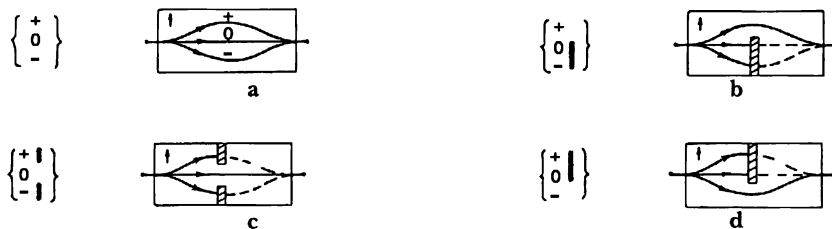
S

bude reprezentovat jedno kompletní zařízení. (S tímto symbolem se v kvantové mechanice *nesetkáme*, vymysleli jsme jej pouze pro potřebu této kapitoly. Znamená jen zkrácené zobrazení přístroje na obr. 3.3). Jelikož budeme používat několik přístrojů najednou s různými orientacemi, každý z nich označíme dole písmenem. Takže symbol (3.1) znamená přístroj S . Zastavení dvou nebo více svazků uvnitř přístroje budeme označovat silnými kolmými čarami, naznačujícími, který svazek jsme zaclonili, např. takto

$$\left. \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad (3.2)$$

S

Různé možné kombinace, které budeme používat, jsou na obr. 3.5.



Obr. 3.5 Speciální zkrácené symboly pro filtry Sternova-Gerlachova typu

Máme-li dva filtry za sebou (jako na *obr. 3.4*), zařadíme oba symboly vedle sebe, třeba takto:

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad \begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix}. \quad (3.3)$$

V tomto uspořádání projde druhým přístrojem vše, co se dostane ven z prvního. Bude tomu tak, i tehdy, zahradíme-li nulový i minusový kanál druhého přístroje, takže máme

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad \begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix}. \quad (3.4)$$

Na druhé straně, kdybychom měli kombinaci

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad \begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix}, \quad (3.5)$$

ze vzdálenějšího konce nevychází vůbec nic. Podobně

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad \begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad (3.6)$$

nám nedá na výstupu nic. Ale kombinace

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad \begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix} \quad (3.7)$$

je ekvivalentní právě

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S \end{matrix}.$$

Nyní chceme tyto experimenty popsat kvantově mechanickým způsobem. Řekneme, že atom je ve stavu (+S), prošel-li přístrojem na *obr. 3.5b*; že je ve stavu (0S), prošel-li *c* a že je ve stavu (-S),

dostal-li se přes d .⁶⁾ Označme $\langle b | a \rangle$ amplitudu toho, že atom ve stavu a se po průchodu přístrojem dostane do stavu b . Můžeme říci: $\langle b | a \rangle$ je amplituda toho, že se atom *ve* stavu a dostane *do* stavu b . Experiment (3.4) nám dává

$$\langle +S | +S \rangle = 1,$$

zatímco z (3.5) dostaneme

$$\langle -S | +S \rangle = 0.$$

Podobně výsledek (3.6) je

$$\langle +S | -S \rangle = 0$$

a z (3.7) máme

$$\langle -S | -S \rangle = 1.$$

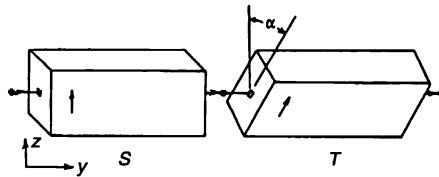
Zabýváme-li se pouze čistými stavy, tj. máme otevřen jen jeden kanál, existuje devět takovýchto amplitud, které můžeme zapsat do tabulky

$$\text{do} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} z \\ +S \quad 0S \quad -S \\ \hline +S \quad \left| \begin{array}{ccc} 1 & 0 & 0 \\ 0S & 0 & 1 & 0 \\ -S & 0 & 0 & 1 \end{array} \right. \end{array} \quad (3.8)$$

Toto pole devíti čísel, nazývané *matice*, zahrnuje stavy, jež jsme právě popsali.

3.2 EXPERIMENTY S PROFILTROVANÝMI ATOMY

Nyní přichází na řadu otázka: Co se stane, natočíme-li druhý přístroj o určitý úhel tak, že směr jeho magnetického pole už nebude rovnoběžný se směrem pole prvního přístroje? Mohl by být nejen natočen, ale i namířen do jiného směru, např. svazek by do něj mohl vstupovat pod úhlem 90° vzhledem k původnímu směru.



Obr. 3.6 Dva Sternovy-Gerlachovy přístroje za sebou; druhý je vůči prvnímu pootočen o úhel α

Pro jednoduchost uvažujme nejdříve uspořádání, v němž je druhý Sternův-Gerlachův přístroj pootočen o určitý úhel α kolem osy y , jak ukazuje obr. 3.6. Druhý přístroj nazvěme T . Představme si, že sestavíme takovýto experiment

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S \end{array} \quad \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ T \end{array}$$

⁶⁾ Čti: (+S)=plus S; (0S)=nula S; (-S)=minus S

nebo experiment

$$\begin{array}{cc} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S & T \end{array}$$

Co dostaneme na výstupu druhého přístroje v takových případech?

Odpověď zní: Jsou-li atomy v určitém stavu vzhledem k S , nejsou v tomto stavu vzhledem k T ; stav $(+S)$ není i stavem $(+T)$. Existuje však určitá amplituda toho, že najdeme atom ve stavu $(+T)$, nebo ve stavech $(0T)$ či $(-T)$.

Jinými slovy, ať jsme se jakkoliv pečlivě snažili o to, aby se atom nacházel v určitém stavu, skutečnost je následující: Projde-li přístrojem pootočeným o určitý úhel, musí se tak řečeno „přeorientovat“ – a nezapomínejme, že to dělá náhodně. Propustíme-li v každém okamžiku přístrojem pouze jednu částici, můžeme si položit otázku: Jakou má naději, že projde? Některé atomy, které se dostaly přes S , skončí ve stavu $(+T)$, další ve stavu $(0T)$ a jiné ve stavu $(-T)$ – každému stavu odpovídá jiná pravděpodobnost. Tyto pravděpodobnosti jsou dány druhými mocninaми absolutních hodnot komplexních amplitud, k jejichž výpočtu chceme najít nějakou matematickou metodu, nebo kvantově mechanický popis. Potřebujeme vědět, čemu je rovna veličina typu

$$\langle -T | +S \rangle,$$

pod níž rozumíme amplitudu toho, že se atom z počátečního stavu $(+S)$ může dostat do stavu $(-T)$ (což není rovno nule, nejsou-li T a S navzájem paralelní). Existují i jiné amplitudy, jako např. $\langle +T | 0S \rangle$ nebo $\langle 0T | -S \rangle$ atd.

Ve skutečnosti je jich devět (a tvoří také matici) a teorie by nám měla dát návod k jejich výpočtu. Tak jako nám vztah $F = ma$ říká, jak předpovídat to, co se stane s klasickou částicí za každých okolností, dovolují nám zákony kvantové mechaniky určit amplitudu toho, že částice projde přístrojem. Ústřední problém tedy spočívá v tom, abychom byli schopni pro libovolný úhel pootočení α (nebo obecněji pro libovolnou orientaci) vypočítat devět amplitud

$$\begin{array}{ccc} \langle +T | +S \rangle, & \langle +T | 0S \rangle, & \langle +T | -S \rangle \\ \langle 0T | +S \rangle, & \langle 0T | 0S \rangle, & \langle 0T | -S \rangle \\ \langle -T | +S \rangle, & \langle -T | 0S \rangle, & \langle -T | -S \rangle. \end{array} \quad (3.9)$$

Nyní už můžeme najít určité vztahy, které mezi nimi platí. Zaprvé, podle definice, představuje druhá mocnina modulu

$$|\langle +T | +S \rangle|^2$$

pravděpodobnost toho, že se atom dostane ze stavu $(+S)$ do stavu $(+T)$. Často pro nás bude výhodnější psát tyto druhé mocniny v ekvivalentní formě

$$\langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^*.$$

V tomto označení představuje číslo

$$\langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^*$$

pravděpodobnost toho, že částice ve stavu $(+S)$ skončí ve stavu $(0T)$ a

$$\langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^*$$

zase pravděpodobnost toho, že se ocitne ve stavu $(-T)$. Ale způsob, jakým jsou naše přístroje sestaveny, zaručuje, že každý atom, který vstoupí do přístroje T , musíme na výstupu najít v jednom ze tří stavů tohoto přístroje – pro daný druh atomů neexistuje jiná možnost. Takže součet tří pravděpodobností, které jsme právě napsali, musí být roven 1. Platí vztah

$$\langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^* + \langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^* + \langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^* = 1. \quad (3.10)$$

Samozřejmě, takové rovnice existují ještě dvě. Dostaneme je, začneme-li se stavem $(0S)$ nebo $(-S)$. To je ale všechno, co lze takto snadno odvodit, proto přejdeme k některým jiným obecným otázkám.

3.3 STERNOVY-GERLACHOVY FILTRY USPOŘÁDANÉ ZA SEBOU

Vzniká zajímavá otázka: Představme si, že jsme měli profiltrované atomy ve stavu $(+S)$, které jsme propustili druhým filtrem řekněme do stavu $(0T)$ a pak dalším filtrem $+S$. (Poslední z nich nazveme S' , abychom jej mohli odlišit od prvního filtru S .) Vzpomenou si atomy, že kdysi byly ve stavu $(+S)$? Jinými slovy, máme experiment

$$\begin{array}{ccc} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ S & T & S' \end{array} \quad (3.11)$$

Chceme vědět, zda všechny atomy, které projdou T , se taktéž dostanou i přes S' . Ne, nedostanou se. Když už byly jednou filtrovány T , už si *nijak nevzpomenou*, že když do něj vstoupily, byly ve stavu $(+S)$. Všimněme si, že přístroj S' v (3.11) je orientován přesně stejně jako první, takže je to vlastně filtr typu S . Stav, který produkuje S' , jsou samozřejmě $(+S)$, $(0S)$ a $(-S)$.

Důležitý bod je tento: *Proupuští-li filtr T pouze jeden svazek, závisí ta část, která projde druhým filtrem S , pouze na konstrukci filtru T a vůbec ne na tom, co je před ním.* Fakt, že tytéž atomy byly kdysi roztrženy filtrem S , nemá žádný vliv na to, co budou dělat potom, když z nich přístroj T znovu vytvoří čistý svazek. Od té chvíle je pravděpodobnost dostat se do různých stavů táž bez ohledu na to, co se stalo předtím, než vešly do přístroje T .

Jako příklad porovnejme experiment (3.11) s následujícím

$$\begin{array}{ccc} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ S & T & S' \end{array}, \quad (3.12)$$

v němž jsme změnili pouze první přístroj S . Řekněme, že úhel α (mezi S a T) je takový, že v experimentu (3.11) projde jedna třetina atomů, které projdou T , také S' . Ačkoliv obecně bude v experimentu (3.12) jiný počet atomů vycházejících z T , přece se *stejná část* z nich – jedna třetina – objeví za S' .

Pomocí našich dosavadních vědomostí můžeme ukázat, že ta část atomů, která vystupuje z T a prochází libovolným S' , závisí jen na T a S' a nezávisí na ničem, co se stalo předtím. Porovnejme experiment (3.12) s takovýmto:

$$\begin{array}{ccc} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S & T & S' \end{array} \quad (3.13)$$

V experimentu (3.12) je amplituda toho, že atom vycházející z S projde T a S' , rovna

$$\langle +S' | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle.$$

Odpovídající pravděpodobnost je

$$|\langle +S' | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle|^2 = |\langle +S' | 0T \rangle|^2 |\langle 0T | 0S \rangle|^2.$$

Pravděpodobnost v experimentu (3.13) vyjadřuje vztah

$$|\langle 0S' | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle|^2 = |\langle 0S' | 0T \rangle|^2 |\langle 0T | 0S \rangle|^2.$$

Jejich poměr

$$\frac{|\langle 0S' | 0T \rangle|^2}{|\langle +S' | 0T \rangle|^2}$$

závisí výlučně na T a S' bez ohledu na to, který svazek ($+S$), ($0S$) nebo ($-S$) přístroj vybral. (Celkový počet atomů může růst nebo klesat podle toho, kolik jich projde T). Týchž výsledek bychom samozřejmě dostali v případě porovnání amplitud toho, že atomy projdou do stavu plus nebo minus (vzhledem k S'), nebo pro poměr pravděpodobností skončit ve stavu nula nebo minus.

Protože uvedené poměry závisejí pouze na tom, který svazek propustíme skrz T , a ne na výběru, jaký předtím provedl filtr S , je jasné, že bychom dostali tentýž výsledek i v případě, kdyby poslední přístroj nebyl filtr S . Kdybychom jako třetí přístroj, který nyní nazveme R , použili filtr pootočený vzhledem k T o libovolný úhel, zjistili bychom, že takový poměr jako např. $|\langle 0R | 0T \rangle|^2 / |\langle +R | 0T \rangle|^2$ by nezávisel na tom, který svazek propustil první filtr S .

3.4 BÁZOVÉ STAVY

Uvedené výsledky ilustrují jeden ze základních principů kvantové mechaniky: Libovolný atomový systém může být pomocí procesu filtrování rozdělen do určitého souboru stavů, které nazveme *bázové stavy*; budoucí chování atomů v jakémkoliv daném bázovém stavu závisí jen na jeho povaze, a ne na jeho předcházející minulosti⁷⁾. Bázové stavy samozřejmě závisejí na použitém filtru, např. tři stavy ($+T$), ($0T$) a ($-T$) představují jeden soubor bázových stavů, tři stavy ($+S$), ($0S$), ($-S$) zase jiný. Možností existuje kolik jen chcete – všechny jsou stejně dobré.

7) Nemáme v úmyslu přisuzovat slovům „bázový stav“ něco víc než bylo uvedeno. Není vhodné chápat je jako nějaký základní stav. Slovo báze používáme ve významu *soustavy* pro popis, podobně, jako když hovoříme o číslech v desítkové *soustavě*.

Je třeba zdůraznit, že uvažujeme *spolehlivé* filtry, které opravdu produkují čisté svazky. Kdyby např. náš Sternův-Gerlachův přístroj neodděloval tři svazky tak dobře, abychom si kterýkoliv z nich mohli vybrat pomocí našich clon, nemohli bychom provést úplné rozdělení do bázových stavů. O tom, zda máme čisté bázové stavy, se můžeme přesvědčit podle toho, zda se v jiném filtru stejného druhu svazky štěpí nebo ne. Mějme např. čistý stav (+T). Pak všechny atomy projdou filtrem

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ T$$

a žádný nepronikne ani

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ T$$

ani

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ T$$

Naše tvrzení o bázových stavech znamená toto: Profiltruujeme-li svazek do čistého bázového stavu, není už další filtrace identickým přístrojem možná.

Ještě musíme zmínit, že to, o čem hovoříme, platí úplně jen v dost idealizovaných situacích. V každém reálném Sternově-Gerlachově přístroji by nám dělal problémy ohyb na štěrbinách, který by mohl přinutit některé atomy, aby přešly do stavů odpovídajících jiným úhlům; taktéž bychom museli přemýšlet, zda by svazek nemohl obsahovat atomy s jiným stupněm excitace svých vnitřních stavů apod. Idealizovali jsme situaci tak, že uvažujeme pouze stavy odpovídající různému rozštěpení v magnetickém poli. Zanedbáváme otázky související s polohou, hybností, vnitřními excitacemi apod. Obecně bychom měli uvažovat i bázové stavy vzhledem k těmto charakteristikám. Pro jednoduchost budeme pracovat jen s naším souborem tří stavů, který postačí na přesnou analýzu idealizované situace, kdy se atomy při průchodu přístrojem neroztříští, ani se nijak jinak „nepokazí“, a po opuštění přístroje dostanou do stavu klidu.

Zajisté jste zjistili, že náš myšlený experiment vždy začínáme filtrem, který má otevřen jen jeden kanál, abychom mohli hned od začátku pracovat s určitým bázovým stavem. Děláme to proto, že atomy vycházejí z „peci“ v různých stavech rozdělených náhodně podle toho, co se v peci děje. (Dostáváme tzv. „nepolarizovaný“ svazek.) Tato náhodnost zahrnuje pravděpodobnosti „klasického“ druhu (jako při házení mincí) lišící se od kvantově mechanických pravděpodobností, které nás v dané chvíli zajímají. Práce s nepolarizovaným svazkem by nás přivedla k dalším komplikacím, kterým se raději vyhneme, dokud nepochopíme chování polarizovaných svazků. Takže v této fázi se netrapte tím, co se stane, když *první* přístroj propustí více než jeden svazek. (Na konci kapitoly vám prozradíme, jak je třeba postupovat v takových případech.)

Nyní se vraťme zpět a podívejme se, co se stane, když přejdeme od bázového stavu jednoho filtru k bázovému stavu jiného. Opět začneme případem

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ S$$

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ T$$

Atomy vycházející z T jsou v bázevém stavu ($0T$) a vůbec si nepamatují, že kdysi byly ve stavu ($+S$). Někteří lidé obvykle říkají, že profiltrováním přes T jsme ztratil informaci o předcházejícím stavu ($+S$), protože jsme „vyrušili“ atomy, když jsme je v přístroji T rozdělili na tři svazky. Ale to není pravda. Bývalá informace se neztrácí díky *rozdělení* na tři svazky, ale díky *clonám*, které do přístroje vkládáme, jak lze vypočítat z následujících experimentů.

Začneme s filtrem $+S$ a počet atomů, které jím projdou, označíme N . Umístíme-li za něj filtr $0T$, bude počet atomů za ním nějakým zlomkem původního počtu, řekněme αN . Použijeme-li nakonec další filtr $+S$, pouze část β z těchto atomů dojde až na samotný konec. Naznačíme to takto

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{\alpha N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S' \end{array} \xrightarrow{\beta \alpha N} \dots \quad (3.14)$$

Kdyby si třetí přístroj S' vybral jiný stav, řekněme ($0S$), prošla by nakonec jiná část, řekněme ⁸⁾ γ . Měli bychom

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{\alpha N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S' \end{array} \xrightarrow{\gamma \alpha N} \dots \quad (3.15)$$

Nyní si představme, že tyto dva experimenty zopakujeme ještě jednou, ale odstraníme přitom z T všechny clony. Dojdeme k těmto pozoruhodným výsledkům

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S' \end{array} \xrightarrow{N} \dots \quad (3.16)$$

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ | \end{array} \right\} \\ S' \end{array} \xrightarrow{0} \dots \quad (3.17)$$

V prvním případě projdou S' *všechny* atomy, zatímco ve druhém *ani jeden!* To je jeden z velkých zákonů kvantové mechaniky. To, že se příroda chová tímto způsobem, není vůbec samozřejmé, ale výsledky, které jsme uvedli pro naši idealizovanou situaci, zcela souhlasí s kvantově mechanickým chováním pozorovaným v nesčetném množství experimentů.

3.5 INTERFERUJÍCÍ AMPLITUDY

Jak je možné, že při změně (3.15) na (3.17), tj. *otevřením většího počtu kanálů*, nám projde *méně* atomů? To je ta velká stará záhada kvantové mechaniky – interference amplitud. Máme tu podobný paradox, s jakým jsme se poprvé seznámili při dvojštěrbinovém experimentu s interferujícími elektrony. Viděli jsme, že když byly oba otvory otevřené, zaznamenali jsme na některých místech méně elektronů než v případě, když byl jeden otvor zavřený. Číselně k tomu dospějeme takto. Amplitudu toho, že atom v přístroji (3.17) projde T a S' , můžeme zapsat jako součet tří amplitud – po jedné pro každý ze tří svazků v T ; tento součet je roven nule

⁸⁾ Pomocí našeho předcházejícího označení $\alpha = |\langle 0T | +S \rangle|^2$, $\beta = |\langle +S | 0T \rangle|^2$ a $\gamma = |\langle 0S | 0T \rangle|^2$.

$$\langle 0S|+T\rangle\langle +T|+S\rangle + \langle 0S|0T\rangle\langle 0T|+S\rangle + \langle 0S|-T\rangle\langle -T|+S\rangle = 0. \quad (3.18)$$

Žádná ze tří jednotlivých amplitud není rovna nule, např. druhá mocnina modulu druhé amplitudy je $\gamma\alpha$ (viz (3.15)), ale *součet je nulový*. Tutéž odpověď bychom dostali, kdyby S' vybral stav $(-S)$. Ale v uspořádání podle (3.16) je situace jiná. Označíme-li amplitudu průchodu T a S' jako a , pro zmíněný případ máme⁹⁾

$$a = \langle +S|+T\rangle\langle +T|+S\rangle + \langle +S|0T\rangle\langle 0T|+S\rangle + \langle +S|-T\rangle\langle -T|+S\rangle = 1. \quad (3.19)$$

V experimentu (3.16) byl svazek rozštěpen a opět spojen. Rozbitý džbán jsme slepili do původního tvaru: Informace o původním stavu $(+S)$ se zachovává; vše vypadá tak, jako kdyby tam přístroj T vůbec nebyl. Platí to vždy, i kdyby za „dokořán otevřeným“ přístrojem T bylo postaveno cokoliv. Přesvědčit se o tom můžeme pomocí filtru R (orientovaného pod náhodně vybraným úhlem) nebo pomocí čehokoliv jiného. Odpověď bude vždy táž, jako kdybychom atomy brali přímo z prvního filtru S .

Došli jsme k důležitému principu: Úplně otevřený filtr T (nebo libovolný jiný) nepůsobí vůbec žádnou změnu. Měli bychom zmínit jednu dodatečnou podmínku. Dokořán otevřený filtr nejen že musí propouštět tři svazky, ale zároveň v nich *nesmí* způsobovat nestejné poruchy. Nemělo by v něm být např. silné elektrické pole v blízkosti jednoho svazku, které by chybělo u ostatních dvou. Důvod je tento: Ačkoliv dodatečná porucha nebrání atomům projít filtrem, může způsobit změnu fáze některých amplitud. Tím by se změnila i interference a amplitudy v rovnicích (3.18) a (3.19) by byly jiné. Dále budeme vždy předpokládat, že žádné dodatečné poruchy podobného druhu neexistují.

Přepíšeme rovnice (3.18) a (3.19) pomocí úspornějších označení. Nechť i označuje libovolný ze tří stavů $(+T)$, $(0T)$ nebo $(-T)$; v tom případě můžeme rovnice zapsat ve tvarech

$$\sum_i \langle 0S|i\rangle\langle i|+S\rangle = 0 \quad (3.20)$$

a

$$\sum_i \langle +S|i\rangle\langle i|+S\rangle = 1. \quad (3.21)$$

Přesně tak je to i v experimentu, v němž nahradíme S' zcela libovolným filtrem R ; dostaneme

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S & T & R' \end{matrix} \quad (3.22)$$

Výsledky budou vždy stejné, jako kdybychom přístroj T vynechali a měli pouze

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S & R \end{matrix}$$

⁹⁾ Z tohoto experimentu ve skutečnosti nemůžeme vyvodit, že $a=1$, ale jen to, že $|a|^2=1$, takže a by mohlo být i $e^{i\delta}$. Lze však dokázat, že výběr $\delta=0$ není překážkou obecnosti.

Tedy vyjádřeno matematicky

$$\sum_i \langle +R | \hat{i} \rangle \langle i | +S \rangle = \langle +R | +S \rangle. \quad (3.23)$$

To je náš základní zákon a platí vždy, když i označuje tři bázevé stavy libovolného filtru.

Zajisté zjistíte, že v experimentu (3.22) nemají filtry S a R žádný speciální vztah k T . Kromě toho by naše argumenty byly stejné bez ohledu na stavy, které tyto filtry vyberou. Abychom napsali obecnou rovnici v obecném tvaru aniž bychom se museli odvolávat na konkrétní stavy, které S a R vybraly, označme stav připravený prvním filtrem jako φ (v našem speciálním případě jako $+S$) a stav, který propouští poslední filtr, jako χ (v našem příkladu je to $+R$). Pak můžeme náš základní zákon (3.23) formulovat ve tvaru

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i \langle \chi | \hat{i} \rangle \langle i | \varphi \rangle, \quad (3.24)$$

kde i musí probíhat třemi bázevémi stavy nějakého vybraného filtru.

Ještě jednou chceme zdůraznit, co rozumíme pod bázevémi stavy. Jsou podobné třem stavům, které si lze vybrat pomocí jednoho z našich Sternových-Gerlachových přístrojů. Jedna podmínka spočívá v tom, že máme-li bázevý stav, nezávisí budoucnost na minulosti. Jiná podmínka říká: Máme-li úplný soubor bázevých stavů, platí rovnice (3.24) pro libovolnou množinu počátečních a konečných stavů φ a χ . Žádný výjimečný soubor bázevých stavů však neexistuje. Začali jsme uvažováním bázevých stavů vzhledem ke konkrétnímu přístroji T . Stejně dobře bychom mohli zkoumat jiné soubory bázevých stavů vzhledem k přístroji S , R atd.¹⁰⁾ Obvykle hovoříme o bázevých stavech „v určité reprezentaci“.

Další podmínka, kterou klademe na soubor bázevých stavů v libovolné reprezentaci, je ta, že všechny stavy v tomto souboru jsou navzájem zcela odlišné. Tím rozumíme to, že pro stav $(+T)$ neexistuje amplituda přechodu do stavu $(0T)$ nebo $(-T)$. Jako i a j označme dva libovolné bázevé stavy nějakého konkrétního souboru. Pak obecná pravidla, která jsme odvodili ve spojitosti s rovnicemi (3.8), říkají, že

$$\langle j | \hat{i} \rangle = 0$$

pro případ, že $i \neq j$. Samozřejmě víme, že platí

$$\langle i | \hat{i} \rangle = 1.$$

Tyto dvě rovnice se obvykle píšou jako

$$\langle j | \hat{i} \rangle = \delta_{ji} \quad (3.25)$$

kde δ_{ji} (tzv. Kroneckerovo delta) je symbol definovaný jako nula pro $j \neq i$ a roven jedné pro $i = j$.

Rovnice (3.25) není nezávislá na jiných zákonech, které jsme už zmínili. Nezajímá nás matematický problém najít nejmenší počet nezávislých axiomů, z nichž by všechny zákony

¹⁰⁾ Pro systémy atomů se třemi a více bázevémi stavy existují ve skutečnosti jiné druhy filtrů (vůbec nejsou podobné Sternovu-Gerlachovu přístroji), které lze použít na získání více možností výběru souboru bázevých stavů (každý soubor se stejným počtem stavů).

vyplynuly jako důsledek.¹¹⁾ Zcela stačí, když máme soubor, který je úplný a na první pohled si neprotiřečí. Můžeme ale ukázat, že rovnice (3.25) a (3.24) nejsou nezávislé. Představme si, že φ v rovnici (3.24) představuje jeden bázeový stav (např. stav j) téhož souboru jako i ; tak dostaneme

$$\langle \chi | j \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | j \rangle.$$

Ale rovnice (3.25) říká, že $\langle i | j \rangle$ je rovno nule, když $i \neq j$, takže ze součtu zůstane jen člen $\langle \chi | j \rangle$. Dostáváme identitu, která naznačuje, že tyto dva zákony nejsou nezávislé.

Platí-li obě rovnice (3.10) a (3.24), musí mezi amplitudami existovat ještě jeden vztah. Rovnice (3.10) tvrdí, že

$$\langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^* + \langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^* + \langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^* = 1.$$

Položíme-li v rovnici (3.24) φ a χ rovno stavu $(+S)$, bude levá strana $\langle +S | +S \rangle$, což je zřejmě rovno 1, takže dostaneme ještě jednu rovnici (3.19)

$$\langle +S | +T \rangle \langle +T | +S \rangle + \langle +S | 0T \rangle \langle 0T | +S \rangle + \langle +S | -T \rangle \langle -T | +S \rangle = 1.$$

Dvě uvedené rovnice jsou konzistentní (pro všechny vzájemné orientace přístrojů T a S) jen v tom případě, když

$$\begin{aligned} \langle +S | +T \rangle &= \langle +T | +S \rangle^* \\ \langle +S | 0T \rangle &= \langle 0T | +S \rangle^* \\ \langle +S | -T \rangle &= \langle -T | +S \rangle^* \end{aligned}$$

Z toho vyplývá, že pro libovolné stavy φ a χ platí

$$\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^*. \quad (3.26)$$

Kdyby to nebyla pravda, pravděpodobnost by se nezachovávala a částice by se „ztrácely“.

Dříve, než budeme pokračovat, shrneme tři důležité *obecné zákony o amplitudách*. Jsou to rovnice (3.24), (3.25) a (3.26):

$$\begin{aligned} \text{I. } \langle j | i \rangle &= \delta_{ji} \\ \text{II. } \langle \chi | \varphi \rangle &= \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle \\ \text{III. } \langle \varphi | \chi \rangle &= \langle \chi | \varphi \rangle^*. \end{aligned} \quad (3.27)$$

V těchto rovnicích se i a j vztahují na *všechny* bázeové stavy nějaké *jedné* reprezentace, zatímco φ a χ představují libovolné možné stavy atomu. Je důležité si všimnout, že II. platí, jen když provedeme součet přes *všechny* stavy systému (v našem případě přes tři stavy $+T$, 0 , $-T$). Tyto zákony neříkají nic o tom, co si máme vybrat jako bázi pro náš soubor bázeových stavů. Začali jsme

¹¹⁾ Nadbytečná pravda nás netrápí!

přístrojem T , který představuje Sternův-Gerlachův experiment s nějakou libovolnou orientací, ale stejně dobrá by byla jakákoliv jiná orientace, řekněme W . Proměnné i a j by probíhaly jiným souborem stavů, ale všechny zákony by zůstaly nenarušeny; žádný výjimečný soubor neexistuje. V kvantové mechanice je úspěch často podmíněn tím, do jaké míry umíme využít skutečnosti, že věci lze vypočítat více způsoby.

3.6 APARÁT KVANTOVÉ MECHANIKY

Nyní vám ukážeme, proč jsou zmíněné zákony užitečné. Mějme atom v určitém stavu (čímž rozumíme, že byl připraven jistým způsobem) a chceme vědět, co se s ním stane v nějakém experimentu. Jinými slovy, náš atom je na počátku ve stavu φ a my bychom rádi věděli, jakou má *naději*, že projde určitým přístrojem, který přijímá jen atomy ve stavu χ . Zákony říkají, že přístroj můžeme úplně popsat pomocí tří komplexních čísel $\langle \chi | i \rangle$ (jsou to amplitudy toho, že každý bázevý stav přejde do stavu χ). Vyjádříme-li stav atomu opět pomocí trojice čísel $\langle i | \varphi \rangle$ (amplitudy toho, že náš původní atom najdeme v každém ze tří bázevých stavů), můžeme říci, co se s ním stane, projde-li přístrojem. To je důležitá myšlenka.

Uvedme si jiný příklad. Uvažujme nad následujícím problémem. Začneme s přístrojem S , pak přijde nějaké složité seskupení přístrojů, které označíme A , a nakonec jeden přístroj R :

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad \left\{ A \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} . \quad (3.28)$$

S R

Pod A rozumíme nějaké komplikované uspořádání Sternových-Gerlachových přístrojů (s nepropustnými nebo polopropustnými clonami), orientovanými pod zvláštními úhly, s neobvyklými elektrickými a magnetickými poli... téměř cokoliv, na co pomyslíte. (Myšlenkové experimenty se provádějí velmi příjemně – netrápí nás žádné starosti, které vznikají při vlastní *stavbě* přístrojů!) Otázka zní: S jakou amplitudou vyjde částice z bloku A , do něhož vstupuje ve stavu $(+S)$, ve stavu $(0R)$, aby se dostala přes poslední filtr R ? Pro tuto amplitudu existuje standardní zápis

$$\langle 0R | A | +S \rangle .$$

Jako obvykle, je nutné jej číst zprava doleva (jako hebrejštinu)

$$\langle \text{konec} | \text{skrz} | \text{začátek} \rangle .$$

Kdyby náhodou A neměnilo vůbec nic (bylo by jednoduchým otevřeným kanálem), píšeme

$$\langle 0R | 1 | +S \rangle = \langle 0R | +S \rangle ; \quad (3.29)$$

tyto dva symboly jsou ekvivalentní. Obecně bychom mohli nahradit $(+S)$ obecným počátečním stavem φ a $(0R)$ obecným koncovým stavem χ a chtěli bychom znát amplitudu $\langle \chi | A | \varphi \rangle$. Úplná analýza přístroje A by měla poskytnout amplitudu $\langle \chi | A | \varphi \rangle$ pro libovolný možný pár stavů φ a χ – nekonečné množství kombinací! Jak tedy můžeme podat úplný popis chování přístroje A ? Můžeme na to jít tímto způsobem. Představte si, že upravíme přístroj (3.28) takto:

$$\begin{array}{ccccc} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \{A\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ \hline + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S & T & & T & R \end{array} \quad (3.30)$$

Ve skutečnosti jsme žádnou modifikaci neprovedli, neboť dokořán otevřené přístroje T vůbec nic nemění. Dávají však návod, jak přistupovat k rozboru úlohy. Existuje soubor amplitud $\langle i | +S \rangle$, že se atomy dostanou z S do i tého stavu přístroje T . Dále máme jiný soubor amplitud, že stav i (vzhledem k T) po vstupu do A vyjde jako stav j (vzhledem k T). A nakonec je tu ještě třetí soubor – soubor amplitud, že každý stav j projde posledním filtrem do stavu $(0R)$. Pro každou možnou dráhu existuje amplituda ve tvaru

$$\langle 0R | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | +S \rangle$$

a celková amplituda je součtem členů, které dostaneme pro různé kombinace i a j . Hledaná amplituda vypadá takto:

$$\sum_{i,j} \langle 0R | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | +S \rangle. \quad (3.31)$$

Nahradíme-li $(0R)$ a $(+S)$ stavy χ a φ , dostaneme výraz stejného tvaru, takže máme obecný výsledek

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{i,j} \langle \chi | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | \varphi \rangle. \quad (3.32)$$

Všimněte si, že pravá strana rovnice (3.32) je skutečně „jednodušší“ než levá. Přístroj A je beze zbytku popsán *devíti* čísly $\langle j | A | i \rangle$, které vyjadřují odezvu A na tři báze stavy přístroje T . Určíme-li těchto devět čísel, můžeme zvládnout každou dvojici vstupujících a vystupujících stavů φ a χ , definujeme-li každý z nich pomocí trojice amplitud pro přechod do každého ze tří báze stavů, resp. z nich. Použitím rovnice (3.32) předpovíme výsledek experimentu.

Tak funguje mechanismus kvantové mechaniky pro částici se spinem jedna. Každý stav je vyjádřen třemi čísly, které představují amplitudu toho, že jej najdeme v každém z báze stavů zvoleného souboru. Každému přístroji přiřazujeme devět čísel – amplitud toho, že jeden báze stav v přístroji přejde do jiného báze stavu. Z těchto čísel můžeme vypočítat vše.

Devět amplitud popisujících přístroj se často zapisuje do matice nazývané matice $\langle j | A | i \rangle$:

$$\text{do} \quad \begin{array}{ccc} & \begin{array}{ccc} z & & \\ & + & 0 & - \\ & + & 0 & - \end{array} & \\ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} & \begin{pmatrix} \langle + | A | + \rangle & \langle + | A | 0 \rangle & \langle + | A | - \rangle \\ \langle 0 | A | + \rangle & \langle 0 | A | 0 \rangle & \langle 0 | A | - \rangle \\ \langle - | A | + \rangle & \langle - | A | 0 \rangle & \langle - | A | - \rangle \end{pmatrix} & \end{array} \quad (3.33)$$

Všechny matematické výpočty kvantové mechaniky jsou pouze rozšířením této myšlenky. Pro ilustraci uvedeme jednoduchý příklad. Mějme přístroj C , který chceme proanalýzovat, tj. chceme vypočítat různé hodnoty $\langle j | C | i \rangle$. Rádi bychom např. věděli, co se stane v experimentu

$$\begin{array}{ccc} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} & \{C\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ \hline + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S & & R \end{array} \quad (3.34)$$

Pak si však všimneme, že přístroj C je složen ze dvou přístrojů A a B umístěných za sebou (částice prochází A a potom B), takže symbolicky lze psát

$$\{C\} = \{A\} \cdot \{B\}. \quad (3.35)$$

Přístroj C můžeme nazvat „součinem“ A a B . Předpokládejme, že už víme, jak analyzovat jeho dvě části; umíme sestavit matice (vzhledem k T) pro A i B . V tom případě je náš problém vyřešen. Pro libovolný vstupní a výstupní stav najdeme $\langle \chi | C | \varphi \rangle$ docela snadno. Nejdříve napíšeme

$$\langle \chi | C | \varphi \rangle = \sum_k \langle \chi | B | k \rangle \langle k | A | \varphi \rangle.$$

Porozuměli jste proč? (Návod: Představte si, že mezi A a B vložíme přístroj T .) Uvážíme-li pak speciální případ, kdy φ a χ jsou taktéž bázovými stavy (přístroje T), řekněme i a j , máme

$$\langle j | C | i \rangle = \sum_k \langle j | B | k \rangle \langle k | A | i \rangle. \quad (3.36)$$

Tato rovnice definuje matici „součinového“ přístroje C pomocí dvou matic přístrojů A a B . Matematici nazývají novou matici $\langle j | C | i \rangle$, vytvořenou ze dvou matic $\langle j | B | i \rangle$ a $\langle j | A | i \rangle$ podle pravidla určeného rovnicí (3.36), maticovým součinem BA dvou matic B a A . (Všimněte si, že pořadí je důležité, $AB \neq BA$.) Můžeme tedy říci, že matici dvou za sebou stojících částí přístroje tvoří součin matic těchto částí braných zvlášť (přičemž první přístroj stojí v součinu *napravo*). Každý, kdo se vyzná v maticové algebře, pochopí, že nemáme na mysli nic víc než rovnici (3.36).

3.7 TRANSFORMOVÁNÍ DO JINÉ BÁZE

V této stati připojíme závěrečnou poznámku o bázových stavech používaných ve výpočtech. Předpokládejme, že jsme se rozhodli pracovat s nějakou konkrétní bází, řekněme s bází S , a náš kolega si umíní provést tytéž výpočty s jinou, odlišnou bází, např. s bází T . Pro přehlednost nazvěme naše bázové stavy (iS), kde $i = +, 0, -$. Podobně můžeme označit jeho bázové stavy jako (jT). Jak porovnat jeho práci s naší? Konečné předpovědi pro výsledek jakéhokoliv měření by měly vyjít stejné, ale amplitudy a matice používané ve výpočtech budou rozdílné. Jaký vztah mezi nimi existuje?: Například oba začneme se stejným stavem φ , my jej popíšeme pomocí tří amplitud $\langle iS | \varphi \rangle$ – amplitud toho, že φ přejde do bázových stavů v naší S -reprezentaci, kolega mu přiřadí amplitudy $\langle jT | \varphi \rangle$, vyjadřující přechod do tohož stavu φ do bázových stavů jeho T -reprezentace. Jak můžeme zkontrolovat, že oba skutečně popisujeme tentýž stav? Pomůže nám při tom obecně II. pravidlo v rovnicích (3.27). Nahrazením χ jeho libovolným stavem jT dostáváme

$$\langle jT | \varphi \rangle = \sum_i \langle jT | iS \rangle \langle iS | \varphi \rangle. \quad (3.37)$$

Abychom mohli navzájem spojit obě reprezentace, potřebujeme jen zadat devět komplexních čísel matice $\langle jT | iS \rangle$. Tu pak lze použít na to, abychom upravili všechny jeho rovnice do naší formy. Říká nám, jak je třeba provést *transformace* z jednoho souboru bázových stavů do druhého. (Z toho důvodu je matice $\langle jT | iS \rangle$ občas nazývána „transformační matice z reprezentace S do reprezentace T “. Vskutku vznešený název!)

Pro případ částic se spinem jedna, pro něž máme jen tři báзовé stavy (pro vyšší spiny je jich víc), je matematická situace podobná jako ve vektorové algebře. Tam jsme viděli, že každý vektor je reprezentován trojicí čísel – složek podél souřadnicových os x , y a z . To znamená, že každý vektor lze rozložit do tří „bázových“ vektorů, tj. – vektorů podél těchto tří os. Někdo jiný si však vybere jiné souřadnicové osy – x' , y' , z' . K reprezentaci libovolného daného vektoru použije jiná čísla. Jeho výpočty budou vypadat jinak, ale konečné výsledky budou stejné. Tím jsme se zabývali už dříve a známe pravidla pro transformaci vektorů z jedné souřadnicové soustavy do druhé.

Snad byste si chtěli vyzkoušet, jak kvantově mechanické transformace fungují a rádi byste nějaké provedli. Uvedeme proto bez důkazu transformační matice pro převedení amplitud částic se spinem jedna z jedné reprezentace S do druhé reprezentace T pro několik speciálních vzájemných orientací filtrů S a T . (V následující kapitole vám ukážeme, jak se tyto výsledky odvozují.)

První případ: Přístroj T má osu y (podél níž se částice pohybují) shodnou s osou y' přístroje S , ale je otočen kolem této společné osy o úhel α (jako na obr. 3.6). (Abychom byli konkrétní, souřadnicová soustava x' , y' , z' pevně spojená s přístrojem T , souvisí se soustavou x , y , z přístroje S vztahy: $z' = z \cos \alpha + x \sin \alpha$, $x' = x \cos \alpha - z \sin \alpha$, $y' = y$.) Pak pro transformační amplitudy dostáváme

$$\begin{aligned}
 \langle +T | +S \rangle &= \frac{1}{2} (1 + \cos \alpha) \\
 \langle 0T | +S \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\
 \langle -T | +S \rangle &= \frac{1}{2} (1 - \cos \alpha) \\
 \langle +T | 0S \rangle &= +\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\
 \langle 0T | 0S \rangle &= \cos \alpha \\
 \langle -T | 0S \rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\
 \langle +T | -S \rangle &= \frac{1}{2} (1 - \cos \alpha) \\
 \langle 0T | -S \rangle &= +\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\
 \langle -T | -S \rangle &= \frac{1}{2} (1 + \cos \alpha).
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

Druhý případ: Přístroj T má tutéž osu z jako přístroj S , ale je otočen kolem ní o úhel β . (Transformace souřadnic má tvar: $z' = z$, $x' = x \cos \beta + y \sin \beta$, $y' = y \cos \beta - x \sin \beta$.) Transformační amplitudy pak jsou

JINÉ SITUACE

$$\begin{aligned}
 \langle +T | +S \rangle &= e^{+i\beta} \\
 \langle 0 T | 0 S \rangle &= 1 \\
 \langle -T | -S \rangle &= e^{-i\beta} \\
 \text{všechny ostatní} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{3.39}$$

Všimněte si, že libovolné rotace přístroje T mohou být utvořeny z těchto dvou popsanych rotací.

Je-li stav φ definován trojicí čísel

$$C_+ = \langle +S | \varphi \rangle, \quad C_0 = \langle 0 S | \varphi \rangle, \quad C_- = \langle -S | \varphi \rangle, \tag{3.40}$$

a tentýž stav je z hlediska přístroje T určen třemi čísly

$$C'_+ = \langle +T | \varphi \rangle, \quad C'_0 = \langle 0 T | \varphi \rangle, \quad C'_- = \langle -T | \varphi \rangle, \tag{3.41}$$

koeficienty $\langle j T | i S \rangle$ z (3.38) anebo (3.39) vyjadřují transformaci spojující C'_i s C_i . Jinak řečeno, koeficienty C_i jsou velmi podobné složkám vektoru, které z pohledu S a T vypadají různě.

Jen pro částici se spinem jedna (protože ta vyžaduje tři amplitudy) je souvislost s vektorem velmi úzká. V obou případech existuje trojice čísel, která se při změně souřadnicové soustavy musí transformovat určitým definovaným způsobem. Skutečně, existuje soubor báзовých stavů, které se transformují přesně tak jako složky vektoru. Tři kombinace

$$C_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ - C_-), \quad C_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-), \quad C_z = C_0 \tag{3.42}$$

se transformují na C'_x , C'_y a C'_z přesně tímž způsobem jako x , y a z na x' , y' a z' . (Můžete se o tom přesvědčit použitím transformačních zákonů (3.38) a (3.39)). Nyní už chápete, proč částici se spinem jedna často nazývají vektorová částice.

3.8 JINÉ SITUACE

Na začátku jsme poukázali na to, že naše diskuze o částicích se spinem jedna bude sloužit jako model pro libovolný kvantově mechanický problém. Zobecnění se týká jen počtu stavů. V jiných případech budeme místo tří potřebovat n báзовých stavů.¹²⁾ Základní zákony v rovnicích (3.27) mají úplně stejnou formu – jen si musíme uvědomit, že i a j probíhají přes všechny báзовé stavy n . Jakýkoliv jev lze analyzovat udáním amplitud toho, že začíná v libovolném báзовém stavu a končí opět v libovolném báзовém stavu, a pak sčítáním přes úplný soubor báзовých stavů. Použit můžeme libovolný vhodný soubor báзовých stavů: Pokud si někdo přeje použít jiný soubor, je to zcela v pořádku; souvislost mezi nimi zprostředkovává transformační matice $n \times n$. O takovýchto transformacích řekneme později něco víc.

Před časem jsme slíbili, že řekneme něco o tom, co dělat, když atomy přímo z pece vstupují do nějakého přístroje, řekněme A , a pak je analyzuje filtr, který vybírá stav χ . Stav φ , v němž vchází

¹²⁾ Počet báзовých stavů n může být (a obecně i je) nekonečný.

do A , neznáme. Nejlepší bude, nebudete-li si pro tuto chvíli nad tímto problémem lámat hlavu, ale místo toho se soustředíte na ty, které vždy začínají čistými stavy. Ale když na tom trváte, naznačíme způsob, jak se k této úloze postavit.

Za prvé, musíte být schopni provést rozumný odhad toho, jakým způsobem jsou rozděleny stavy atomů vycházejících z pece. Například neskrývá-li pec v sobě „neobvyklého“, mohli byste docela odůvodněně předpokládat, že atomy opouštějí pec s náhodnými orientacemi. Kvantově mechanicky to odpovídá tvrzení, že o stavech víme jen tolik, že jedna třetina z nich jsou stavy $(+S)$, jedna třetina $(0S)$ a jedna třetina $(-S)$. Pro stavy $(+S)$ je amplituda přechodu rovna $\langle \chi | A | +S \rangle$ a pravděpodobnost $|\langle \chi | A | +S \rangle|^2$, pro ostatní případy je to podobné. Celková pravděpodobnost pak je

$$\frac{1}{3} |\langle \chi | A | +S \rangle|^2 + \frac{1}{3} |\langle \chi | A | 0S \rangle|^2 + \frac{1}{3} |\langle \chi | A | -S \rangle|^2.$$

Proč jsme použili raději S a ne třeba T ? I když se to zdá překvapující, odpověď nezávisí na počátečním rozhodnutí; pracujeme-li s úplně náhodnými orientacemi, je stále stejná. Tímto způsobem dostaneme, že

$$\sum_i |\langle \chi | iS \rangle|^2 = \sum_j |\langle \chi | jT \rangle|^2$$

pro libovolné χ . (Důkaz přenecháme vám.)

Všimněte si: Je *nesprávné* říkat, že vstupní stav má amplitudu $\sqrt{1/3}$ být ve stavu $(+S)$, $\sqrt{1/3}$ ve stavu $(0S)$ a $\sqrt{1/3}$ ve stavu $(-S)$; kdyby tomu tak bylo, připouštěla by se možnost určitých interferencí. Počáteční stav prostě *neznáte*; musíte přemýšlet v rovině pravděpodobností, že systém se na počátku nachází v různých možných počátečních stavech a pak vezmete vážený průměr různých pravděpodobností.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

3.1 ■ Dokažte tvrzení uvedené v kapitole 3 o tom, že může-li být přístroj C rozdělen na dvě části A a B , platí $\langle \chi | C | \varphi \rangle = \sum_k \langle \chi | B | k \rangle \langle k | A | \varphi \rangle$.

3.2 ■ Tři modifikované Sternovy-Gerlachovy přístroje popsané v kapitole 3, které rozdělují svazek částic na složky odpovídající různým hodnotám projekce spinu (ale bez *prostorového dělení svazku na výstupu*), jsou instalovány za sebou a je do nich vpouštěn svazek částic se spinem 1. První a třetí přístroj jsou orientovány ve stejném směru, prostřední je natočen pod libovolným

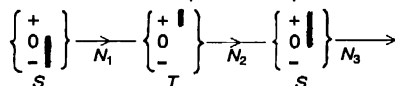
úhlem. V označeních zavedených v kapitole 3 to zapisujeme takto: $\begin{matrix} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix} \\ S & T & S \end{matrix}$.

a) V přístroji T otevřeme jen jednu štěrbinu Bude rozdělení svazku na tři složky v koncovém stavu S záviset na stavu na vstupu, tj. na poměrech, v nichž jsou přítomny stavy $+S$, 0 a $-S$ v původním svazku? Proč?

b) Jak to bude, otevřeme-li v přístroji T dvě štěrbinu?

c) A budou-li otevřeny tři?

3.3 ■ Trojitý modifikovaný Sternův-Gerlachův experiment probíhá s částicemi se spinem 1 podle následujícího schématu:



Všechny tři přístroje leží na jedné přímce, ale prostřední přístroj T je pootočen o 90° vzhledem k druhým dvěma. Svazek částic dopadá zleva. Svazek, který vystupuje z prvního přístroje S má intenzitu N_1 částic za sekundu.

a) Čemu je rovna intenzita svazku N_2 na výstupu z přístroje T ?

b) Čemu je rovna intenzita svazku N_3 na výstupu z posledního přístroje S ?

c) Jak se změní hodnoty N_2 a N_3 , odstraníme-li clonu z přístroje T ?

3.4 ■ Představíme si posloupnost modifikovaných přístrojů Sternových-Gerlachových S , T , a S' , jimiž prochází svazek částic se spinem 1. Přístroj T je pootočen kolem osy x o 90° vzhledem k přístrojům S a S' (viz obrázek).

a) Vychází-li z přístroje S N_0 částic, určete, jaký počet částic můžeme očekávat na výstupu přístroje S' ve stavech $|+S'\rangle$ a $|0S'\rangle$.

Odpovídající hodnoty označíme $N_{+,S'}$ a $N_{0,S'}$.

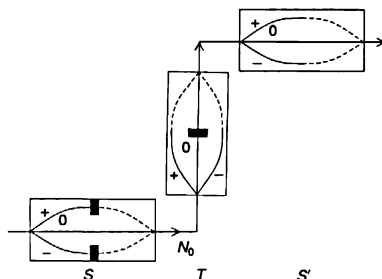
b) Předpokládejme, že máme „průhledné“ detektory, které můžeme umístit do cesty svazkům $+$ a $-$ přístroje T .

Vlastnost těchto detektorů spočívá v tom, že signalizují průchod částice, ale nemění její spinový stav. Kromě toho ani hybnost částice se zřetelně nezmění v tom smyslu, že její trajektorie v přístroji zůstane stejná v přítomnosti detektoru i bez něho. Umístíme-li detektory v postavení $+$ a $-$ přístroje T (cesta 0 je zablokována), jaké můžeme očekávat počty částic $N_{+,T}$, $N_{-,T}$, $N_{+,S'}$ a $N_{0,S'}$, vychází-li z přístroje S N_0 částic?

c) Jak se změní výsledek pro $N_{+,S'}$ v popsaném pokusu, jestliže se po jeho provedení zjistí, že počty $N_{+,T}$ a $N_{-,T}$ nebyly registrovány?

d) Je-li účinnost každého detektoru rovna 50 % (tj. zaznamenává jen polovinu celkového počtu prolétajících částic), čemu budou rovny hodnoty $N_{+,S'}$ a $N_{0,S'}$?

e) Čemu budou rovny počty $N_{+,S'}$ a $N_{0,S'}$, odblokujeme-li stavy $+S$ a $-S$, odstraníme-li detektory z přístroje T a z přístroje S vychází N_0 částic? Svazek považujte za nepolarizovaný.



4 Spin 1/2

4.1 TRANSFORMACE AMPLITUD

4.2 TRANSFORMACE DO POOTOČENÉ SOUSTAVY SOUŘADNIC

4.3 ROTACE KOLEM OSY z

4.4 ROTACE O 180° A 90° KOLEM OSY y

4.5 ROTACE KOLEM OSY x

4.6 LIBOVOLNÉ ROTACE

4.1 TRANSFORMACE AMPLITUD

V předcházející kapitole jsme na příkladu systému se spinem 1 naznačili obecné principy kvantové mechaniky:

1. Libovolný stav ψ lze popsat udáním amplitud toho, že se nachází v každém z báзовých stavů.
2. Amplitudu přechodu z jednoho stavu do druhého lze obecně psát jako součet určitého počtu členů, přičemž každý člen představuje součin amplitudy přechodu do jednoho z báзовých stavů a amplitudy přechodu z tohoto báзовého stavu do konečného stavu. Každý báзовý stav přispívá do součtu jedním sčítancem

$$\langle \chi | \psi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (4.1)$$

3. Báзовé stavy jsou navzájem ortogonální: Nacházíme-li se v jednom z nich, je amplituda toho, že se nacházíme v jiném, nulová

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (4.2)$$

4. Amplituda přechodu z jednoho stavu do druhého je komplexně sdružená s amplitudou opačného procesu

$$\langle \chi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \chi \rangle. \quad (4.3)$$

V krátkosti jsme zmínili i to, že pro stavy nemusí existovat pouze jedna báze a že rovnici (4.1) můžeme použít pro přechod z jedné báze do druhé. Představme si např., že známe amplitudy $\langle iS | \psi \rangle$ nalezení stavu ψ v každém ze stavů i bázevého systému S , ale pak se rozhodne, že bude lepší popsat daný stav pomocí jiného souboru bázevých stavů, řekněme pomocí stavů j patřících do báze T . V obecném výrazu (4.1) můžeme χ nahradit jT a dostaneme formuli

$$\langle jT | \psi \rangle = \sum_i \langle jT | iS \rangle \langle iS | \psi \rangle. \quad (4.4)$$

Amplitudy nalezení stavu ψ v bázevých stavech (jT) souvisejí s amplitudami jeho výskytu v bázevých stavech (iS) prostřednictvím souboru koeficientů $\langle jT | iS \rangle$. Máme-li N bázevých stavů, je takových koeficientů N^2 . Zmíněný soubor se často nazývá *transformační matice přechodu* z S do T reprezentace. Z matematické stránky vypadá rovnice (4.4) dost hrozně, ale změníme-li trochu označení, uvidíme, že to s ní není tak zlé. Nazveme-li C_i amplitudou toho, že se stav ψ nachází v bázevém stavu iS , tj. $C_i = \langle iS | \psi \rangle$, a C'_j označíme odpovídající amplitudu pro bázevý systém T , tj. $C'_j = \langle jT | \psi \rangle$, můžeme rovnici (4.4) psát ve tvaru

$$C'_j = \sum_i R_{ji} C_i, \quad (4.5)$$

kde R_{ji} znamená totéž co $\langle jT | iS \rangle$. Každá amplituda C'_j je rovna součtu přes všechna i koeficientů R_{ji} násobených příslušnou amplitudou C_i . Má tentýž tvar jako transformace vektoru z jedné soustavy souřadnic do druhé.

Abychom se příliš dlouho nezabývali jen samotným abstraktním výkladem, uvedli jsme pro částici se spinem 1 transformační koeficienty pro několik příkladů, abyste si mohli prakticky vyzkoušet, jak se s nimi pracuje. Na druhé straně v sobě kvantová mechanika skrývá jednu krásnou vlastnost: Na základě vlastnosti symetrie prostoru vzhledem k otáčení a obvyčejného faktu, že máme tři stavy, lze tyto koeficienty určit pouhým abstraktním uvažováním. Seznámíme-li vás s příslušným postupem v tomto raném stádiu, riskujeme, že se utopíte v novém moři abstrakcí ještě dříve než se vrátíme „zpět na zem“. Ale je to tak krásné, že se do toho tak či onak pustíme.

V této kapitole vám ukážeme, jak lze odvodit transformační rovnice pro částice se spinem $1/2$ ¹³⁾. Tomuto případu jsme dali přednost před spinem 1, neboť je do jisté míry jednodušší. Naším úkolem je určit koeficienty R_{ji} pro částici nebo atomový systém, který se v Sternově-Gerlachově přístroji štěpí na dva svazky. Všechny koeficienty pro transformaci z jedné reprezentace do druhé odvodíme čistou úvahou – když vyjdeme z několika předpokladů. Nějaké předpoklady jsou vždy potřebné, aby se logické myšlení mohlo uplatnit. Ačkoliv naše argumentace bude abstraktní a trochu nepřehledná, výsledek, který dostaneme, lze poměrně jednoduše formulovat a snadno pochopit – a výsledek, to je to nejdůležitější. Pokud se vám zachce, můžete to považovat za určitý druh „kulturní“ odbočky. Ve skutečnosti jsme vše narafčili tak, že ke všem zde odvozeným podstatným výsledkům dospějeme v případě potřeby nějakým jiným způsobem v dalších kapitolách. Takže nemusíte mít strach, že ztratíte návaznost v našem vysvětlování kvantové mechaniky, vynecháte-li tuto kapitolu úplně nebo si ji prostudujete někdy později. Odbočka je „kulturní“ v tom smyslu, že jejím cílem je ukázat nejen zajímavost principů kvantové

¹³⁾ Tato kapitola představuje trochu dlouhý a abstraktní odbočení od hlavní linie výkladu a nepřináší žádnou myšlenku, k níž bychom v dalších kapitolách nedospěli jinou cestou. Proto ji můžete přeskóčit nebo se k ní vrátit později, budete-li mít zájem.

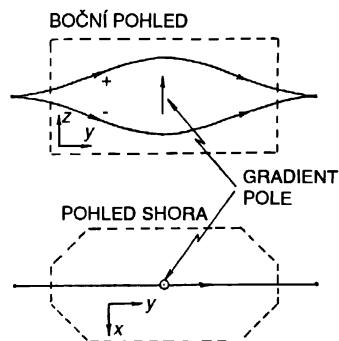
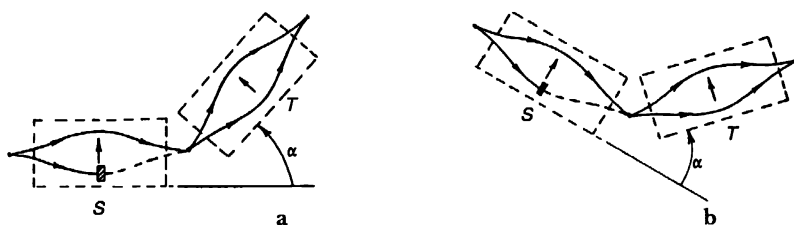
mechaniky, ale i jejich tak velkou hloubku, že stačí přidat jen několik dodatečných hypotéz o struktuře prostoru, abychom uměli vydedukovat ohromné množství vlastností fyzikálních systémů. Je také důležité, abychom věděli, odkud pocházejí různé důsledky kvantové mechaniky, protože dokud jsou naše zákony fyziky neúplné (a my víme, že jsou), je vždy zajímavé si vyjasnit, kde jsou místa, v nichž naše teorie nesouhlasí s experimentem – zda tam, kde naše logika stojí na pevných základech nebo kde je vratká. Až dosud se zdá, že právě tam, kde naše logické myšlení nabývá nejabstraktnější formy, dává vždy správné výsledky – v souladu s experimentem. Jen když se snažíme vytvořit konkrétní modely vnitřní struktury elementárních částic a jejich interakcí, nejsme schopni najít teorii, která je s nimi vždy ve shodě. Teorii, kterou se chystáme popsat, potvrdil experiment ve všech případech, v nichž se prověřovala – pro podivné částice a také pro elektrony, protony atd.

Dříve než budeme pokračovat, ještě malá poznámka vzhledem k jednomu nepřijemnému, ale důležitému bodu: Není možné určit koeficienty R_{ji} univerzálně, protože vždy existuje jistá libovůle pro amplitudy pravděpodobnosti. Máme-li soubor amplitud libovolného druhu, např. amplitudy dopadu na určité místo pro velké množství různých drah, a vynásobíme-li každou jednotlivou dráhu tímž fázovým faktorem, řekněme $e^{i\delta}$, dostaneme jiný, stejně dobrý soubor. Takže když chceme, můžeme v jakémkoliv daném problému libovolně změnit fázi všech amplitud.

Předpokládejme, že počítáme nějakou pravděpodobnost danou součtem několika amplitud, řekněme $(A + B + C + \dots)$, z něhož vezmeme druhou mocninu absolutní hodnoty. Pak někdo jiný počítá tutéž věc a vezme druhou mocninu modulu součtu amplitud $(A' + B' + C' + \dots)$. Jsou-li všechny A', B', C', \dots rovny A, B, C, \dots až na faktor $e^{i\delta}$, budou všechny pravděpodobnosti, které oba dostaneme ze čtverců modulů, přesně stejné, protože $(A' + B' + C' + \dots)$ je pak rovno $e^{i\delta}(A + B + C + \dots)$. Nebo si představme, že jsme např. něco počítali pomocí rovnice (4.1), ale pak bychom najednou změnili všechny fáze určitého bázevého systému. Každá z amplitud $\langle i | \psi \rangle$ by byla vynásobena tímž faktorem $e^{i\delta}$. Podobně by se o faktor $e^{i\delta}$ změnily i amplitudy $\langle i | \chi \rangle$, které jsou však komplexně sdružené s amplitudami $\langle \chi | i \rangle$, takže by byly vynásobeny faktorem $e^{-i\delta}$. Hodnoty $+i\delta$ a $-i\delta$ v exponentu se zruší, a tak dostaneme stejný výraz, jako jsme měli předtím. Platí tedy obecné pravidlo, že změníme-li všechny amplitudy o tutéž fázi vzhledem k danému bázevému systému nebo změníme o tutéž fázi dokonce jen *všechny* amplitudy v libovolné úloze, nic se nestane. Při výběru fází v naší transformační matici máme tedy jistou volnost. Čas od času využijeme možnosti takového libovolného výběru, přičemž budeme postupovat podle obecně přijatých dohod.

4.2 TRANSFORMACE DO POTOČENÉ SOUSTAVY SOUŘADNIC

Opět uvažujme vylepšený Sternův-Gerlachův přístroj, který jsme popsali v předcházející kapitole. Zleva vstupující svazek částic se spinem 1/2 se obecně štěpí na *dva* paprsky, jak je schématicky znázorněno na *obr. 4.1*. (Pro spin 1 jsme měli tři paprsky.) Tak jako předtím, oba rozštěpené svazky opět spojíme do jednoho, pokud bychom jednomu nebo druhému z nich nepřehradili dráhu v půli cesty překážkou. Šipka na obrázku označuje směr, v němž narůstá *velikost* magnetického pole – řekněme k magnetickému pólu s ostrou hranou. Tato šipka bude zároveň reprezentovat směr *nahoru* v libovolném zvoleném přístroji. Je s ním pevně spojena, což nám v případě použití několika přístrojů dovolí najednou označit jejich vzájemné orientace. Zároveň předpokládáme, že v každém magnetu je směr magnetického pole vždy stejný vzhledem k šipce.


 Obr. 4.1 Pohled shora a ze strany na vylepšený Sternův-Gerlachův přístroj se svazky částic se spinem $1/2$


Obr. 4.2 Dva ekvivalentní experimenty

Budeme říkat, že atomy v horním svazku jsou v soustavě (+) *vzhledem k dotyčnému přístroji* a atomy z dolního svazku jsou v soustavě (-). (Pro částice se spinem $1/2$ neexistuje stav nula.)

Nyní si představme, že vedle sebe umístíme dva modifikované Sternovy-Gerlachovy přístroje, jak ukazuje *obr. 4.2a*. První z nich, který nazveme S , můžeme použít k přípravě čistého (+ S) nebo čistého (- S) stavu tak, že zastavíme jednou první, jednou druhý svazek. (Na obrázku se připravuje čistý (+ S).) Ať je částice vycházející z S v libovolném stavu, vždy má určitou amplitudu toho, že se ocitne v (+ T) nebo v (- T) svazku druhého přístroje. Takové amplitudy existují ve skutečnosti čtyři: amplituda přechodu z (+ S) do (+ T), z (+ S) do (- T), z (- S) do (+ T) a z (- S) do (- T). Jsou to právě ty čtyři koeficienty transformační matice R_{ji} pro přechod z S do T reprezentace. První přístroj můžeme pokládat za zařízení připravující určitý stav v jedné reprezentaci, který druhý přístroj analyzuje pomocí aparátu druhé reprezentace. Otázka, kterou chceme odpovědět, zní takto: Byl-li atom připraven v určitém stavu, řekněme ve stavu (+ S) (zastavením jednoho ze svazků v přístroji S), jakou má šanci projít druhým přístrojem T , je-li tento nastaven např. na stav (- T)? Výsledek bude samozřejmě záviset na úhlech mezi systémy S a T .

Měli bychom vysvětlit, proč máme naději, že najdeme koeficienty R_{ji} logickou úvahou. Je téměř neuvěřitelné, že má-li částice spin orientovaný ve směru osy z , existuje určitá naděje najít tutéž částici se spinem směřujícím do kladného směru osy x nebo do jiného libovolného směru. Je to téměř nemožné, ale ne zcela. Zbývá jen *jediná* cesta, jak to uskutečnit. Tedy existuje-li, je to důvod, proč můžeme tento jedinečný způsob najít.

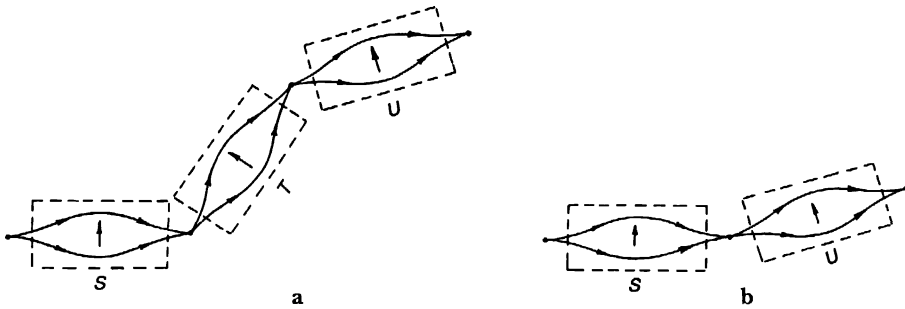
První argument, který můžeme uvést, je tento. Představme si experimentální zařízení jako na *obr. 4.2a*, v němž máme dva přístroje S a T , přičemž T je otočen vzhledem k S o úhel α směrem nahoru. Skrz S necháme projít jen svazek (+) a skrz T svazek (-). Změříme určitou pravděpodobnost toho, že částice vycházející z S projdou T . Nyní zvažujeme jiný experiment s přístrojem podle *obr. 4.2b*. *Vzájemná* orientace S a T je stejná, ale celý systém je umístěn v prostoru pod jiným

úhlem. Budeme *předpokládat*, že u obou zmíněných experimentů je stejná pravděpodobnost toho, že se částice v čistém stavu vzhledem k S dostane do nějakého konkrétního stavu vzhledem k T . Jinými slovy, předpokládáme, že výsledek jakéhokoliv experimentu tohoto druhu je stejný (že *fyzika je stejná*) bez ohledu na to, jak je *celý* přístroj orientován v prostoru. (Řeknete: „To je samozřejmé“. Ale i tak je to jen domněnka a je správná jen tehdy, když to skutečně nastává.) To znamená, že koeficienty R_{ji} závisí jen na vzájemné orientaci S a T v prostoru a ne na jejich absolutní poloze. Vyjádřeno jiným způsobem, R_{ji} závisí jen na *rotaci*, která převádí S na T , protože to, co mají oba *obr. 4.2a* a *4.2b* společné, je evidentně trojrozměrné otočení, které dostane přístroj S do polohy přístroje T . Je-li transformační matice pouze funkcí rotace jako v tomto případě, nazývá se *rotační matice*.

K dalšímu kroku budeme potřebovat ještě jednu malou informaci. Představme si, že za T postavíme pod libovolným úhlem třetí přístroj, který nazveme U (*obr. 4.3a*). (Začíná to vypadat strašně, ale to je právě ta zábava, kterou poskytuje abstraktní myšlení – nakreslíme pár čar můžeme uskutečňovat nejfantastičtější experimenty!) Jak vypadá transformace $S \rightarrow T \rightarrow U$? Ve skutečnosti se ptáme, jaká je amplituda přechodu z nějakého stavu vzhledem k S do nějakého libovolného stavu vzhledem k U , známe-li transformace z S do T a z T do U . Nejdříve budeme zkoumat experiment, v němž jsou oba kanály přístroje T otevřeny. Odpověď dostaneme, použijeme-li rovnici (4.5) dvakrát po sobě. Pro přechod z S do T reprezentace máme

$$C'_j = \sum_i R_{ji}^{TS} C_i, \quad (4.6)$$

kde jsme koeficientům R_{ji} přidali index TS , abychom je uměli odlišit od koeficientů R_{ji}^{UT} , které budou popisovat přechod od T k U .



Obr. 4.3 Je-li T „otevřený dokořán,“ je b) ekvivalentní a)

Označíme-li C''_k amplitudy toho, že se částice ocitne v básových stavech U reprezentace, můžeme opakovaným využitím rovnice (4.5) najít souvislost mezi nimi a T amplitudami; dostaneme

$$C''_k = \sum_j R_{kj}^{UT} C'_j. \quad (4.7)$$

Zkombinováním rovnic (4.6) a (4.7) získáme transformaci z S přímo do U . Dosadíme-li za C'_j v rovnici (4.7) jejich vyjádření pomocí rovnice (4.6), máme

$$C''_k = \sum_j R_{kj}^{UT} \sum_i R_{ji}^{TS} C_i. \quad (4.8)$$

Jelikož index i se v R_{kj}^{UT} nevyskytuje, můžeme přesunout sumaci přes i na začátek a psát

$$C_k'' = \sum_i \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS} C_i. \quad (4.9)$$

To je vztah pro dvojnásobnou transformaci.

Všimněme si ale, že pokud nezastavíme ani jeden ze svazků v přístroji T , vychází z něj částice v témže stavu, v jakém do něj vstoupila. Stejně dobře jsme mohli provést transformaci z S přímo do U reprezentace. Situace je totiž ekvivalentní případu, v němž postavíme přístroj U hned je $Stak$ jako na *obr. 4.3b*. Pro takové uspořádání bychom napsali

$$C_k'' = \sum_i R_{ki}^{US} C_i, \quad (4.10)$$

kde transformaci popisují koeficienty R_{ki}^{US} . Je jasné, že rovnice (4.9) a (4.10) by měly dát tytéž amplitudy C_k'' , a to bez ohledu na to, jaký byl počáteční stav φ daný amplitudami C_i . Proto musí být splněna rovnost

$$R_{ki}^{US} = \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS}. \quad (4.11)$$

Jinak řečeno, rotační matici R_{ki}^{US} příslušící libovolné rotaci referenční báze $S \rightarrow U$, na niž se díváme jako na složení dvou za sebou následujících otočení $S \rightarrow T$ a $T \rightarrow U$, můžeme získat pomocí matic obou částečných rotací podle rovnice (4.11). Můžeme ji odvodit i přímo z rovnice (4.1), neboť představuje jen jiný zápis výrazu

$$\langle kU|iS \rangle = \sum_j \langle kU|jT \rangle \langle jT|iS \rangle.$$

Pro přesnost bychom měli připojit následující doplňující poznámky. Nejsou nijak zvlášť důležité, takže chcete-li, můžete v klidu přejít k další stati. Je třeba přiznat, že to, co jsme řekli, není docela správné. Ve skutečnosti nemůžeme tvrdit, že rovnice (4.9) a (4.10) musí vést k *přesně* stejným amplitudám. Jen *fyzikální* výsledky musí být tytéž; všechny amplitudy by se mohly lišit o obecný fázový faktor typu $e^{i\delta}$ aniž by se změnilы výsledky nějakých výpočtů týkajících se reálného světa. Takže jediné, co můžeme místo rovnice (4.11) říci, je, že

$$e^{i\delta} R_{ki}^{US} = \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS}, \quad (4.12)$$

kde δ je *nějaká* reálná konstanta. Dodatkový faktor $e^{i\delta}$ znamená, že všechny amplitudy, které dostaneme použitím matice R_{ki}^{US} , by se mohly lišit o tutéž fázi $e^{-i\delta}$ od amplitud, které bychom našli složením dvou rotací R^{US} a R^{TS} . Víme, že vůbec nezáleží na tom, zda změníme všechny amplitudy o tutéž fázi, takže kdybychom chtěli, nemuseli bychom ji vůbec brát v úvahu. Ukazuje se však, že definujeme-li všechny naše rotační matice určitým způsobem, doplňkový fázový faktor se nikdy neobjeví - δ v rovnici (4.12) bude vždy rovno nule. Ačkoliv pro zbytek našich úvah to není důležité, uvedeme rychlý důkaz využitím matematické věty o determinantech. (Pokud toho o determinantech ještě mnoho nevíte, nestarejte se o důkaz a ihned přejděte k definici (4.15).)

V první řadě bychom měli zmínit, že rovnice (4.11) je matematickou definicí součinu dvou matic. (Je prostě pohodlné říci: „ R^{US} je součinem R^{UT} a R^{TS} .“) Za druhé, v matematicce existuje

věta (kterou si můžete pro matice typu 2×2 , jaké používáme, snadno dokázat), která říká, že determinant součinu dvou matic je součinem jejich determinantů. Použitím této věty na rovnici (4.12) dostaneme

$$e^{2i\delta}(\det R^{US}) = (\det R^{UT})(\det R^{TS}). \quad (4.13)$$

(Indexy vynecháváme, protože nám nic užitečného neříkají.) Ano, 2δ má své opodstatnění. Vzpomeňte si, že pracujeme s maticemi typu 2×2 ; každý prvek matice R_{ki}^{US} je vynásoben faktorem $e^{i\delta}$, takže v determinantu stojí u každého součinu (který je složen ze dvou členů) činitel $e^{2\delta}$. Vezměme druhou odmocninu rovnice (4.13) a vydělme jí rovnici (4.12); dostaneme

$$\frac{R_{ki}^{US}}{\sqrt{\det R^{US}}} = \sum_i \frac{R_{kj}^{UT}}{\sqrt{\det R^{UT}}} \frac{R_{ji}^{TS}}{\sqrt{\det R^{TS}}}. \quad (4.14)$$

Fázový faktor, který byl navíc, zmizel.

Dále se ukazuje, že chceme-li, aby všechny naše amplitudy byly normovány v libovolně zvolené reprezentaci (což znamená, jak si vzpomínáte, že $\sum_i \langle \varphi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle = 1$), budou determinanty všech rotačních matic čistě imaginárními čísly typu $e^{i\alpha}$. (Nebudeme to dokazovat; sami uvidíte, že to vždy tak vychází.) Chceme-li tedy, můžeme vybrat všechny rotační matice R tak, aby $\det R = 1$, čímž její fáze bude jednotková. Postup vypadá takto. Představme si, že jsme nějakým způsobem našli rotační matici R . Do standardní formy ji upravíme podle pravidla definovaného tímto způsobem

$$R_{\text{stand}} = \frac{R}{\sqrt{\det R}}. \quad (4.15)$$

Můžeme to udělat, protože chceme-li dostat fáze, jaké potřebujeme, prostě jen vynásobíme každý prvek R tímž faktorem. Dále budeme vždy předpokládat, že jsme naše rotační matice upravili do standardní formy; pak můžeme rovnici (4.11) používat bez jakýchkoliv dodatečných fázových faktorů.

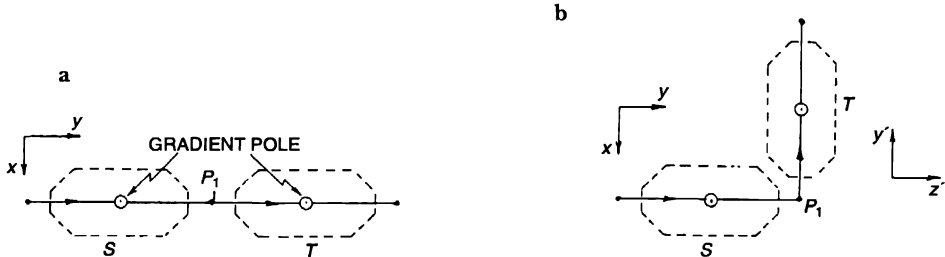
4.3 ROTACE KOLEM OSY z

Nyní jsme připraveni najít transformační matici R_{ji} mezi dvěma různými reprezentacemi. Naše pravidlo skládání rotací a předpoklad, že v prostoru neexistuje privilegovaný směr, jsou těmi potřebnými klíči k tomu, abychom uměli najít matici libovolné rotace. Existuje jen *jediné* řešení. Začneme transformací, která odpovídá otočení kolem osy z. Představme si, že máme dva přístroje S a T ležící za sebou v přímce takovým způsobem, že jejich osy jsou rovnoběžné a směřují nahoru kolmo ke stránce knihy (obr. 4.4a). Naši osu z vybereme v tomto směru. Pokud se svazek v přístroji S vychýlí nahoru (směrem + z), bude se určitě chovat stejně i v přístroji T . Podobně prochází-li v S spodní dráhou, půjde jí i v T . Uvažujme však případ, že by byl přístroj T pootočen o nějaký úhel, ale tak, že jeho osa je stále rovnoběžná s osou přístroje S (obr. 4.4b). Intuitivně bychom řekli, že (+) svazek v S projde taktéž do (+) svazku v T , protože pole a jejich gradienty jsou orientovány ve stále stejném fyzikálním směru. A naše tvrzení by bylo zcela správné. Také (-) svazek v S by prošel do (-) svazku v T . Stejný výsledek platí pro libovolnou orientaci T v rovině xy přístroje S .

Co nám to napovídá o vztahu $C'_+ = \langle +T | \psi \rangle$, $C'_- = \langle -T | \psi \rangle$ na jedné straně a $C_+ = \langle +S | \psi \rangle$, $C_- = \langle -S | \psi \rangle$ na straně druhé? Mohli byste vyvodit závěr, že libovolná rotace „referenční soustavy pro bázevé stavy“ kolem osy z ponechává amplitudy C_{\pm} ve stavech nahoru a dolů nezměněny a napsali byste $C'_+ = C_+$ a $C'_- = C_-$ – to je však *nesprávně*. Jediné, co *můžeme* o takových pootočeních říci, je to, že pro přístroje S a T jsou pravděpodobnosti objevení částice v horním svazku stejné. To znamená

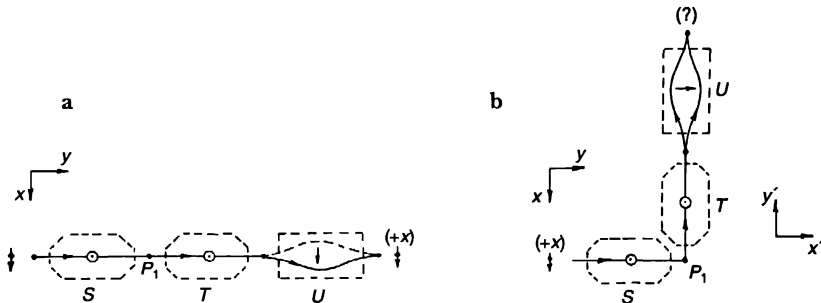
$$|C'_+| = |C_+| \text{ a } |C'_-| = |C_-|.$$

Nemáme právo prohlásit, že *fáze* amplitud vztahujících se k přístroji T se nesmí lišit pro dvě různé orientace a a b na obr. 4.4.



Obr. 4.4 Otočení o 90° kolem osy z

Dvojice přístrojů v částech a a b na obr. 4.4 skutečně představuje odlišné zařízení, o čemž se přesvědčíme následujícím způsobem. Představme si, že před S umístíme přístroj, který připravuje čistý stav (+x). (Osa x míří na obrázku směrem dolů.) Částice v tomto stavu by se v S sroztěpily do svazků (+z) a (-z), ale na výstupu z S (v bodě P1) by se oba paprsky spojily a vznikl by opět stav (+x). Totéž by se stalo i v T. Kdybychom za T postavili třetí přístroj U tak, aby jeho osa směřovala do směru (+x), všechny částice by si vybraly v U svazek (+) (obr. 4.5a). Nyní uvažujme, co se stane, otočíme-li T a U společně o 90° do polohy naznačené na obr. 4.5b.



Obr. 4.5 Částice ve stavu (+x) se chová jinak v a) a b)

Přístroj T opět propouští vše, co do něj vchází, takže částice vstupující do U jsou ve stavu (+x) vzhledem k S. Avšak U nyní analyzuje stav (+y) vzhledem k S, a to už je něco docela jiného než předtím. (Z důvodů symetrie bychom očekávali, že projde pouze polovina částic.)

Co se mohlo změnit? Přístroje T a U jsou vůči sobě ve stále stejném fyzikálním vztahu. Může se změnit fyzika jen proto, že T a U jsou orientovány jinak? Náš původní předpoklad to nepřipouští. V případech na obr. 4.5 (a tedy na obr. 4.4) se musí lišit *amplitudy* vzhledem k T. Musí existovat

nějaký způsob, jak se částice doví, že v bodě P_1 zahнула za roh. Jak to zařídit? Zůstává jen jedno: Velikosti C'_1 a C'_2 jsou v obou případech stejné, ale mohou – a skutečně *musí* – mít různé fáze. Docházíme k závěru, že mezi C'_+ a C_+ nutně platí vztah

$$C'_+ = e^{i\lambda} C_+$$

a podobně i pro C'_- a C_-

$$C'_- = e^{i\mu} C_-$$

kde λ a μ jsou reálná čísla, která musejí nějakým způsobem záviset na úhlu mezi S a T .

O λ a μ můžeme v této chvíli říci jedině to, že si nesmí být rovna (kromě speciálního případu na obr. 4.5a, kdy T a S jsou orientovány stejně). Viděli jsme, že změna všech amplitud o jednu a tutéž fázi s sebou nenesou žádné fyzikální důsledky. Z tohoto důvodu lze vždy k λ a μ přičíst libovolné konstantní číslo aniž by se něco změnilo. Dovoluje nám to vybrat λ a μ odlišná pouze znaménkem, tj. vždy můžeme vzít

$$\lambda' = \lambda - \frac{(\lambda + \mu)}{2}, \quad \mu' = \mu - \frac{(\lambda + \mu)}{2}.$$

Pak

$$\lambda' = \frac{\lambda}{2} - \frac{\mu}{2} = -\mu'.$$

Přijímáme konvenci¹⁴⁾, že $\mu = -\lambda$ a tím dostáváme obecné pravidlo, že rotaci referenčního přístroje o nějaký úhel kolem osy z popisuje transformace vyjádřená vztahy

$$C'_+ = e^{+i\lambda} C_+, \quad C'_- = e^{-i\lambda} C_- \quad (4.16)$$

Absolutní hodnoty jsou stejné, jen fáze se liší. Tyto fázové faktory jsou odpovědné za různé výsledky dvou experimentů na obr. 4.5.

Rádi bychom znali zákon, který spojuje λ s úhlem mezi S a T . Pro jeden případ už odpověď známe. Je-li úhel nulový, je λ takéž nula. Nyní budeme předpokládat, že blíží-li se úhel φ mezi S a T nule, je fázový posun λ spojitou funkcí úhlu φ . Je zřejmé, že to je jediná rozumná představa. Jinak řečeno, otočíme-li T kolem S z počáteční polohy (kdy oba leží na přímce) o malý úhel ε , i λ získá malou hodnotu, řekněme $m\varepsilon$, kde m je nějaké číslo. Píšeme $m\varepsilon$, neboť můžeme ukázat, že λ musí být úměrné ε . Uvažujme další přístroj T' , umístěný za T , který s ním svírá úhel ε , a tedy úhel 2ε s přístrojem S . Vzhledem k T máme

$$C'_+ = e^{i\lambda} C_+$$

a vzhledem k T' dostáváme

$$C''_+ = e^{+i\lambda} C'_+ = e^{+i2\lambda} C_+.$$

Víme však, že tentýž výsledek bychom měli dostat, umístíme-li T' přímo za S . To znamená: zdvojnásobíme-li úhel, zdvojnásobí se i fáze. Je jasné, že uvedený argument můžeme rozšířit

¹⁴⁾ Jiným způsobem se na danou operaci můžeme dívat tak, že použitím rovnice (4.15) pouze přivádíme transformaci do standardního tvaru, popsánoho ve stati 4.2.

a sestavit libovolnou rotaci postupnou aplikací nekonečně malých pootočení. Z toho vyplývá závěr, že λ je úměrné úhlu pro libovolné φ . Můžeme proto psát: $\lambda = m\varphi$.

Obecný výsledek, který jsme dostali, říká, že pro T otočené kolem osy z o úhel φ vzhledem k S platí

$$C_+' = e^{im\varphi} C_+, \quad C_-' = e^{-im\varphi} C_- \quad (4.17)$$

Pro úhel φ a pro všechny rotace, o nichž budeme v budoucnosti hovořit, přijmeme standardní dohodu, že *kladným* otočením budeme chápat *pravotočivou* rotaci kolem kladného směru souřadnicové osy. Kladný úhel φ odpovídá rotaci pravotočivého šroubu, který při šroubování postupuje v kladném směru osy z.

Nyní nám zbývá zjistit, jaké musí být m . Nejdříve bychom mohli vyzkoušet takovýto argument: Představme si, že otočíme T o 360° ; zřejmě se ocitne opět pod úhlem 0° , a proto bychom měli dostat $C_+' = C_+$, $C_-' = C_-$, což je totéž jako podmínka $e^{i2\pi m} = 1$. Máme $m = 1$. *Naše úvaha je však nesprávná!* Abychom se o tom přesvědčili, uvažujme přístroj otočený o 180° . Kdyby m bylo rovno jedné, platilo by: $C_+' = e^{i\pi} C_+ = -C_+$ a $C_-' = e^{-i\pi} C_- = -C_-$. Tím jsme však opět přišli k *původnímu* stavu. *Obě* amplitudy jsou vynásobeny faktorem -1 , což nás vrací k *původnímu* fyzikálnímu systému. (Jde opět o případ obecné změny fáze.) Znamená to, že kdyby se úhel mezi S a T na obr. 4.5b zvětšil o 180° , nedal by se systém (vzhledem k T) odlišit od 0° eventuality a částice by opět procházely stavem (+) přístroje U . Pro úhel 180° je stav (+) přístroje U stavem (-) původního přístroje S . Takže ze stavu (+) by se stal stav (-). Neudělali jsme však nic, co by *změnilo* původní stav; odpověď je proto nesprávná. Nemůže platit, že $m = 1$.

Musíme dospět k takové situaci, že pouze rotace o *úhel* 360° obnovuje tentýž fyzikální stav. Tomu vyhovuje podmínka $m = 1/2$. Právě tehdy bude prvním úhlem, který reprodukuje tentýž *fyzikální* stav, úhel 360° .¹⁵⁾ Přitom bude

$$\left. \begin{aligned} C_+' &= -C_+ \\ C_-' &= -C_- \end{aligned} \right\} 360^\circ \text{ kolem osy } z. \quad (4.18)$$

Je velmi kuriózní říkat, že otočíme-li přístrojem o 360° , dostaneme nové amplitudy. Ve skutečnosti novými nejsou, protože současná změna každého znaménka nevede k žádné nové fyzice. Kdyby se někdo rozhodl změnit všechna znaménka amplitud proto, že si představil sebe otočeného o 360° , je to v pořádku; dostane tentýž fyzikální popis¹⁶⁾. Takže naše konečná odpověď zní: Známe-li pro částici se spinem $1/2$ dvě amplitudy C_+ a C_- vzhledem k souřadnicové soustavě S a použijeme bázeový systém vztahující se k T , který dostaneme z S rotací o úhel φ kolem osy z, jsou nové amplitudy určeny pomocí starých vztahů

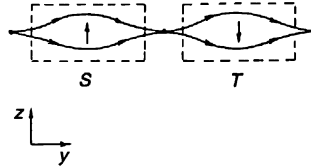
$$\left. \begin{aligned} C_+' &= e^{i\varphi/2} C_+ \\ C_-' &= e^{-i\varphi/2} C_- \end{aligned} \right\} \varphi \text{ kolem } z. \quad (4.19)$$

¹⁵⁾ Ukazuje se, že by vyhovovalo i $m = -1/2$. Z rovnic (4.17) však víme, že změna znaménka způsobuje jen obyčejnou změnu označení pro částici se spinem nahoru.

¹⁶⁾ Všimněme si, že přivede-li posloupnost malých rotací předmět nakonec do jeho počáteční orientace, vždy je možné rozlišit otočení o 360° od otočení o 0° , sledujeme-li celou historii. (Je zajímavé, že to *není* pravda pro celkovou rotaci o 720° .)

4.4 ROTACE O 180° a 90° KOLEM OSY y

Nyní se pokusíme uhádnout transformaci pro rotaci přístroje T vůči S o 180° kolem osy *kolmé* na osu z – řekněme kolem osy y . (Souřadnicové osy jsme definovali na *obr. 4.1.*) Jinými slovy uvažujeme dva identické Sternovy-Gerlachovy přístroje, z nichž druhý je vzhledem k prvnímu obrácen vzhůru nohama (*obr. 4.6.*).



Obr. 4.6 Rotace o 180° kolem osy y

Považujeme-li naše objekty za maličké magnetické dipóly, částice ve stavu (+ S), procházející prvním přístrojem po horní dráze, si ve druhém přístroji vybere taktéž horní dráhu, takže vzhledem k T bude ve stavu *minus*. (V obráceném přístroji T má opačný směr jednak gradient, jednak směr magnetického pole. Síla působící na částici s magnetickým momentem orientovaným v daném směru se nemění.) Co je nahoře vůči S , je dole vůči T . Víme, že pro takové vzájemné umístění S a T musí z transformace vyjít

$$|C_+'| = |C_-|, \quad |C_-'| = |C_+|.$$

Tak jako předtím, nemůžeme vyloučit nějaké dodatečné fázové faktory; může se ukázat, že (pro otočení o 180° kolem osy y)

$$C_+' = e^{i\beta} C_- \quad \text{a} \quad C_-' = e^{i\gamma} C_+, \quad (4.20)$$

kde β a γ je ještě třeba určit.

Co můžeme říci o rotaci o 360° kolem osy y ? Už známe odpověď pro otočení o 360° kolem osy z – amplituda být v libovolném stavu změnila znaménko. Rotace o 360° kolem jakékoliv osy nás vždy přivede zpět do původní polohy. Musí platit, že *libovolné* otočení o 360° nám dá stejný výsledek jako rotace o 360° kolem osy z : Všechny amplitudy prostě změnila znaménko. Představme si dvě za sebou následující otočení o 180° kolem osy y ; při použití rovnice (4.20) bychom měli dojít k výsledku rovnic (4.18). Jinými slovy

$$C_+'' = e^{i\beta} C_+' = e^{i\beta} e^{i\gamma} C_+ = -C_+$$

a

$$C_-'' = e^{i\gamma} C_-' = e^{i\gamma} e^{i\beta} C_- = -C_- \quad (4.21)$$

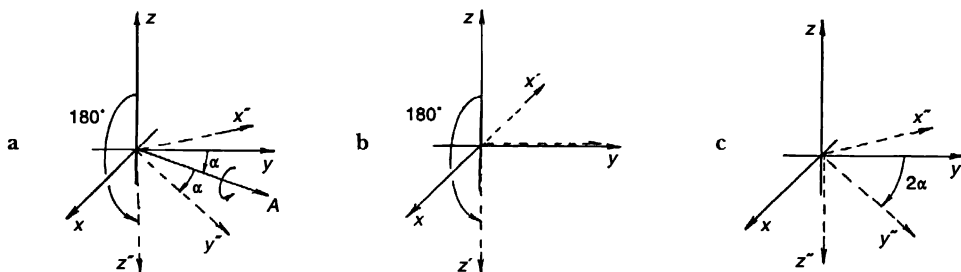
To znamená, že

$$e^{i\beta} e^{i\gamma} = -1 \quad \text{a} \quad e^{i\gamma} = -e^{-i\beta}.$$

Takže transformaci pro rotaci o 180° kolem osy y lze zapsat jako

$$C_+' = e^{i\beta} C_-, \quad C_-' = -e^{-i\beta} C_+. \quad (4.22)$$

Argumenty, které jsme právě uvedli, lze stejně dobře použít pro otočení o 180° kolem *libovolné* osy v rovině xy , ačkoliv různým osám budou samozřejmě příslušet různé hodnoty β . Mimořádně, to je to jediné, v čem se mohou lišit. Ve zvolení čísla β existuje jistá libovůle, ale je-li to už jednou určeno pro jednu osu rotace v rovině xy , je jednoznačně dáno pro jakoukoliv jinou osu. Je *věcí dohody* vybrat $\beta=0$ pro rotaci o 180° kolem osy y .



Obr. 4.7 Rotace kolem osy A je ekvivalentní otočení o 180° kolem y , za nímž následuje otočení kolem z'

Abychom dokázali, že máme skutečně volnou možnost výběru, předpokládejme, že jsme se rozhodli nepoložit β rovné nule pro otočení kolem osy y ; ukážeme, že v rovině xy existuje *nějaká jiná* osa, pro níž je odpovídající fázový faktor nulový. Najdeme fázový faktor β_A pro osu A , která svírá s osou y úhel α , jak ukazuje obr. 4.7a. (Pro přehlednost je úhel α na obrázku záporný, ale to není podstatné.) Vezmeme-li nyní přístroj T , který ležel původně v jedné přímce s S , a otočíme jej kolem osy A , budou jeho osy označené jako x'' , y'' a z'' orientovány jako na obr. 4.7a. Amplitudy vzhledem k T tak budou

$$C_+'' = e^{i\beta_A} C_-, \quad C_-'' = -e^{-i\beta_A} C_+. \quad (4.23)$$

Můžeme si představit, že tutéž orientaci dostaneme dvěma po sobě jdoucími rotacemi označenými na obrázku v částech b a c . Zaprvé, uvažujeme přístroj U otočený vůči S o 180° kolem osy y . Souřadnicové osy x' , y' a z' přístroje U jsou nakresleny na obr. 4.7b; amplitudy vzhledem k U jsou dány vztahy (4.22).

Všimněme si, že z U do T se můžeme dostat rotací kolem z -ové osy U , tj. kolem z' , jak naznačuje obr. 4.7c. Odtud lze vidět, že požadovaný úhel je dvojnásobkem úhlu α , ale v opačném směru (vzhledem k z'). Použitím transformačních vztahů (4.19) s úhlem $\varphi = -2\alpha$ dostáváme

$$C_+'' = -e^{-i\alpha} C_+', \quad C_-'' = e^{+i\alpha} C_-' . \quad (4.24)$$

Kombinací rovnic (4.24) a (4.22) máme

$$C_+'' = e^{i(\beta-\alpha)} C_-, \quad C_-'' = -e^{-i(\beta-\alpha)} C_+. \quad (4.25)$$

Tyto amplitudy musí být samozřejmě identické s těmi, které jsme dostali v rovnicích (4.23). Takže mezi β_A na jedné straně a β a α na straně druhé musí platit vztah

$$\beta_A = \beta - \alpha. \quad (4.26)$$

To znamená, že je-li úhel α mezi přímkou A a osou y (přístroje S) roven β , bude β_A v transformaci pro rotaci o 180° kolem A nulové: $\beta_A = 0$.

Jestliže pro *nějakou* osu kolmou na osu z bude $\beta = 0$, nic nám nebrání vybrat ji za osu y . Je to čistě věc *dohody*, a my ji přijmeme pro obecný případ. Jako výsledek pro otočení o 180° kolem osy y dostáváme

$$\left. \begin{array}{l} C'_+ = C_- \\ C'_- = -C_+ \end{array} \right\} 180^\circ \text{ kolem } y. \quad (4.27)$$

Dokud se ještě zabýváme osou y , zeptejme se, jak vypadá transformační matice pro rotaci o 90° kolem osy y . Jsme schopni ji najít, neboť víme, že dvě po sobě jdoucí otočení o 90° kolem téže osy musí být ekvivalentní jedné rotaci o 180° . Napíšeme transformaci pro 90° v obecnějším tvaru

$$C'_+ = aC_+ + bC_-, \quad C'_- = cC_+ + dC_- \quad (4.28)$$

Druhé otočení o 90° kolem téže osy by bylo popsáno týmiž koeficienty

$$C''_+ = aC'_+ + bC'_-, \quad C''_- = cC'_+ + dC'_- \quad (4.29)$$

Spojením rovnic (4.28) a (4.29) docházíme k vyjádření

$$\begin{aligned} C''_+ &= a(aC_+ + bC_-) + b(cC_+ + dC_-) \\ C''_- &= c(aC_+ + bC_-) + d(cC_+ + dC_-). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Ze vztahu (4.27) však víme, že

$$C''_+ = C_-, \quad C''_- = -C_+.$$

takže musí platit

$$\begin{aligned} ab + bd &= 1 \\ a^2 + bc &= 0 \\ ac + cd &= -1 \\ bc + d^2 &\neq 0. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Tyto čtyři rovnice stačí k tomu, abychom určili všechny neznámé: a , b , c a d . Není těžké je vyřešit. Podívejme se na druhou a čtvrtou rovnici. Vidíme, že $a^2 = d^2$, což znamená, že buď $a = d$, nebo $a = -d$. Poslední možnost však odpadá, protože pak by nebyla splněna první rovnice. Takže $d = a$. Pomocí toho ihned zjistíme, že $b = 1/2 a$ a $c = -1/2 a$. Nyní máme vše vyjádřeno pomocí a . Dosadíme-li tyto vztahy např. do druhé rovnice, dostaneme

$$a^2 - \frac{1}{4a^2} = 0 \quad \text{neboli} \quad a^4 = \frac{1}{4}.$$

Tato rovnice má čtyři různá řešení, z nichž však jen dvě vedou k standardní hodnotě determinantu. Můžeme zvolit $a = 1/\sqrt{2}$; pak¹⁷⁾

¹⁷⁾ Druhé řešení změní všechna znaménka u a , b , c a d a odpovídá rotaci o -270° .

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$c = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad d = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Jinými slovy, transformační matice má pro dva přístroje S a T za předpokladu, že T je vůči S otočen o 90° kolem osy y , tvar

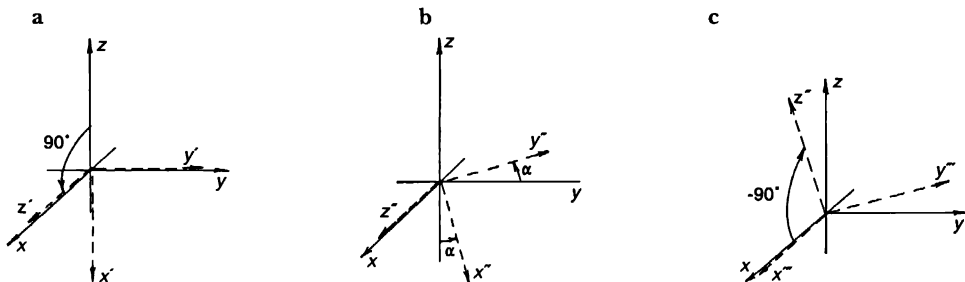
$$\left. \begin{aligned} C_+^{\prime} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ + C_-) \\ C_-^{\prime} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-C_+ + C_-) \end{aligned} \right\} 90^\circ \text{ kolem } y. \quad (4.32)$$

Samozřejmě, mohli bychom tyto rovnice řešit i vzhledem k C_+ a C_- , čímž bychom našli transformaci pro rotaci o -90° kolem y . Vyměníme-li ještě i čárky, dojdeme k závěru, že

$$\left. \begin{aligned} C_+^{\prime} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ - C_-) \\ C_-^{\prime} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ + C_-) \end{aligned} \right\} -90^\circ \text{ kolem } y. \quad (4.33)$$

4.5 ROTACE KOLEM OSY x

Může vás napadnout myšlenka: „Začíná to být směšné. Co budeme zkoumat dál – otočení o 47° kolem osy y , potom o 33° kolem osy x , a tak dále, donekonečna?“ Ne, jsme už téměř na konci. Vystačíme se dvěma transformacemi – pro 90° kolem osy y a pro libovolný úhel kolem z (což jsme, jak si vzpomínáte, dělali jako první), s nimiž můžeme uskutečňovat všechny rotace, jaké jen chceme.



Obr. 4.8 Otočení o úhel α kolem osy x je ekvivalentní
 a) rotaci o $+90^\circ$ kolem y , za kterou následuje,
 b) otočení o α kolem z' a nakonec,
 c) rotace o 90° kolem y''

Na ukázkou předpokládejme, že nás zajímá otočení o úhel α kolem osy x . Umíme si poradit s rotací o úhel α kolem z , ale nyní ji chceme provést kolem x . Jak ji dostaneme? Nejdříve otočíme osu z do osy x – což je rotace o úhel $+90^\circ$ kolem y (obr. 4.8). Pak vykonáme otočení o α kolem z' a nakonec provedeme rotaci o -90° kolem y'' . Konečný výsledek těchto tří rotací je tentýž jako otočení o úhel α kolem osy x . Taková je vlastnost prostoru.

(Je těžké si intuitivně představit, jaké výsledky přinese takovéto skládání rotací. Divná je skutečnost, že ačkoliv žijeme v trojrozměrném prostoru, máme problémy orientovat se, co se stane, otočíme-li se nejdříve sem a potom tam. Kdybychom snad byli rybami nebo ptáky a měli reálnou představu o tom, jaké důsledky s sebou přináší děláním přemetů a salt v prostoru, snáze bychom podobné věci chápali.)

Ať je to jak je, odvoďme si transformaci pro otočení o úhel α kolem osy x pomocí toho, co známe. Při první rotaci o $+90^\circ$ kolem y se amplitudy chovají podle rovnic (4.32). Nazveme-li otočené osy x' , y' a z' , přivede nás následující rotace o úhel α kolem x'' , y'' a z'' k souřadnicové soustavě x''' , y''' a z''' , pro níž

$$C_+'' = e^{+i\alpha/2} C_+', \quad C_-'' = e^{-i\alpha/2} C_-'$$

Poslední rotací o úhel -90° kolem y'' dospějeme k x''' , y''' a z''' ; podle (4.33) platí

$$C_+''' = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+'' - C_-''), \quad C_-''' = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+'' + C_-'')$$

Spojením posledních dvou transformací dostaneme

$$C_+''' = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{+i\alpha/2} C_+' - e^{-i\alpha/2} C_-')$$

$$C_-''' = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{+i\alpha/2} C_+' + e^{-i\alpha/2} C_-')$$

Dosadíme-li za C_+' a C_-' z rovnice (4.32), dojdeme ke konečné transformaci

$$C_+''' = \frac{1}{2} \{ e^{+i\alpha/2} (C_+ + C_-) - e^{-i\alpha/2} (-C_+ + C_-) \} \quad C_-''' = \frac{1}{2} \{ e^{+i\alpha/2} (C_+ + C_-) + e^{-i\alpha/2} (-C_+ + C_-) \}.$$

Uvedené vztahy můžeme trochu zjednodušit, když si uvědomíme, že

$$e^{i\vartheta} + e^{-i\vartheta} = 2 \cos \vartheta \quad \text{a} \quad e^{i\vartheta} - e^{-i\vartheta} = 2i \sin \vartheta.$$

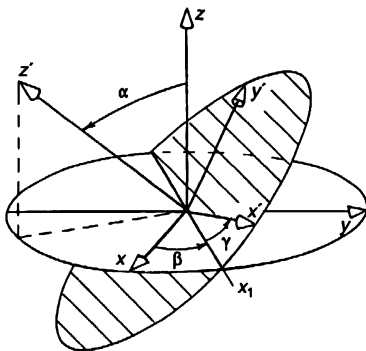
Máme

$$\left. \begin{aligned} C_+''' &= \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right) C_+ + i \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right) C_- \\ C_-''' &= i \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right) C_+ + \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right) C_- \end{aligned} \right\} \alpha \text{ kolem } x. \quad (4.34)$$

To je naše transformace pro rotaci o libovolný úhel α kolem osy x . Je jen o něco složitější než ostatní.

4.6 LIBOVOLNÉ ROTACE

Nyní už vidíme, jak to bude s *libovolným* úhlem. Nejdříve si všimněte, že každou vzájemnou orientaci dvou souřadnicových soustav lze popsat pomocí tří úhlů (obr. 4.9). Necht' jsou osy x' , y' a z' orientovány vůči x , y a z libovolným způsobem, vždy můžeme vzájemný vztah mezi oběma soustavami souřadnic vyjádřit pomocí tří Eulerových úhlů α , β a γ , které definují tři na sebe navazující rotace převádějící soustavu x , y , z do soustavy x' , y' , z' . Vyjděme z x , y , z a otočme naši souřadnicovou soustavu o úhel β kolem osy z tak, že osa x splyne s přímkou x_1 .



Obr. 4.9 Libovolnou vzájemnou orientaci dvou souřadnicových soustav x' , y' , z' a x , y , z lze definovat pomocí tří Eulerových úhlů α , β , γ

Kolem této dočasné x -ové osy vykonáme druhou rotaci o úhel α , čímž osy z a z' přejdou do společného směru. Třetí, poslední rotace kolem nové osy z (tj. osy z') o úhel γ otočí osu x do x' a osu y do y' .¹⁸⁾ Známe transformaci pro každou ze tří zmíněných rotací (jsou definovány vztahy (4.19) a (4.34)). Složíme-li je ve správném pořadí, dostaneme

$$\begin{aligned} C'_+ &= \cos \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta + \gamma)/2} C_+ + i \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta - \gamma)/2} C_- \\ C'_- &= i \sin \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta - \gamma)/2} C_+ + \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta + \gamma)/2} C_- \end{aligned} \quad (4.35)$$

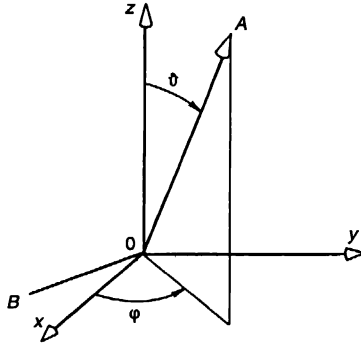
Vyšli jsme z několika předpokladů o vlastnostech prostoru a odvodili jsme transformaci amplitud pro jakoukoliv rotaci. To znamená, že známe-li amplitudy přechodu částice se spinem $1/2$, nacházející se v libovolném stavu, do dvou svazků Sternova-Gerlachova přístroje S , jehož osy jsou x , y a z , můžeme vypočítat, jaká část připadne na každý svazek přístroje T s osami x' , y' a z' . Řečeno jinými slovy, máme-li částici se spinem $1/2$ ve stavu ψ a amplitudy toho, že ji najdeme ve stavech se směry spinu nahoru a dolů vzhledem k ose z souřadnicové soustavy x , y , z jsou dány výrazy $C_+ = \langle + | \psi \rangle$ a $C_- = \langle - | \psi \rangle$, známe zároveň i amplitudy C'_+ a C'_- toho, že se bude nacházet ve stavech nahoru a dolů vzhledem k ose z' kterékoliv souřadnicové soustavy x' , y' , z' . Čtyři

¹⁸⁾ S trochou námahy můžete dokázat, že soustavu souřadnic x , y , z lze ztotožnit se soustavou x' , y' , z' pomocí těchto tří rotací kolem *původních* os: 1) otočením o úhel γ kolem původní osy z ; 2) otočením o úhel α kolem původní osy x ; 3) rotací o úhel β kolem původní osy z .

koeficienty v rovnicích (4.35) jsou prvky transformační matice, pomocí níž můžeme promítnout amplitudy částice se spinem $1/2$ do jakékoliv jiné soustavy souřadnic.

Uvedeme řešení několika příkladů, abyste viděli, jak to vše funguje. Položme si následující jednoduchou otázku. Atom se spinem $1/2$ necháme projít Sternovým-Gerlachovým přístrojem, který propouští pouze stav $(+x)$. Jaká je amplituda toho, že daný atom najdeme ve stavu $(+z)$? Osa $+x$ je totožná s osou $+z'$ soustavy otočené o $+90^\circ$ kolem osy y . Pro tento problém je nejjednodušší použít rovnice (4.32), ačkoliv bychom mohli, samozřejmě, využít obecné rovnice (4.35). Jelikož $C_+ = 1$ a $C_- = 0$, dostaneme $C'_+ = 1/\sqrt{2}$. Pravděpodobnosti jsou druhými mocninami modulů těchto amplitud; částice má 50% naději, že projde přístrojem, který vybírá stavy $(+x)$. Kdybychom se ptali na stav $(-x)$, byla by jeho amplituda $-1/\sqrt{2}$, což taktéž dává pravděpodobnost $1/2$, jak bychom očekávali od prostorové symetrie. Takže nachází-li se částice ve stavu $(+z)$, je stejně pravděpodobné najít ji ve stavech $(+x)$ a $(-x)$, ale fáze jsou opačné.

Ani vůči ose y nemáme žádné předpoklady. Pro částici ve stavu $(+z)$ jsou šance $1 : 1$, že se ocitne ve stavu $(+y)$ nebo $(-y)$. V tomto případě (s použitím vztahu pro otočení o -90° kolem x) jsou však amplitudy $1/\sqrt{2}$ a $-i/\sqrt{2}$. Fázový rozdíl mezi nimi je 90° a ne 180° , jak tomu bylo pro stavy $(+x)$ a $(-x)$. Tak se projevuje rozdíl mezi x a y .



Obr. 4.10 Osa A definovaná pomocí polárních úhlů ϑ a φ

Uvedeme poslední příklad. Předpokládejme, že víme, že se částice se spinem $1/2$ nachází v takovém stavu ψ , který je polarizovatelný směrem nahoru podél nějaké osy A definované úhly ϑ a φ na obr. 4.10. Chceme znát amplitudu $\langle C_+ | \psi \rangle$ toho, že spin částice bude orientován nahoru vzhledem k z a amplitudu $\langle C_- | \psi \rangle$ toho, že bude mířit vůči z dolů. Tyto amplitudy najdeme, představíme-li si, že A je z -ovou osou souřadnicové soustavy, jejíž x -ová osa leží v nějakém libovolném směru, řekněme v rovině určené přímkami A a z . Soustavu souřadnic spojenou s A můžeme ztotožnit s x, y, z třemi rotacemi. Nejdříve ji otočíme o úhel $-\pi/2$ kolem osy A, čímž nám x -ová osy splyne s přímkou B na obrázku. Pak provedeme rotaci o úhel ϑ kolem B (nová x -ová osa souřadnicové soustavy spojené s A), abychom dostali osu A do z . Nakonec otočíme soustavu o úhel $(\pi/2 - \varphi)$ kolem z . Uvědomíme-li si, že na počátku máme jen stav $(+)$ vzhledem k A, dostaneme

$$C_+ = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi/2}, \quad C_- = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{+i\varphi/2}. \quad (4.36)$$

Nakonec bychom rádi shrnuli výsledky této kapitoly ve formě, která bude užitečná pro naši další práci. Nejdříve vám připomínáme, že náš hlavní výsledek v rovnicích (4.35) lze zapsat i v ji-

ném označení. Všimněte si, že rovnice (4.35) znamenají přesně totéž co rovnice (4.4), tj. koeficienty $C_+ = \langle +S | \psi \rangle$ a $C_- = \langle -S | \psi \rangle$ jsou právě amplitudy $\langle jT | iS \rangle$ z rovnice (4.4) – amplitudy toho, že se částice ve stavu i vzhledem k S dostane do stavu j vzhledem k T (je-li poloha T vůči S dána třemi úhly α , β a γ). V rovnici (4.6) jsme je označili R_{ji}^{TS} . (Máme hromadu různých označení!) Například $R_{-+}^{TS} = \langle -T | +S \rangle$ je koeficient C_+ ve vztahu pro C_-' , totiž $i \sin(\alpha/2) e^{i(\beta-\gamma)/2}$. Výsledky, k nimž jsme dospěli, můžeme proto shrnout do přehledné tabulky 4.1.

Někdy je vhodné mít po ruce tyto amplitudy už dopředu vypočtené pro několik jednoduchých speciálních případů. Nechť $R_z(\varphi)$ označuje rotaci o úhel φ kolem osy z . Tímto označením můžeme mít na mysli i odpovídající rotační matici (indexy i a j vynecháváme, ale je třeba si je implicitně domyslet). Analogicky budou $R_x(\varphi)$ a $R_y(\varphi)$ označovat otočení o úhel φ kolem osy x nebo y . V tabulce 4.2 uvádíme matice, tabulky amplitud $\langle jT | iS \rangle$, které promítají amplitudy ze souřadnicové soustavy S do T , kde T dostaneme z S pomocí uvedené rotace.

Tabulka 4.1: Amplitudy $\langle jT | iS \rangle$ pro rotaci definovanou Eulerovými úhly α , β , γ znázorněnou na obr. 4.9

$$R_{ji}(\alpha, \beta, \gamma)$$

$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta+\gamma)/2}$	$i \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta-\gamma)/2}$
$-T$	$i \sin \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta-\gamma)/2}$	$\cos \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta+\gamma)/2}$

Tabulka 4.2: Amplitudy $\langle jT | iS \rangle$ pro rotace $R(\varphi)$ o úhlu φ kolem osy x a osy y

$$R_z(\varphi)$$

$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$e^{i\varphi/2}$	0
$-T$	0	$e^{-i\varphi/2}$

$$R_x(\varphi)$$

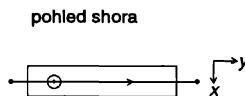
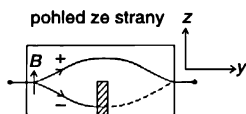
$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \varphi/2$	$i \sin \varphi/2$
$-T$	$i \sin \varphi/2$	$\cos \varphi/2$

$$R_y(\varphi)$$

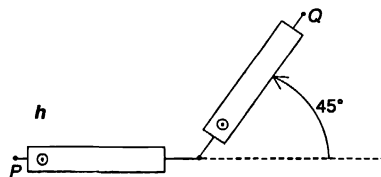
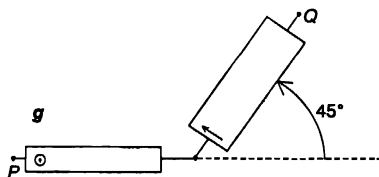
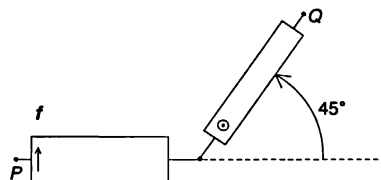
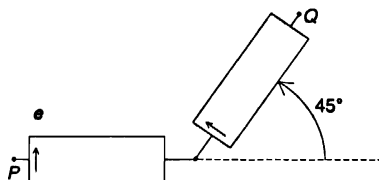
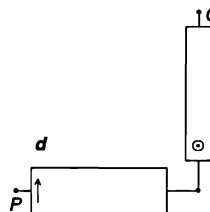
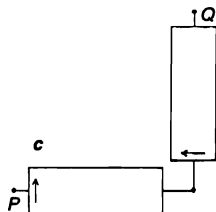
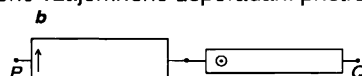
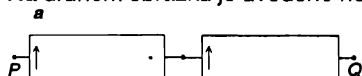
$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \varphi/2$	$\sin \varphi/2$
$-T$	$-\sin \varphi/2$	$\cos \varphi/2$

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 4.1 ■ Představte si, že svazek atomů se spinem $1/2$ je filtrován dvěma modifikovanými Sternovými-Gerlachovými přístroji umístěnými za sebou. Předpokládejme, že každý přístroj propouští pouze jeden svazek, jak je ukázáno na obrázku.



Na druhém obrázku je uvedeno několik variant možného vzájemného uspořádání přístrojů.



Nechť do přístroje P vstupuje N nepolarizovaných atomů. Kolik atomů se objeví v bodě Q ?

- 4.2 ■ Do nějakého přístroje vstupuje N částic se spinem $1/2$, přičemž odpovídající amplitudy pro směry spinů nahoru a dolů podél osy z jsou a a b . Ukažte, že pravděpodobnost najít tuto částici v libovolném bodě uvnitř přístroje je rovna $|aX+bY|^2$, kde X a Y jsou nějaké komplexní konstanty charakterizující přístroj. Jak bude vypadat tato pravděpodobnost vyjádřená pomocí X a Y , jestliže

- 1) spin vlétající částice míří nahoru, případně dolů;
- 2) spin míří ve směru osy $+x$, případně $-x$;
- 3) spin míří podél osy, jejíž směr udávají polární úhly ϑ a φ .

Představte si, že spinový stav dopadajících částic má být dílem náhody. To je možno uskutečnit několika způsoby:

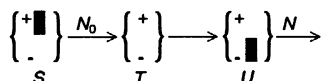
- a) abychom rozhodli, má-li spin mířit v kladném nebo záporném směru osy z , můžeme pokaždé házet mincí.

b) totéž můžeme dělat pro osu x .

c) spin každého elektronu bude orientován ve směru daném úhly ϑ a φ , ale tento směr pokaždé vybíráme zcela náhodně, takže v tom případě musíme vystředovat podle prostorového úhlu $\sin \vartheta d\vartheta d\varphi/4\pi$.

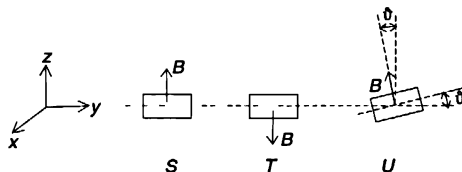
Ukažte, že pravděpodobnost nalezení částice je stejná pro všechny tři způsoby zavedení „náhodné orientace“. Předpokládejme, že částice se spinem $1/2$ vylétávají otvorem ve stěně a předtím byl směr jejich spinu náhodný ve smyslu jednoho ze tří uvedených způsobů. Můžete najít nějakou metodu, podle níž by bylo možné na vnější straně stěny určit, který z uvedených způsobů byl ve skutečnosti použit?

4.3 ■ Tři modifikované Sternovy-Gerlachovy přístroje jsou umístěny za sebou podle obrázku.



Vyjádřete N (počet atomů se spinem $1/2$ vycházejících z přístroje U) pomocí N_0 (počet atomů vycházejících z S) a veličin typu $\langle +T|+U \rangle$ atd.

Pak uvažujte tutéž posloupnost přístrojů, ale pro případ, kdy jsou pole B orientována podle schématu na druhém obrázku.



To znamená, že magnetické pole přístroje T je otočeno antiparalelně vzhledem k poli v přístroji S a magnetické pole přístroje U svírá úhel ϑ s osou z .

a) Najděte explicitní vyjádření pro $\langle +T|-S \rangle$ a $\langle -T|-S \rangle$.

b) Najděte explicitní vyjádření pro $\langle +U|-S \rangle$; z cvičných důvodů použijte pouze tabulky transformací pro rotace kolem os z a y .

c) Zkoumejte předchozí výsledek v limitě $\vartheta \rightarrow 0$ a $\vartheta \rightarrow \pi$. Vysvětlíte odpověď pro $\vartheta \rightarrow \pi$ srovnáním s $\langle +T|-S \rangle$ pro případ a).

4.4 ■ Hranol z kalcitu štěpí svazek světla mířící podél osy z na dva svazky x a y . Jednotlivý foton, který dopadá na tento hranol je charakterizován určitou amplitudou toho, že se ocitne v jednom z těchto svazků x a y . Tentýž vzorek kalcitu, převrátíme-li ho, můžeme použít ke spojení těchto dvou svazků opět do jednoho, podobně jako jsme to dělali s modifikovaným přístrojem Sternovým-Gerlachovým. Osu druhého hranolu T můžeme orientovat pod úhlem ϑ v rovině $x-y$, a tak převést svazek do stavů x' , y' neboli xT , yT . Najděte amplitudy $\langle xT|xS \rangle$, $\langle yT|yS \rangle$, atd. na základě svých znalostí vlastností klasické teorie polarizace světla. Můžeme předpokládat, že při velkém počtu fotonů svazku bude možno jeho intenzitu popsat v dobrém přiblížení těmito klasickými výsledky. Uvažujte otáčení pouze kolem osy z , neboť světlo nelze „zastavit“. (Otáčení kolem jiných os se projeví spíše podle jejich vlivu na směr šíření světla a ne na jeho polarizaci. V tomto smyslu se světlo, i když také představuje soustavu se dvěma stavy, silně odlišuje od elektronů.)

4.5 ■ Najděte všechny čtyři prvky matice $\langle j|A|i \rangle$, kde indexy i a j mohou nabývat hodnot x a y , pro následující přístroje, jimiž prochází světlo:

a) x je kalcitový analyzátor a y kalcitový syntezátor, přičemž je paprsek y zablokován;

b) tentýž přístroj pootočený o úhel ϑ ;

c) polaroid, jehož osa míří ve směru x ;

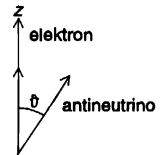
d) polaroid, jehož osa svírá s x úhel ϑ ;

e) kalcitový analyzátor a syntezátor, mezi nimiž je skleněná destička stáčející fázi paprsku x o úhel φ ;

- f) kalcitový analyzátor a syntezátor, přičemž oba paprsky procházejí touž skleněnou destičkou;
- g) analyzátor a syntezátor pootočené o 45° , a dále skleněná destička stojící v cestě paprsku x , která zvětšuje fázi o 90° ;
- h) čtvrtlnová destička;
- i) destička z dvojlomné látky, jejíž optická osa je rovnoběžná s osou x (najděte obecný vzorec pro vrstvu této látky o libovolné tloušťce);
- j) roztok cukru, který stáčí rovinu polarizace světla doprava o úhel ϑ ;
- k) zařízení, které štěpí výchozí paprsek na x a y , převádí paprsek x do roviny y (tím, že ho propouští cukrovým roztokem, který stáčí rovinu polarizace o 90°) a znovu spojuje oba paprsky do jednoho;
- l) ukažte, že pomocí přístroje popsaného v bodě k) je možno sestrojít perpetuum mobile. Nebo ne?

4.6 ■ Podle teorie radioaktivního rozpadu beta v jednom jeho zvláštním případě (který se nazývá „dovolený Fermiho přechod“ a probíhá beze změny momentu hybnosti a parity jádra) elektron pohybující se podél osy z rychlostí v vylétá se spinem mířícím podél osy z s amplitudou $A\sqrt{1-v/c}\sin\vartheta/2$ a s opačně orientovaným spinem s amplitudou $A\sqrt{1-v/c}\cos\vartheta/2$. A je nějaká konstanta a ϑ je úhel, který svírá osa z se směrem vylétajícího antineutrína (viz obrázek). Je tomu už tak, že spin antineutrína je vždy orientován ve směru jeho pohybu.

- a) Čemu je rovna pravděpodobnost toho, že spin elektronu míří nahoru ve směru osy z ? A dolů?
- b) Najděte pravděpodobnost toho, že spin elektronu míří podél osy $+x$ (antineutrino vylétá v rovině xz)? A co ve směru $-x$?
- c) Jaká bude pravděpodobnost spinu ve směru $\pm y$? (Přesně vzato, je třeba používat soustavu souřadnic pohybující se spolu s elektronem.)
- d) Jestliže antineutrino jako obvykle neregistrujeme (tj. musíme provádět středování podle všech směrů jeho vyzařování), jaká bude odpověď na otázku a)?



Závislost amplitud na čase

5.1 ATOMY V KLIDU. STACIONÁRNÍ STAVY

5.2 ROVNOMĚRNÝ POHYB

5.3 POTENCIÁLNÍ ENERGIE. ZACHOVÁNÍ ENERGIE

5.4 SÍLY. KLASICKÁ LIMITA

5.5 PRECESE ČÁSTICE SE SPINEM 1/2

Přečtěte si znovu: kapitolu 17, díl 1, Časoprostor
kapitolu 48, díl 1, Rázy

5.1 ATOMY V KLIDU. STACIONÁRNÍ STAVY

Nyní trochu pohovoříme o tom, jak amplitudy pravděpodobnosti závisejí na čase. Říkáme „trochu“, protože samotná časová závislost nevyhnutelně obsahuje prostorovou závislost; to znamená, že chceme-li to udělat korektně a podrobně, dostáváme se ihned do velice složité situace. Musíme se totiž rozhodnout, zda zvolit způsob, který je sice logicky přesný, ale zato velmi abstraktní, nebo zda budeme postupovat ne tak exaktně, ale zato způsobem, který nám dá představu o skutečné situaci, přičemž k podrobnému popisu se vrátíme později. Rozhodli jsme se, že pokud jde o závislost energie, použijeme druhý postup. Vyslovíme několik tvrzení. Nebudeme se pokoušet o přesnost – jen vás seznámíme s tím, co bylo zjištěno, abyste získali určitý cit pro to, jak amplituda závisí na čase. Přesnost bude postupně narůstat, proto nebuďte nervózní, bude-li se vám zdát, že věci bereme ze vzduchu. Všechno je to, samozřejmě, založeno na experimentu a na lidské představitivosti. Trvalo by nám velmi dlouho, kdybychom chtěli probrat všechny etapy historického vývoje – proto musíme od něčeho upustit. Mohli bychom vykročit abstraktním směrem a všechno odvozovat (tomu byste asi nerozuměli), nebo můžeme uvést velký počet experimentů, které by nám každý výrok potvrdily. Rozhodli jsme se pro zlatou střední cestu.

Volný elektron v prázdném prostoru může mít za určitých podmínek jistou přesně určenou energii. Je-li např. v klidu (tj. nepohybuje-li se translačním pohybem a jeho hybnost a kinetická energie jsou rovny nule), přísluší mu pouze klidová energie. I složitější objekt, např. atom, může

mít v klidovém stavu jistou přesně určenou energii, ale také může být vnitřně excitován na jinou energetickou hladinu. (Tento mechanismus popíšeme později.) Atomu v excitovaném stavu často připisujeme přesně určenou energii. Platí to však jen přibližně. Atom nezůstává trvale excitován, neboť se snaží zbavit se energie interakcí s elektromagnetickým polem. Proto existuje určitá amplituda toho, že vznikne nová situace, v níž bude atom v energeticky nižším stavu a elektromagnetické pole v energeticky vyšším stavu excitace. Celková energie systému zůstane stejná, ale energie atomu *se zmenší*. Proto není správné říkat, že excitovaný atom má *přesně určenou energii*; bude to však často výhodné a ne zcela nesprávné.

(Mimochodem, proč odevzdávání energie probíhá v tomto směru a ne opačně? Proč atom vyzařuje světlo? Odpověď souvisí s entropií. Nachází-li se energie v elektromagnetickém poli, existuje velké množství různých způsobů, jak se může rozdělit. Při hledání rovnovážného stavu zjišťujeme, že nejpravděpodobnější situace je právě ta, v níž je pole excitované fotonem a atom je deexcitován. Foton potřebuje velmi dlouhý čas k tomu, aby se vrátil a znovu vybudil atom do původního excitovaného stavu. Je to úplně analogické klasické úloze: „Proč náboj vyzařuje, pohybuje-li se zrychleným pohybem?“ Není to proto, že by „chtěl“ ztratit energii; vždyť když vyzařuje, celková energie světa zůstává stejná. Vyzařování nebo absorpce se uskutečňuje vždy ve směru narůstání *entropie*.)

I jádra se mohou vyskytovat na různých energetických hladinách; uvažujeme-li přiblížení, které nebere v úvahu elektromagnetické efekty, můžeme říci, že jádro, které je v excitovaném stavu, v něm i zůstane. I když víme, že tam nezůstane natrvalo, i tak je někdy užitečné vycházet z přiblížení, které je sice částečně idealizované, ale přitom přehlednější. Za určitých podmínek je to často oprávněné. (Když jsme na začátku vysvětlovali zákony padajícího tělesa, neuvažovali jsme tření, ačkoliv téměř nikdy nenastane případ, v němž by k němu nedošlo.)

Kromě toho existují ještě subnukleární „podivné částice“, které mají různé hmotnosti. Protože těžší z nich se rozpadají na lehčí, opět není správné tvrdit, že mají přesnou, jednoznačně určenou energii. To by byla pravda pouze tehdy, kdyby trvaly věčně. Používáme-li tedy přiblížení, v němž mají energii určenou jednoznačně, neuvažujeme, že se rozpadají. Nyní vědomě na takové procesy zapomeneme a až později se naučíme, jak je brát v úvahu.

Uvažujme atom (nebo elektron, nebo libovolnou částici), který má ve stavu klidu jednoznačně určenou energii E_0 . Pod E_0 myslíme jeho celkovou hmotnost násobenou c^2 . V ní je obsažena celá vnitřní energie; proto má excitovaný atom jinou hmotnost než tentýž atom v základním stavu. (Základním stavem rozumíme stav s nejnižší energií.) energii E_0 budeme nazývat *klidová energie*.

Nachází-li se atom *v klidu*, je *amplituda* toho, že ho najdeme v některém místě, *všude stejná* – na poloze *nezávisí*. Z toho samozřejmě vyplývá, *pravděpodobnost najít* atom na libovolném místě je stejná. Znamená to však ještě víc. Pravděpodobnost může být *nezávislá* na poloze a přitom se *fáze amplitudy* může měnit od místa k místu. Je-li částice v klidu, je celková amplituda sice všude stejná, ale *závisí* na čase. Je-li částice ve stavu s přesně určenou energií E_0 , je amplituda nalezení částice v místě (x, y, z) v čase t rovna

$$ae^{-i(E_0/\hbar)t}, \quad (5.1)$$

kde a je nějaká konstanta. Amplituda výskytu částice na libovolném místě prostoru je stejná v každém bodě a časová závislost je určena výrazem (5.1). Budeme ho prostě pokládat za správný.

Můžeme ho samozřejmě vyjádřit i ve tvaru

$$ae^{-i\omega t}, \quad (5.2)$$

kde

$$\hbar\omega = E_0 = Mc^2.$$

M je klidová hmotnost atomu nebo částice. Energii můžeme zadat třemi různými způsoby: frekvencí amplitudy, energií v klasickém smyslu nebo setrvačnou hmotností. Všechny tři způsoby jsou rovnocenné – vyjadřují jedno a totéž.

Možná, že vám připadá divné uvažovat „částici“, která má stejnou amplitudu výskytu v libovolném místě prostoru. Vždyť konec konců, „částici“ si obvykle představujeme jako malý objekt, který se „někde nachází“. Nezapomínejte však na princip neurčitosti. Má-li částice přesně určenou energii, má i přesně určenou hybnost. Je-li neurčitost hybnosti nulová, znamená princip neurčitosti $\Delta p \Delta x \geq \hbar$, že neurčitost polohy musí být nekonečná; a to je právě to, co tvrdíme, když říkáme, že amplituda pro nalezení částice je na všech místech prostoru stejná.

Jsou-li vnitřní části atomu v nějakém jiném stavu, s jinou celkovou energií, bude jiná i časová závislost amplitudy. Nevíme-li, v jakém stavu se nachází, existuje určitá amplituda toho, že se vyskytuje v jednom stavu, a určitá amplituda toho, že se vyskytuje v jiném stavu, přičemž každá z nich má jinou frekvenci. Nastává interference těchto dvou různých složek, jako u rázů, což se může projevit na měnící se pravděpodobnosti. Uvnitř atomu se něco děje, ačkoliv navenek se nám atom jeví v klidu, tj. jeho těžiště se nepohybuje. Má-li však atom jedinou přesně určenou energii, bude amplituda určena výrazem (5.1) a druhá mocnina její absolutní hodnoty bude na čase nezávislá. Z toho je vidět, že má-li nějaký objekt přesně určenou energii, každá otázka z hlediska *pravděpodobnosti* dává odpověď, která není na čase závislá. Je-li energie *přesně určena*, *amplitudy* sice na čase závislejší, ale mění se jako exponenciální funkce s imaginárním exponentem a absolutní hodnoty zůstávají nezměněny.

Proto často říkáme, že atom, který je na přesně určené energetické hladině, se nachází ve *stacionárním stavu*. Provedeme-li jakákoliv měření v jeho nitru, zjistíme, že nic (žádná pravděpodobnost) se s časem nemění. Aby se pravděpodobnosti měnily s časem, je třeba, aby nastala interference dvou amplitud se dvěma různými frekvencemi. To však znamená, že neznáme energii. Atom bude mít dvě amplitudy: jednu amplitudu pro stav s jednou energií a druhou pro stav s druhou energií. Tak se popisují kvantově mechanické objekty, jejichž *chování* na čase závisí.

Máme-li případ, který dostaneme smícháním dvou různých stavů s různými energiemi, amplituda každého z nich se mění s časem podle vztahu (5.2), např.

$$e^{-i(E_1/\hbar)t} \text{ a } e^{-i(E_2/\hbar)t} \quad (5.3)$$

Při kombinaci těchto dvou stavů nastává interference. Všimněte si, že by se nic nezměnilo, kdybychom k oběma energiím přičetli určitou konstantu. Kdyby někdo jiný použil odlišnou stupnici energií, v níž by byla každá energie zvětšena (nebo zmenšena) o určitou konstantní hodnotu – řekněme o hodnotu A – pak by amplitudy příslušných dvou stavů vypadaly z jeho hlediska takto

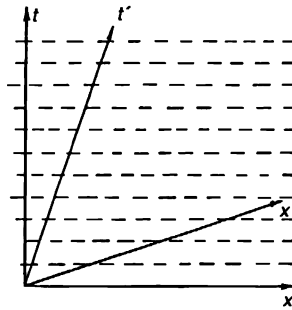
$$e^{-i(E_1 + A)t/\hbar} \text{ a } e^{-i(E_2 + A)t/\hbar} \quad (5.4)$$

Všechny by byly vynásobeny stejným faktorem $e^{-i(A/\hbar)t}$ a všechny lineární kombinace a interference by obsahovaly tentýž faktor. Kdybychom si vyčíslili pravděpodobnosti (druhé mocniny absolutních hodnot), všechny výsledky by byly stejné. Výběr počátku na naší stupnici energií je neovlivňuje; energii můžeme měřit od libovolného počátku. V relativistických případech je výhodné měřit energii tak, aby v ní byla zahrnuta i klidová hmotnost, ale pro mnohé nerelativistické účely je často užitečné odečíst od všech energií standardní hodnotu. Například u atomu je obvykle výhodné odečíst energii $M_s c^2$, kde M_s je hmotnost všech *jednotlivých* složek – jádra a elektronů – která je samozřejmě odlišná od hmotnosti atomu. V jiných případech je užitečné odečíst od všech

energií hodnotu $M_z c^2$, kde M_z je hmotnost celého atomu v *základním* stavu; energie, která nám v tom případě zůstane, je právě excitační energie atomu. To znamená, že někdy můžeme posunout nulový počátek stupnice energií o velmi velkou hodnotu a přitom se nic nezmění (za předpokladu, že v konkrétním výpočtu posuneme všechny energie o stejnou konstantu). Tolik o částici, která se nachází v klidu.

5.2 ROVNOMĚRNÝ POHYB

Považujeme-li teorii relativity za pravdivou, může se částice, která se v jedné inerciální soustavě nachází v klidu, v jiné inerciální soustavě pohybovat rovnoměrným pohybem. Amplituda pravděpodobnosti nabývá v klidové soustavě částice stejné hodnoty pro všechna x , y a z , ale mění se s časem. Velikost amplitudy je pro všechna t stejná, ale *fáze* závisí na t .



Obr. 5.1 Relativistická transformace amplitudy částice v klidu v souřadnicové soustavě $x - t$

Obraz toho, jak se chová amplituda, můžeme graficky znázornit tak, že si čárkami vyznačíme místa se stejnou fází (řekněme nulovou) jako funkci x a t . Pro částici v klidu jsou čárky se stejnou fází rovnoběžné s osou x a na ose t jsou rozmístěny se stejným odstupem (na obr. 5.1 jsou nakresleny přerušovaně).

V druhé soustavě – x' , y' , z' , t' –, která se vzhledem k částici pohybuje řekněme ve směru x , je vztah mezi souřadnicemi x' a t' libovolného bodu v prostoru a souřadnicemi x a t určen Lorentzovou transformací. Graficky to lze znázornit nakreslením os x' a t' , jako na obr. 5.1 (viz kapitola 17, díl 1, obr. 17.2). Je vidět, že v soustavě souřadnic $x' - t'$ mají čárky se stejnou fází¹⁹⁾ jiné vzájemné vzdálenosti podél osy t' , což znamená, že frekvence časové změny je jiná. Kromě toho změna fáze závisí na x' , proto musí být amplituda pravděpodobnosti funkcí x' .

Při Lorentzově transformaci rychlosti v , orientované řekněme v záporném směru osy x , souvisí čas t s časem t' podle vztahu

$$t = \frac{t' - x'v/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

¹⁹⁾ Předpokládám, že fáze by měla mít stejnou hodnotu v místech, která si ve dvou souřadnicových soustavách vzájemně odpovídají. Je to však choulostivá záležitost, neboť fázi kvantově mechanické amplitudy lze do značné míry volit libovolně. Úplné zdůvodnění předpokladu vyžaduje podrobnější diskuzi, která uvažuje interferenci dvou nebo více amplitud.

a proto se naše amplituda mění takto

$$e^{(-i/\hbar)E_0 t} = e^{(-i/\hbar)(E_0 t' \sqrt{1 - v^2/c^2} - E_0 v x' / c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2})}$$

V čárkované soustavě závisí amplituda i na poloze, i na čase. Zapišeme-li ji ve tvaru

$$e^{-(i/\hbar)(E'_p t' - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}')},$$

je vidět, že $E'_p = E_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$ (klasický relativistický vzorec) je energie částice s klidovou energií E_0 , která se pohybuje rychlostí v a $\mathbf{p}' = E'_p v / c^2$ je její příslušná hybnost.

Víte, že $x_\mu = (t, \mathbf{x}, y, z)$ a $p_\mu = (E, \mathbf{p}_x, \mathbf{p}_y, \mathbf{p}_z)$ jsou čtyřvektory a $p_\mu x_\mu = Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$ je skalární invariant. V klidové soustavě částice je $p_\mu x_\mu$ rovno Et ; to znamená, že při transformaci do jiné souřadnicové soustavy bude Et nahrazeno výrazem

$$E' t' - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'.$$

Amplituda pravděpodobnosti částice s hybností \mathbf{p} bude

$$e^{-(i/\hbar)(E_p t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (5.5)$$

kde E_p je energie částice s hybností \mathbf{p} , tj.

$$E_p = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + E_0^2}, \quad (5.6)$$

kde E_0 je (jako původně) klidová energie. V nerelativistických případech můžeme psát

$$E_p = M_s c^2 + W_p, \quad (5.7)$$

kde W_p je přebytek energie v porovnání s klidovou energií $M_s c^2$ částí atomu. Obecně W_p představuje i kinetickou energii atomu i vazebnou a excitační energii, které můžeme nazývat *vnitřní energií*. Potom

$$W_p = W_{\text{vnitř}} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \quad (5.8)$$

a amplitudy mají tvar

$$e^{-(i/\hbar)(W_p t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}. \quad (5.9)$$

Protože obecně se budeme zabývat nerelativistickými výpočty, budeme amplitudy vyjadřovat v tomto tvaru.

Všimněte si, že samotná relativistická transformace, bez jakýchkoliv dodatečných předpokladů způsobila změnu amplitudy atomu, který se pohybuje v prostoru. Vlnové číslo jeho změn v prostoru, jak vyplývá z (5.9), je ve tvaru

$$k = \frac{\mathbf{p}}{\hbar},$$

a tedy vlnová délka bude

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{\hbar}{\mathbf{p}}. \quad (5.11)$$

Je to tatáž vlnová délka, kterou jsme používali pro částice s hybností p . Právě takovým způsobem dospěl de Broglie jako první k uvedenému vztahu. Frekvenci změn amplitudy pohybující se částice udává vztah, který jsme už zmínili

$$\hbar\omega = W_p. \quad (5.12)$$

Druhá mocnina absolutní hodnoty výrazu (5.9) je rovna právě 1, proto pravděpodobnost toho, že se pohybující se částice s *přesně určenou energií* někde nachází, je v každém místě stejná a nemění se s časem. (Je důležité si všimnout, že amplituda je *komplexní* vlnou. Kdybychom použili reálnou sinusoidu, druhá mocnina absolutní hodnoty by se měnila od místa k místu, což by nebylo správné.)

Samozřejmě víme, že se vyskytují situace, kdy se částice pohybují od místa k místu. V těchto případech závisí pravděpodobnost na poloze a mění se s časem. Jak takové situace popisujeme? Můžeme to udělat tak, že uvažujeme amplitudy, které dostaneme superpozicí dvou nebo více amplitud stavů s přesně určenou energií. Tento případ jsme už rozebrali (dokonce pro amplitudy pravděpodobnosti!) v kapitole 48, díl 1. Zjistili jsme, že součet dvou amplitud s rozdílnými vlnovými čísly k (tj. hybnostmi) a frekvencemi ω (tj. energiemi) způsobuje vznik interferenčních hrbů nebo rázů, proto se druhá mocnina amplitudy mění i v prostoru, i v čase. Také jsme zjistili, že rázy se pohybují grupovou rychlostí, která je určena vztahem

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k},$$

kde Δk a $\Delta\omega$ jsou rozdíly mezi vlnovými čísly a frekvencemi dvou vln. Pro složitější vlny – vytvořené součtem mnoha amplitud s blízkými frekvencemi – je grupová rychlost

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (5.13)$$

Nahradíme-li $\omega = E_p/\hbar$ a $k = p/\hbar$ dostaneme

$$v_g = \frac{dE_p}{dp}. \quad (5.14)$$

Na základě rovnice (5.6), můžeme psát

$$\frac{dE_p}{dp} = c^2 \frac{p}{E_p}. \quad (5.15)$$

Protože $E_p = Mc^2$, dostáváme

$$\frac{dE_p}{dp} = \frac{p}{M}, \quad (5.16)$$

což je právě klasická rychlost částice. Podobně, s použitím nerelativistických výrazů, dostaneme

$$\omega = \frac{W_p}{\hbar} \text{ a } k = \frac{p}{\hbar}$$

a

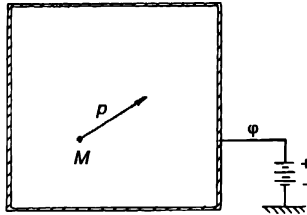
$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{dW}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2M} \right) = \frac{p}{M}, \quad (5.17)$$

což je znovu klasická rychlost.

Z toho vyplývá následující výsledek: Nabývají-li amplitudy (příslušející stavům s čistými energiemi) přibližně stejné hodnoty, jejich interference vytváří pravděpodobnostní maxima, která se pohybují prostorem rychlostí rovnou rychlosti klasické částice s touž energií. Musíme však poznamenat, že při sčítání dvou amplitud různých vlnových délek pro získání balíku, který odpovídá pohybující se částici, zavádíme něco nového – něco, co nelze přímo odvodit z teorie relativity. Vysvětlili jsme si, jak se chová amplituda částice, která je v klidu, a pak jsme z toho vyvodili, jak by se chovala, kdyby se částice pohybovala. Z těchto argumentů však *nemůžeme* dedukovat co se stane, pohybují-li se *dvě* vlny různými rychlostmi. Zastavíme-li jednu, nemůžeme zastavit druhou. Mlčky jsme zavedli jednu hypotézu *navíc*, která říká: „Amplituda (5.9) není jediným možným řešením; v téže soustavě souřadnic existují řešení pro všechny možné hybnosti p , přičemž různé členy interferují.“

5.3 POTENCIÁLNÍ ENERGIE. ZACHOVÁNÍ ENERGIE

Nyní objasníme, co se děje, když se energie částice může měnit. Uvažujme částici, která se pohybuje v silovém poli popsaném potenciálem. Nejdříve rozeberme případ konstantního potenciálu. Představme si, že máme velkou kovovou krabici, kterou jsme nabili na určitý elektrostatický potenciál φ (obr. 5.2).



Obr. 5.2 Částice s hmotností M a hybností p v oblasti s konstantním potenciálem

Jsou-li uvnitř nabitě objekty, bude jejich potenciální energie $q\varphi$ (označme ji U) a bude zcela nezávislá na poloze. Fyzikální situace uvnitř krabice se nemůže změnit, protože konstantní potenciál nijak neovlivňuje jevy, které probíhají uvnitř. To znamená, že nelze nijak odvodit změnu amplitudy. Proto musíme provést odhad; správný odhad je ten, který bychom více méně očekávali: Za hodnotu energie je třeba dosadit součet potenciální energie U a energie E_p , která je součtem vnitřní a kinetické energie. Amplituda je přímo úměrná

$$e^{-i(\hbar)^{-1}(E_p + U)t - p \cdot x}. \quad (5.18)$$

Obecný princip spočívá v tom, že koeficient před veličinou t , který nazveme ω , je vždy dán *celkovou energií* systému: vnitřní energií („hmotností“) plus kinetickou plus potenciální energií

$$\hbar\omega = E_p + U \quad (5.19)$$

nebo pro relativistické případy

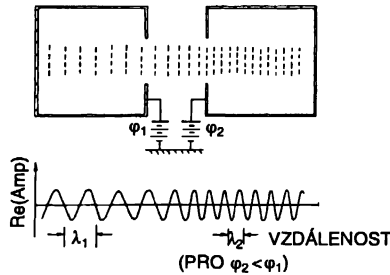
$$\hbar\omega = W_{\text{vnitř}} + \frac{p^2}{2M} + U. \quad (5.20)$$

Co můžeme říci o fyzikálních jevech uvnitř krabice? Co se stane, máme-li několik různých energetických stavů? Amplituda každého stavu získá stejný dodatečný faktor

$$e^{-(i/\hbar)Ut}$$

k těm členům, které jsme měli v případě $U=0$. Je to přesně totéž, jako když změním nulový počátek na energetické stupnici. Všechny amplitudy se změňí o stejnou fázi, ale – jak jsme se už přesvědčili dříve – nezmění se žádné pravděpodobnosti a všechny fyzikální jevy zůstávají stejné. (Předpokládali jsme, že se zabýváme různými stavy jednoho a téhož nabitého objektu, proto je $q\varphi$ ve všech stavech stejný. Kdyby objekt mohl měnit svůj náboj při přechodu z jednoho stavu do druhého, dostali bychom úplně jiný výsledek. Zachování náboje tomu však zabraňuje.)

Naše domněnka zatím souhlasí s tím, co bychom očekávali od změny hodnoty na energetické stupnici. Je-li však opravdu správná, měla by platit i pro takovou potenciální energii, která není obyčejnou konstantou. Obecně se může U měnit libovolně i v čase, i v prostoru a úplné vyjádření amplitudy se musí vyjádřit pomocí diferenciální rovnice. Nyní nebudeme rozebírat obecný případ, chceme jen získat určitou představu o několika věcech. Budeme proto uvažovat pouze potenciál, který je konstantní v čase a velmi pomalu se mění v prostoru. Tak budeme moci navzájem porovnat klasické a kvantově mechanické představy.



Obr. 5.3 Amplituda částice při přechodu od jednoho potenciálu ke druhému

Uvažujme situaci znázorněnou na obr. 5.3. Máme dvě krabice, které udržujeme na konstantních potenciálech φ_1 a φ_2 ; předpokládáme, že v oblasti mezi nimi se potenciál plynule mění od φ_1 k φ_2 . Mějme částici, která má určitou amplitudu toho, že se bude nacházet v některé z těchto dvou oblastí. Dále budeme předpokládat, že hybnost je dostatečně velká, tak aby v libovolně malé oblasti prostoru, do níž se vejde mnoho vlnových délek, byl potenciál přibližně konstantní. V tomto případě jsme oprávněni vyjádřit amplitudu v libovolné části prostoru pomocí (5.18) s hodnotou U , která dané oblasti prostoru přísluší.

Uvažujme speciální případ, kdy $\varphi_1 = 0$, tedy potenciální energie je v první krabici rovna nule, ale $q\varphi_2$ je záporné, takže v klasickém smyslu bude mít částice v druhé krabici větší energii, a tedy i větší hybnost, a proto se bude i rychleji pohybovat. Podíváme se, jak by se to dalo odvodit z kvantové mechaniky.

Podle našeho předpokladu je amplituda v první krabici úměrná

$$e^{-(i/\hbar)[(W_{\text{vnitř}} + p_1^2/2M + U_1)t - p_1 \cdot x]} \quad (5.21)$$

a amplituda v druhé krabici

$$e^{-(i/\hbar)[(W_{\text{vnitř}} + p_2^2/2M + U_2)t - p_2 \cdot x]} \quad (5.22)$$

(Předpokládáme, že vnitřní energie se nemění, ale zůstává v obou oblastech stejná.) Otázka zní: „Jak se obě amplitudy sladí v oblasti mezi krabicemi?“

Aby se neměnily podmínky, budeme předpokládat, že všechny potenciály zůstávají v čase konstantní; protože v prostředí neexistuje nic, co by na čase záviselo, budeme předpokládat, že změny amplitudy (tj. její fáze) mají všude tutéž *frekvenci*. Když se v prostoru nic nemění, můžeme se dívat na vlnu v jedné oblasti jako na takovou, která generuje druhotné vlny do celého prostoru, oscilující se stejnou frekvencí. Je to podobné světelným vlnám, které nemění své frekvence, prochází-li látkami, které jsou v klidu. Jsou-li frekvence v (5.21) a (5.22) stejné, musí platit

$$W_{\text{vnitř}} + \frac{p_1^2}{2M} + U_1 = W_{\text{vnitř}} + \frac{p_2^2}{2M} + U_2. \quad (5.23)$$

Na obou stranách je zapsána celková klasická energie, tedy rovnice (5.23) je vyjádřením zákona zachování energie. Řečeno jinými slovy, klasické vyjádření zachování energie je ekvivalentní s kvantově mechanickým vyjádřením toho, že frekvence částice jsou všude stejné, nemění-li se podmínky s časem. Vše to souhlasí s představou, že $\hbar\omega = E$.

Ve speciálním případě, kdy $U_1 = 0$ a U_2 je záporné, vyplývá z rovnice (5.23), že p_2 je větší než p_1 , tj. v oblasti 2 jsou vlnové délky kratší. Místa se stejnou fází jsou na *obr. 5.3* znázorněna přerušovanými čarami. Je tam nakreslen i graf reálné části amplitudy, který taktéž ukazuje, jak se vlnová délka zkracuje při přechodu z oblasti 1 do oblasti 2. Grupová rychlost vln, rovná p/M , roste stejným způsobem, jak bychom očekávali od klasického zachování energie, které je vlastně vyjádřeno rovnicí (5.23).

Zajímavý případ nastává, je-li hodnota U_2 tak velká, že $U_2 - U_1$ je větší než $p_1^2/2M$. Pak je p_2^2 vyjádřeno vztahem

$$p_2^2 = 2M \left[\frac{p_1^2}{2M} - U_2 + U_1 \right] \quad (5.24)$$

záporné. To znamená, že p_2 je imaginární číslo, řekněme $i p'$. V klasickém případě bychom řekli, že částice se nikdy do oblasti 2 nedostane – nemá dostatek energie na to, aby „vyšplhala“ na potenciálový „kopec“. V kvantové mechanice je však amplituda vyjádřena rovnicí (5.22) a její prostorovou změnu vyjadřuje člen

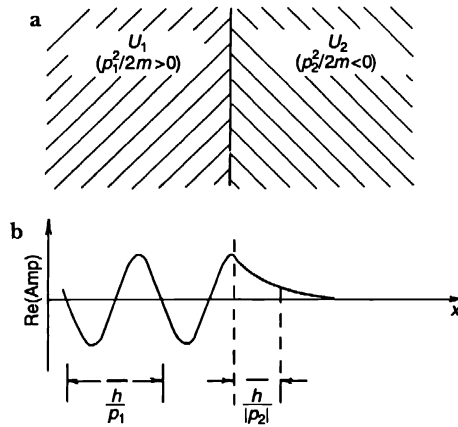
$$e^{(i/\hbar)p_2 \cdot x}$$

Je-li však p_2 imaginární, stává se prostorová závislost reálnou exponenciálou. Uvažujme, že částice se na počátku pohybovala v kladném směru osy $+x$; amplituda se pak bude měnit jako

$$e^{-p' x/\hbar} \quad (5.25)$$

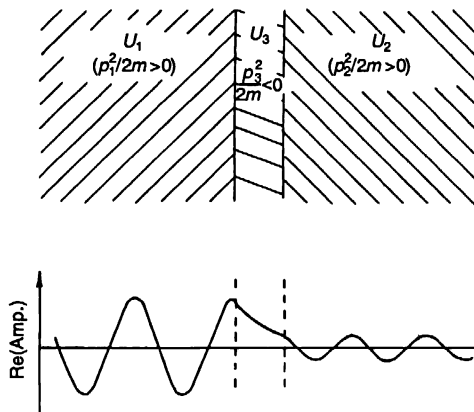
S rostoucím x prudce klesá.

Představme si, že by obě oblasti s různými potenciály byly velmi blízko u sebe, takže potenciální energie se náhle změní z U_1 na U_2 , jak je ukázáno na obr. 5.4a.



Obr. 5.4 Amplituda částice, která se blíží k silně odpudivému potenciálu

Vyneseme-li do grafu reálnou část amplitudy pravděpodobnosti, dostaneme závislost, která je zobrazena na obr. 5.4b. Vlna v první oblasti odpovídá částici, která se pokouší dostat se do druhé oblasti, v níž však amplituda prudce klesá. Existuje určitá pravděpodobnost, že ji budeme pozorovat v druhé oblasti – kam by se klasickým způsobem nikdy nedostala –, ale amplituda je (až na oblast těsné blízkosti hranice) velmi malá. Situace je velmi podobná případu s úplným odrazem světla. Tam jsme zjistili, že světlo se obvykle nedostane ven, ale můžeme je pozorovat, umístíme-li něco do vzdálenosti jedné nebo dvou vlnových délek od povrchu.

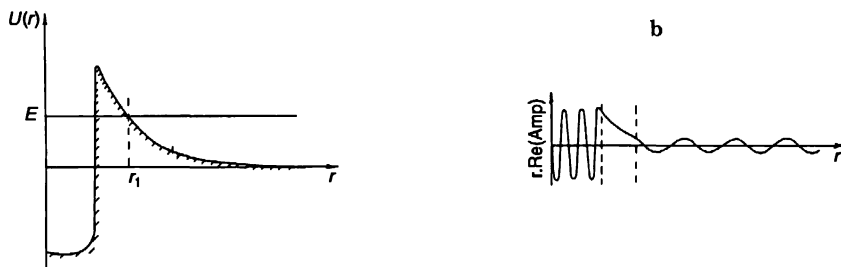


Obr. 5.5 Průběh amplitudy při průchodu potenciálovou bariérou

Pokud jsme v blízkosti rozhraní, na němž docházelo k úplnému odrazu světla, umístili další povrch, mohla projít část světla do tohoto materiálu. Něco podobného se děje s částicemi v kvantové mechanice. Máme-li úzkou oblast s tak velkým potenciálem, že klasická kinetická energie je záporná, klasická částice se odtud nikdy nedostane. V kvantové mechanice však může exponenciálně klesající amplituda projít až za hranici bariéry a vytvořit pravděpodobnost (i když malou),

že částici najdeme mimo původní oblast, tj. v místě, kde už je kinetická energie kladná. Situace je znázorněna na obr. 5.5. Uvedený jev nazýváme *kvantově mechanický tunelový jev*.

Na základě tohoto jevu můžeme vysvětlit (nebo popsat) α -rozpad jádra uranu. Na obr. 5.6a je ukázána závislost potenciální energie částice α na její vzdálenosti do středu jádra.

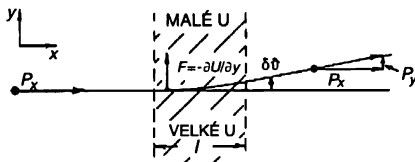


Obr. 5.6 a) Průběh potenciální energie částice α v jádru uranu, b) kvalitativní tvar amplitudy pravděpodobnosti

Kdybychom se pokusili vystřelit částici α s energií E do jádra, bude na ni působit elektrostatické odpuzování nábojem jádra; v klasickém případě by se nedostala blíže než do vzdálenosti r_1 , při níž je její celková energie rovna potenciální energii U . Při ještě menších vzdálenostech je však potenciální energie mnohem nižší, neboť se projevuje silné přitahování jaderných sil krátkého dosahu. Jak je pak možné, že při radioaktivním rozpadu detekujeme částice α , které vycházejí z nitra jádra s energií E ? Je to proto, že částice uvnitř jádra se od počátku pohybují s energií E a odtud pronikají potenciálovou bariérou. Přibližný průběh amplitudy pravděpodobnosti je na obr. 5.6b, ačkoliv ve skutečnosti je exponenciální pokles mnohem strmější. Je velice pozoruhodné, že zatímco střední doba života částice α v jádru uranu je 4,5 miliardy let, nabývá počet přirozených oscilací uvnitř jádra extrémních hodnot – kolem 10^{22} za sekundu! Jak můžeme dostat z čísla 10^{-22} sekund číslo 10^9 let? Odpověď spočívá v tom, že exponenciála dává nesmírně malý faktor kolem e^{-45} , který udává velmi malou (ale nenulovou) pravděpodobnost průniku. Když už je částice α v jádru, neexistuje téměř žádná amplituda, že ji nalezneme venku. Vezmete-li však mnoho jader a čekáte dostatečně dlouho, můžete mít štěstí a uvidíte, jak částice z jádra vyletí.

5.4 SÍLY. KLASICKÁ LIMITA

Uvažujme částici, pohybující se oblastí, v níž se mění potenciál ve směru kolmém na její pohyb. Z klasického hlediska bychom situaci popisovali tak, jak je znázorněna na obr. 5.7. Pohybuje-li se částice ve směru osy x a vstoupí do oblasti, kde se mění potenciál v závislosti na y , získá v důsledku síly $F = -\partial U / \partial y$ příčné zrychlení.



Obr. 5.7 Vychýlení částice příčným gradientem potenciálu

Vyskytuje-li se tato síla pouze na úseku s délkou l , bude působit jen po dobu l/v . Částice získá příčnou hybnost

$$p_y = F \frac{l}{v}$$

a odchýlí se o úhel

$$\delta\vartheta = \frac{p_y}{p} = \frac{Fl}{pv},$$

kde p je vstupní hybnost. Nahradíme-li sílu F výrazem $-\partial U/\partial y$, dostaneme

$$\delta\vartheta = -\frac{l}{pv} \frac{\partial U}{\partial y}. \quad (5.26)$$

Nyní přezkoumáme, zda dostaneme stejný výsledek pomocí představy, podle níž vlny splňují vztah (5.20). Podíváme se na celou situaci z hlediska kvantové mechaniky a předpokládáme, že všechny rozměry jsou v porovnání s vlnovou délkou amplitud pravděpodobnosti velké. V libovolné malé oblasti se amplituda mění takto

$$e^{-(i/\hbar) [(W + p^2/2M + U)t - p \cdot x]}. \quad (5.27)$$

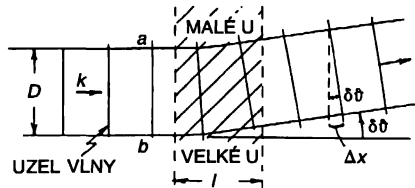
Lze z toho vyčíst, že se částice odchýlí, má-li U příčný gradient? Na obr. 5.8 jsme naznačili, jak budou vypadat vlny amplitudy pravděpodobnosti. Ukázali jsme několik „vlnových uzlů“, pod nimiž si můžete představit místa, v nichž je fáze amplitudy rovna nule. V každé malé oblasti je vlnová délka (vzdálenost mezi sousedními uzly) rovna

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

kde p souvisí s U podle vztahu

$$W + \frac{p^2}{2M} + U = \text{konst.} \quad (5.28)$$

V oblasti, kde je U větší, je p menší a vlnová délka delší. Proto se úhel vlnových uzlů mění tak, jak ukazuje obrázek.



Obr. 5.8 Amplituda pravděpodobnosti s v oblasti s příčným gradientem potenciálu

Abychom mohli vypočítat změnu úhlu vlnových uzlů, uvědomme si, že mezi dráhami a a b , vyznačenými na obr. 5.8, existuje potenciálový rozdíl $\Delta U = (\partial U/\partial y) D$, a proto existuje i rozdíl hybností Δp , který můžeme získat z rovnice (5.28)

$$\Delta \left(\frac{p^2}{2M} \right) = \frac{p}{M} \Delta p = -\Delta U. \quad (5.29)$$

Vlnové číslo proto bude na každé dráze jiné, to znamená, že fáze postupuje různými rychlostmi. Rozdíl rychlostí nárůstu fáze je $\Delta k = \Delta p / \hbar$, proto fázový rozdíl podél celkové vzdálenosti l bude

$$\Delta(\text{fáze}) = \Delta k \cdot l = \frac{\Delta p}{\hbar} l = -\frac{M}{p\hbar} \Delta U \cdot l. \quad (5.30)$$

Je to hodnota, o níž fáze na dráze b předbíhá fázi na dráze a v čase, kdy vlny opouštějí oblast. Mimo ni je velikost fázového předstihu rovna posunu vlnového uzlu o hodnotu

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi} \Delta(\text{fáze}) = \frac{\hbar}{p} \Delta(\text{fáze})$$

neboli

$$\Delta x = -\frac{M}{p^2} \Delta U \cdot l. \quad (5.31)$$

Podíváme-li se na *obr. 5.8*, vidíme, že nové čelo vlny se pootočí o úhel $\delta\vartheta$, který je určen vztahem

$$\Delta x = D \delta\vartheta; \quad (5.32)$$

proto dostáváme

$$D \delta\vartheta = -\frac{M}{p^2} \Delta U \cdot l. \quad (5.33)$$

Rovnice je totožná s rovnicí (5.26), nahradíme-li v ní p/m rychlostí v a $\Delta U/D$ výrazem $\partial U/\partial y$.

Výsledek, k němuž jsme dospěli, je správný jen tehdy, když se potenciál mění pomalu a spojitě – v tzv. *klasické limitě*. Ukázali jsme, že za těchto podmínek dostaneme stejný pohyb částice jako z rovnice $F = ma$, za předpokladu, že potenciál přispívá k fázi amplitudy pravděpodobnosti členem Ut/\hbar . V *klasickém přiblížení nastává shoda kvantové a Newtonovy mechaniky*.

5.5 PRECESE ČÁSTICE SE SPINEM 1/2

Všimněte si, že o potenciální energii jsme nepředpokládali nic zvláštního, je to prostě energie, jejíž derivací dostaneme sílu. Například ve Sternově-Gerlachově experimentu měla energie tvar $U = -\mu \cdot B$. Síla se objevuje tehdy, když se B mění v prostoru. Kdybychom chtěli použít kvantově mechanický popis, museli bychom říci, že částicím v jednom svazku se měnila energie přesně opačně než částicím v druhém svazku. (Magnetickou energii U jsme mohli započítat buď do potenciální energie W_{pot} , nebo do „vnitřní“ energie $W_{\text{vnitř}}$; nezáleží na tom, co si vybereme.) Protože se mění energie, vlny se lámou a svazky se ohýbají směrem nahoru nebo dolů. (Je vidět, že kvantově mechanickým přístupem bychom došli ke stejnému ohybu jako klasickým výpočtem.)

Protože amplituda je závislá na potenciální energii, dalo by se čekat, že nachází-li se částice v magnetickém poli, které je homogenní ve směru osy z , musí se jeho amplituda pravděpodobnosti měnit v čase podle závislosti

$$e^{-(i/\hbar)(-\mu_z B)t}.$$

(Můžeme to vlastně chápat jako definici μ_z .) Řečeno jinými slovy, umístíme-li částici do homogenního pole B na dobu τ , musíme vynásobit její amplitudu pravděpodobnosti faktorem

$$e^{-(i/\hbar)(-\mu_z B)\tau},$$

navíc k tomu, co bychom měli, kdyby pole neexistovalo. Protože v případě částice se spinem $1/2$ je veličina μ_z buď plus, nebo minus nějaké číslo (označme jej μ), budou se v homogenním poli měnit fáze obou možných stavů stejnými rychlostmi, ale opačnými směry. Obě amplitudy budou vynásobeny členy

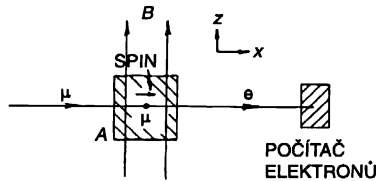
$$e^{\pm(i/\hbar)\mu B\tau}. \quad (5.34)$$

Uvedený výsledek vede k zajímavým důsledkům. Představme si částici se spinem $1/2$ v nějakém stavu, který neodpovídá ani čistému stavu se spinem nahoru, ani čistému stavu se spinem dolů. Můžeme jej popsat pomocí amplitud uvedených dvou čistých stavů. V magnetickém poli se však jejich fáze mění různými rychlostmi. Takže ptáme-li se na něco co se týká amplitud, odpověď bude záviset na tom, jak dlouho se částice v poli nachází.

Jako příklad si všimneme rozpadu mionu v magnetickém poli. Miony vznikají jako rozpadové produkty mezonů π v polarizovaném stavu (tj. preferují jeden směr spinu). Dále se rozpadají (v průměru asi za $2,2 \mu\text{s}$) na elektron a dvě neutrina

$$\mu \rightarrow e + \nu + \bar{\nu}.$$

V uvedeném rozpadu se ukazuje (alespoň při vyšších energiích), že převážná část elektronů vylétává ve směru, který je opačný, než směr spinu mionu.



Obr. 5.9 Experiment s rozpadem mionu

Představme si, že máme experimentální zařízení, zobrazené na obr. 5.9. Polarizované miony přilétají z levé strany, v materiálu A se zastaví a krátce poté se rozpadnou. Vzniklé elektrony budou létat všemi možnými směry. Předpokládejme, že všechny miony, které vstupují do brzdícího bloku A , mají spiny orientované ve směru osy x . Bez magnetického pole dostaneme určité úhlové rozdělení směrů rozpadu; nás zajímá, jak se změní uvedené rozdělení v přítomnosti magnetického pole. Očekáváme, že se určitým způsobem bude měnit v závislosti na čase. Zjistíme to tak, že se v každé chvíli zeptáme, jaká je amplituda toho, že mion najdeme ve stavu $(+x)$.

Otázku můžeme formulovat následujícím způsobem: Necht' se mion nachází v čase $t=0$ ve stavu se spinem orientovaným ve směru osy $+x$. Jaká je amplituda toho, že jej v čase τ najdeme v témž stavu? Sice neznáme pravidlo na to, jak se chová částice se spinem $1/2$ v magnetickém poli, které je kolmé na směr spinu, víme však, co se děje se stavy, v nichž jsou spiny orientovány vzhledem k poli směrem nahoru a dolů – jejich amplitudy se musí vynásobit faktorem (5.34). Naší

úlohou je vybrat takovou reprezentaci, jejíž bázevé stavy představují stav s orientací spinu nahoru a dolů (vzhledem k ose z , tj. ke směru pole). Libovolnou otázku pak můžeme vyjádřit pomocí amplitud daných stavů.

Nechť $\psi(t)$ představuje stav mionu. Vstupuje-li mion do bloku A , je jeho stav $\psi(0)$ a nás zajímá, jaké bude $\psi(\tau)$ v pozdějším čase τ . Označíme-li si dva bázevé stavy $(+z)$ a $(-z)$, budeme znát obě amplitudy $\langle +z | \psi(0) \rangle$ a $\langle -z | \psi(0) \rangle$, neboť víme, že $\psi(0)$ označuje stav se spinem ve směru $(+x)$. Na základě výsledků předcházející kapitoly můžeme psát²⁰⁾

$$\begin{aligned} \langle +z | +x \rangle &= C_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle -z | +x \rangle &= C_- = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Obě amplitudy jsou stejné. Protože se vztahují k času $t=0$, nazveme je $C_+(0)$ a $C_-(0)$. Už víme i to, jak budou záviset na čase. Na základě (5.34) dostáváme

$$\begin{aligned} C_+(t) &= C_+(0) e^{-(i/\hbar)\mu B t} \\ C_-(t) &= C_-(0) e^{+(i/\hbar)\mu B t}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Známe-li $C_+(t)$ a $C_-(t)$, víme vše, co potřebujeme vědět o podmínkách v čase t . Problém je v tom, že chceme zjistit, jaká je pravděpodobnost toho, že v čase t bude spin orientován ve směru $+x$. Obecná pravidla nám však umožňují danou úlohu řešit. Pro amplitudy stavu $(+x)$ v čase t označme ji $A_+(t)$ – píšeme

$$A_+(t) = \langle +x | \psi(t) \rangle = \langle +x | +z \rangle \langle +z | \psi(t) \rangle + \langle +x | -z \rangle \langle -z | \psi(t) \rangle$$

nebo-li

$$A_+(t) = \langle +x | +z \rangle C_+(t) + \langle +x | -z \rangle C_-(t). \quad (5.37)$$

Opět použijeme výsledky z předcházející kapitoly (nebo raději rovnost $\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^*$ z 3. kapitoly) a píšeme

$$\langle +x | +z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle +x | -z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

V rovnici (5.37) známe všechny členy. Dostáváme

$$A_+(t) = \frac{1}{2} e^{(i/\hbar)\mu B t} + \frac{1}{2} e^{-(i/\hbar)\mu B t}$$

resp.

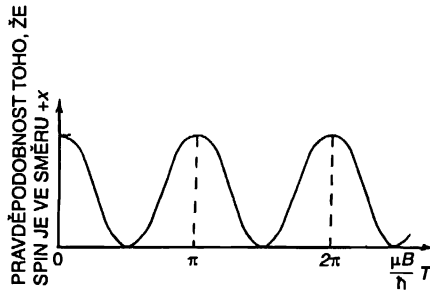
$$A_+(t) = \cos \frac{\mu B t}{\hbar}.$$

²⁰⁾ Pokud jsme 4. kapitolu přeskočili, můžete považovat vztahy (5.35) prostě za nedokázané pravidlo. Později (v 8. kapitole) uvedeme podrobnější rozbor precese spinu, který bude obsahovat odvození uvedených amplitud.

Úplně jednoduchý výsledek! Všimněte si, že souhlasí s tím, co jsme čekali v čase $t=0$. Dostaneme $A_+(0) = 1$, což je správné, neboť jsme předpokládali, že se mion v čase $t=0$ nacházel ve stavu $(+x)$. Pravděpodobnost P_+ toho, že se mion bude v čase t vyskytovat ve stavu $(+x)$ je $(A_+)^2$,

$$P_+ = \cos^2 \frac{\mu B t}{\hbar}.$$

Pravděpodobnost osciluje mezi nulou a jedničkou (obr. 5.10). Všimněte si, že nabývá hodnoty jedna tehdy, když $\mu B t / \hbar = \pi$. Protože se kosinus vyskytuje jen ve druhé mocnině, opakuje se pravděpodobnost s frekvencí $2\mu B / \hbar$.



Obr. 5.10 Časová závislost pravděpodobnosti toho, že se částice se spinem 1/2 bude nacházet ve stavu $(+)$ vzhledem k ose x

Vidíme, že naděje registrovat rozpadový elektron v detektoru elektronů (podle obr. 5.9) se periodicky mění s délkou časového intervalu, v němž se mion nacházel v magnetickém poli. Frekvence závisí na magnetickém momentu μ . Na tomto základě byl změřen i magnetický moment mionu.

Stejným způsobem můžeme samozřejmě odpovědět i další otázky týkající se rozpadu mionu. Například jak na čase t závisí pravděpodobnost toho, že zaregistrujeme rozpadový elektron ve směru osy y , tj. ve směru, který je kolmý na směr x a na magnetické pole? Výpočtem si můžete ověřit, že amplituda toho, že se mion bude vyskytovat ve stavu $(+y)$, se mění podle závislosti $\cos^2 \{(\mu B t / \hbar) - \pi/4\}$, která osciluje se stejnou periodou, ale své maximální hodnoty dosahuje o čtvrt cyklu později, kdy $\mu B t / \hbar = \pi/4$. Ve skutečnosti, jak čas plyne, mion postupně prochází stavy, které odpovídají úplné polarizaci v určitém směru, který se neustále otáčí kolem osy z . Můžeme to psát tak, že *spin vykonává precesi* s frekvencí

$$\omega_p = \frac{2\mu B}{\hbar}. \quad (5.38)$$

Začínáme vidět, jaké vztahy se objevují v kvantově mechanickém aparátu, popisujeme-li jevy, které jsou časově závislé.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 5.1 ■ Částice se spinem 1 a magnetickým momentem μ v magnetickém poli mířícím ve směru osy z se může nacházet ve stavech $+$, 0 , $-$, jimž odpovídají energie $-\mu B$, 0 , $+\mu B$. Metodami kvantové mechaniky ukažte, že v nehomogenním magnetickém poli se svazek takových částic rozštěpí na tři svazky a najděte zákony, podle nichž se tyto svazky odchylují (odchyly uvažujte malé). Odpověď vyjádřete pomocí velikosti prostorové oblasti, v níž pole působí, počáteční hybnosti částice apod. Dále ukažte, že taková částice bude vykonávat precesi (v kvantověmechanickém smyslu) a použijte přitom koeficienty (3.38) a úvahy uvedené v kapitole 5. Navrhněte alespoň dva nezávislé způsoby experimentálního určení veličiny μ .

Hamiltonova matice

6.1 AMPLITUDY A VEKTORY

6.2 ROZKLAD STAVOVÝCH VEKTORŮ

6.3 JAKÉ JSOU BÁZOVÉ STAVY TOHOTO SVĚTA?

6.4 JAK SE STAVY MĚNÍ S ČASEM

6.5 HAMILTONOVA MATICE

6.6 MOLEKULA AMONIAKU

Přečtěte si znovu kapitolu 49, díl 1, Mody

6.1 AMPLITUDY A VEKTORY

Dříve, než přistoupíme k vlastnímu obsahu této kapitoly, rádi bychom popsali několik matematických myšlenek, s nimiž se lze setkat v literatuře týkající se kvantové mechaniky. Seznámení se s nimi vám usnadní čtení knih a přednášek na toto téma. První z nich je velká podobnost mezi matematickým vyjádřením rovnic kvantové fyziky a vyjádřením rovnic pro skalární součin dvou vektorů. Zajisté si vzpomínáte, že jsou-li χ a φ dva stavy, lze amplitudu toho, že začneme ve φ a skončíme v χ zapsat jako součet jistého počtu členů, z nichž každý představuje amplitudu přechodu z φ do jednoho z báзовých stavů násobenou amplitudou přechodu z tohoto stavu do χ , přičemž sčítáme přes úplný soubor báзовých stavů

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle. \quad (6.1)$$

Platnost uvedené rovnice jsme si vysvětlili pomocí Sternova-Gerlachova přístroje, ale připomínáme, že se bez něho můžeme obejít. Rovnice (6.1) vyjadřuje matematický zákon, který je platný bez ohledu na to, zda použijeme filtrovací zařízení nebo ne – ne vždy je třeba představit si tam přístroj. Můžeme se na ni dívat jednoduše jako na vztah pro amplitudu $\langle \chi | \varphi \rangle$.

Rádi bychom porovnali rovnici (6.1) s formulí pro skalární součin dvou vektorů \mathbf{B} a \mathbf{A} . Jsou-li to oba obyčejné trojrozměrné vektory, můžeme jejich skalární součin zapsat takto

$$\sum_i (\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_i)(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}), \quad (6.2)$$

přičemž symbol \mathbf{e}_i představuje tři jednotkové vektory ve směrech x, y a z . $\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_i$ je to, co obvykle označujeme jako B_x , $\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_2$ je vlastně B_y atd., takže rovnice (6.2) je ekvivalentní

$$B_x A_x + B_y A_y + B_z A_z,$$

což je skalární součin $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$.

Porovnáme-li rovnice (6.1) a (6.2), můžeme si povšimnout následující analogie: Stav χ a φ odpovídají dvěma vektorům \mathbf{A} a \mathbf{B} . Bázové stavy i odpovídají vybraným vektorům \mathbf{e}_i , k nimž vztahujeme všechny ostatní vektory. Každý vektor můžeme reprezentovat jako lineární kombinaci tří bázových vektorů \mathbf{e}_i . Kromě toho, známe-li koeficienty, které stojí před každým z nich, tj. tři složky vektoru, víme o něm všechno. Podobným způsobem lze beze zbytku popsat i libovolný kvantově mechanický stav pomocí amplitud $\langle i | \varphi \rangle$ jeho přechodu do bázových stavů; známe-li tyto koeficienty, víme o stavu vše, co vědět lze. Vzhledem k této blízké analogii se tomu, co jsme nazvali *stav*, často říká *stavový vektor*.

Protože všechny bázové vektory \mathbf{e}_i svírají pravé úhly, platí vztah

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}. \quad (6.3)$$

Ten odpovídá vztahům (3.25) mezi bázovými stavy i

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Nyní už vidíte, proč říkáme, že bázové stavy i jsou navzájem ortogonální.

Mezi rovnicí (6.1) a skalárním součinem existuje menší rozdíl. Platí vztah

$$\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^* \quad (6.5)$$

zatímco ve vektorové algebře

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}.$$

Komplexní čísla způsobují, že v kvantové mechanice musíme dbát na pořadí členů, přičemž u skalárního součinu na něm nezáleží.

Uvažujme následující vektorovou rovnici

$$\mathbf{A} = \sum_i \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}). \quad (6.6)$$

Je trochu neobvyklá, ale správná. Znamená totéž, co

$$\mathbf{A} = \sum_i A_i \mathbf{e}_i = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z. \quad (6.7)$$

Všimněte si, že rovnice (6.6) obsahuje veličinu *různou* od skalárního součinu. Výsledkem skalárního součinu je *číslo*, zatímco rovnice (6.6) je *vektorovou* rovnicí. Jedním z vrcholných kousků vektorové analýzy bylo vyabstrahování pojmu samotného *vektoru* z vektorových rovnic. Člověk má pokušení udělat totéž i s kvantově mechanickou formulí (6.1) a definovat jakýsi analog „vektoru“ – a skutečně to jde. Z obou stran rovnice (6.1) odstraníme $\langle \chi |$ a zapíšeme získanou rovnici (nelekněte se – je to jen označení a za chvíli se dovíte, co jednotlivé symboly znamenají)

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | \varphi\rangle. \quad (6.8)$$

Na výraz $\langle \chi | \varphi\rangle$ se lze dívat tak, jakoby byl složen ze dvou složek. Druhá z nich, $|\varphi\rangle$ je často nazývána *ket-vektorem* a první zase *bra-vektorem* (spojeno dohromady vytvoří „bra-ket“²¹⁾ – označení navržené Diracem); polosymbolům $\langle \chi |$ a $|\varphi\rangle$ říkáme *stavové vektory*. V každém případě to *nejsou* čísla, ale my chceme dostat číselné výsledky našich výpočtů, takže takovéto „nedokončené“ veličiny představují jen částečné kroky v naší práci.

Až dosud jsme všechny odvozené výsledky zapisovali formou čísel. Jak se nám dařilo vyhnout se vektorům? Je zábavné si všimnout, že dokonce i v obyčejné vektorové algebře bychom *mohlivěci* zařídit tak, aby všechny rovnice obsahovaly pouze čísla. Například místo vektorové rovnice typu

$$F = ma$$

jsme mohli vždy psát

$$C \cdot F = C \cdot (ma).$$

Dostali bychom rovnost mezi skalárními součiny platnou pro libovolný vektor C . Platí-li však pro jakékoliv C , má sotva nějaký smysl je stále uvádět!

Podívejme se nyní na rovnici (6.1). Platí pro *libovolné* χ . Abychom ušetřili zbytečné psaní, prostě je vynecháme a místo toho píšeme rovnici (6.8). Obsahuje v sobě tutéž informaci *za předpokladu*, že si uvědomíme, že ji na obou stranách vždy musíme „ukončit vynásobením zleva“ (což prostě znamená doplněním) nějakým bra-vektorem $\langle \chi |$. Takže rovnice (6.8) znamená přesně to, co rovnice (6.1) – nic víc a nic máj. Chceme-li dostat čísla, dosadíme do ní potřebné $\langle \chi |$.

Možná, že jste se podivili nad ket-vektorem $|\varphi\rangle$ v rovnici (6.8). Platí-li rovnice pro *každé* φ , proč jej tam psát? Skutečně, Dirac navrhuje odpoutat se i od něj, takže dostaneme jen

$$| = \sum_i |i\rangle \langle i|. \quad (6.9)$$

A to je ten velký zákon kvantové mechaniky! (Ve vektorové analýze žádná analogie neexistuje.) Říká, že obložíme-li každou stranu zprava i zleva libovolnými dvěma stavy φ a χ , *opět dostaneme* rovnici (6.1). Ve skutečnosti nám nepřináší mnoho užítka, ale pěkným způsobem nám připomíná, že rovnice platí pro jakékoliv dva stavy.

6.2 ROZKLÁDÁNÍ STAVOVÝCH VEKTORŮ

Opět se podívejme na rovnici (6.8), kterou můžeme chápat takto: Každý stavový vektor lze vyjádřit jako lineární kombinaci bázevých vektorů s vhodnými koeficienty – nebo pokud se vám

21) V angličtině slovo bracket znamená závorku.

to líbí víc – jako superpozici jednotkových vektorů ve vhodných poměrech. Pro zdůraznění faktu, že koeficienty $\langle i | \varphi \rangle$ jsou pouze obyčejnými (komplexními) čísly, označme

$$\langle i | \varphi \rangle = C_i.$$

Rovnice (6.8) je pak identická s rovnicí

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle C_i. \quad (6.10)$$

Podobnou rovnici můžeme napsat pro jakýkoliv jiný stavový vektor, řekněme $|\chi\rangle$, samozřejmě s odlišnými koeficienty, např. D_i . Tak dostaneme

$$|\chi\rangle = \sum_i |i\rangle D_i. \quad (6.11)$$

Koeficienty D_i jsou právě amplitudy $\langle i | \chi \rangle$.

Představme si, že v rovnici (6.1) vynecháme φ . Dostali bychom

$$\langle \chi | = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i |. \quad (6.12)$$

Připomeneme-li si, že $\langle \chi | i \rangle = \langle i | \chi \rangle^*$, můžeme poslední rovnici upravit na tvar

$$\langle \chi | = \sum_i D_i^* \langle i |. \quad (6.13)$$

Je zajímavé, že rovnice (6.10) a (6.13) stačí pouze *vynásobit*, abychom se vrátili nazpět k $\langle \chi | \varphi \rangle$. Při ověřování tohoto tvrzení si musíme dát pozor na sumační indexy, neboť se v obou rovnicích liší. Přepíšeme nejdříve rovnici (6.13) takovým způsobem, že přeznačíme indexy

$$\langle \chi | = \sum_j D_j^* \langle j |.$$

Na platnosti vztahu to nic nemění. Spojíme-li ji s rovnicí (6.10) dostaneme

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{i,j} D_j^* \langle j | i \rangle C_i. \quad (6.14)$$

Vzpomeňme si, že $\langle j | i \rangle = \delta_{ij}$, takže z celého součtu zůstanou jen členy s $j = i$. Máme

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i D_i^* C_i, \quad (6.15)$$

kde, samozřejmě, $D_i^* = \langle i | \chi \rangle^* = \langle \chi | i \rangle$ a $C_i = \langle i | \varphi \rangle$. Opět můžeme zjistit blízkou analogii se skalárním součinem

$$A \cdot B = \sum_i A_i \cdot B_i.$$

Jediným rozdílem je znak komplexního sdružení nad D_i . Takže rovnice (6.15) říká, že rozložíme-li stavové vektory $\langle \chi |$ a $|\varphi\rangle$ podle báze vektorů $\langle i |$ nebo $|i\rangle$, je amplituda přechodu z φ do χ určena jakýmsi skalárním součinem (6.15). Tato rovnice je vlastně rovnicí (6.1), přepsanou do jiných symbolů. Chodíme stále v kruhu, abychom si zvykli na nová označení.

Snad bychom měli znovu zdůraznit, že zatímco vektory v trojrozměrném prostoru popisujeme pomocí *tří* ortogonálních jednotkových vektorů, musí báze vektory $|i\rangle$ kvantově mechanických stavů probíhat celým souborem příslušícím danému problému. V závislosti na konkrétní situaci může být jejich počet různý: dva, tři, pět nebo i nekonečně mnoho.

Taktéž jsme hovořili o tom, co se děje, procházejí-li částice přístrojem. Vypustíme-li částice v určitém stavu φ , necháme je projít experimentálním zařízením a pak měřením zjišťujeme, zda jsou ve stavu χ , je výsledek určen amplitudou

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle. \quad (6.16)$$

Tento symbol nemá ve vektorové algebře blízkou analogii. (Má blíž k tenzorové algebře, ale tato podobnost není kdovíjak užitečná.) V 3. kapitole, rovnice (3.32), jsme viděli, že rovnici (6.16) můžeme psát ve tvaru

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{i,j} \langle \chi | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | \varphi \rangle. \quad (6.17)$$

Je to jen příklad dvojnásobného použití základního pravidla (6.9).

Zjistili jsme i to, že přidáme-li za A další přístroj B , platí

$$\langle \chi | BA | \varphi \rangle = \sum_{i,j,k} \langle \chi | i \rangle \langle i | B | j \rangle \langle j | A | k \rangle \langle k | \varphi \rangle. \quad (6.18)$$

Opět to vychází přímo z Diracovy metody zápisu rovnice (6.9); vzpomeňme si, že mezi B a A můžeme vždy umístit znak $|$, který se chová jako faktor 1.

Mimořádně, na rovnici (6.17) se můžeme dívat i jinak. Uvažujme částici, která vstupuje do přístroje ve stavu φ a vychází z něj ve stavu ψ . Mohli bychom si položit následující otázku: Můžeme najít takové ψ , aby byla amplituda přechodu z ψ do χ vždy identická a všude stejná jako amplituda $\langle \chi | A | \varphi \rangle$? Odpověď zní: ano. Rovnici (6.17) chceme nahradit rovnicí

$$\langle \chi | \psi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (6.19)$$

Je zřejmé, že to můžeme udělat, platí-li

$$\langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | A | j \rangle \langle j | \varphi \rangle = \langle i | A | \varphi \rangle, \quad (6.20)$$

což vlastně určuje ψ . „Ale tato rovnice přece nedefinuje ψ , ale jen $\langle i | \psi \rangle$,“ namítnete. Ovšem $\langle i | \psi \rangle$ opravdu určuje ψ , protože známe-li všechny koeficienty, které spojují ψ s báze vektory i , je ψ definováno jednoznačně. Ve skutečnosti si můžeme s naším označením trochu pohrát a zapsat poslední člen v rovnici (6.20) jako

$$\langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | j \rangle \langle j | A | \varphi \rangle. \quad (6.21)$$

Jelikož tato rovnice platí pro všechna i , můžeme napsat

$$|\psi\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|A|\varphi\rangle. \quad (6.22)$$

Říkáme: „Stav ψ je ten, který dostaneme, začneme-li se stavem φ a projdeme přístrojem A “.

Uvedme poslední příklad takovýchto užitečných triků. Vycházíme opět z rovnice (6.17). Jelikož platí pro libovolné χ a φ , můžeme je obě vypustit. Máme²²⁾

$$A = \sum_{i,j} |i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|. \quad (6.23)$$

Co to znamená? Nic víc a nic míň než to, co dostaneme, vrátíme-li φ a χ na svá místa. V této podobě je rovnice „otevřená“ a neúplná. Vynásobíme-li ji zprava $|\varphi\rangle$, získáme

$$A|\varphi\rangle = \sum_{i,j} |i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|\varphi\rangle, \quad (6.24)$$

což je opět tatáž rovnice jako (6.22). Z ní jsme mohli prostě vynechat všechna j a psát

$$|\psi\rangle = A|\varphi\rangle. \quad (6.25)$$

Symbol A není ani amplituda, ani vektor; představuje pojem nového typu, který nazýváme *operátor*. Je to něco, co působí na stav a vyrábí z něj jiný; rovnice (6.25) říká, že $|\psi\rangle$ je výsledkem působení operátoru A na stav $|\varphi\rangle$. Zase před sebou máme otevřenou rovnici, kterou je třeba dokončit vynásobením určitým bra-vektorem, řekněme $\langle\chi|$

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|A|\varphi\rangle. \quad (6.26)$$

Operátor A je popsán beze zbytku, stanovíme-li matici amplitud $\langle i|A|j\rangle$ (označovaných i A_{ij}) pro libovolný soubor bázevých vektorů.

Celé toto nové matematické označení nám ve skutečnosti nepřináší nic nového. Jediný důvod, proč jsme se o něm zmínili, je to, že jsme vám chtěli ukázat způsob, jakým se zapisují zkrácené rovnice; v mnohých knihách totiž najdete rovnice zapsané v neúplném tvaru a není důvod mít z nich strach, když na ně narazíte. Pokud se vám zachce, můžete chybějící části vždy doplnit, čímž získáte rovnici, která mezi sebou spojuje čísla. V tomto tvaru se vám bude zdát známější.

Sami se přesvědčíte, že označení „bra“ a „ket“ jsou velmi výhodná. Především teď můžeme identifikovat stav udáním jeho stavového vektoru. Chceme-li se odvolávat na stav s danou hybností p , řekneme: „stav $|p\rangle$ “. Nebo budeme hovořit o nějakém libovolném stavu $|\psi\rangle$. Pro jednoznačnost budeme při zadání stavu vždy používat ket vektor a psát $|\psi\rangle$. (Přitom máme samozřejmě volnou ruku; stejně dobře jsme mohli zvolit označování bra, $\langle\psi|$).

²²⁾ Mohli byste si myslet, že bychom měli psát $|A|$ místo A . Pak by to však vypadalo jako symbol pro „absolutní hodnotu A “, takže kolmé čáry obvykle vynecháváme. Obecně se znak $|$ chová velmi podobně jako faktor jedna.

6.3 JAKÉ JSOU BÁZOVÉ STAVY TOHOTO SVĚTA?

Zjistili jsme, že libovolný stav v našem světě lze vyjádřit jako superpozici (lineární kombinaci s vhodnými koeficienty) báзовých stavů. Především se můžete zeptat: *kterých báзовých stavů? Existuje mnoho různých možností. Můžete udělat např. průmět spinu do směru osy z nebo do jakéhokoliv jiného. Existuje obrovské množství různých reprezentací, které představují analogii různých souřadnicových soustav pro vyjádření obyčejných vektorů. Dále se můžeme ptát: jaké koeficienty? To závisí na fyzikálních okolnostech. Různé soubory koeficientů odpovídají různým fyzikálním podmínkám. Důležitá věc je poznat „prostředí“, v němž pracujeme; jinými slovy, co znamenají báзовé stavy fyzikálně. Takže první, co obecně musíme znát, je to, jak báзовé stavy vypadají. Až pak můžeme porozumět tomu, jak jejich pomocí popisovat konkrétní situaci.*

Rádi bychom se na chvíli podívali trochu dopředu a pohovořili o tom, jak bude vypadat obecný kvantově mechanický popis přírody – vycházíme přitom ze současných představ fyziky. Nejdříve se člověk rozhodne pro konkrétní reprezentaci (výběr báзовých stavů) – různé reprezentace jsou vždy možné. Například pro částici se spinem $1/2$ můžeme zvolit stavy plus a minus vzhledem k ose z. Na této ose však není nic výjimečného – můžeme vzít jakoukoliv jinou, která se nám zlíbí. Pro důslednost však budeme vybírat osu z. Přestavme si, že máme situaci s jedním elektronem. Ke dvěma možnostem pro spin (nahoru a dolů vzhledem k ose z) přistupuje ještě hybnost elektronu. Vybereme soubor báзовých stavů, z nichž každý odpovídá jedné hodnotě hybnosti. A co když hybnost elektronu není přesně určena? Žádná tragédie, vždyť hovoříme pouze o tom, jak vypadají báзовé stavy. Nemá-li elektron přesně určenou hybnost, má určité amplitudy toho, že ta bude nabývat buď takových nebo jiných hodnot atd. A když se právě netočí tak, že by jeho spin mířil směrem nahoru, existuje určitá amplituda toho, že se při dané hybnosti točí se spinem směřujícím nahoru, a určitá amplituda toho, že se při téže hybnosti točí tak, že spin míří dolů. *Zatím víme jen to, že úplný popis elektronu vyžaduje, aby báзовé stavy závisely na hybnosti a spinu.* Takže jeden přijatelný soubor báзовých stavů pro samotný elektron je přiřazen různým hodnotám hybnosti a tomu, zda spin směřuje nahoru nebo dolů. Různé možnosti skládání amplitud, tj. různé kombinace koeficientů C popisují různé okolnosti. To, co daný elektron dělá, určíme tak, že řekneme, jakou má amplitudu pro spin nahoru nebo dolů a pro tu či onu hodnotu hybnosti (pro všechny možné hodnoty). Nyní už vidíme, co v sobě skrývá úplný kvantově mechanický popis jednotlivého elektronu.

A co se systémy obsahujícími víc než jeden elektron? V tomto případě se báзовé stavy stanou složitějšími. Představme si, že máme dva elektrony. Především tak dostaneme čtyři možné stavy vzhledem ke spinu: oba elektrony se spinem nahoru, první dolů a druhý nahoru, první nahoru a druhý dolů a nakonec oba se spinem dolů. Musíme také určit, že první elektron má hybnost p_1 a druhý p_2 . Báзовé stavy pro dva elektrony proto vyžadují definici dvou hybností a dvou označení spinu. Je-li elektronů sedm, musíme určit sedm takových párů.

Máme-li proton a elektron, musíme specifikovat orientaci spinu a hybnost každého z nich. Platí to alespoň přibližně. *Ve skutečnosti nevíme, jak vypadá správná reprezentace pro náš svět. Je velmi přitažlivé začít předpokladem, že určíme-li spin a hybnost elektronu a taktéž protonu, dostaneme báзовé stavy; ale co si počít s „vnitřnostmi“ protonu? Podívejme se na tuto otázku jinak.* V atomu vodíku, který se skládá z jednoho protonu a jednoho elektronu, musíme vyjádřit mnoho různých báзовých stavů odpovídajících spinovým stavům nahoru a dolů a zároveň různým možným hodnotám hybnosti obou částic. Existují různé kombinace amplitud C_i , které spolu popisují charakter atomu vodíku v různých stavech. Představme si, že se díváme na vodíkový atom jako na jeden celek, jako na „částici“. Kdybychom nevěděli, že je složen z protonu a elektronu,

mohli bychom začít tvrzením: „Víme, jak vypadají báзовé stavy – odpovídají různým hodnotám hybnosti atomu vodíku.“ Tak tomu však není, neboť vodíkový atom má vnitřní části. Může být proto v různých stavech lišících se vnitřní energií, takže popisování skutečné přírody vyžaduje poznání dalších podrobností.

Otázka zní: Má proton nějaké vnitřní složky? Musíme popisovat proton zadáním všech možných stavů protonů, mezonů nebo podivných částic? To nevíme. A i když předpokládáme, že elektron je jednoduchý objekt a vše, co je o něm třeba říci, je zadat jeho hybnost a spin, už zítra se může ukázat, že i on má uvnitř „páčky a kolečka“. Znamenalo by to, že naše představa je neúplná, anebo nesprávná, anebo přibližná. Stejně by byla neúplná představa o atomu vodíku popisující jen jeho hybnost, protože by nebrala v úvahu možnost vnitřní excitace. Kdyby i elektron mohl být vnitřně excitován a mohl by se změnit v cosi jiného, např. mion, bylo by jej nutno popsat nejen jednoduchým zadáním stavů nové částice, ale dejme tomu pomocí nějakých složitějších vnitřních součástí. *Dnes hlavní problém při studiu elementárních částic* spočívá v tom, jak najít správné představy pro popis přírody. V současnosti se *domníváme*, že pro elektron stačí udát jeho hybnost a spin. Taktéž předpokládáme, že existuje i idealizovaný proton se svými mezony π , mezony K atd. a všechny je třeba výslovně uvést. Několik tuctů částic – vždyť je to nemyslitelné!²³⁾ Otázka, co je elementární částice a co *ne* (na toto téma je dnes mnoho diskuzí), je vlastně otázkou, jak bude vypadat konečná *reprezentace* v definitivním kvantově mechanickém popisu světa. Bude ještě hybnost elektronu stále tím správným pojmem pro popis přírody? Je vůbec třeba postavit celou tuto otázku takovým způsobem? Podobné úvahy se musí vynořovat při každém vědeckém výzkumu. V každém případě je problém znám – jak najít správnou reprezentaci. Odpověď neznáme. Dokonce ani nevíme, zda je to ten „pravý“ problém, ale kdyby jím přece jen byl, musíme se nejdříve snažit zjistit, zda je daná konkrétní částice „elementární“ nebo ne.

V nerelativistické kvantové mechanice, kde energie nejsou příliš vysoké, takže se nenarušuje vnitřní mechanismus podivných částic apod., můžeme provádět i složité výpočty a o tyto podrobnosti se nestarat. Stačí nám definovat hybnosti, spiny elektronů a jader a všechno bude v pořádku. Ve většině chemických reakcí a jiných nízkoenergetických dějích se v jádrech nic neodehrává; do excitovaných stavů se nedostávají. Kromě toho, pohybuje-li se vodíkový atom pomalu a klidně se sráží s ostatními atomy vodíku – přičemž nikdy nedochází ani k jeho vnitřní excitaci, ani k vyzařování energie a ani k žádným podobným komplikacím, ale vždy setrvává v základním energetickém stavu vnitřního pohybu – můžeme použít přiblížení, v němž se na něj budeme dívat jako na jeden jediný objekt, jednu jedinou částici a nebudeme se trápit skutečností, že se v jeho nitru *může* něco dít. Bude to dobré přiblížení, pokud kinetická energie bude v každé srážce podstatně menší než 10 eV, tj. než energie potřebná k excitaci vodíkového atomu do jiného vnitřního stavu. Často budeme využívat přiblížení, v němž zanedbáváme možnost vnitřního pohybu, čímž zároveň snížíme počet detailů, které musíme zahrnout do našich báзовých stavů. Samozřejmě, vynecháme tím některé jevy, které by se (obvykle) objevily při nějaké vyšší energii, ale velmi se nám zjednoduší rozbor fyzikálních problémů. Například můžeme studovat srážku dvou vodíkových atomů při nízkých energiích (nebo libovolný chemický proces) a nestarat se přitom o to, že by se atomová jádra mohla dostat do excitovaného stavu. Provedme shrnutí. Máme-li právo zanedbat efekty způsobené vnitřními excitovanými stavy částice, můžeme vybrat báзовý soubor ze stavů s určitou hodnotou hybnosti a *z*-ovou složkou momentu hybnosti.

23) Proton a další „tucty“ částic zvané hadrony si dnes představujeme složené ze složek zvaných kvarky. Ty však nejsou schopny samostatné existence. Elektron a další tzv. leptony stále považujeme za jednoduché. (Pozn. red.)

Prvním z problémů při popisování přírody je tedy najít vhodnou reprezentaci pro bázevé stavy. Ale to je pouze začátek. Chceme být schopni říci i to, co se „stane“. Známe-li „stav“ našeho světa vjednom okamžiku, rádi bychom jej znali i v pozdějším okamžiku. Takže musíme ještě najít zákony, které určují, jak se všechno s časem mění. Nyní se obracíme k druhé části rámce kvantové mechaniky – na to, jak stavy závisí na čase.

6.4 JAK SE STAVY MĚNÍ S ČASEM

Už jsme hovořili o tom, jak můžeme znázorňovat situaci, necháme-li něco projít přístrojem. Jedno takové rozkošné, pro zkoumání vhodné „zařízení“ si lze představit tak, že se prostě zastavíme a počkáme několik minut; tj. připravíme stav φ a dříve než přistoupíme ke zkoumání, necháme jej chvíli v klidu. Necháme ho třeba v určitém elektrickém nebo magnetickém poli – to závisí na fyzikálních okolnostech. V každém případě ať jsou podmínky jakékoliv, necháme daný objekt v klidu v časovém intervalu od t_1 do t_2 . Představme si, že v čase t_1 vychází z prvního přístroje ve stavu φ a pak vstupuje do druhého „přístroje“, který však představuje pouze obyčejné čekání až do okamžiku t_2 . Po dobu čekání může dojít k mnoha událostem (k působení vnějších sil nebo k jiným „nepřístojnostem“); tedy, něco se odehrává. Na konci zdržení už nebude amplituda nalezení našeho objektu v nějakém stavu χ přesně tatáž, jako by byla bývala, kdyby ke zpoždění nedošlo. Protože „čekání“ je pouze zvláštním druhem „přístroje“, můžeme popsat budoucnost udáním amplitudy ve stejném tvaru jako má rovnice (6.17). Protože operace „čekání“ je velmi důležitá, nebudeme ji nazývat A , ale U ; abychom blíže určili počáteční a konečný čas t_1 a t_2 , budeme psát $U(t_2, t_1)$. Zajímá nás amplituda

$$\langle \chi | U(t_2, t_1) | \varphi \rangle. \quad (6.27)$$

Podobně jako jakoukoliv jinou amplitudu, lze tento výraz vyjádřit v nějakém bázevém systému ve tvaru

$$\sum_{i,j} \langle \chi | i \rangle \langle i | U(t_2, t_1) | j \rangle \langle j | \varphi \rangle. \quad (6.28)$$

U je pak beze zbytku popsána udáním úplného souboru amplitud – maticí

$$\langle i | U(t_2, t_1) | j \rangle. \quad (6.29)$$

Mimochodem, lze ukázat, že uvedená matice poskytuje mnohem víc podrobností, než je někdy potřeba. Fundovaný teoretický fyzik, pracující v oblasti fyziky vysokých energií, se zabývá problémy, které mají následující obecnou povahu (protože tímto způsobem se obvykle provádějí experimenty). Začíná s párem částic, řekněme protonem a neutronem, které se k sobě přibližují z nekonečna. (V laboratoři je jedna částice obvykle v klidu a druhá přichází z urychlovače, který je v atomových rozměrech prakticky v nekonečnu.) Dochází ke srážce, při níž vylétají např. dva mezony K , šest mezonů π a dva neutrony, přitom každá ze vzniklých částic má svůj směr a určitou hybnost. Jaká je amplituda této události? Matematika vypadá asi takto: Stav φ určuje spiny a hybnosti vstupujících částic. V χ se skrývá odpověď na otázku, jaký bude výsledek srážky. Například s jakou amplitudou vznikne šest mezonů v takovém směru a dva neutrony letící v takových a takových směrech se spiny orientovanými tak a tak. Jinými slovy, χ je určeno zadáním všech

hybností, spinů apod. konečných produktů. Úkolem teoretika je vypočítat amplitudu (6.27). Ve skutečnosti se však zajímá jen o speciální případ, kdy $t_1 = -\infty$ a $t_2 = +\infty$. (Nemáme experimentální údaje o podrobnostech samotného procesu, ale jen o vstupu a výstupu.) Limitní případ pro $U(t_2, t_1)$, kdy $t_1 \rightarrow -\infty$ a $t_2 \rightarrow +\infty$ označujeme písmenem S a hledáme

$$\langle \chi | S | \varphi \rangle.$$

Použijeme-li tvar (6.28), je třeba vypočítat matici

$$\langle i | S | j \rangle,$$

kteřou nazýváme matice S . Takže uvidíte-li teoretického fyzika, jak chodí po místnosti sem a tam a bručí: „Jediné, co mi zbývá, je vypočítat matici S “, budete vědět, nad čím si láme hlavu a co mu nedá spát.

Otázka, jak analyzovat matici S (jak pro ni určit zákony), je velmi zajímavá. Jedním způsobem se to provádí v relativistické kvantové mechanice pro vysoké energie, ale i v nerelativistické kvantové teorii to jde jinak, a výhodněji. (Tento druhý způsob lze použít i v relativistickém případě, ale tam už ztrácí své výhodné vlastnosti.) Základní myšlenka spočívá v odvození matice U pro malý časový interval, tj. jsou-li t_1 a t_2 blízko sebe. Budeme-li umět najít posloupnost takových matic U pro časové intervaly následující za sebou, můžeme sledovat, jak se vše v čase vyvíjí. Ihned je jasné, že zmíněný postup se nehodí pro teorii relativity, protože není snadné ukázat, jak vypadá všechno „současně“ všude. Tím se však netrapme; naší starostí zůstane jen nerelativistická mechanika.

Uvažujme matici U pro dobu zpoždění času t_1 k času t_3 , který je větší než t_2 . Jinak řečeno, vezměme tři po sobě následující časy: t_1 menší než t_2 a to menší než t_3 . Tvrdíme, že matice patřící intervalu od t_1 do t_3 je součinem toho, co se stane při vyčkání od t_1 do t_2 a pak do t_3 . Je to velmi podobné situaci, kdy jsme měli dva přístroje B a A umístěné za sebou. Budeme-li se držet označených zavedených ve stati 3.6 můžeme napsat

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2) \cdot U(t_2, t_1). \quad (6.30)$$

Jinými slovy, dokážeme-li prozkoumat posloupnost za sebou následujících krátkých časových úseků, umíme analyzovat libovolný časový interval. Všechny členy mezi sebou prostě vynásobíme; takovým způsobem se přistupuje k nerelativistické analýze kvantové mechaniky.

Nášim úkolem je tedy najít matici $U(t_2, t_1)$ pro nekonečně malý časový interval, tj. pro $t_2 = t_1 + \Delta t$. Klademe si následující otázku: máme-li nyní stav φ , jak bude vypadat po uplynutí nekonečně malého času Δt ? Podívejme se, jak to můžeme zapsat. Označme stav v čase t jako $|\psi(t)\rangle$ (explicitně vypisujeme závislost ψ na čase, aby bylo úplně jasné, že máme na mysli podmínky v čase t .) Ptáme se, jaký bude stav po uplynutí malého časového intervalu Δt . Odpověď je tato:

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = U(t + \Delta t, t) |\psi(t)\rangle. \quad (6.31)$$

Vyjadřuje totéž, co rovnice (6.25), tj. že amplituda najít v čase $t + \Delta t$ stav χ je dána vztahem

$$\langle \chi | \psi(t + \Delta t) \rangle = \langle \chi | U(t + \Delta t, t) | \psi(t) \rangle. \quad (6.32)$$

Jelikož ještě nemáme úplně v křvi zacházení s abstraktními věcmi, promítneme naše amplitudy do určité reprezentace. Vynásobíme-li obě strany rovnice (6.31) stavem $\langle i |$, dostaneme

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \langle i | U(t + \Delta t, t) | \psi(t) \rangle. \quad (6.33)$$

Také $|\psi(t)\rangle$ můžeme rozložit do báзовých stavů a psát

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \sum_j \langle i | U(t + \Delta t, t) | j \rangle \langle j | \psi(t) \rangle. \quad (6.34)$$

Rovnici (6.34) můžeme chápat takto. Označíme-li amplitudu toho, že v čase t najdeme stav ψ v báзовém stavu i jako $C_i(t)$ (tj. $C_i(t) = \langle i | \psi(t) \rangle$), můžeme se na ni dívat jako na číslo měnící se s časem (je to *obyčejné číslo*, vzpomeňte si!) Každé C_i je funkcí času t . A *nějakou* informací o jejich časové závislosti už máme. Každá amplituda v čase $(t + \Delta t)$ je úměrná *všem ostatním* amplitudám v čase t , násobeným nějakým souborem koeficientů. Označme matici U jako U_{ij} , čímž chápeme, že

$$U_{ij} = \langle i | U | j \rangle.$$

Pak můžeme rovnici (6.34) přepsat do tvaru

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j U_{ij}(t + \Delta t, t) C_j(t). \quad (6.35)$$

Tak bude vypadat dynamika kvantové mechaniky.

O koeficientech U_{ij} toho moc nevíme, až na jednu věc: Blíží-li se Δt nule, nemůže se nic stát, měli bychom dostat původní stav. Takže $U_{ii} \rightarrow 1$ a $U_{ij} \rightarrow 0$ pro $i \neq j$. Jinými slovy pro $\Delta t \rightarrow 0$ platí $U_{ij} = \delta_{ij}$. Zároveň můžeme předpokládat, že pro malé Δt by se měl každý koeficient U_{ij} lišit od δ_{ij} o hodnoty úměrné Δt , takže můžeme napsat

$$U_{ij} = \delta_{ij} + K_{ij} \Delta t. \quad (6.36)$$

Z historických a jiných příčin je zvykem vyčlenit z koeficientů K_{ij} faktor $(-i/\hbar)$, kde i je imaginární jednotka a proto dáváme přednost zápisu

$$U_{ij}(t + \Delta t, t) = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t. \quad (6.37)$$

Je to samozřejmě totéž, co rovnice (6.36), a lze to chápat jako definici koeficientů H_{ij} . Členy H_{ij} jsou vlastně úměrné derivacím koeficientů $U_{ij}(t_2, t_1)$ podle t_2 v čase $t_2 = t_1 = t$.

Použijeme-li toto vyjádření pro U v rovnici (6.35), máme

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j \left[\delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t \right] C_j(t). \quad (6.38)$$

Z celého součtu členů obsahujících δ_{ij} zůstane jen $C_i(t)$, což můžeme převést na druhou

stranu rovnice. Po jejím vydělení členem Δt poznáváme derivaci

$$\frac{C_i(t + \Delta t) - C_i(t)}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij}(t) C_j(t)$$

neboli

$$i\hbar \frac{d C_i(t)}{d t} = \sum_j H_{ij}(t) C_j(t). \quad (6.39)$$

Určitě si vzpomínáte, že $C_i(t)$ vyjadřuje amplitudu $\langle i | \psi \rangle$ nalezení stavu ψ v jednom z báзовých stavů i (v čase t). Takže rovnice (6.39) nám říká, jak se každý z koeficientů mění v čase. To je však totéž, jako když řekneme, že rovnice (6.39) nám určuje, jak závisí na čase stav ψ , neboť ten popisujeme pomocí amplitud $\langle i | \psi \rangle$. Změna ψ s časem je vyjádřena maticí H_{ij} , která musí v sobě zahrnovat vše, co jsme dělali se systémem, abychom způsobili jeho změnu. Známe-li matici H_{ij} , která v sobě ukrývá celou fyzikální situaci a může obecně záviset na čase, umíme s jistotou říci, jak se chová celý systém v čase. Rovnice (6.39) je proto *kvantově mechanickým zákonem pro dynamický vývoj světa*.

(Měli bychom zdůraznit, že vždy vybíráme soubor fixovaných báзовých stavů, které se s časem nemění. Někteří fyzici používají báзовé stavy závislé na čase. Je to podobné používání rotující soustavy souřadnic v mechanice a my se nechceme pouštět do takových problémů.)

6.5 HAMILTONOVA MATICE

Myšlenka tedy spočívá v tom, že pro kvantově mechanický popis světa je třeba vybrat soubor báзовých stavů i a napsat fyzikální zákony zadáním matice koeficientů H_{ij} . Pak budeme mít vše, co je třeba: Můžeme odpovědět na libovolnou otázku týkající se toho, co se stane. Zbývá nám tedy naučit se pravidla pro hledání matic H příslušejícím různým fyzikálním situacím – jaké H odpovídá magnetickému poli, jaké elektrickému atd. A to je nejtěžší část celé práce. Např. nemáme ani potuchy, jaké hodnoty H_{ij} použít pro nové podivné částice. Jinými slovy, nikdo nezná *všechny* prvky H_{ij} pro celý svět. (Problémy spočívají částečně v tom, že sotva lze mít reálnou naději objevit H_{ij} , když ani nevíme, jaké jsou báзовé stavy!) Přece však existují pro nerelativistické jevy a některé jiné speciální případy vynikající přiblížení. Konkrétně umíme popsat chemii – známe potřebné tvary pro pohyby elektronů v atomech. Nevíme však, jak vypadá úplná, pravá matice H pro celý vesmír.

Koeficienty H_{ij} nazýváme *Hamiltonovou maticí*, zkráceně pouze *hamiltoniánem*. (Jak došlo k tomu, že kvantově mechanická matice dostala jméno podle Hamiltona, činného ve 30. letech 19. století, je dlouhá historie.) Z důvodů, které si ozřejmíme později, by bylo mnohem výstižnější pojmenovat ji *matice energie*. Úloha zní: Najdi hamiltonián!

Jednu vlastnost hamiltoniánu lze zjistit ihned; totiž to, že

$$H_{ij}^* = H_{ji}. \quad (6.40)$$

Tato vlastnost vyplývá z podmínky, že celková pravděpodobnost toho, že systém se nachází vůbec v nějakém stavu, se nemění. Máme-li na začátku nějakou částici (nebo objekt, či dokonce celý svět), budeme ji mít i v libovolném budoucím okamžiku. Celková pravděpodobnost někde ji najít

je dána výrazem

$$\sum_i |C_i(t)|^2,$$

který se v čase měnit nesmí. Platí-li to pro jakoukoliv počáteční podmínku φ , musí platit i (6.40).

Jako náš první příklad uvažujme situaci, v níž se fyzikální podmínky s časem nemění; máme na mysli *vnější* fyzikální podmínky, takže H nezávisí na čase. Nikdo magnety nezapíná, ani nevypíná. Také si vybereme systém, na jehož popis stačí jediný bázevý stav; toto přiblížení bychom mohli udělat pro vodíkový atom v klidu nebo pro něco podobného. Rovnice (6.39) pak říká

$$i\hbar \frac{d C_1}{d t} = H_{11} C_1. \quad (6.41)$$

Pouze jedna rovnice – a dost! Je-li H_{11} konstanta, řešení této diferenciální rovnice najdeme snadno

$$C_1 = (\text{konst}) e^{-i(t/\hbar)H_{11}t}. \quad (6.42)$$

Představuje časovou závislost stavu s pevně určenou energií $E = H_{11}$. Je vidět, proč by se měla matice H_{ij} nazývat maticí energie; zobecňuje pojem energie na složitější situace.

Abychom porozuměli trochu víc, co tato závislost znamená, podívejme se na systém se dvěma bázeovými stavy. Pak čteme rovnici (6.39) takto

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d C_1}{d t} &= H_{11} C_1 + H_{12} C_2 \\ i\hbar \frac{d C_2}{d t} &= H_{21} C_1 + H_{22} C_2. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Jsou-li všechna H_{ij} opět nezávislá na čase, můžete uvedené rovnice snadno vyřešit. Zkuste si to sami, jen tak pro zábavu; my se k nim vrátíme později. Opravdu ano, už jste schopni provádět výpočty v kvantové mechanice, i když o matici H víte jen tolik, že její prvky nezávisí na čase.

6.6 MOLEKULA AMONIAKU

Nyní vám chceme ukázat, jak lze použít dynamickou rovnici kvantové mechaniky pro popis konkrétní fyzikální situace.

Vybrali jsme si zajímavý, ale přitom jednoduchý příklad, z něhož můžeme odvodit několik důležitých (a dokonce praktických) výsledků, učiníme-li o hamiltoniánu několik rozumných předpokladů. Vezmeme příklad, který stačí popsat dvěma stavy: molekulu amoniaku.

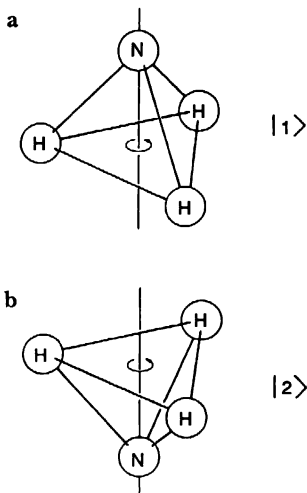
Molekulu amoniaku tvoří jeden atom dusíku a tři atomy vodíku, které leží v rovině pod atomem dusíku, takže jako celek má molekula tvar pyramidy (*obr. 6.1a*). Tato molekula, tak jako každá jiná, se může nacházet v nekonečném počtu stavů. Může se točit kolem libovolné osy, pohybovat se v jakémkoliv směru, kmitat atd. Vůbec nepředstavuje systém se dvěma stavy. Proto použijeme následující přiblížení: Uvažujme, že všechny stavy, které nás právě nezajímají, jsou pevně fixovány. Budeme předpokládat, že se molekula pouze točí kolem jedné osy své symetrie

(jak ukazuje obrázek), že hybnost příslušná pohybu jejího těžiště je nulová a že její kmity jsou velmi slabé. Tím jsme specifikovali všechny podmínky až na jednu: Stále ještě existují *dvě možné polohy pro atom dusíku* – může se nacházet buď na jedné, nebo na druhé straně roviny vytvořené atomy vodíku (obr. 6.1a a 6.1b). Takže na molekulu amoniaku se budeme dívat jako na systém se dvěma stavy. Rozumíme tím to, že existují jen dva stavy, které nás budou zajímat; vše ostatní budeme považovat za dáno. Jak vidíte, dokonce i když víme, že se molekula točí kolem své osy symetrie s určitým momentem hybnosti, že se pohybuje určitou rychlostí a kmitá jistým způsobem, stále ještě zůstávají dva možné stavy. Budeme říkat, že molekula je ve stavu $|1\rangle$, je-li dusík nahoře (obr. 6.1a) a ve stavu $|2\rangle$, je-li dusík dole (obr. 6.1b). Při našem rozboru chování molekuly amoniaku vybereme stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ za soubor bázových stavů. V libovolném okamžiku lze momentální stav $|\psi\rangle$ molekuly určit zadáním $C_1 = \langle 1 | \psi \rangle$, tj. amplitudy výskytu ve stavu $|1\rangle$, a $C_2 = \langle 2 | \psi \rangle$ – amplitudy nalezení systému ve stavu $|2\rangle$. Využijeme-li rovnici (6.8), lze stavový vektor $|\psi\rangle$ psát ve tvaru

$$|\psi\rangle = |1\rangle \langle 1 | \psi \rangle + |2\rangle \langle 2 | \psi \rangle$$

nebo

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2. \quad (6.44)$$



Obr. 6.1 Dvě ekvivalentní geometrická uspořádání molekuly amoniaku

Je zajímavé, že nachází-li se molekula v daném okamžiku v nějakém stavu, v následující chvíli už v něm nebude. Dva koeficienty C_i se budou měnit s časem podle rovnice (6.43), které platí pro jakýkoliv systém se dvěma stavy. Představme si, např. že po nějakém pozorování (nebo po určitém výběru molekul) víme, že *na počátku* je molekula ve stavu $|1\rangle$. V nějakém pozdějším čase máme naději najít ji ve stavu $|2\rangle$. Abychom poznali naše vyhlídky, musíme vyřešit diferenciální rovnici, která nám říká, jak se amplitudy mění s časem.

Jediný problém je v tom, že nevíme, co použít jako koeficienty H_{ij} v rovnici (6.43). Přece však o nich *můžeme* něco říci. Představme si, že molekula, kterou jsme už jednou dostali do stavu $|1\rangle$, nebude mít žádnou možnost přejít do stavu $|2\rangle$ a naopak. Oba koeficienty H_{12} i H_{21} budou rovny nule a z rovnic (6.43) zůstane

$$i\hbar \frac{d C_1}{d t} = H_{11} C_1, \quad i\hbar \frac{d C_2}{d t} = H_{22} C_2.$$

Řešení jsou úplně jednoduchá; dostaneme

$$C_1 = \text{konst } e^{-(i/\hbar)H_{11}t}, \quad C_2 = \text{konst } e^{-(i/\hbar)H_{22}t}. \quad (6.45)$$

Jsou to právě amplitudy pro *stacionární* stavy s energiemi $E_1 = H_{11}$ a $E_2 = H_{22}$. Poznamenejme, že stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ molekuly amoniaku mají určitou symetrii. Má-li se příroda chovat více méně rozumně, musí být maticové elementy H_{11} a H_{22} rovny jeden druhému. Oba označíme E_0 , neboť odpovídají energii, kterou by měly stavy, kdyby H_{12} a H_{21} byly rovny nule. Rovnice (6.45) nám však neřkají, co se s amoniakem ve skutečnosti děje. Ukazuje se, že dusík je schopen protlačit se mezi vodíkovými atomy a překlopit se na druhou stranu. Je to dost těžké; aby dusík prošel poloviční cestu potřebuje mnoho energie. Jak může prorazit na druhou stranu, pokud jí nemá dostatek? Přesto *existuje* určitá amplituda, že molekula pronikne energetickou bariérou. V kvantové mechanice je možné proklouznout oblastí, která je energeticky zakázána. Máme proto malou amplitudu toho, že molekula projde ze stavu $|1\rangle$ do stavu $|2\rangle$. Koeficienty H_{12} a H_{21} ve skutečnosti nejsou rovny nule. Opět by z důvodů symetrie měly být stejné – alespoň co do velikosti. Už víme, že H_{ij} musí být obecně komplexně sdružené s H_{ji} , takže se mohou lišit jedině fází. Ukazuje se (jak uvidíte), že položíme-li je rovny jeden druhému, neutrpíme žádnou újmu na obecnosti. Později zjistíme, že bude vhodné považovat je za záporná čísla; vezmeme $H_{12} = H_{21} = -A$. Dostaneme následující pár rovnic

$$i\hbar \frac{d C_1}{d t} = E_0 C_1 - A C_2 \quad (6.46)$$

$$i\hbar \frac{d C_2}{d t} = E_0 C_2 - A C_1. \quad (6.47)$$

Jsou dostatečně jednoduché a lze je řešit mnoha způsoby. Vhodná cesta je tato. Sčítáním obou rovnic dostaneme rovnici

$$i\hbar \frac{d}{d t} (C_1 + C_2) = (E_0 - A) (C_1 + C_2),$$

jejíž řešení má tvar

$$C_1 + C_2 = a e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \quad (6.48)$$

Odečítáním rovnic (6.46) a (6.47) zjistíme, že

$$i\hbar \frac{d}{d t} (C_1 - C_2) = (E_0 + A) (C_1 - C_2),$$

což dává řešení

$$C_1 - C_2 = b e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \quad (6.49)$$

Dvě integrační konstanty jsme označili a a b ; je třeba je samozřejmě zvolit tak, abychom dostali

příslušné počáteční podmínky pro daný fyzikální problém. Sčítáním a odečítáním rovnic (6.48) a (6.49) najdeme C_1 a C_2 :

$$C_1(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t} \quad (6.50)$$

$$C_2(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \quad (6.51)$$

Liší se jen znaménkem u druhého členu.

Řešení jsme našli; co však znamenají? (V kvantové mechanice je těžké nejen rovnice vyřešit, ale i pochopit, co řešení znamenají!) Zprvce si všimneme, že je-li $b=0$, mají obě řešení stejnou frekvenci $\omega = (E_0 - A)/\hbar$. Pokud se ale všechno mění s jednou a toutéž frekvencí, znamená to, že systém je ve stavu s určitou energií – v našem případě s energií $(E_0 - A)$. Takže existuje stacionární stav s touto energií; obě amplitudy C_1 a C_2 jsou v něm rovny. Přicházíme k tomuto výsledku: Má-li dusík stejné amplitudy být nahoře i dole, *molekula amoniaku má přesně určenou energii $(E_0 - A)$* .

Existuje ještě jeden stacionární stav pro $a=0$; obě amplitudy mají frekvenci $(E_0 + A)/\hbar$. Jsou-li obě amplitudy stejné až na znaménko, tj. $C_2 = -C_1$, dostáváme stav s energií $(E_0 + A)$. Toto jsou jediné dva stavy s přesně určenou hodnotou energie. V další kapitole rozebereme stavy molekulý amoniaku podrobněji; zde o nich zmíníme jen něco.

Přicházíme tedy k závěru: Protože dusíkový atom má nenulovou pravděpodobnost překlopit se z jedné polohy do druhé, energie molekuly není přesně E_0 , jak bychom očekávali, ale existují *dvě* energetické hladiny $(E_0 + A)$ a $(E_0 - A)$. Každý z možných stavů molekuly, ať má jakoukoliv energii, je „rozštěpen“ do dvou hladin. Říkáme *jakýkoliv* stav, protože jak si jistě vzpomenete, vybrali jsme jeden konkrétní rotační stav s danou vnitřní energií atd. Protože se molekula překlápí, existuje pro každou možnou podmínku podobného druhu dublet energetických hladin.

Položme si o molekule amoniaku následující otázku. Předpokládejme, že v čase $t=0$ *víme*, že molekula je ve stavu $|1\rangle$, jinak řečeno, že $C_1(0) = 1$ a $C_2(0) = 0$. Jaká je pravděpodobnost, že v čase t ji najdeme ve stavu $|2\rangle$? Nebo budeme opět ve stavu $|1\rangle$? Počáteční podmínka nám říká, jaké jsou koeficienty a a b v rovnicích (6.50) a (6.51). Položíme-li $t=0$, máme

$$C_1(0) = \frac{a+b}{2} = 1, \quad C_2(0) = \frac{a-b}{2} = 0$$

Je zřejmé, že $a=b=1$. Po dosazení těchto hodnot do vztahů pro $C_1(t)$ a $C_2(t)$, a po malé úpravě dostaneme

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t} \left(\frac{e^{(i/\hbar)At} + e^{-(i/\hbar)At}}{2} \right)$$

$$C_2(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t} \left(\frac{e^{(i/\hbar)At} - e^{-(i/\hbar)At}}{2} \right),$$

což lze přepsat jako

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar)E_0 t} \cos \frac{At}{\hbar} \quad (6.52)$$

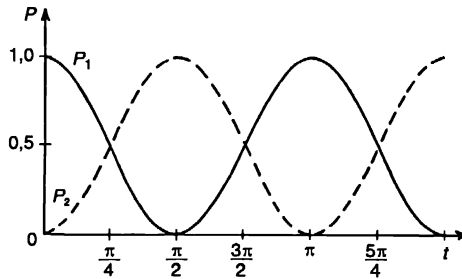
$$C_2(t) = ie^{-(i/\hbar)E_0 t} \sin \frac{At}{\hbar}. \quad (6.53)$$

Velikost obou amplitud se mění s časem harmonicky.

Pravděpodobnost toho, že v čase t najdeme molekulu ve stavu $|2\rangle$, je dána druhou mocninou modulu $C_2(t)$:

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{At}{\hbar}. \quad (6.54)$$

Pravděpodobnost začíná od nuly (jak by se patřilo), stoupá k jedné a pak osciluje dolů a nahoru mezi nulou a jednou, jak naznačuje křivka P_2 na obr. 6.2. Pravděpodobnost být ve stavu $|1\rangle$ nezůstává samozřejmě rovna jedné. Přečlívá do druhého stavu, do té doby, dokud není pravděpodobnost najít molekulu v prvním stavu rovna nule, jak ukazuje křivka P_1 na obr. 6.2. *Pravděpodobnost se jednoduše mezi těmito dvěma stavy přelévá.*



Obr. 6.2 P_1 je pravděpodobnost toho, že v čase t najdeme molekulu amoniaku ve stavu $|1\rangle$, nacházela-li se v něm v čase $t=0$. P_2 je pravděpodobnost toho, že se ocitne ve stavu $|2\rangle$ (čas v jednotkách \hbar/A).

Je to už dost dávno, co jsme zkoumali pohyb dvou stejných kyvadel, mezi nimiž existuje slabá vazba (kapitola 49, díl 1). Vychýlíme-li jedno z nich do strany a pustíme ho, bude se kývat, ale postupně rozkýve i druhé a to zanedlouho přebere všechnu energii. Pak se proces obrátí a energie se opět vrátí k prvnímu kyvadlu. Přesně totéž se děje i zde. Rychlost, jakou si obě kyvadla vyměňují energii mezi sebou (rychlost přeskokování kmitů), závisí na jejich vzájemné vazbě. Kromě toho, jak si vzpomínáte, u dvou kyvadel existují dva speciální pohyby, tzv. vlastní kmity s přesně určenou hodnotou frekvence. Pohneme-li oběma kyvadly společně v jednom směru, budou se kývat se stejnou frekvencí. Na druhé straně, vychýlíme-li první na jednu a druhé na opačnou stranu, vznikne jiný stacionární typ kmitů s určitou frekvencí.

Nynější situace je obdobná – z matematické stránky se molekula amoniaku podobá páru kyvadel. $(E_0 + A)/\hbar$ a $(E_0 - A)/\hbar$ jsou těmi hodnotami frekvence, při nichž kmitají buď souhlasně, nebo proti sobě.

Analogie s kyvadly nemá hlubší význam než zásada, že tytéž rovnice mají tatáž řešení. Lineární rovnice (6.39) pro amplitudy se velice podobají lineárním rovnicím harmonických oscilátorů. (Ve skutečnosti tomuto důvodu vděčíme za úspěch naší klasické teorie indexu lomu, v níž jsme kvantově mechanický atom nahradili harmonickým oscilátorem, ačkoliv z klasického hlediska to není rozumný pohled na elektrony kroužící kolem jádra. Vysuneme-li atom dusíku na jednu stranu, nastane superpozice těchto dvou frekvencí a dostaneme určitý druh rážů, protože systém *se nebude* nacházet v jednom či druhém stavu s přesně určenou hodnotou frekvence. Rozštěpení energetických hladin molekuly amoniaku je ovšem čistě kvantově mechanickým efektem.

Má mnoho důležitých praktických využití, s nimiž se seznámíme v následující kapitole. Konečně tedy máme příklad praktického fyzikálního problému, kterému můžeme porozumět pomocí kvantové mechaniky!

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 6.1** ■ Svazek částic se spinem $1/2$ a magnetickým momentem μ prochází Sternovým-Gerlachovým filtrem, který propouští pouze částice ve stavu $|+\rangle$ se spinem mířícím v kladném směru osy z . Částice pak tráví dobu T v homogenním magnetickém poli \mathbf{B}_0 rovnoběžným s osou x . Když toto pole opustí, vstupují do druhého Sternova-Gerlachova filtru, který propouští pouze částice ve stavu $|-\rangle$ se spinem v záporném směru osy z . Pokládejte vektory μ a \mathbf{J} za rovnoběžné.
- Jaká je minimální hodnota B_0 , při níž všechny částice projdou druhým filtrem?
 - Stráví-li částice v magnetickém poli jen polovinu doby T , jaká je pravděpodobnost toho, že projdou druhým filtrem?
- 6.2** ■ Svazek částic se spinem $1/2$ a magnetickým momentem μ prochází Sternovým-Gerlachovým přístrojem, který propouští pouze částice ve stavu $|+\rangle$ se spinem mířícím v kladném směru osy z . Svazek pak vstupuje do magnetického pole, které míří pod úhlem 45° k ose z v rovině x, z . Jaká je pravděpodobnost toho, že po uplynutí doby T budou tyto částice nalezeny ve stavech $J_x = \hbar/2$ nebo $J_y = \hbar/2$? Pokládejte vektory μ a \mathbf{J} za rovnoběžné.
- 6.3** ■ V okamžiku $t=0$ míří spin částice ve směru $+z$ (velikost spinu je $1/2$). Částice je umístěna v přístroji, který zajišťuje konstantní amplitudu překlopení spinu částice za jednotku času rovnou iA/\hbar , tj. $H_{12} = H_{21} = -A$, kde A je kladná konstanta. Kromě toho $H_{11} = H_{22}$ a je možno je položit rovné nule.
- Čemu je rovna pravděpodobnost nalezení částice v okamžiku T ve stavu $+z$?
 - Najděte dvě lineární kombinace amplitud stavů $+z$ a $-z$, které by odpovídaly stacionárním stavům. Čemu jsou rovny energie těchto stacionárních stavů?
 - V každém okamžiku T existuje směr, v němž spin míří vzhůru s pravděpodobností rovnou jedné. Najděte tento směr.
 - Dokážete vymyslet fyzikální přístroj k realizaci uvažovaných jevů?

Amoniakový maser

7.1 STAVY MOLEKULY AMONIAKU

7.2 MOLEKULA VE STATICKÉM ELEKTRICKÉM POLI

7.3 PŘECHODY V ČASOVĚ ZÁVISLÉM POLI

7.4 PŘECHODY PŘI REZONANCI

7.5 PŘECHODY MIMO REZONANCI

7.6 ABSORPCE SVĚTLA

7.1 STAVY MOLEKULY AMONIAKU

V této kapitole si pomocí kvantové mechaniky rozebereme a vysvětlíme činnost jednoho praktického přístroje – amoniakového maseru.²⁴⁾ Možná, že se divíte, proč přerušujeme formální budování kvantové mechaniky a zastavujeme se u speciálního problému, ale nakonec zjistíte, že s mnohými jeho rysy se lze běžně setkat v obecné teorii kvantové mechaniky; pokud si ho podrobně prostudujeme, naučíme se mnoho nového. Amoniakový maser je přístroj na generování elektromagnetických vln. Jeho činnost je založena na vlastnostech molekuly amoniaku (ty jsme stručně zmínili v předcházející kapitole). Nejdříve si shrňme, co jsme se dosud dozvěděli.

Molekula amoniaku může existovat v mnoha stavech. Budeme se na ni však dívat jako na dvojhladinový systém a bude nás zajímat jen to, co se děje, nachází-li se v kterémkoliv určitém rotačním nebo translačním stavu. Fyzikální model dvou zmíněných stavů lze vizuálně znázornit takto: Uvažujeme-li, že molekula amoniaku rotuje kolem osy procházející atomem dusíku a kolmé na rovinu vytvořenou atomy vodíku (*obr. 7.1*), ještě stále existují dva možné stavy – dusík se může nacházet buď na jedné, nebo na druhé straně roviny tvořené vodíkovými atomy. Tyto dva stavy nazveme $|1\rangle$ a $|2\rangle$. V našem rozboru chování molekuly amoniaku si je vybereme jako soubor bázevých stavů.

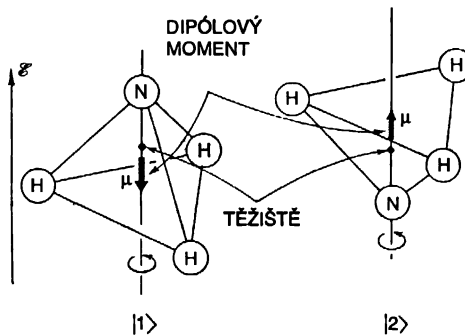
V systému se dvěma bázevými stavy lze libovolný stav $|\psi\rangle$ vždy vyjádřit jako lineární kombinaci těchto stavů, tj. existuje určitá amplituda C_1 toho, že ho najdeme v jednom bázevém stavu a amplituda C_2 toho, že ho najdeme ve stavu druhém. Jeho stavový vektor můžeme napsat takto

²⁴⁾ MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) – zesilování mikrovln pomocí stimulované emise záření.

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2, \quad (7.1)$$

kde

$$C_1 = \langle 1|\psi\rangle \text{ a } C_2 = \langle 2|\psi\rangle.$$



Obr. 7.1 Fyzikální model pro dva bázevé stavy molekuly amoniaku. Oba mají elektrický dipólový moment hodnoty μ .

Obě amplitudy se mění v čase podle Hamiltonových rovnic (6.43). Využijeme-li symetrie těchto dvou stavů molekuly amoniaku, klademe $H_{11} = H_{22} = E_0$ a $H_{12} = H_{21} = -A$, čímž dostaneme řešení ve tvaru (viz rovnice (6.50) a (6.51))

$$C_1 = \frac{a}{2} e^{-i/\hbar(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-i/\hbar(E_0 + A)t} \quad (7.2)$$

$$C_2 = \frac{a}{2} e^{-i/\hbar(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-i/\hbar(E_0 + A)t}. \quad (7.3)$$

Podívejme se trochu blíže na tato obecná řešení. Představme si, že jsme na počátku dostali molekulu do stavu $|\psi_{II}\rangle$, pro který je koeficient b roven nule. V čase $t=0$ jsou amplitudy výskytu ve stavech $|1\rangle$ a $|2\rangle$ navzájem identické a *identické zůstanou i v libovolném pozdějším okamžiku*. Jejich fáze se mění s časem stejným způsobem s frekvencí $(E_0 - A)/\hbar$. Podobně, pokud bychom měli dát molekulu do stavu $|\psi_I\rangle$, pro který je $a=0$, měla by amplituda C_2 opačné znaménko než C_1 ; tento vztah by mezi nimi zůstal natrvalo. Obě amplitudy by se nyní měnily s časem s frekvencí $(E_0 + A)/\hbar$. Zmíněné případy jsou jedinými dvěma možnými stavy, v nichž vztah mezi C_1 a C_2 nezávisí na čase.

Našli jsme dvě speciální řešení, v nichž velikosti amplitud nejenže zůstávají v čase stejné, ale jejich fáze se mění se stejnou frekvencí. Ve smyslu naší definice ze stati 5.1 jsou to *stacionární stavy*, což znamená, že mají *přesně určenou hodnotu energie*. Stavů $|\psi_{II}\rangle$ odpovídá energie $E_{II} = E_0 - A$ a stavů $|\psi_I\rangle$ energie $E_I = E_0 + A$. Oba jsou jedinými existujícími stacionárními stavy, takže zjišťujeme, že molekula má dvě energetické úrovně, lišící se o energii $2A$. (Máme na mysli dvě energetické hladiny pro daný uvažovaný rotační a vibrační stav, o němž jsme hovořili v našich úvodních předpokladech.)²⁵⁾

25) V dalším výkladu, budete-li si jej číst pro sebe nebo se o něm budete s někým bavit, vám velice pomůže, najdete-li si šikovní způsob pro slovní rozlišení arabských 1 a 2 od římských I a II. Považujeme za vhodné ponechat pojmenování „jeden“ a „dva“ pro arabské číslování a pro římské číslování zavést výrazy z jiného jazyka, např. „one“ a „two“ (ačkoliv „unus“ a „duo“ by bylo logičtější!).

Kdybychom byli nepřipustili možnost, že se dusík smí překlápět sem a tam, byli bychom nuceni vzít A nulové a obě energetické hladiny by splynuly do jedné s energií E_0 . Skutečné hladiny jsou jiné: Jejich průměr je E_0 , ale jsou rozštěpeny o $\pm A$, čímž vzniká rozdíl $2A$ mezi energiemi obou stavů. Jelikož A je ve skutečnosti velmi malé, energetický rozdíl je taktéž nepatrný.

Na excitaci *elektronu* uvnitř atomu jsou třeba poměrně vysoké energie; proces vyžaduje fotony v optické nebo ultrafialové oblasti. Na excitaci *vibrací* molekul jsou třeba fotony z infračerveného pásma. Hovoříme-li o excitaci *rotací*, odpovídají energetické rozdíly stavů fotonům z daleké infračervené zóny. Rozdíl $2A$ je menší než jakýkoliv z nich, menší než energie infračervených fotonů aspadá až do mikrovlnné oblasti. Bylo experimentálně zjištěno, že existující dvojice energetických hladin se liší o 10^{-4} eV, což je ekvivalentní frekvenci $24 \cdot 10^3$ MHz. Je zřejmé, že $2A = hf$, kde $f = 24 \cdot 10^3$ MHz (což odpovídá vlnové délce 1,25 cm). Máme tedy molekulu, která při přechodu neemituje světlo v běžném slova smyslu, ale vyzařuje mikrovlny.

V dalším výkladu pro nás bude výhodnější popsat tyto dva stavy s přesně určenou hodnotou energie trochu lepším způsobem. Představme si, že sestrojíme amplitudu C_{II} tak, že vezmeme součet dvou čísel C_1 a C_2 :

$$C_{II} = C_1 + C_2 = \langle 1 | \varphi \rangle + \langle 2 | \varphi \rangle. \quad (7.4)$$

Co by to znamenalo? C_{II} představuje amplitudu toho, že najdeme stav $|\varphi\rangle$ v novém stavu $|II\rangle$, v němž se amplitudy původních bázevých stavů navzájem rovnají. Píšeme-li $C_{II} = \langle II | \varphi \rangle$, můžeme si v rovnici (7.4.) odmyslet $|\varphi\rangle$ (protože ta platí pro libovolné φ), čímž dostaneme

$$\langle II | = \langle 1 | + \langle 2 |,$$

což znamená totéž jako

$$|II\rangle = |1\rangle + |2\rangle.$$

Amplituda nalezení stavu $|II\rangle$ ve stavu $|1\rangle$ je

$$\langle 1 | II \rangle = \langle 1 | 1 \rangle + \langle 1 | 2 \rangle,$$

což je samozřejmě rovno 1, neboť $|1\rangle$ a $|2\rangle$ jsou bázevých stavy. Podobně i amplituda toho, že stav $|II\rangle$ bude ve stavu $|2\rangle$, je rovna 1, takže $|II\rangle$ je takový stav, který má stejné amplitudy dostat se do dvou bázevých stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$.

Upadli jsme však do menších problémů. Ukazuje se, že celková pravděpodobnost, že najdeme stav $|II\rangle$ buď v jednom, nebo ve druhém bázevém stavu je větší než 1. To zkrátka znamená, že stavový vektor není správně normován. Vše dáme do pořádku, když si uvědomíme, že musí platit $\langle II | II \rangle = 1$, ale nejen to: Vyžadujeme, aby této podmínce vyhovoval libovolný stav. Při použití obecného stavu

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle,$$

v němž za χ a φ položíme stav II a výpočtem přes bázevých stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ dostaneme

$$\langle II | II \rangle = \langle II | 1 \rangle \langle 1 | II \rangle + \langle II | 2 \rangle \langle 2 | II \rangle.$$

Uvedený skalární součin bude roven 1, pozměníme-li naši definici amplitudy v v rovnici (7.4) takto

$$C_{\text{II}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 + C_2).$$

Týmž způsobem můžeme sestrojít amplitudu

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 - C_2)$$

neboli

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle 1 | \varphi \rangle - \langle 2 | \varphi \rangle]. \quad (7.6)$$

Tato amplituda je projekcí stavu $|\varphi\rangle$ do nového stavu $|I\rangle$, jehož amplitudy nacházet se ve stavech $|1\rangle$ a $|2\rangle$ se liší pouze znaménkem. Rovnice (7.6) totiž znamená totéž co

$$\langle I | = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle 1 | - \langle 2 |]$$

nebo

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle], \quad (7.7)$$

z čeho vyplývá

$$\langle 1 | I \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = -\langle 2 | I \rangle.$$

Důvod, proč jsme to všechno dělali, je ten, že stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$ lze zvolit za nový soubor bázeových stavů, který je velmi vhodný pro popis stacionárních stavů molekuly amoniaku. Zajisté si vzpomínáte, že požadavky kladené na soubor bázeových stavů jsou

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}.$$

Už jsme vše zařídili tak, aby platilo

$$\langle I | I \rangle = \langle II | II \rangle = 1.$$

Z rovnic (7.5) a (7.7) snadno ukážete, že

$$\langle I | II \rangle = \langle II | I \rangle = 0.$$

Amplitudy $C_I = \langle I | \varphi \rangle$ a $C_{II} = \langle II | \varphi \rangle$ toho, že se libovolný stav φ ocitne v našich nových bázeových stavech $|I\rangle$ a $|II\rangle$, musí také vyhovovat Hamiltonově rovnici (6.39). Opravdu, odečteme-li rovnice (7.2) a (7.3) jednu od druhé a derivujeme podle t , vidíme, že

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A) C_I = E_I C_I. \quad (7.8)$$

Když naopak obě rovnice sčítáme, dostaneme

$$i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A) C_{II} = E_{II} C_{II}. \quad (7.9)$$

Použijeme-li $|I\rangle$ a $|II\rangle$ za bázové stavy, získá Hamiltonova matice jednoduchý tvar

$$\begin{aligned} H_{I,I} &= E_I, & H_{I,II} &= 0 \\ H_{II,I} &= 0, & H_{II,II} &= E_{II}. \end{aligned}$$

Všimněte si, že obě rovnice, (7.8) i (7.9), vypadají přesně tak jako rovnice pro systém s jediným bázovým stavem, ke kterému jsme došli ve stati 6.6. Přísluší jim jednoduchá exponenciální časová závislost odpovídající jediné hodnotě energie. Amplitudy být v každém ze stavů se v čase navzájem neovlivňují.

Oba stacionární stavy $|\psi_I\rangle$ a $|\psi_{II}\rangle$, které jsme už našli, jsou samozřejmě řešenými rovnic (7.8) a (7.9). Pro stav $|\psi_I\rangle$ (v němž $C_I = -C_{II}$) máme

$$C_I = e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \quad C_{II} = 0 \quad (7.10)$$

a stavu $|\psi_{II}\rangle$ (v němž $C_I = C_{II}$) patří

$$C_I = 0, \quad C_{II} = e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \quad (7.11)$$

Vzpomeňte si, jak jsou definovány amplitudy v rovnici (7.10):

$$C_I = \langle I | \psi_I \rangle \quad \text{a} \quad C_{II} = \langle II | \psi_I \rangle$$

takže rovnice (7.10) vyjadřuje totéž, co

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}.$$

Vyjádřeno slovy, stavový vektor stacionárního stavu $|\psi_I\rangle$ se od stavového vektoru bázového stavu $|I\rangle$ liší jediné exponenciálním faktorem příslušným k energii stavu. V čase $t=0$ platí

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle.$$

Stav $|I\rangle$ má tedy stejnou fyzikální konfiguraci jako stacionární stav s energií $E_0 + A$. Týmž způsobem najdeme pro druhý stacionární stav vyjádření

$$|\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}.$$

Stav $|II\rangle$ je právě stacionárním stavem s energií $E_0 - A$ v čase $t=0$. Tedy naše nové bázové stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$ mají fyzikálně tvar stavů s přesně určenou hodnotou energie, ale s vynechaným exponenciálním časovým faktorem, takže je lze považovat za bázové stavy nezávislé na čase. (V následujícím výkladu nám přijde vhod, že ne vždy budeme muset odlišovat stacionární stavy $|\psi_I\rangle$ a $|\psi_{II}\rangle$ od jejich bázových stavů $|I\rangle$ a $|II\rangle$, jelikož jediný rozdíl mezi nimi je v zřejmých časových faktorech.)

Shrňme nové výsledky. Stavové vektory $|I\rangle$ a $|II\rangle$ představují pár bázových vektorů přizpůsobených pro popis molekuly amoniaku ve stavech s přesně určenou hodnotou energie. S našimi

původními vektory souvisejí vztahy

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle], \quad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle + |2\rangle]. \quad (7.12)$$

Amplitudy očitnutí se ve stavech $|I\rangle$ a $|II\rangle$ závisejí na C_1 a C_2 takto

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 - C_2), \quad C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 + C_2). \quad (7.13)$$

Libovolný stav lze vyjádřit buď jako lineární kombinaci stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$ (s koeficienty C_1 a C_2), nebo jako lineární superpozici bázevých stavů $|I\rangle$ a $|II\rangle$ (s koeficienty C_I a C_{II}), stavů s přesně určenou hodnotou energie. Tedy

$$|\varphi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2$$

nebo

$$|\varphi\rangle = |I\rangle C_I + |II\rangle C_{II}.$$

Druhé vyjádření nám poskytuje amplitudy pro nalezení stavu $|\varphi\rangle$ ve stavu s energií $E_I = E_0 + A$, nebo ve stavu s energií $E_{II} = E_0 - A$.

7.2 MOLEKULA VE STATICKÉM ELEKTRICKÉM POLI

Nachází-li se molekula amoniaku v libovolném ze dvou stavů s přesně určenou hodnotou energie a dostane se pod vliv poruchy s takovou frekvencí ω , že $\hbar\omega = E_I - E_{II} = 2A$, může systém přejít z jednoho stavu do druhého. Je-li např. ve vyšším energetickém stavu, může „spadnout“ do nižšího a emitovat foton. Avšak na vyvolání takových přechodů musíme mít fyzikální spojení s danými stavy – musíme nějakým způsobem „vyvést zmíněný systém z klidu“. Je nutné, aby existoval určitý vnější mechanismus, který by působil na stavy, jako např. elektrická a magnetická pole. Nyní se proto blíže podíváme na otázku chování molekuly amoniaku ve vnějším elektrickém poli.

Při rozboru budeme raději pracovat v našem původním bázevém systému $|1\rangle$ a $|2\rangle$ než v systému $|I\rangle$ a $|II\rangle$. Uvažujme přítomné elektrické pole kolmé na rovinu tvořenou atomy vodíku. Zapomeneme-li na chvíli na možnost překlápění a zanedbáme ji, bude platit, že energie molekuly je stejná pro obě polohy dusíkového atomu? Obecně ne. Elektrony mají tendenci nacházet se blíž u jádra dusíku než u vodíkových jader, takže atomy vodíku se jeví, jako kdyby nesly kladný náboj. Jeho konkrétní velikost závisí na podrobnostech v rozdělení elektronů. Přesný výpočet tohoto rozdělení představuje složitý problém, ale v každém případě čistý výsledek je ten, že molekula amoniaku má elektrický dipólový moment, jak je naznačeno na *obr. 7.1*.

V další analýze můžeme pokračovat, aniž bychom dopodrobna znali směr a velikost posunutí náboje. Aby se však naše označení nelišila od obecně používaných, předpokládejme, že elektrický dipólový moment je roven μ a směřuje od atomu dusíku kolmo k rovině tvořené vodíkovými atomy.

Přeskočí-li nyní dusík z jedné strany na druhou, zůstane těžiště tam, kde předtím, ale elektrický dipólový moment se převrátí. Výsledkem je fakt, že energie molekuly závisí na její

orientaci vzhledem k elektrickému poli \mathcal{E} .²⁶⁾ Za uvedeného předpokladu bude potenciální energie vyšší, je-li vrchol amoniakové pyramidy, tj. atom dusíku, vysunut ve směru pole, a nižší, bude-li to naopak. Rozdíl mezi dvěma energiemi bude $2\mu\mathcal{E}$.

Až dosud jsme v naší diskuzi přijímali hodnoty E_0 a A , aniž bychom věděli, jak je vypočítat. Správná fyzikální teorie by měla být schopna umožnit nám tyto konstanty určit, známe-li polohu a pohyb všech jader a elektronů. Ještě nikdo však nedělal. Taková soustava obsahuje deset elektronů a čtyři jádra, a to je problém příliš komplikovaný. Není na světě nikdo, kdo by o této molekule věděl mnohem víc než my. Každý o ní může říci jen tolik, že v přítomnosti elektrického pole je energie obou stavů různá, přičemž tento rozdíl je úměrný velikosti elektrického pole. Koeficient úměrnosti jsme nazvali 2μ , ale jeho hodnotu je třeba určit experimentálně. Lze ještě říci, že amplituda překlopení molekuly je A , ale i tu je třeba změřit. Nikdo nám nemůže dát přesné teoretické hodnoty pro μ a A , protože výpočty jsou příliš složité na to, aby bylo možné je provést podrobně.

V případě molekuly amoniaku v elektrickém poli musíme náš popis pozměnit. Pokud bychom nebrali v úvahu amplitudu překlopení molekuly z jedné konfigurace do druhé, očekávali bychom, že energie stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$ by byly $(E_0 \pm \mu\mathcal{E})$. V souladu s postupem v předcházející kapitole klademe

$$H_{11} = E_0 + \mu\mathcal{E}, \quad H_{22} = E_0 - \mu\mathcal{E}. \quad (7.14)$$

Taktéž budeme předpokládat, že působení elektrických polí, která nás zajímají, na geometrické uspořádání molekuly je nepatrné, takže nijak neovlivňuje amplitudu přeskokování atomu dusíku z jedné polohy do druhé. Proto můžeme připustit, že H_{12} a H_{21} se nezmění, takže

$$H_{12} = H_{21} = -A. \quad (7.15)$$

Nyní musíme vyřešit Hamiltonovy rovnice (6.43) s těmito novými koeficienty H_{ij} . Mohli bychom to udělat tak jako předtím, ale jelikož budeme mít více příležitostí řešit dvojhladinové systémy, vyřešme je jednou a provždy pro obecný případ libovolných H_{ij} – s jediným předpokladem, že H_{ij} se s časem nemění.

Chceme najít obecná řešení páru Hamiltonových rovnic

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11} C_1 + H_{12} C_2 \quad (7.16)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21} C_1 + H_{22} C_2. \quad (7.17)$$

Jelikož obě jsou lineárními diferenciálními rovnicemi s konstantními koeficienty, vždy lze najít řešení, která jsou exponenciálními funkcemi nezávislé proměnné t . Nejdříve budeme hledat řešení, v němž C_1 i C_2 mají stejnou časovou závislost; můžeme zkusit řešení ve tvaru

$$C_1 = a_1 e^{-i\omega t}, \quad C_2 = a_2 e^{-i\omega t}.$$

²⁶⁾ Je nám líto, že musíme zavést nové označení. Protože pro hybnost a energii používáme symboly p a E , nechceme je znovu používat pro dipólový moment a intenzitu elektrického pole. Zapamatujte si, že v této stati označuje μ elektrický dipólový moment.

Protože takové řešení odpovídá stavu s energií $E = \hbar\omega$, můžeme přímo napsat

$$C_1 = a_1 e^{-(i/\hbar)Et} \quad (7.18)$$

$$C_2 = a_2 e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (7.19)$$

kde E není zatím známo a je třeba ho určit tak, aby byly splněny diferenciální rovnice (7.16) a (7.17).

Dosadíme za C_1 a C_2 podle rovnic (7.18) a (7.19), derivace nám dají $-iE/\hbar$ vynásobené C_1 nebo C_2 , takže na levé straně se objeví obyčejné EC_1 nebo EC_2 . Po vykrácení rovnic společným exponenciálním faktorem zůstanou

$$Ea_1 = H_{11}a_1 + H_{12}a_2, \quad Ea_2 = H_{21}a_1 + H_{22}a_2.$$

Po malém přeskupení členů dostaneme

$$(E - H_{11})a_1 - H_{12}a_2 = 0 \quad (7.20)$$

$$-H_{21}a_1 + (E - H_{22})a_2 = 0. \quad (7.21)$$

Takový soubor homogenních algebraických rovnic má pro a_1 a a_2 nenulové řešení pouze tehdy, je-li determinant soustavy roven nule, tj. když

$$\det \begin{pmatrix} E - H_{11} & -H_{12} \\ -H_{21} & E - H_{22} \end{pmatrix} = 0. \quad (7.22)$$

V případě, že máme jen dvě rovnice se dvěma neznámými, obejdeme se i bez takovýchto učebních představ. Každá z rovnic (7.20) a (7.21) dává poměr dvou koeficientů a_1 a a_2 a oba tyto poměry si musí být rovny. Z rovnice (7.20) dostáváme

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}} \quad (7.23)$$

a z rovnice (7.21)

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{E - H_{22}}{H_{21}}. \quad (7.24)$$

Dáme-li oba poměry do rovnosti, zjistíme, že E musí vyhovovat rovnici

$$(E - H_{11})(E - H_{22}) - H_{12}H_{21} = 0.$$

Je to tentýž výsledek, který bychom dostali řešením rovnice (7.22). V každém případě jsme získali kvadratickou rovnici pro E , která má dvě řešení

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (7.25)$$

Energie E může nabývat dvou možných hodnot. Všimněte si, že obě řešení dávají *reálnou* hodnotu energie, neboť H_{11} a H_{22} jsou reálná a $H_{12}H_{21}$ je rovno $H_{12}H_{12}^* = |H_{12}|^2$, což je zároveň reálné i kladné.

Použijeme stejnou konvenci jako dříve a označíme vyšší energii než E_I a nižší než E_{II} . Máme

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}} \quad (7.26)$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (7.27)$$

Použijeme-li v rovnicích (7.18) a (7.19) každou z těchto dvou energií samostatně, dostaneme amplitudy pro dva stacionární stavy (stavy s přesně určenou hodnotou energie). Neexistují-li vnější poruchy a systém se na začátku nachází v jednom ze zmíněných stavů, zůstane v něm navždy – mění se pouze jeho fáze.

Naše výsledky můžeme ověřit na dvou speciálních případech. Je-li $H_{12}H_{21} = 0$, dostáváme $E_I = H_{11}$ a $E_{II} = H_{22}$. Je to zajisté správné, neboť pak nejsou rovnice (7.16) a (7.17) navzájem vázány a každá z nich představuje stav s energií H_{11} a H_{22} . Dále, položíme-li $H_{11}H_{22} = E_0$ a $H_{21}H_{12} = -A$, dostaneme řešení, které jsme našli už předtím

$$E_I = E_0 + A, \quad E_{II} = E_0 - A.$$

V obecném případě se dvě řešení E_I a E_{II} vztahují na dva stavy, které můžeme opět nazvat

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle e^{-i/\hbar E_I t} \quad \text{a} \quad |\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-i/\hbar E_{II} t}.$$

V nich budou koeficienty C_1 a C_2 dány rovnicemi (7.18) a (7.19), v nichž je třeba ještě určit a_1 a a_2 . Jejich poměr definuje buď rovnice (7.23) nebo rovnice (7.24). Tyto koeficienty však musejí splňovat ještě jednu podmínku. Víme-li, že se systém nachází v jednom ze stacionárních stavů, musí součet pravděpodobností toho, že jej najdeme ve stavech $|1\rangle$ a $|2\rangle$, být roven jedné. Proto

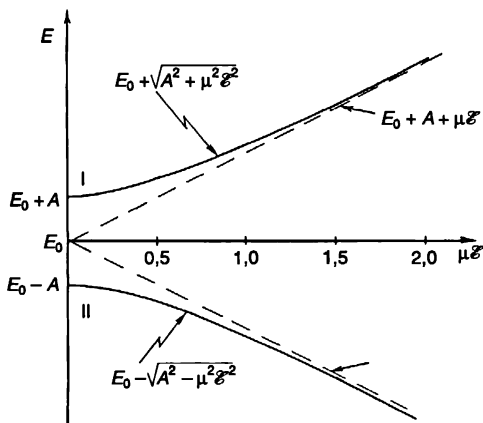
$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1, \quad (7.28)$$

což je totéž jako

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \quad (7.29)$$

Tyto podmínky však stále nespécifikují a_1 a a_2 jednoznačně; zůstává ještě volný výběr fáze, tj.

faktoru typu $e^{i\delta}$. Ačkoliv lze napsat obecná řešení pro koeficienty²⁷⁾ a , je obvykle vhodnější vypočítat je v každém jednotlivém případě.



Obr. 7.2 Energetické hladiny molekuly amoniaku v elektrickém poli

Vraťme se zpět k našemu konkrétnímu příkladu molekuly amoniaku v elektrickém poli. Použijeme-li hodnoty H_{11} , H_{22} a H_{12} dané rovnicemi (7.14) a (7.15), dostaneme pro energie dvou stacionárních stavů vztahy

$$E_{\text{I}} = E_0 + \sqrt{A^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2}, \quad E_{\text{II}} = E_0 - \sqrt{A^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2}. \quad (7.30)$$

Obě energie jsou vyneseny na obr. 7.2 jako funkce intenzity elektrického pole. Je-li elektrické pole nulové, jsou samozřejmě rovny hodnotám $E_0 \pm A$. Zapneme-li pole, rozštěpení obou hladin narůstá. Při malých hodnotách roste \mathcal{E} jen zvolna, při vyšších hodnotách se stává úměrným intenzitě. (Křivkou je hyperbola.) Pro mimořádně silná pole jsou energie jednoduše

$$E_{\text{I}} = E_0 + \mu \mathcal{E} = H_{11}, \quad E_{\text{II}} = E_0 - \mu \mathcal{E} = H_{22}. \quad (7.31)$$

Liší-li se obě polohy atomu dusíku svými energiemi příliš, je skutečnost, že pro ně existuje amplituda překlápění tam a zpět, téměř nepodstatná. To je zajímavý důsledek, k němuž se zanedlouho opět vrátíme.

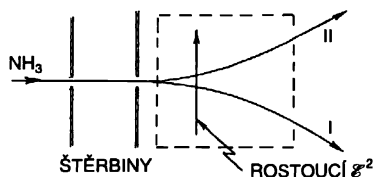
Nyní už jsme připraveni pochopit, na jakém principu pracuje amoniakový maser. Myšlenka je následující. Zaprvé najdeme způsob, jakým lze od sebe oddělit molekuly ve stavech |I⟩ a |II⟩.²⁸⁾ Pak ty ve vyšším energetickém stavu necháme projít dutinou, která má rezonanční frekvenci 24 000 MHz. Molekuly tam mohou odevzdat svou energii (jakým způsobem, to si rozebereme

²⁷⁾ Jak si snadno můžete ověřit, jedním přijatelným řešením je systém

$$a_1 = \frac{H_{12}}{[(E - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}, \quad a_2 = \frac{E - H_{11}}{[(E - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}.$$

²⁸⁾ Od této chvíle budeme místo $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$ psát |I⟩ a |II⟩. Musíte mít na paměti, že nynější stavy $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$ jsou báze stavy energie vynásobené příslušným exponenciálním faktorem.

později) a opustí ji ve stavu $|II\rangle$. Při takovém přechodu odevzdá každá molekula energii $E = E_I - E_{II}$, která se projeví jako elektrická energie dutiny.



Obr. 7.3 Svazek amoniakových molekul lze rozdělit elektrickým polem s gradientem \mathcal{E}^2 kolmým na svazek

Jak od sebe můžeme oddělit dva molekulové stavy? Uvedeme jednu metodu. Z malé trysky vypouštíme plynný amoniak a necháváme ho procházet párem štěrbin, abychom dostali úzký svazek (obr. 7.3), který pak vstupuje do oblasti s velkým příčným elektrickým polem. Elektrody mají takový tvar, aby se jimi vytvářené elektrické pole měnilo velice rychle napříč svazkem. Pak bude mít druhá mocnina intenzity, \mathcal{E}^2 , velký gradient kolmý na svazek. Energie molekuly ve stavu $|I\rangle$ roste s \mathcal{E}^2 , proto se tato část svazku bude odklánět do oblasti s nižší druhou mocninou intenzity. Na druhé straně se budou molekuly ve stavu $|II\rangle$ vychylovat směrem k vyšším hodnotám \mathcal{E}^2 , protože jejich energie přitom klesá.

Mimochodem pro elektrická pole, která jsme schopni vytvořit v laboratorních podmínkách, je energie $\mu\mathcal{E}$ vždy mnohem menší než A . V takových případech lze druhou odmocninu v rovnici (7.30) aproximovat výrazem

$$A \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{A^2} \right). \quad (7.32)$$

Pro všechny praktické účely mají proto energetické hladiny tvar

$$E_I = E_0 + A + \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2A} \quad (7.33)$$

a

$$E_{II} = E_0 - A - \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2A}. \quad (7.34)$$

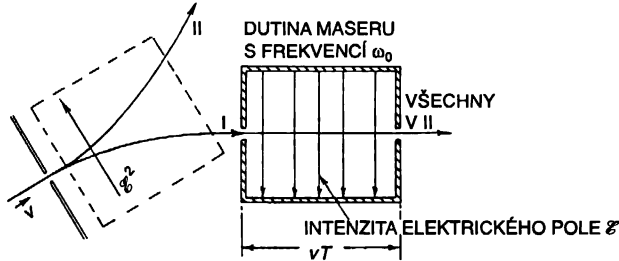
Energie se mění přibližně lineárně s \mathcal{E}^2 . Síla působící na molekuly je pak rovna

$$F = \frac{\mu^2}{2A} \nabla \mathcal{E}^2. \quad (7.35)$$

Mnoho molekul má v elektrickém poli energii úměrnou \mathcal{E}^2 . Koeficient úměrnosti nazýváme polarizovatelnost molekuly. Amoniak ji má nezvykle vysokou, protože hodnota A ve jmenovateli je velmi malá. Molekuly amoniaku jsou proto neobvykle citlivé na elektrické pole. (Jakou hodnotu permitivity ϵ byste očekávali pro plyn NH_3 ?)

7.3 PŘECHODY V ČASOVĚ ZÁVISLÉM POLI

V amoniakovém maseru prochází svazek molekul ve stavu $|I\rangle$ s energií E_I rezonanční dutinou, jak naznačuje obr. 7.4. O druhý svazek se už nestaráme, ten je pro nás nepotřebný.



Obr. 7.4 Schematický náčrt amoniakového maseru

V dutině se generuje časově proměnné elektrické pole, takže před námi stojí tato úloha: Prostudovat chování molekuly v elektrickém poli, které se s časem mění. Je to problém zcela jiného druhu než doposud – hamiltonián totiž závisí na čase. Jelikož koeficienty H_{ij} jsou funkcí \mathcal{E} , mění se s časem, jsme nuceni prozkoumat chování systému za těchto okolností.

Nejdříve zapíšeme rovnice, které je třeba vyřešit

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = (E_0 + \mu\mathcal{E})C_1 - AC_2 \quad (7.36)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = -AC_1 + (E_0 - \mu\mathcal{E})C_2.$$

Pro konkrétní představu předpokládejme, že se elektrické pole mění jako sinusoida; pak můžeme napsat

$$\mathcal{E} = 2\mathcal{E}_0 \cos \omega t = \mathcal{E}_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (7.37)$$

Při samotné činnosti maseru bude frekvence ω velmi blízká rezonanční frekvenci molekulového přechodu $\omega_0 = 2A/\hbar$, ale pro tuto chvíli pro zobecnění ji budeme považovat za libovolnou. Nejlepším způsobem, jak vyřešit naše rovnice, je vytvořit lineární kombinace C_1 a C_2 tak, jak jsme to již udělali. Obě rovnice nejdříve sečteme, pak vydělíme $\sqrt{2}$ a nakonec využijeme definice koeficientů C_I a C_{II} v rovnici (7.13). Dostáváme rovnici

$$i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A)C_{II} + \mu\mathcal{E}C_I. \quad (7.38)$$

Určitě si všimnete, že je velmi podobná rovnici (7.9) až na to, že se v ní objevuje dodatečný člen elektrického pole. Podobně odečteme-li obě rovnice (7.36) od sebe navzájem, dostaneme

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A)C_I + \mu\mathcal{E}C_{II}. \quad (7.39)$$

Otázka zní: Jak je obě vyřešit? Jsou těžší než náš předcházející systém, neboť \mathcal{E} závisí na t , a ve skutečnosti nelze pro obecné $\mathcal{E}(t)$ řešení vyjádřit pomocí elementárních funkcí. K dobrému přiblížení se můžeme dopracovat v případě, kdy je elektrické pole malé. Nejdříve vyjádříme

$$\begin{aligned} C_I &= \gamma_I e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} = \gamma_I e^{-i(E_I)t/\hbar} \\ C_{II} &= \gamma_{II} e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} = \gamma_{II} e^{-i(E_{II})t/\hbar}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Kdyby elektrické pole neexistovalo a za γ_I a γ_{II} bychom vybrali komplexní konstanty, dostali bychom správné řešení. Protože pravděpodobnost nacházet se ve stavu $|I\rangle$ je druhou mocninou absolutní hodnoty C_I a pravděpodobnost nacházet se ve stavu $|II\rangle$ zase druhou mocninou modulu C_{II} , je pravděpodobnost toho, že najdeme molekulu buď ve stavu $|I\rangle$, nebo $|II\rangle$ rovna $|\gamma_I|^2$ nebo $|\gamma_{II}|^2$. Například, kdyby se systém začal vyvíjet ze stavu $|II\rangle$, takže γ_I by byla nula a $|\gamma_{II}|^2$ rovno jedné, tyto podmínky by se zachovaly. Molekula původně ve stavu $|II\rangle$ by neměla žádnou naději někdy přeskocit do stavu $|I\rangle$.

Myšlenka napsat řešení ve tvaru (7.40) je založena na tom, že je-li $\mu\mathcal{E}$ malé ve srovnání s A , je možné hledat je v této formě, ale γ_I a γ_{II} se stanou pomalu se měnícími funkcemi času, přičemž vyjádřením „pomalu se měnícími“ máme na mysli pomalu v porovnání s exponenciálními funkcemi. V tom je celý trik. Abychom našli přibližné řešení, využijeme skutečnost, že γ_I a γ_{II} se pomalu mění.

Nyní chceme v diferenciální rovnici (7.39) dosadit za C_I z rovnice (7.40); přitom si však musíme uvědomit, že γ_I je také funkcí času t . Máme

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = E_I \gamma_I e^{-iE_I t/\hbar} + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} e^{-iE_I t/\hbar}.$$

Diferenciální rovnice získá tvar

$$\left(E_I \gamma_I + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} \right) e^{-(i/\hbar)E_I t} = E_I \gamma_I e^{-(i/\hbar)E_I t} + \mu\mathcal{E} \gamma_{II} e^{-(i/\hbar)E_{II} t}. \quad (7.41)$$

Podobně i rovnice pro $\frac{dC_{II}}{dt}$ přejde na tvar

$$\left(E_{II} \gamma_{II} + i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} \right) e^{-(i/\hbar)E_{II} t} = E_{II} \gamma_{II} e^{-(i/\hbar)E_{II} t} + \mu\mathcal{E} \gamma_I e^{-(i/\hbar)E_I t}. \quad (7.42)$$

Všimněte si, že na obou stranách každé rovnice stojí stejné členy, které se proto navzájem vruší. První rovnici vynásobíme faktorem $e^{+iE_I t/\hbar}$ a druhou faktorem $e^{+iE_{II} t/\hbar}$. Vzpomeneme-li si, že $(E_I - E_{II}) = 2A = \hbar\omega_0$, dospějeme nakonec k systému rovnic

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{i\omega_0 t} \gamma_{II} \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{-i\omega_0 t} \gamma_I. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Zdá se, že jsme dostali jednoduchý pár rovnic – a jsou, samozřejmě, stále zcela přesné. První derivace jedné proměnné je úměrná funkci času $\mu \mathcal{E}(t) e^{i\omega_0 t}$ vynásobené druhou proměnnou; derivace druhé je úměrná obdobné funkci času vynásobené první proměnnou. Ačkoliv pro tyto jednoduché rovnice nelze najít obecné řešení, vyřešíme je pro několik speciálních případů.

Alespoň prozatím se zajímáme jen o oscilující elektrické pole. Vezmeme-li $\mathcal{E}(t)$ ve formě dané rovnicí (7.37), zjistíme, že rovnice pro γ_I a γ_{II} přejdou na tvar

$$i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} = \mu \mathcal{E}_0 \left[e^{i(\omega + \omega_0)t} + e^{-i(\omega - \omega_0)t} \right] \gamma_{II} \quad (7.44)$$

$$i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} = \mu \mathcal{E}_0 \left[e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t} \right] \gamma_I.$$

Je-li \mathcal{E}_0 dostatečně malé, mění se i γ_I a γ_{II} pozvolna. Změny obou koeficientů γ s časem nebudou příliš velké, zejména v porovnání s rychlými změnami způsobenými exponenciálními členy. Reálné i imaginární části těchto členů oscilují s frekvencemi $\omega + \omega_0$ nebo $\omega - \omega_0$. Členy s frekvencí $\omega + \omega_0$ oscilují velmi rychle kolem střední hodnoty (nuly), a proto vnášejí jen malý příspěvek k rychlosti změny γ . Takže je můžeme nahradit střední hodnotou, totiž nulou, a dostaneme docela rozumné přiblížení. Prostě je vynecháme a použijeme aproximaci

$$i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} = \mu \mathcal{E}_0 e^{-i(\omega - \omega_0)t} \gamma_{II} \quad (7.45)$$

$$i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} = \mu \mathcal{E}_0 e^{i(\omega - \omega_0)t} \gamma_I.$$

Dokonce i zbylé členy s exponenty úměrnými $(\omega - \omega_0)$ se budou velice rychle měnit, nebude-li ω blízké ω_0 . Jen tehdy se bude pravá strana rovnice měnit dostatečně pomalu, takže integrujeme-li rovnice podle t , máme šanci dostat nějaký nezanedbatelný příspěvek. Řečeno jinými slovy, při slabém elektrickém poli mají význam jen frekvence blízké ω_0 .

Rovnice (7.45), které jsme získali použitím zmíněného přiblížení, lze vyřešit úplně přesně, ale postup je trochu pracný, takže ho odložíme na později, kdy se budeme věnovat jinému problému stejného typu. Nyní najdeme jejich přibližná řešení – lépe řečeno, vyřešíme je přesně pro případ dokonalé rezonance (tj. pro $\omega = \omega_0$) a přibližně pro frekvence v blízkosti rezonance.

7.4 PŘECHODY PŘI REZONANCI

Zabývejme se nejdříve případem dokonalé rezonance. Položíme-li $\omega = \omega_0$, budou v obou rovnicích (7.45) exponenciální členy rovny jedné a dostaneme jednoduchý systém

$$\frac{d\gamma_I}{dt} = -\frac{i\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} \gamma_{II}, \quad \frac{d\gamma_{II}}{dt} = -\frac{i\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} \gamma_I. \quad (7.46)$$

Vyloučíme-li z těchto rovnic nejdříve γ_I a potom γ_{II} zjistíme, že obě vyhovují diferenciální

rovnici pro obyčejný harmonický pohyb

$$\frac{d^2 \gamma}{dt^2} = - \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} \right) \gamma. \quad (7.47)$$

Obecná řešení takových rovnic lze vyjádřit pomocí funkcí sinus a cosinus. Jak si snadno ověříte, jsou řešeními následující výrazy

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{I}} &= a \cos \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right) + b \sin \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right) \\ \gamma_{\text{II}} &= i b \cos \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right) - i a \sin \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right), \end{aligned} \quad (7.48)$$

kde a a b jsou konstanty, které je třeba určit tak, abychom vyhověli konkrétní fyzikální situaci.

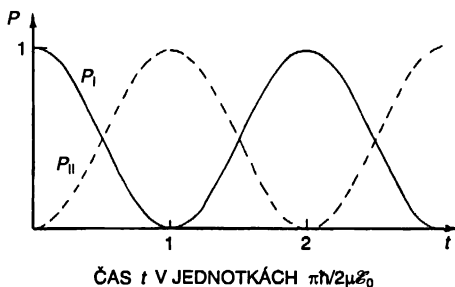
Jako příklad předpokládejme, že v čase $t=0$ se náš molekulový systém nacházel ve vyšším energetickém stavu $|I\rangle$, což vyžaduje (z rovnic (7.40)), aby v čase $t=0$ byl $\gamma_{\text{I}}=1$ a $\gamma_{\text{II}}=0$. Pro takový případ potřebujeme $a=1$ a $b=0$. Pravděpodobnost toho, že v nějakém pozdějším čase t najedeme molekulu ve stavu $|I\rangle$ bude druhou mocninou modulu γ_{I} , tedy

$$P_{\text{I}} = |\gamma_{\text{I}}|^2 = \cos^2 \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right). \quad (7.49)$$

Podobně pravděpodobnost najít molekulu ve stavu $|II\rangle$ je dána druhou mocninou absolutní hodnoty γ_{II}

$$P_{\text{II}} = |\gamma_{\text{II}}|^2 = \sin^2 \left(\frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} t \right). \quad (7.50)$$

Je-li \mathcal{E} malé a nacházíme se v rezonanci, jsou pravděpodobnosti dány jednoduchými oscilujícími funkcemi. Pravděpodobnost být ve stavu $|I\rangle$ klesá od jedné k nule a pak zase stoupá ke své počáteční hodnotě, zatímco pravděpodobnost být ve stavu $|II\rangle$ vzrůstá od nuly k jedné a pak opět klesá k nule. Časová změna obou pravděpodobností je znázorněna na obr. 7.54. Je zbytečné připomínat, že jejich součet je vždy roven jedné; molekula se vždy nachází v nějakém stavu!



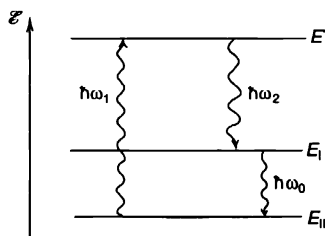
Obr. 7.5 Pravděpodobnosti obou stavů molekuly amoniaku nacházející se v sinusovém elektrickém poli

Předpokládejme, že molekula potřebuje čas T na to, aby prošla celou dutinou. Vybereme-li tedy dutinu právě takové délky, že $\mu \mathcal{E}_0 T / \hbar = \pi/2$, molekula, která do ní vstupuje ve stavu $|I\rangle$, ji určitě opustí ve stavu $|II\rangle$. Vchází-li do ní ve vyšším energetickém stavu, vychází z ní v nižším. Jinými slovy, její energie se zmenší a úbytek energie nemůže být odevzdán jinde než mechanismu, který generuje pole. Podrobnější vysvětlení, které by vám usnadnilo pochopit, jakým způsobem se energie molekuly dodává oscilacím dutiny, není jednoduché, ale nepotřebujeme se jím zabývat, protože můžeme využít zákon zachování energie. (Mohli bychom tyto podrobnosti studovat, kdybychom byli nuceni, ale pak bychom zároveň s kvantovou mechanikou atomu měli co dělat i s kvantovou teorií pole v dutině.)

Shrneme-li, můžeme říci, že molekula vstupuje do dutiny, pole v ní (oscilující s právě potřebnou frekvencí) vyvolá přechod z vyššího do nižšího energetického stavu a uvolněná energie je odevzdána oscilujícím poli. Je-li maser v činnosti, dodávají molekuly dostatek energie na to, aby se oscilace dutiny udržely; je jí dost nejen na vyrovnání ztrát v dutině, ale i na to, aby mohl vzniknout malý přebytek energie, který umíme z dutiny odebrat. Dochází tedy k přeměně molekulové energie na energii vnějšího elektromagnetického pole.

Pamatujte na to, že předtím, než svazek vstoupí do dutiny, musíme použít filtr, který ho rozdělí takovým způsobem, že dovnitř vstupují jen molekuly ve vyšším energetickém stavu. Lze snadno ukázat, že kdybychom začali s molekulami v nižším energetickém stavu, probíhal by proces opačným směrem a energie by se dutině odebírala. Kdybychom do ní pustili neprofiltrovaný svazek, přesně tentýž počet molekul, které energii odebírá, i energii odevzdává, takže nic zvláštního by se nedělo. Při vlastní činnosti maseru není samozřejmě nutné, aby $(\mu \mathcal{E}_0 T / \hbar)$ bylo rovno přesně $\pi/2$. Pro jakoukoliv jinou hodnotu (kromě celočíselného násobku π) existuje nenulová pravděpodobnost pro přechody ze stavu $|I\rangle$ do stavu $|II\rangle$. Pak však nemá přístroj 100% účinnost; mnoho molekul, které opouštějí dutinu, jí mohlo odevzdat nějakou energii, ale neudělaly to.

Ve skutečnosti není rychlost všech molekul stejná, ale podléhá Maxwellovu rozdělení. To znamená, že různé molekuly budou mít odlišné ideální časové periody, takže není možné dostat 100% účinnost pro všechny molekuly najednou. Kromě toho existuje i jiná komplikace, kterou lze sice snadno vzít v úvahu, ale v tomto stádiu nás nebude trápit. Zajisté si vzpomenete, že elektrické pole se v dutině mění od místa k místu. Proto když molekuly driftují dutinou, působí na ně elektrické pole složitějším způsobem, než jednoduché harmonické oscilace, o nichž jsme uvažovali. Je jasné, že bychom museli vykonat komplikovanější integrování, kdybychom chtěli problém vyřešit přesněji, ale obecná myšlenka zůstává nezměněna.



Obr. 7.6 Energetické hladiny trojhladinového maseru

Existují i jiné způsoby, jak sestavit masery. Místo toho, abychom pomocí Sternova-Gerlachova přístroje navzájem odstěhovali atomy ve stavech $|I\rangle$ a $|II\rangle$, lze je všechny soustředit v dutině (v plynné nebo pevné formě) a nějakým způsobem vybudit atomy ve stavu $|II\rangle$ do stavu $|I\rangle$. Jeden takový trik se používá v tzv. trojhladinovém maseru. V něm se používají systémy se třemi energie-

tickými hladinami (*obr. 7.6*) s následujícími speciálními vlastnostmi. Systém absorbuje záření (řekněme světlo) s energií $\hbar\omega_1$ a přejde z nejnižší energetické hladiny E_{II} na některou hladinu E' s velkou energií; pak rychle emituje fotony s energií $\hbar\omega_2$ a klesne do stavu $|I\rangle$ s energií E_I . Stav $|I\rangle$ má dlouhou dobu života, takže počet atomů v něm může narůst; vytvoří se vhodné podmínky pro činnost maseru mezi stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$. Ačkoliv takový přístroj nazýváme trojhladinový maser, vlastní maserový proces ve skutečnosti probíhá tak, jako u popsaného dvojhladinového systému.

Laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) je vlastně maser pracující na světelných frekvencích. Laserová „dutina“ je obvykle tvořena dvěma rovinnými zrcadly, mezi nimiž se generují stojaté vlny.²⁹⁾

7.5 PŘECHODY MIMO REZONANCE

Nakonec bychom rádi odvodili, jak se stavy mění v tom případě, když je frekvence pole v dutině ne zcela přesně, ale jen přibližně rovna ω_0 . Tento problém, bychom mohli vyřešit exaktně, ale místo toho, abychom se o to pokusili, rozebereme důležitý případ, kdy intenzita elektrického pole, jakož i časová perioda T nabývají malých hodnot, takže $\mu\mathcal{E}_0 T/\hbar$ je mnohem menší než jedna. Pak je i za předpokladu dokonalé rezonance, který jsme právě prostudovali, pravděpodobnost přechodu malá. Znovu začneme s $\gamma_I = 1$ a $\gamma_{II} = 0$. Očekáváme, že po dobu kratičkého časového intervalu T zůstane γ_I prakticky rovno jedné a γ_{II} bude velmi malé v porovnání s jednou. Tím se úloha zjednoduší. γ_{II} můžeme vypočítat z druhé rovnice (7.45), položíme-li γ_I rovno jedné a integrujeme od $t=0$ do $t=T$. Dostaneme

$$\gamma_{II} = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega - \omega_0)T}}{\omega - \omega_0} \right]. \quad (7.51)$$

γ_{II} , použité v rovnicích (7.40) představuje amplitudu toho, že po dobu časového intervalu T došlo k přechodu ze stavu $|I\rangle$ do stavu $|II\rangle$. Pravděpodobnost přechodu $P(I \rightarrow II)$ je $|\gamma_{II}|^2$ neboli

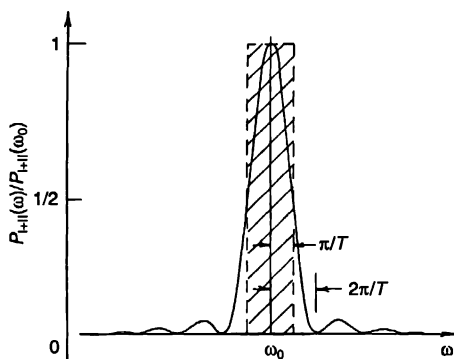
$$P(I \rightarrow II) = \left[\frac{\mu\mathcal{E}_0 T}{\hbar} \right]^2 \cdot \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_0) T/2]}{[(\omega - \omega_0) T/2]^2}. \quad (7.52)$$

Je zajímavé vynést tuto pravděpodobnost do grafu (při pevně určeném T) jako funkci frekvence v dutině; uvidíme, nakolik je pravděpodobnost citlivá na frekvence blízké rezonanční frekvenci ω_0 . Křivka $P(I \rightarrow II)$ je znázorněna na *obr. 7.7*. (Měřítka na svislé ose jsme zvolili tak, aby hodnota v maximu byla rovna jedné – proto jsme všechny hodnoty vydělili pravděpodobností při $\omega = \omega_0$.)

S podobnou křivkou jsme se už setkali v teorii difrakce, takže by vám měla být známá. Dost strmě klesá k nule pro $(\omega - \omega_0) = 2\pi/T$ a při značných frekvenčních odchylkách už nikdy nezískává významnou hodnotu. Ve skutečnosti téměř celá plocha leží pod křivkou v rozmezí $\pm\pi/T$. Lze ukázat,³⁰⁾ že celá plocha je právě $2\pi/T$ a je rovna ploše vyšrafovaného obdélníku na obrázku.

²⁹⁾ První maser (amoniakový) byl zkonstruován v roce 1954 a první lasery právě v době, kdy Feynman psal tuto knihu. Dnes už teorie i technika laserů nesmírně pokročila (pozn. red.).

³⁰⁾ Využijeme vztah $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin^2 x/x^2) dx = \pi$.



Obr. 7.7 Pravděpodobnost přechodu pro molekulu amoniaku jako funkce frekvence

Prozkoumejme význam našich výsledků pro reálný maser. Předpokládejme, že se molekula amoniaku nachází v dutině rozumně dlouhou dobu, řekněme jednu milisekundu. Můžeme si spočítat, že při $f_0 = 24\,000$ MHz klesne pravděpodobnost přechodu na nulu, bude-li odchylka $(f - f_0)/f_0 = 1/f_0 T$, tj. $5 \cdot 10^{-8}$. Je zřejmé, že chceme-li dosáhnout znatelné pravděpodobnosti přechodu, musíme se frekvence téměř shodovat s ω_0 . Tento efekt je základem vysoké přesnosti, které dosahují „atomové“ hodiny pracující na principu maseru.

7.6 ABSORPCE SVĚTLA

Naše dříve uvedená interpretace se vztahuje i na obecnější případ než ten, který představuje amoniakový maser. Zkoumali jsme chování molekuly pod vlivem elektrického pole bez ohledu na to, zda bylo uzavřeno v dutině nebo ne. Jednoduše bychom mohli na molekulu nasměrovat svazek „světla“ mikrovlnné frekvence a ptát se na pravděpodobnost emise nebo absorpce. Naše rovnice lze stejně dobře použít i v tomto případě, ale přepíšeme je tak, aby obsahovaly *intenzitu* záření, a ne elektrického pole. Definujeme-li intenzitu I jako střední hodnotu hustoty toku energie, s odvoláním na 27. kapitolu 2. dílu můžeme napsat

$$I = \varepsilon_0 c^2 |\mathcal{E} \times \mathbf{B}|_{\text{střed}} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c^2 |\mathcal{E} \times \mathbf{B}|_{\text{max}} = 2 \varepsilon_0 c \mathcal{E}_0^2.$$

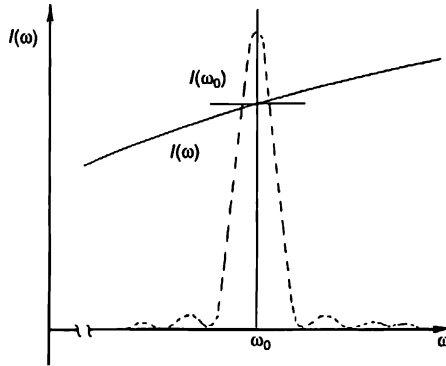
(Maximální hodnota \mathcal{E} je rovna $2\mathcal{E}_0$.) Pravděpodobnost přechodu potom nabývá tvaru

$$P(\text{I} \rightarrow \text{II}) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c} \right] I T^2 \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_0) T/2]}{[(\omega - \omega_0) T/2]^2}. \quad (7.53)$$

Světlo, které dopadá na takový systém, není obvykle přesně monochromatické. Je proto zajímavé vyřešit ještě jednu úlohu – vypočítat pravděpodobnost přechodu, je-li intenzita světla na jednotkový frekvenční interval rovna $S(\omega)$ a pokrývá široké spektrum frekvencí obsahující ω_0 . Pak bude pravděpodobnost přechodu ze stavu $|I\rangle$ do stavu $|II\rangle$ dána integrálem

$$P(I \rightarrow II) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 c} \right] T^2 \int_0^\infty I(\omega) \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)T/2]}{[(\omega - \omega_0)T/2]^2} d\omega. \quad (7.54)$$

Obecně se bude $I(\omega)$ měnit s ω mnohem pomaleji než ostrý rezonanční člen. Obrázek 7.8 naznačuje možný průběh obou funkcí.



Obr. 7.8 Spektrální intenzitu $I(\omega)$ lze aproximovat její hodnotou při ω_0

V těchto případech smíme $I(\omega)$ nahradit její hodnotou $I(\omega_0)$, kterou získává ve středu ostré rezonanční křivky a dát ji před integrál. Integrál, který zůstane, představuje právě plochu pod křivkou na obr. 7.7, a jak jsme viděli, ta je rovna $2\pi/T$. Dostáváme výsledek

$$P(I \rightarrow II) = 4\pi^2 \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 c} \right] I(\omega_0) T. \quad (7.55)$$

Uvedený vztah je velice důležitý; představuje totiž *obecnou teorii absorpce světla libovolným molekulovým nebo atomovým systémem*. Ačkoliv jsme naše úvahy začali případem, v němž měl stav $|I\rangle$ vyšší energii než stav $|II\rangle$, žádná naše tvrzení se neopírala o tuto skutečnost. Rovnice (7.55) platí i tehdy, je-li energie stavu $|I\rangle$ nižší než má stav $|II\rangle$; $P(I \rightarrow II)$ pak představuje pravděpodobnost přechodu s *absorbí* energie z dopadající elektromagnetické vlny. Absorpce světla libovolným atomovým systémem vždy předpokládá, že v oscilujícím elektrickém poli existuje amplituda přechodu mezi dvěma stavy, jejichž energie se liší o hodnotu $E = \hbar\omega_0$. Vezmeme-li jakýkoliv konkrétní případ, postupem, který jsme uvedli, se vždy dopracujeme k výrazu podobnému rovnici (7.55). Zdůrazníme proto následující charakteristické vlastnosti tohoto vztahu. Zaprvé, pravděpodobnost je přímo úměrná T . Jinými slovy, pravděpodobnost přechodu vztažená na jednotku času je konstantní. Za druhé, je úměrná *intenzitě* světla dopadajícího na systém. A konečně pravděpodobnost přechodu je přímo úměrná μ^2 , kde, jak si vzpomínáte, výraz $\mu\mathcal{E}$ definoval energetický posun způsobený elektrickým polem \mathcal{E} . Proto se v rovnicích (7.38) a (7.39) v úloze spojovacího článku odpovědného za přechod mezi jinak stacionárními stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$ objevilo $\mu\mathcal{E}$. Jinými slovy, pro malé hodnoty \mathcal{E} , které stále uvažujeme, se součinu $\mu\mathcal{E}$ říká i poruchový člen v maticovém prvku hamiltoniánu, který spojuje stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$. V obecném případě bychom $\mu\mathcal{E}$ nahradili maticovým elementem $\langle II|H|I\rangle$ (viz stať 3.6).

Ve stati 42.5, díl I jsme hovořili o vztahu mezi absorpcí světla, indukovanou a spontánní emisí pomocí Einsteinových koeficientů A a B . Na tomto místě jsme konečně dostali do rukou kvantově mechanický postup pro výpočet těchto koeficientů. Protože to, co jsme pro naši dvojhladinovou molekulu amoniaku nazvali $P(I \rightarrow II)$, přesně odpovídá absorpčnímu koeficientu B_{nm} v Einsteinově teorii záření. Jelikož molekula amoniaku je opravdu složitá (a proto velmi obtížná na to, aby ji někdo exaktně vypočítal), vybrali jsme maticový element $\langle II|H|I \rangle$ rovný $\mu \mathcal{E}$, přičemž jsme byli nuceni prohlásit, že hodnotu μ je třeba vzít z experimentu. Pro jednodušší atomové systémy lze μ_{mn} , patřící konkrétnímu přechodu, vypočítat z *definice*

$$\mu_{mn} \mathcal{E} = \langle m|H|n \rangle = H_{mn}, \quad (7.56)$$

kde H_{mn} je maticový element hamiltoniánu, zahrnující všechny efekty způsobené slabým elektrickým polem. Takto vypočtené μ_{mn} se nazývá *maticový element elektrického dipólového momentu*. Kvantově mechanická teorie absorpce a emise světla se tedy redukuje na výpočet uvedených maticových elementů pro konkrétní atomové systémy.

Studium jednoduchého dvojhladinového systému nás takto přivedlo k pochopení obecného problému absorpce a emise světla.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 7.1 ■ V 7. kapitole jsme počítali pravděpodobnost převodu molekuly amoniaku ze stavu $|II\rangle$ do stavu $|I\rangle$ při ozáření mikrovlnami. Stav $|II\rangle$ má menší energii než stav $|I\rangle$, a proto takový přechod odpovídá absorpci záření. Pokuste se rozvinout tyto myšlenky a použít je k výpočtu pravděpodobnosti indukovaného záření molekuly amoniaku. Jak souvisí pravděpodobnost emise s pravděpodobností absorpce? Jak je tato pravděpodobnost vázána s Einsteinovými koeficienty A_{mn} a B_{mn} , které jsme zavedli v kapitole 42 dílu 1? Určete intenzitu spontánní emise molekuly amoniaku.
- 7.2 ■ Protony s magnetickým momentem μ nacházející se ve vzorku vody, jsou umístěny do homogenního magnetického pole. Amplituda pole je konstantní a jeho směr se mění v čase (jde o experiment s jadernou magnetickou rezonancí NMR) podle $B_x = B \sin \vartheta \cos \omega t$, $B_y = -B \sin \vartheta \sin \omega t$, $B_z = B \cos \vartheta$.
V počátečním okamžiku $t = 0$ míří spiny všech protonů podél kladného směru magnetického pole (nacházejí se ve stavu $+1/2$). Předpokládejme, že polární úhel ϑ ve sférických souřadnicích je velmi malý. Jaká musí být hodnota ω , aby nastala rezonance? Jaká je pravděpodobnost toho, že částice má při rezonanční frekvenci spin mířící v okamžiku t dolů?

Jiné dvojhladinové soustavy

8.1 IONT MOLEKULY VODÍKU

8.2 JADERNÉ SÍLY

8.3 MOLEKULA VODÍKU

8.4 MOLEKULA BENZENU

8.5 BARVIVA

8.6 HAMILTONIÁN ČÁSTICE SE SPINEM $1/2$ NACHÁZEJÍCÍ SE V MAGNETICKÉM POLI

8.7 SPINUJÍCÍ ELEKTRON V MAGNETICKÉM POLI

8.1 IONT MOLEKULY VODÍKU

V předcházející kapitole jsme prodiskutovali některé vlastnosti molekuly amoniaku za předpokladu, že ji lze považovat za dvojhladinový systém. Samozřejmě, že ve skutečnosti jím není – existuje mnoho rotačních, vibračních, translačních stavů atd., v nichž se může nacházet, ale u každého z nich můžeme hovořit o dvojici vnitřních stavů proto, že atom dusíku se může překlápět sem a tam. V této kapitole zmíníme jiné příklady soustav, které lze v té či oné aproximaci považovat za dvojhladinové. Mnoho věcí bude přibližných, protože vždy existuje mnoho jiných stavů, které bychom při přesnějším rozboru museli vzít v úvahu. Mnohému však budeme schopni porozumět, i když v každém našem příkladu budeme uvažovat jen dva stavy.

Jelikož se budeme zabývat jen dvojhladinovými systémy, bude hledaný hamiltonián vypadat stejně jako ten, když jsme používali v předcházející kapitole. Nezávisí-li na čase, víme, že existují dva stacionární stavy s přesně určenými, obvykle různými hodnotami energie. Obecně však budeme začínat analýzu výběrem souboru bázových stavů, které *nejsou* stacio-

nárními stavy, ale stavy s nějakým jiným jednoduchým fyzikálním významem. Stacionární stavy soustavy pak vyjádříme lineární kombinací těchto bázevých stavů.

Pro přehled shrneme nejdůležitější rovnice odvozené v 7. kapitole. Necht $|1\rangle$ a $|2\rangle$ jsou původní bázevové stavy. Libovolný stav $|\psi\rangle$ pak lze zapsat jako lineární superpozici

$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1|\psi\rangle + |2\rangle\langle 2|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2. \quad (8.1)$$

Amplitudy C_i (čímž rozumíme buď C_1 , nebo C_2) vyhovují dvěma lineárními diferenciálními rovnicím

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \quad (8.2)$$

kde i a j nabývají hodnoty 1 a 2.

Nezávisejí-li prvky hamiltoniánu H_{ij} na čase, mají dva stavy s přesně určenou hodnotou energie (stacionární stavy), které nazveme

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)E_I t} \quad \text{a} \quad |\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)E_{II} t}$$

energie

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}} \quad (8.3)$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}}.$$

Pro každý z těchto stavů mají oba koeficienty C stejnou časovou závislost. Stavové vektory $|I\rangle$ a $|II\rangle$, které odpovídají stacionárním stavům, souvisejí s našimi původními bázevými stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ vztahy

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |1\rangle a_1 + |2\rangle a_2 \\ |II\rangle &= |1\rangle a'_1 + |2\rangle a'_2. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Čárkované i nečárkované koeficienty a'_i , a_i jsou komplexní konstanty, které vyhovují rovnicím

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}} \quad (8.5)$$

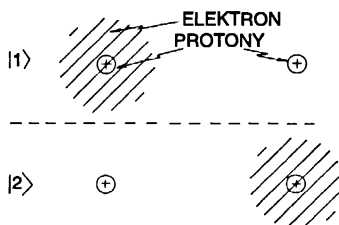
$$|a'_1|^2 + |a'_2|^2 = 1$$

$$\frac{a'_1}{a'_2} = \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{11}} \quad (8.6)$$

Je-li H_{11} rovno H_{22} (řekněme obě jsou rovny E_0) a $H_{12} = H_{21} = -A$, pak $E_I = E_0 + A$, $E_{II} = E_0 - A$ a stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$ jsou velmi jednoduché

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle], \quad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle + |2\rangle]. \quad (8.7)$$

Tyto výsledky chceme použít k prostudování několika zajímavých příkladů z oblasti chemie a fyziky. Prvním příkladem je ion molekuly vodíku. Kladně ionizovaná molekula vodíku se skládá ze dvou protonů a jednoho elektronu, který se nějakým způsobem potuluje mezi nimi. Jsou-li oba protony od sebe velmi vzdálené, jaké stavy můžeme očekávat pro tento systém? Odpověď je zcela jasná: Elektron bude setrvávat v blízkosti jednoho protonu a vytvoří s ním atom vodíku v nejnižším energetickém stavu, zatímco druhý proton zůstane osamocen jako kladný ion. Jsou-li tedy protony dostatečně daleko od sebe, můžeme si představit jeden fyzikální stav, v němž je elektron připoután k jednomu z protonů. Je jasné, že existuje další, symetrický stav, v němž se elektron nachází u druhého protonu a první je kladným iontem. Tyto dva stavy zvolíme za naše báze stavy a nazveme je $|1\rangle$ a $|2\rangle$. Jsou znázorněny na obr. 8.1. Samozřejmě, že existuje opravdu mnoho stavů, je-li elektron v blízkosti protonu, neboť jejich kombinací může vzniknout libovolný excitovaný stav atomu vodíku. Tato různorodost stavů nás nyní nezajímá; budeme uvažovat pouze tu situaci, kdy je vodíkový atom v nejnižším, základním stavu a na chvíli nebudeme brát v úvahu ani spin elektronu. Můžeme jednoduše předpokládat, že ve všech našich stavech míří spin elektronu podél osy z.³¹⁾



Obr. 8.1 Soubor báze stáv pro dva protony a jeden elektron

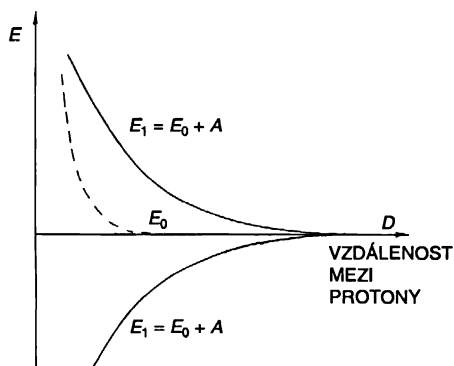
K odtržení elektronu z atomu vodíku potřebujeme vynaložit energii 13,6 eV. Pokud jsou oba protony tvořící ion molekulu vodíku dostatečně vzdáleny od sebe, stále je třeba zhruba tolik energie (což je při našich současných úvahách velmi mnoho) na to, abychom dopravili elektron někam ke středu vzdálenosti mezi protony. Podle klasických úvah proto elektron nemůže přeskočit od jednoho protonu ke druhému. Ale v kvantové mechanice to je možné – ačkoliv málo pravděpodobné. Existuje jistá malá amplituda toho že elektron přeběhne od svého původního protonu k jeho sousedovi. V prvním přiblížení bude mít každý z našich báze stáv $|1\rangle$ a $|2\rangle$ energii E_0 , což je právě energie jednoho atomu vodíku plus jednoho protonu. Prvky H_{11} a H_{22} Hamiltonovy matice můžeme zvolit tak, aby byly přibližně rovny E_0 . Zbývající maticové elementy H_{12} a H_{21} , představující amplitudy přechodu elektronu tam a zpět, zapíšeme opět jako $-A$.

³¹⁾ Tento předpoklad je vyhovující a oprávněný, pokud neexistují silná magnetická pole. V dalších státech této kapitoly vysvětlíme, jaký vliv mají magnetická pole na chování elektronu, a v 10. kapitole pohovoříme o velmi slabých spinových efektech v atomu vodíku.

Vidíte, že hrajeme tutéz hru jako v předcházejících dvou kapitolách. Zanedbáme-li skutečnost, že elektron může přeskokovat tam a zpět, dostaneme dva stavy s přesně stejnou hodnotou energie. Ale v důsledku toho, že elektron tuto možnost má, rozštěpí se uvedená energie na dvě hladiny; čím větší je pravděpodobnost přechodu, tím větší je i rozštěpení. Takže energetické úrovně soustavy jsou $E_0 + A$ a $E_0 - A$; stavy, kterým tyto hodnoty energie přísluší, jsou dány rovnicí (8.7).

Z našeho řešení vidíme, že přiblížíme-li proton a vodíkový atom k sobě, nebude se elektron zuby nehty držet svého původního protonu, ale bude přeskokovat tam a zpět mezi oběma protony. Začne-li u jednoho protonu, bude oscilovat sem a tam mezi stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ a dávat řešení měnící se s časem. Abychom dostali řešení odpovídající nejnižší energii (které se s časem nemění), je třeba, aby v daném systému měl elektron na počátku stejné amplitudy nacházet se v blízkosti každého z protonů. Uvědomme si, že nemáme dva elektrony; neříkáme, že u každého protonu je jeden elektron. Existuje jen *jeden* se stejnou amplitudou ($1/\sqrt{2}$ co do velikosti) být v jednom či druhém stavu.

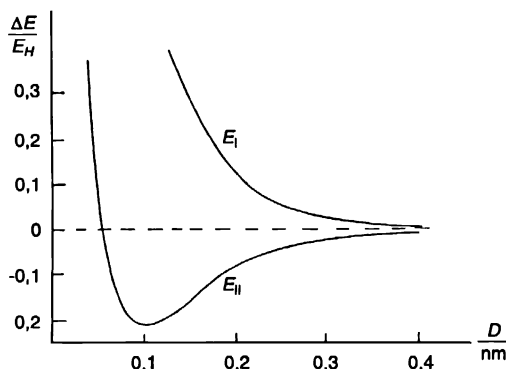
Pro elektron vyskytující se v blízkosti jednoho protonu závisí amplituda A přechodu k druhému z nich na vzájemné vzdálenosti mezi protony. Čím jsou k sobě blíží, tím je amplituda větší. Zajisté si vzpomínáte, že v 5. kapitole jsme hovořili o amplitudě elektronu „proniknout potenciálovou bariérou“, přes kterou by se klasicky nemohl nijak dostat. Tutéz situaci máme i nyní. Amplituda přechodu elektronu klesá se vzdáleností zhruba exponenciálně (pro velké vzdálenosti). Jelikož pravděpodobnost přechodu, a tedy i A , roste při vzájemném přibližování protonů, narůstá zároveň rozdíl mezi energetickými hladinami. Pokud se soustava nachází ve stavu $|I\rangle$, energie $E_0 + A$ roste se zmenšující se vzdáleností, takže tyto kvantově mechanické efekty generují *odpudivou sílu* usilující o udržení protonů od sebe. Na druhé straně, je-li soustava ve stavu $|II\rangle$ a protony navzájem přibližujeme, jejich celková energie *klesá*; vzniká *přitažlivá síla*, která tlačí oba protony k sobě. Průběh jedné i druhé energie v závislosti na vzdálenosti mezi protony by měl vypadat zhruba tak jako na *obr. 8.2*. Máme kvantově mechanické vysvětlení vazebné síly, která drží ion molekuly vodíku H_2^+ pohromadě.



Obr. 8.2 Energie obou stacionárních stavů iontu H_2^+ jako funkce vzdálenosti mezi dvěma protony

Zapomněli jsme však na jednu věc. Kromě síly, kterou jsme právě popsali, existuje mezi protony ještě elektrostatická odpuzivá síla. Jsou-li dva protony dostatečně daleko od sebe (*obr. 8.1*), vidí „holý“ proton před sebou pouze neutrální atom, takže elektrostatickou sílu lze zanedbat. Při velmi malých vzdálenostech však začíná „holý“ proton pronikat do elektro-

nového rozdělení, tj. v průměru je blíž u protonu než u elektronu. Objevuje se dodatečná elektrostatická energie, která je samozřejmě kladná. Tato energie, která také závisí na vzdálenosti, by měla být zahrnuta do E_0 . Takže za E_0 bychom měli vzít něco takového, co znázorňuje čárkovaná křivka na *obr. 8.2*, která velmi prudce narůstá při vzdálenostech menších, než poloměr vodíkového atomu. K této hodnotě E_0 bychom měli přičíst, resp. od ní odečíst energii překlápní A . Pokud to uděláme, budou se energie E_I a E_{II} měnit s mezi-protonovou vzdáleností tak jako na *obr. 8.3*.



Obr. 8.3 Energetické hladiny iontu H_2^+ jako funkce mezi-protonové vzdálenosti D ($E_H = 13,6$ eV)

(Na něm jsou zachyceny výsledky podrobnějších výpočtů. Vzdálenost mezi protony je dána v jednotkách 1 nm (10^{-9} m) a energie, o kterou má systém více, resp. méně, než je součet energie protonu a vodíkového atomu, v jednotkách vazebné energie atomu vodíku, tzv. Rydbergovy energie 13,6 eV.) Vidíme, že pro stav $|II\rangle$ existuje bod, v němž energie nabývá minimální hodnoty. To odpovídá rovnovážnému uspořádání (podmínka nejmenší energie) pro ion H_2^+ . V tomto bodě je energie soustavy menší než energie samotného protonu plus samotného atomu vodíku, takže dostáváme vázaný stav. Jediný elektron drží oba protony pohromadě. Chemik by to nazval „jednoelektronová vazba“.

Tento druh chemické vazby se často nazývá *kvantově mechanická rezonance* (podle analogie s případem dvou vázaných kyvadel, který jsme popsali dříve). Zní to však záhadněji, než to ve skutečnosti je. Rezonance to bude jen tehdy, pokud na začátku nevhodně zvolíme bázové stavy – což se nám stalo! Kdybychom vybrali stav $|II\rangle$, hned bychom dostali stav s nižší hodnotou energie.

Ke zdůvodnění skutečnosti, proč by takový stav měl mít menší energii než proton plus atom vodíku, existuje ještě jiný způsob. Uvažujme elektron v blízkosti dvou protonů, jejichž vzájemná vzdálenost je fixována a není příliš velká. Zajisté si vzpomenete, že v případě jediného protonu je v důsledku principu neurčitosti elektron „rozmazán“. Snaží se najít takový kompromis, aby měl malou Coulombovu *potenciální* energii a nebyl přitom uvězněn v příliš malém prostoru, což by naznačovalo velkou *kinetickou* energii (vzhledem ke vztahu neurčitosti $\Delta p \Delta x = \hbar$). Jsou-li protony dva, má elektron k dispozici větší prostor, kde může mít malou potenciální energii. Může se víc rozmazat (a snížit při tom svou kinetickou energii) bez zvýšení potenciální energie. V konečném důsledku je jeho energie menší než v atomu vodíku. Proč má potom stav $|I\rangle$ vyšší energii? Všimněme si, že tento stav je *rozdílem* stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$. V důsledku symetrie $|1\rangle$ a $|2\rangle$ musí mít uvedený rozdíl nulovou amplitudu

pro nalezení elektronu na půl cesty mezi oběma protony. To znamená, že elektron je ve svém pohybu jaksi víc omezen, což vede k vyšší energii.

Je třeba říci, že náš přibližný přístup k iontu H_2^+ jako k dvojhladinovému systému se zhroutl, jakmile se protony k sobě přiblíží na vzdálenost, která odpovídá minimu křivky na obr. 8.3; pro skutečnou energii vazby dostaneme nesprávnou hodnotu. Při malých vzdálenostech už energie obou „stavů“ nejsou rovny E_0 ; situace vyžaduje uplatnění jemnějšího kvantově mechanického rozboru.

Nyní se ptáme, co by se stalo, kdybychom místo dvou protonů měli dva různé objekty, jako např. jeden proton a jeden kladný ion lithia (obě částice nesou, tak jako předtím, kladný jednotkový náboj). Pak by už členy H_{11} a H_{22} v hamiltoniánu nebyly navzájem rovny; dokonce by se značně lišily. Kdyby se ukázalo, že rozdíl $(H_{11} - H_{22})$ v absolutní hodnotě je mnohem větší než $A = -H_{12}$, stala by se přitažlivá síla velmi slabou. Můžeme se o tom přesvědčit následujícím způsobem.

Položíme-li v rovnici (8.3) $H_{12}H_{21} = A^2$, dostaneme

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \frac{H_{11} - H_{22}}{2} \sqrt{1 + \frac{4A^2}{(H_{11} - H_{22})^2}}.$$

Je-li $(H_{11} - H_{22})^2$ mnohem větší než A^2 , druhá odmocnina je přibližně rovna

$$1 + \frac{2A^2}{(H_{11} - H_{22})^2}.$$

Obě energie pak mají hodnoty

$$\begin{aligned} E_I &= H_{11} + \frac{A^2}{(H_{11} - H_{22})} \\ E_{II} &= H_{22} - \frac{A^2}{(H_{11} - H_{22})}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Téměř úplně se shodují s energiemi H_{11} a H_{22} samostatných atomů; nepatrná odchylka je způsobena vlivem nenulové amplitudy přeskoků.

Rozdíl energií $E_I - E_{II}$ je

$$(H_{11} - H_{22}) + \frac{2A^2}{H_{11} - H_{22}}.$$

Dodatečný příspěvek pocházející z možnosti přeskoků elektronu tam a zpět už není roven $2A$; je vynásoben faktorem $A/(H_{11} - H_{22})$, který nyní považujeme za mnohem menší než 1. Kromě toho, samotná závislost $E_I - E_{II}$ na vzdálenosti mezi oběma jádry je mnohem menší než pro ion H_2^+ – i do ní vstupuje faktor $A/(H_{11} - H_{22})$. Nyní už chápeme, proč je vazba nesymetrických dvojjadrových molekul obecně velmi slabá.

V naší teorii iontu H_2^+ jsme objevili vysvětlení mechanismu, jehož pomocí elektron, pohybující se mezi oběma protony, vytváří v konečném důsledku přitažlivou sílu mezi nimi, a to dokonce i tehdy, když jsou od sebe velmi vzdálené. Přitažlivá síla pochází z toho, že energie soustavy poklesne proto, že pro elektron existuje možnost přeskokovat od jednoho

protonu ke druhému. Při takových přeskocích se systém mění z konfigurace vodíkový atom–proton na konfiguraci proton–vodíkový atom a zpět. Symbolicky lze tento proces zapsat jako

$$(H, p) = (p, H).$$

Takto způsobený posun energie je úměrný amplitudě A , žc elektron s energií $-W_H$ (jeho vazebná energie v atomu vodíku) může proniknout od jednoho protonu ke druhému.

Při velkých vzdálenostech R mezi oběma protony je elektrostatická energie elektronu blízka nule téměř v celém prostoru, kterým musí projít, když provádí skok. Zde se tedy elektron pohybuje téměř jako volná částice ve volném prostoru – ale se *zápornou* energií! V 1. kapitole (rovnice (1.7)) jsme viděli, že pro částici s přesně určenou hodnotou energie je amplituda dostat se z jednoho místa na místo, nacházející se ve vzdálenosti r , úměrná

$$\frac{e^{(i/\hbar)pr}}{r},$$

kde p je hybnost odpovídající dané energii. V našem případě (při použití nerelativistické formule) určíme p ze vztahu

$$\frac{p^2}{2m} = -W_H. \quad (8.9)$$

To znamená, že p je imaginární číslo

$$p = i\sqrt{2mW_H}.$$

(Druhý kořen, se znaménkem minus, nedává smysl.)

Očekáváme tedy, že pro ion H_2^+ se bude amplituda A při velkých meziprotonových vzdálenostech R měnit jako

$$A \sim \frac{e^{-\sqrt{2mW_H}/\hbar R}}{R}. \quad (8.10)$$

Posun energie v důsledku elektronové vazby je úměrný A , takže existuje síla, která oba protony tlačí k sobě a je pro velké R úměrná derivaci vztahu (8.10) podle R .

Pro úplnost je třeba na konec ještě poznamenat, že v soustavě se dvěma protony a jedním elektronem existuje ještě jeden jev, které vede k závislosti energie na R . Dosud jsme ho zanedbávali, protože není obvyčejně příliš důležitý. Výjimku však tvoří příliš velké vzdálenosti, když energie výměnného členu A exponenciálně klesne na velmi malé hodnoty. Nový efekt, který máme na mysli, je elektrostatické přitahování protonu k atomu vodíku, které vzniká z téže příčiny, z jaké nabitý objekt přitahuje objekt nenabitý. Samotný proton vytváří elektrické pole \mathcal{E} (mění se jako $1/R^2$) v místě neutrálního atomu vodíku. Ten je polarizován a získává indukovaný dipólový moment μ úměrný \mathcal{E} . Energie dipólu je $\mu\mathcal{E}$, což je úměrné \mathcal{E}^2 – neboli $1/R^4$. Ve výrazu pro energii tedy dostáváme člen, který klesá jako čtvrtá mocnina vzdálenosti (představuje korekci k E_0), tedy pomaleji než posun A daný vztahem (8.10). Při určitém velkém vzájemném vzdálení se právě on stává jedinou rozhodující a důležitou složkou udávající změnu energie v závislosti na R , a tedy i jedinou působící silou. Všimněte si, že elektrostatický člen má pro oba bazové stavy stejné znaménko (síla je přitažlivá, takže energie je záporná). Totéž platí i pro stacionární stavy, zatímco člen elektronové výměny A pro ně dává opačná znaménka.

8.2 JADERNÉ SÍLY

Viděli jsme, že soustava skládající se z atomu vodíku a protonu má v důsledku vzájemné výměny jednoho elektronu energii interakce, která se při velkých vzdálenostech R mění jako

$$\frac{e^{-\alpha R}}{R}, \quad (8.11)$$

kde $\alpha = \sqrt{2mW_H}/\hbar$. (Obvykle se říká, že nastává výměna „virtuálního“ elektronu, když tak jako v našem případě musí elektron přeskočit tu oblast, kde by měl zápornou energii. Konkrétněji řečeno, „virtuální výměna“ znamená, že jev zahrnuje kvantově mechanickou interferenci mezi vyměněným a nevyměněným stavem.)

Mohli bychom si položit následující otázku: Je možné, že i síly mezi jinými částicemi mají podobný původ? Co lze říci např. o jaderné síle působící mezi neutronem a protonem nebo dvěma protony? Ve snaze vysvětlit podstatu jaderných sil navrhl Yukawa, že síla mezi dvěma nukleony je způsobena podobným výměnným efektem, ale že v tomto případě při virtuální výměně nejde o elektron, ale o novou částici, kterou nazval *mezon*. Dnes bychom Yukawův mezon ztotožnili s mezonom π (totiž s pionem) vznikajícím při srážkách vysokoenergetických protonů nebo jiných částic.

Jako příklad se podívejme, jaký druh síly můžeme očekávat, když vycházíme z toho, že si proton a neutron vyměňují kladně nabitý pion (π^+) s hmotností m_π . Právě tak jako se atom vodíku H^0 může změnit na proton p^+ odtržením elektronu e^- ,



může se proton p^+ přeměnit na neutron n^0 tak, že se zbaví mezonu π^+ :



Takže máme-li proton v bodě a a neutron v bodě b (jejich vzájemná vzdálenost je R), může se z protonu stát neutron tak, že emituje mezon π^+ ; ten je v bodě b pohlcen neutronem, který se přemění na proton. Existuje energie interakce systému složeného ze dvou nukleonů a jednoho pionu, závisící na amplitudě A pro výměnu pionu – přesně tak, jak to bylo s výměnou elektronu v iontu H_2^+ .

V procesu (8.12) je energie atomu vodíku H^0 (počítáme-li ji nerelativisticky a vynecháme klidovou energii mc^2) menší než energie protonu o hodnotu W_H , takže elektron má zápornou *kinetickou* energii (nebo imaginární hybnost), tak jako v rovnici (8.9). Proton i neutron mají téměř shodné hmotnosti, proto v jaderném procesu (8.13) bude mít π^+ nulovou *celkovou* energii. Vztah mezi celkovou energií E a hybností p pionu s hmotností m_π je

$$E^2 = p^2 c^2 + m_\pi^2 c^4.$$

Protože E je rovno nule (alespoň je zanedbatelné v porovnání s m_π), vychází hybnost opět imaginární

$$p = i m_\pi c.$$

Použijeme-li tytéž argumenty, které jsme uvedli pro amplitudu toho, že vázaný elektron pronikne bariérou v prostoru mezi dvěma protony, dostáváme v případě jádra amplitudu výměny A , která by se pro velká R měla chovat jako

$$\frac{e^{-(m_\pi c/\hbar)R}}{R}. \quad (8.14)$$

Energie interakce je úměrná A , takže se mění tímž způsobem. Změnu energie dostáváme ve formě *Yukawova potenciálu* mezi dvěma nukleony. Mimochodem, přesně tentýž vztah jsme získali už dřív, když jsme řešili diferenciální rovnici pro pohyb pionu v prázdném prostoru (viz rovnice (28.18), díl 2).

Přidržíme-li se téhož sledu argumentů můžeme prodiskutovat interakci mezi dvěma protony (nebo mezi dvěma neutrony), která je následkem vzájemné výměny *neutrálního* pionu (π^0). Základní proces je nyní

$$p^+ \rightarrow p^+ + \pi^0. \quad (8.15)$$

Proton může emitovat virtuální pion π^0 , ale přitom zůstává stále protonem. Máme-li protony dva, může první z nich emitovat virtuální π^0 , který je následně pohlcen druhým protonem. Na konci celého procesu dostáváme opět dva protony. Je to trochu odlišná situace než pro ion H_2^+ . Tam atom vodíku H^0 přešel po emisi elektronu do jiného stavu – změnil se na proton. Nyní předpokládáme, že proton může emitovat π^0 , aniž by narušil svou podstatu. Ve skutečnosti lze takové procesy pozorovat při vysokoenergetických srážkách. Je to podobné, jako když elektron emituje foton a zůstává přitom stále jen elektronem

$$e^- \rightarrow e^- + \text{foton}. \quad (8.16)$$

Před emisí nebo po absorpci fotonů „nevidíme“, že by se nacházely uvnitř elektronů; jejich emisí se „podstata“ elektronu nemění.

Vraťme se zpět ke dvěma protonům. Existuje pro ně energie interakce, pocházející z existence amplitudy A – amplitudy toho, že jeden proton emituje neutrální pion, který putuje (s imaginární hybností) ke druhému protonu a tam je pohlcen. Tato amplituda je opět úměrná výrazu (8.14), kde je z m_π třeba brát hmotnost π^0 . Tytéž argumenty vedou ke stejné interakční energii pro dva neutrony. Jelikož jaderné síly (neuvažujeme-li efekty způsobené elektrickými náboji) nezávisí na náboji, tj. jaderné síly působící mezi neutronem a protonem, mezi protonem a protonem a mezi neutronem a neutronem jsou stejně silné, přicházíme k závěru, že hmotnosti neutrálního a nabitých pionů by měly být stejné. Experimentálně bylo zjištěno, že hmotnosti jsou si opravdu velmi blízké a nevelký rozdíl mezi nimi je přibližně to, co lze očekávat z oprav na elektromagnetickou vlastní energii (kapitola 28, díl 2).

Dva nukleony si mohou navzájem vyměňovat i jiné druhy částic, např. mezony K . Je taktéž možná současná výměna dvou pionů. Ale všechny tyto vyměňované „objekty“ mají klidovou hmotnost m_x větší než je hmotnost pionu m_π a v amplitudě výměny vedou ke členům měnícím se jako

$$\frac{e^{-(m_x c/\hbar)R}}{R}.$$

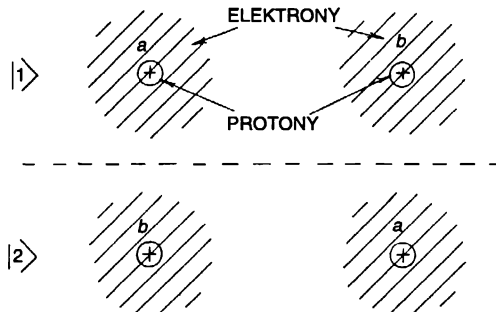
Ty s rostoucím R mizí rychleji než člen příslušící jednomu pionu. Dnes ještě nikdo neví, jak spočítat členy s vyšší hmotností, ale pro dostatečně velké hodnoty R přežije jen jednopionový člen. A opravdu, experimenty, v nichž hrají hlavní roli jen jaderné interakce na velkých vzdálenostech, dokazují, že energie interakce je právě taková, jakou ji předpovídá teorie s výměnou jednoho pionu.

V klasické teorii elektřiny a magnetizmu spolu úzce souvisí coulombovská elektrostatická interakce a vyzařování světla urychleným nábojem – oba jevy vyplývají z Maxwellových rovnic. V kvantové teorii jsme viděli, že světlo si lze představit jako kvantová buzení harmonických kmitů klasických elektromagnetických polí v krabici. Na druhé straně lze kvantovou teorii vybudovat tak, že světlo popíšeme pomocí částic (fotonů), které se podřizují Boseho statistice. Ve stati 2.5 jsme zdůraznili, že obě vzájemně se vylučující hlediska dávají stejné předpovědi. Může být druhé hledisko dovedeno do konce v tom smyslu, že by obsahlo *všechny* elektromagnetické jevy? Konkrétně, chceme-li popsat elektromagnetické pole výlučně pomocí Boseho částic, tj. pomocí fotonů, což je potom příčinou vzniku Coulombovy síly?

Z „částicového“ hlediska je coulombovská interakce mezi dvěma elektrony *důsledkem výměny virtuálního fotonu*. Jeden elektron emituje foton (tak jako v reakci (8.16)), který proletí k druhému elektronu, a tam je pohlcen – uvedená reakce probíhá i opačným směrem. Energii interakce opět udává formule podobná vztahu (8.14); hmotnost pionu m_π je však nahrazena klidovou hmotností fotonu – a ta je rovna nule. Výměna virtuálního fotonu mezi dvojicí elektronů vede k energii interakce, které se mění nepřímo úměrně jejich vzdálenosti R – je to zkrátka obyčejná coulombovská potenciální energie. V teorii elektromagnetizmu, vybudované na „částicovém“ základu, je proces výměny virtuálního fotonu původcem všech jevů v elektrostaticce.

8.3 MOLEKULA VODÍKU

Další dvojhladinový systém, kterého si blíže všimneme, bude neutrální molekula vodíku H_2 . Přírozeně, je složitější na pochopení, neboť má dva elektrony. Na úvod opět uvažujme, co se děje, jsou-li oba protony od sebe dostatečně vzdáleny. Nyní k nim však musíme přidat dva elektrony. Abychom je mohli pozorně sledovat, nazveme jeden z nich elektron a a druhý elektron b . Zase si můžeme představit dva možné stavy. Jedna možnost je, že elektron a se nachází v blízkosti prvního a elektron b v blízkosti druhého protonu, tak jak ukazují *obr. 8.4*. Máme prostě dva vodíkové atomy.

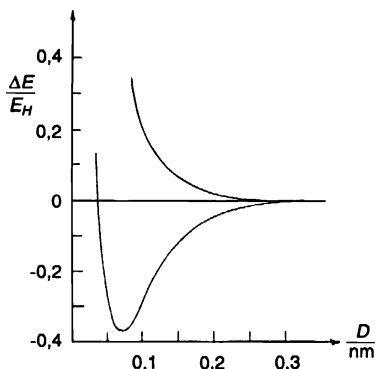


Obr. 8.4 Soubor bázových stavů pro molekulu H_2

Tento stav nazveme stavem $|1\rangle$. Existuje ještě jiná možnost: Elektron b se pohybuje kolem prvního a elektron a kolem druhého protonu. To bude stav $|2\rangle$. V důsledku symetrie by měly být obě varianty energeticky ekvivalentní, ale jak uvidíme později, energie systému *není* jednoduše energií dvou vodíkových atomů. Je třeba zmínit, že možností existuje mnohem více. Například elektron a by se mohl vyskytovat u prvního protonu a elektron b *také*, ale v jiném stavu. Takový případ nebudeme brát v úvahu, protože bude mít jistě vyšší energii (mezi oběma elektrony existuje totiž velké coulombovské odpuzování). K dosažení vyšší přesnosti bychom museli do našich úvah zahrnout i takovéto stavy, ale na to, abychom pochopili podstatu molekulové vazby, nám stačí, budeme-li uvažovat pouze ty, které jsou znázorněny na *obr. 8.4*. V tomto přiblížení můžeme libovolný stav popsat udáním amplitudy $\langle 1|\varphi\rangle$, že se bude nacházet ve stavu $|1\rangle$ a amplitudy $\langle 2|\varphi\rangle$, že ho najdeme ve stavu $|2\rangle$. Jinými slovy, stavový vektor $|\varphi\rangle$ lze zapsat jako lineární kombinaci

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\varphi\rangle.$$

Dále jako obvykle předpokládáme, že existuje určitá amplituda toho, že elektrony mohou procházet prostorem, který je odděluje, a vyměňovat si místa. Tato možnost vzájemné výměny znamená, že energie soustavy je rozštěpena, tak jako jsme to viděli pro jiné dvojhladinové systémy. Pro ion molekuly vodíku je rozštěpení nepatrné, jsou-li protony od sebe velmi vzdáleny. Při jejich vzájemném přibližování amplituda přesakování elektronů tam a zpět narůstá, takže i rozštěpení se zvětšuje. Z poklesu energie stavu E_{II} vyplývá existence přitažlivé síly, která tlačí protony k sobě. Dostanou-li se protony blízko jeden k druhému, energetické hladiny opět rostou v důsledku coulombovského odpuzování. Jako konečný výsledek dostáváme závislost energií dvou stacionárních stavů na vzdálenosti znázorněnou na *obr. 8.5*. Nižší energetická hladina nabývá minima při odstupu kolem 0,074 nm; to je vzdálenost mezi protony v reálně existující molekule vodíku.



Obr. 8.5 Energetické hladiny molekuly H_2 pro různé meziprotonové vzdálenosti D ($E_H = 13,6$ eV)

Nyní pravděpodobně namítnete: A co fakt, že oba elektrony jsou identické částice? Nazýváme je sice elektron a a elektron b , ale ve skutečnosti je od sebe neumíme nijak odlišit. A v 2. kapitole jsme si řekli, že existují-li pro elektrony (které jsou Fermiho částicemi) v důsledku jejich vzájemné výměny dva způsoby, jakými může určitá událost nastat, budou obě

amplitudy interferovat se *záporným* znaménkem. To znamená, že když elektrony navzájem zaměníme, musí amplituda změnit znaménko. Před chvílí jsme však dospěli k závěru, že vázaný stav molekuly vodíku by měl tvar (při $t=0$)

$$|\text{II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle).$$

Naše pravidla z 2. kapitoly to však nedovolují. Zaměníme-li označení elektronů, dostaneme stav

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

se stejným znaménkem, a ne opačným.

Zmíněné argumenty jsou správné, *mají-li oba elektrony stejný spin*. Je pravda, že směřují-li oba spiny nahoru (nebo dolů), je jediným dovoleným stavem stav

$$|\text{I}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle).$$

Pro něj dává vzájemná výměna elektronů stav

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle - |1\rangle),$$

což je podle požadavku rovno $-|\text{I}\rangle$. Takže přiblížíme-li k sobě dva vodíkové atomy, jejichž elektrony spinují týmž směrem, mohou přejít jedině do stavu $|\text{I}\rangle$, a ne do $|\text{II}\rangle$. Ale všimněte si, že stav $|\text{I}\rangle$ je stavem s *vyšší* energií. Jeho křivka závislosti energie na vzdálenosti nemá minimum. Oba vodíkové atomy se budou stále odpuzovat a nikdy nevytvoří molekulu. Docházíme k závěru, že molekula vodíku s paralelními spiny elektronů nemůže existovat. A opravdu tomu tak je.

Na druhé straně, stav $|\text{II}\rangle$ je dokonale symetrický vzhledem k oběma elektronům. Skutečně, změníme-li jejich označení (tj. elektron, který jsme předtím nazvali a , bude nyní b a naopak), dostaneme přesně tentýž stav. Ve stati 2.7 jsme viděli, že jsou-li dvě Fermiho částice ve stejném stavu, *musí* mít opačné spiny. Takže ve vázané molekule vodíku musí být nutně jeden elektron se spinem nahoru a jeden se spinem dolů.

Celé povídání o molekule vodíku by ve skutečnosti bylo o něco složitější, kdybychom chtěli do našich úvah zahrnout i spiny protonů. Pak by už nebylo správné považovat molekulu za *dvojhladinový* systém. Bylo by třeba se na ni dívat spíš jako na soustavu s *osmi* hladinami (pro každý ze stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$ existují čtyři různá uspořádání spinů), takže zanedbáním spinů protonů jsme si to trochu zjednodušili. Naše konečné závěry jsou však správné.

Zjistili jsme, že molekula H_2 má ve stavu s nejnižší energií (v jediném vázaném stavu) elektrony s opačně orientovanými spiny. Celkový spinový moment hybnosti elektronů je roven nule. Na druhé straně dva atomy vodíku s rovnoběžnými spiny elektronů (a tedy s celkovým spinovým momentem hybnosti \hbar), nacházející se blízko sebe, musí být ve vyšším (ne vázaném) energetickém stavu; oba se navzájem odpuzují. Pozorujeme zajímavou korelaci

mezi spiny a energiemi. Opět nám ilustruje to, co jsme zmínili už dříve. Jako kdyby mezi dvěma spiny existovala „interakční“ energie, protože případ spinů orientovaných souhlasně nabývá vyšší energie než případ spinů orientovaných nesouhlasně. V témže smyslu bychom mohli říci, že spiny se snaží dostat se do antiparalelního stavu a při tomto svém úsilí mají schopnost uvolnit energii, ale ne díky přítomnosti velké magnetické síly, ale v důsledku vylučovacího principu.

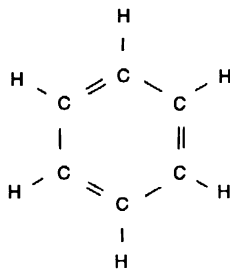
Ve stati 8.1 jsme viděli, že vazba dvou *různých* iontů vytvářená *jediným* elektronem bývá ve většině případů poměrně slabá. *Neplatí to* pro vazbu tvořenou *dvěma* elektrony. Představme si, že oba protony na *obr. 8.4* nahradíme libovolnými dvěma ionty (se zaplněnými vnitřními elektronovými slupkami a jednotkovým iontovým nábojem) a že vazebné energie elektronu v uvedených iontech jsou různé. Tak jako předtím, i nyní budou energie stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$ totožné, neboť na každý z nich připadá vazba jednoho elektronu na jeden ion. Proto je rozštěpení vždy úměrné A . Dvojelektronová vazba je vskutku všudypřítomná – je to totiž nejobyčejnější valenční vazba. Chemická vazba obvykle předpokládá takovýto „přeskakovací ping-pong“, kterému se podrobují oba elektrony. Ačkoliv jediný elektron je schopný vázat dva atomy dohromady, stává se tak poměrně zřídka; vyžaduje to zkrátka patřičné podmínky.

Nakonec bychom chtěli poznamenat, že je-li vazebná energie elektronu pro jedno jádro mnohem větší než pro druhé, pak už naše tvrzení o případném zanedbání jiných možných stavů není správné. Předpokládejme, že jádro a (nebo to může být i kladný ion) přitahuje elektron mnohem silněji než jádro b . Může se přitom stát, že celková energie je stále poměrně nízká, dokonce i když jsou oba elektrony u jádra a a žádný se nenachází u jádra b . Je možné, že toto přitahování se někdy ukáže silnějším než vzájemné odpuzování obou elektronů. Je-li tomu tak, může mít nižší energetický stav velkou amplitudu toho, že najdeme oba elektrony u a (čímž se vytvoří záporný ion) a malou amplitudu výskytu alespoň jednoho elektronu u b . Výsledný stav vypadá jako dvojice tvořená kladným a záporným iontem. Tento efekt se ve skutečnosti projevuje v iontové molekule, jakou je např. NaCl. Vidíme, že všechny možné stupně přechodu mezi kovalentní a iontovou vazbou jsme reálné.

Nyní už snad jasněji chápete, že mnohým chemickým faktům lze bez problémů porozumět pomocí kvantově mechanického popisu.

8.4 MOLEKULA BENZENU

Chemici vymysleli přehledné diagramy ke znázornění složitých organických molekul. O jedné z nich, která patří mezi nejzajímavější, nyní trochu pohovoříme. Je to molekula benzenu; její schéma je nakresleno na *obr. 8.6*. Je složena ze šesti uhlíkových a šesti vodíkových atomů tvořících symetrické uspořádání.

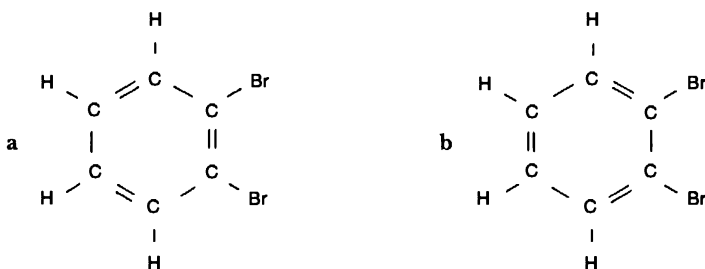


Obr. 8.6 Molekula benzenu C₆H₆

Každá čárka v diagramu představuje *jeden pár* elektronů s opačnými spiny, podílejících se na „výměnném tanci“ při vzniku kovalentní vazby. Každý vodíkový atom přispívá jedním a každý atom uhlíku čtyřmi elektrony do celkového počtu 30 elektronů, zúčastňujících se této hry. (V těsné blízkosti každého uhlíkového jádra se nacházejí ještě dva elektrony z první slupky, tzv. slupky K. Ty nejsou ve schématu vyznačeny, protože jsou tak silně vázány, že na kovalentní vazbě nemají žádný významný podíl.) Takže každá čárka na obrázku představuje *vazbu*, nebo elektronový pár, a dvojně vazby znamenají, že mezi příslušnými dvojicemi atomů uhlíku existují *dva páry* elektronů.

S molekulou benzeny je spojena jedna záhada. Můžeme spočítat, jaká energie by byla potřebná k jejímu vytvoření, protože chemici změřili energie různých sloučenin obsahujících části kruhu (jádra); studiem etylénu např. zjistili energii dvojně vazby apod. Proto jsme schopni vypočítat celkovou energii, jakou by podle našeho očekávání měla mít molekula benzeny. Skutečná energie benzenového jádra je však mnohem menší než hodnota, jakou dává výpočet; jádro drží pohromadě silněji, než bychom očekávali pro soustavu tzv. nenasycených dvojných vazeb. Nevytvářejí-li tyto vazby kruhové jádro, lze je obvykle snadno porušit přidáním dalších atomů vodíku, neboť tyto vazby mají relativně velkou energii. V benzeny je však jádro poměrně stabilní a jen těžko je lze rozbít. Jinými slovy, energie benzeny je mnohem menší než vyplývá z výpočtu podle schématu dvojných vazeb.

Vzniká ještě jedna záhada. Představme si, že dva sousední vodíkové atomy nahradíme atomy brómu a vytvoříme ortodibrombenzen. Provést to můžeme dvěma způsoby tak, jak ukazuje *obr. 8.7*. Oba atomy brómu se mohou vázat buď na atomy uhlíku, mezi nimiž existuje dvojná vazba (část *a* na obrázku), nebo na uhlíky, mezi nimiž se uplatňuje obyčejná jednoduchá vazba (část *b* na obrázku). Zdálo by se, že ortodibrombenzen by měl mít dvě různé struktury, ale nemá. Existuje jen jedna jediná takováto chemická látka³²⁾.



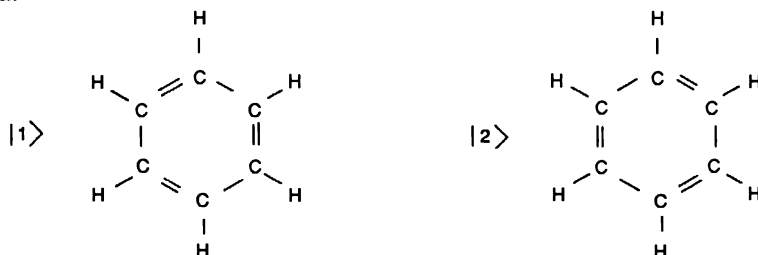
Obr. 8.7 Dvě možnosti pro ortodibrombenzen. Dva atomy brómu mohou být odděleny jednoduchou nebo dvojnou vazbou.

Rádi bychom uvedené záhady objasnili – snad jste už uhodli, jak. Klíč spočívá v tom, že základní stav benzenového jádra je ve skutečnosti dvojhladinovým systémem, tj. systémem se dvěma stavy. Lze si představit, že vazby v benzeny jsou uspořádány dvojím způsobem (*obr. 8.8*). Řeknete: „Ve skutečnosti jsou zcela totožné; měly by mít stejnou energii.“ Opravdu by

³²⁾ Trochu si to usnaňujeme. Původně zastávali chemici názor, že by měly existovat *čtyři* struktury dibrombenzeny: dvě s atomy brómu vázanými na sousední atomy uhlíku (ortodibrombenzen), třetí s brómy na uhlících, mezi nimiž se nachází ještě jeden atom uhlíku s vázaným vodíkem (metadibrombenzen), a nakonec čtvrtá s atomy brómu ležícími proti sobě (paradibrombenzen). Našli však jen tři – ortomolekula existuje jen v *jedné* struktuře.

měly. A z toho důvodu je musíme zkoumat jako systém se dvěma stavy. Každý stav představuje jinou konfiguraci celého souboru elektronů a existuje určitá amplituda A toho, že celá tato elektronová kolekce přejde z jednoho uspořádání do druhého; elektrony mají šanci zaměnit jednu taneční figuru za druhou.

Jak jsme viděli, tato pravděpodobnost přeskočení vede k smíšenému stavu, jehož energie je menší, než jsme vypočítali, kdybychom se na každou ze dvou částí *obrázku 8.8* dívali zvlášť. Místo toho máme dva stacionární stavy – jeden s energií nad a jeden s energií pod očekávanou hodnotou.



Obr. 8.8 Soubor bázevých stavů pro molekulu benzenu

Takže vlastně skutečný stav benzenu (s nejnižší energií) není ani jednou z možností uvedených na *obr. 8.8*, ale je to takový stav, který má amplitudu $1/\sqrt{2}$ nacházet se v každém z nich. Jen tento jediný stav je třeba brát v úvahu v chemii benzenu při normálních teplotách. Mimochodem, stav s vyšší energií také existuje; na jeho přítomnost ukazuje to, že benzen projevuje silné absorpční vlastnosti pro ultrafialové světlo s frekvencí $\omega = (E_1 - E_{II})/\hbar$. Zajisté si vzpomenete, že v amoniaku, kde překlápějící se soustavou byla trojice protonů, ležel energetický rozdíl v mikrovlnné oblasti. V benzenu tvoří tuto soustavu elektrony, a protože jsou mnohem lehčí, je pro ně jednodušší přeskakovat sem a tam, což způsobuje, že koeficient A silně vzroste. V důsledku toho je energetický rozdíl mnohem větší – asi 6.8 eV, což je energie fotonu z ultrafialové části spektra.³³⁾

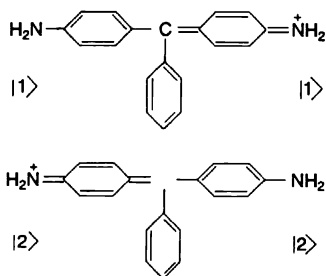
Co se stane, bude-li se na dva sousední uhlíky vázat bróm? Opět dostaneme dvě možnosti a a b na *obr. 8.7*, které představují dvě různé elektronové konfigurace. Jediný rozdíl je v tom, že energie obou bázevých stavů, z nichž vycházíme, budou trochu odlišné. Stacionární stav s nejnižší energií bude sice obsahovat lineární kombinaci obou stavů, ale s nestejnými amplitudami. Amplituda pro stav $|1\rangle$ by mohla mít hodnotu řekněme $\sqrt{2/3}$, zatímco pro stav $|2\rangle$ by byla rovna $\sqrt{1/3}$. Bez dodatečné informace to nemůžeme s jistotou prohlásit, ale nejsou-li jedny energie H_{11} a H_{22} stejné, nebudou mít ani amplitudy C_1 a C_2 stejnou velikost. To samozřejmě znamená, že jedna ze dvou možností na *obrázku* je pravděpodobnější než druhá, ale elektrony jsou dostatečně pohyblivé, aby existovala jistá amplituda pro

33) To, co jsme řekli, není zcela správné. V dvojhadinovém systému, který jsme vybrali pro benzen, by se ultrafialové světlo absorbovalo velmi slabě, neboť maticový element dipólového momentu mezi oběma stavy je roven nule. Oba stavy jsou elektricky nesymetrické, takže v našem vztahu (7.55) pro pravděpodobnost přechodu je dipólový moment roven nule a žádné světlo neabsorbuje. Kdyby to byly jediné stavy, museli bychom existenci vyššího energetického stavu dokázat jiným způsobem. Úplnější teorie benzenu však vychází z většího počtu bázevých stavů (zahrnuje např. stavy se sousedními dvojnými vazbami). Ukazuje, že skutečné stacionární stavy jsou trochu zkresleny proti těm, které jsme našli. Výsledné dipólové momenty povolují přechod zmíněný v textu a vedou k absorpci ultrafialového světla.

obě varianty. Druhý stacionární stav má jiné amplitudy (řekněme $\sqrt{1/3}$ a $-\sqrt{2/3}$), ale vyšší energii. Existuje jen jeden jediný nejnižší stav, a ne dva, jako by plynulo z naivní představy pevných chemických vazeb.

8.5 BARVIVA

Uvedeme ještě jeden příklad chemických jevů souvisejících se dvěma stavy: tentokrát na úrovni velkých molekul. Týká se teorie barviv. Mnohá z nich (ve skutečnosti většina umělých barviv) se vyznačuje zajímavou charakteristikou – jsou jistým způsobem symetrická. Na *obr. 8.9* je naznačeno schéma iontu konkrétního barviva zvaného fuchsin, který má červenofialovou barvu. Molekula je složena ze tří cyklických struktur, z nichž dvě jsou benzenová jádra. Třetí se od nich trochu liší, protože obsahuje jen dvě dvojně vazby. Na obrázku jsou znázorněna dvě rovnoprávná schémata, která by podle našeho odhadu měla mít stejnou energii.



Obr. 8.9 Dvojice bázových stavů pro molekulu barviva zvaného fuchsin

Existuje však určitá amplituda toho, že všechny elektrony mohou přejít z jednoho stavu do druhého, čímž se přesune poloha „nezaplněného“ kruhu z jednoho konce na druhý. Protože je ve hře tolik elektronů, je amplituda přeskočků o něco menší než v případě benzenu, čímž se sníží rozdíl mezi energiemi obou stacionárních stavů. Tyto nám známé stacionární stavy $|I\rangle$ a $|II\rangle$ však přesto existují a představují součet a rozdíl obou bázových stavů uvedených na obrázku. Energetický rozdíl mezi $|I\rangle$ a $|II\rangle$ vychází roven energii fotonu z oblasti viditelného světla. Vystavíme-li molekulu působení světla, dochází při určité frekvenci k velmi silné absorpci a molekula vypadá jasně zbarvena. Právě proto je to barvivo!

Další zajímavým rysem takové molekuly barviva je to, že ve dvou uvedených bázových stavech je těžiště rozdělení elektrického náboje v různých bodech. V důsledku toho by měla být velmi citlivá na působení vnějšího elektrického pole. S podobným jevem jsme se setkali u molekuly amoniaku. Je zřejmé, že k jeho rozboru můžeme použít přesně tentýž matematický postup, ale za předpokladu, že známe čísla E_0 a A . Ta se obecně získávají hromaděním experimentálních údajů. Vykonáme-li měření s mnohými barvivy, lze často odhadnout, co se stane s nějakou správně zvolenou molekulou barviva. Protože posun polohy těžiště rozdělení elektrického náboje je značný, nabývá μ ve vztahu (7.55) velké hodnoty a látka má vysokou pravděpodobnost absorpce světla charakteristické frekvence $2A/\hbar$. Je proto zbarvena velice sytě; malé množství látky pohlcuje mnoho světla.

Počet přeskočků za jednotku času (a tím zároveň i A) je velmi citlivý na celkovou

strukturu molekuly. Změnou A lze pozměnit energii rozštěpení a s ní i zabarvení barviva. Molekuly také nemusejí být zcela symetrické. Viděli jsme, že i za přítomnosti nějaké malé asymetrie tentýž základní stav stále existuje, ačkoliv s jemnými modifikacemi. Tím, že do molekul zavedeme nepatrné asymetrie, můžeme dostat určité barevné odstíny. Například malachitová zeleň, další důležité barvivo, je velmi podobná fuchsinu; dva vodíkové atomy jsou však nahrazeny skupinou CH_3 . Dostáváme jinou barvu, protože A se posunulo a frekvence překlápění se změnila.

8.6 HAMILTONIÁN ČÁSTICE SE SPINEM 1/2 NACHÁZEJÍCÍ SE V MAGNETICKÉM POLI

Nyní se začneme podrobněji věnovat ještě jednomu dvojhladinovému systému; tentokrát bude objektem našeho zájmu částice se spinem 1/2. Něco z toho, co řekneme, jsme už zmínili v předcházejících kapitolách, ale zopakování nám snad pomůže trochu objasnit některé méně jasné body. Elektron v klidu můžeme považovat za soustavu se dvěma stavy. Ačkoliv v této stati budeme hovořit o elektronu, bude to, k čemu dojdeme, platit pro *libovolnou* částici se spinem 1/2. Představme si, že za naše bázevé stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ zvolíme stavy, v nichž má z -ová složka spinu elektronu hodnoty $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$.

Tyto stavy jsou samozřejmě totožné s těmi, které jsme v 3. kapitole nazvali stavy (+) a (-). Abychom se přidrželi označení, které používáme nyní, definujeme „plusový“ spinový stav jako stav $|1\rangle$ a „minusový“ spinový stav jako stav $|2\rangle$; plus a minus se vztahují na moment hybnosti ve směru osy z .

Libovolný stav ψ elektronu lze popsat tak jako v rovnici (8.1) udáním amplitudy C_1 , že se elektron nachází ve stavu $|1\rangle$ a amplitudy C_2 , že ho najdeme ve stavu $|2\rangle$. Abychom vyřešili tento problém, potřebujeme znát hamiltonián pro zmíněnou dvojhladinovou soustavu, tj. pro elektron v magnetickém poli. Na úvod se zaměříme na speciální případ magnetického pole ve směru osy z .

Předpokládejme, že vektor \mathbf{B} má nenulovou pouze z -ovou složku B_z . Z definice obou bázeových stavů (se spiny paralelními a antiparalelními s \mathbf{B}) víme, že jsou zároveň stacionárními stavy s přesně určenou hodnotou energie v magnetickém poli. Stav $|1\rangle$ odpovídá energii³⁴⁾ $-\mu B_z$ a stav $|2\rangle$ energii $+\mu B_z$. V tomto případě musí hamiltonián vypadat velice jednoduše, neboť C_1 (amplituda nacházející se ve stavu $|1\rangle$) není ovlivněna amplitudou C_2 a naopak

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= E_1 C_1 = -\mu B_z C_1 \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= E_2 C_2 = +\mu B_z C_2. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Pro uvedený konkrétní případ má hamiltonián tvar

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z & H_{12} &= 0 \\ H_{21} &= 0 & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \quad (8.18)$$

³⁴⁾ Klidovou energii $m_0 c^2$ považujeme za nulovou hodnotu energie a za magnetický moment μ elektronu bereme *záporné* číslo, protože míří na opačnou stranu než spin.

Víme tedy, jak vypadá Hamiltonova matice pro magnetické pole ve směru osy z a známe energie stacionárních stavů.

Nechť nyní pole *nemá* směr osy z . Jaký tvar má hamiltonián v tomto případě? Jak se změny maticové elementy, leželi pole v obecném směru? Přijmeme předpoklad, že pro prvky Hamiltonovy matice existuje určitý druh principu superpozice. Konkrétněji zformulováno, budeme předpokládat, že při superpozici dvou magnetických polí se prvky v hamiltoniánu jednoduše sčítají – známe-li H_{ij} pro čisté B_z i pro čisté B_x , pak H_{ij} pro obě složky pole B_z a B_x představuje prostý součet jednotlivých částečných hamiltoniánů. Určitě to platí, uvažujeme-li pole výlučně ve směru osy z – zdvojnásobíme-li B_z všechny H_{ij} , se taktéž zvětší dvakrát. Předpokládejme tedy, že H je lineární vzhledem B . Úplně nám to stačí k tomu, abychom našli H_{ij} pro libovolné magnetické pole.

Uvažujeme konstantní magnetické pole B . Mohli jsme naši osu z zvolit v jeho směru a *byly bychom našli* dva stacionární stavy s energiemi $\pm\mu B$. Ale rozdílný výběr směrů souřadnicových os přece nezmění *fyzikální skutečnost*. Náš popis stacionárních stavů bude jiný, ale energie *budou stále* $\pm\mu B$, tj.

$$E_I = -\mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$

a

$$E_{II} = +\mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}.$$

(8.19)

Zbytek už půjde snadno. Máme vztahy pro energie. Potřebujeme hamiltonián lineární v B_x , B_y a B_z ; použijeme-li jej v našich obecných vztazích (8.3), přijdeme právě k takovým hodnotám energie. Úkolem tedy zůstává najít ho. Nejdříve si všimněme, že rozštěpení energie je symetrické se střední hodnotou rovnou nule. Podíváme-li se na rovnici (8.3), vidíme, že tento fakt vyžaduje, aby

$$H_{22} = -H_{11}.$$

(Uvedený požadavek je v souladu s tím, co už víme o případě, kdy B_x i B_y jsou rovny nule; v tom případě $H_{11} = -\mu B_z$ a $H_{22} = \mu B_z$.) Položíme-li do rovnosti výrazy pro energie z rovnic (8.3) a (8.19), máme

$$\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2 (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2). \quad (8.20)$$

(Přitom jsme využili skutečnosti, že $H_{21} = H_{12}^*$, takže $H_{12}H_{21}$ lze psát jako $|H_{12}|^2$.) Opět pro speciální případ pole ve směru osy z dostáváme

$$\mu^2 B_z^2 + |H_{12}|^2 = \mu B_z^2.$$

Je jasné, že $|H_{12}|$ musí být rovno nule, což znamená, že H_{12} nemůže obsahovat žádné členy s B_z . (Vzpomeňte si, že jsme hovořili o požadavku k lineárnosti všech členů v B_x , B_y a B_z .)

Ďospěli jsme tedy i zjištění, že do H_{11} i do H_{22} vstupují členy s B_z zatímco do H_{12} a H_{21} ne. Můžeme se pokoušet provést jednoduchý odhad jednotlivých členů hamiltoniánu, který bude vyhovovat rovnici (8.20). Položme

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z \\ H_{22} &= +\mu B_z \end{aligned}$$

$$a \quad (8.21)$$

$$|H_{12}|^2 = \mu^2 (B_x^2 + B_y^2).$$

Ukazuje se, že jiným způsobem se to ani provést *nedá*

„Počkat“, řeknete si, „ H_{12} není lineární v B ; z rovnice (8.12) vyplývá, že $H_{12} = \mu\sqrt{B_x^2 + B_y^2}$ “. To však není nutné. Existuje ještě jedna možnost, která je lineární, totiž

$$H_{12} = \mu (B_x + iB_y).$$

Ve skutečnosti je takových variant několik; v nejobecnějším případě bychom mohli napsat

$$H_{12} = \mu (B_x \pm iB_y) e^{i\delta},$$

kde δ je libovolná fáze. Jaké znaménko a jakou fázi máme používat? Ukazuje se, že v tom máme úplně volnou ruku; zda zvolíme takové nebo jiné znaménko nebo hodnotu fáze, dojdeme vždy ke stejným fyzikálním výsledkům. Takže výběr je jen otázkou dohody. V dálnějších dobách se fyzici dohodli na tom, že se bude používat znaménko minus a taková fáze, pro kterou $e^{i\delta} = -1$. Přizpůsobíme se přijaté konvenci a položíme

$$H_{12} = -\mu (B_x - iB_y), \quad H_{21} = -\mu (B_x + iB_y).$$

(Mimochodem, tato dohoda je v souladu s volbou ve výběru fází, které jsme používali ve 4. kapitole.)

Úplný hamiltonián pro elektron nacházející se v libovolném magnetickém poli má tedy tvar

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z & H_{12} &= -\mu (B_x - iB_y) \\ H_{21} &= -\mu (B_x + iB_y) & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Rovnice pro amplitudy C_1 a C_2 vypadají takto

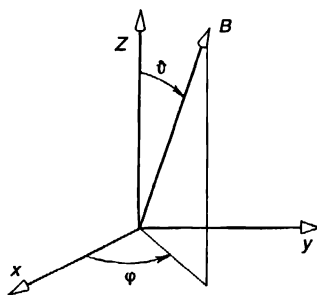
$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= -\mu [B_z C_1 + (B_x - iB_y) C_2] \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\mu [(B_x + iB_y) C_1 - B_z C_2]. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Odhadli jsme tedy „rovnice pohybu spinových stavů“ elektronu v magnetickém poli. Uhodli jsme je s využitím některých fyzikálních argumentů, ale skutečná проверка každého hamiltoniánu spočívá v tom, zda poskytuje předpovědi v soulase s experimentem. Všechny dosud uskutečněné testy potvrzují, že tyto rovnice jsou správné. Kromě toho, ačkoliv jsme všechny naše úvahy vztahovali na konstantní pole, získává hamiltonián tentýž tvar i tehdy, když se magnetické pole mění s časem. Rovnice (8.23) můžeme takto použít na řešení různých zajímavých úloh.

8.7 SPINUJÍCÍ ELEKTRON V MAGNETICKÉM POLI

Příklad číslo jedna: Mějme na počátku konstantní magnetické pole ve směru osy z . Odpovídají mu dva stacionární stavy s energiemi $\pm\mu B_z$. Představme si, že přidáme slabé pole ve směru osy x . Pak budou rovnice vypadat přesně tak jako v naší staré známé úloze o dvojhladinových systémech. Opět dochází k překlápění a v důsledku toho i nepatrnému rozštěpení energetických hladin. Nechtě se nyní x -ová složka pole měnit s časem, řekněme jako $\cos \omega t$. Dostaneme tytéž rovnice jako v 7. kapitole, kde jsme měli molekulu amoniaku v oscilujícím elektrickém poli. Stejným způsobem jako tehdy si můžeme i náš nynější případ rozebrat do nejmenších podrobností. Dospějeme k výsledku, že osciluje-li pole horizontálně s frekvencí blízkou rezonanční frekvenci $\omega_0 = 2\mu B_z/\hbar$, způsobuje přechody ze stavu $+z$ do stavu $-z$ a naopak. Na tom je založena kvantově mechanická teorie jevů magnetické rezonance, kterou jsme popsali v 35. kapitole 2. dílu.

Stejně tak můžeme sestavit maser využívající soustavy se spinem $1/2$. Sternův-Gerlachův přístroj použijeme k přípravě svazku částic polarizovaných řekněme ve směru $+z$, které pak vpustíme do dutiny nacházející se v konstantním poli. Oscilující pole v dutině interagují s magnetickým momentem a vyvolávají přechody, které dodávají dutině energii.



Obr. 8.10 Směr B je definován polárním úhlem ϑ a azimutálním úhlem φ

Nyní se podívejme na následující otázku. Uvažujme magnetické pole B ve směru určném polárním úhlem ϑ a azimutálním úhlem φ (obr. 8.10). Dále předpokládejme, že máme elektron, jehož spin míří podél pole. Čemu jsou rovny amplitudy C_1 a C_2 pro takto připravený elektron? Jinými slovy, označíme-li stav elektronu jako $|\psi\rangle$, rádi bychom napsali

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2,$$

kde C_1 a C_2 jsou

$$C_1 = \langle 1|\psi\rangle, \quad C_2 = \langle 2|\psi\rangle.$$

Pod $|1\rangle$ a $|2\rangle$ rozumíme totéž, co jsme předtím označovali $|+\rangle$ a $|-\rangle$ (vzhledem k naší vybrané ose z).

I odpověď na tuto otázku dávají naše obecné rovnice pro dvojhladinové systémy. Zaprvé, víme, že když je spin elektronu rovnoběžný s B , nachází se elektron ve stacionárním stavu s energií $E_1 = -\mu B$. Proto se musejí obě amplitudy C_1 a C_2 měnit jako $e^{-iE_1 t/\hbar}$ (viz rovnice

(7.18)); jejich koeficienty a_1 a a_2 udává rovnice (8.5):

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_1 - H_{11}}. \quad (8.24)$$

Dodatečná podmínka vyžaduje, aby a_1 i a_2 byly normovány tak, že $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$. Veličiny H_{11} a H_{12} můžeme vzít z rovnice (8.22), přičemž využijeme rovnice

$$B_z = B \cos \vartheta, \quad B_x = B \sin \vartheta \cos \varphi, \quad B_y = B \sin \vartheta \sin \varphi.$$

Dostaneme tedy

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B \cos \vartheta \\ H_{12} &= -\mu B \sin \vartheta (\cos \varphi - i \sin \varphi). \end{aligned} \quad (8.25)$$

Poslední faktor ve druhé rovnici je právě $e^{-i\varphi}$, takže je jednodušší psát

$$H_{12} = -\mu B \sin \vartheta e^{-i\varphi}. \quad (8.26)$$

Dosadíme-li uvedené maticové prvky do rovnice (8.24) a čitatele i jmenovatele vydělíme faktorem $-\mu B$, dojdeme k vztahu

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{\sin \vartheta e^{-i\varphi}}{1 - \cos \vartheta}. \quad (8.27)$$

Pomocí něj a normovací podmínky jsme schopni najít a_1 a a_2 . Není to těžké, ale využitím malého triku si můžeme cestu k výsledku trochu zkrátit. Všimněme si, že $1 - \cos \vartheta = 2 \sin^2(\vartheta/2)$ a že $\sin \vartheta = 2 \sin(\vartheta/2) \cos(\vartheta/2)$. Proto je rovnice (8.27) ekvivalentní rovnici

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{\cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi}}{\sin \frac{\vartheta}{2}}. \quad (8.28)$$

Jedna možná odpověď je tedy

$$a_1 = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi}; \quad a_2 = \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (8.29)$$

protože vyhovuje jednak rovnici (8.28), a jednak podmínce

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Jak víme, vynásobením a_1 a a_2 libovolným fázovým faktorem na věci nic nemění. Zpravidla se rovnice (8.29) upravují do symetrické formy vynásobením obou vztahů faktorem $e^{-i\varphi/2}$. Koeficienty a_1 a a_2 se obvykle používají ve tvaru

$$a_1 = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi/2}; \quad a_2 = \sin \frac{\vartheta}{2} e^{+i\varphi/2}. \quad (8.30)$$

To je zároveň odpověď na naši otázku. Čísla a_1 a a_2 představují amplitudy nalezení elektronu se spinem ve směru a proti směru osy z , víme-li, že jeho spin je orientován podél osy definované úhly ϑ a φ . (Amplitudy C_1 a C_2 jsou rovny koeficientům a_1 a a_2 vynásobených faktorem $e^{-iE_1 t/\hbar}$.)

Nyní si všimněme zajímavé skutečnosti. Velikost intenzity B magnetického pole se v rovnicích (8.30) nikde neobjevuje. Výsledek je evidentně tentýž v limitním případě, kdy se B blíží nule. To znamená, že jsme *obecně* zodpověděli otázku, jak reprezentovat částici, jejíž spin je orientován podél libovolné osy. Amplitudy v rovnicích (8.30) jsou tzv. projekční amplitudy pro částice se spinem $1/2$, podobné projekčním amplitudám, které jsme uvedli v 3. kapitole (rovnice (3.38)) pro částice se spinem 1 . Nyní jsme schopni najít amplitudy přechodu filtrovaných svazků částic se spinem $1/2$ libovolným Sternovým-Gerlachovým přístrojem.

Nechť $|+z\rangle$ označuje stav se spinem ve směru a $|-z\rangle$ stav se spinem proti směru osy z . Představuje-li $|+z'\rangle$ stav se spinem se směru osy z' , jejíž orientace vůči z je dána polárními úhly ϑ a φ , v označeních přijatých v 3. kapitole dostáváme

$$\langle +z|+z'\rangle = \cos\frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi/2}; \quad \langle -z|+z'\rangle = \sin\frac{\vartheta}{2} e^{+i\varphi/2}. \quad (8.31)$$

Tyto výsledky jsou ekvivalentní tomu, k čemu jsme dospěli ve 4. kapitole čistě geometrickými úvahami (rovnice (4.36)). (Takže pokud jste se rozhodli 4. kapitolu přeskočit, i tak jste se seznámili s jedním z jejích podstatných výsledků.)

Na závěr se ještě jednou vrátíme k příkladu, který jsme už zmínili mnohokrát. Uvažujme následující problém. Na počátku mějme elektron, jehož spin je orientován v určitém směru. Zapneme magnetické pole ve směru osy z a po 25 minutách ho zase vypneme. Jaký bude konečný stav? Vyjádříme stav opět ve tvaru lineární kombinace $|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2$. V naší úloze jsou však bázové stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ zároveň stavy s přesně určenou hodnotou energie. Takže C_1 a C_2 se mění jen ve fázi. Víme, že

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-iE_1 t/\hbar} = C_1(0) e^{+i\mu B t/\hbar}$$

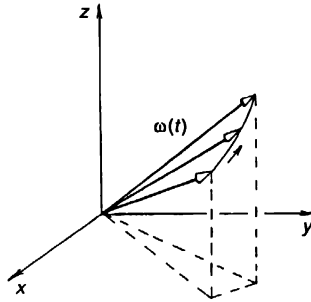
a

$$C_2(t) = C_2(0) e^{-iE_2 t/\hbar} = C_2(0) e^{-i\mu B t/\hbar}.$$

Řekli jsme, že zpočátku měl elektron spin orientovaný v určitém směru. To znamená, že počáteční hodnoty C_1 a C_2 byly dány rovnicemi (8.30). Po uplynutí časového intervalu T budou nová C_1 a C_2 rovna starým hodnotám vynásobeným odpovídajícími faktory $e^{i\mu B_z T/\hbar}$ a $e^{-i\mu B_z T/\hbar}$. Co to bude za stav? To je snadné zjistit. Je to úplně totéž, jako kdybychom od úhlu φ odečetli $2\mu B_z T/\hbar$ a úhel ϑ bychom nechali beze změny. Po uplynutí času T tedy stav $|\psi\rangle$ zobrazuje elektron se spinem ležícím ve směru, které se od původní orientace liší pouze rotací o úhel $\Delta\varphi = 2\mu B_z T/\hbar$ kolem osy z . Jelikož je úhel úměrný T , můžeme také říci, že směr spinu vykonává precesní pohyb kolem osy z úhlovou rychlostí $2\mu B_z/\hbar$. Tento výsledek jsme rozebrali už dříve několikrát, ale ne tak podrobně a pečlivě. Nyní jsme do rukou dostali úplný a přesný kvantově mechanický popis precese atomových magnetů.

Je zajímavé, že matematické myšlenky, které jsme právě využili pro elektron, spinující v magnetickém poli, lze aplikovat na *libovolný* dvojhladinový systém. Provedeme-li matematic-

systemům řešit čistě geometrickými úvahami. Provádí se to takto. Nejdříve posuneme nulovou hladinu energie tak, aby $(H_{11} + H_{22})$ bylo rovno nule (tj. $H_{11} = -H_{22}$). Pak se libovolná dvojhladinová úloha stane *formálně* shodnou s úlohou o elektronu v magnetickém poli. Jediné, co nám zbývá, je *ztožnit* $-\mu B_z$ s H_{11} a $-\mu(B_x - iB_y)$ s H_{12} . Vůbec nezáleží na tom, jaká fyzika se tam skrývala původně (molekula amoniaku nebo něco jiného); můžeme ji převést do jazyka odpovídajícího úloze s elektronem. Jsme-li tedy schopni vyřešit tuto úlohu *obecně*, vyřešili jsme *všechny* dvojhladinové problémy.



Obr. 8.11 Směr spinu elektronu v proměnném magnetickém poli $B(t)$ vykonává precesní pohyb kolem osy rovnoběžné s B úhlovou rychlostí $\omega(t)$

A pro elektron přece obecné řešení máme! Představme si, že na začátku máme nějaký stav se spinem nahoru v určitém směru a že je přítomno magnetické pole B orientované v jakémsi jiném směru. Provedeme rotaci směru spinu kolem osy B vektorovou úhlovou rychlostí $\omega(t)$ rovnou konstantě vynásobené vektorem B (totiž $\omega = 2\mu B/\hbar$). Měnil-li se B s časem, neustále pohybujeme osou rotace tak, aby zůstávala rovnoběžná s B a rychlost rotace měníme tak, aby byla stále úměrná velikosti intenzity B (obr. 8.11). Budeme-li to dodržovat, bude mít osa spinu nakonec určitou orientaci a amplitudy C_1 a C_2 budou dány projekcemi podle rovnic (8.30) do naší soustavy souřadnic. Sami vidíte, že je to pouze geometrický problém; je třeba jen pozorně sledovat, kde všechny naše rotace skončí. Ačkoliv snadno vidíme, co je k tomu třeba, v obecném případě není jednoduché vyřešit uvedenou geometrickou úlohu (nalezení konečného výsledku rotace s měnícím se vektorem úhlové rychlosti) explicitně. V *principu* však vidíme, jak získat řešení libovolného dvojhladinového problému. V následující kapitole hlouběji vnikneme do matematických postupů používaných při zkoumání důležitého případu částice se spinem $1/2$, jakož i při zacházení s dvojhladinovými systémy obecně.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 8.1 ■ Částice se spinem $1/2$ se nachází v silném magnetickém poli \mathbf{B}_0 . Ve směru kolmém k \mathbf{B}_0 působí oscilující magnetické pole $B = 2B_n \cos \omega t$, přičemž $B_n \ll B_0$. Jestliže původně byl spin částice orientován nesouhlasně rovnoběžně s vektorem \mathbf{B}_0 , jaká je pravděpodobnost toho, že v okamžiku T bude orientován souhlasně rovnoběžně?

Další dvojhladinové soustavy

- 9.1 PAULIHO SPINOVÉ MATICE
- 9.2 SPINOVÉ MATICE JAKO OPERÁTORY
- 9.3 ŘEŠENÍ ROVNIC PRO DVA STAVY
- 9.4 POLARIZAČNÍ STAVY FOTONU
- 9.5 NEUTRÁLNÍ KAON
- 9.6 ZOBECNĚNÍ NA SOUSTAVY S N STAVY

Přečtěte si znovu kapitolu 35, díl 1, Polarizace

9.1 PAULIHO SPINOVÉ MATICE

Pokračujme v naší diskuzi o dvojhladinových soustavách. Na konci předcházející kapitoly jsme hovořili o částici se spinem $1/2$ v magnetickém poli. Spinový stav jsme popsali udáním amplitudy C_1 , že z -ová složka spinového momentu hybnosti bude $+\hbar/2$ a amplitudy C_2 , že bude rovna $-\hbar/2$. V předešlých kapitolách jsme tyto báze stavy nazvali $|+\rangle$ a $|-\rangle$. Vrátime se zpět k tomuto označení, ale kdyby se při nějaké příležitosti ukázalo výhodnější pracovat se symboly $|1\rangle$ a $|2\rangle$, použijeme je.

V minulé kapitole jsme viděli, že nacházela-li se částice se spinem $1/2$ a magnetickým momentem μ v magnetickém poli $\mathbf{B}=(B_x, B_y, B_z)$, amplitudy C_+ ($=C_1$) a C_- ($=C_2$) byly vzájemně propojeny následujícími diferenciálními rovnicemi

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_+}{dt} &= -\mu [B_z C_+ + (B_x - iB_y) C_-] \\ i\hbar \frac{dC_-}{dt} &= -\mu [(B_x + iB_y) C_+ - B_z C_-]. \end{aligned} \tag{9.1}$$

Jinými slovy, Hamiltonova matice H_{ij} má tvar

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z & H_{12} &= -\mu(B_x - iB_y) \\ H_{21} &= -\mu(B_x + iB_y) & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Rovnice (9.1) jsou, samozřejmě, totožné s rovnicemi

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \quad (9.3)$$

kde i a j nabývají hodnot $+a$ – (nebo 1 a 2).

Uvedený dvojhladinový systém – spin elektronu – má tak velký význam, že je velmi užitečné mít po ruce elegantnější způsob jeho popisu. Abychom vám ukázali, jak se obvykle zapisují rovnice pro dvojhladinový systém, provedeme malou matematickou odbočku. Dělá se to takto: Nejdříve si všimneme, že každý člen v hamiltoniánu je úměrný μ a nějaké složce vektoru B ; čistě z formálních důvodů proto můžeme napsat, že

$$H_{ij} = -\mu \left[\sigma_{ij}^x B_x + \sigma_{ij}^y B_y + \sigma_{ij}^z B_z \right]. \quad (9.4)$$

Není za tím skryta žádná nová fyzika; tato rovnice znamená jen to, že koeficienty σ_{ij}^x , σ_{ij}^y , σ_{ij}^z (je jich dohromady $4 \times 3 = 12$) lze zvolit tak, aby (9.4) bylo totožné s (9.2).

Podívejme se, čemu musí být rovny. Začněme s B_z . Jelikož B_z se objevuje jen v H_{11} a H_{22} , bude vše v pořádku, když

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^z &= 1 & \sigma_{12}^z &= 0 \\ \sigma_{21}^z &= 0 & \sigma_{22}^z &= -1. \end{aligned}$$

Matici H_{ij} často zapisujeme ve tvaru takové malé tabulky

$$H_{ij} = \begin{matrix} & j \\ i1 & \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Pro hamiltonián se spinem $1/2$ v magnetickém poli tak dostáváme

$$H_{ij} = \begin{matrix} & j \\ i1 & \begin{pmatrix} -\mu B_z & -\mu(B_x - iB_y) \\ -\mu(B_x + iB_y) & +\mu B_z \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Přesně takovým způsobem můžeme jako matici zapsat i koeficienty σ_{ij}^z :

$$\sigma_{ij}^z = \begin{matrix} & j \\ i1 & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (9.5)$$

Vypíšeme-li si koeficienty stojící u B_x , dojdeme k tomu, že prvky matice σ_x musejí mít tvar

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^x &= 0 & \sigma_{12}^x &= 1 \\ \sigma_{21}^x &= 1 & \sigma_{22}^x &= 0.\end{aligned}$$

Nebo zkráceně

$$\sigma_{ij}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

Nakonec, když se podíváme na B_y , dostáváme

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^y &= 0 & \sigma_{12}^y &= -i \\ \sigma_{21}^y &= i & \sigma_{22}^y &= 0\end{aligned} \quad (9.7)$$

neboli

$$\sigma_{ij}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Definujeme-li tři matice sigma tímto způsobem, rovnice (9.2) a (9.4) jsou identické. Aby nám zůstalo místo na dolní indexy i a j , označili jsme každou matici σ horním indexem x, y nebo z pro rozlišení, které σ stojí u každé složky vektoru B . Obvykle se však indexy i a j vynechávají (je snadné si je tam představit) a x, y, z se zapíší jako dolní index. Rovnice (9.4) má pak tvar

$$H_{ij} = -\mu[\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z]. \quad (9.8)$$

Protože matice sigma jsou tak důležité (profesionálové s nimi pracují nepřetržitě) shrnuli jsme je do *tab. 9.1*. (Každý, kdo se chystá pracovat v kvantové mechanice, by si je měl zapamatovat.) Nazývají se *Pauliho matice* – nesou jméno fyzika, který je zavedl.

Tabulka 9.1: Pauliho spinové matice

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Do tabulky jsme zahrnuli ještě jednu matici typu 2×2 , kterou potřebujeme, chceme-li být schopni studovat soustavu se dvěma spinovými stavy téže energie, nebo chceme-li zvolit jinou nulovou energii. V takových případech musíme k první rovnici v (9.1) přičíst člen $E_0 C_x$, a k druhé

rovnici člen $E_0 C_-$. Tuto skutečnost můžeme vyjádřit v našem novém označení, definujeme-li jednotkovou matici $\mathbf{1}$ jako δ_{ij}

$$\mathbf{1} = \delta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.98)$$

a přepíšeme rovnici (9.8) do tvaru

$$H_{ij} = E_0 \delta_{ij} - \mu (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z). \quad (9.10)$$

Obvykle se *přijímá dohoda*, že libovolná konstanta, jako např. E_0 , se má automaticky vynásobit jednotkovou maticí; pak prostě píšeme

$$H_{ij} = E_0 - \mu (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z). \quad (9.11)$$

Jedním z důvodů, proč jsou spinové matice užitečné, je ten, že pomocí nich lze vyjádřit libovolnou matici typu 2×2 . Každá taková matice se skládá ze čtyř čísel, řekněme

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Vždy je lze rozepsat jako lineární kombinaci čtyř matic. Například

$$M = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podobných způsobů existuje mnoho. Jeden z nich je takový, že M obsahuje určitou část σ_x plus určitou část σ_y atd., což zapíšeme

$$M = \alpha \mathbf{1} + \beta \sigma_x + \gamma \sigma_y + \delta \sigma_z,$$

kde „podíly“ α, β, γ a δ mohou obecně být komplexními čísly.

Jelikož jakákoliv matice typu 2×2 je vyjádřitelná pomocí jednotkové matice a tří matic sigma, máme k dispozici vše, co potřebujeme pro libovolnou dvojhladinovou soustavu. Nezáleží na tom, o jakou soustavu jde (zda je to molekula amoniaku, fuchsin nebo něco jiného); Hamiltonovu rovnici lze vždy zapsat pomocí matic sigma. Ačkoliv se zdá, že ve fyzikálním případě elektronu v magnetickém poli mají matice sigma geometrický význam, lze se na ně dívat jako na užitečné matice, které lze s úspěchem použít při řešení libovolného dvojhladinového problému.

Například jeden způsob náhledu na proton a neutron je ten, že je považujeme za jednu a tutéž částici nacházející se ve dvou různých stavech. Říkáme, že *nukleon* (proton nebo neutron) je dvojhladinová soustava, v tomto případě se dvěma nábojovými stavy. Díváme-li se na věc tímto způsobem, může stav $|1\rangle$ reprezentovat proton a stav $|2\rangle$ neutron. Říkáme, že nukleon má dva „izospinové“ stavy.

Protože v kvantové mechanice dvojhladinových soustav bude pro nás práce s maticemi sigma představovat jakousi „malou násobilku“ (tj. něco, bez čeho se dále nepohneme), probereme si v krátkosti nejnnutnější základy maticové algebry. Součtem libovolných dvou nebo více matic rozumíme to, co jsme měli na mysli v rovnici (9.4). Obecně je výsledkem sčítání dvou matic

A a B matice C, jejíž každý prvek C_{ij} je dán vztahem

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}.$$

Každé C_{ij} je součtem prvků stojících na témže místě v maticích A a B.

Ve statí 3.6 jsme se už setkali s představou maticového součinu. Tatáž myšlenka najde své uplatnění i při práci s maticemi sigma. V obecném případě je součin dvou matic A a B (v tomto pořadí) definován jako matice C, jejíž prvky jsou

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}. \quad (9.12)$$

Je to součet členů, z nichž každý představuje součin párově vzatých prvků i -tého řádku matice A s prvky j -tého sloupce matice B. Vypíšeme-li matice ve tvaru tabulek (obr. 9.1), existuje snadno zapamatovatelná metoda, jak dostat členy výsledné matice. Předpokládejme, že počítáme prvek C_{23} . Ukazovákem levé ruky pohybujeme po *druhém řádku* matice A *zleva doprava* a ukazovákem pravé ruky po *třetím sloupci* matice B *shora dolů*; přitom každý pár prvků vynásobíme a všechno dohromady sečteme. Na obrázku jsme se tento postup snažili názorně naznačit.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} \\ B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} \end{pmatrix}$$

$$C_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$$

Příklad: $C_{23} = A_{21} B_{13} + A_{22} B_{23} + A_{23} B_{33} + A_{24} B_{43}$

Obr. 9.1 Násobení dvou matic

Pro matice typu 2×2 je celá procedura velmi jednoduchá. Například vynásobíme σ_x s σ_x , dostaneme

$$\sigma_x^2 = \sigma_x \cdot \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

což je právě jednotková matice 1. Nebo jiný příklad – počítejme $\sigma_x \sigma_y$:

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

Při pohledu na *tab. 9.1* vidíme, že uvedený součin je právě i -násobkem matice σ_z . (Vzpomeňte si, že číslo krát matice znamená, že jím vynásobíme každý prvek dané matice.) Součiny matic sigma se sebou samými jsou velice důležité (zároveň i trochu zábavné), proto jsme je všechny vypsalí v *tab. 9.2*. Můžete je spočítat stejným způsobem, jako jsme to udělali pro σ_x^2 a $\sigma_x \sigma_y$.

Tabulka 9.2: Součiny spinových matic

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= 1 \\ \sigma_y^2 &= 1 \\ \sigma_z^2 &= 1 \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i \sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i \sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i \sigma_y\end{aligned}$$

S maticemi σ je spjat ještě jeden velice důležitý a zajímavý moment. Můžeme si představit, že trojice matic σ_x , σ_y a σ_z je analogická třem složkám vektoru; někdy jej nazýváme *sigma-vektor* a označujeme σ . Je to skutečně „maticový vektor“, nebo „vektorová matice“. Představuje vlastně tři různé matice, z nichž každá přísluší jedné ose, a to x , y nebo z . S jejich pomocí můžeme hamiltonián systému zapsat v přehledném tvaru, platném v libovolné soustavě souřadnic

$$H = -\mu \sigma \cdot B. \quad (9.13)$$

Ačkoliv jsme naši trojici matic odvodili v reprezentaci, v níž se pojmy nahoru a dolů vztahují k ose z (takže σ_z vypadá mimořádně jednoduše), mohli bychom zjišťovat, jaký tvar budou mít v nějaké jiné reprezentaci. I když je k tomu třeba dost algebry, lze přece jen ukázat, že se vzájemně transformují jako složky vektoru. (Nad důkazem si nebudeme lámat hlavu. Chcete-li, můžete si to prověřit.) Veličinu σ můžeme používat v různých souřadnicových soustavách, jako by to byl vektor.

Jistě si vzpomínáte, že v kvantové mechanice souvisí H s energií. Ve skutečnosti je totožné s energií tehdy, když existuje pouze jediný stav. Dokonce zapíšeme-li v dvojhladinové soustavě, jakou je spin elektronu, hamiltonián ve tvaru rovnice (9.13), je velmi podobný *klasickému* vztahu pro energii malého magnetu s magnetickým momentem μ , umístěného v magnetickém poli B . Klasicky to vypadá takto

$$U = -\mu \cdot B, \quad (9.14)$$

kde μ je vlastností daného tělesa a B je vnější pole. Můžeme si představit, že z rovnice (9.14) přejdeme k rovnici (9.13) záměnou klasické energie za hamiltonián a klasického μ za matici $\mu\sigma$. Po této čistě formální substituci interpretujeme výsledek jako maticovou rovnici. Někdy se říká, že každé veličině v klasické fyzice odpovídá matice v kvantové mechanice. Správnější je tvrzení, že Hamiltonova matice odpovídá energii a každé veličině, kterou lze definovat pomocí energie, přísluší odpovídající matice.

Jako příklad uveďme magnetický moment, který lze pomocí energie zavést tak, že za energii ve vnějším poli B prohlásíme výraz $-\mu \cdot B$. Tím *definujeme* vektor magnetického momentu μ . Pak se podíváme na vyjádření reálného (kvantového) objektu v magnetickém poli hamiltoniánem a snažíme se uhádnout, jaké matice příslušejí těm nebo oněm veličinám v klasické formuli. V důsledku zmíněného triku mají *někdy* klasické veličiny své kvantové partnery.

Chcete-li, pokuste se zamyslet nad tím, v jakém smyslu je klasický vektor roven matici $\mu\sigma$, možná že na něco přijdete. Není však třeba si nad tím lámat hlavu, nestojí to za to – ve skutečnosti si navzájem rovny nejsou. Kvantová mechanika je docela jiný typ teorie pro popis světa. Někdy se stává, že existují určité korespondence; jsou však sotva něčím víc, než mnemotechnickými pomůc-

kami – prostředky na zapamatování. Studujeme-li klasickou fyziku, odvodíme a zapamatujeme si rovnici (9.14); vzpomeneme-li si pak na záměnu $\mu - \mu\sigma$, máme prostředek k tomu, jak si uchovat v paměti rovnici (9.13). Příroda se, samozřejmě, řídí kvantovou mechanikou a klasická mechanika je jen přiblížení. Není na tom tedy nic záhadného, objevují-li se někde v klasické mechanice jakési kontury kvantově mechanických zákonů tvořících skutečný základ. Zrekonstruovat původní předmět z jeho stínu není možné přímou cestou, ale stín nám pomůže zapamatovat si, jak daný předmět vypadá. Rovnice (9.13) – to je pravda, zatímco rovnice (9.14) je jejím stínem. Protože se nejdříve seznamujeme s klasickou mechanikou, byli bychom rádi, kdybychom z ní uměli dojít ke kvantově mechanickým vztahům, avšak spolehlivý návod pro takový postup neexistuje. Vždy se musíme vrátit zpět do reálného světa a objevit správné kvantově mechanické rovnice. Vypadají-li podobně jako klasické, máme štěstí.

Zdají-li se vám uvedená upozornění zbytečným opakováním a omíláním starých známých pravd, týkajících se vztahu klasické a kvantové fyziky, prosím o prominutí. Působí tu podmíněný reflex profesora přednášejícího obvykle kvantovou mechaniku takovým studentům, kteří o Pauliho maticích poprvé slyšeli až ve vyšších ročnících vysoké školy. Zdá se, jako by stále doufali, že kvantová mechanika jaksi vyplyne jako logický důsledek z klasické mechaniky, kterou se podrobně učili po předcházející roky. (Možná, že se chtěli vyhnout tomu, aby se museli učit něco nového.) Teprve nedávno jsme se seznámili s klasickým vztahem (9.14) – a to s varováním, že není zcela správný – takže snad nebudete příliš neochotní přijmout kvantový vztah (9.13) za základní pravdu.

9.2 SPINOVÉ MATICE JAKO OPERÁTORY

Když už se zabýváme matematickým označováním, rádi bychom zmínili *ještě jeden* způsob zápisu, který se díky své stručnosti používá velmi často. Vyplývá přímo z označení zavedeného v 6. kapitole. Máme-li soustavu ve stavu $|\psi(t)\rangle$, který se mění s časem, můžeme (tak jak jsme to udělali v rovnici (6.31)) napsat amplitudu toho, že v čase $t + \Delta t$ by se soustava ocitla ve stavu $|i\rangle$, jako

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \sum_j \langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle \langle j | \psi(t) \rangle.$$

Maticový element $\langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle$ představuje amplitudu toho, že po dobu časového intervalu Δt přejde bázeový stav $|j\rangle$ do bázeového stavu $|i\rangle$. Pak jsme H_{ij} *definovali* vztahem

$$\langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t,$$

a ukázali jsme, že amplitudy $C_i(t) = \langle i | \psi(t) \rangle$ jsou ve vztahu popsáném diferenciálními rovnicemi

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j. \quad (9.15)$$

Vypíšeme-li amplitudy C_i explicitně, tatáž rovnice bude vypadat takto

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle = \sum_j H_{ij} \langle j | \psi \rangle. \quad (9.16)$$

Imaticové elementy H_{ij} jsou amplitudami, které můžeme vyjádřit jako $\langle i|H|j\rangle$; naše diferenciální rovnice získá tvar

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|H|j\rangle \langle j|\psi\rangle. \quad (9.17)$$

Vidíme, že $-i/\hbar \langle i|H|j\rangle$ je amplituda toho, že za fyzikálních podmínek, které popisuje matice H , stav $|j\rangle$ „vygeneruje“ za čas dt stav $|i\rangle$. (To vše je obsaženo v úvahách ve stati 6.4.)

Přidržíme se představ stati 6.2 a můžeme v rovnici (9.17) vynechat společný člen $\langle i|$ (protože ta platí pro libovolný stav $|i\rangle$) a zapsat rovnici jednoduše jako

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \sum_j H|j\rangle \langle j|\psi\rangle. \quad (9.18)$$

Lze pokročit ještě dále a vypustit i j ; dostaneme

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H|\psi\rangle. \quad (9.19)$$

V 6. kapitole jsme poukázali na to, že při tomto zápisu H v $H|j\rangle$ nebo v $H|\psi\rangle$ nazýváme *operátorem*. Od této chvíle budeme nad operátor psát malou stříšku ($\hat{\ }$), abychom vám připomněli, že jde o operátor, a ne obyčejné číslo. Budeme psát $\hat{H}|\psi\rangle$. Ačkoliv dvojice rovnic (9.18) a (9.19) znamená přesně totéž, co rovnice (9.17) nebo (9.15), můžeme se na ně *podívat* trochu jinak. Například rovnici (9.18) bychom popsali takto: „Časová derivace *stavového vektoru* $|\psi\rangle$ je rovna tomu, co dostaneme, když působíme Hamiltonovým *operátorem* H na *bázový stav* $|j\rangle$, takto získaný stav vynásobíme amplitudou $\langle j|\psi\rangle$ najít ψ ve stavu j , a nakonec provedeme součet přes všechna j .“ Nebo rovnici (9.19) vyjádříme takovýmto způsobem: „Časová derivace (vynásobená faktorem $i\hbar$) stavu $|\psi\rangle$ je dána působením Hamiltonova operátoru H na *stavový vektor* $|\psi\rangle$.“ Je to jen zkrácená forma obsahu rovnice (9.17), ale jak uvidíme, může být velmi výhodná.

Kdybychom chtěli, mohli bychom dojít v „abstrakci“ ještě o jeden krok dále. Rovnice (9.19) platí pro *libovolný stav* $|\psi\rangle$. Levá strana $i\hbar d/dt$, je také operátorem – představuje operaci „derivování podle t a násobení faktorem $i\hbar$.“ Proto se lze na rovnici (9.19) dívat jako na rovnici mezi operátory, tj. operátorovou rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} = \hat{H}.$$

Hamiltonův operátor (až na konstantu) působící na libovolný stav dává tentýž výsledek jako d/dt . Zapamatujte si, že tato rovnice, jakož i rovnice (9.19) *netvrdí*, že operátor H je *identický s operací* d/dt . Uvedené rovnice vyjadřují dynamický zákon přírody (zákon pohybu) pro kvantovou soustavu.

Abychom zmíněné představy dostali trochu do krve, ukážeme vám jiný způsob, jak přijít k rovnici (9.18). Víme, že jakýkoliv stav $|\psi\rangle$ lze rozložit pomocí jeho projekcí v rámci nějakého bázového souboru do tvaru (rovnice (6.8))

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\psi\rangle. \quad (9.20)$$

Jak se $|\psi\rangle$ mění v čase? Zderivujeme ho

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = \frac{d}{dt} \sum_i |i\rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (9.21)$$

Bázové stavy se s časem nemění (přínejmenším my je vždy považujeme za pevně určené), ale amplitudy $\langle i | \psi \rangle$ jsou čísla, která se mohou měnit. Takže rovnici (9.21) lze upravit

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle. \quad (9.22)$$

Protože rovnice (9.16) nám říká, čemu je rovno $d \langle i | \psi \rangle / dt$, dostáváme

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_i |i\rangle \sum_j H_{ij} \langle j | \psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_{ij} |i\rangle \langle i | H | j \rangle \langle j | \psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H | j \rangle \langle j | \psi \rangle.$$

Je to opět vztah (9.18).

Máme tedy mnoho způsobů, jak se dívat na hamiltonián. Na soubor koeficientů H_{ij} se můžeme dívat prostě jako na množinu čísel nebo jako na amplitudy $\langle i | H | j \rangle$; můžeme hovořit o matici H_{ij} nebo o operátoru H . Všechno je to jedno a totéž.

Nyní se vraťme k našim dvojhladinovým soustavám. Vyjádříme-li hamiltonián pomocí matic sigma (s vhodnými číselnými koeficienty jako B_x atd.), je přirozené považovat σ_{ij}^x za amplitudu $\langle i | \sigma_x | j \rangle$ nebo zkráceně, za operátor $\hat{\sigma}_x$. Použijeme-li operátorovou představu, můžeme pohybovou rovnici pro stav $|\psi\rangle$ v magnetickém poli zapsat ve tvaru

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\mu (B_x \hat{\sigma}_x + B_y \hat{\sigma}_y + B_z \hat{\sigma}_z). \quad (9.23)$$

Budeme-li chtít použít takovouto rovnici, budeme muset za normálních okolností vyjádřit $|\psi\rangle$ pomocí bázových vektorů (přesně tak, jako když potřebujeme najít složky prostorových vektorů, abychom dostali konkrétní čísla). Proto obvykle rozepisujeme rovnici (9.23) do trochu rozvinutějšího tvaru

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\mu \sum_i (B_x \hat{\sigma}_x + B_y \hat{\sigma}_y + B_z \hat{\sigma}_z) |i\rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (9.24)$$

Nyní vidíme, proč je myšlenka operátorů tak pěkná. Abychom použili rovnici (9.24), potřebujeme vědět, co se stane při působení operátorů $\hat{\sigma}$ na každý z bázových stavů. Pojďme to zjistit. Předpokládejme, že vezmeme $\hat{\sigma}_z |+\rangle$; je to nějaký vektor $|?\rangle$, ale jaký? Vynásobíme jej zleva $\langle + |$; dostaneme

$$\langle + | \hat{\sigma}_z | + \rangle = \sigma_{11}^z = 1$$

(pomocí tab. 9.1). Víme tedy, že

$$\langle + | ? \rangle = 1. \quad (9.25)$$

Nyní vynásobíme $\hat{\sigma}_z |+\rangle$ zleva $\langle - |$. Máme

$$\langle - | \hat{\sigma}_z | + \rangle = \sigma_{21}^z = 0$$

takže

$$\langle -|? \rangle = 0. \quad (9.26)$$

Existuje jediný stavový vektor vyhovující oběma rovnicím; je to $|+\rangle$. Zjistili jsme tedy, že

$$\hat{\sigma}_z |+\rangle = |+\rangle \quad (9.27)$$

Úvahami takového druhu můžeme snadno ukázat, že všechny vlastnosti matic sigma lze v operátorovém označení shrnout do souboru pravidel uvedeného v tab. 9.3.

Tabulka 9.3: Vlastnosti operátoru $\hat{\sigma}$

$\sigma_z +\rangle = +\rangle$
$\sigma_z -\rangle = - -\rangle$
$\sigma_x +\rangle = -\rangle$
$\sigma_x -\rangle = +\rangle$
$\sigma_y +\rangle = i -\rangle$
$\sigma_y -\rangle = -i +\rangle$

Součiny matic sigma přejdou na součiny operátorů. Objevili se dva operátory vedle sebe ve tvaru součinu, vykonáváme nejdříve operaci s operátorem stojícím víc vpravo. Například označením $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y |+\rangle$ máme rozumět $\hat{\sigma}_x (\hat{\sigma}_y |+\rangle)$. Z tab. 9.3 vidíme, že $\hat{\sigma}_y |+\rangle = i|-\rangle$, takže

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y |+\rangle = \hat{\sigma}_x (i|-\rangle). \quad (9.28)$$

Libovolné číslo (jako např. i) vytkneme před operátor (ty působí totiž pouze na stavové vektory), takže rovnice (9.28) je totožná s rovnicí

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y |+\rangle = i \hat{\sigma}_x |-\rangle = i |+\rangle.$$

Provedeme-li totéž s $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y |-\rangle$, zjistíme, že

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y |-\rangle = -i |-\rangle.$$

Při pohledu na tab. 9.3 vidíme, že působením součinu $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$ na stavy $|+\rangle$ nebo $|-\rangle$ dostaneme přesně totéž, jako když na ně působíme operátorem $\hat{\sigma}_z$ a výsledek vynásobíme faktorem $+i$. Můžeme proto prohlásit, že operace $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$ je identická s operací $i \hat{\sigma}_z$ a toto tvrzení zapsat ve formě operátorové rovnice

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i \hat{\sigma}_z \quad (9.29)$$

Všimněme si, že tato rovnice přesně souhlasí s jednou z našich maticových rovnic v tab. 9.2. Opět zjišťujeme úzkou souvislost mezi maticovým a operátorovým hlediskem. Každou rovnicí v tab. 9.2

lze proto považovat za rovnici pro operátory sigma. Můžete si prověřit, že opravdu vyplývají z *tab. 9.3*. Pracujeme-li s těmito pojmy, je nejlepší *nestarat* se o to, zda veličina jako σ nebo H je operátorem nebo maticí. Tak či onak jsou všechny rovnice stejné, takže *tab. 9.2* lze podle přání vztahovat buď na operátory sigma, nebo na matice sigma.

9.3 ŘEŠENÍ ROVNIC PRO DVA STAVY

Naši rovnici pro dva stavy můžeme tedy zapisovat v různých tvarech, např. jako

$$i\hbar \frac{d C_i}{d t} = \sum_j H_{ij} C_j \quad (9.30)$$

nebo jako

$$i\hbar \frac{d |\psi\rangle}{d t} = \hat{H} |\psi\rangle.$$

Obě znamenají jedno a totéž. Hamiltonián H částice se spinem $1/2$ nacházející se magnetickém poli je dán rovnicí (9.8) nebo rovnicí (9.13).

Už několikrát jsme měli možnost vidět, že má-li pole směr osy z , vypadá řešení tak, že stav $|\psi\rangle$, ať je jakýkoliv, vykonává kolem ní precesní pohyb (přesně tak, jako kdybychom vzali tuhé těleso a otáčeli jím jako celkem kolem osy z) úhlovou rychlostí rovnou dvojnásobku velikosti magnetického pole vynásobenou μ/\hbar . Totéž samozřejmě platí i pro magnetické pole v jiném libovolném směru, protože fyzika nezávisí na výběru soustavy souřadnic. Máme-li situaci, kdy se magnetické pole mění s časem složitým způsobem, můžeme ji analyzovat takto. Na začátku nechť spin leží ve směru osy $+z$ a magnetické pole má pouze x -ovou složku. Spin začne precedovat. Pak x -ové pole vypneme; spin přestane precedovat. Když zase zapneme pole ve směru osy z , bude spin vykonávat precesní pohyb kolem ní atd. Takže v závislosti na tom, jak se pole mění s časem, můžeme najít osu, podél níž bude mířit konečný stav. Použitím projekčních vztahů uvedených v 8. (nebo i ve 4.) kapitole se od něj můžeme vrátit zpět k původním stavům $|+\rangle$ a $|-\rangle$ vzhledem k ose z . Skončili-li spin stavu ve směru (ϑ, φ) , bude se amplituda toho, že ho najdeme směřovat nahoru, rovna výrazu $(\vartheta/2)e^{-i\varphi/2}$ a amplituda toho, že bude směřovat dolů pak bude $(\vartheta/2)e^{+i\varphi/2}$. Tím je vyřešena libovolná úloha. Je to vlastně slovní popis řešení diferenciálních rovnic.

Právě popsané řešení je dostatečně obecné na to, abychom si dokázali poradit s *libovolnou dvojhladinovou soustavou*. Vezměme si náš příklad s molekulou amoniaku, na kterou působí elektrické pole. Popíšeme-li soustavu pomocí stavů $|I\rangle$ a $|II\rangle$, budou rovnice vypadat takto

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d C_I}{d t} &= +A C_I + \mu \mathcal{E} C_{II} \\ i\hbar \frac{d C_{II}}{d t} &= -A C_{II} + \mu \mathcal{E} C_I. \end{aligned} \quad (9.31)$$

Vzpomenete-li si na rovnice 7.38 a 7.39, řeknete: „Pamatuji se, že tam stálo nějaké E_0 .“ Je to v pořádku; počátek odečítání energie jsme posunuli tak, aby E_0 bylo rovno nule. (Můžeme to provést vždy, a to tak, že obě amplitudy vynásobíme tímtež faktorem $e^{iE_0 T/\hbar}$; tím se zbavíme libovolného konstatního dodatku k energii.) Stejně rovnice mají vždy stejná řešení, proto je

opravdu není třeba řešit dvakrát. Porovnáme-li tyto rovnice s rovnicí (9.1), můžeme provést následující ztotožnění. Označme stav $|+\rangle$ jako $|I\rangle$ a stav $|-\rangle$ jako $|II\rangle$. *Neznamená to, že uspořádáme molekuly amoniaku do přímky, nebo že by $|+\rangle$ a $|-\rangle$ měly co dělat s osou z. Je to čistě umělý krok. Máme uměle vytvořený prostor, který bychom mohli nazvat „prostor na zobrazení molekuly amoniaku“, nebo nějak podobně. Je to prostě trojrozměrný „diagram“, v němž mířit nahoru odpovídá výskytu molekuly ve stavu $|I\rangle$ a mířit dolů vzhledem k fiktivní osc z zase výskytu molekuly ve stavu $|II\rangle$. Pak rovnice ztotožníme takto. Především vidíme, že hamiltonián lze pomocí matic sigma vyjádřit jako*

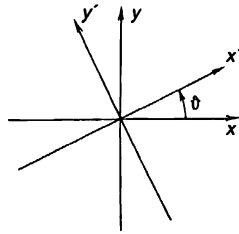
$$H = +A\sigma_z + \mu\mathcal{E}\sigma_z. \quad (9.32)$$

Jinak řečeno, μB_z v rovnici (9.1) odpovídá $-A$ v rovnici (9.32) a μB odpovídá $-\mu\mathcal{E}$. V našem „modelovém“ prostoru tedy vzniká konstantní pole B ve směru osy z. Máme-li elektrické pole \mathcal{E} měnící se s časem, objeví se x -ová složka B , v každé chvíli úměrná \mathcal{E} . *Takže chování elektronu v magnetickém poli s konstantní složkou ve směru osy z a oscilující složkou ve směru osy x je matematicky zcela analogické a přesně odpovídá chování molekuly amoniaku, nacházející se v oscilujícím elektrickém poli.* Bohužel, nemáme dostatek místa k tomu, abychom pronikli ještě hlouběji do podrobností této vzájemné souvislosti, nebo abychom rozpracovali některé technické detaily. Chtěli jsme jen zdůraznit, že všechny dvojhladinové soustavy jsou analogické částici se spinem $1/2$, vykonávající precesní pohyb v magnetickém poli.

9.4 POLARIZAČNÍ STAVY FOTONU

Existuje množství jiných soustav se dvěma hladinami, jejichž studium je velmi zajímavé; jako první z nich bychom rádi pohovořili o fotonu. Pro popis fotonu musíme nejdříve zadat vektor jeho hybnosti. Frekvence volného fotonu je určena jeho hybností, takže nemusíme zvlášť připomínat, jakou má frekvenci. Ale zbývá nám ještě jedna vlastnost, kterou nazýváme polarizace. Představme si, že se k nám blíží foton s přesně určenou monochromatickou frekvencí (ta se po dobu celé naší diskuze nebude měnit, takže nebudeme muset uvažovat různé stavy hybnosti). V tom případě existují dva směry polarizace. V klasické teorii může být světlo popsáno pomocí elektrického pole kmitajícího např. horizontálně nebo vertikálně: tyto dva typy se nazývají světlo polarizované ve směru x a ve směru y . Světlo může být polarizováno i v nějakém jiném směru; lze je vytvořit superpozicí polí ve směru x a ve směru y . Vezmeme-li x -ovou a y -ovou složku s fázovým posunem 90° , dostaneme rotující elektrické pole – světlo je elipticky polarizováno. (Je to takové připomenutí klasické teorie polarizovaného světla, které jsme studovali v kapitole 35, díl 1.)

Nyní mějme pouze *jediný* foton, ne víc. Elektrické pole, o němž bychom mohli hovořit ve stejném smyslu, prostě neexistuje. Vše, co máme k dispozici je *jeden jediný foton*. Ten však musí mít nějaký analog odpovídající klasickému jevu polarizace. Musí existovat přinejmenším dva druhy fotonů. Na první pohled by se zdálo, že by jich mělo být nekonečně mnoho; konec konců vektor elektrického pole může mířit do všech možných směrů. Polarizaci fotonu však lze popsat jako soustavu se dvěma hladinami. Foton může být ve stavu $|x\rangle$ nebo ve stavu $|y\rangle$. Stavem $|x\rangle$ rozumíme stav polarizace zvlášť každého fotonu ve svazku světla, o němž bychom *klasicky* tvrdili, že je x -ově polarizován. Na druhé straně stavem $|y\rangle$ rozumíme stav polarizace jednotlivého fotonu ve svazku polarizovaném ve směru y . $|x\rangle$ a $|y\rangle$ si můžeme zvolit za naše báze stavy fotonu s danou hybností, mířící na nás – s hybností ve směru osy z. Existují tedy dva báze stavy $|x\rangle$ a $|y\rangle$, a to úplně stačí pro popis libovolného fotonu.



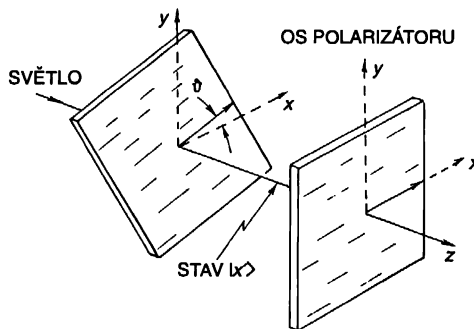
Obr. 9.2 Souřadnicové osy kolmé k vektoru hybnosti fotonu

Máme-li např. kousek polaroidu umístěného osou tak, že propouští jen světlo polarizované ve směru, který nazýváme směrem x , a vyšleme na něj foton, o němž víme, že se nachází ve stavu $|y\rangle$, polaroid jej pohltí. Vyšleme-li na něj foton, o němž víme, že je ve stavu $|x\rangle$, v tomto stavu z něj i vyjde. Vezmeme-li kousek islandského vápence, který štěpí dopadající parsek polarizovaného světla na dva svazky $|x\rangle$ a $|y\rangle$, bude tento kousek kalcitu úplnou analogií Sternova-Gerlachova přístroje, rozkládajícího svazek atomů stříbra na dva stavy $|+\rangle$ a $|-\rangle$. Takže všechno to, co už jsme dříve dělali s částicemi a Sternovými-Gerlachovými přístroji, můžeme provést opět se světlem a kousky kalcitu. A co lze říci o světle profiltrovaném kouskem polaroidu otočeným o úhel ϑ ? Je to jiný stav? Ano, opravdu jde o jiný stav. Označme osu polaroidu jako x' , abychom ji odlišili od os našich bazových stavů (obr. 9.2). Vylétající foton bude ve stavu $|x'\rangle$. Libovolný stav však lze vyjádřit jako lineární kombinaci bazových stavů a vztah pro ni je znám

$$|x'\rangle = \cos \vartheta |x\rangle + \sin \vartheta |y\rangle. \quad (9.33)$$

To znamená, že prochází-li foton kouskem polaroidu pootočeným o úhel ϑ (vzhledem k x), lze ho i v tom případě rozdělit do svazků $|x\rangle$ nebo $|y\rangle$ (např. pomocí kousku kalcitu). Nebo chceme-li, můžeme si jej jednoduše v duchu rozložit na x -ovou a y -ovou složku. Tak či onak vždy dojdeme k tomu, že amplituda pro stav $|x\rangle$ je $\cos \vartheta$ a pro stav $|y\rangle$ zase $\sin \vartheta$.

Nyní si položíme následující otázku: Předpokládejme, že foton polarizovaný ve směru x' kouskem polaroidu otočeným o úhel 30° dopadá na polaroid postavený pod nulovým úhlem (obr. 9.3). Co se stane? S jakou pravděpodobností jím projde?

Obr. 9.3 Dvě destičky polaroidu, jejichž roviny polarizace svírají úhel ϑ

Odpověď je tato. Po průchodu prvním polaroidem je foton jistě ve stavu $|x'\rangle$. Druhý polaroid jej propustí, pouze bude-li se nacházet ve stavu $|x\rangle$ (a absorbuje jej, bude-li ve stavu $|y\rangle$). Ptáme se

tedy, s jakou pravděpodobností se foton u něj objeví ve stavu $|x\rangle$? Dostaneme ji jako druhou mocninu absolutní hodnoty amplitudy $\langle x|x'\rangle$ toho, že foton ve stavu $|x'\rangle$ bude také ve stavu $|x\rangle$. Čemu je rovno $\langle x|x'\rangle$? Stačí rovnici (9.33) vynásobit zleva $\langle x|$ a dostaneme

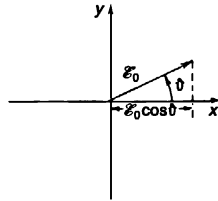
$$\langle x|x'\rangle = \cos \vartheta \langle x|x\rangle + \sin \vartheta \langle x|y\rangle.$$

Z fyzikálních důvodů platí, že $\langle x|y\rangle = 0$ (tak to musí být, jsou-li $|x\rangle$ a $|y\rangle$ bázovými stavy) a $\langle x|x\rangle = 1$. Takže nám zůstane

$$\langle x|x'\rangle = \cos \vartheta$$

a pravděpodobnost je rovna $\cos^2 \vartheta$. Například je-li polaroid pootočen o 30° , foton jím projde s pravděpodobností $3/4$ a s pravděpodobností $1/4$ jej ohřeje, když se v něm pohltí.

Nyní se podívejme, co se v téže situaci odehrává, zkoumáme-li ji z klasického hlediska. Tam bychom měli paprsek světla, elektrické pole, jež se mění tím nebo oním způsobem, řekněme „nepolarizovaný“ paprsek. Po opuštění prvního polaroidu osciluje elektrické pole velikosti \mathcal{E} ve směru x' ; nakreslili bychom ho ve tvaru kmitajícího vektoru s maximální hodnotou jeho délky rovnou \mathcal{E}_0 (obr. 9.4). Dopadá-li světlo na druhý polaroid, projde jím jen x -ová složka elektrického pole, tj. $\mathcal{E}_0 \cos \vartheta$. *Intenzita* je úměrná druhé mocnině, a tedy hodnotě $\mathcal{E}_0^2 \cos^2 \vartheta$. Takže energie, která pronikne, je $\cos^2 \vartheta$ krát menší než ta, která vstupuje do posledního polaroidu.



Obr. 9.4 Klasické znázornění vektoru intenzity elektrického pole \mathcal{E}

Klasický a kvantový obraz nás přivádí k podobným výsledkům. Kdybychom měli na druhý polaroid vyslat 10 miliard fotonů a střední pravděpodobnost každého z nich projít jím by byla, řekněme $3/4$, očekávali bychom, že $3/4$ z 10 miliard z něj vyletí ven. Podobně i energie, kterou by s sebou odnesly, by byla jen $3/4$ z té energie, jakou bychom se snažili „protačit“ polaroidem. Klasická teorie neříká nic o statistice těchto záležitostí – tvrdí jen, že přenesená energie bude rovna přesně $3/4$ energie, kterou použijeme na polaroid. To je samozřejmě nemožné v případě jednoho fotonu. Něco takového jako $3/4$ fotonu prostě neexistuje. Buď tam je *celý*, nebo tam není *vůbec*. Kvantová mechanika nám říká, že celý se tam nachází $3/4$ času. Vztah mezi oběma teoriemi je jasný.

Co lze říci o jiných druzích polarizace? Například o pravotočivé kruhové polarizaci? V klasické teorii mají při tomto typu polarizace složky x a y stejnou velikost, ale jsou fázově posunuté o 90° . V kvantové teorii má pravotočivý kruhově polarizovaný foton stejné amplitudy polarizace do stavů $|x\rangle$ a $|y\rangle$, a navíc fázový rozdíl obou *amplitud* je 90° . Označíme-li stav „pravého“ fotonu jako $|R\rangle$ a „levého“ jako $|L\rangle$, můžeme napsat (stať 33.1, díl 1)

$$\begin{aligned} |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle) \\ |L\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle), \end{aligned} \tag{9.34}$$

příčemž faktor $1/\sqrt{2}$ tam vystupuje proto, abychom dostali normované stavy. Použitím zákonů kvantové teorie můžeme pomocí těchto stavů vypočítat libovolné efekty spojené s filtrováním nebo interferencí. Stejně dobře si můžeme $|R\rangle$ a $|L\rangle$ vybrat za báze stavy a vše vyjadřovat pomocí nich. Nejdříve však potřebujeme ukázat, že $\langle R|L\rangle = 0$ – což lze provést velmi jednoduše tak, že vezmeme rovnici komplexně sdruženou s první rovnicí v (9.34) (viz rovnici (6.13)) a vynásobíme ji druhou z nich. Při rozkladu světla lze jako bázi použít polarizaci ve směrech x a y , nebo ve směrech x' a y' , nebo dokonce i pravou a levou polarizaci.

Pokusme se jen pro příklad naše vztahy obrátit. Lze vyjádřit stav $|x\rangle$ jako lineární kombinaci pravého a levého stavu? Ano, lze:

$$\begin{aligned} |x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle + |L\rangle) \\ |y\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}} (|R\rangle - |L\rangle). \end{aligned} \quad (9.35)$$

Důkaz: Sčítejme a odečítejme obě rovnice v (9.34). Je opravdu snadné přecházet z jedné báze do druhé.

Je však třeba připojit jednu zvláštní poznámku. Je-li foton pravotočivě kruhově polarizován, neměl by co dělat s osami x a y . Kdybychom se na něj dívali ze souřadnicové soustavy otočené o nějaký úhel kolem směru jeho letu, bude světlo polarizováno pravotočivě – totéž platí pro polarizaci levotočivou. Při libovolném takovém pootočení se na pravotočivě a levotočivě kruhově polarizovaném světle nic nemění; definice nezávisí na výběru os x ; musí být pouze dán směr pohybu fotonu. Není to ohromné? K definici nepotřebujeme žádné osy. Je to mnohem výhodnější než x a y . Na druhé straně, není to tak trochu zázrak, že *sčítáme-li* pravotočivý a levotočivý stav dohromady, můžeme zjistit, jaký byl směr x ? Nezávisí-li „pravé“ a „levé“ nijak na ose x , jak je možné, že po jejich složení dostaneme x -ový směr? Částečnou odpověď na tuto otázku nám může poskytnout tato úvaha. Rozepíšeme, čemu je roven stav $|R\rangle$, představující pravotočivě polarizovaný foton v souřadnicové soustavě x' , y' . Tam bychom napsali

$$|R'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x'\rangle + i|y'\rangle).$$

Jak vypadá tento stav v soustavě x , y ? Za $|x'\rangle$ jednoduše dosadíme z rovnice (9.33) a taktéž i za $|y'\rangle$ (explicitně jsme jej nevyjadřovali, ale je roven $(-\sin \vartheta)|x\rangle + (\cos \vartheta)|y\rangle$). Pak

$$\begin{aligned} |R'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\cos \vartheta |x\rangle + \sin \vartheta |y\rangle - i \sin \vartheta |x\rangle + i \cos \vartheta |y\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\cos \vartheta - i \sin \vartheta) |x\rangle + i(\cos \vartheta - i \sin \vartheta) |y\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} [(|x\rangle + i|y\rangle) (\cos \vartheta - i \sin \vartheta)]. \end{aligned}$$

První činitel je právě $|R\rangle$ a druhý zase $e^{-i\vartheta}$, výsledek tedy bude

$$|R'\rangle = e^{-i\vartheta} |R\rangle. \quad (9.36)$$

Stavy $|R'\rangle$ a $|R\rangle$ jsou totožné až na fázový faktor $e^{-i\vartheta}$. Vypočítáme-li totéž pro $|L'\rangle$, dostaneme³⁵⁾

$$|L'\rangle = e^{+i\vartheta}|L\rangle. \quad (9.37)$$

Nyní vidíme co se děje. Sčítáme-li $|R\rangle$ a $|L\rangle$, dostaneme něco jiného, než když sečteme $|R'\rangle$ a $|L'\rangle$. Například x -ově polarizovaný foton je dán součtem $|R\rangle$ a $|L\rangle$ (rovnice 9.35), ale pro y -ově polarizovaný foton má $|R\rangle$ fázový posun 90° směrem dozadu a $|L\rangle$ 90° směrem dopředu. Přesně totéž bychom dostali, kdybychom sčítali $|R'\rangle$ a $|L'\rangle$ pro speciální úhel $\vartheta=90^\circ$, a je to správně. Foton polarizovaný v *čárkované* souřadnicové soustavě ve směru x je totožný s fotonem polarizovaným ve směru y v původní soustavě souřadnic. Takže není zcela správné tvrdit, že kruhově polarizovaný foton vypadá ve všech souřadnicových soustavách stejně. Jeho *fáze* (vztah mezi fázemi pravotočivě a levotočivě kruhově polarizovaných stavů) si pamatuje směr x .

9.5 NEUTRÁLNÍ KAON³⁶⁾

Nyní si pohovoříme o dvojhadinové soustavě existující ve světě podivných částic – o soustavě, pro niž dává kvantová mechanika velmi pozoruhodné předpovědi. Podrobný popis by od nás vyžadoval podat mnoho informací o podivných částicích, což v daném okamžiku není možné, takže budeme muset, bohužel, přistoupit k jistým zjednodušením. Ve zkratce vám můžeme objasnit historii jednoho objevu, abychom ukázali, jaké úvahy k němu vedly. Vše začalo Gell-Mannovým a Nishijimovým objevem pojmu *podivnosti* a s ním spojeného nového zákona zachování: *zákona zachování podivnosti*. Když Gell-Mann a Pais rozebírali důsledky těchto myšlenek, dospěli k předpovědi neobvyklého jevu, který se chystáme popsát. Je však třeba nejdříve vás trochu seznámit s pojmem podivnost.

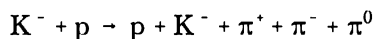
Musíme začít tím, co se nazývá *silné interakce* jaderných částic. V přírodě existují interakce, které nesou odpovědnost za silné jaderné síly, narozdíl od např. mnohem slabších elektromagnetických interakcí. Tyto interakce jsou silné v tom smyslu, že když se dvě částice přiblíží dostatečně blízko k sobě, budou interagovat opravdu pořádně a velmi snadno vyprodukují jiné částice. Jaderné částice podléhají i tzv. *slabým interakcím*, v důsledku kterých probíhají takové procesy jako rozpady beta, ale vždy pomalu (v porovnání s jadernými časy). Slabé interakce jsou o mnoho, mnoho řádů slabší než silné a dokonce mnohem slabší než elektromagnetické interakce.

Při studiu silných interakcí na velkých urychlovačích fyziky překvapilo zjištění, že některé jevy, které se „měly“ stát (jejichž existence byla očekávána), se nestaly. Například v některých interakcích se očekával vznik částice určitého typu, ale neobjevila se. Gell-Mann a Nishijima si všimli, že mnohé tyto podivné události lze ihned vysvětlit zavedením nového zákona zachování: zákona zachování podivnosti. Předložili návrh, že s každou částicí je spojen nový charakteristický znak – číslo, které nazvali podivnost – a že v každé silné interakci se „velikost podivnosti“ zachovává.

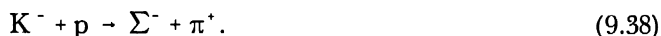
³⁵⁾ Něco podobného jsme našli ve 4. kapitole pro částici se spinem $1/2$, když jsme souřadnicovou soustavu otáčeli kolem osy z – tam nám vystoupil fázový faktor $e^{\pm i\varphi/2}$. Ve skutečnosti je to přesně totéž, co jsme psali ve stati 3.7 pro stavy $|+\rangle$ a $|-\rangle$ částice se spinem 1. Není to náhoda; foton je částice se spinem 1, ale nemá „nulový“ stav.

³⁶⁾ Máme pocit, že látka probíraná v této stati je rozsáhlejší a obtížnější než odpovídá úrovni našich vědomostí. Proto vám navrhuje vynechat ji a pokračovat statí 9.6. Jste-li ctižádostiví a měli byste čas, můžete se k ní vrátit později. Uvádíme ji proto, že je nádherným příkladem (vybraným z nedávných prací ve fyzice vysokých energií) toho, k čemu lze dospět pomocí naší formulace kvantové mechaniky dvojhadinových soustav.

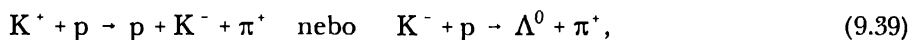
Představme si, například, že vysokoenergetický záporný mezon K (kaon) (s energií, řekněme, několik GeV) se sráží s protonem. Z jejich vzájemné interakce může vzniknout mnoho jiných částic: mezony π , mezony K, částice lambda, částice sigma – libovolné z mezonů a baryonů uvedených v tab 2.2, díl 1. Pozorováním však bylo zjištěno, že se objevují jen *určité kombinace*, a žádné jiné. Na vysvětlení bylo možné použít některé známé zákony zachování. Zaprvé, energie a hybnost se vždy zachovávají. Celková energie a hybnost před nějakou událostí a po ní musí být *táž*. Za druhé, zákon zachování elektrického náboje říká, že celkový náboj vylétávajících částic musí být roven celkovému náboji vstupujících částic. Ve zmíněném příkladu srážky mezonu K a protonu se následující reakce opravdu *vyskytují*



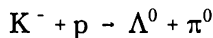
nebo



Nikdy nepozorujeme reakce



protože by byl porušen zákon zachování elektrického náboje. Bylo taktéž známo, že se zachovává *počet baryonů*. Počet baryonů *po reakci* musí být roven počtu baryonů *před reakcí*. V tomto zákoně se *antičástice* k baryonu považuje za *minus* jeden baryon. To znamená, že můžeme sledovat (a opravdu i *sledujeme*) reakce



nebo



(kde \bar{p} je antiproton, který nese záporný náboj). *Nikdy* však nepozorujeme

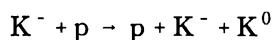


nebo



(i když je energie velmi vysoká), protože by nebylo zachováno baryonové číslo.

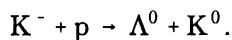
Zmíněné zákony však *nedokážou* vysvětlit podivný fakt, že k následujícím reakcím, které se na první pohled nijak zvlášť neliší od některých příkladů v (9.38) nebo (9.40), taktéž nikdy *nedochází*



nebo



nebo



Vysvětlení spočívá v zachování podivnosti. Každé částici je přiřazeno číslo – její *podivnost S* – a platí zákon, že v libovolné *silné* interakci musí být celková podivnost *po reakci* rovna celkové podivnosti částic, které do reakce *ustoupily*. Proton a antiproton (p, \bar{p}), neutron a antineutron (n, \bar{n}), mezony π (π^+, π^-, π^0), všechny mají podivnost *nula*; mezony K^+ a K^0 mají podivnost +1; K^-

a $\bar{K}^{0(37)}$ (anti- K^0), Λ^0 a částice $\Sigma (+, 0, -)$ mají podivnost -1 . Existuje i částice s podivností -2 (Ξ^- částice (velké „ksí“)), a snad i jiné, které dosud neznáme. Uvedené charakteristiky jsme shrnuli v *tab. 9.4*.

Podíváme se, jak funguje zachování podivnosti v některých uvedených reakcích. Máme-li na začátku K^- a proton, bude celková podivnost $S = -1 + 0 = -1$.

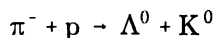
Tabulka 9.4: Kvantové číslo podivnosti silně reagujících částic

	S			
	-2	-1	0	+1
Baryony	Ξ^0 Ξ^-	Σ^+ Λ^0, Σ^0 Σ^-	p n	
Mezony		\bar{K}^0 K^-	π^+ π^0 π^-	K^+ K^0

Poznámka: π^- je antičástic k π^+ (a naopak).

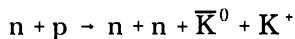
Zákon zachování podivnosti říká, že podivnost *produktů* reakce musí po sečtení dát taktéž hodnotu -1 . Vidíme, že pro reakce (9.38), (9.40), to tak opravdu je. V reakcích (9.42) je však podivnost na pravé straně pokaždé rovna *nule*. Takové reakce nezachovávají podivnost, a proto jsou zakázané. Proč? Nikdo neví. Nikdo neví o nic více, než jsme vám právě řekli. V přírodě to zkrátka takto funguje.

Nyní si všimněte následující reakce: mezon π^- narazí na proton. Jako výsledek může vzniknout např. částice Λ^0 a neutrální mezon K – dvě neutrální částice. Který neutrální mezon K to bude? Protože částice Λ má podivnost -1 a π^- a p ji mají nulovou, a navíc jde o rychlou reakci, nesmí se podivnost změnit. Částice K musí nutně mít podivnost $+1$ – půjde tedy o mezon K^0 . Reakce probíhá takto



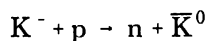
$$S = 0 + 0 = -1 + +1 \text{ (zachovává se).}$$

Kdyby místo K^0 byl výsledný produkt \bar{K}^0 , byla by podivnost pravé strany -2 ; to však příroda nedovolí, neboť podivnost nalevo je rovna nule. Na druhé straně se může \bar{K}^0 objevit v jiných reakcích, jako např.



$$S = 0 + 0 = 0 + 0 + +1 + -1$$

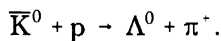
nebo



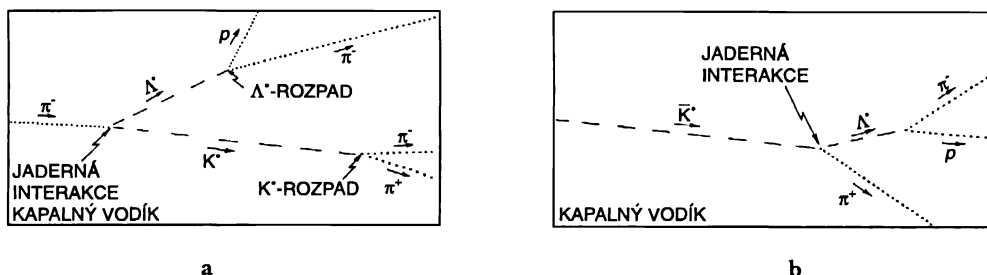
$$S = -1 + 0 = 0 + -1.$$

37) Čti: „K-nula s pruhem“.

Mohli byste si pomyslet: Neděláme kolem toho velké „cavyky“? Vždyť jak *víme*, zda jde o \bar{K}^0 nebo K^0 ? Vypadají totiž přesně stejně. Jedna je antičásticí druhé, takže mají přesně stejnou hmotnost a oba nesou nulový elektrický náboj. Jak je rozlišit? Podle reakcí, které vyvolávají. Například \bar{K}^0 interaguje s látkou a vznikne částice Λ , řekněme takto



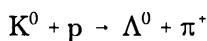
Mezon K^0 toho schopný není. *Neexistuje žádný způsob*, jakým by K^0 mohl vytvořit částici Λ interakcí s normální látkou (s protony a neutrony).³⁸⁾ Experimentální rozlišení částic K^0 a \bar{K}^0 spočívá v tom, že jedna z nich bude a druhá nebude schopna produkovat částice Λ .



Obr. 9.5 Procesy při vysokých energiích, jak je vidíme ve vodíkové bublinové komoře. a) mezon π^- interaguje s jádrem vodíku (protonem) a vzniká částice Λ^0 spolu s mezonem K^0 . Obě částice se v komoře rozpadají, b) při interakci mezonu \bar{K}^0 s protonem je produkován mezon π^+ a částice Λ^0 , která se pak rozpadá. (Neutrální částice za sebou nezanechávají stopy. Jejich předpokládané trajektorie jsou na obrázku naznačené přerušovanými čarami.)

Jedna z předpovědí teorie podivnosti je tato: Vznikne-li v experimentu s vysokoenergetickými piony částice Λ spolu s neutrálním mezonem K , *tento* neutrální mezon K při interakci s další látkou nikdy nevyprodukuje částici Λ . Experiment by mohl probíhat asi takto: Do vodíkové bublinové komory velkého objemu použijeme svazek mezonů π^- . Stopa π^- zmizí, ale někde jinde se objeví nová viditelná vidlice (proton a mezon π^-), která nám naznačuje, že nastal rozpad částice Λ (obr. 9.5). Pak vidíme, že někde uvnitř bude i mezon K^0 , který však nemůžeme pozorovat.

Využitím zákonů zachování energie a hybnosti lze však spočítat, kam poletí. (Mohl by se prozradit později, a to rozpadem na dvě nabitě částice, jak je naznačeno na obr. 9.5a). Po dobu letu by mohl interagovat s jedním z vodíkových jader (s protonem) a vytvořit nějaké jiné částice. Teorie podivnosti předpovídá, že jako produkt této reakce *nikdy* nevznikne částice Λ , tj. nikdy nenastane např. reakce



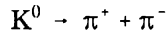
ačkoliv \bar{K}^0 by ji vyvolat mohl. To znamená, že v bublinové komoře může \bar{K}^0 způsobit událost

38) Samozřejmě kromě případu, že jsou *současné* produkovány dva mezony K^+ nebo jiné částice s celkovou podivností +2. V našich úvahách se omezíme na reakce, při nichž energie nestačí na vznik takových dodatečných podivných částic.

39) Volná částice Λ se pomalu rozpadá v důsledku *slabé* interakce (takže podivnost se nemusí zachovávat). Produkty rozpadu jsou buď p a π^+ , nebo n a π^0 . Doba života je $2,2 \cdot 10^{-10}$ s.

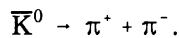
znázorněnou na *obr. 9.5b* (Λ^0 pozorujeme v důsledku jejího rozpadu), zatímco K^0 toho schopný není. To je první část naší historie o zachování podivnosti.

Podivnost se však *nezachovává* úplně. Existují velmi pomalé rozpady podivných částic (trvající velmi dlouho,⁴⁰⁾ kolem 10^{-10} s), při nichž se podivnost *nezachovává*. Jsou to tzv. slabé rozpady. Například K^0 se přemění na pár mezonů π (π^+ a π^-) se střední dobou života 10^{-10} s. Tak byly ve skutečnosti kaony poprvé pozorovány. Všimněme si, že rozpad



nezachovává podivnost, takže nemůže probíhat „rychle“ v důsledku silných interakcí; musí jít proto jediné o slabý rozpadový proces.

\bar{K}^0 se rozpadá *týmž způsobem* (na π^+ a π^-) a se stejnou střední dobou života



Opět jde o slabý rozpad, protože se podivnost *nezachovává*. Existuje princip, který říká, že pro libovolnou reakci se vždy najde odpovídající reakce, v níž je látka nahrazena antilátkou a *naopak*. Jelikož \bar{K}^0 je antičástice k K^0 , měla by se rozpadat na antičástice k π^+ a π^- , avšak π^- je antičásticí k π^+ . (Nebo *naopak*, je-li to pro vás přijatelnější. Ukazuje se, že u mezonů π nezáleží na tom, který z nich nazveme „látkou“.) A tak v důsledku slabých rozpadů se mohou K^0 a \bar{K}^0 přeměňovat na tytéž konečné produkty. Pozorujeme-li jejich rozpady (např. v bublinové komoře), vypadají úplně jako totožné částice. Liší se pouze silnými interakcemi.

Nakonec jsme se přece jen dopracovali k tomu, abychom vás seznámili s prací Gell-Manna a Paise. Zprv jsme poukázali na to, že jelikož se oba neutrální kaony mohou změnit na mezony π , musí existovat určitá amplituda toho, že K^0 přechází na \bar{K}^0 , a tatáž amplituda opačného procesu, tj. procesu přechodu \bar{K}^0 a K^0 . Reakce lze zapsat tak, jak je to běžné v chemii

$$K^0 \rightleftharpoons \pi^- + \pi^+ \rightleftharpoons \bar{K}^0. \quad (9.43)$$

Z jejich existence vyplývá, že existuje amplituda (označujeme ji jako $-i/\hbar \langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$) proměny K^0 a \bar{K}^0 , podmíněná toutéž slabou interakcí, s níž je spojen rozpad na dva mezony π . Je zřejmé, že existuje i amplituda opačného procesu $\langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$. Protože látka a antilátka se vždy chovají stejně, číselně jsou si obě amplitudy rovny; označíme je A

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle = A. \quad (9.44)$$

A zde, jak poznamenali Gell-Mann a Pais, dochází k zajímavé situaci. To, co fyzici nazvali dvěma různými stavy světa (K^0 a \bar{K}^0), je třeba vlastně považovat za *jedinou dvojhladinovou soustavu*, protože existuje amplituda přechodu z jednoho stavu do druhého. Při úplné analýze by však bylo třeba uvažovat ne dva, ale více stavů, protože existují ještě dvojpionové stavy apod.; ale jelikož se zmínění dva fyzici zabývali zejména o souvislost mezi K^0 a \bar{K}^0 , nechtěli si zbytečně komplikovat situaci a řešili úlohu v určitém přiblížení jako dvojhladinovou soustavu. Jiné stavy *se braly* v úvahu v takové míře, v jaké se jejich vliv nepřímo projevuje na amplitudách (9.44).

⁴⁰⁾ Typický čas pro silné interakce je řádově 10^{-23} s.

V souladu s touto myšlenkou analyzovali Gell-Mann a Pais neutrální kaon jako dvojhladinový systém. Začali tak, že stavy $|K^0\rangle$ a $|\bar{K}^0\rangle$ zvolili za bázevé stavy. (Od této chvíle se bude celý další výklad velmi podobat tomu, co jsme zmiňovali u molekuly amoniaku.) Libovolný stav neutrálního mezonu K lze popsat udáním amplitud toho, že se ocitne v každém z bázevých stavů. Tyto amplitudy označíme jako

$$C_+ = \langle K^0 | \psi \rangle, \quad C_- = \langle \bar{K}^0 | \psi \rangle. \quad (9.45)$$

Další krok spočívá v napsání Hamiltonovy rovnice pro tuto dvojhladinovou soustavu. Kdyby K^0 a \bar{K}^0 nebyly navzájem nijak spjaté, rovnice by měly jednoduchý tvar

$$i\hbar \frac{dC_+}{dt} = E_0 C_+, \quad i\hbar \frac{dC_-}{dt} = E_0 C_-. \quad (9.46)$$

Máme tu však ještě amplitudu $\langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$ přeměny K^0 na \bar{K}^0 , proto je na pravou stranu první rovnice třeba přidat člen

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle C_- = A C_-.$$

Analogický člen $A C_+$ je nutné přičíst k pravé straně rovnice, popisující rychlost změny C_- .

To však ještě není všechno! Uvažujeme-li o dvojpionovém efektu, je třeba vzít v úvahu i to, že existuje dodatečná amplituda přeměny K^0 v sebe sama po uzavřené smyčce

$$K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- \rightarrow K^0.$$

Tato dodateková amplituda (označíme ji $\langle K^0 | W | K^0 \rangle$) je identická s amplitudou $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, protože amplitudy přechodu na pionový pár a z něj na K^0 nebo \bar{K}^0 jsou úplně shodné. Můžeme to ukázat i podrobněji. Především je možné psát⁴¹⁾

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | 2\pi \rangle = \langle 2\pi | W | K^0 \rangle$$

a

$$\langle K^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | 2\pi \rangle = \langle 2\pi | W | K^0 \rangle.$$

Symetrie mezi látkou a antilátkou vyžaduje, aby

$$\langle 2\pi | W | K^0 \rangle = \langle 2\pi | W | \bar{K}^0 \rangle$$

a taktéž

$$\langle \bar{K}^0 | W | 2\pi \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | 2\pi \rangle.$$

Odtud $\langle K^0 | W | K^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, a také $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$, jak jsme uvedli dříve. Máme tedy dvě dodatekové amplitudy $\langle K^0 | W | K^0 \rangle$ a $\langle \bar{K}^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$, obě rovné A , které je třeba vložit do Hamiltonových rovnic. První z nich vede ke členu $A C_+$ v pravé části rovnice pro dC_+/dt a druhá

⁴¹⁾ Zde si to trochu zjednodušujeme. Dvojpionová soustava může mít mnoho stavů odpovídajících různým hybnostem mezonů π , a proto bychom měli na pravé straně uváděné rovnice provést součet přes všechny bázevé stavy mezonů π . Důkladné odvození však stále vede ke stejným výsledkům.

ke členu AC_- v pravé části rovnice pro dC_-/dt . Takovými úvahami dospěli Gell-Mann a Pais k závěru, že Hamiltonovy rovnice pro soustavu $K^0\bar{K}^0$ musejí mít tvar

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dC_+}{dt} &= E_0C_+ + AC_- + AC_+ \\ i\hbar\frac{dC_-}{dt} &= E_0C_- + AC_+ + AC_- \end{aligned} \quad (9.47)$$

Nyní jsme nuceni poopravit jedno naše tvrzení, uvedené v některé z předcházejících kapitol – tvrzení týkající se toho, že amplitudy jsou reálná čísla; ve skutečnosti jsou komplexní. Proto je koeficient A komplexní číslo a není možné jej jednoduše zahrnout do energie E_0 .

Naši hrdinové, kteří se do té doby často bavili se spiny elektronů a s nimi souvisejícími záležitostmi, věděli, že Hamiltonovy rovnice (9.47) umožňují existenci i jiné dvojice bázeových stavů s velmi jednoduchými vlastnostmi, které lze taktéž použít k popisu soustavy kaonů. Uvažovali takto: „Vezměme součet a rozdíl obou rovnic. Vztahujme všechny energie k E_0 , tj. odečteme všechny hodnoty energie od E_0 a pro energii a čas vyberme takové jednotky, v nichž $\hbar=1$.“ (Současní teoretičtí fyzici vždy postupují takovýmto způsobem. Fyzika se nezmění, ale rovnice získají jednodušší tvar.) Jako výsledek dostali

$$i\frac{d}{dt}(C_+ + C_-) = 2A(C_+ + C_-), \quad i\frac{d}{dt}(C_+ - C_-) = 0, \quad (9.48)$$

z něhož je ihned zřejmé, že kombinace amplitud $(C_+ + C_-)$ a $(C_+ - C_-)$ působí nezávisle jedna na druhé. (Odpovídají, samozřejmě, stacionárním stavům, které jsme studovali už dříve.) Došli k závěru, že bude výhodnější používat pro částice K jinou reprezentaci. Definovali dvojici stavů

$$|K_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle), \quad |K_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle) \quad (9.49)$$

a prohlásili, že místo toho, abychom uvažovali mezony K^0 a \bar{K}^0 , můžeme stejně dobře pracovat s dvěma „částicemi“ (tj. „stavy“) K_1 a K_2 . (Ty odpovídají stavům, které jsme obvykle označovali jako $|I\rangle$ a $|II\rangle$. Nepoužíváme naše staré symboly, protože se chceme přidržet původního označení, jaké použili autoři a s jakým se setkáte na fyzikálních seminářích.)

Gell-Mann a Pais nedělali toto všechno jen proto, aby dali částicím jiná jména; skrývá se za tím i nová neobvyklá fyzika. Nechť C_1 a C_2 jsou amplitudy toho, že nějaký stav $|\psi\rangle$ se ukáže být buď mezonem K_1 nebo K_2

$$C_1 = \langle K_1 | \psi \rangle, \quad C_2 = \langle K_2 | \psi \rangle.$$

Z rovnic (9.49) vyplývá

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-), \quad C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ - C_-). \quad (9.50)$$

Rovnice (9.48) dostanou tvar

$$i\frac{dC_1}{dt} = 2AC_1, \quad i\frac{dC_2}{dt} = 0. \quad (9.51)$$

Řešeními jsou

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-i2At}, \quad C_2(t) = C_2(0), \quad (9.52)$$

kde $C_1(0)$ a $C_2(0)$ jsou amplitudy v čase $t=0$.

Uvedené rovnice říkají, že je-li neutrální kaon v čase $t=0$ ve stavu $|K_1\rangle$ (tj. $C_1(0)=1$, $C_2(0)=0$), amplitudy v čase t budou

$$C_1(t) = e^{-i2At}, \quad C_2(t) = 0.$$

Když si vzpomeneme, že A je komplexní číslo, je výhodné položit

$$2A = \alpha - i\beta$$

(jelikož se ukazuje, že imaginární část $2A$ je záporná, zapisujeme ji jako *minus* $i\beta$). Po takovéto substituci dostává $C_1(t)$ tvar

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-\beta t} e^{i\alpha t}. \quad (9.53)$$

Pravděpodobnost toho, že v čase t najdeme částici K_1 , je rovna druhé mocnině absolutní hodnoty amplitudy, tj. $e^{-2\beta t}$. A z druhé rovnice (9.52) vyplývá, že pravděpodobnost najít stav K_2 je v libovolném čase rovna nule. To znamená, že připravíme-li mezon K ve stavu $|K_1\rangle$, klesá pravděpodobnost najít jej v téměř stavu s časem exponenciálně – ale ve stavu $|K_2\rangle$ jej nenajdeme nikdy. Kam zmizí? Rozpadá se na dva mezony π s experimentálně určenou střední dobou života $\tau = 1/2\beta = 10^{-10}$ s. Tento proces jsme předpovídali, když jsme řekli, že A je komplexní číslo.

Na druhé straně rovnice (9.52) říká, že připravíme-li kaon výlučně ve stavu $|K_2\rangle$, zůstane v něm navždy. To není tak zcela pravda. Experimentálně bylo pozorováno, že se rozpadá na tři mezony π , ale 600-krát pomaleji než námi popsaný dvojpionový rozpad. Znamená to, že existují ještě nějaké malé členy, které jsme v našem přiblížení zanedbali. Uvažujeme-li však jen rozpad na dva mezony π , trvá K_2 „věčně“.

Povídání o Gell-Mannovi a Paisovi pomalu končí. Později se podívali na to, co se stane, vznikne-li v *silné* interakci kaon spolu s částicí Λ^0 . Jelikož přitom musí mít podivnost $+1$, může jít jedině o stav K^0 . Takže v čase $t=0$ to není ani K_1 , ani K_2 , ale jejich *směs*. Počáteční podmínky jsou

$$C_+(0) = 1, \quad C_-(0) = 0.$$

Podle rovnice (9.50) to však znamená, že

$$C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

a z rovnice (9.51) dále vyplývá, že

$$C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\beta t} e^{-i\alpha t}, \quad C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (9.54)$$

Uvědomme si však, že K_1 a K_2 jsou lineárními kombinacemi K^0 a \bar{K}^0 . V rovnicích (9.54) byly amplitudy vybrány tak, že v čase $t=0$ se v důsledku interference navzájem vyloučí části tvořící \bar{K}^0

a zůstane jen stav K^0 . Ale stav $|K_1\rangle$ se mění s časem a stav $|K_2\rangle$ ne. V čase následujícím po $t=0$ zabezpečí interference C_1 a C_2 konečné amplitudy pro oba stavy K^0 a \bar{K}^0 .

Co to všechno znamená? Vraťme se trochu nazpět a zamysleme se nad experimentem znázorněným na obr. 9.5. Mezon π^- tam po srážce s protonem vytvořil částici Λ^0 a mezon K^0 , který letěl dále bublinovou komorou. Na jeho pouti pro něj existovala malá, ale konstantní amplituda toho, že se srazí s jádrem vodíku. Zpočátku jsme byli toho míněni, že zákon zachování podivnosti v takovéto interakci zabrání kaonu vytvořit částici Λ^0 . Nyní však vidíme, že jsme neměli pravdu. Protože ačkoliv naše částice K byla na počátku mezonom K^0 (ten nemůže generovat částici Λ^0), nezůstává jím stále. Za okamžik se objeví určitá amplituda toho, že přeskóčí do stavu \bar{K}^0 . Můžeme proto očekávat, že podél dráhy neutrálního kaonu uvidíme částici Λ^0 . Pravděpodobnost vzniku této události udává amplituda C_- , kterou můžeme vyjádřit pomocí C_1 a C_2 , když obrátíme rovnice (9.50). Dostaneme

$$C_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 - C_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\beta t} e^{-i\alpha t} - 1). \quad (9.55)$$

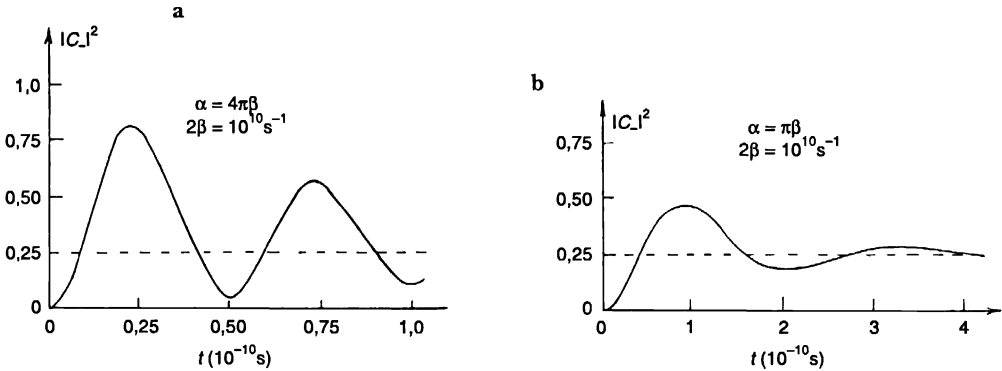
Při pohybu mezonu K bude pravděpodobnost toho, že bude „interagovat jako“ \bar{K}^0 , rovna výrazu $|C_-|^2$, tj.

$$|C_-|^2 = \frac{1}{4} (1 + e^{-2\beta t} - 2e^{-\beta t} \cos \alpha t). \quad (9.56)$$

Složitý a zvláštní výsledek!

Je to pozoruhodná předpověď Gell-Manna a Paise: Vznikne-li částice K^0 , pravděpodobnost toho, že se změní na \bar{K}^0 (což lze demonstrovat její schopností vytvořit Λ^0) se mění v čase podle rovnice (9.56). K jejímu odvození stačilo logicky myslet a použít základní principy kvantové mechaniky – nepotřebovali jsme vědět nic o tom, co se děje uvnitř kaonu. Jelikož neexistuje nikdo, kdo by o tom opravdu něco věděl, nemohli se Gell-Mann a Pais dostat dále. Pro α a β nemohli žádné teoretické hodnoty najít. Byli schopni odhadnout hodnotu β získanou experimentálním pozorováním rychlosti rozpadu na dva mezony π ($2\beta = 10^{10} \text{ s}^{-1}$), ale nedokázali říci nic o α .

Na obr. 9.6 jsme zobrazili funkci (9.56) pro hodnoty α . Vidíme, že jejich průběh velmi silně závisí na poměru α ku β . Na začátku je pravděpodobnost pro \bar{K}^0 nulová, pak postupně narůstá. Je-li α velké, pravděpodobnost rychle osciluje. Nabývá-li α malých hodnot, oscilace budou malé nebo žádné – pravděpodobnost spojitě roste k $1/4$.



Obr. 9.6 Funkce (9.56): a) pro $\alpha = 4\pi\beta$, b) pro $\alpha = \pi\beta$ (přičemž $2\beta = 10^{10} \text{ s}^{-1}$)

Je pravidlem, že kaony se pohybují konstantní rychlostí blízkou rychlosti světla. Křivky na obr. 9.6 tak znázorňují i pravděpodobnost pozorovat podél dráhy neutrální mezon \bar{K}^0 ; typické vzdálenosti jsou několik centimetrů. Nyní vidíme, proč je tato předpověď tak nadměrně zvláštní. Vytvoříme jednu částici a ona místo toho, aby se rozpadla, dělá úplně něco jiného. Někdy se rozpadne a někdy se změní v částici jiného druhu. Charakteristická pravděpodobnost tohoto efektu se mění po dobu jejího pohybu podivným způsobem. Nic podobného v přírodě neexistuje. A přitom se k této nanejvýš pozoruhodné předpovědi dospělo vylučně na základě úvah o interferenci amplitud.

Existuje-li nějaké místo, kde máme naději prověřit si základní principy kvantové mechaniky tím nejpřímějším způsobem – funguje superpozice amplitud nebo ne? – je to právě tady. Nehledě k tomu, že je to už pár let, co tento jev předpověděli, dodnes jsme se nedočkali jasněho experimentálního potvrzení. Máme k dispozici několik přibližných výsledků, které naznačují, že α není rovno nule a že zmíněný jev skutečně nastává; vyplývá z nich, že α leží mezi 2β a 4β . To je vše, co jsme zatím získali z experimentu. Bylo by velmi prospěšné, kdyby se podařilo uvedenou křivku přesně prověřit a přesvědčit se, zda princip superpozice skutečně funguje v takovém záhadném světě, jakým je svět podivných částic – svět s neznámými důvody pro rozpady a s neznámými důvody podivnosti.

Analýza, kterou jsme právě popsali, velmi dobře charakterizuje způsob, jakým se dnes kvantová mechanika využívá při našem úsilí porozumět podivným částicím. Všechny ty složité teorie, o nichž tolik slyšíme, nejsou ničím jiným než takovýmto typem elementárního hokus pokusu, který využívá princip superpozice a jiné postuláty kvantové mechaniky na této úrovni. Někteří lidé tvrdí, že se jim podařilo vypracovat teorie, umožňující výpočet α a β , nebo alespoň α při daném β , ale všechny jsou úplně nanič. Například teorie, která předpovídá hodnotu α při daném β , nám říká, že α by mohlo být nekonečně velké. Systém rovnic, z něhož původně vycházejí, zahrnuje dva mezony π a pak se od nich vrací zpět ke K_0 atd. Když je vše propracováno do konce, teorie opravdu vede k dvěma rovnicím podobným našim; ale protože existuje nekonečně mnoho stavů dvou mezonů π , závisejících na jejich hybnostech, po integraci přes všechny možnosti dostáváme nekonečně velkou hodnotu α . Ale příroda má své α , a to *není* nekonečně velké. Proto jsou dynamické teorie nesprávné. Je opravdu dost pozoruhodné, že jedině jevy, které se *vůbec dají* předpovědět ve světě podivných částic, jsou založeny na kvantové mechanických principech takové úrovně, na jaké se je nyní učíme.

9.6 ZOBEČNĚNÍ NA SOUSTAVY S N STAVY

Skončili jsme vyprávění o dvojhladinových soustavách; zmínili jsme o nich vše, co jsme měli v úmyslu. V následujících kapitolách se budeme zabývat studiem soustav s více stavy. Zobečnění myšlenek, které jsme rozvinuli a rozpracovali pro dva stavy, na soustavy s N hladinami je docela jednoduché. Vypadá to asi takto.

Může-li se soustava nacházet v N určitých nezávislých stavech, lze libovolný stav $|\psi(t)\rangle$ vyjádřit lineární kombinací jakéhokoliv souboru bázeových stavů $|i\rangle$, kde $i = 1, 2, \dots, N$;

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\text{všechna } i} |i\rangle C_i(t). \quad (9.57)$$

Koeficienty $C_i(t)$ jsou amplitudy $\langle i|\psi(t)\rangle$. Závislost amplitudy C_i na čase určují rovnice

$$i\hbar \frac{dC_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \quad (9.58)$$

kde matice energie H_{ij} vyjadřuje fyzikální stránku problému. Vypadá tak jako pro dva stavy. Nyní však musejí indexy i a j probíhat všemi N bázeovými stavy, takže matice H_{ij} (nebo hamiltonián, jestli vám to zní přijatelněji) je typu $N \times N$ a obsahuje N^2 prvků. Tak jako předtím, i nyní platí $H_{ij}^* = H_{ji}$ (pokud se částice zachovávají) a diagonální členy H_{ii} jsou reálná čísla.

Je-li matice energie konstantní (tj, nezávislá na čase), našli jsme pro dvojhladinový případ obecné řešení pro koeficienty C_j . Stejně tak není těžké vyřešit rovnice (9.58) pro soustavu s N hladinami, pokud se H s časem nemění. Opět budeme nejdříve hledat možná řešení, v němž mají všechny amplitudy *tulež* časovou závislost. Zkusíme

$$C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}. \quad (9.59)$$

Dosadíme-li takto vyjádřené hodnoty C_i do rovnic (9.58), z derivací dC_i/dt dostaneme jednoduše $-(i/\hbar)EC_i$. Po vydělení všech členů společným exponenciálním faktorem zůstane

$$Ea_i = \sum_j H_{ij} a_j. \quad (9.60)$$

Je to soustava N lineárních algebraických rovnic pro N neznámých a_1, a_2, \dots, a_n . Chceme-li najít její řešení, musíme mít i trochu štěstí – podaří se nám to jen tehdy, bude-li determinant soustavy, sestavený z koeficientů stojících u všech a_i nabývat nulové hodnoty. Není však nutné ovládat takovéto moudrosti; můžeme začít řešit uvedené rovnice libovolným způsobem a zjistíme, že řešení existují jen při určitých hodnotách E . (Je třeba si uvědomit, že kromě E se v rovnicích už nevyskytuje nic, co bychom mohli volně přizpůsobovat.)

Chceme-li postupovat formálně, můžeme zapsat rovnice (9.60) jako

$$\sum_j (H_{ij} - \delta_{ij}E) a_j = 0. \quad (9.61)$$

Pak už použijeme pravidlo (pravda, pokud ho známe), že tyto rovnice budou mít řešení jen pro ty hodnoty E , pro které

$$\det(H_{ij} - \delta_{ij}E) = 0. \quad (9.62)$$

Každý prvek determinantu obsahuje jen H_{ij} kromě diagonálních členů, od nichž je odečteno E , tj. (9.62) prostě znamená

$$\det \begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \dots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = 0. \quad (9.63)$$

Je to samozřejmě jen speciální způsob zápisu algebraické rovnice pro E , tvořené součtem součinů jednotlivých členů, přičemž každý součin je vytvořen podle určitého klíče. Mocniny E jsou v nich zastoupeny od prvního do N -tého řádu.

Máme tedy polynom N -tého stupně, který je roven nule; obecně má N kořenů. (Musíme si však uvědomit, že některé z nich mohou být násobné, tj. dva nebo více kořenů si může být vzájemně rovno.) Těchto N kořenů označme jako

$$E_I, E_{II}, E_{III}, \dots, E_n, \dots, E_N \quad (9.64)$$

(n použijeme k označení n -té římské číslice, takže n nabývá hodnot I, II, III, ..., N). Může se stát, že některé z těchto energií budou shodné (řekněme $E_{II} = E_{III}$), ale i přesto jim dáme různá jména.

Rovnice (9.60) (nebo (9.61)) mají jedno řešení pro každou hodnotu E . Dosadíme-li do nich jakoukoliv z nalezených hodnot E , řekněme E_n , a najdeme odpovídající a_i , dostaneme soubor náležející energii E_n . Nazveme ho $a_i(n)$.

Použitím těchto koeficientů $a_i(n)$ v rovnicích (9.59) dostaneme amplitudy $C_i(n)$ toho, že se stavy s přesně určenou hodnotou energie ocitnou v básovém stavu $|i\rangle$. Bude-li $|n\rangle$ představovat stavový vektor stavu s přesně určenou energií v čase $t=0$, můžeme psát

$$C_i(n) = \langle i|n\rangle e^{-(i/\hbar)E_n t},$$

kde

$$\langle i|n\rangle = a_i(n). \quad (9.65)$$

Úplné vyjádření takového stavu pak bude

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_i |i\rangle a_i(n) e^{-(i/\hbar)E_n t}$$

neboli

$$|\psi_n(t)\rangle = |n\rangle e^{-(i/\hbar)E_n t}. \quad (9.66)$$

Stavové vektory $|n\rangle$ popisují konfiguraci stavů s přesně určenou hodnotou energie, ale nezahrnují časovou závislost; ta stojí za nimi jak samostatný faktor. Proto jsou to konstantní vektory, které si můžeme zvolit za novou bázi, kdyby se nám to hodilo.

Každý ze stavů $|n\rangle$ má tu vlastnost (jako se lze snadno přesvědčit), že působí-li na něj Hamiltonův operátor \hat{H} , výsledkem bude E_n -násobek téhož stavu

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (9.67)$$

Energie E_n je tedy číslo charakteristické pro Hamiltonův operátor \hat{H} . Jak jsme viděli, hamiltonián bude mít v obecném případě několik charakteristických energií. Fyzici je obvykle nazývají vlastními hodnotami operátoru \hat{H} . Každé vlastní hodnotě \hat{H} (jinými slovy, každé energii) přísluší stav s přesně určenou hodnotou energie, který jsme nazvali stacionárním stavem. Stavy $|n\rangle$ se obvykle nazývají vlastní stavy operátoru \hat{H} . Každý z nich odpovídá určité vlastní hodnotě E_n .

Obecně lze N stavů $|n\rangle$ zvolit za básový soubor. Aby to platilo, musí být všechny stavy navzájem ortogonální, tj. pro libovolné dva z nich, např. $|n\rangle$ a $|m\rangle$, musí být splněna podmínka

$$\langle n|m\rangle = 0. \quad (9.68)$$

Jsou-li všechny energie různé, je splněna automaticky. Všechny $a_i(n)$ lze taktéž vynásobit vhodným faktorem, abychom dostali normované stavy, čímž rozumíme, že

$$\langle n | n \rangle = 1 \quad (9.69)$$

pro všechna n .

Stane-li se náhodou, že má rovnice (9.63) dvojnásobný (nebo vícenásobný) kořen, vzniknou menší komplikace, tj. v tomto případě sice existují dva různé soubory koeficientů a_i , náležející dvěma stejným hodnotám energie, ale stavy, které popisují, už *nemusí* být ortogonální. Představme si, že vykonáme celý ten obvyklý postup a najdeme dva stacionární stavy se shodnými energiemi; označme je $|\mu\rangle$ a $|\nu\rangle$. Pokud jsme náhodou neměli šťastnou ruku, nemusí být nutně ortogonální, tj. může platit

$$\langle \mu | \nu \rangle \neq 0.$$

Vždy však můžeme zkonstruovat dva nové stavy (nazveme je $|\mu'\rangle$ a $|\nu'\rangle$) s tou vlastností, že mají stejně energie a jsou navzájem ortogonální, takže

$$\langle \mu' | \nu' \rangle = 0. \quad (9.70)$$

Dosáhneme toho tak, že sestrojíme vhodné lineární kombinace $|\mu\rangle$ a $|\nu\rangle$ s koeficienty vybranými tak, aby platila rovnice (9.70). Je vždy užitečné takto postupovat a obecně budeme předpokládat, že jsme to udělali. Všechny naše stavy $|n\rangle$ s přesně určenou hodnotou energie budeme tedy moci považovat za navzájem ortogonální.

Pro zajímavost bychom rádi dokázali tvrzení, že mají-li dva stacionární stavy různé energie, jsou opravdu ortogonální. Pro stav $|n\rangle$ s energií E_n je splněna operátorová rovnice

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (9.71)$$

Ve skutečnosti představuje vztah mezi čísly. Doplníme-li chybějící části, znamená totéž, co

$$\sum_j \langle i | \hat{H} |j\rangle \langle j | n \rangle = E_n \langle i | n \rangle. \quad (9.72)$$

Vezmeme-li rovnici s ní komplexně sdruženou, dostaneme

$$\sum_j \langle i | \hat{H} |j\rangle^* \langle j | n \rangle^* = E_n^* \langle i | n \rangle^*. \quad (9.73)$$

Vzpomeňme si, že komplexně sdružená amplituda je totožná s amplitudou opačného procesu, takže rovnici (9.73) lze přepsat do tvaru

$$\sum_j \langle n | j \rangle \langle j | \hat{H} | i \rangle = E_n^* \langle n | i \rangle. \quad (9.74)$$

Jelikož tato rovnice platí pro libovolné i , bude její zkrácená forma

$$\langle n | \hat{H} = E_n^* \langle n |. \quad (9.75)$$

Nazývá se *sdrúžená rovnice* s rovnicí (9.71).

Nyní lze snadno ukázat, že E_n je reálné číslo. Vynásobíme-li rovnici (9.71) bra-vektorem $\langle n|$ dostaneme

$$\langle n|\hat{H}|n\rangle = E_n, \quad (9.76)$$

protože $\langle n|n\rangle = 1$. Pak vynásobíme rovnici (9.75) zprava ket-vektorem $|n\rangle$:

$$\langle n|\hat{H}|n\rangle = E_n^*. \quad (9.77)$$

Z porovnání rovnic (9.76) a (9.77) jasně vyplývá, že

$$E_n = E_n^*, \quad (9.78)$$

což znamená, že E_n je reálné. V rovnici (9.75) můžeme proto vygumovat hvězdičku nad E_n .

Konečně jsme schopni dokázat, že stavy s různou energií jsou ortogonální. Nechť $|n\rangle$ a $|m\rangle$ jsou libovolné dva bázevé stavy s přesně určenými hodnotami energie. Použijeme-li rovnici (9.75) pro stav $\langle m|$ a vynásobíme ji stavem $|n\rangle$, dostaneme

$$\langle m|\hat{H}|n\rangle = E_m\langle m|n\rangle.$$

Ale vynásobíme-li rovnici (9.71) zleva vektorem $\langle m|$, máme

$$\langle m|\hat{H}|n\rangle = E_n\langle m|n\rangle.$$

Levé strany obou rovnic jsou navzájem rovny, proto se musí rovnat i pravé, takže

$$E_m\langle m|n\rangle = E_n\langle m|n\rangle. \quad (9.79)$$

Je-li $E_m = E_n$, rovnice nám nic neříká. Ale liší-li se energie obou stavů ($E_m \neq E_n$), $\langle m|n\rangle$ musí být rovno nule, což jsme chtěli dokázat. Jakmile se E_n a E_m numericky liší, jsou oba stavy nutně ortogonální.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 9.1 ■ Ukažte, že Pauliho spinové matice můžeme považovat za složky vektoru σ , pro který platí následující vztahy: $\sigma \times \sigma = 2i\sigma$, $\sigma \cdot \sigma = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.
Najděte součin $\sigma_x \sigma_y \sigma_z$.
- 9.2 ■ Molekula oxidu uhličitého má lineární strukturu OCO, snadno přibírá nadbytečný elektron a stává se záporným molekulovým iontem. Předpokládejme, že tento elektron bude mít energii E_O , příle- ne-li k atomu kyslíku, a energii E_C , příle- ne-li k atomu uhlíku. Žádná z těchto energií však nebude odpovídat stacionárnímu stavu, protože vždy existuje malá pravděpodobnost přechodu nadby- tečného elektronu z atomu kyslíku na atom uhlíku a naopak. (Pravděpodobnost toho, že elektron přejde přímo z jednoho atomu kyslíku na druhý, budeme považovat za zanedbatelně malou.)
a) Najděte energie hladin iontu CO_2^- vyjádřené pomocí E_O , E_C a jednoho dalšího parametru.
b) Popište fyzikálně všechny stacionární stavy v případě, že hodnoty energie E_O a E_C koincidují.
- 9.3 ■ V molekule methanu CH_4 jsou atomy uhlíku umístěny ve vrcholech čtyřstěnu a jediný atom uhlíku v jeho středu. V methanovém iontu chybí elektron k realizaci jedné z těchto čtyř vazeb a zůstává po něm díra, která může přeskakovat z jedné vazby na druhou. Je to příklad soustavy se čtyřmi stavy. Na základě představ o symetrii minimalizujte počet různých maticových prvků hamiltoniánu a předpovězte počet různých energetických hladin, které odpovídají elektronovému obalu methanového iontu. Zanedbejte vibrační a rotační interakce atomů. Vyjádřete vzdálenost mezi hladinami pomocí nejmenšího možného počtu maticových prvků.
- 9.4 ■ Uvažujte šest atomů rozmístěných na obvodu kružnice ve stejných vzájemných vzdálenostech (viz obrázek). Dodáme jeden nadbytečný elektron a označíme bázové stavy symboly $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |6\rangle$ kde $|1\rangle$ znamená, že nadbytečný elektron se nachází v prvním atomu, atd. Dále předpokládejme, že tento elektron může přeskakovat ze „svého“ atomu jen na jeden ze dvou sousedních, ale ne dále.
Ukažte, že $|1\rangle$ je stacionární stav, jestliže všechny amplitudy bázových stavů $C_i = \langle i | \psi \rangle$ jsou rovny $C_i = \frac{1}{\sqrt{6}} e^{-iE_i t / \hbar}$.
Určete E_1 . Kolik dalších stacionárních stavů existuje v takové soustavě?
Lze ukázat, že bude-li ψ stacionární stav, pak amplitudy $C_i = \langle i | \psi \rangle$ při vhodné volbě konstanty δ splňují následující vztahy: $C_2 = C_1 e^{i\delta}$, $C_3 = C_2 e^{i\delta}$, $C_4 = C_3 e^{i\delta}$, $C_5 = C_4 e^{i\delta}$, $C_6 = C_5 e^{i\delta}$.
Čemu je rovna konstanta δ ? Nakreslete schéma energetických hladin uvažované soustavy a najděte vzdálenosti mezi hladinami.
- 9.5 ■ Molekula se skládá ze tří stejných atomů umístěných ve vrcholech rovnostranného trojúhelníka (viz obrázek). V záporném iontu takové molekuly je přítomen dodatečný elektron, který může pře- skakovat z jednoho vrcholu trojúhelníka na libovolný druhý.
a) Nechť maticový prvek takového přechodu je roven $-A$. Vypočítejte vzdálenost mezi ener- getickými hladinami molekulového iontu.
b) Umístíme ion do elektrického pole rovnoběžného s rovinou iontu ve směru, který je ukázán na obrázku. Je-li intenzita pole taková, že potenciální energie elektronu umístěného v horním vrcholu trojúhelníka je o $\epsilon A = 0,01A$ větší, než v druhých dvou vrcholech, jak se změní vzdálenost mezi hladinami?

Hyperjemné rozštěpení v atomu vodíku

- 10.1 BÁZOVÉ STAVY SOUSTAVY DVOU ČÁSTIC SE SPINEM 1/2
- 10.2 HAMILTONIÁN ZÁKLADNÍHO STAVU ATOMU VODÍKU
- 10.3 ENERGETICKÉ HLADINY
- 10.4 ZEEMANŮV JEV
- 10.5 STAVY V MAGNETICKÉM POLI
- 10.6 PROJEKČNÍ MATICE PRO SPIN 1

10.1 BÁZOVÉ STAVY SOUSTAVY DVOU ČÁSTIC SE SPINEM 1/2

V této kapitole se budeme zabývat hyperjemným rozštěpením v atomu vodíku, protože je to fyzikálně zajímavá ukáзка toho, co všechno už dokážeme vyřešit pomocí kvantové mechaniky. V ní už nevystačíme se dvěma stavy; budeme jich potřebovat více. Zároveň si názorně ilustrujeme použití kvantové mechanických metod v trochu komplikovanějších úlohách. Sám o sobě je tento problém dostatečně složitý, takže přijdeme-li už jednou na to, jak k němu přistupovat a jak se s ním vyrovnat, bude nám ihned jasné, jak ho zobecnit na úlohy jiného druhu.

Jak víme, atom vodíku se skládá z jednoho protonu, nedaleko kterého sídlí jeden elektron. Ten se může nacházet v libovolném z množství stavů s diskrétní hodnotou energie a v každém z nich je jeho charakter pohybu jiný. Například první excitovaný stav leží asi 10 eV nad základním stavem. V důsledku existence spinů elektronu a protonu však dokonce ani základní stav atomu vodíku není ve skutečnosti jedním jediným stavem s přesně určenou hodnotou energie. Uvedené spiny nesou zodpovědnost za hyperjemnou strukturu energetických hladin; znamená to, všechny hladiny energie jsou rozštěpeny na několik hladin ležících těsně vedle sebe.

Elektron může mít spin orientovaný buď směrem nahoru, nebo směrem dolů; totéž platí i pro proton. Pro každý dynamický stav atomu proto existují čtyři možné spinové konfigurace. Jinak řečeno, mluví-li fyzik o základním stavu atomu vodíku, ve skutečnosti má na mysli čtyři základní stavy, a nejen nejnižší z nich. Všechny čtyři spinové stavy nemají přesně tutéž energii; jejich energie jsou maličko posunuty oproti hodnotě, kterou bychom očekávali, kdyby nebylo spinů. Tyto posuny jsou o mnoho, mnoho řádů menší než zhruba těch 10 eV mezi základním a prvním excitovaným stavem. V důsledku toho se energie každého dynamického stavu rozštěpí na soustavu několika velmi blízkých energetických hladin; říkáme tomu *hyperjemné rozštěpení*.

V této kapitole chceme spočítat rozdíly energií čtyř spinových stavů. Hyperjemná struktura je způsobena vzájemnou interakcí magnetických momentů elektronu a protonu, která vede k tomu, že se magnetické energie jednotlivých spinových stavů od sebe maličko liší. Rozdíly představují asi jen desetimiliontiny elektronvltu – opravdu nepatrné hodnoty v porovnání s 10 eV! Právě díky tomuto velkému skoku můžeme považovat základní stav atomu vodíku za čtyřhladinovou soustavu a nemusíme se starat o to, že ve skutečnosti existuje ještě mnoho stavů s vyššími energiemi. Omezíme se na studium hyperjemné struktury základního stavu atomu vodíku.

Pro naše cíle nebudou podstatné žádné podrobnosti týkající se rozložení elektronu a protonu; to asi tak řečeno zařídil samotný atom, když se dostal do základního stavu. Potřebujeme vědět jedině to, že elektron a proton se nacházejí blízko sebe v určitém prostorovém rozložení. Kromě toho mohou mít různé relativní orientace spinů. Soustředíme se jen na spinový efekt.

První otázka, která čeká na naši odpověď, zní: Jaké jsou *bázové stavy* soustavy? Nepoložili jsme ji však zcela správně. Neexistuje nějaký daný soubor bázových stavů, protože žádný soubor bázových stavů, který si vybereme, nebude jediný možný. Lineárními kombinacemi prvků staré báze vždy můžeme sestavit nové bázové soubory. Při jejich výběru máme volnou ruku; všechny jsou rovnoprávné. Otázka tedy nemá stát ve tvaru: „Co je báze?“, ale „Jaká by *mohla* být?“. Zvolit si můžeme jakoukoliv z nich; nejrozumněji tu, která nám nejvíc vyhovuje. Obvykle je nejvýhodnější začít s *fyzikálně* nejjasnější. Nemusí nutně představovat řešení nějakého problému, nemusí mít ani žádný *bezprostřední* význam; obecně by nám měla ulehčovat pochopení toho, co se děje.

Vybereme čtyři následující bázové stavy:

Stav 1: Spiny elektronu i protonu míří směrem nahoru.

Stav 2: Spin elektronu je orientován směrem nahoru a spin protonu směrem dolů.

Stav 3: Spin elektronu je orientován dolů a spin protonu nahoru.

Stav 4: Spiny elektronu i protonu jsou natočeny směrem dolů.

Zavedeme šikovní označení těchto čtyř stavů:

Stav 1: $|++\rangle$; spin elektronu *nahoru*, spin protonu *nahoru*

Stav 2: $|+-\rangle$; spin elektronu *nahoru*, spin protonu *dolů*

Stav 3: $|-+\rangle$; spin elektronu *dolů*, spin protonu *nahoru*

Stav 4: $|--\rangle$; spin elektronu *dolů*, spin protonu *dolů*

(10.1)

Budeme si muset zapamatovat, že *první* znaménko plus nebo minus se vztahuje k elektronu a *druhé* k protonu. Abychom měli toto označení stále po ruce, shrnuli jsme jej do *obr. 10.1*. Někdy bude výhodné nazvat tyto stavy $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ a $|4\rangle$.

Mohli byste namítnout: „Ale částice přece interagují a možná že to nejsou ty správné bázové stavy. Zdá se, jako kdybyste uvažovali obě částice nezávisle.“ Ano, opravdu! Interakce nastoluje otázku: Jaký je *hamiltonián* soustavy? Otázka, jak *popsat* soustavu, se však netýká interakce. Co

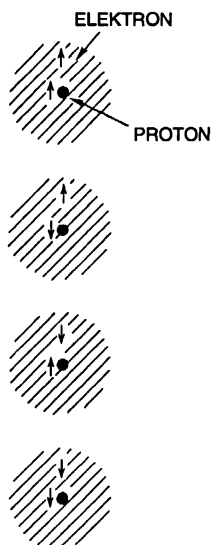
zvolíme za báze stavy, nemá nic společného s tím, co se stane pak. Může se stát, že atom nikdy nebude moci *zůstat* v jednom z uvedených báze stavy, i kdyby v něm na začátku byl. To je jiná otázka. Naše však zní: Jak se mění amplitudy s časem v určité (fixované) bázi? Volbou báze stavy vlastně vybíráme pro náš popis „jednotkové vektory.“

Když už se této problematiky dotýkáme, podívejme se na obecný problém, jak najít soubor báze stavy, obsahuje-li soustava víc než jednu částici. Pro jednu částici to udělat umíme. Například elektron je v reálném životě (ne v našich zjednodušených případech, ale v reálném životě) úplně popsán udáním toho, že se nachází v každém z následujících stavů:

|elektron se spinem nahoru a s hybností \mathbf{p}

nebo

|elektron se spinem dolů a s hybností \mathbf{p} .



Obr. 10.1 Soubor báze stavy pro základní stav atomu vodíku

Jsou to pravdu dva nekonečné soubory stavů; pro každou hodnotu \mathbf{p} jeden. Znamená to, že elektronový stav $|\psi\rangle$ je daný úplně, známe-li všechny amplitudy

$$\langle +, \mathbf{p} | \psi \rangle \quad \text{a} \quad \langle -, \mathbf{p} | \psi \rangle,$$

kde + a – představují složky momentu hybnosti podél nějaké osy, obvykle osy z , a \mathbf{p} je vektor hybnosti. Pro každou přípustnou hodnotu hybnosti tedy musí existovat dvě amplitudy (dvojnásobně nekonečný soubor báze stavy). To je vše, co je třeba pro popis jediné částice,

Je-li částic více, lze báze stavy zapsat podobným způsobem. Například kdyby se elektron a proton nacházely ve složitější situaci, než uvažujeme, mohly by báze stavy vypadat takto:

|elektron se spinem nahoru má hybnost \mathbf{p}_1 a proton se spinem dolů má hybnost \mathbf{p}_2 .

Podobně pro jiné spinové kombinace. Je-li částic víc než dvě, zůstává myšlenka nezměná. Vidíme, že napsat *možné* báze stavů je opravdu velmi jednoduché. Jediným problémem zůstává tvar hamiltoniánu.

Při studiu základního stavu atomu vodíku nebudeme muset využívat celé soubory báze stavů pro různé hybnosti. Tím, že bereme základní stav, určujeme konkrétní stavy hybnosti pro proton a pro elektron. Podrobnosti celé konfigurace – amplitudy všech báze stavů hybnosti – lze spočítat, ale to už je jiný problém. Nás nyní zajímají jen spinové efekty, takže můžeme vybrat jak čtyři báze stavů (10.1). Stojí před námi další úloha: Jak vypadá hamiltonián pro soubor stavů?

10.2 HAMILTONIÁN ZÁKLADNÍHO STAVU ATOMU VODÍKU

Za chvíli si povíme, jak vypadá. Nejdříve vám však připomeneme, že *libovolný* stav lze vždy vyjádřit jako lineární kombinaci báze stavů. Pro jakýkoliv stav $|\psi\rangle$ můžeme napsat

$$|\psi\rangle = |++\rangle\langle ++|\psi\rangle + |+-\rangle\langle +-|\psi\rangle + |-+\rangle\langle -+|\psi\rangle + |--\rangle\langle --|\psi\rangle. \quad (10.2)$$

Uvědomme si, že úplné závorky jsou obyčejná komplexní čísla, takže je jako obvykle můžeme nahradit koeficienty C_i , $i = 1, 2, 3$ nebo 4 a rovnici (10.2) přepsat do tvaru

$$|\psi\rangle = |++\rangle C_1 + |+-\rangle C_2 + |-+\rangle C_3 + |--\rangle C_4. \quad (10.3)$$

Udáním čtyř amplitud C_i úplně popíšeme spinový stav $|\psi\rangle$. Mění-li se tyto amplitudy s časem (jak se i budou), vyjadřuje rychlost jejich časové změny operátor \hat{H} . Úkolem je najít \hat{H} .

Neexistuje obecné pravidlo, které by nás přivedlo k hamiltoniánu atomové soustavy. Najít pro ni ten správný vztah je mnohem větší umění, než najít báze stavů. Byli jsme schopni vám dát obecný návod, jak zapsat soubor báze stavů pro libovolný problém týkající se elektronu a protonu; na nynější úrovni je však příliš těžké seznámit vás s obecnými tvarem hamiltoniánu pro takovou kombinaci. Namísto toho vás k němu dovedeme pomocí určitého heuristického argumentu; budete jej muset přijmout za správný, protože výsledky jsou v souladu s experimentálním pozorováním.

Zajisté si vzpomenete, že v předcházející kapitole jsme vyjadřovali hamiltonián jediné částice se spinem $1/2$ pomocí matic sigma – nebo s nimi ekvivalentním operátorů sigma. Jejich vlastnosti jsou shrnuty v *tab. 10.1*.

Tabulka 10.1:

$\sigma_z +\rangle$	$= + +\rangle$
$\sigma_z -\rangle$	$= - -\rangle$
$\sigma_x +\rangle$	$= + -\rangle$
$\sigma_x -\rangle$	$= + +\rangle$
$\sigma_y +\rangle$	$= +i -\rangle$
$\sigma_y -\rangle$	$= -i +\rangle$

Tyto operátory, představující vhodný a výstižný způsob pro zapamatování maticových elementů typu $\langle + | \sigma_z | + \rangle$, byly užitečné popisu chování *jediné* částice se spinem 1/2. Otázka zní: Dokážeme najít analogický prostředek pro popis soustavy se dvěma spiny? Odpověď zní ano, velmi snadno, a to následujícím způsobem. Zavedeme vektorový operátor σ^e (nazveme ho „elektronové sigma“), jehož složky x, y a z jsou $\sigma_x^e, \sigma_y^e, \sigma_z^e$. Přijmeme *dohodu*, že působí-li jeden z těchto operátorů na libovolný ze čtyř bázevých stavů atomu vodíku, působí jen na spin *elektronu*, a to přesně tím způsobem, jako kdyby byl elektron docela sám. Příklad: Čemu je rovno $\sigma_y^e | - + \rangle$? Jelikož σ_y působí na elektron se spinem dolů dá (-i)-násobek odpovídajícího stavu elektronu se spinem nahoru, platí

$$\sigma_y^e | - + \rangle = -i | + + \rangle$$

(jelikož σ_y^e působí na kombinovaný stav, překlopí pouze spin elektronu a protonu se vůbec nedotkne, přičemž výsledek vynásobí faktorem -i.) Působením σ_y^e na ostatní stavy dostaneme

$$\begin{aligned}\sigma_y^e | + + \rangle &= i | - + \rangle \\ \sigma_y^e | + - \rangle &= i | - - \rangle \\ \sigma_y^e | - - \rangle &= -i | + - \rangle.\end{aligned}$$

Zapamatujte si jen, že operátory σ^e působí jen na první spinový symbol, tj. na spin *elektronu*.

V dalším kroku definujeme odpovídající operátor „protonové sigma“ pro spin protonu. Jeho tři složky $\sigma_x^p, \sigma_y^p, \sigma_z^p$ působí přesně tak jako σ^e , ale pouze na spin *protonu*. Například působí-li σ_x^p na každý ze čtyř bázevých stavů, dostaneme (pokaždé použijeme *tabulku 10.1*)

$$\begin{aligned}\sigma_x^p | + + \rangle &= | + - \rangle \\ \sigma_x^p | + - \rangle &= | + + \rangle \\ \sigma_x^p | - + \rangle &= | - - \rangle \\ \sigma_x^p | - - \rangle &= | - + \rangle.\end{aligned}$$

Jak vidíme, není to příliš těžké.

V nejobecnějším případě můžeme pracovat i se složitějšími příklady. Mohli bychom se např. setkat se součiny dvou operátorů typu $\sigma_y^e \sigma_z^p$. Narazíme-li na takovýto součin, provedeme nejdříve to, co přikazuje pravý operátor, a pak to, co nařizuje levý.⁴²⁾ Například

$$\sigma_x^e \sigma_z^p | + - \rangle = \sigma_x^e (\sigma_z^p | + - \rangle) = \sigma_x^e (- | + - \rangle) = -\sigma_x^e | + - \rangle = - | - - \rangle.$$

Všimněte si, že tyto operátory ignorují obyčejná čísla; této skutečnosti jsme využili tehdy, když jsme psali $\sigma_x^e (-1) = (-1) \sigma_x^e$. Říkáme, že operátory komutují s čísly, nebo že číslo může „projít“ před operátor. Procvičte si výpočty takového druhu a ukažte, že součin $\sigma_x^e \sigma_z^p$ vede pro čtyři bázevé stavy k následujícím výsledkům

⁴²⁾ Zajistě si všimnete, že pro tyto *konkrétní* operátory se ukazuje, že na jejich pořadí nezáleží.

$$\begin{aligned}\sigma_x^e \sigma_z^p |++\rangle &= +|--\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |+-\rangle &= -|--\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |-+\rangle &= +|++\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |--\rangle &= -|+-\rangle.\end{aligned}$$

Vezmeme-li všechny možné operátory, každý jednou, dostaneme 16 možností. Ano, šestnáct – za předpokladu, že vezmeme v úvahu i „jednotkový operátor“ $\hat{1}$. Zaprvé, máme trojici $\sigma_x^e, \sigma_y^e, \sigma_z^e$. Pak je tu trojice $\sigma_x^p, \sigma_y^p, \sigma_z^p$ – to je dohromady šest. Kromě toho přistupuje devět možných součinů typu $\sigma_x^e \sigma_y^p$, což je dohromady 15. Nakonec jednotkový operátor, který nechává takový součin beze změny, tedy celkem 16.

Všimněme si, že pro čtyřhladinovou soustavu musí být Hamiltonova matice typu 4×4 – složena z 16 čísel. Lze snadno ukázat, že libovolnou matici takového typu (a tedy jmenovitě i Hamiltonovu matici) lze napsat jako lineární kombinaci šestnácti dvojspinových matic příslušejících souboru operátorů, které jsme právě vytvořili. Proto pro interakci mezi elektronem a protonem, která se týká jen jejich spinů, očekáváme, že Hamiltonův operátor lze vyjádřit lineární kombinací těchto 16 operátorů. Jde jen o to, jak.

Zaprvé, víme, že interakce nezávisí na výběru os pro souřadnicovou soustavu. Není-li přítomna žádná vnější porucha (např. magnetické pole), který by určovala nějaký významný směr v prostoru, nemůže hamiltonián záviset na tom, jak si zvolíme směry os x, y a z . To znamená, že hamiltonián nemůže obsahovat člen typu σ_x^e stojící sám o sobě. Bylo by to směšné, protože pak by někdo jiný s jinou soustavou souřadnic dostal jiné výsledky.

Zbývají jen tyto možnosti: člen tvořený jednotkovou maticí, řekněme konstanta a (krát $\hat{1}$), a nějaká kombinace matic sigma, která nezávisí na souřadnicích – nějaká „invariantní“ kombinace. Jednou *skalární* invariantní funkcí dvou vektorů je skalární součin, která má v našem případě tvar

$$\sigma^e \cdot \sigma^p = \sigma_x^e \sigma_x^p + \sigma_y^e \sigma_y^p + \sigma_z^e \sigma_z^p. \quad (10.4)$$

Tento operátor je invariantní vzhledem k libovolné rotaci soustavy souřadnic. Takže hamiltonián s vhodnou prostorovou symetrií musí jít vyjádřit jediňč součtem nějakého násobku jednotkové matice a násobku tohoto skalárního součinu, řekněme jako

$$\hat{H} = E_0 + A \sigma^e \cdot \sigma^p. \quad (10.5)$$

Takový tvar má tedy hamiltonián, který hledáme. Pokud nepřistupuje žádné vnější pole a vycházíme z prostorové symetrie, jinak ani vypadat nemůže. Konstantní člen nám moc neříká; závisí jen na referenční hladině, od které odečítáme energie. Stejně dobře můžeme položit $E_0 = 0$. V druhém členu je schováno vše, co potřebujeme k tomu, abychom uměli najít rozštěpení hladin v atomu vodíku.

Snad pro vás bude přijatelnější, budete-li se dívat na hamiltonián trochu jiným způsobem. Máme-li vedle sebe dva magnety s magnetickými momenty μ_e a μ_p , závisí jejich vzájemná energie kromě jiného i na skalárním součinu $\mu_e \cdot \mu_p$. A jak si jistě vzpomínáte, zjistili jsme, že klasická veličina, kterou označujeme jako μ_e , vystupuje v kvantové mechanice pod názvem $\mu_e \sigma_e$. Podobně kvantově mechanická analogie klasické veličiny μ_p má tvar $\mu_p \sigma_p$ (kde μ_p je magnetický moment

protonu, který je asi 1000krát menší než μ_e a má opačné znaménko). Takže rovnice (10.5) říká, že interakční energie je podobná interakci mezi dvěma magnety, ačkoliv ne zcela, neboť ta závisí ještě na vzájemné vzdálenosti mezi nimi. Ale rovnice (10.5) by mohla být (a ve skutečnosti i je) jakousi střední interakcí. Elektron se v atomu pohybuje a náš hamiltonián udává jen střední interakční energii. Říká nám jedině to, že pro předepsané prostorové uspořádání elektronu a protonu existuje, řečeno klasickým jazykem, energie úměrná kosinu úhlu mezi oběma magnetickými momenty. Takový klasický kvalitativní obraz nám snad pomůže lépe porozumět, jak jsme ke všemu dospěli, ale důležité je to, že rovnice (10.5) představuje správný kvantově mechanický vztah.

Co do velikosti by byla klasická interakce mezi dvěma magnety rovna součinu obou magnetických momentů vydělenému třetí mocninou jejich vzájemné vzdálenosti. V atomu vodíku je vzdálenost mezi elektronem a protonem zhruba $5 \cdot 10^{-2}$ nm (asi polovina průměru atomu). Lze proto udělat hrubý odhad konstanty A ; měla by být přibližně rovna součinu obou magnetických momentů μ_e a μ_p vydělenému třetí mocninou 1/20 nanometru. Řádově bude výsledek odpovídat. Ukazuje se, že pochopíme-li do nejmenších podrobností kvantovou teorii vodíkového atomu (k čemuž máme ještě dost daleko), dokážeme vypočítat A i přesněji. Lidé ji dokázali vypočítat s přesností na 30 miliontin. Takže na rozdíl od konstanty A , charakterizující v molekule amoniaku rychlost překlápění, pro níž teorie vůbec nedokázala poskytnout vyhovující hodnotu, lze konstantu A pro atom vodíku spočítat, vycházíme-li z podrobněji vybudované teorie. Nedá se však nic dělat, pro naše nynější účely budeme nuceni považovat A za číslo, které lze určit experimentálně, a zaměřit se na fyziku daného problému.

Vezmeme-li hamiltonián ve tvaru (10.5), můžeme využitím rovnice

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j \quad (10.6)$$

zjistit, co udělá vzájemná interakce spinů s energetickými hladinami. K tomu však nejprve potřebujeme vyčíslit 16 maticových elementů $H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle$, odpovídajících libovolné dvojici sestavené ze čtyř bázevých stavů (10.1).

Začneme s tím, čemu je rovno $\hat{H} | j \rangle$ pro každý uvedený bázevých stav. Například

$$\hat{H} | ++ \rangle = A \sigma^e \cdot \sigma^p | ++ \rangle = A \left\{ \sigma_x^e \sigma_x^p + \sigma_y^e \sigma_y^p + \sigma_z^e \sigma_z^p \right\} | ++ \rangle. \quad (10.7)$$

Použijeme-li metodu, s níž jsme se seznámili před malou chvílí (velmi nám usnadní práci, pokud jsme si zapamatovali *tabulku 10.1*), zjistíme, jak působí každý pár matic sigma na stav $| ++ \rangle$. Odpověď je tato:

$$\begin{aligned} \sigma_x^e \sigma_x^p | ++ \rangle &= + | -- \rangle \\ \sigma_y^e \sigma_y^p | ++ \rangle &= - | -- \rangle \\ \sigma_z^e \sigma_z^p | ++ \rangle &= + | ++ \rangle. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Takže rovnice (10.7) se zjednoduší na

$$\hat{H} | ++ \rangle = A \{ | -- \rangle - | -- \rangle + | ++ \rangle \} = A | ++ \rangle. \quad (10.9)$$

Jelikož všechny čtyři báze jsou navzájem ortogonální, dostaneme ihned, že

$$\begin{aligned}
 \langle ++ | H | ++ \rangle &= A \langle ++ | ++ \rangle = A \\
 \langle +- | H | ++ \rangle &= A \langle +- | ++ \rangle = 0 \\
 \langle -+ | H | ++ \rangle &= A \langle -+ | ++ \rangle = 0 \\
 \langle -- | H | ++ \rangle &= A \langle -- | ++ \rangle = 0.
 \end{aligned}
 \tag{10.10}$$

Uvědomíme-li si, že $\langle j | H | i \rangle = \langle i | H | j \rangle^*$, můžeme okamžitě napsat diferenciální rovnici pro amplitudu C_1 :

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11} C_1 + H_{12} C_2 + H_{13} C_3 + H_{14} C_4$$

neboli

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = A C_{11} \tag{10.11}$$

A to je všechno! Pouze jeden jediný člen.

Tabulka 10.2: Spinové operátory pro atom vodíku

$\sigma_x^e \sigma_x^p ++ \rangle = + -- \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p +- \rangle = + -+ \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p -+ \rangle = + +- \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p -- \rangle = + ++ \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p ++ \rangle = - -- \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p +- \rangle = + -+ \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p -+ \rangle = + +- \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p -- \rangle = - ++ \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p ++ \rangle = + ++ \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p +- \rangle = - +- \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p -+ \rangle = - -+ \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p -- \rangle = + -- \rangle$

Abychom dostali zbývající Hamiltonovy rovnice, musíme se trpělivě prokousat podobnými procedurami, když \hat{H} působí na ostatní stavy. V rámci cvičení však nejdříve ověřte, že všechny součiny matic sigma, uvedené v *tab. 10.2*, jsou správné. Pomocí nich dostaneme rovnice

$$\begin{aligned}
 \hat{H} |+-\rangle &= A\{2|-\rangle - |+-\rangle\} \\
 \hat{H} |-\rangle &= A\{2|+-\rangle - |--\rangle\}. \\
 \hat{H} |--\rangle &= A |--\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{10.12}$$

Vynásobíme-li jednu po druhé zleva všemi stavovými vektory, dojdeme k následující Hamiltonově matici H_{ij} :

$$H_{ij} = \begin{matrix} & \begin{matrix} j \\ \overline{A} & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \\ \begin{matrix} i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \overline{A} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{pmatrix} \end{matrix}.
 \tag{10.13}$$

Samozřejmě to znamená pouze tolik, že naše diferenciální rovnice pro čtyři amplitudy C_i mají tvar

$$\begin{aligned}
 i\hbar\dot{C}_1 &= AC_1 \\
 i\hbar\dot{C}_2 &= -AC_2 + 2AC_3 \\
 i\hbar\dot{C}_3 &= 2AC_2 - AC_3 \\
 i\hbar\dot{C}_4 &= AC_4.
 \end{aligned}
 \tag{10.14}$$

Dříve než přistoupíme k řešení těchto rovnic, nedá nám, abychom neuvedli jedno vhodné pravidlo (vděčíme za něj Diracovi), které sice nebudeme dále potřebovat, ale vyvolá ve vás dojem, že už toho opravdu hodně víte. Z rovnic (10.9) a (10.12) vyplývá, že

$$\begin{aligned}
 \sigma^e \cdot \sigma^p |++\rangle &= |++\rangle \\
 \sigma^e \cdot \sigma^p |+-\rangle &= 2|-\rangle - |+-\rangle \\
 \sigma^e \cdot \sigma^p |-\rangle &= 2|+-\rangle - |--\rangle \\
 \sigma^e \cdot \sigma^p |--\rangle &= |--\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{10.15}$$

„Podívejte se“, řekl Dirac, „první a poslední rovnici mohu napsat i takto“:

$$\begin{aligned}
 \sigma^e \cdot \sigma^p |++\rangle &= 2|++\rangle - |++\rangle \\
 \sigma^e \cdot \sigma^p |--\rangle &= 2|--\rangle - |--\rangle.
 \end{aligned}$$

pak jsou si navzájem podobné. Zavedu nový operátor, který označím $P_{\text{vým. spinu}}$ a který bude mít, podle *definice*, tyto vlastnosti:⁴³⁾

$$\begin{aligned}
 P_{\text{vým. spinu}} |++\rangle &= |++\rangle \\
 P_{\text{vým. spinu}} |+-\rangle &= |+-\rangle \\
 P_{\text{vým. spinu}} |-\rangle &= |-\rangle \\
 P_{\text{vým. spinu}} |--\rangle &= |--\rangle
 \end{aligned}$$

Způsobí jedině to, že obě částice si navzájem vymění orientace spinu. Pak mohu celý systém rovnic (10.15) zapsat ve formě jediné operátorové rovnice

⁴³⁾ Tento operátor se nazývá Pauliho výměnný operátor spinu.

$$\sigma^e \cdot \sigma^p = 2P_{\text{vým. spinu}} - 1. \quad (10.16)$$

To je zmíněná Diracova formulace. Jeho výměnný operátor spinu nám poskytuje elegantní způsob k výpočtu součinu $\sigma^e \cdot \sigma^p$. (Jak sami vidíte, všechny brány máme otevřené; můžeme se použít opravdu do všeho.)

10.3 ENERGETICKÉ HLADINY

Nyní už jsme schopni vypočítat energetické hladiny základního stavu atomu vodíku vyřešením Hamiltonových rovnic (10.14). Chceme najít energie stacionárních stavů. Znamená to, že vlastně chceme najít ty speciální stavy $|\psi\rangle$, pro něž má každá jim náležící amplituda $C_i = \langle i | \psi \rangle$ tutéž časovou závislost, konkrétně $e^{-i\omega t}$. Daný stav pak bude mít energii $E = \hbar\omega$. Hledáme tedy soubor amplitud, pro něž

$$C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (10.17)$$

kde čtyři koeficienty a_i na čase nezávisí. Abychom zjistili, zda vůbec máme naději najít takové amplitudy, dosadíme rovnice (10.17) do (10.14) a podíváme se, co se stane. Každá časová derivace $i\hbar d C_i / dt$ přejde na $E C_i$ a když rovnice vykrátíme společným exponenciálním faktorem, každé C_i se změní na a_i ; dostaneme

$$\begin{aligned} E a_1 &= A a_1 \\ E a_2 &= -A a_2 + 2 A a_3 \\ E a_3 &= 2 A a_2 - A a_3 \\ E a_4 &= A a_4. \end{aligned} \quad (10.18)$$

Z těchto rovnic je třeba vypočítat neznámé a_1 , a_2 , a_3 a a_4 . Je příjemné, že první rovnice na ostatních nezávisí; znamená to, že jedno řešení vidíme ihned. Položíme-li $E = A$, zjistíme, že

$$a_1 = 1, \quad a_2 = a_3 = a_4 = 0$$

představuje možné řešení. (Samozřejmě, kdyby byla všechna a_i rovna nule, bylo by to také řešení; nepopisovalo by však žádný fyzikální stav!) Nazvěme naše první řešení stavem $|I\rangle$ ⁴⁴⁾:

$$|I\rangle = |1\rangle = |++\rangle. \quad (10.19)$$

Jeho energie je

$$E_I = A.$$

Všechny tyto úvahy nám okamžitě dávají klíč k druhému řešení, které dostaneme z poslední rovnice (10.18):

$$a_1 = a_2 = a_3 = 0, \quad a_4 = 1$$

$$E = A.$$

⁴⁴⁾ Stavem je ve skutečnosti $|I\rangle e^{-(i/\hbar)Et}$, ale jako obvykle, ztotožníme stavy s konstantními vektory, které se shodují s úplnými vektory v čase $t=0$.

ENERGETICKÉ HLADINY

Nazveme ho stavem $|\text{II}\rangle$:

$$|\text{II}\rangle = |4\rangle = |--\rangle \quad (10.20)$$

$$E_{\text{II}} = A.$$

Dále to už bude trochu těžší; zbývající rovnice v (10.18) jsou navzájem provázány. S něčím podobným jsme však už setkali. Sečtením obou rovnic dostaneme

$$E(a_2 + a_3) = A(a_2 + a_3). \quad (10.21)$$

Jejich vzájemným odečtením dojdeme k

$$E(a_2 - a_3) = -3A(a_2 - a_3). \quad (10.22)$$

Už na první pohled vidíme (a když si navíc ještě vzpomeneme na náš známý amoniak), že existují dvě řešení

$$a_2 = a_3, \quad E = A$$

a

$$a_2 = -a_3, \quad E = -3A. \quad (10.23)$$

Jsou směsí stavů $|2\rangle$ a $|3\rangle$. Označíme-li je $|\text{III}\rangle$ a $|\text{IV}\rangle$ a pro správné normování je vynásobíme $1/\sqrt{2}$, máme

$$|\text{III}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |--\rangle) \quad (10.24)$$

$$E_{\text{III}} = A$$

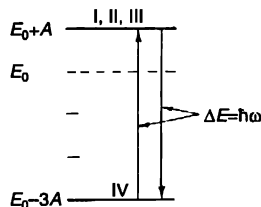
a

$$|\text{IV}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |--\rangle) \quad (10.25)$$

$$E_{\text{IV}} = -3A.$$

Našli jsme čtyři stacionární stavy a jejich energie. Všimněme si, jen tak mimochodem, že všechny jsou navzájem ortogonální, takže v případě potřeby je lze zvolit za báze stavy. Tím jsme naši úlohu úplně vyřešili.

Tři stavy mají energii A a čtvrtý $-3A$. Střední hodnota je nula; tj. když jsme v rovnici (10.5) položili $E_0 = 0$, rozhodli jsme se odečíst všechny energie od střední hodnoty. Můžeme si proto znázornit schéma energetických hladin základního stavu atomu vodíku tak, jak je naznačeno na obr. 10.2.



Obr. 10.2 Schéma energetických hladin základního stavu atomu vodíku

Energetický rozdíl mezi stavem $|IV\rangle$ a libovolným jiným ze zbývajících trojice je $4A$. Atom, který se náhodou dostal do stavu $|I\rangle$, z něj může spadnout do stavu $|IV\rangle$, přičemž emituje světlo. Nevíditelné světlo, neboť energetický rozdíl je velmi malý, ale kvantum z mikrovlnné oblasti. Nebo kdybychom vodíkový plyn vystavili vlivu mikrovlnného záření, zjistili bychom, že dochází k absorpci energie, neboť atomy ve stavu $|IV\rangle$ je pohlcují a přecházejí do jednoho z vyšších stavů – ale jen při frekvenci $\omega = 4A/\hbar$. Tato frekvence byla změřena experimentálně; nejlepší výsledek, získaný poměrně nedávno,⁴⁵⁾ je

$$f = \omega/2\pi = (1\,420\,405\,751,800 \pm 0,028) \text{ Hz}. \quad (10.26)$$

Chyba představuje jen dvě stomiliardtiny! Pravděpodobně žádná základní fyzikální veličina není změřena přesněji než tato – co do přesnosti je to jedno z nejvydařenějších měření ve fyzice. Teoretici byli velice šťastni, že dokázali vypočítat energii s přesností $3 \cdot 10^{-3}$, ale mezitím byla změřena na 2 stomiliardtiny – milionkrát přesněji než zjistila teorie. Takže experimentátoři jsou daleko před teoretiky. V teorii základního stavu atomu vodíku jsme oba ve stejné situaci – i vy, i my. Vždyť i vy můžete hodnotu A převzít z experimentu – konec konců to jednou musí udělat každý.

Pravděpodobně jste už někdy zaslechli něco o „21 cm čáře“ vodíku. Je to vlnová délka spektrální čáry o frekvenci 1420 MHz mezi hyperjemnými stavy. Záření této vlnové délky emituje nebo absorbuje galaktický atomový vodíkový plyn. Takže pomocí radioteleskopů naladěných na 21 cm vlny (nebo přibližně na 1420 MHz) můžeme pozorovat rychlosti a rozmístění oblastí se zvýšenou koncentrací atomového vodíku. Měřením intenzity lze odhadnout jeho množství. Určením frekvenčního posunu v důsledku Dopplerova efektu lze usuzovat na pohyb plynu v galaxii. To je jeden z velkých programů, které stojí před radioastronomií. Takže nyní hovoříme o něčem velmi reálném a ne o nějakém vykonstruovaném problému.

10.4 ZEEMANŮV JEV

Ačkoliv jsme úlohu najít energetické hladiny základního stavu atomu vodíku úspěšně zvládli, budeme ve zkoumání této zajímavé soustavy pokračovat. Abychom o ní mohli říci více, např. abychom dokázali vypočítat rychlost, jakou vodíkový atom absorbuje, případně emituje rádiové vlny délky 21 cm, musíme vědět, jak reaguje na to, když je vystaven vlivu nějaké poruchy. Musíme postupovat tak jako u molekuly amoniaku. Když jsme našli energetické hladiny, zjišťovali jsme, co se stane, vložíme-li molekulu do elektrického pole. Pak už nebylo těžké rozebrat vliv elektrického pole rádiové vlny. V případě vodíkového atomu se s hladinami v elektrickém poli nic neděje, kromě toho, že se všechny posunou o nějakou konstantní hodnotu úměrnou druhé mocnině intenzity pole. To však není zajímavé, neboť se nezmění *rozdíly* energií. Významný bude účinek *magnetického pole*. Další krok bude tedy v tom, že najdeme hamiltonián pro složitější situaci, kdy se atom nachází ve vnějším magnetickém poli.

Jak příslušný hamiltonián vypadá? Nezbyvá nám nic jiného, než odpověď prozradit, neboť vám nemůžeme poskytnout žádný „důkaz“; můžeme jediné říci, že právě tak to v atomu funguje.

Hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = A(\sigma^e \cdot \sigma^p) - \mu_e \sigma^e \cdot \mathbf{B} - \mu_p \sigma^p \cdot \mathbf{B}. \quad (10.27)$$

⁴⁵⁾ Crampton, Kleppner a Ramsey; Physical Review Letters, 11, 338 (1963).

Skládá se ze tří částí. První člen $A\sigma^e \cdot \sigma^p$ odpovídá magnetické interakci mezi elektronem a protonem – ta je stejná jako v případě, kdy vnější magnetické pole neexistuje. S tímto výrazem jsme se už setkali; vliv magnetického pole na konstantu A lze zanedbat. Účinek vnějšího magnetického pole se projevuje v posledních dvou členech. První z nich, $-\mu_e \sigma^e \cdot B$, představuje energii, jakou by měl samotný elektron v magnetickém poli.⁴⁶⁾ Stejný význam má i člen $-\mu_p \sigma^p \cdot B$, ale pro proton. V klasickém případě by energie obou částic byla součtem jejich jednotlivých energií; v kvantové mechanice platí přesně totéž. Interakční energie vznikající v důsledku přítomnosti magnetického pole je dána součtem interakční energie elektronu s uvedeným polem a interakční energie protonu s tímž vnějším polem; obě jsou vyjádřeny pomocí operátorů sigma. V kvantové mechanice to však ve skutečnosti nejsou energie, ale odkaz na klasické vztahy pro energii nám pomůže zapamatovat si pravidla pro konstrukci hamiltoniánu. V každém případě rovnice (10.27) představuje správný hamiltonián.

Nyní se musíme vrátit na samý začátek a projít celou úlohu znovu. Velkou část práce však už máme za sebou; je jen třeba přičíst účinky nových členů. Předpokládejme, že magnetické pole B je konstantní a má směr osy z . Pak musíme k našemu Hamiltonovu operátoru \hat{H} přidat dva nové členy, které označíme \hat{H}'

$$\hat{H}' = (\mu_e \sigma_z^e + \mu_p \sigma_z^p) B.$$

Použitím *tab. 10.1* dostaneme ihned, že

$$\begin{aligned} \hat{H}' |++\rangle &= -(\mu_e + \mu_p) B |++\rangle \\ \hat{H}' |+-\rangle &= -(\mu_e - \mu_p) B |+-\rangle \\ \hat{H}' |-+\rangle &= -(-\mu_e + \mu_p) B |-+\rangle \\ \hat{H}' |--\rangle &= +(\mu_e + \mu_p) B |--\rangle. \end{aligned} \tag{10.28}$$

Jak pohodlné! Působení operátoru \hat{H}' na každý stav dává tentýž stav vynásobený nějakým číselným koeficientem. Matice $\langle i | \hat{H}' | j \rangle$ proto bude obsahovat jen *diagonální* členy – jednoduše tedy stačí koeficienty v (10.28) přičíst k odpovídajícím diagonálním členům (10.13) a dostaneme výslednou Hamiltonovu matici. Hamiltonovy rovnice (10.14) pak budou vypadat takto

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= \{A - (\mu_e + \mu_p) B\} C_1 \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\{A + (\mu_e - \mu_p) B\} C_2 + 2AC_3 \\ i\hbar \frac{dC_3}{dt} &= 2AC_2 - \{A - (\mu_e - \mu_p) B\} C_3 \\ i\hbar \frac{dC_4}{dt} &= \{A + (\mu_e + \mu_p) B\} C_4. \end{aligned} \tag{10.29}$$

⁴⁶⁾ Uvědomte si, že klasicky $U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$, takže energie získává nejmenší hodnotu, je-li magnetický moment orientován ve směru pole. Kladně nabitě částice mají magnetický moment rovnoběžný se spinem; pro záporně nabitě částice je to naopak. Takže v rovnici (10.27) je μ_p *kladné* číslo a μ_e *záporné*.

Tvar rovnic je stejný, liší se jen koeficienty. Pokud se B nemění s časem, můžeme pokračovat tak jako předtím. Položíme $C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}$ a dostaneme (jako jistou modifikaci rovnic (10.18)):

$$\begin{aligned} E a_1 &= \{A - (\mu_e + \mu_p)B\} a_1 \\ E a_2 &= -\{A + (\mu_e - \mu_p)B\} a_2 + 2A a_3 \\ E a_3 &= 2A a_2 - \{A - (\mu_e + \mu_p)B\} a_3 \\ E a_4 &= \{A + (\mu_e + \mu_p)B\} a_4. \end{aligned} \quad (10.30)$$

Naštěstí první a čtvrtá rovnice opět nezávisí na ostatních, takže se uplatní tentýž postup.

Jedním řešením je stav $|I\rangle$, pro který $a_1 = 1$, $a_2 = a_3 = a_4 = 0$ neboli

$$|I\rangle = |1\rangle = |++\rangle$$

s

$$E_I = A - (\mu_e + \mu_p)B. \quad (10.31)$$

Další stav je

$$|II\rangle = |4\rangle = |--\rangle$$

s

$$E_{II} = A + (\mu_e + \mu_p)B. \quad (10.32)$$

Se zbylými dvěma rovnicemi budeme mít trochu více práce, neboť koeficienty u a_2 a a_3 už si navzájem rovné nejsou. Ale zato jsou podobné rovnicím, které jsme odvodili u molekuly amoniaku. Podíváme-li se zpět na rovnice (7.20), můžeme použít následující analogii (je však třeba si uvědomit, že tamní indexy 1 a 2 odpovídají nyníjším indexům 2 a 3):

$$\begin{aligned} H_{11} &\rightarrow -A - (\mu_e - \mu_p)B \\ H_{12} &\rightarrow 2A \\ H_{21} &\rightarrow 2A \\ H_{22} &\rightarrow -A + (\mu_e - \mu_p)B. \end{aligned} \quad (10.33)$$

Energie jsou dány rovnicí (7.25), která měla tvar

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (10.34)$$

Po substituci z (10.33) pro energii dostaneme vztah

$$E = -A \pm \sqrt{(\mu_e - \mu_p)^2 B^2 + 4A^2}.$$

V 7. kapitole jsme tyto energie obvykle označovali E_I a E_{II} ; nyní je nazveme E_{III} a E_{IV} :

$$\begin{aligned} E_{III} &= A \left\{ -1 + 2\sqrt{1 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2 / 4A^2} \right\} \\ E_{IV} &= -A \left\{ 1 + 2\sqrt{1 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2 / 4A^2} \right\}. \end{aligned} \quad (10.35)$$

Našli jsme tedy energie čtyř stacionárních stavů atomu vodíku nacházejícího se v konstantním magnetickém poli. Ověřme si naše výsledky: Nechme B přibližovat se k nule a podívejme se, zda dojdeme k týmž energiím jako v předcházející části. Vidíme, že ano. U $B=0$ jsou energie E_I , E_{II} a E_{III} rovny $+A$ a $E_{IV} = -3A$. Ještě i číslování stavů souhlasí s předešlým. Když však zapneme magnetické pole, každá energie se změní jiným způsobem. Podívejme se jak.

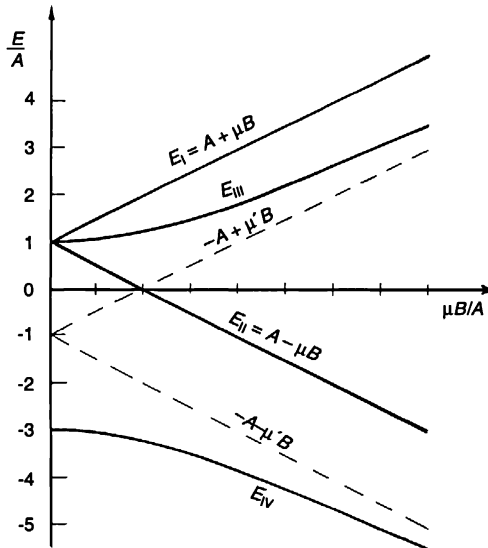
Zprv je třeba zmínit, že μ_e elektronu nabývá záporné hodnoty a je asi 1000 krát větší než μ_p , které je kladné. Takže $(\mu_e + \mu_p)$, stejně jako $(\mu_e - \mu_p)$ jsou záporná, zhruba stejná čísla. Označme je $-\mu$ a $-\mu'$:

$$\mu = -(\mu_e + \mu_p), \quad \mu' = -(\mu_e - \mu_p). \quad (10.36)$$

(Obě čísla, μ a $-\mu'$, jsou kladná, přibližně rovna velikosti μ_e , což je asi jeden Bohrov magneton.) Naše čtveřice energií bude vypadat takto

$$\begin{aligned} E_I &= A + \mu B \\ E_{II} &= A - \mu B \\ E_{III} &= A \{-1 + 2\sqrt{1 + \mu'^2 B^2 / 4A^2}\} \\ E_{IV} &= -A \{1 + 2\sqrt{1 + \mu'^2 B^2 / 4A^2}\}. \end{aligned} \quad (10.37)$$

Energie E_I začíná od hodnoty A a s B roste lineárně se směrnicí μ . Energie E_{II} taktéž vychází z hodnoty A , ale s rostoucím B lineárně klesá se směrnicí $-\mu$.

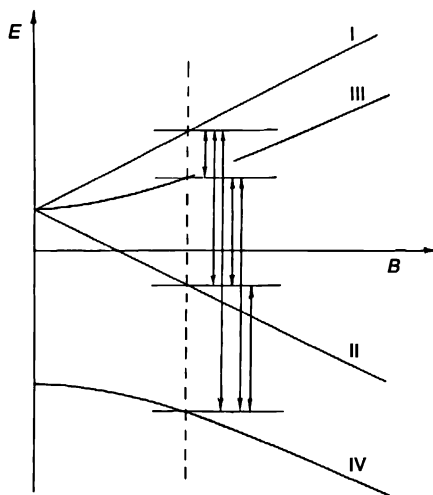


Obr. 10.3 Energetické hladiny základního stavu atomu vodíku nacházejícího se v magnetickém poli B

Tyto dvě hladiny se s energií mění tak, jak naznačuje obr. 10.3. Na něm jsou zakresleny i energie E_{III} a E_{IV} . Jejich závislost na B je jiná. Při malých hodnotách B je kvadratická; na počátku je první derivace obou podle B rovna nule. S rostoucím B se začnou zakřivovat a při

velkých hodnotách B se blíží k přímkám se směrnicemi $\pm \mu'$, které se jen málo liší od směrnic pro energie E_I a E_{II} .

Posun energetických hladin atomu, který je vyvolán působením magnetického pole se nazývá *Zeemanův jev*. Říkáme, že křivky na *obr. 10.3* znázorňují *zeemanovské rozštěpení* základního stavu atomu vodíku. Bez přítomnosti magnetického pole dostaneme díky hyperjemné struktuře právě jednu spektrální čáru. Přechody mezi stavem $|IV\rangle$ a libovolným jiným jsou provázeny absorpcí nebo emisí fotonu, jehož frekvence $1/420$ MHz je $1/h$ -násobkem energetického rozdílu $4A$. Nachází-li se však atom v magnetickém poli B , je čar mnohem víc. Přechody mohou nastat mezi libovolnou dvojicí stavů. Jsou-li mezi atomy zastoupeny všechny čtyři stavy, může docházet k absorpci nebo emisi při jakémkoliv ze šesti přechodů, naznačených na *obr. 10.4* svislými šipkami. Mnohé z nich lze pozorovat pomocí Rabiho metody molekulových svazků, kterou jsme popsali ve stati 35.3 dílu 2.



Obr. 10.4 Přechody mezi jednotlivými energetickými hladinami základního stavu atomu vodíku v daném magnetickém poli B

Co vyvolá zmíněné přechody? Dojde k nim, když kromě silného pole B přiložíme ještě slabé, s časem se měnící poruchové magnetické pole. Přesně tak jako v případě molekuly amoniaku, kde tuto úlohu sehrálo proměnné elektrické pole. Nyní však je to magnetické pole, které váže magnetické momenty a vyvolává přechody. Teorie však postupuje stejným způsobem jako u amoniaku. Nejjednodušší bude tehdy, kdy poruchové magnetické pole rotuje v rovině xy , ačkoliv pro naše účely by stačilo libovolné oscilující horizontální pole. Zahrneme-li toto poruchové pole do hamiltoniánu ve formě dodatečného členu, dostaneme řešení, v nichž amplitudy závisí na čase – tak, jak tomu bylo u molekuly amoniaku. Takže si můžeme velice snadno a přesně spočítat pravděpodobnost přechodu z jednoho stavu do druhého. Zjistíme, že vše souhlasí s experimentem.

10.5 STAVY V MAGNETICKÉM POLI

Nyní si blíže všimněme tvaru křivek na *obr. 10.3*. Zaprvé, pro případ silných magnetických polí vypadá závislost energie na B poměrně zajímavě a lze ji snadno objasnit. Pro dostatečně velké

hodnoty B (tj. pro $\mu B/A \gg 1$) můžeme ve vztazích (10.37) zanedbat faktor 1. Čtveřice energií přejde do tvaru

$$\begin{aligned} E_I &= A + \mu B, & E_{II} &= A - \mu B \\ E_{III} &= -A + \mu' B, & E_{IV} &= -A - \mu' B. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Jsou to rovnice čtyř přímků na obr. 10.3. Fyzikálně jim lze porozumět následujícím způsobem. Charakter stacionárních stavů je v nulovém poli podmíněn výlučně interakcí obou magnetických momentů. Smíšené báze stavů $|+-\rangle$ a $| -+\rangle$ ve stavech $|III\rangle$ a $|IV\rangle$ je způsobeno právě touto interakcí. V silných magnetických polích však sotva lze očekávat, že by proton nebo elektron pocítoval vliv pole jeden na druhého; každý z nich se bude chovat tak, jako kdyby se ve vnějším poli nacházel sám. Jak jsme už mnohokrát viděli, spin elektronu pak bude orientován buď ve směru, nebo proti směru vnějšího magnetického pole.

Předpokládejme, že elektron má spin orientovaný směrem nahoru, tj. ve směru pole; jeho energie bude $-\mu_e B$. Proton má stále ještě na výběr. Míří-li jeho spin také nahoru, bude mít energii $-\mu_p B$. Součet obou energií dává $-(\mu_e + \mu_p)B = \mu B$. Tentýž výraz jsme dostali pro energii E_I ; což je dobře, neboť popisujeme stav $|++\rangle = |I\rangle$. Vystupuje tu sice ještě malý dodatečný člen A , odpovídající interakční energii elektronu a protonu s rovnoběžnými spiny, ale je mnohem menší než μB . (Od samého začátku jsme považovali A za kladné číslo, protože z teorie, o níž byla řeč, to vyplývá. Experiment naši volbu jen potvrzuje.) Na druhé straně může být spin protonu otočen směrem dolů. Jeho energie ve vnějším poli se změní na $+\mu_p B$, takže spolu s elektronem bude jejich energie $-(\mu_e - \mu_p)B = \mu' B$. Navíc přistoupí ještě interakční energie $-A$. Součet dává právě energii E_{III} v (10.38). Pro velká pole musí proto stav $|III\rangle$ přejít do stavu $|+-\rangle$.

Nyní uvažujme případ, kdy spin elektronu směřuje dolů. Energie elektronu ve vnějším poli je $\mu_e B$. Je-li spin protonu otočen taktéž směrem dolů, mají oba dohromady energii $(\mu_e + \mu_p)B = \mu B$, plus ještě interakční energie A , neboť mají rovnoběžné spiny. Je to přesně energie E_{II} v (10.38) a odpovídá stavu $|--\rangle = |II\rangle$, což je velmi milé. Nakonec, je-li spin elektronu obrácen dolů a spin protonu nahoru, vyjde nám celková energie $(\mu_e - \mu_p)B - A$ ($-A$ proto, že spiny jsou navzájem opačně orientovány), což je právě energie E_{IV} , která odpovídá stavu $| -+\rangle$.

„Okamžik“, namítnete. „Stavy $|III\rangle$ a $|IV\rangle$ nejsou stavy $|+-\rangle$ a $| -+\rangle$, ale jejich směšť.“ Máte sice pravdu, ale v tomto případě nestojí jejich vzájemné mísení za řeč. Pro $B=0$ jsou stavy $|III\rangle$ a $|IV\rangle$ opravdu kombinací stavů $|+-\rangle$ a $| -+\rangle$, ale pro velké B jsme zatím ještě nezjistili, jak vypadají. Když už jsme k získání stacionárních stavů použili analogii mezi (10.33) a vztahy 7. kapitoly, bylo by dobré dojít týmž způsobem i k amplitudám. Dostaneme je ze vztahu (7.23):

$$\frac{a_2}{a_3} = \frac{E - H_{22}}{H_{11}}.$$

Poměr a_2/a_3 je totožný s poměrem C_2/C_3 . Dosazením odpovídajících veličin z (10.23) dojdeme k výrazu

$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A - (\mu_e - \mu_p)B}{2A}$$

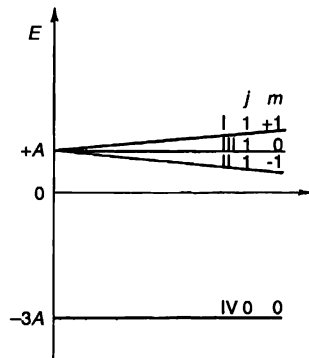
neboli

$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A + \mu' B}{2A}, \quad (10.39)$$

kde za E_j třeba dosadit příslušnou energii (buď E_{III} , nebo E_{IV}). Například pro stav $|\text{III}\rangle$ máme

$$\left(\frac{C_2}{C_3} \right)_{\text{III}} \approx \frac{\mu' B}{A}. \quad (10.40)$$

To znamená, že pro velké B pro stav $|\text{III}\rangle$ platí: $C_2 \gg C_3$, takže se téměř zcela shoduje se stavem $|2\rangle = |+-\rangle$. Podobně, dosadíme-li do (10.39) E_{IV} , dojdeme k tomu, že $(C_2/C_3)_{\text{IV}} \ll 1$; pro silná pole bude stav E_{IV} téměř totožný se stavem $|3\rangle = |-+\rangle$. Je vidět, že v těch lineárních kombinacích našich básových stavů, které vytvářejí stacionární stavy, závisejí i koeficienty na B . V přítomnosti velmi slabých polí představuje stav, který označujeme jako $|\text{III}\rangle$, směs stavů $|+-\rangle$ a $|-+\rangle$ v poměru 1 : 1; u silných polí se však váhy téměř zcela nakloní na stranu $|+-\rangle$.



Obr. 10.5 Stavy vodíkového atomu ve slabých magnetických polích

Podobně je tomu i pro stav $|\text{IV}\rangle$. Na jeho vytvoření se při slabých polích taktéž podílejí stavy $|+-\rangle$ a $|-+\rangle$ stejným dílem (ale s opačným znaménkem); v přítomnosti silného vnějšího pole, které způsobuje to, že spiny obou částic nebudou navzájem vázány, však přechází do stavu $|-+\rangle$.

Rádi bychom obrátili vaši pozornost zejména k tomu, co se děje ve *velmi slabých* magnetických polích. Jedna energie ($-3A$) se v nich *nezmění*, ale druhá ($+A$) se rozštěpí na tři různé energetické hladiny. Energie se s B mění tak, jak ukazuje obr. 10.5. Představme si, že jsme určitým způsobem shromáždili určité množství atomů vodíku, které všechny mají energii $-3A$. Kdybychom je propouštěli Sternovým-Gerlachovým přístrojem (v němž nejsou příliš silná pole), zjistili bychom, že jím prostě proletí přímým směrem. (Jelikož jejich energie nezávisí na B , podle principu virtuální práce na ně nepůsobí gradient magnetického pole žádnou silou.) Na druhé straně uvažujme případ, že bychom vybrali svazek atomů s energií $+A$ a vpouštěli ho do Sternova-Gerlachova přístroje, řekněme typu S. (Pole v přístroji by opět neměla být tak velká, aby narušila nitro atomu; máme na mysli natolik slabá pole, že závislost energie na B lze považovat za lineární.) Našli bychom *tři svazky*. Na stavy $|\text{I}\rangle$ a $|\text{II}\rangle$ působí opačné síly – jejich energie se s B mění lineárně se směnicemi $\pm \mu$, takže dostáváme analogii se *silami* působícími na magnetický dipól s $\mu_z = \pm \mu$; stav $|\text{III}\rangle$ projde nedotknut napříč přístrojem. Znovu se vracíme k 3. kapitole. *Vodíkový atom s energií $+A$ je částice se spinem 1*. Tento energetický stav se ukazuje být „částicí“, pro níž $j = 1$, a lze jej popsat (vzhledem k určité soustavě os v prostoru) pomocí básových stavů $|+S\rangle$, $|0S\rangle$ a $|-S\rangle$ používaných v 3. kapitole. Na druhou stranu, atom vodíku s energií $-3A$ představuje částici se spinem 0.

(Uvědomme si, že to, co tvrdíme, platí, přísně vzato, jen pro nekonečně malá magnetická pole.) Stav atomu vodíku můžeme proto roztřídit do těchto skupin:

$$\left. \begin{aligned} |I\rangle &= |++\rangle \\ |III\rangle &= \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |II\rangle &= |--\rangle \end{aligned} \right\} \text{spin } 1 \quad \left\{ \begin{aligned} &|+S\rangle \\ &|0S\rangle \\ &|-S\rangle \end{aligned} \right. \quad (10.41)$$

$$|IV\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{spin } 0. \quad (10.42)$$

V 35. kapitole 2. dílu jsme řekli, že pro libovolnou částici může její složka momentu hybnosti podél jakékoliv osy nabývat pouze určité hodnoty, lišící se vždy o \hbar . z-ová složka momentu hybnosti J_z může být rovna jen $j\hbar$, $(j-1)\hbar$, $(j-2)\hbar$, ..., $(-j)\hbar$, kde j je spin částice (ten může být buď celočíselný, nebo poločíselný). Ačkoliv jsme to tehdy nezmiňovali, obvykle se píše

$$J_z = m\hbar, \quad (10.43)$$

kde si pod m můžeme představit libovolné z čísel $j, j-1, j-2, \dots, -j$. V knihách se proto setkáme s tím, že autoři označují čtyři základní stavy atomu vodíku tzv. *kvantovými čísly* j a m (často se nazývají kvantovým číslem celkového momentu hybnosti (j) a magnetickým kvantovým číslem (m)).

Tabulka 10.3: Stav atomu vodíku v nulovém magnetickém poli

Stav $ j, m\rangle$	j	m	Naše označení
$ 1, +1\rangle$	1	1	$ I\rangle = +S\rangle$
$ 1, 0\rangle$	1	0	$ III\rangle = 0S\rangle$
$ 1, -1\rangle$	1	-1	$ II\rangle = -S\rangle$
$ 0, 0\rangle$	0	0	$ IV\rangle$

Pak místo našich symbolů $|I\rangle$ a $|II\rangle$ atd. budou zapisovat stav jako $|j, m\rangle$. Náš soubor stavů pro nulové pole v (10.41) a (10.42) by vyjádřili ve tvaru *tab. 10.3*. Není v tom žádná nová fyzika, je to čistě jen věc označení.

10.6 PROJEKČNÍ MATICE PRO SPIN 1⁴⁷⁾

Nyní bychom rádi využili naše poznatky o atomu vodíku při řešení jedné speciální úlohy. V 3. kapitole jsme hovořili o tom, že nachází-li se částice se spinem 1 v jednom z básových stavů

⁴⁷⁾ Těm, kteří se rozhodli přeskochit 4. kapitolu, radíme vynechat i tuto část.

(+, 0, -) vzhledem k Sternovu-Gerlachovu přístroji s konkrétní orientací v prostoru (řekněme vzhledem k přístroji S), budou pro ni existovat jisté amplitudy toho, že ji najdeme v každém ze tří báзовých stavů vzhledem k přístroji T , jehož prostorové umístění je jiné. Těchto amplitud $\langle jT|iS \rangle$ je devět a dohromady vytvářejí projekční matici. Ve stati 3.7 jsme bez důkazu uvedli její prvky pro různé vzájemné orientace přístroje T vzhledem k S . Nyní vám ukážeme jeden ze způsobů jejich odvození.

Zjistili jsme, že vodíkový atom představuje soustavu se spinem jedna, tvořenou dvěma částicemi se spinem $1/2$. Už ve 4. kapitole jsme vypracovali způsob transformace amplitud pro spin $1/2$. Tento poznatek můžeme využít při odvození transformace pro spin 1. Dělá se to takto: Máme soustavu – atom vodíku s energií $+A$ – která má spin 1. Předpokládejme, že jej necháme projít Sternovým-Gerlachovým filtrem S , takže víme, že se nachází v jednom z báзовých stavů vzhledem k S , řekněme ve stavu $|+S\rangle$. Jaká je amplituda toho, že jej najdeme v některém báзовém stavu přístroje T , řekněme $|+T\rangle$? Nazveme-li souřadnicovou soustavu spojenou s přístrojem S x, y, z bude $|+S\rangle$ právě ten stav, který jsme označovali $|++\rangle$. Představte si však, že váš přítel si jako osu zvolí osu přístroje T . Své vztahy bude vztahovat k soustavě x', y' a z' . Jeho stavy nahoru a dolů pro elektron a proton budou odlišné od našich. Jeho stav „plus-plus“ (který můžeme zapsat jako $|+'+'\rangle$, abychom vyjádřili, že se vztahuje k čárkované soustavě) je stavem $|+T\rangle$ částice se spinem 1. Chceme najít $\langle +T|+S \rangle$, což je jen jiným způsobem zápisu amplitudy $\langle +'+'|++ \rangle$.

Amplitudu $\langle +'+'|++ \rangle$ můžeme najít takto. V naší souřadnicové soustavě má *elektron* ve stavu $|++\rangle$ spin mířící nahoru. To znamená, že má jistou amplitudu $\langle +'|+\rangle_e$, aby byl ve své soustavě orientován nahoru a jistou amplitudu $\langle -'|+\rangle_e$ pro orientaci dolů. Podobně má *proton* ve stavu $|++\rangle$ spin nahoru a amplitudy $\langle +'|+\rangle_p$ a $\langle -'|+\rangle_p$ toho, že v čárkované soustavě bude orientován nahoru nebo dolů. Jelikož hovoříme o dvou rozlišitelných částicích, amplituda toho, že váš přítel najde ve *své* soustavě souřadnic *obě* částice se spinem nahoru, bude součinem obou částečných amplitud

$$\langle +'+'|++ \rangle = \langle +'|+\rangle_e \langle +'|+\rangle_p. \quad (10.44)$$

K amplitudám $\langle +'|+\rangle$ jsme přidali indexy e a p , aby bylo zřejmé, co jsme dělali. Obě jsou však obyčejnými transformačními amplitudami pro částici se spinem $1/2$, takže to ve skutečnosti jsou identická čísla. Jsou to vlastně amplitudy, které jsme ve 4. kapitole označovali $\langle +T|+S \rangle$ a které jsme tam shrnuli do tabulek.

Nyní nám však moc nechybí, abychom se dostali do problémů s označováním. Musíme být schopni odlišit amplitudu $\langle +T|+S \rangle$ částice *se spinem* $1/2$ od toho, co jsme *taktéž* nazvali $\langle +T|+S \rangle$ pro částici *se spinem* 1 – jsou to přece zcela rozdílné veličiny! Doufáme, že vás to nepoplete, avšak alespoň *pro tuto chvíli* budeme muset používat pro amplitudy spinu $1/2$ nějaké jiné symboly. Abychom vám pomohli udržet si v hlavě jasno, shrnuli jsme nová označení do *tab. 10.4*. Pro stavy částice se spinem 1 budeme nadále používat symboly $|+S\rangle$, $|0S\rangle$ a $|-S\rangle$.

Tabulka 10.4: Amplitudy pro spin $1/2$

Tato kapitola	4. kapitola
$a = \langle +' +\rangle$	$\langle +T +S \rangle$
$b = \langle -' +\rangle$	$\langle -T +S \rangle$
$c = \langle +' -\rangle$	$\langle +T -S \rangle$
$d = \langle -' -\rangle$	$\langle -T -S \rangle$

Rovnice (10.44) vypadá v novém zápisu jednoduše

$$\langle +'+' | ++ \rangle = a^2,$$

a to je právě amplituda $\langle +T | +S \rangle$ pro *spin* 1. Předpokládejme, například, že soustava souřadnic vašeho kamaráda, tj., T nebo „čárkovaný“ přístroj, je otočená o úhel φ kolem *naší* osy z ; pak z *tab. 4.2* dostáváme

$$a = \langle +' | + \rangle = e^{i\varphi/2}.$$

Z rovnice (10.44) dojdeme k tomu, že amplituda pro spin 1 je

$$\langle +T | +S \rangle = \langle +'+' | ++ \rangle = (e^{i\varphi/2})^2 = e^{i\varphi}. \quad (10.45)$$

Zde je možné vidět, jak to bude pokračovat.

Nyní si probereme obecný případ pro všechny stavy. Míří-li oba spiny elektronu i protonu v *naší* soustavě souřadnic S nahoru, amplitudy toho, že se tento stav bude nacházet v *libovolném* ze *čtyř* možných básových stavů soustavy T vašeho přítele, jsou

$$\begin{aligned} \langle +'+' | ++ \rangle &= \langle +' | + \rangle_e \langle +' | + \rangle_p = a^2 \\ \langle +'-' | ++ \rangle &= \langle +' | + \rangle_e \langle -' | + \rangle_p = ab \\ \langle -'+' | ++ \rangle &= \langle -' | + \rangle_e \langle +' | + \rangle_p = ba \\ \langle -'-' | ++ \rangle &= \langle -' | + \rangle_e \langle -' | + \rangle_p = b^2. \end{aligned} \quad (10.46)$$

Stav $|++\rangle$ proto můžeme psát ve tvaru následující lineární kombinace

$$|++\rangle = a^2 |+'+' \rangle + ab \{|+'-' \rangle + |-'+' \rangle\} + b^2 |-'-' \rangle. \quad (10.47)$$

Všimneme si, že $|+'+' \rangle$ je stav $|+T\rangle$, že $\{|+'-' \rangle + |-'+' \rangle\}$ je právě $\sqrt{2}$ -násobkem stavu $|0T\rangle$ (viz 10.41) a že $|-'-' \rangle = |-T\rangle$. Jinak řečeno, rovnici (10.47) lze přepsat takto

$$|+S\rangle = a^2 |+T\rangle + \sqrt{2} ab |0T\rangle + b^2 |-T\rangle. \quad (10.48)$$

Podobným způsobem snadno ukážeme, že

$$|-S\rangle = c^2 |+T\rangle + \sqrt{2} cd |0T\rangle + d^2 |-T\rangle. \quad (10.49)$$

Pro $|0S\rangle$ je situace trochu složitější, protože

$$|0S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+-\rangle + |-+\rangle\}.$$

Každý ze stavů $|+-\rangle$ a $|-+\rangle$ však umíme vyjádřit pomocí čárkovaných stavů, a pak vezmeme jejich součet. Tj.

$$|+-\rangle = ac |+'+' \rangle + ad |+'-' \rangle + bc |-'+' \rangle + bd |-'-' \rangle \quad (10.50)$$

a

$$|-\rangle = ac|+'+' \rangle + bc|+'-' \rangle + ad|-'+' \rangle + bd|-'-' \rangle. \quad (10.51)$$

Vezmeme-li $1/\sqrt{2}$ -násobek jejich součtu, máme

$$|0S\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}} ac|+'+' \rangle + \frac{ad+bc}{\sqrt{2}} \{|+'-' \rangle + |-'+' \rangle\} + \frac{2}{\sqrt{2}} bd|-'-' \rangle$$

Z toho vyplývá, že

$$|0S\rangle = \sqrt{2} ac|+T\rangle + (ad+bc)|0T\rangle + \sqrt{2} bd|-T\rangle. \quad (10.52)$$

Máme všechny amplitudy, které jsme chtěli. Koefficienty v rovnicích (10.48), (10.49) a (10.52) jsou maticové elementy $\langle jT|iS\rangle$. Shrňme je všechny dohromady

$$\langle jT|iS\rangle = jT \begin{pmatrix} a^2 & \sqrt{2} ac & c^2 \\ \sqrt{2} ab & ad+bc & \sqrt{2} cd \\ b^2 & \sqrt{2} bd & d^2 \end{pmatrix}. \quad (10.53)$$

Transformaci spinu 1 jsme vyjádřili pomocí amplitud a, b, c, d pro transformaci spinu $1/2$.

Je-li např. soustava souřadnic T otočena vzhledem k S o úhel α kolem osy y (jako na obr. 3.6), jsou amplitudy v tab. 10.4 totožné s maticovými elementy $R_y(\alpha)$ v tab. 4.2.

$$\begin{aligned} a &= \cos \frac{\alpha}{2}, & b &= -\sin \frac{\alpha}{2} \\ c &= \sin \frac{\alpha}{2}, & d &= \cos \frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \quad (10.54)$$

Dosadíme-li je do (10.53), dostaneme právě vztahy (3.38), které jsme tehdy uvedli bez důkazu.

A co se stalo se stavem $|IV\rangle$? Je to soustava se spinem 0, takže má pouze jeden stav – *stejný ve všech souřadnicových soustavách*. Lze snadno prověřit, že je tomu tak. Vezmeme rozdíl rovnic (10.50) a (10.51); dostaneme

$$|+-\rangle - |-\rangle = (ad-bc) \{|+'-' \rangle - |-'+' \rangle\}.$$

Ale $(ad-bc)$ je determinant matice pro spin $1/2$, a je tedy roven 1. Proto platí

$$|IV'\rangle = |IV\rangle$$

pro libovolnou vzájemnou orientaci dvou souřadnicových soustav.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 10.1 ■ Vypočítejte velikost rozštěpení energetické hladiny atomu vodíku s $j = 1$ v mezihvězdném prostoru, kde má magnetické pole hodnotu 10^{-9} T , na povrchu Země (asi $5 \cdot 10^{-5} \text{ T}$) a v nejsilnějším magnetickém poli, které umíme vytvořit v laboratorních podmínkách (řádově 10 T). Odpověď vyjádřete pomocí frekvence a vlnové délky.

Pohyb elektronu v krystalové mřížce

- 11.1 STAVY ELEKTRONU V JEDNOROZMĚRNÉ MŘÍŽCE
- 11.2 STAVY S PŘESNĚ URČENOU HODNOTOU ENERGIE
- 11.3 STAVY ZÁVISLÉ NA ČASE
- 11.4 ELEKTRON V TROJROZMĚRNÉ MŘÍŽCE
- 11.5 JINÉ STAVY ELEKTRONU V MŘÍŽCE
- 11.6 ROZPTYL NA PORUCHÁCH MŘÍŽKY
- 11.7 ZACHYCENÍ NA ATOMU PŘÍMĚSI V MŘÍŽCE
- 11.8 AMPLITUDY ROZPTYLU A VÁZANÉ STAVY

11.1 STAVY ELEKTRONU V JEDNOROZMĚRNÉ MŘÍŽCE

Na první pohled by se mohlo zdát, že nízkoenergetický elektron může jen velmi obtížně projít pevným krystalem. Atomy jsou uspořádány tak hustě u sebe, že jejich středy jsou od sebe vzdáleny řádově několik stamiliontin centimetru a efektivní průměr atomu pro rozptyl elektronu je přibližně stamiliontina centimetru. Atomy zabírají velkou část prostoru, a proto bychom očekávali, že střední volná dráha mezi dvěma srážkami bude mít velikost řádově stamiliontiny centimetru, což je prakticky nulová vzdálenost. Domnívali bychom se, že elektron bude téměř ustavičně vrážet do atomů. Všude v přírodě se však ukazuje, že je-li mřížka ideální, mohou elektrony snadno a bez překážek putovat krystalem, jako kdyby byly ve vakuu. Tento zvláštní jev je příčinou toho, proč kovy tak dobře vedou elektrický proud. Kromě toho umožnil i vývoj mnoha užitečných zařízení, např. tranzistoru, který nahradil elektronku. V ní se elektrony pohybují volně vakuem, v tranzistoru se také pohybují volně krystalovou mřížkou. V této kapitole popíšeme principy vysvětlující chování tranzistoru a v další uvedeme jejich praktické využití v různých zařízeních.

Vodivost elektronu v krystalu je ukázkou velmi často se vyskytujícího jevu. Krystalem mohou podobným způsobem putovat nejen elektrony, ale i jiné „věci“, jako např. excitace atomu. S uvedeným jevem, který budeme nyní studovat, se můžeme často setkat v různých formách ve fyzice pevných látek.

Určitě si vzpomínáte na mnohé příklady dvojhladinových systémů, které jsme probírali v předcházejících kapitolách. Uvažujme elektron, který se může nacházet v jedné ze dvou možných poloh; v každé z nich je ve stejných vnějších podmínkách. Předpokládejme, že existuje určitá amplituda toho, že elektron přejde v jedné ze dvou možných poloh; v každé z nich je ve stejných vnějších podmínkách. Předpokládejme, že existuje určitá amplituda toho, že elektron přejde z jedné polohy do druhé a samozřejmě stejná amplituda pro opačný proces, přesně tak, jak tomu bylo v případě iontu molekuly vodíku ve stati 8.1. Zákony kvantové mechaniky nás přivádějí k těmto výsledkům. Pro elektron existují dva možné stavy s přesně určenými energiemi. Oba stavy můžeme popsat amplitudou toho, že se elektron nachází v každém z nich. Velikosti amplitud jsou v obou stavech konstantní v čase a jejich fáze se v čase mění se stejnými frekvencemi. Vyskytují se na počátku elektron v první poloze, později přejde do druhé a za nějaký čas se opět přehoupne do první polohy. Změny amplitudy jsou podobné pohybům dvou spřažených kyvadel.

Nyní uvažujme ideální krystalovou mřížku a představme si, že elektron, který se nachází u některého atomu, je jakoby v nějaké „jamce“ s konkrétní energií. Dále předpokládejme, že existuje určitá amplituda toho, že se elektron přesune do některé ze dvou sousedních jamek. Připomíná nám to dvojhladinový systém, ale s jednou komplikací navíc. Když se elektron dostane k sousednímu atomu, může se odtud přesunout do další polohy, ale může se i vrátit k původnímu atomu. Tato situace už není podobná *dvěma*, ale *nekonečnému počtu* navzájem spřažených kyvadel. Připomíná nám to jeden z těch přístrojů (vytvoříme jej z dlouhé řady tyček připevněných na zkrouceném drátu), který se používá v úvodním kurzu fyziky k demonstraci šíření vlny.

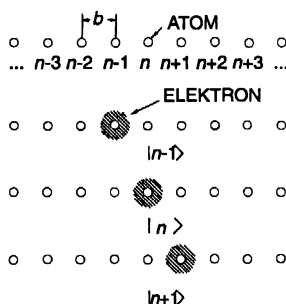
Mějme harmonický oscilátor, který připojíme k dalšímu oscilátoru, ten zase k dalšímu atd.,, Vytvoříme-li na některém místě nepravidelnost, bude se šířit jako vlna. Tatáž situace nastane, umístíme-li elektron k jednomu atomu v dlouhém řetězci atomů.

Mechanickou úlohu nejsnáze řešíme pomocí ustálených vln; je to jednodušší, než řešit problém šíření impulzu, který vznikl na určitém místě. Vzniká totiž obrazec posunutí, který se šíří krystalem jako vlna s jedinou pevnou frekvencí. Totéž se děje (ze stejných důvodů) s elektronem, neboť kvantová mechanika popisuje pohyb elektronu podobnými rovnicemi.

Na jednu věc však nesmíme zapomínat: Nepleťme si amplitudu s pravděpodobností! Amplituda toho, že se elektron nachází na nějakém místě, *není* totožná s pravděpodobností. Kdyby mohl elektron jednoduše téct jako voda z jednoho místa na druhé, bylo by jeho chování zcela jiné. Máme-li např. dvě nádoby s vodou spojené trubicí, vyrovnávají se hladiny exponenciálně. U elektronu však nastává přelévání amplitudy, a ne pravděpodobnosti. Přítomnost imaginárního členu (i v diferenciálních rovnicích kvantové mechaniky) způsobuje, že místo exponenciálních dostáváme harmonická řešení. To, co se tedy objevuje, není nijak podobné přelévání vody mezi spojenými nádobami.

Pokusme se kvantitativně analyzovat kvantově mechanickou situaci. Představme si jednorozměrnou dlouhou řadu atomů, zobrazenou na *obr. 11.1a*. (Krystal je ve skutečnosti trojrozměrný, ale fyzikální situace je v obou případech velmi podobná. Porozumíme-li jednorozměrnému případu, snadno porozumíme i trojrozměrnému.) Nejdříve si všimneme, co se stane, umístíme-li jeden elektron do řady atomů. Reálný krystal obsahuje, přirozeně, miliony elektronů. Většina z nich (v nevodivém krystalu jsou to téměř všechny) se pohybují určitým způsobem kolem svých atomů a vše je tedy docela stacionární. Nás však zajímá, co se stane, přidáme-li jeden elektron

navíc. Nebudeme si všimnout, co se děje s ostatními, jelikož předpokládáme, že ke změně jejich pohybu je potřebná dostatečně velká excitační energie. Přidáme elektron, jako kdybychom chtěli vytvořit slabě vázaný záporný ion, a na základě pozorování toho, co se s ním děje, provedeme přiblížení, které nezávisí na mechanismu vnitřních pohybů v atomech.



Obr. 11.1 Bázové stavy elektronu v jednorozměrném krystalu

Je pravda, že se elektron může přesunout k dalšímu atomu a přenést záporný ion na nové místo. Stejně, jako tomu bylo v případě, kdy elektron přeskakoval mezi dvěma protony, předpokládáme, že elektron může s určitou amplitudou přeskočit k sousednímu atomu. Jak popsat takový systém? Které bázové stavy jsou nejvhodnější? Vybereme je podobným způsobem, jako jsme to dělali v případě, kdy jsme měli jen dvě možné polohy. Nechtějí být v naší posloupnosti atomu všechny vzdálenosti mezi nimi stejné a očíslováme je za sebou tak, jak je to na obr. 11.1a. Jeden bázový stav je ten, kdy je elektron u atomu číslo 6, další bázový stav je tehdy, kdy je elektron u atomu číslo 7 a zase další u atomu číslo 8 atd.: n -tý bázový stav je ten, kdy je elektron u atomu číslo n . Označme jej $|n\rangle$. Z obr. 11.1 je zřejmé, co je myšleno třemi bázovými stavy

$$|n-1\rangle, |n\rangle \text{ a } |n+1\rangle.$$

Každý stav $|\varphi\rangle$ jednorozměrného krystalu lze popsat pomocí zavedených bázových stavů, a to tak, že udáme všechny amplitudy $\langle n|\varphi\rangle$ toho, že se stav $|\varphi\rangle$ nachází v některém bázovém stavu, tj. amplitudy toho, že se elektron vyskytuje u některého atomu. Stav $|\varphi\rangle$ lze proto psát jako superpozici bázových stavů

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\varphi\rangle. \quad (11.1)$$

Dále předpokládejme, že elektron může s určitou amplitudou přeskočit k atomu na jedné nebo druhé straně. Uvažujme nejjednodušší případ, v němž může elektron přecházet pouze k nejbližším sousedům – k těm dalším musí jít nadvakrát. Nechtějí být amplituda toho, že elektron přeskočí k sousednímu atomu, iA/\hbar (za jednotku času).

Změňme označení a amplitudu $\langle n|\varphi\rangle$ toho, že se elektron nachází u n -tého atomu, napíšme jako C_n . Rovnice (11.1) pak bude mít tvar

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle C_n. \quad (11.2)$$

Kdybychom znali amplitudu C_n v některém časovém okamžiku, říkala by nám druhá mocnina její absolutní hodnoty, s jakou pravděpodobností najdeme v daném čase elektron u n -tého atomu.

Jaká bude situace o chvíli později? Hamiltonovy rovnice systému by se na základě analogie s dvojhladinovými systémy měly skládat z následujících rovnic

$$i\hbar \frac{d C_n(t)}{dt} = E_0 C_n(t) - A C_{n+1}(t) - A C_{n-1}(t). \quad (11.3)$$

První koeficient na pravé straně E_0 představuje energii, kterou by měl elektron, kdyby se nemohl odpoutat od atomu. (Veličina E_0 představuje pouze výběr nulové hodnoty na stupnici energií. Je proto jedno, jak ji budeme nazývat.) Další člen je amplituda (za jednotku času) toho, že elektron přeskočí z $(n+1)$ -né do n -té jamky a poslední člen vyjadřuje amplitudu přeskočení z $(n-1)$ -né jamky. Hodnotu A považujeme – jako obvykle – za konstantu (nezávisí na čase).

Aby bylo chování každého stavu $|\varphi\rangle$ úplně popsáno, je třeba napsat rovnici typu (11.3) pro každou amplitudu C_n . Protože uvažujeme krystal s velmi velkým počtem atomů, budeme předpokládat, že počet atomů, a tedy i stavů je nekonečný. (V případě konečného krystalu je třeba věnovat zvláštní pozornost tomu, co se děje na jeho koncích.) Když je počet básových stavů nekonečný, musí být i počet Hamiltonových rovnic nekonečný! Zapišeme jen část z nich

$$\begin{aligned} & \vdots & & \vdots \\ & i\hbar \frac{d C_{n-1}}{dt} = E_0 C_{n-1} - A C_{n-2} - A C_n \\ & i\hbar \frac{d C_n}{dt} = E_0 C_n - A C_{n-1} - A C_{n+1} \\ & i\hbar \frac{d C_{n+1}}{dt} = E_0 C_{n+1} - A C_n - A C_{n+2} \\ & \vdots & & \vdots \end{aligned} \quad (11.4)$$

11.2 STAVY S PŘESNĚ URČENOU HODNOTOU ENERGIE

V případě elektronu v mřížce lze studovat mnoho věcí, ale pokusme se nejdříve najít stavy s přesně určenou hodnotou energie. V předcházejících kapitolách jsme viděli, že to znamená najít takový případ, v němž se všechny amplitudy mění se stejnou frekvencí (pokud se s časem vůbec mění). Řešení budeme hledat ve tvaru

$$C_n = a_n e^{-iEt/\hbar}. \quad (11.5)$$

Komplexní číslo a_n představuje časově nezávislou část amplitudy toho, že elektron najdeme u n -tého atomu. Po dosazení zkušební řešení (11.5) do rovnic (11.4) získáváme

$$E a_n = E_0 a_n - A a_{n+1} - A a_{n-1}. \quad (11.6)$$

Dostáváme nekonečný počet rovnic s nekonečným počtem neznámých a_n – situace přímo hrůzostrašná!

Víme, že stačí vzít determinant ... ale počkat! Determinanty jsou výborné pro systém dvou, tří nebo čtyř rovnic. Když je jich však mnoho, dokonce nekonečný počet, nejsou determinanty příliš vhodné. Pokusme se najít řešení raději přímo. Označme nejdříve atomy podle *polohy*: atom n se bude nacházet v místě x_n , atom $(n+1)$ v x_{n+1} . Když je vzdálenost mezi atomy b (obr. 11.1), platí: $x_{n+1} = x_n + b$. Zvolíme-li počátek v atomu číslo nula, máme $x_n = nb$. Rovnice (11.5) a (11.6) přepíšeme jako

$$C_n = a(x_n) e^{-iEt/\hbar} \quad (11.7)$$

a

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_{n+1}) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1}). \quad (11.8)$$

S využitím vztahu $x_{n+1} = x_n + b$ zapíšeme poslední rovnici ve tvaru

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_n + b) - Aa(x_n - b). \quad (11.9)$$

Poslední tvar je velmi podobný diferenciální rovnici. Říká, že veličina $a(x)$ v bodě x_n souvisí s toutéž fyzikální veličinou v sousedních bodech $x_n \pm b$. (V diferenciální rovnici souvisí hodnota funkce v určitém bodě s hodnotami v nekonečně blízkých bodech.) Pokusme se vyřešit uvedenou rovnici metodami, které obvykle používáme při řešení diferenciálních rovnic. Možná, že budeme úspěšní.

Lineární diferenciální rovnice s konstantními koeficienty mají vždy řešení ve tvaru exponenciálních funkcí. Zkusme to i v našem případě. Hledejme řešení ve tvaru

$$a(x_n) = e^{ikx_n}. \quad (11.10)$$

Po dosazení do rovnice (11.9) dostaneme

$$Ee^{ikx_n} = E_0 e^{ikx_n} - Ae^{ik(x_n + b)} - Ae^{ik(x_n - b)}. \quad (11.11)$$

Celou rovnici můžeme dělit e^{ikx_n} a máme

$$E = E_0 - Ae^{ikb} - Ae^{-ikb}. \quad (11.12)$$

Poslední dva členy jsou rovny výrazu $(2A \cos kb)$, a proto můžeme psát

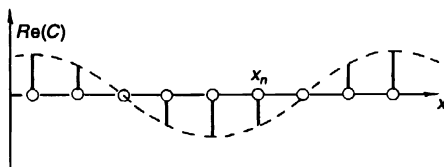
$$E = E_0 - 2A \cos kb. \quad (11.13)$$

Zjistili jsme, že při *libovolném* výběru konstanty k existuje řešení, jehož energie je určena poslední rovnicí. Pro různá k dostáváme různé energie a každému k přísluší jiné řešení. Existuje nekonečný počet řešení, což nás nepřekvapuje, neboť jsme vycházeli z předpokladu nekonečného počtu bázevých stavů.

Podívejme se, co představují tato řešení. Rovnice (11.10) určuje pro každé k veličiny $a(x_n)$. Amplitudy C_n můžeme proto psát takto

$$C_n = e^{ikx_n} e^{-(i/\hbar)Et}. \quad (11.14)$$

Nezapomínejme však, že rovnice (11.13) určuje i závislost energie E na k . Člen e^{ikx_n} představuje závislost amplitud na poloze. Když přecházíme od jednoho atomu ke druhému, zjišťujeme, že amplitudy oscilují.



Obr. 11.2 Reálné části amplitud C_n v bodech x_n

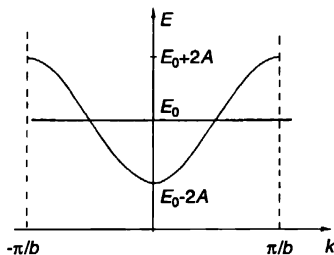
Uvědomme si, že amplituda se chová v prostoru jako *komplexní* oscilace, tj. její *velikost* je stejná u všech atomů, ale fáze (v daném čase) při přechodu od atomu k atomu roste o hodnotu ikb . Graficky to můžeme znázornit tak, že si u každého atomu naneseeme ve vertikálním směru pouze reálnou část amplitudy (obr. 11.2). Spojíme-li si plynule nanesené hodnoty dostaneme kosinusoidu (na obrázku je vyznačena přerušovanou čarou). I imaginární část C_n je oscilující funkcí, ale její fáze je posunuta o 90° ; to znamená, že druhá mocnina absolutní hodnoty (tedy součet druhých mocnin reálné a imaginární části) je stejný pro všechna C .

Zvolíme-li si nějaké k , dostaneme stacionární stav se stejnou pravděpodobností u libovolného atomu – žádný atom není preferován. Pouze fáze se mění od atomu k atomu. I fáze se mění v závislosti na čase. Z rovnice (11.14) je vidět, že reálná a imaginární část amplitudy se šíří krystalem jako vlny, tj. jako reálná a imaginární část výrazu

$$e^{i[kx_n - (E/\hbar)t]} \quad (11.15)$$

Vlna se může pohybovat v kladném nebo záporném směru osy x podle toho, jaké znaménko jsme vybrali pro k .

Všimněme si, že číslo k , které jsme zavedli do zkušebního řešení (11.10), je reálným číslem. Nyní vidíme, proč je to třeba v případě nekonečné posloupnosti atomů. Nechť k je imaginární číslo, řekněme ik' . Amplituda a_n by se měnila jako $e^{k'x_n}$, což znamená, že by se stále zvětšovala s rostoucím x (resp. s rostoucím záporným x , kdyby k' bylo záporné). Tento druh řešení může vyhovovat pro konečný počet atomů. Uvažujeme-li však nekonečný řetůzek atomů, je uvedené řešení fyzikálně nevyhovující. Objevují se nekonečné amplitudy, a tedy i nekonečné pravděpodobnosti, což neodpovídá reálné situaci. Později se seznámíme s příkladem, v němž imaginární k dává fyzikální smysl.



Obr. 11.3 Energie stacionárních stavů jako funkce parametru k

Závislost mezi energií E a vlnovým číslem k , kterou určuje rovnice (11.13), je graficky znázorněna na obr. 11.3. Je z něj vidět, že energie může získávat hodnoty od $E_0 - 2A$ při $k=0$ až po $E_0 + 2A$ při $k = \pm \pi/b$. Graf je nakreslen pro případ kladného A ; je-li A záporné, bude křivka pouze překlopena a rozsah hodnot zůstane stejný. Důležitost výsledku je v tom, že energie může nabývat libovolných hodnot z určitého rozsahu energií, ale mimo něj žádnou. Z našich předpokladů vyplývá, že nachází-li se elektron v krystalu ve stacionárním stavu, může mít energii jen v uvedeném pásu.

Ze vztahu (11.13) je vidět, že malé hodnoty k odpovídají stavům s malou hodnotou energie: $E \approx (E_0 - 2A)$. Zvětšujeme-li k (kladným nebo záporným směrem), hodnota energie narůstá a při $k = \pm \pi/b$ dosáhne maxima (obr. 11.3). Kdybychom hodnotu k zvětšovali dále nad π/b , začala by energie znovu klesat dolů. Tyto vyšší hodnoty k nás nemusejí zajímat, neboť nevytvářejí žádné nové stavy; pouze opakují ty, které jsme dostali pro malé k . Přesvědčme se o tom. Uvažujme stav s nejnižší energií pro $k=0$. Koeficient $a(x_n)$ je stejný pro všechna x_n . Tutéž energii dostaneme i při $k=2\pi/b$. Dosadíme-li do rovnice (11.10), dostaneme

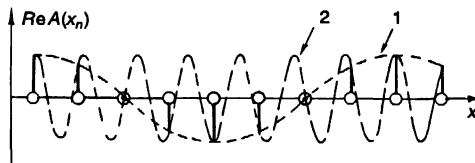
$$a(x_n) = e^{i(2\pi/b)x_n}.$$

Protože x_0 jsme zvolili za počátek, můžeme využít vztahu $x_n = nb$ a po dosazení máme výsledek

$$a(x_n) = e^{i2\pi n} = 1.$$

Uvedné $a(x_n)$ fyzikálně představuje tentýž stav jako pro $k=0$. Nedostali jsme žádné nové řešení.

Uvedme si další příklad. Necht' $k = \pi/4b$. Křivka 1 na obr. 11.4 ukazuje, jak se mění reálná část $a(x_n)$. Kdybychom vzali k sedmkrát větší ($k = 7\pi/4b$), měnila by se reálná část $a(x_n)$ tak, jak znázorňuje křivka 2. (Ať vás nesplete různý kosinový průběh křivek; podstatné jsou jejich hodnoty v bodech x_n . Křivky nám jen pomáhají, abychom snáze viděli, jak se mění amplitudy.) Vidíme, že obě hodnoty k dávají stejné amplitudy ve všech bodech x_n .



Obr. 11.4 Dvě hodnoty k , které představují tutéž fyzikální situaci. Křivka 1 pro $k = \pi/4b$ a křivka 2 pro $k = 7\pi/4b$

Závěr je tento: Stačí vzít k z určité ohraničené oblasti a získáme všechna možná řešení úlohy. Vybereme si rozsah od $-\pi/b$ po $+\pi/b$, který je znázorněn i na obr. 11.3. Na tomto intervalu se energie stacionárních stavů zvětšuje s rostoucí absolutní hodnotou k .

Uvedeme ještě jednu poznámku, abyste si měli s čím pohrát. Předpokládejme, že elektron může přímo přejít nejen ke svému nejbližšímu sousedovi (s amplitudou iA/\hbar), ale může přímo přeskočit i k druhému dalšímu sousedovi s nějakou jinou amplitudou iB/\hbar . Zjistíte, že řešení můžete opět zapsat ve tvaru $a_n = e^{ikx_n}$ – tento typ řešení je univerzální. Dále zjistíte, že stacionární stavy určené vlnovým číslem k nabývají hodnot energie rovné $E_0 - 2A\cos kb - 2B\cos 2kb$. Tento výsledek nám říká, že závislost energie E na vlnovém čísle k není vždy táž, ale závisí na konkrétních

předpokladech úlohy. Nemusí to být kosinusoida a nemusí být ani symetrická vzhledem k některé horizontální ose. Vždy však platí, že mimo interval $(-\pi/b, \pi/b)$ se průběh křivky periodicky opakuje, proto nás hodnoty k mimo uvedený rozsah nemusí zajímat.

Podívejme se blíže, co se děje při malých hodnotách k , tedy tehdy, když se amplituda při přechodu od jednoho atomu ke druhému mění poměrně pomalu. Vybereme si takovou stupnici energií, aby platilo $E_0 = 2A$. Pak se minimum křivky na obr. 11.3 posune na nulovou hodnotu energie. Pro dostatečně malá k můžeme psát

$$\cos kb \approx 1 - k^2 b^2 / 2$$

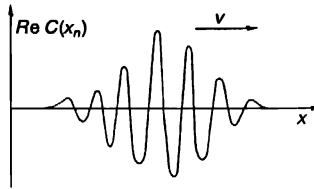
a energie (11.13) přejde na tvar

$$E = Ak^2 b^2. \quad (11.16)$$

Energie je přímo úměrná druhé mocnině vlnového čísla, které popisuje prostorové změny amplitud C_n .

11.3 STAVY ZÁVISLÉ NA ČASE

Nyní se podrobněji podíváme na chování stavů v jednorozměrné mřížce. Je-li amplituda výskytu elektronu v x_n rovna C_n , pravděpodobnost toho, že ho tam najdeme, je $|C_n|^2$. Pro *stacionární* stavy popsané rovnicí (11.14) je tato pravděpodobnost stejná ve všech x_n a s časem se nemění. Jak by bylo možné popsat situaci, při níž bychom věděli, že elektron s určitou energií je lokalizován v určité oblasti, tj. že se v některé oblasti vyskytuje s větší pravděpodobností než na jiných místech? Můžeme toho dosáhnout superpozicí několika řešení (11.14), v nichž se hodnoty k (a tedy i hodnoty energie) od sebe jen nepatrně liší. Amplituda C_n se bude měnit v závislosti na poloze přinejmenším v čase $t=0$, neboť rozdílné členy budou navzájem interferovat přesně tak, jako to bylo tehdy, když jsme smícháním vln rozdílných vlnových délek dostali rázy (viz 48. kapitole, 1. díl). Můžeme proto vytvořit vlnový balík, v němž bude převládat vlnové číslo k_0 a ostatní vlnová čísla budou blízká k_0 .⁴⁸⁾



Obr. 11.5 Reálná část $C(x_n)$ jako funkce x při superpozici několika stavů blízkých energií (měřítko na ose x je tak malé, že vzdálenost b mezi atomy nelze vyznačit.)

V naší superpozici stacionárních stavů představují amplitudy s rozdílnými hodnotami k stavy s nepatrně rozdílnými hodnotami energie, a tedy i frekvence. Interferenční obraz všech C_n se proto bude měnit i v závislosti na čase – objeví se rázy. V 48. kapitole 1. dílu jsme viděli, že vrcholy rázů (místa s největším $|C(x_n)|^2$) se s plynoucím časem pohybují ve směru osy x rychlostí, kterou

⁴⁸⁾ Nepokoušejme se však vytvořit příliš úzký balík.

jsme nazvali *grupová rychlost*. Ukázali jsme si, že tato rychlost souvisí se změnami frekvence ω na čísle k podle vztahu

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (11.17)$$

Uvedený vztah můžeme stejně dobře použít i v našem případě. Stav elektronu, jehož C_n se mění v závislosti na poloze tak, jak znázorňuje *obr. 11.5*, je vlnový balík; tento „chumáč“ se pohybuje jednorozměrným „krystalem“ rychlostí v rovnou $d\omega/dk$, kde $\omega = E/\hbar$. Místo E dosadíme výraz (11.16) a dostaneme

$$v = \frac{2Ab^2}{\hbar}k. \quad (11.18)$$

Řečeno jinými slovy, elektrony se pohybují rychlostí úměrnou charakteristické hodnotě k . Rovnice (11.16) pak znamená, že jejich energie je úměrná druhé mocnině jejich rychlosti. Takové elektrony jsou vlastně *podobné klasickým částicím*. Díváme-li se z dostatečné vzdálenosti, při níž už nerozeznáváme jemnou strukturu, začíná kvantová mechanika dávat stejné výsledky jako klasická fyzika. Opravdu, když z rovnice (11.18) vyjádříme k a dosadíme ho do (11.16), dostaneme

$$E = \frac{1}{2}m_{ef}v^2, \quad (11.19)$$

kde m_{ef} je konstanta. „Energie pohybu“ elektronu v balíku závisí na rychlosti stejně jako pro klasickou částici. Konstanta m_{ef} se nazývá *efektivní hmotnost* a je určena vztahem

$$m_{ef} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \quad (11.20)$$

Všimněte si, že můžeme psát

$$m_{ef}v = \hbar k. \quad (11.21)$$

Rozhodneme-li se nazvat $m_{ef}v$ hybnost, bude vztah mezi vlnovým číslem k a hybností stejný jako v případě volné částice.

Nezapomínejme, že m_{ef} nijak nesouvisí se skutečnou hmotností elektronu, která může být zcela odlišná, ačkoliv v reálných krystalech má často stejný řád jako hmotnost elektronu v prázdném prostoru (obvykle 2 až 20krát větší)

Tím jsme skončili vysvětlení záhady – jak je možné, že elektron proletí krystalem (např. krystalem germania) úplně volně, ačkoliv se musí srážet se všemi atomy. Umožňují mu to amplitudy, které se „přelévají“ od jednoho atomu k druhému a klesá mu tak cestu krystalem. Tak mohou pevné látky vést elektrický proud.

11.4 ELEKTRON V TROJROZMĚRNÉ MŘÍŽCE

Pokusme se nyní aplikovat předcházející myšlenky na trojrozměrný pohyb elektronu. Výsledky budou velice podobné. Uvažujme pravouhlou mřížku atomů s rozměry a , b a c ve třech směrech. (Kubickou mřížku bychom dostali, kdyby si byly všechny tři vzdálenosti rovny.) Předpokládáme

dále, že amplituda přeskočení elektronu ke svému sousedovi ve směru x je iA_x/\hbar , ve směru y je iA_y/\hbar a ve směru z je iA_z/\hbar . Jak popíšeme bázevé stavy? Podobně jako v jednorozměrném případě – jeden bázevý stav bude ten, kdy se elektron nachází u atomu se souřadnicemi x, y, z , kde (x, y, z) je jeden z uzlových bodů mřížky. Umístíme-li počátek souřadnic do některého z atomů, můžeme pro všechny body mřížky psát

$$x = n_x a, \quad y = n_y b, \quad z = n_z c,$$

kde n_x, n_y, n_z jsou libovolná celá čísla. Pro zjednodušení nebudeme používat indexy, ale budeme psát pouze x, y, z a budeme mít vždy na mysli souřadnice bodů mřížky. Bázevý stav budeme označovat symbolem $|\text{elektron v } x, y, z\rangle$ a amplituda toho, že se elektron v nějakém stavu $|\psi\rangle$ nachází v uvedeném bázeovém stavu je $C(x, y, z) = \langle \text{elektron v } x, y, z | \psi \rangle$.

Podobně jako v předcházejícím případě, i nyní se amplitudy $C(x, y, z)$ mohou měnit v závislosti na čase. Podle našich předpokladů lze psát Hamiltonovy rovnice takto

$$i\hbar \frac{dC(x, y, z)}{dt} = E_0 C(x, y, z) - A_x C(x+a, y, z) - A_x C(x-a, y, z) - A_y C(x, y+b, z) - A_y C(x, y-b, z) - A_z C(x, y, z+c) - A_z C(x, y, z-c). \quad (11.22)$$

Vypadá to hrozně, ale víme, odkud každý člen pochází.

Pokusme se opět najít stacionární stav, v němž se všechna C mění v závislosti na čase stejným způsobem. Řešení je opět exponenciální

$$C(x, y, z) = e^{-iEt/\hbar} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}. \quad (11.23)$$

Dosazením do (11.22) se můžeme přesvědčit o správnosti řešení za předpokladu, že energie E souvisí s k_x, k_y a k_z podle vztahu

$$E = E_0 - 2A_x \cos k_x a - 2A_y \cos k_y b - 2A_z \cos k_z c. \quad (11.24)$$

Energie závisí na třech vlnových vektorech k_x, k_y a k_z , které, mimochodem, tvoří složky trojrozměrného vektoru \mathbf{k} . Rovnici (11.23) proto můžeme psát ve vektorovém tvaru

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = e^{-iEt/\hbar} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (11.25)$$

Amplituda se mění jako komplexní rovinná vlna pohybující se trojrozměrným prostorem ve směru vektoru \mathbf{k} , s vlnovým číslem $k = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2}$.

Rovnice (11.24) ukazuje, jakým způsobem závisí energie příslušící uvedeným stavům na třech složkách vektoru \mathbf{k} . Charakter závislosti E na k je určen znaménky a velikostmi A_x, A_y a A_z . Jsou-li všechna tři čísla kladná a nás zajímají pouze malé hodnoty k , je závislost poměrně jednoduchá.

Rozvineme-li kosiny tak, jak jsme to udělali v případě (11.16), a dostáváme

$$E = E_{\min} + A_x a^2 k_x^2 + A_y b k_y^2 + A_z c k_z^2. \quad (11.26)$$

Uvažujeme-li jednoduchou kubickou mřížku s mřížkovou konstantou a , očekáváme, že

A_x , A_y a A_z budou stejné (řekněme budou rovna A); pak lze vztah (11.26) zjednodušit

$$E = E_{\min} + Aa^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

neboli

$$E = E_{\min} + Aa^2 k^2, \quad (11.27)$$

což je úplně stejné jako vztah (11.16). Na základě stejných úvah jako v předcházející stati docházíme k závěru, že i *trojrozměrný* elektronový balík (vytvořený superpozicí mnoha stavů s přibližně stejnou energií) se pohybuje jako klasická částice s určitou efektivní hmotností.

Koeficienty A_x , A_y a A_z jsou různé, má-li krystal jinou než kubickou symetrii. (Při kubické symetrii jsou koeficienty různé tehdy, když je stav elektronu u atomů nesymetrický.) V tom případě závisí *efektivní hmotnost* elektronu lokalizovaného v malé oblasti *na směru jako pohybu*. Částice může mít např. jinou setrvačnost pohybu ve směru x než ve směru z . (Pro podrobnější popis uvedené situace se někdy zavádí pojem „tenzor efektivní hmotnosti“.)

11.5 JINÉ STAVY ELEKTRONU V MŘÍŽCE

Stavy elektronu, o nichž jsme hovořili, mohou podle rovnice (11.24) nabývat energie pouze z určitého pásu, jehož rozsah sahá od minimální energie

$$E_0 - 2(A_x + A_y + A_z)$$

po maximální energii

$$E_0 + 2(A_x + A_y + A_z).$$

I další energie jsou možné, ale ty už patří do jiné skupiny stavů elektronu. Stavy, o nichž jsme dosud hovořili, jsme popisovali pomocí *bázových stavů*, v nichž se elektron nachází u atomu krystalu v určitém stavu, řekněme ve stavu s nejnižší energií.

Představme si atom v prázdném prostoru, k němuž přidáme elektron, abychom vytvořili ion. Ion může vzniknout různými způsoby. Elektron se může navázat buď tak, že vytvoří stav s nejnižší energií, nebo tak, že vznikne některý z mnoha excitovaných stavů iontu s přesně určenou energií, která převyšuje nejnižší hodnotu. Totéž se může stát i v krystalu. Předpokládejme, že zmíněná energie E_0 se týká *bázových stavů* iontů s nejnižší možnou energií. Nyní si představme novou skupinu *bázových stavů*, v nichž se elektron nachází u n -tého atomu jiným způsobem: Vyskytuje se v excitovaném stavu iontu, a proto i energie E_0 bude o něco vyšší. Podobně jako v předcházející části existuje určitá amplituda A (různá od předcházející) toho, že elektron přeskočí z excitovaného stavu u jednoho atomu do téhož excitovaného stavu u sousedního atomu; obdobně můžeme pokračovat v dalších úvahách. Zjistíme, že pás možných energií se nachází v oblasti vyšších energií. Obecně může existovat mnoho takových pásů a každý z nich bude odpovídat různé úrovni excitace.

V úvahu přicházejí i jiné možnosti. Může existovat určitá amplituda toho, že elektron přeskočí z excitovaného stavu u jednoho atomu do neexcitovaného stavu u sousedního atomu. (To se nazývá interakce mezi pásy.) Čím více pásů uvažujeme a čím více koeficientů pro možné přechody zavádíme, tím složitější jsou matematické vztahy. Žádné nové myšlenky se neobjevují, ale rovnice, jak jsme to z našeho jednoduchého příkladu viděli, se velmi rozrůstají.

Měli bychom ještě poznamenat, že o různých koeficientech (jako je např. amplituda A), které se vyskytují v teorii, toho moc říci nedokážeme. Lze je obtížně vypočítat a v praktických případech o nich teoreticky víme velmi málo. V konkrétních reálných situacích můžeme používat pouze jejich experimentálně zjištěné hodnoty.

Existují případy, v nichž je úplně stejná fyzika i matematika jako v případě elektronu pohybujícího se v krystalu, ale pohybující se „objekt“ je zcela jiný než elektron. Nechtě např. dříve zmíněnou lineární mřížku tvoří neutrální atomy, z nichž každý má velmi slabou vazbu s vnějším elektronem. Nyní si představme, že jeden elektron odstraníme. Kterému atomu bude chybět? Nechtě C_n je amplituda toho, že elektron *chybí* atomu, který je umístěn v bodě x_n . Obecně existuje určitá amplituda iA/\hbar toho, že elektron u sousedního, řekněme $(n-1)$ -ho atomu přeskočí k n -tému a $(n-1)$ -ní atom zůstane bez elektronu. Je to úplně totéž, jako kdybychom řekli, že existuje amplituda A toho, že „chybějící elektron“ přeskočí z n -tého na $(n-1)$ -tý atom. Je zřejmé, že i rovnice zůstanou přesně tytéž, jako byly původní, s tím rozdílem, že hodnota A nemusí být stejná. Opět dostaneme stejné vztahy pro hodnoty energií, pro efektivní hmotnost, pro „vlny“ pravděpodobnosti, které se pohybují krystalem grupovou rychlostí (11.18) atd. Tentokrát však vlny popisují chování *chybějícího elektronu* nebo, jak se často říká, *díry*. Takže díra se chová jako částice s kladným nábojem a určitou hmotností m_{ef} . V následující kapitole pohovoříme o těchto částicích podrobněji.

Podívejme se na další příklad. Uvažujme posloupnost *neutrálních* atomů, z nichž jeden se nachází v excitovaném stavu, tj. má vyšší energii, než je energie základního stavu. Nechtě C_n je amplituda toho, že n -tý atom je v excitovaném stavu. Se sousedním atomem může interagovat tak, že mu odevzdá svou nadbytečnou energii a vrátí se do základního stavu. Označme amplitudu tohoto procesu iA/\hbar a ihned vidíme, že tu máme opět stejnou matematiku. To, co se v tomto případě pohybuje krystalem, nazýváme *exciton*. Chová se jako neutrální částice, jejíž energie je rovna energii excitace. Lze předpokládat, že uvedený druh pohybu se vyskytuje v některých biologických procesech, jako je např. mechanismus vidění nebo fotosyntéza. Existuje hypotéza, podle které světlo absorbované sítnicí vytváří „exciton“, který prochází určitou periodickou strukturou (jako jsou vrstvy v tyčince, popsané v 36. kapitole, 1. dílu, a znázorněné na *obr. 36.5*) a akumuluje se v určitých speciálních místech, kde se tato energie využívá na vyvolání chemické reakce.

11.6 ROZPTYL NA PORUCHÁCH MŘÍŽKY

Nyní se budeme zabývat případem, jednoho elektronu v krystalu, který není ideální. Na základě předcházející analýzy víme, že ideální krystaly jsou dokonale vodivé – elektrony jimi mohou proklouznout bez tření jako ve vakuu. Jedna z nejčastějších příčin, která může zastavit volný pohyb elektronu, je nečistota nebo nepravidelnost v krystalu. Například předpokládejme, že někde v krystalu chybí atom, nebo si představme, že do uzlového bodu mřížky někdo umístil nesprávný atom, takže situace je tam jiná než v ostatních bodech, např. jiné energie E_0 nebo jiná amplituda A . Co se stane v takovém případě?

Abychom hovořili o konkrétní situaci, vrátíme se k jednorozměrnému případu a budeme předpokládat, že atom číslo nula je příměsový atom a že má jinou hodnotu energie E_0 než ostatní atomy. Označme ji $E_0 + F$. Co se stane? Existuje určitá pravděpodobnost, že když se elektron dostane k atomu nula, bude rozptýlen zpět. Pohybuje-li se vlnový balík krystalem a dojde k místu, kde jsou poměry trochu změněny, bude část z něj pokračovat ve směru pohybu a část se odrazí opačným směrem. Taková situace se těžko analyzuje pomocí vlnového balíku, protože všechno se s časem mění. Mnohem snáze se pracuje se stacionárními řešeními. Budeme je proto používat

a uvidíme, že je tvoří spojité vlny, které jsou složeny ze dvou částí – postupující a odražené. V trojrozměrném případě bychom odraženou část nazvali rozptýlenou vlnou, neboť by se šířila do různých směrů.

Nejdříve si napíšeme systém rovnic, které jsou, s výjimkou rovnice $n=0$ (ta se od ostatních odlišuje), stejné jako (11.6). Pět rovnic pro $n = -2, -1, 0, +1$ a $+2$ vypadá takto

$$\begin{aligned}
 & \vdots & & \vdots \\
 E a_{-2} &= E_0 a_{-2} - A a_{-1} - A a_{-3} \\
 E a_{-1} &= E_0 a_{-1} - A a_0 - A a_{-2} \\
 E a_0 &= (E_0 + F) a_0 - A a_1 - A a_{-1} \\
 E a_1 &= E_0 a_1 - A a_2 - A a_0 \\
 E a_2 &= E_0 a_2 - A a_3 - A a_1 \\
 & \vdots & & \vdots
 \end{aligned} \tag{11.28}$$

Všechny ostatní rovnice pro $|n| > 2$, jsou, samozřejmě, analogické a vypadají jako rovnice (11.6).

Obecně bychom měli používat jiná A pro amplitudu toho, že elektron přiskočí nebo odskočí od atomu nula. Hlavní rysy toho, co se děje, budeme však vidět i ve zjednodušeném případě, v němž jsou všechna A stejná.

Funkce (11.10) je i v tomto případě řešením všech rovnic – s výjimkou rovnice pro atom nula. Pro ni potřebujeme jiné řešení, které můžeme sestavit následujícím způsobem. Funkce (11.10) představuje vlnu, která se pohybuje v kladném směru osy x . Vlna, která se pohybuje v záporném směru osy x , je stejně dobrým řešením. Píšeme

$$a(x_n) = e^{-ikx_n}.$$

Nejobecnější řešení rovnice (11.6) bude proto součtem vlny pohybující se vpřed a vlny pohybující se vzad, totiž

$$a_n = \alpha e^{ikx_n} + \beta e^{-ikx_n}. \tag{11.29}$$

Uvedené řešení představuje komplexní vlnu s amplitudou α pohybující se ve směru $+x$ a vlnu s amplitudou β pohybující se ve směru $-x$.

Nyní se vraťme k systému rovnic (11.28), které popisují naši novou úlohu. Výraz (11.29) vyhovuje všem rovnicím s $n \leq 1$ s podmínkou, že vztah mezi veličinou k , energií E a mřížkovou konstantou b je dán jako

$$E = E_0 - 2A \cos kb. \tag{11.30}$$

Fyzikální význam řešení (11.29) je následující: Levý člen představuje *dopadající* vlnu, která se zleva přibližuje k atomu nula s amplitudou α a pravý člen odpovídá *rozptýlené* nebo *odražené* vlně, která se pohybuje s amplitudou β směrem doleva. Neztratíme nic na obecnosti, položíme-li amplitudu α dopadající vlny rovnou 1. Pak bude amplituda β obecně komplexním číslem.

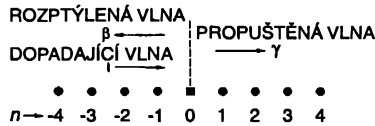
Totéž můžeme říci o řešeních s $n \geq 1$. Koeficienty mohou být různé, a proto píšeme

$$a_n = \gamma e^{ikx_n} + \delta e^{-ikx_n} \quad \text{pro } n \geq 1. \tag{11.31}$$

Zde je γ amplituda vlny postupující doprava a δ je amplituda vlny přicházející zprava. Zajímá nás fyzikální situace, v níž původní vlna přichází pouze z levé strany a na pravé straně, za příměšovým atomem, se nachází pouze *propuštěná* vlna. Pokusme se najít řešení, pro které $\delta=0$. Následující zkušební řešení určitě vyhovují všem rovnicím (11.28) (kromě prostředních tří)

$$\begin{aligned} a_n \text{ (pro } n < 0) &= e^{ikx_n} + \beta e^{-ikx_n} \\ a_n \text{ (pro } n > 0) &= \gamma e^{ikx_n}. \end{aligned} \quad (11.32)$$

Situace, o níž hovoříme, je znázorněna na obr. 11.6.



Obr. 11.6 Vlny v jednorozměrné mřížce s jedním „příměšovým“ atomem v místě $n=0$

Dosadíme-li do tří prostředních rovnic (11.28) výrazy a_{-1} a a_{+1} vyjádřené pomocí (11.32), dokážeme vypočítat a_0 , jakož i oba koeficienty β a γ . Tak najdeme úplné řešení. Je třeba tedy řešit tyto tři rovnice (položme $x_n = nb$)

$$\begin{aligned} (E - E_0) \{ e^{ik(-b)} + \beta e^{-ik(-b)} \} &= -A \{ a_0 + e^{ik(-2b)} + \beta e^{-ik(-2b)} \} \\ (E - E_0 - F) a_0 &= -A \{ \gamma e^{ikb} + e^{ik(-b)} + \beta e^{-ik(-b)} \} \\ (E - E_0) \gamma e^{ikb} &= -A \{ \gamma e^{ik(2b)} + a_0 \}. \end{aligned} \quad (11.33)$$

Vzpomeňme si, že rovnice (11.30) vyjadřuje E pomocí k . Dosadíme-li uvedené vyjádření do všech rovnic a použijeme vztah $\cos x = 1/2(e^{ix} + e^{-ix})$, dostaneme z první rovnice

$$a_0 = 1 + \beta \quad (11.34)$$

a z třetí rovnice

$$a_0 = \gamma. \quad (11.35)$$

Aby byly splněny obě rovnice, musí platit

$$\gamma = 1 + \beta. \quad (11.36)$$

Rovnice říká, že propuštěná vlna (γ) je vlastně původní dopadající vlna (1) plus dodatečná vlna (β) rovná odražené vlně. To platí pouze tehdy, když jde o rozptyl na jednom atomu. Vyskytuje-li se v mřížce více příměšových atomů, nemusí být veličina přičtená k vlně pohybující se dopředu vždy shodná s odraženou vlnou.

Amplitudu β odražené vlny můžeme vypočítat z prostřední rovnice (11.33). Dostaneme

$$\beta = \frac{-F}{F - 2iA \sin kb}. \quad (11.37)$$

Dospěli jsme k úplnému řešení pro mřížku s jedním cizím atomem.

Na základě rovnice (11.34) byste se mohli divit, jak může být propuštěná vlna „větší“ než dopadající. Vzpomeňte si však, že β a γ jsou komplexní čísla a že počet částic ve vlně (resp. pravděpodobnost toho, že najdeme částici) je úměrný druhé mocnině absolutní hodnoty amplitudy. „Zachování počtu elektronů“ nastane ve skutečnosti pouze tehdy, když

$$|\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1. \quad (11.38)$$

Můžete se přesvědčit, že to pro naše řešení platí.

11.7 ZACHYCENÍ NA ATOMU PŘÍMĚSI V MŘÍŽCE

Další zajímavý případ nastane, když je F záporným číslem. Je-li energie elektronu v příměsovém atomu ($n=0$) nižší než u ostatních, může se elektron zachytit na tomto atomu. To znamená, je-li hodnota $E_0 + F$ menší než dolní hranice pásu $E_0 - 2A$, může elektron „uváznout“ ve stavu $E < E_0 - 2A$. Takové řešení nelze dostat z toho, co jsme dosud udělali, ale lze je získat, když číslo k vystupující v rovnici (11.15) bude imaginární. Položme $k = i\kappa$. Dostaneme opět různá řešení pro $n < 0$ a pro $n > 0$. Jedno možné řešení pro $n < 0$ je

$$a_n \text{ (pro } n < 0) = c e^{+\kappa x_n}. \quad (11.39)$$

V exponentu musí být kladné znaménko. V opačném případě by pro velké záporné hodnoty n rostla amplituda do nekonečna. Analogické řešení dostáváme pro $n > 0$

$$a_n \text{ (pro } n > 0) = c' e^{-\kappa x_n}. \quad (11.40)$$

Dosadíme-li uvedená řešení do rovnic (11.28), zjistíme, že kromě tří prostředních jsou všechny rovnice splněny, za podmínky, že

$$E = E_0 - A(e^{x^b} + e^{-x^b}). \quad (11.41)$$

Protože součet exponenciálních členů je vždy větší než 2, je energie menší než dolní hranice energetického pásu – a to jsme hledali. Zbývající tři rovnice v systému (11.28) jsou splněny, je-li $c = c'$ a vybereme-li κ takové, že

$$A(e^{x^b} - e^{-x^b}) = -F. \quad (11.42)$$

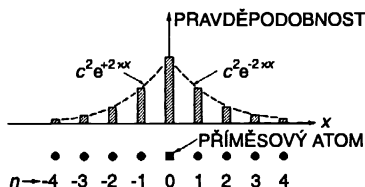
Využijeme-li tento vztah při úpravě (11.41), můžeme vyjádřit energii zachyceného elektronu jako

$$E = E_0 - \sqrt{4A^2 + F^2}. \quad (11.43)$$

Jeho energie má výjimečnou hodnotu, neboť se nacházíme pod vodivostním pásem.

Všimněte si, že amplitudy (11.39) a (11.40) *netvrdí*, že zachycený elektron sedí přímo na příměsovém atomu. Pravděpodobnost toho že jej najdeme u některého sousedního atomu, je určena druhou mocninou amplitudy. Grafické znázornění této závislosti je na *obr. 11.7*. Největší

pravděpodobnost je u příměsového atomu. Je to další příklad průchodu bariérou. Z hlediska klasické fyziky nemá elektron dostatečnou energii na to, aby se dostal ven z energetické jámy u zachytného centra. Z kvantově mechanického hlediska se však může dostat i trochu dále.



Obr. 11.7 Relativní pravděpodobnosti nalezení zachyceného elektronu u atomů, které jsou v blízkosti příměsového atomu

11.8 AMPLITUDY ROZPTYLU A VÁZANÉ STAVY

Předcházející příklad lze použít k ilustraci jedné skutečnosti, která je pro fyziku částic vysokých energií velmi užitečná. Jde o souvislost mezi amplitudami rozptylu a vázanými stavy. Předpokládejme, že jsme pomocí experimentu a teoretického rozboru zjistili, jak se piony rozptylují na protonech. Pak objevíme novou částici a někdo by mohl namítat, zda to snad není jen kombinace pionu a protonu, které jsou v určitém vázaném stavu poutány k sobě (podobně jako je to v atomu vodíku, kde je elektron vázán k protonu). Vázaným stavem rozumíme kombinaci, která má menší energii než dvojice volných částic.

Existuje obecná teorie, která říká, že extrapolujeme-li (nebo matematicky řečeno „analyticky prodlužujeme“) amplitudu rozptylu do oblasti energií mimo povolený pás pro energii, při níž roste amplituda rozptylu do nekonečna, vzniká vázaný stav.

Fyzikální důvod je tento: Ve vázaném stavu existují pouze vlny, které jsou připoutány k nějakému místu – nepřicházejí zvenku, jednoduše tam už jsou. Vzájemný poměr mezi tzv. rozptýlenými nebo vytvořenými vlnami a mezi dopadajícími vlnami je nekonečný. Ověřme si to na našem příkladu. Vyjádříme rovnici (11.37) pro rozptýlenou amplitudu pomocí energie E rozptýlené částice. Použijeme rovnici (11.30), kterou můžeme přepsat jako

$$2A \sin kb = \sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2}.$$

Amplituda rozptylu je

$$\beta = \frac{-F}{F - i\sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2}}. \quad (11.44)$$

Z odůvodnění vyplývá, že vztah lze použít pouze pro reálné stavy, tedy ty, jejichž energie je z energetického pásu $E = E_0 \pm 2A$. Na tuto skutečnost však zapomeneme a rozšíříme vztah do „nefyzikálních“ oblastí energií, kde $|E - E_0| > 2A$. Pro tyto nefyzikální oblasti můžeme psát⁴⁹⁾

$$\sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2} = i\sqrt{(E - E_0)^2 - 4A^2}.$$

⁴⁹⁾ Výběr znaménka před odmocninou je na tomto místě pouze technická záležitost, která souvisí s přípustnými znaménky x v (11.39) a (11.40). Nebudeme se tím zabývat.

„Amplituda rozptylu“, ať už pod ní rozumíme cokoliv, je rovna

$$\beta = \frac{-F}{F + \sqrt{(E - E_0)^2 - 4A^2}}. \quad (11.45)$$

Ptáme se: Existuje energie E , pro níž je β nekonečné (tj. výraz má „pól“)? Ano existuje: Je-li F záporná hodnota, bude jmenovatel v (11.45) roven nule, je-li

$$(E - E_0)^2 - 4A^2 = F^2$$

resp.

$$E = E_0 \pm \sqrt{4A^2 + F^2}.$$

Řešení se znaménkem minus je právě ta energie, kterou jsme v rovnici (11.43) dostali pro zachycený elektron.

A co kladné znaménko? Toto řešení představuje energii *nad* povoleným pásem energií. Opravdu, je to další vázaný stav, který jsme neuvedli při řešení rovnic (11.28). Necháváme vám za úkol, abyste si sami našli energii a amplitudy a_n tohoto vázaného stavu.

Souvislost mezi rozptylovými a vázanými stavy poskytuje jeden z nejužitečnějších klíčů k porozumění experimentálních pozorování nových podivných částic.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 11.1** ■ Uvažujme nekonečný řetízek atomů rozložených ve vzájemných vzdálenostech b (souřadnice n -tého atomu je $x = nb$) a předpokládejme, že elektron se může nacházet na každém z atomů ve dvou stavech i a j s různými energiemi E_i a E_j , tj. soubor stavů báze je možno zapsat následujícím způsobem:

|elektron na atomu x_n ve stavu i) = $|x_{n,i}\rangle$,

|elektron na atomu x_n ve stavu j) = $|x_{n,j}\rangle$.

Dále předpokládejme, že elektron může přeskakovat ze svého atomu na nejbližší sousední s amplitudami

$-\frac{A_{ii}}{i\hbar}$ pro přechod z $|x_n, i\rangle$ do $|x_{n+1}, i\rangle$ nebo $|x_{n-1}, i\rangle$,

$-\frac{A_{jj}}{i\hbar}$ pro přechod z $|x_n, j\rangle$ do $|x_{n+1}, j\rangle$ nebo $|x_{n-1}, j\rangle$,

$-\frac{A_{ji}}{i\hbar}$ pro přechod z $|x_n, j\rangle$ do $|x_{n+1}, i\rangle$ nebo $|x_{n-1}, i\rangle$,

$-\frac{A_{ij}}{i\hbar}$ pro přechod z $|x_n, i\rangle$ do $|x_{n+1}, j\rangle$ nebo $|x_{n-1}, j\rangle$.

Prozkoumejme případ, kdy $A_{ij} = A_{ji} = B$ a $A_{jj} = A_{ii} = A$. Pomocí procedury popsané v této kapitole najdete dovolené hodnoty energie takové soustavy. Popište zonální strukturu v limitních případech $|E_i - E_j| \ll 2B$ a $|E_i - E_j| \gg 2B$. Porovnejte odpověď s řešením uvedeným v textu.

- 11.2** ■ Uvažujte nekonečný řetízek tvořený atomy dvojího druhu a a b podle obrázku.

(a) (b) (a) (b) (a) (b) (a) (b) (a)

$n-2$ $n-2$ $n-1$ $n-1$ n n $n+1$ $n+1$ $n+2$

Nechť amplituda nalezení elektronu na n -tém atomu typu a je C_n^a a na n -tém atomu typu b je C_n^b .

Předpokládejme, že energie elektronu v atomu a je rovna $E_0 + \Delta E$ a v atomu b je rovna $E_0 - \Delta E$. Nechť dále je maticový prvek hamiltoniánu pro přechod elektronu mezi sousedními atomy roven A . Vzdálenost mezi atomy je rovna c .

Vypočítejte a přibližně nakreslete graf závislosti energie stacionárního stavu na vlnovém čísle k . (Každé zadané hodnotě k odpovídají dvě hodnoty energie.) Jaká omezení musíme zavést pro hodnoty k , abychom každý stav počítali jen jednou?

- 11.3** ■ Uvažujme rozptyl na příměsích (viz příklad v odstavci 11.6). Nechť se atom označený indexem $n = 0$ liší od všech ostatních. Klademe $H_{00} = E_0$, $H_{01} = H_{10} = H_{0(-1)} = H_{(-1)0} = -B$, kde $B \neq A$. Najděte β a γ a přesvědčte se, že $|\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1$.

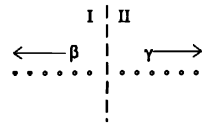
- 11.4** ■ V předchozím příkladě, stejně tak jako v úloze probrané v odstavci 11.6, $\beta = \gamma - 1$. Snadno lze ověřit, že v libovolném obecnějším případě, který je kombinací těchto dvou, také platí rovnost $\beta = \gamma - 1$. V obecném případě jednorozměrného rozptylu tedy platí „zákon zachování počtu částic“ $|\beta|^2 + |1 + \beta|^2 = 1$.

a) Ukažte, že pak musí nutně platit $\text{Re}\left(\frac{\beta}{1 + \beta}\right) = 0$.

b) Ukažte, že β může být zapsáno ve tvaru $\beta = i e^{i\eta} \sin \eta$, kde η je reálné číslo. Veličina η se nazývá „fázový posun při rozptylu“ a obsahuje informaci jak o fázi, tak o amplitudě rozptýlené vlny. (Platí to i v trojrozměrném případě).

- 11.5** ■ Uvažujme jednorozměrný analog plochy nespojitosti, kde nekonečný krystal mění své vlastnosti (viz obrázek). Částice dopadá zleva jako v odstavci 11.6.

Nechť v oblasti I mají parametry hodnoty E_0 , $-A$, b a v oblasti II E'_0 , $-A'$, b' . Analog amplitud A a A' pro atomy ležící na obou stranách dělicí čáry označíme jako B . Předpokládáme, že A , A' a B jsou reálná čísla.



a) Ukažte, že v místě nespojitosti mezi atomy $n=0$ a $n=+1$ platí $\gamma = (1 + \beta)B/A'$.

b) Vyjádřete β pomocí A , A' , B , kb , $k'b'$. Ukažte, že $|\beta| = 1$ při imaginárním $k'b'$. Jaký má tento výsledek fyzikální smysl? Při kterých hodnotách $E - E_0$ nastává úplný odraz?

c) Ověřte zákon zachování počtu částic tím, že dokážete $|\beta|^2 + |\gamma|^2 \frac{v_g/b'}{v_g/b} = 1$, kde v_g a v_g' jsou grupové rychlosti v různých oblastech. Čím se vysvětluje přítomnost koeficientu u $|\gamma|^2$?

12 P Polovodiče

12.1 ELEKTRONY A DÍRY V POLOVODIČÍCH

12.2 PŘÍMĚSOVÉ POLOVODIČE

12.3 HALLŮV JEV

12.4 POLOVODIČOVÉ PŘECHODY

12.5 USMĚRŇOVÁNÍ NA POLOVODIČOVÉM PŘECHODU

12.6 TRANZISTOR

Literatura: Kittel, Ch.: Úvod do fyziky pevných látek. Praha, Academia 1985, kapitoly 7 a 8.

12.1 ELEKTRONY A DÍRY V POLOVODIČÍCH

Jedním z nejpozoruhodnějších a nejdramatičtějších přelomů v posledních letech bylo využití výsledků fyziky pevných látek v oblasti technického rozvoje elektronických součástek, jakými jsou např. tranzistory. V důsledku výzkumu polovodičů se objevilo mnoho jejich užitečných vlastností a dospělo se k mnohému praktickému využití. V této oblasti se všechno mění tak rychle, že to, co vám říkáme dnes, se bude za rok jevit jako nesprávné nebo přinejmenším jako nedostatečné. Je zcela jasné, že pokračující studium vlastností těchto materiálů přinese postupně mnohé nové a obdivuhodné objevy. Pochopení této kapitoly není třeba ke studiu dalších kapitol, ale snad vás bude zajímat, jak souvisí alespoň některé části toho, co studujete, s praktickým světem.

Existuje velké množství polovodičů, ale soustředme se pouze na ty, které mají větší technické využití. Patří zároveň k těm, které známe nejlépe; pochopíme-li tyto typy, pochopíme do určité míry i mnohé další. Dnes se nejvíce používají polovodičové materiály křemík a germanium. Krystalizují v mřížce diamantového typu – je to určitý druh kubické struktury, v níž má atom čtyřstěnnou vazbu se čtyřmi nejbližšími sousedy. Při velmi nízkých teplotách (v blízkosti absolutní nuly) jsou nevodivé, ale při pokojové teplotě trochu vedou elektrický proud. Nepatří do skupiny kovů; nazýváme je *polovodiče*.

Vložíme-li do krystalu křemíku nebo germania při nízké teplotě jeden elektron navíc, dostaneme stejnou situaci, jakou jsme popisovali v předcházející kapitole. Elektron bude schopen putovat krystalem, a to tak, že bude přeskakovat od jednoho atomu k druhému. Chování elektronu jsme vlastně studovali pouze v pravouhlé mřížce; v případě reálné mřížky křemíku a germania

budou rovnice trochu odlišné. Přece však budeme moci všechny podstatné vlastnosti vysvětlit pomocí výsledků pravouhlé mřížky.

V 11. kapitole jsme viděli, že elektrony mohou mít energii z určitého energetického pásu; nazýváme ho *vodivostní pás*. Souvislost mezi energiemi z tohoto intervalu a vlnovým číslem k a amplitudy pravděpodobnosti C (rovnice (11.24)) je dána vztahem

$$E = E_0 - 2A_x \cos k_x a - 2A_y \cos k_y b - 2A_z \cos k_z c. \quad (12.1)$$

Koeficienty A_x , A_y a A_z jsou amplitudy přeskoků elektronu ve směru x , y a z a veličiny a , b a c jsou mřížkové konstanty v uvedených směrech.

Pro energie v blízkosti dolní hranice pásu můžeme rovnici (12.1) aproximovat na tvar

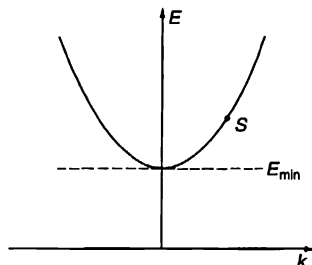
$$E = E_{\min} + A_x a^2 k_x^2 + A_y b^2 k_y^2 + A_z c^2 k_z^2. \quad (12.2)$$

(viz stať 11.4)

Uvažujeme-li pohyb elektronu v určitém směru, kde zůstávají složky vektoru k ve stejném poměru, je energie kvadratickou funkcí vlnového čísla – a jak jsme se mohli přesvědčit – i hybnosti elektronu. Můžeme psát

$$E = E_{\min} + \alpha k^2, \quad (12.3)$$

kde α je určitá konstanta. Závislost E na k je graficky znázorněna na *obr. 12.1*. Budeme ji nazývat *energetický diagram*. Elektron, který je v určitém stavu energie a hybnosti, můžeme na takovémto grafu znázornit bodem (např. S)



Obr. 12.1 Energetický diagram pro jeden elektron v nevodivém krystalu

V 11. kapitole jsme zmínili i to, že podobné situace lze dosáhnout, když z izolantu, který je elektricky neutrální, *odstraníme* jeden elektron. Pak může z blízkého atomu na jeho místo přeskocit jiný elektron, který zaplní díru, ale u atomu, od kterého odskočil, zanechá novou díru. Uvedené chování můžeme popsat udáním amplitudy toho, že najdeme *díru* u určitého atomu, a tím, když řekneme, že *díra* může „přeskakovat“ od jednoho atomu k druhému. (Je zřejmé, že amplituda A přeskoku díry od atomu a do díry k atomu b je stejná jako amplituda přeskoků elektronu od atomu b do díry u atomu a). V případě díry jsou matematické vztahy úplně stejné jako u jednoho nadbytečného elektronu; souvislost mezi energií díry a jejím vlnovým číslem je opět určena rovnicí (12.1), resp. (12.2) s tím rozdílem, že amplitudy A_x , A_y a A_z mají jiné numerické hodnoty. Vidíme, že energie díry souvisí s vlnovým číslem jejich amplitud pravděpodobnosti. Hodnoty energie jsou z ohraničeného intervalu a v blízkosti dolní hranice pásu je závislost energie na vlnovém čísle, resp. hybnosti kvadratická (*obr. 12.1*). Na základě těchto argumentů, jak jsme uvedli ve stati 11.3, můžeme tvrdit, že *díra se chová jako klasická částice* s určitou efektivní

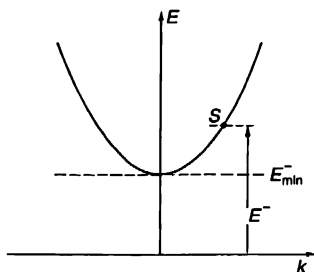
hmotností – s tím rozdílem, že v krystalech, které nejsou kubické, bude hmotnost záviset na směru pohybu. Díra se proto chová jako *kladně nabitá částice* pohybující se krystalem. Náboj částice – díry – je kladný, neboť se nachází na místě chybějícího elektronu; když se díra pohybuje některým směrem, pohybují se elektrony vždy opačným.

Vložíme-li několik elektronů do krystalu, který je elektricky neutrální, bude jejich pohyb velmi podobný pohybu atomů v plynu při nízkém tlaku. Nebude-li jich příliš mnoho, můžeme zanedbat jejich vzájemné působení. Přiložením elektrického pole na krystal se začnou elektrony pohybovat a vznikne elektrický proud. Všechny budou vlastně přitahovány k jedné straně krystalu; do té doby, dokud na ni bude přiložena kovová elektroda, se na ní budou sbírat elektrony a krystal se stane neutrálním.

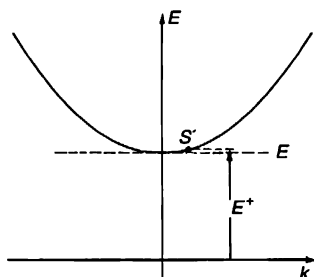
Podobně můžeme do krystalu vložit větší počet děr. Budou se jím potulovat, dokud nepřiložíme elektrické pole. Tehdy začnou téct směrem k záporné elektrodě, na níž se „shromáždí“; ve skutečnosti to znamená, že díry budou neutralizovány elektrony z kovové elektrody.

Díry a elektrony se v krystalu mohou vyskytovat i současně. Nebude-li jich příliš mnoho, budou se pohybovat nezávisle na sobě. V přítomnosti elektrického pole budou i elektrony, i díry přispívat k elektrickému proudu. Ze zřejmých důvodů se elektrony nazývají *záporné nosiče* a díry *kladné nosiče*.

Dosud jsme uvažovali, že elektrony vkládáme do krystalu zvenku nebo je z něj vybíráme (když vytváříme díry). Pár elektron–díra můžeme „vytvořit“ i takovým způsobem, že některému neutrálnímu atomu v krystalu odsuneme jeho vazebný elektron trochu na stranu. Získáme volný elektron a volnou díru, které se už pohybují popsaným způsobem.



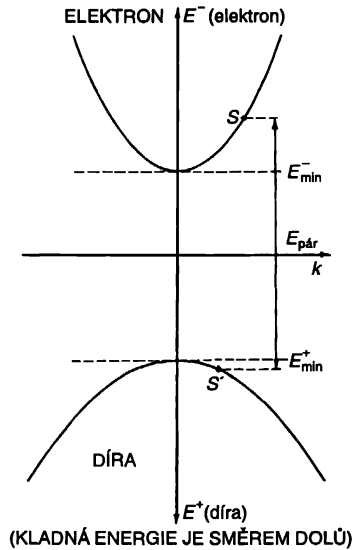
Obr. 12.2 Energie E^- potřebná k „vytvoření“ volného elektronu



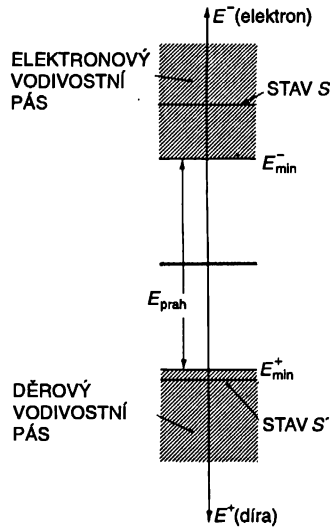
Obr. 12.3 Energie E^+ potřebná k „vytvoření“ díry ve stavu S'

Energie potřebná k tomu, abychom dostali elektron *do* stavu S (aby „vznikl“ stav S), je zobrazena na obr. 12.2 jako energie E^- ; je o něco větší než E_{\min}^- . Energie potřebná k „zrození“ díry v nějakém stavu S' je vyznačena na obr. 12.3 jako E^+ a je o něco větší než E_{\min}^+ . Abychom vytvořili pár ve stavech S a S' , potřebujeme energii $E^- + E^+$.

Tvorba párů (jak uvidíme později) je velmi častý jev, proto se často kreslí grafy na *obr. 12.2* a *12.3* do jednoho obrázku, přičemž energie *díry* je vyznačována v *dolní části*, i když má samozřejmě, *kladnou* hodnotu. Tak jsme na *obr. 12.4* vyznačili oba grafy. Výhoda uvedeného znázornění je v tom, že energie $E_{\text{pár}} = E^- + E^+$ potřebná k vytvoření páru s elektronem ve stavu S a dírou v S' je zobrazena jednoduše vertikální vzdáleností mezi S' , jak je vyznačeno na *obr. 12.4*. Minimální energie, které je třeba k vytvoření páru, se nazývá *prahová* energie a je rovna $E_{\text{min}}^- + E_{\text{min}}^+$.



Obr. 12.4 Energetické diagramy elektronu a díry



Obr. 12.5 Diagram energetických pásů elektronů a děr

Někdy se můžeme setkat s jednodušším znázorněním, tzv. diagramem energetických pásů, který používáme tehdy, když nás nezajímá proměnná k . Takový diagram (znázorněný na obr. 12.5) vsa ukazuje jen možné hodnoty energií elektronů a děr.⁵⁰⁾

Jak vzniká pár elektron–díra? Existuje několik způsobů. Fotony světla (nebo rentgenového záření) mohou být např. pohlceny a vytvoří pár, je-li energie fotonu větší, než je prahová energie. Rychlost tvorby párů je úměrná intenzitě světla. Přiložíme-li k tenkému krystalu dvě elektrody s určitým základním napětím, budou elektrony a díry přitahovány k elektrodám. Proud bude úměrný intenzitě světla. Tento mechanismus je zodpovědný za jev fotovodivosti a za činnost fotobuněk.

Páry elektron – díra mohou být vytvořeny i pomocí vysokoenergetických částic. Nabitá částice, která se pohybuje velkou rychlostí (např. proton nebo mezon π s energií několik desítek nebo stovek MeV), při průletu krystalem vyrazí svým elektrickým polem elektrony z jejich vázaných stavů a vytváří páry elektron–díra. Na každém milimetru dráhy částice dochází ke statisícům takových událostí. Po jejím průletu mohou být nosiče náboje shromážděny a mohou vytvořit elektrický pulz. Uvedený mechanismus se využívá v polovodičových detektorech, které se používají v experimentech v jaderné fyzice. Takové detektory můžeme sestavit nejen z polovodičů, ale i z krystalů, které jsou izolanty. První detektor tohoto typu byl vyroben z krystalu diamantu, který je při pokojové teplotě izolantem. Aby se elektrony a díry mohly k elektrodám pohybovat volně, aniž by byly zachyceny, potřebujeme velmi čisté krystaly. Používá se křemík a germanium, protože tyto polovodiče lze vyrobit s vysokou čistotou v dostatečně velkých rozměrech (několik centimetrů). Dosud jsme si všimli polovodičových krystalů při teplotách kolem absolutní nuly. Při libovolné nenulové teplotě se objevuje ještě další mechanismus, který dokáže produkovat páry elektron – díra. Energie na vytvoření páru může pocházet i z tepelné energie krystalu. Tepelné vibrace mu odevzdají energii a dojde ke „spontánnímu“ zrodu.

Pravděpodobnost (za jednotku času) toho, že se v místě některého atomu soustředí energie s velikostí prahové energie E_{prah} je úměrná $e^{-E_{\text{prah}}/kT}$, kde T je teplota a k je Boltzmanova konstanta (viz kapitola 40, díl 1). V blízkosti absolutní nuly je pravděpodobnost tvorby párů zanedbatelná, ale s rostoucí teplotou se zvětšuje. Při libovolně zvolené teplotě by měla tvorba párů ustavičně probíhat konstantní rychlostí a měly by vznikat další nové a nové záporné a kladné nosiče. K tomu, samozřejmě, nedojde, protože po určité chvíli se elektrony a díry začnou náhodně setkávat – elektron skočí do díry a uvolněná energie je odevzdána mřížce. Říkáme, že elektron a díra „anihilovaly“. Existuje určitá pravděpodobnost toho, že se za jednotku času díra setká s elektronem a navzájem anihilují.

Je-li počet elektronů v jednotkovém objemu N_n (index n – označuje záporné nosiče) a hustota kladných nosičů je N_p (index p – označuje kladné nosiče), pravděpodobnost toho, že se za jednotku času setká elektron s dírou a anihilují, je úměrná součinu $N_n N_p$. Ve stavu rovnováhy je rychlost tohoto procesu rovna rychlosti tvorby párů, a proto by měl být součin $N_n N_p$ roven Boltzmanově konstantě vynásobené nějakým konstantním faktorem

$$N_n N_p = \text{konst} e^{-E_{\text{prah}}/kT}. \quad (12.4)$$

⁵⁰⁾ V mnoha knihách se uvedený diagram vysvětluje odlišně. Stupnice energií se vztahuje pouze k elektronům. Neuvažuje se energie díry, místo toho se uvažuje energie, kterou by měl elektron, kdyby doplnil díru. Tato energie je *menší* než energie volného elektronu právě o posunutí dolní části obr. 12.5. Při takovéto interpretaci energetické stupnice se prahovou energií rozumí minimální energie, kterou je třeba udělit *elektronu*, aby se z vázaného stavu dostal do vodivostního pásu.

Konstantním faktorem myslíme v našem případě „téměř konstantu“. Úplnější teorie, která zahrnuje více podrobností o tom, jak se díry a elektrony navzájem „hledají“, ukazuje, že „konstanta“ nepatrně závisí na teplotě; hlavní závislost na teplotě však vyjadřuje exponenciální člen.

Vezměme si např. čistý materiál, který byl na začátku elektricky neutrální. Při konečné teplotě můžeme očekávat, že počet kladných a záporných nosičů je stejný, tj. $N_n = N_p$. Každý z nich by pak měl záviset na teplotě podle funkce $e^{-E_{\text{práh}}/2kT}$. Změny mnohých vlastností supravodivých materiálů, např. elektrické vodivosti, jsou převážně dány exponenciálním faktorem, neboť všechny ostatní faktory se s teplotou mění mnohem pomaleji. Prahová energie germania je přibližně 0,72 eV a křemíku 1,1 eV.

Při pokojové teplotě je hodnota kT přibližně 1/40 eV. Při těchto teplotách už existuje dostatečný počet děr a elektronů, které zabezpečují výraznou elektrickou vodivost, zatímco řekněme při 30 K (jedné desetíně pokojové teploty) je vodivost nepostřehnutelná. Prahová energie diamantu je 6 až 7 eV. Při pokojové teplotě se chová jako dobrý izolant.

12.2 PŘÍMĚSOVÉ POLOVODIČE

Dosud jsme hovořili o dvou způsobech, jak lze v geometricky ideálně uspořádané mřížce vytvořit volné elektrony. V prvním případě jsme elektron vložili do krystalu zvenku, ve druhém případě jsme elektron vyražením odsunuli od neutrálního atomu, čímž se vytvořil volný elektron a díra. Elektron je však možno dodat do vodivostního pásu krystalu i jiným způsobem. Představme si krystal germania, v němž jeden z jeho atomů nahradíme atomem arsenu. Atomy germania jsou čtyřvázná a struktura krystalu je určena čtyřmi vazebnými elektrony. Arsen je však pětivázný. Ukazuje se, že atom arsenu si může najít místo v krystalu germania (protože má poměrně vhodné rozměry), ale musí se chovat jako čtyřvázný atom, tj. čtyři ze svých vazebných elektronů používá k tvorbě vazeb krystalu a pátý elektron je navíc. Tento nadbytečný elektron je poután velmi slabě – jeho vazebná energie je menší než 1/10 eV. Při pokojové teplotě získá elektron snadno uvedenou energii z tepelné energie krystalu, a pak začne jednat po svém – pohybuje se v mřížce jako volný elektron. Příměsový atom, jakým je v našem případě arsen, se nazývá *donor*, protože přináší do krystalu záporné nosiče. Přidáme-li do taveniny germania velmi malé množství arsenu, rozdělí se donory arsenu po celé oblasti a v krystalu vznikne určitá hustota záporných nosičů.

Mohlo by se zdát, že po přiložení libovolně malého elektrického napětí na krystal z něj uniknou všechny záporné nosiče. K tomu nedojde, neboť všechny atomy arsenu, které jsou v krystalu zabudovány, mají kladný náboj; jelikož má krystal zůstat neutrální, musí být průměrná hustota záporných nosičů – elektronů rovna hustotě donorů. Přiložíme-li ke stěnám krystalu dvě elektrody a připojíme je na baterii, začne obvodem téct proud. Stejně jako jedním koncem unikají záporné nosiče, musejí na druhé straně z druhé elektrody přicházet nové elektrony, aby se průměrná hustota vodivostních elektronů přibližně shodovala s hustotou donorů.

Protože donory jsou kladně nabitě, budou se snažit zachytávat vodivostní elektrony, které pronikají dovnitř krystalu. Atomy donoru proto mohou fungovat jako zachytávače, o nichž jsme hovořili v předcházející stati. Je-li energie potřebná k zachycení dostatečně malá (jako je tomu např. u arsenu), bude počet nosičů zachycených v libovolném okamžiku jen malým zlomkem z celkového počtu. Chceme-li hlouběji pochopit chování polovodičů, musíme vzít v úvahu uvedený záchyt. Budeme však dále předpokládat, že energie zachycení je dostatečně malá a teplota krystalu je dostatečně vysoká, takže všechny atomy – donory budou bez svých elektronů. Samozřejmě to je jen přiblížení.

Je také možné zabudovat do krystalu germania nějaký příměsový trojvazný atom, např. hliník. Atom hliníku se snaží zachovat si čtyřvaznost tím, že „ukradne“ některému sousednímu atomu germania jeden elektron. Z atomu hliníku se tak stane záporně nabitý atom, který bude efektivně čtyřvazný. U okradeného atomu germania samozřejmě vznikne díra, která může putovat krystalem jako kladný nosič. Příměsový atom, který může takovým způsobem vytvořit díru, se nazývá *akceptor*, protože akceptuje, tj. přijímá jeden elektron. Když do taveniny germania nebo křemíku přidáme malou příměs hliníku, bude mít vzniklý krystal určitou zabudovanou hustotu děr, které se mohou chovat jako kladné nosiče.

Přidáme-li do polovodiče donorovou nebo akceptorovou příměs, říkáme, že materiál byl *dotován*.

V krystalu germania se zabudovanými donorovými nečistotami se při pokojové teplotě objevují vodivostní elektrony – nejen donorů, ale i z párů elektron–díra, které vznikají působením tepelné energie krystalu. Elektrony pocházející z obou zdrojů jsou, samozřejmě, rovnocenné a do hry statistických procesů, které vedou do stavu rovnováhy, se jich zapojuje celkový počet N_n . Není-li teplota příliš nízká, počet záporných nosičů pocházejících od donorových atomů příměsi je přibližně stejný jako počet příměsových atomů. Ve stavu rovnováhy je rovnice (12.4) stále platná; součin $N_n N_p$ je při dané teplotě přesně určené číslo. Znamená to, že přidáme-li do krystalu další donory, které zvýší N_n , musí se počet kladných nosičů N_p zmenšit o takovou hodnotu, aby součin $N_n N_p$ zůstal nezměněn. Je-li koncentrace příměsí dostatečně velká, je počet záporných nosičů N_n určen počtem donorových atomů a téměř nezávisí na teplotě – všechny změny exponenciálního členu se uskutečňují na účet N_p , i když je mnohem menší než N_n . V čistém krystalu s malou koncentrací donorové příměsi budou v převaze záporné nosiče; takový materiál se nazývá *polovodič typu N*.

Přidáme-li do krystalové mřížky akceptorovou příměs, vzniknou díry; některé z nich při svých toulkách krystalem anihilují s volnými elektrony, které objevily v důsledku tepelných fluktuací. Tento proces pokračuje do té doby, dokud není splněna podmínka (12.4). Ve stavu rovnováhy narůstá počet kladných nosičů na úkor zmenšování počtu záporných nosičů tak, že jejich součin zůstává konstantní. Materiál s nadbytkem kladných nosičů se nazývá *polovodič typu P*.

Přiložíme-li k polovodičovému krystalu dvojici elektrod napojených na různé potenciály, objeví se uvnitř elektrické pole, které uvede kladné a záporné nosiče do pohybu; obvodem začne téct elektrický proud. Nejdříve zkoumejme, co se děje v materiálu typu N, v němž záporné nosiče tvoří většinu. V tom případě můžeme zanedbat vliv děr; jejich příspěvek je nepatrný, neboť je jich velmi málo. V ideálním krystalu by se nosiče pohybovaly volně, bez překážek. V reálném krystalu (a zvláště v krystalu s příměsmi) se však při konečné teplotě elektrony nepohybují úplně volně. Při neustálých srážkách jsou vychylovány ze svých původních trajektorií, čímž se mění jejich hybnosti. Tyto srážky jsou právě ty rozptyly, o nichž jsme hovořili v předcházející kapitole a které se objevují na každé nehomogenitě krystalové mřížky. V materiálu typu N jsou hlavními centry rozptylů právě donorové atomy, které jsou zdrojem nosičů. Protože vodivostní elektrony mají na místech donorů částečně odlišnou energii, budou se vlny pravděpodobnosti rozptylovat právě na těchto místech. Dokonce i v dokonale čistém krystalu se v důsledku tepelných vibrací objevují (při nenulové teplotě) nehomogenity v mřížce. Z klasického pohledu můžeme říci, že atomy nesedí přesně v pravidelných uzlech mřížky, ale v každém okamžiku jsou v důsledku tepelných vibrací trochu vysunuty. Energie E_0 , které souvisí s každým uzlem mřížky podle teorie popsané v 11. kapitole se od místa k místu částečně mění, takže vlny amplitudy pravděpodobnosti se nepřenášejí úplně ideálně, ale rozptylují se nepravidelným způsobem. Při velmi vysokých teplotách nebo u velmi čistých materiálů může mít uvedený rozptyl značný vliv, ale pro většinu materiálů s příměsmi, které se používají v běžných přístrojích, pochází největší příspěvek k rozptylu od příměsových atomů. Nyní se pokusme odhadnout hodnotu elektrické vodivosti takového materiálu.

Přiložíme-li k polovodiči typu N elektrické pole, začnou se v něm urychlovat všechny záporné nosiče; jejich rychlost se zvětšuje, dokud se nerozptýlí na některém donorovém atomu. Znamená to, že nosiče, které se původně pohybovaly náhodným způsobem s určitou tepelnou energií, se začnou pohybovat ve směru siločar elektrického pole a získávají průměrnou driftovou rychlost, čímž způsobí tok elektrického náboje krystalem. Driftová rychlost je obecně v porovnání s typickými tepelnými rychlostmi menší, proto můžeme při odhadu proudu předpokládat, že doba mezi rozptyly je konstantní. Předpokládejme, že záporný nosič má efektivní elektrický náboj q_n . V elektrickém poli \mathcal{E} na něj působí síla $q_n \mathcal{E}$. Ve stati 43.3, dílu 1 jsme za takových podmínek vypočítali průměrnou driftovou rychlost. Zjistili jsme, že je rovna $F\tau/m$, kde F je síla působící na náboj, τ je střední volná doba mezi srážkami a m je hmotnost. Měli bychom sice použít efektivní hmotnost, kterou jsme vypočítali v předcházející kapitole, ale protože nás zajímá pouze přibližný odhad, budeme předpokládat, že tato efektivní hmotnost je ve všech směrech stejná. Budeme ji nyní označovat m_n . V tomto přiblížení je průměrná driftová rychlost rovna

$$v_{\text{drift}} = \frac{q_n \mathcal{E} \tau_n}{m_n}. \quad (12.5)$$

Když známe driftovou rychlost, umíme vypočítat velikost proudu. Hustota elektrického proudu j je rovna počtu nosičů N_n v jednotce objemu, kterou vynásobíme průměrnou driftovou rychlostí a nábojem nosiče, tedy

$$j = N_n v_{\text{drift}} q_n = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n} \mathcal{E}. \quad (12.6)$$

Vidíme, že hustota proudu je úměrná elektrickému poli; takový polovodičový materiál podléhá Ohmovu zákonu. Koeficient úměrnosti mezi j a \mathcal{E} , tj. σ , je roven

$$\sigma = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n}. \quad (12.7)$$

Pro materiály typu N je vodivost poměrně nezávislá na teplotě. Zaprvé, počet většiny nosičů N_n je určen hlavně hustotou donorů v krystalu (pokud teplota není příliš nízká, neboť pak atomy zachytávají příliš mnoho nosičů). Za druhé, střední doba mezi srážkami τ_n je dána převážně hustotou příměsových atomů, což, samozřejmě, nezávisí na teplotě.

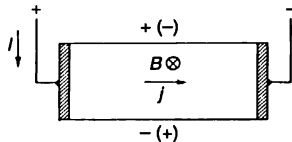
Všechny uvedené argumenty platí i v případě materiálu typu P. Jediné, co se změní, jsou hodnoty parametrů v rovnici (12.7). Je-li ve stejném čase porovnatelný počet záporných i kladných nosičů, musíme sečíst příspěvky od obou typů. Celková vodivost bude rovna

$$\sigma = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n} + \frac{N_p q_p^2 \tau_p}{m_p}. \quad (12.8)$$

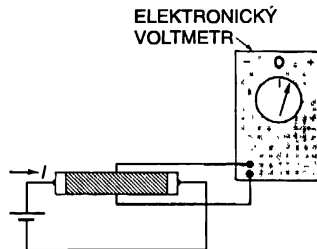
Ve velmi čistých materiálech jsou N_p a N_n přibližně stejné. Jsou menší než v materiálech s příměsemi, proto i vodivost je menší. Kromě toho se prudce mění s teplotou (podle závislosti $e^{-E_{\text{prah}}/kT}$) a tedy i vodivost se může s teplotou měnit extrémně rychle.

12.3 HALLŮV JEV

Je to určitě zvláštní, že v látce, v níž jedinými relativně volnými objekty jsou elektrony, by se měl elektrický proud přenášet dírami, které se chovají jako kladně nabitě částice. Rádi bychom proto popsali experiment, který poměrně jasně ukazuje, že nosiče elektrického proudu zcela určitě nesou kladný náboj. Předpokládejme, že máme polovodičový materiál (může to být i kov) ve tvaru kvádru, na nějž přiložíme elektrické pole v takovém směru, aby proud tek l horizontálním směrem, jak to ukazuje *obr. 12.6*. Dále uvažujme, že ke kvádru přiložíme magnetické pole, které je kolmé na proud (nechť je nasměrováno kolmo na rovinu obrázku). Pohybující se nosiče budou pociťovat magnetickou sílu $q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Protože střední rychlost driftu je v závislosti na znaménku náboje nosiče nasměrována buď doprava nebo doleva, bude střední magnetická síla směřovat buď nahoru, nebo dolů. Ne, to není pravda! U směrů, které jsme vybrali pro proud a magnetické pole, bude magnetická síla působit na pohybující se náboje vždy směrem *nahoru*! Kladně nabitě částice, které se pohybují ve směru \mathbf{j} (doprava), budou vychylovány nahoru. Tvoří-li proud záporné náboje, pohybují se doleva (protože směr elektrického proudu zůstává stejný) a také budou vychylovány nahoru. Při ustálených poměrech však nedochází k pohybu nosičů směrem nahoru, neboť proud může téct pouze zleva doprava. Na začátku se několik nábojů vychýlí směrem nahoru a na povrchu polovodiče vytvoří plošnou hustotu náboje. Na povrchu opačné strany krystalu se vytvoří stejná plošná hustota náboje, ale s opačným znaménkem. Náboje se hromadí na vrchní a spodní straně krystalu do té doby, kdy se síly takto vzniklého elektrického pole, které působí na pohybující se náboje přesně nevyruší se střední magnetickou silou, takže ustálený proud teče horizontálně. Náboje na protilehlých stranách krystalu vytvoří podél krystalu ve vertikálním směru potenciálový rozdíl, který můžeme měřit pomocí vysokoodporového voltmetru, jak je znázorněno na *obr. 12.7*. Znaménko potenciálového rozdílu, které ukazuje voltmetr, závisí na znaménku nosičů nábojů odpovídých za proud.



Obr. 12.6 Hallův jev vzniká v důsledku magnetických sil působících na nosiče náboje



Obr. 12.7 Měření Hallova jevu

Když byly poprvé provedeny tyto pokusy, očekávalo se, že znaménko potenciálového rozdílu bude záporné, neboť se myslelo, že vodivost zprostředkovávají záporné elektrony. Nastalo velké

překvapení, když se zjistilo, že znaménko má v některých materiálech opačnou hodnotu. Ukázalo se, že nosičem proudu byly částice s kladným nábojem. Z našich úvah o příměsových polovodičích je jasné, že polovodiče typu N by měly vytvořit takové znaménko potenciálového rozdílu, které odpovídá záporným nosičům a polovodiče typu P by měly mít opačné znaménko, jelikož proud je tvořen v tomto případě kladně nabitými dírami.

Objevení anomálního znaménka potenciálového rozdílu v Hallově jevu bylo poprvé pozorováno v kovu a ne v polovodiči. Předpokládalo se, že vodivost kovů zprostředkovávají vždy elektrony, ale ukázalo se, že beryllium má právě opačné znaménko potenciálového rozdílu. Nyní už chápeme, proč v kovech a polovodičích je za určitých okolností možné, že „objekty“ odpovědné za vodivost jsou díry. Ačkoliv v konečném důsledku jsou to vždy elektrony, které se pohybují krystalem, přece však vztah mezi hybností, energií a odezvou na vnější pole je přesně takový, jaký bychom očekávali pro elektrický proud, tvořený kladnými částicemi.

Pokusme se kvantitativně odhadnout, jak velký bude potenciálový rozdíl, který očekáváme u Hallova jevu. Odebírá-li voltmetr (viz obr. 12.7) zanedbatelný proud, znamená to, že náboje v polovodiči se pohybují zleva doprava a vertikální magnetická síla se musí přesně vyrušit s vertikálním elektrickým polem, které označíme \mathcal{E}_\perp (index znamená příčný). Aby elektrické pole vyrušilo magnetické síly, musí platit

$$\mathcal{E}_\perp = -v_{\text{drift}} \times B. \quad (12.9)$$

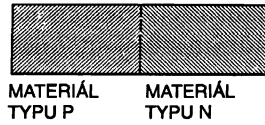
Použijeme vztah mezi driftovou rychlostí a hustotou elektrického proudu uvedeného v rovnici (12.6) a dostaneme

$$\mathcal{E}_\perp = -\frac{1}{qN} jB.$$

Potenciálový rozdíl mezi vrchní a spodní stranou krystalu dostaneme, když uvedenou intenzitu elektrického pole vynásobíme výškou krystalu. Intenzita \mathcal{E}_\perp v krystalu je úměrná hustotě proudu a magnetické indukci. Konstanta úměrnosti $1/qN$ se nazývá Hallův koeficient a obvykle se označuje symbolem R_H . Závisí jen na hustotě nosičů za předpokladu, že nosiče jednoho znaménka jsou ve zjevné převaze. Hallův jev je proto velice vhodný k experimentálnímu měření hustoty nábojů v polovodiči.

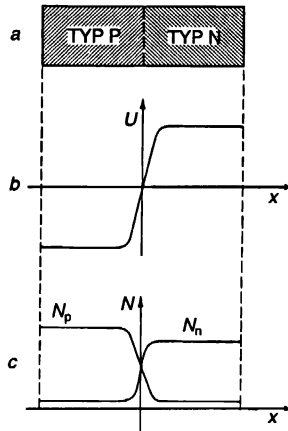
12.4 POLOVODIČOVÉ PŘECHODY

Nyní si objasníme, co se stane, vezmeme-li dva krystaly germania nebo křemíku, které mají rozdílné vnitřní charakteristiky (řekněme různé druhy nebo množství příměsí) a k vytvoření přechodu je přiložíme k sobě. Uvažujme nejdříve přechod PN, u kterého je na jedné straně hraniční plochy germanium typu P a na druhé straně germanium typu N (viz obr. 12.8). Z praktického hlediska je velmi těžké přiložit k sobě dva kusy krystalů tak, aby se na atomové úrovni rovnoměrně dotýkaly po celé ploše. Proto se při tvorbě přechodu používá jen jeden kus krystalu, jehož dvě oblasti opracujeme rozdílným způsobem. Například nejdříve necháme vyrůst polovinu krystalu a do zbývající taveniny přidáme nějakou vhodnou příměs. Jiná možnost je, že potřebeme povrch krystalu trochou příměsí a zahřejeme ho, čímž způsobíme, že některé atomy příměsí difundují do nitra krystalu. Přechody vytvořené takovýmto způsobem nemají ostrou hranici, ačkoliv rozhraní můžeme udělat velmi úzké – do 10^{-4} cm. V našich úvahách budeme brát ideální situaci, při níž se dvě rozdílné oblasti krystalu setkávají na ostrém rozhraní.



Obr. 12.8 Přechod PN

Na té straně přechodu PN, kde je oblast typu N, se nacházejí volně se pohybující se elektrony, ale i pevné donorové atomy, které vyrovnávají celkový elektrický náboj. Na straně typu P se kromě volně se pohybujících děr nachází stejný počet záporných akceptorových atomů, které udržují nábojovou rovnováhu. Ve skutečnosti je to popis situace, kdy se materiály navzájem ještě nedotýkají. Jakmile je však přiložíme k sobě, situace se v okolí rozhraní změní. Elektrony, které přijdou z oblasti typu N k rozhraní, se neodrazí nazpět, jako by tomu bylo v případě volné plochy, ale mohou přímo vniknout do oblasti typu P. Část elektronů se proto bude snažit proniknout z materiálu typu N do materiálu typu P, kde je méně elektronů. To však nemůže pokračovat donekonečna, neboť s ubýváním počtu elektronů vzrůstá v oblasti N kladný náboj; nakonec vznikne takové elektrické napětí, které brzdí difuzi elektronů do oblasti P. Podobným způsobem difundují kladné nosiče ze strany P na stranu N a zanechávají v oblasti P nadbytek záporného náboje. Ve stavu rovnováhy musí být celkový difuzní tok roven nule. K tomu dochází v důsledku působení vytvořených elektrických polí, která jsou orientována právě takovým způsobem, že přitahují kladné nosiče zpět do oblasti P.



Obr. 12.9 Elektrický potenciál a hustoty nosičů náboje v polovodičovém přechodu bez vnějšího napětí

Difuzní procesy, které jsme právě popsali, probíhají současně a jsou orientovány v takových směrech, že způsobují přísun kladného náboje do materiálu typu N a záporného náboje do oblasti typu P. Protože polovodičové materiály mají konečnou vodivost, nastane změna potenciálu mezi stranou P a stranou N pouze v poměrně úzké oblasti blízko rozhraní; v obou hlavních částech krystalu bude potenciál konstantní. Představme si osu x ve směru kolmém na rozhraní. Elektrický potenciál se pak bude měnit v závislosti na x tak, jak ukazuje obr. 12.9b. Část c obrázku ukazuje očekávané změny hustoty N_n záporných nosičů a hustoty N_p kladných nosičů. V dostatečné vzdálenosti od rozhraní by měly hustoty nosičů N_p a N_n dosáhnout takové rovnovážné hodnoty, kterou dostaneme v oddělené části krystalu při téže teplotě. (Obrázek je nakreslen pro

přechod, v němž oblast P obsahuje více příměsí než oblast N.) Protože na rozhraní existuje potenciálový rozdíl, musí kladné nosiče překonat potenciálový val, aby se dostaly do oblasti typu P. Znamená to, že ve stavu rovnováhy může být v materiálu typu N méně kladných nosičů než v materiálu typu P. Lze očekávat (vzpomeňte si na zákony statistické mechaniky), že poměr nosičů typu P na obou stranách je určen následující rovnicí

$$\frac{N_p(\text{P - oblast})}{N_p(\text{N - oblast})} = e^{-q_p U/kT}. \quad (12.10)$$

Součin $q_p U$ v exponentu je roven právě energii, která je potřebná k přenesení náboje q_p potenciálovým rozdílem V .

Přesně podobnou rovnici máme pro hustotu nosičů typu N

$$\frac{N_n(\text{N - oblast})}{N_n(\text{P - oblast})} = e^{-q_n U/kT}. \quad (12.11)$$

Známe-li rovnovážné hustoty v obou materiálech, můžeme z libovolné z uvedených rovnic vypočítat potenciálový rozdíl na rozhraní.

Všimněme si, mají-li rovnice (12.10) a (12.11) dávat stejnou hodnotu potenciálového rozdílu U , musí být hodnota součinu $N_p N_n$ stejná v oblasti P, jakož i v oblasti N. (Vzpomeňme si, že $q_n = -q_p$). V předcházejících částech jsme viděli, že součin závisí pouze na teplotě a prahové energii krystalu. Za předpokladu, že obě části krystalu mají stejnou teplotu, dávají uvedené rovnice stejnou hodnotu potenciálového rozdílu.

Potenciálový rozdíl, který existuje mezi jednou a druhou stranou přechodu, nám připomíná baterii. Kdybychom stranu N spojili vodičem se stranou P, získali bychom možná elektrický proud. To by bylo skvělé, neboť proud by neustále protékal a nespotřebovávali bychom žádný materiál. Získali bychom tak nekonečný zdroj energie, což by bylo narušením druhého zákony termodynamiky. Spojíme-li však opravdu stranu P se stranou N, nedostaneme žádný proud. Příčina je zjevná. Představme si nejdříve vodič, který je vyroben z nedotovaného materiálu. Když jej připojíme v oblasti typu N, vznikne přechod, na němž se vytvoří potenciálový rozdíl. Necht' je jeho velikost rovna jedné polovině potenciálového rozdílu, který je mezi oblastí P a N. Připojíme-li nedotovaný vodič k oblasti typu P, vznikne znovu přechod, jehož potenciálový rozdíl bude opět roven jedné polovině rozdílu potenciálů na přechodu PN. Na všech přechodech se rozdíly potenciálů nastaví tak, že v obvodu nebude téct žádný proud. Ať bychom použili jakýkoliv druh vodiče na spojení obou stran přechodu PN, vždy nám vzniknou dva přechody; budou-li mít všechny přechody stejnou teplotu, budou se všechny potenciálové skoky navzájem rušit a v obvodě se neobjeví žádný proud. Při podrobné analýze se však ukazuje, že má-li některý přechod odlišnou teplotu od jiných přechodů, proud poteče. Tento proud bude některé přechody ohřívat, jiné bude ochlazovat a tepelná energie se bude přeměňovat na elektrickou. Na základě uvedeného jevu pracují termočlánky, které se používají k měření teploty a v termoelektrických generátorech. Tentýž jev je využíván i u nízkooberňových ledniček.

Nedokážeme-li však změřit potenciálový rozdíl mezi dvěma stranami přechodu PN, jak se můžeme ujistit, že potenciálový skok znázorněný na *obr. 12.9* opravdu existuje? Jeden způsob je ten, že přechod osvítime světlem. Když se fotony světla absorbují, mohou vytvořit pár elektron – díra. V silném elektrickém poli, které existuje v přechodu (tj. v oblasti klesání potenciálu, viz *obr. 12.9*), jsou díry přitahovány do oblasti typu P a elektrony do oblasti typu N. Připojíme-li obě

strany přechodu k vnějšímu obvodu, vytvoří tyto dodatečné náboje proud. Světelná energie se v přechodu změní na elektrickou. Na tomto principu pracují sluneční baterie, které vyrábějí elektrický proud pro zabezpečení provozu některých satelitů.

Při našich úvahách o polovodičových přechodech jsme předpokládali, že díry a elektrony se pohybují více méně nezávisle (neuvažujeme-li, jakým způsobem se dostávají do stavu statistické rovnováhy). Když jsme popisovali proud vznikající při osvětlení přechodu světlem, předpokládali jsme, že elektrony a díry vytvořené v oblasti přechodu se dostanou do nitra krystalu ještě dříve, než by mohly být anihilovány nosiči opačné polarity. V bezprostřední blízkosti přechodu, kde je hustota nosičů obou znamének přibližně stejná, je anihilace párů elektron – díra (nazývaná i *rekombinace*) velmi důležitý jev a při podrobné analýze polovodičového přechodu jej musíme brát v úvahu. Předpokládali jsme, že díra a elektron, které vzniknou v oblasti přechodu, mají velkou šanci dostat se do nitra krystalu ještě před rekombinací. Typický čas, za nějž si elektron nebo díra najde partnera s opačným znaménkem, kolísá pro běžné polovodičové materiály v rozsahu od 10^{-3} do 10^{-7} s. Tento čas je, mimochodem, mnohem delší než střední volná doba τ mezi srážkami s rozptylovými centry v krystalu, kterou jsme používali při výpočtu vodivosti. U typického přechodu NP je čas, za nějž je elektron nebo díra, která vznikne v oblasti přechodu vtažena dovnitř krystalu, mnohem kratší než rekombinační doba. Proto bude většina párů přispívat vnějšímu proudu.

12.5 USMĚRNĚNÍ NA POLOVODIČOVÉM PŘECHODU

V této části si ukážeme, jak může přechod PN pracovat jako usměrňovač. Přiložíme-li k přechodu napětí v jednom směru, bude procházet velký proud; když přiložíme totéž napětí v opačném směru, bude protékat velmi malý proud. V případě, že použijeme střídavé napětí, dostaneme proud pouze v jednom směru – proud bude *usměrněný*. Ještě jednou se podívejme, co se děje ve stavu rovnováhy popsané křivkami na *obr. 12.9*. V materiálu typu P je velká koncentrace N_p kladných nosičů, které difundují všemi směry, a určitá jejich část přichází každou sekundu k přechodu. Proud kladných nosičů, které se dostanou k přechodu, je úměrný N_p . Většina z nich se však vzhledem k vysokému potenciálovému valu vrátí zpět a pouze část $e^{-qU/kT}$ přechodem projde. Stejně existuje proud kladných nosičů přicházejících k přechodu z druhé strany, který je taktéž úměrný hustotě kladných nosičů v oblasti N. Tato hustota je však mnohem menší než hustota na straně P. Když kladné nosiče postupují ze strany N k přechodu, přicházejí k valu se záporným sklonem, kde okamžitě sklouznou dolů do oblasti P. Tento proud si označme I_0 . Ve stavu rovnováhy jsou proudy v obou směrech stejné. Znamená to, že můžeme očekávat platnost následujícího vztahu

$$I_0 \sim N_p(\text{oblast N}) = N_p(\text{oblast P}) e^{-qU/kT}. \quad (12.12)$$

Všimněte si, že se zcela shoduje s rovnicí (12.10). Rozdíl je jen v tom, že jsme k ní přišli odlišným způsobem.

Zkusme snížit napětí na straně N přechodu o hodnotu ΔU , čehož lze dosáhnout připojením vnějšího potenciálového rozdílu k přechodu. Rozdíl potenciálů podél valu nebude U , ale $U - \Delta U$. Proud kladných nosičů z oblasti P do oblasti N bude nyní obsahovat tuto hodnotu potenciálového rozdílu v exponentu. Označíme si ho I_1 a píšeme

$$I_1 \sim N_p(\text{oblast P}) e^{-q(U - \Delta U)/kT}.$$

Uvedený proud je oproti I_0 větší právě o faktor $e^{q\Delta U/kT}$. Znamená to, že mezi I_1 a I_0 platí následující vztah

$$I_1 = I_0 e^{+q\Delta U/kT}. \quad (12.13)$$

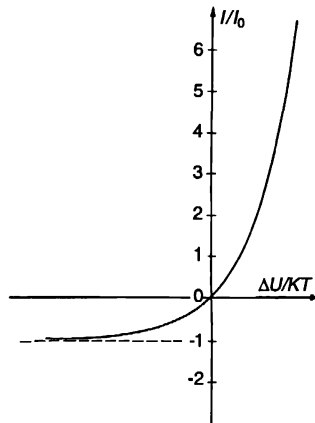
Proud z oblasti P roste exponenciálně v závislosti na vnějším připojeném napětí ΔU . Proud kladných nosičů z oblasti N však zůstává při malých hodnotách ΔU konstantní. Když se kladné nosiče přibližují k valu, vždy se setkají s klesajícím potenciálem a všechny sklouznou do oblasti P. (Situace se změní, je-li ΔU větší než přirozený potenciálový rozdíl U ; takovými vysokými napětími se však nebudeme zabývat.) Výsledný proud I kladných nosičů, který teče přechodem, získáme jako rozdíl proudů z obou směrů

$$I = I_0 (e^{+q\Delta U/kT} - 1). \quad (12.14)$$

Výsledný děrový proud teče do oblasti N. Tam díry difundují do nitra oblasti N, kde anihilují s elektrony, které jsou v této oblasti v převaze. Elektrony, které se při této anihilaci ztrácejí, nahrazuje proud elektronů z elektrody připojené k materiálu typu N.

Je-li $\Delta U = 0$, je výsledný proud v (12.14) nulový. Pro kladné ΔU se stoupajícím napětím proud prudce roste. Pro záporné ΔU má proud opačné znaménko, exponenciální člen se brzy stane zanedbatelným a záporný proud nikdy nepřevyší I_0 , který má podle našich předpokladů poměrně malou hodnotu. Závěrný proud I_0 je ohraničen malou hustotou minoritních nosičů na straně N přechodu.

Provedeme-li přesně tutéž analýzu pro proud záporných nosičů, který prochází přechodem, opět nejdříve s nulovým potenciálovým rozdílem a pak s malým vnějším rozdílem potenciálů ΔU , dostaneme pro výsledný elektronový proud rovnici zcela analogickou rovnicí (12.14). Protože celkový proud je součtem proudů obou nosičů, bude rovnice (12.14) vyjadřovat taktéž i celkový proud za předpokladu, že I_0 představuje maximální proud při opačném napětí.



Obr. 12.10 Závislost proudu přechodem na připojeném napětí

Voltampérová charakteristika rovnice (12.14) je znázorněna na obr. 12.10. Ukazuje typické chování krystalových diod používaných v počítačích. Musíme připomenout, že rovnice (12.14) platí pouze pro malá napětí. Při napětích porovnatelných nebo větších než vlastní vnitřní potenciálový rozdíl U , vstupují do hry další efekty a vyjádření proudu už není tak jednoduché.

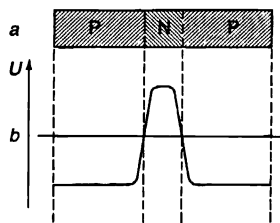
Mimochodem, možná že si vzpomenete, že přesně stejnou rovnici, jako je (12.14), jsme dostali, když jsme rozebrali „mechanický usměrňovač“ – rohatku se západkou (viz kapitola 46, díl 1). V obou případech jsou rovnice stejné, neboť základní fyzikální procesy jsou velmi podobné.

12.6 TRANZISTOR

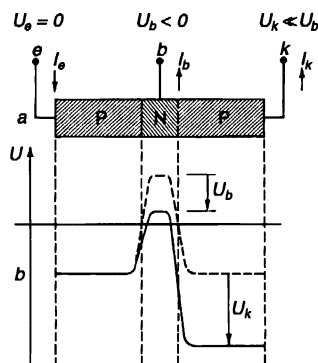
Snad nejvýznamnější uplatnění polovodičů bylo realizováno při vynálezu tranzistoru. Tranzistor obsahuje dva polovodičové přechody, které jsou velmi blízko u sebe. Funguje v podstatě na stejných principech, které jsme viděli u polovodičové diody, na usměrňujícím přechodu. Představme si, že máme krystal germania, který je složen ze tří oblastí: oblast typu P, oblast typu N a opět oblast typu P (obr. 12.11a).

Uvedená kombinace tvoří tranzistor typu PNP. Každý přechod se chová přibližně tak, jak jsme popsali v předcházející stati, tj. na každém přechodu dochází k potenciálovému poklesu ve směru z oblasti typu N do oblasti typu P. Mají-li obě oblasti typu P stejné vnitřní vlastnosti, budou potenciálové změny podél krystalu vypadat tak, jak znázorňuje obr. 12.11b.

Nyní si představme, že ke každé ze tří oblastí připojíme vnější zdroj napětí (viz obr. 12.12a). Všechna napětí budeme určovat vzhledem k levému potenciálu, který z tohoto důvodu bude roven nule.



Obr. 12.11 Rozdělení potenciálu v tranzistoru, když není připojeno napětí



Obr. 12.12 Rozdělení potenciálu v pracujícím tranzistoru

Budeme ho nazývat *emitor*. Oblast typu N se nazývá *báze* a je k ní připojen slabý záporný potenciál. Pravou oblast P nazveme *kolektor* a je k ní připojen větší záporný potenciál. Za těchto podmínek budou potenciálové změny podél krystalu probíhat tak, jak to ukazuje obr. 12.12b.

Nejdříve se podívejme, co se děje s kladnými nosiči, protože hlavně na jejich chování závisí práce tranzistoru PNP. Protože emitor má vůči bázi kladný potenciál, bude procházet proud kladných nosičů z oblasti emitoru do oblasti báze. Proud je poměrně velký, protože napětí je připojeno na přechod v propustném směru (to odpovídá pravé polovině křivky na obr. 12.10). Za těchto podmínek jsou kladné nosiče-díry „emitovány“ z části P do části N. Možná si myslíte, že tento proud vytéká z oblasti N do vývodu připojeného na bázi. Zde je však ukryto tajemství tranzistoru. Oblast N je vyrobena velmi úzká – řádově 10^{-3} cm a méně a je mnohem užší než její příčné rozměry. Znamená to, že když díry vstoupí do oblasti N, mají velkou naději, že prodifundují ke druhému přechodu ještě dříve, než by mohly anihilovat s elektrony v oblasti N. Když se dostanou k pravému přechodu, objeví se před nimi prudce klesající potenciálový val, po němž okamžitě sklouznou do pravé oblasti P. Tato část krystalu se nazývá *kolektor* (z anglického collect – sbírat), protože sbírá díry, které prodifundovaly oblastí typu N. V typickém tranzistoru je děrový proud, který opouští emitor a vstupuje do báze, až na malý zlomek procenta sbírán kolektorem a jen malá jeho část přispívá k čistému bázeovému proudu. Součet bázeového a kolektorového proudu je, samozřejmě, roven emitorovému proudu.

Nyní si představme, co se bude dít, když začneme jemně měnit bázeový potenciál U_b . Protože se nacházíme v pravé oblasti relativně prudké závislosti křivky, která je na obr. 12.10, způsobí už i malá změna potenciálu U_b poměrně velkou změnu emitorového proudu I_e . Kolektorové napětí U_k má mnohem větší zápornou hodnotu než bázeové napětí, a proto mají tyto nepatrné změny potenciálu zanedbatelný vliv na strmost potenciálového valu mezi bázi a kolektorem. V každém případě dopadne většina kladných nosičů emitovaných do oblasti N do kolektoru. Proto budou změnám potenciálu na bázeové elektrodě odpovídat změny proudu I_k na kolektoru. Podstatné však je, že bázeový proud I_b bude vždy pouze malým zlomkem kolektorového proudu. Tranzistor tedy pracuje jako zesilovač; malý proud I_b vstupující do bázeové elektrody vytváří několiksetkrát silnější kolektorový proud.

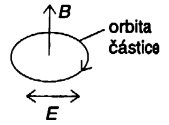
A co se děje s elektrony – zápornými nosiči, které jsme dosud neuvažovali? Všimněte si, že neočekáváme žádný významný proud elektronů mezi bázi a kolektorem. Protože kolektor je připojen na vysoké záporné napětí, musely by elektrony z báze překonat značně vysoký potenciálový val a pravděpodobnost toho je příliš malá. Proud elektronů na kolektoru bude proto velmi malý.

Na druhé straně však elektrony *mohou* putovat do emitorové části. Lze očekávat, že proud elektronů v tomto směru bude srovnatelný s proudem děr z emitoru do báze. Takový elektronový proud není užitečný, naopak, je velmi nevhodný, neboť zvětšuje celkový bázeový proud, který je třeba k dosažení určitého proudu děr do kolektoru. Tranzistor se proto konstruuje tak, aby proud elektronů do emitoru byl co nejmenší. Elektronový proud je úměrný N_n (báze), hustotě záporných nosičů v bázeové části, zatímco děrový proud z emitoru závisí na N_p (emitoru), hustotě kladných nosičů v emitorové části. Poměrně slabým dotováním oblastí typu N dosáhneme, že N_n (báze) bude mnohem menší než N_p (emitoru). (Kromě toho nám pomůže, uděláme-li bázeovou oblast velmi úzkou, neboť odstraňování děr z této oblasti do kolektoru značně zvětší průměrný děrový proud z emitoru do báze a elektronový proud zůstane nezměněn.) Celkově lze shrnout, že elektronový proud přechodem emitor–báze může být učiněn mnohem menším než proud děrový, takže elektrony nebudou mít v činnosti tranzistoru PNP žádnou významnou úlohu. Proudů jsou určeny zejména pohybem děr a tranzistor pracuje jako zesilovač.

Tranzistor dostaneme i tehdy, když zaměníme materiály typu P za N a opačně. Pak získáme tranzistor typu NPN, v němž hlavní proudy tvoří elektrony, které se pohybují z emitoru do báze a odtud do kolektoru. Je zřejmé, že všechny úvahy, které jsme provedli o tranzistoru PNP, platí stejně dobře i pro tranzistor NPN za předpokladu, že potenciály na elektrodách budou mít opačná znaménka.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 12.1 ■ Uvádíme obvyklé schéma experimentu s cyklotronovou rezonancí (obrázek). $\mathbf{B} = B_0$ je statické magnetické pole mířící podél osy z , střídavé elektrické pole $E = E_0 \cos \omega t$ míří ve směru osy x . Cyklotronová rezonanční frekvence ω_c se určuje při maximu pohlcovaného výkonu pole E .



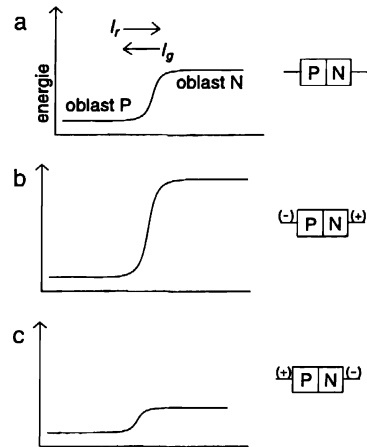
Elementární řešení úlohy o pohybu částice v homogenním magnetickém poli dává $\omega_c = \frac{qB_0}{m^*}$, kde m^* je efektivní hmotnost. Předpokládejme, že efektivní hmotnost nezávisí

na směru, v němž se částice pohybuje. Pohybová rovnice elektronu (nebo díry) v polovodiči má tvar $m^* \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{v}}{\tau} \right) = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, kde τ je střední doba mezi srážkami (viz kap. 32 díl 2). Necht' $v_x = v_0 e^{i\omega t}$

a $E_x = E_0 e^{i\omega t}$. Ukažte, že $\frac{v_x}{E_x} = \frac{q\tau}{m^*} \left[\frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2 + 2i\omega\tau} \right]$.

Pohlcovaný výkon je úměrný $\text{Re}(v_x/E_x)$. Proč? Jak lze získat současně obě veličiny τ a m^* z údajů o cyklotronové rezonanci? Všimněte si, že k pozorování rezonance musí být $\omega_c \tau > 1$. Co to fyzikálně znamená?

- 12.2 ■ Na obrázku a jsou znázorněny typické energetické diagramy pro díry v PN přechodu (např. v polovodičové diodě) bez vnějšího napětí. V rovnovážném stavu máme v tom případě proud „tepelných děr“ I_g . Tyto díry difundují z oblasti N do oblasti P a vzniklý proud je přesně roven rekombinačnímu proudu děr I_r , který teče z oblasti P do oblasti N. Přiložíme-li k PN přechodu závěrné nebo propustné napětí, změní se energetický diagram na případ b a c na obrázku. Uvažujte tyto tři případy a ukažte že výraz pro výsledný děrový proud bude $I_g = I_r (e^{qU/kT} - 1)$ (U je napětí přiložené k PN přechodu). A jaký bude celkový proud?



Přiblížení nezávislých částic

13.1 SPINOVÉ VLNY

13.2 DVĚ SPINOVÉ VLNY

13.3 NEZÁVISLÉ ČÁSTICE

13.4 MOLEKULA BENZENU

13.5 JEŠTĚ TROCHU ORGANICKÉ CHEMIE

13.6 DALŠÍ POUŽITÍ TOHOTO PŘIBLÍŽENÍ

13.1 SPINOVÉ VLNY

V 11. kapitole jsme vypracovali teorii šíření elektronu nebo libovolné jiné „částice“ (např. excitace atomu) krystalovou mřížkou. V předcházející kapitole jsme tuto teorii uplatnili na polovodiče. Když jsme však hovořili o situacích, v nichž se vyskytovalo mnoho elektronů, zanedbávali jsme všechny interakce mezi nimi. Bylo to, samozřejmě, pouze přiblížení. V této kapitole budeme dále rozebírat myšlenku, že interakci mezi elektrony můžeme zanedbávat. Využijeme také příležitosti a ukážeme si některá další použití teorie šíření částic. Protože nadále nebudeme uvažovat vzájemné působení částic, nepřinese nám tato kapitola kromě aplikace nic principiálně nového. První příklad, který uvedeme, je však takový, že je možné poměrně přesně napsat správné rovnice, i když je „částic“ víc než jedna. Na tomto případu uvidíme, jak se dělá přiblížení při zanedbání vzájemného působení. Problém však nebudeme rozebírat příliš podrobně.

Jako první příklad uvažujme spinovou vlnu ve feromagnetickém krystalu. S teorií feromagnetizmu jsme se setkali v 36. kapitole, díl 2. Při nulové teplotě jsou všechny spiny elektronů, které přispívají k magnetizmu celého feromagnetického krystalu, navzájem rovnoběžné. Mezi spiny existuje energie interakce, která je nejnižší, když jsou všechny orientovány směrem dolů. Při libovolné nenulové teplotě je však určitá pravděpodobnost, že některé spiny budou nasměrovány opačně. Přibližný výpočet této pravděpodobnosti je uveden v 36. kapitole. Nyní si popíšeme kvantově mechanickou teorii tohoto jevu, abychom věděli, jak bychom měli postupovat, kdybychom

problém řešili přesněji. (Přesto provedeme určité idealizace, neboť budeme předpokládat, že elektrony jsou lokalizovány u atomů a každý spin interaguje pouze se sousedními spiny.)

Uvažujme model, v němž jsou u každého atomu spárovány všechny elektrony s výjimkou jednoho, takže všechny magnetické jevy atomu pocházejí z jednoho elektronu se spinem $1/2$. Dále předpokládejme, že tyto elektrony jsou umístěny v uzlových bodech mřížky. Uvedený model přibližně odpovídá kovovému niklu.

Také předpokládejme, že interakce mezi libovolnými dvěma sousedními spinujícími elektrony přispívá k energii celého systému členem

$$E = -\sum_{i,j} K \cdot \sigma_i \cdot \sigma_j, \quad (13.1)$$

kde σ_i , σ_j představují spiny a součet provedeme přes všechny sousedící páry elektronů. Tento typ energie interakce jsme už rozebrali, když jsme zkoumali hyperjemné rozštěpení v atomu vodíku v důsledku interakce mezi magnetickými momenty elektronu a protonu. Tehdy jsme ji vyjádřili jako $A \sigma_e \cdot \sigma_p$. Pro daný pár, řekněme pro elektrony u atomu 4 a u atomu 5, bude nyní hamiltonián $-K \sigma_4 \cdot \sigma_5$. Takovýto člen má každý pár a celkový hamiltonián dostaneme (stejně, jako to bývá i s klasickou energií) součtem členů všech interagujících párů. Ve výrazu pro energii vystupuje faktor $-K$, neboť kladné K odpovídá feromagnetizmu, tj. takovému případu, kdy se nejmenší energie získá při paralelní orientaci sousedních spinů. V případě reálného krystalu se mohou objevit i další členy – interakce s druhým, případně s třetím nejbližším sousedem atd., ale takovéto komplikace nebudeme v této chvíli uvažovat.

Hamiltonián (13.1) nám poskytuje úplný popis feromagnetika (v rámci našeho přiblížení) a měly by tedy z něj jít odvodit všechny magnetické vlastnosti. Měli bychom být také schopni vypočítat termodynamické vlastnosti magnetizace. Kdybychom dokázali najít všechny energetické hladiny, mohli bychom určit vlastnosti krystalu při teplotě T na základě principu, že pravděpodobnost toho, že se systém bude nacházet v daném stavu s energií E , je úměrná $e^{-E/kT}$. Tento problém nebyl nikdy vyřešen do konce.

Některé úlohy si můžeme znázornit na jednoduchém případě, kdy všechny atomy leží na jedné přímce – případ jednorozměrné mřížky. Postupy, které uvedeme, si můžete snadno upravit na trojrozměrnou mřížku. V každém bodě mřížky je umístěn elektron, který se může vyskytovat ve dvou různých stavech – se spinem nahoru, nebo se spinem dolů. Celou soustavu popíšeme tak, že řekneme, jak jsou všechny spiny orientovány. Nechť je hamiltonián systému operátorem energie interakce. Interpretujeme-li spinové vektory ze vztahu (13.1) jako operátory sigma nebo matice sigma, můžeme pro lineární mřížku psát vztah

$$\hat{H} = \sum_n -\frac{A}{2} \hat{\sigma}_n \cdot \hat{\sigma}_{n+1} \quad (13.2)$$

V rovnici jsme použili konstantu $A/2$, aby se některé z dalších rovnic shodovaly s těmi, které jsou v kapitole 11.

Jaký je nejnižší stav uvedeného systému? Stav s nejmenší energií je ten, při němž jsou všechny spiny paralelní, řekněme všechny orientovány nahoru⁵¹⁾. Uvedený stav můžeme zapsat jako

51) Základní stav, který jsme vybrali, je ve skutečnosti „degenerovaný“; existují i další stavy s toutéž energií – např. stav, v němž jsou všechny spiny nasměrovány dolů nebo do jiného libovolného směru. Už nepatrný vliv vnějšího pole ve směru osy z přiřadí všem uvedeným stavům rozdílné energie a stav, který jsme si vybrali my, zůstane jako jediný základní stav.

$|\dots++++\dots\rangle$, nebo $|\text{zákl.}\rangle$ pro zdůraznění toho, že je to „základní“, tj. nejnižší stav. Jeho energii vypočítáme snadno. Jeden způsob je ten, že si všechny vektory sigma rozepíšeme do složek $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ a $\hat{\sigma}_z$, podrobně vypočítáme všechny příspěvky k energii základního stavu a nakonec je sečteme. Můžeme však použít výhodnou zkratku. Ve stati 10.2 jsme viděli, že $\hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j$ můžeme zapsat pomocí Pauliho operátoru výměny spinu

$$\hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j = 2\hat{P}_{ij}^{\text{vým. spinu}} - 1, \quad (13.3)$$

kde operátor $\hat{P}_{ij}^{\text{vým. spinu}}$ vyměňuje spiny i -tého a j -tého elektronu. Pomocí uvedené substituce přejde hamiltonián na tvar

$$\hat{H} = -A \sum_n \left(\hat{P}_{n, n+1}^{\text{vým. spinu}} - \frac{1}{2} \right). \quad (13.4)$$

Nyní snadno vidíme, co se děje v různých stavech. Když jsou např. oba spiny i -tého a j -tého elektronu orientovány směrem nahoru, nezpůsobí výměna spinů žádnou změnu, tedy působením \hat{P}_{ij} na daný stav dostaneme tentýž stav, což je ekvivalentní násobení číslem $+1$. Výraz $(\hat{P}_{ij} - 1/2)$ je přesně roven $1/2$. (Vysvětlující slova „vým. spinu“ u písmene P už nebudeme v dalších zápisech používat.)

V základním stavu směřují všechny spiny nahoru, proto vyměníme-li libovolný pár spinů, dostaneme opět původní stav. Základní stav je stacionární. Působíme-li na něj hamiltoniánem, získáme znovu tentýž stav vynásobený součtem členů, kdy za každý pár spinů přibude $-(A/2)$. Znamená to, že energie systému v základním stavu je $-A/2$ na každý atom. Dále bychom se chtěli podívat na energie některých vybuzených stavů. Bude výhodné vztahovat energie k základnímu stavu, tj. zvolit energii základního stavu rovnou nule. Můžeme toho dosáhnout přičtením energie $A/2$ ke každému členu hamiltoniánu. Pak se $1/2$ v rovnici (13.4) změní na 1 a nový hamiltonián bude ve tvaru

$$\hat{H} = -A \sum_n (\hat{P}_{n, n+1} - 1). \quad (13.5)$$

Při tomto hamiltoniánu je energie nejnižšího stavu rovna nule. Působení operátoru výměny spinu je ekvivalentní násobení jednou (pro základní stav), což se ruší s 1 v každém členu.

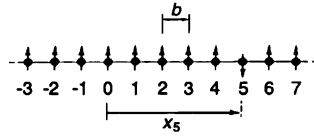
Pro popis stavů, různých od základního, potřebujeme vhodný soubor bázových stavů. Výhodné bude roztřídit si stavy podle toho, jestli je v daném stavu jeden elektron se spinem směřujícím dolů, nebo dva elektrony atd. Existuje mnoho stavů, v nichž je pouze jeden spin nasměrovaný dolů. Tento spin může být u atomu „4“, nebo u atomu „5“, nebo u atomu „6“, ... Tyto stavy jsme si vlastně mohli vybrat jako bázové a označit je $|4\rangle$, $|5\rangle$, $|6\rangle$, ... Výhodnější však bude označovat zvláštní atom, jehož spin je nasměrovaný dolů, jeho souřadnicí x . To znamená, že stav $|x_3\rangle$ definujeme jako stav, v němž směřují všechny spiny směrem nahoru kromě spinu elektronu u atomu v místě x_3 , jehož spin směřuje dolů (obr. 13.1). Obecně bude $|x_n\rangle$ označovat stav s jedním spinem natočeným dolů, který se nachází v místě x_n n -tého atomu.

Jak působí hamiltonián (13.5) na stav $|x_5\rangle$? Jeden člen hamiltoniánu je řekněme $-A(\hat{P}_{7,8} - 1)$. Operátor $\hat{P}_{7,8}$ vymění spiny sousedících atomů 7 a 8. Ve stavu $|x_5\rangle$ však oba směřují nahoru, a proto se nic nestane. Působení operátorem $\hat{P}_{7,8}$ je ekvivalentní násobení jednou

$$\hat{P}_{7,8} |x_5\rangle = |x_5\rangle.$$

Z toho vyplývá

$$(\hat{P}_{7,8} - 1) |x_5\rangle = 0.$$



Obr. 13.1 Bázový stav $|x_5\rangle$ systému lineárně uspořádaných spinů. Všechny spiny směřují nahoru kromě spinu v místě x_5 , který směřuje dolů

Takže všechny členy hamiltoniánu – samozřejmě kromě těch, které obsahují atom 5 – dávají nulu. Při působení na stav $|5\rangle$ vymění operátor $\hat{P}_{4,5}$ spin atomu 4 (směr nahoru) a atomu 5 (směr dolů). V koncovém stavu směřují všechny spiny nahoru, kromě spinu u atomu 4, tj.

$$\hat{P}_{4,5} |x_5\rangle = |x_4\rangle.$$

Stejně platí

$$\hat{P}_{5,6} |x_5\rangle = |x_6\rangle.$$

Z uvedeného je vidět, že jediné členy hamiltoniánu, které „přežijí“ jsou $-A(\hat{P}_{4,5} - 1)$ a $-A(\hat{P}_{5,6} - 1)$. Při působení na $|x_5\rangle$ vytvářejí $-A|x_4\rangle + A|x_5\rangle$, resp. $-A|x_6\rangle + A|x_5\rangle$ takže máme výsledek

$$\hat{H}|x_5\rangle = -A \sum_n (\hat{P}_{n,n+1} - 1) |x_5\rangle = -A \{|x_6\rangle + |x_4\rangle - 2|x_5\rangle\}. \quad (13.6)$$

Působí-li hamiltonián na stav $|x_5\rangle$, vzniká určitá amplituda toho, že se objeví stavy $|x_4\rangle$ a $|x_6\rangle$. Znamená to, že existuje nenulová amplituda toho, že spin směřující dolů přeskočí na sousední atom. Protože mezi spiny dochází k vzájemnému působení, může se stát (tj. existuje určitá pravděpodobnost), že pokud jsme měli na začátku na některém místě spin dolů, na konci bude místo něj překlopen jiný spin. Působíme-li hamiltoniánem na obecný stav $|x_n\rangle$, dostáváme

$$\hat{H}|x_n\rangle = -A \{|x_{n+1}\rangle + |x_{n-1}\rangle - 2|x_n\rangle\}. \quad (13.7)$$

Všimněme si, že vezmeme-li úplnou množinu stavů, v nichž je pouze jeden spin natočen dolů, budou se míchat mezi sebou. Hamiltonián nikdy nepromíchává tyto stavy s těmi, v nichž je více spinů natočených dolů. Pokud spiny pouze vyměňujeme, nemůžeme nikdy změnit celkový počet spinů směřujících dolů.

Bude výhodné, zapíšeme-li hamiltonián v maticovém tvaru, řekněme $H_{n,m} \equiv \langle x_n | \hat{H} | x_m \rangle$. Rovnice (13.7) je ekvivalentní s následujícím zápisem

$$\begin{aligned} H_{n,n} &= 2A \\ H_{n,n+1} &= H_{n,n-1} = -A \\ H_{n,m} &= 0 \quad \text{pro } |n-m| > 1. \end{aligned} \quad (13.8)$$

Jaké jsou hladiny stavů, v nichž jeden spin směřuje dolů? Jako obvykle, nechť C_n je amplituda toho, že nějaký stav $|\psi\rangle$ je ve stavu $|x_n\rangle$. Má-li $|\psi\rangle$ být stav s přesně určenou energií, musí se

všechna C_n měnit v závislosti na čase stejným způsobem, totiž

$$C_n = a_n e^{-iEt/\hbar}. \quad (13.9)$$

Dosaďme toto zkušební řešení do obecné rovnice pro hamiltonián a využijme vztahy (13.8):

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = \sum_m H_{nm} C_m. \quad (13.10)$$

Dostaneme, samozřejmě, nekonečný počet rovnic, všechny však můžeme psát takto

$$Ea_n = 2Aa_n - Aa_{n-1} - Aa_{n+1}. \quad (13.11)$$

Setkáváme se opět s přesně toutéž úlohou, kterou jsme řešili v 11. kapitole, ale s tím rozdílem, že místo E_0 máme nyní $2A$. Řešení odpovídají amplitudám C_n (amplitudy se spinem překlopeným dolů), které se šíří podél mřížky s konstantou šíření k a s energií

$$E = 2A(1 - \cos kb), \quad (13.12)$$

kde b je mřížková konstanta.

Řešení s přesně určenou hodnotou energie představují vlny převráceného spinu nazývané *spinové vlny*. Každé vlnové délce přísluší určitá energie. Pro velké vlnové délky (malé hodnoty k) se tato energie mění podle zákona

$$E = Ab^2k^2. \quad (13.13)$$

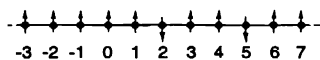
Podobně můžeme nyní uvažovat lokalizovaný balík (obsahující pouze velké vlnové délky), které představuje elektron se spinem dolů v nějakém místě mřížky. Tento spin se bude chovat jako „částice“. Protože její energie souvisí s k podle vztahu (13.13), bude mít „částice“ efektivní hmotnost

$$m_{\text{ef}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \quad (13.14)$$

Takové „částice“ se někdy nazývají *magnony*.

13.2 DVĚ SPINOVÉ VLNY

Nyní si ujasníme, co se děje, vyskytují-li se dva spiny směřující dolů. Opět si určíme soubor bázeových stavů. Vybereme si ty stavy, v nichž na dvou místech směřují spiny dolů, jako např. stav znázorněný na *obr. 13.2*. Takové stavy můžeme označit dvěma x -ovými souřadnicemi těch bodů mřížky, v nichž se nacházejí uvedené dva spiny.



Obr. 13.2 Stav se dvěma dolů překlopenými spiny

Stav, který je ukázán na obrázku, označme $|x_2, x_5\rangle$. Obecně vyjádření báзовých stavů je $|x_n, x_m\rangle$ – je to dvojnásobně nekonečná množina! Při uvedeném zápisu je stav $|x_4, x_9\rangle$ přesně tentýž jako stav $|x_9, x_4\rangle$, protože každý z nich pouze říká, že spiny v místech 4 a 9 směřují dolů; pořadí nehraje žádnou úlohu. Stav $|x_4, x_4\rangle$ nemá žádný smysl, protože něco takového neexistuje. Libovolný stav $|\psi\rangle$ můžeme popsat tak, že udáme, jaké jsou amplitudy toho, že se tento stav nachází v každém z báзовých stavů. $C_{m,n} = \langle x_m, x_n | \psi \rangle$ bude proto nyní znamenat amplitudu toho, že se systém ve stavu $|\psi\rangle$ bude nacházet ve stavu, v němž jsou na místě m -tého i n -tého atomu oba spiny nasměrovány dolů. Nepřehlednosti, které se nyní začínají objevovat, nepocházejí z nepřehlednosti myšlenek – jsou to pouze problémy „účetnického“ charakteru. (Jedním z problémů kvantové mechaniky je právě způsob zápisu. Čím více překlopených spinů budeme uvažovat, tím nepřehlednější bude zápis, tím víc indexů se bude objevovat a rovnice budou vypadat stále hrozivěji a hrozivěji; samotné myšlenky však zůstávají většinou takové, jako v nejjednodušším případě.)

Rovnice pro pohyb systému spinů jsou diferenciální rovnice pro $C_{n,m}$:

$$i\hbar \frac{d C_{n,m}}{d t} = \sum_{ij} H_{nm,ij} C_{ij}. \quad (13.15)$$

Předpokládejme, že chceme najít stacionární stavy. Jako obvykle, derivací podle času dostaneme E krát amplituda a $C_{m,n}$ můžeme nahradit koeficienty $a_{m,n}$. Dále musíme pečlivě prošetřit působení H na stav s překlopenými spiny m a n . Není to složité. Na chvíli uvažujme, že polohy m a n jsou od sebe dostatečně vzdálené, takže se vyhneme zjevné komplikaci. Operace výměny, která se uskutečňuje v místě x_n , posune překlopený spin buď k $(n+1)$ -ímu, nebo $(n-1)$ -ímu atomu, takže existuje určitá amplituda toho, že nynější stav pochází ze stavu $|x_m, x_{n+1}\rangle$, ale existuje i amplituda toho, že pochází ze stavu $|x_m, x_{n-1}\rangle$. Posunout se však mohl i druhý spin; v tom případě dostáváme amplitudu toho, že $C_{m,n}$ pochází z $C_{m+1,n}$ nebo z $C_{m-1,n}$. Oba tyto jevy by měly být stejné. Konečný tvar Hamiltonovy rovnice pro $C_{m,n}$ je následující

$$E a_{m,n} = -A(a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) + 4A a_{m,n}. \quad (13.16)$$

Uvedená rovnice je správná kromě dvou případů. Pro $m=n$ rovnice vůbec neexistuje a pro $m=n\pm 1$ se první dva členy v rovnici (13.16) nenacházejí. *Těchto dvou výjimek si nebudeme všimát.* Budeme prostě ignorovat to, že některé z uvedených rovnic jsou trochu změněné. Konec konců, krystal považujeme za nekonečný a počet členů v hamiltoniánu je také nekonečný, takže zanedbání několika z nich by nemělo mít velký vliv. V prvním přiblížení proto na změny rovnic zapomeňme. Jinými slovy, předpokládejme, že rovnice (13.16) platí pro všechna m a n , dokonce i tehdy když jsou m a n sousední. *To je podstatný předpoklad našeho přiblížení.*

Nyní už není tak těžké najít řešení. Okamžitě dostáváme

$$C_{m,n} = a_{m,n} e^{iEt/\hbar}, \quad (13.17)$$

přičemž

$$a_{m,n} = \text{konst} e^{ik_1 x_m} e^{ik_2 x_n}, \quad (13.18)$$

kde

$$E = 4A - 2A \cos k_1 b - 2A \cos k_2 b. \quad (13.19)$$

Na chvíli uvažujme, co by se stalo, kdybychom měli *nezávislé* spinové vlny (zmíněné v předcházející stati) s příslušejícími $k = k_1$ a $k = k_2$. Na základě rovnice (13.12) by jejich energie byly

$$\varepsilon_1 = (2A - 2A \cos k_1 b)$$

$$\varepsilon_2 = (2A - 2A \cos k_2 b).$$

Všimněte si, že energie E ve vztahu (13.19) je rovna přesně jejich součtu

$$E = \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2). \quad (13.20)$$

Jinými slovy, řešení můžeme vysvětlit následujícím způsobem. Máme dvě částice, tj. dvě spinové vlny. Hybnost jedné je popsána číslem k_1 , hybnost druhé číslem k_2 a energie systému je rovna součtu energií těchto dvou objektů. Obě částice působí úplně nezávisle. To je všechno, co k tomu lze říci.

Je pravda, že jsme provedli určitá přiblížení, ale na tomto místě nechceme otázku přesnosti naší odpovědi rozebírat. Cítíte však, že při uvažování průměrně velkého krystalu s miliardami atomů obsahuje i hamiltonián miliardy členů a vynechání několika z nich nezpůsobí velkou chybu. Kdyby byl počet spinů natočených dolů tak velký, že by to bylo nezanedbatelné, museli bychom se určitě zabývat opravami.

(Je zajímavé, že jsou-li překlopeny právě dva spiny, umíme napsat přesné řešení. Samotný výsledek není zvlášť důležitý. Pozoruhodné je však to, že v takovémto případě se rovnice vůbec dají přesně řešit. Řešení je

$$a_{m,n} = e^{i k_c (x_m + x_n)} \sin k |x_m - x_n| \quad (13.21)$$

s energií

$$E = 4A - 2A \cos k_1 b - 2A \cos k_2 b$$

a s vlnovými čísly k_c a k , která souvisejí s k_1 a k_2 podle vztahů

$$k_1 = k_c - k, \quad k_2 = k_c + k. \quad (13.22)$$

Uvedené řešení zahrnuje interakci mezi dvěma spiny. Popisuje to, že při jejich sblížení, existuje určitá pravděpodobnost rozptylu. Chování spinů je velmi podobné chování vzájemně působících částic. Podobná teorie rozptylu však přesahuje rámec toho, o čem zde chceme hovořit.)

13.3 NEZÁVISLÉ ČÁSTICE

V předcházející stati jsme si napsali hamiltonián rovnicí (13.15) pro dvojčásticový systém. Pak jsme pomocí přiblížení, které je ekvivalentní zanedbání libovolné „interakce“ mezi dvěma částicemi, našli stacionární stavy popsané rovnicemi (13.17) a (13.18). Výsledný stav je součinem dvou jednočásticových stavů. Avšak řešení, které jsme napsali pro $a_{m,n}$ (vztah (13.18)), opravdu není uspokojivé. Už tehdy jsme upozornili, že stav $|x_4, x_9\rangle$ se *nelíší* od stavu $|x_9, x_4\rangle$, neboť *pořadí* x_m a x_n nemá význam. Obecně řečeno, algebraický výraz pro amplitudu $C_{m,n}$ se při výměně hodnot x_m a x_n nesmí změnit, neboť výměna nemění stav. V každém případě $C_{m,n}$ představuje amplitudu

toho, že v místě x_m a x_n najdeme spiny orientované směrem dolů. Všimněme si však, že výraz (13.18) *není* symetrický vzhledem k x_m a x_n , neboť hodnoty k_1 a k_2 mohou být obecně rozdílné.

Problém vznikl proto, že při řešení rovnice (13.15) jsme nepožadovali splnění tohoto dodatečného požadavku. Naštěstí, to lze snadno upravit. Nejdříve si všimněme, že kromě řešení (13.18) je stejně dobré i následující řešení Hamiltonovy rovnice

$$a_{m,n} = K e^{i k_2 x_m} e^{i k_1 x_n}. \quad (13.23)$$

Dokonce i energie je stejná jako v případě (13.18). Libovolná lineární kombinace (13.18) a (13.23) je také vyhovujícím řešením a energie zůstává určena rovnicí (13.19). Řešení, které jsme si na základě požadavku symetrie měli vybrat, je jednoduše součet rovnic (13.18) a (13.23)

$$a_{m,n} = K [e^{i k_1 x_m} e^{i k_2 x_n} + e^{i k_2 x_m} e^{i k_1 x_n}]. \quad (13.24)$$

V takovém případě je pro libovolné k_1 a k_2 amplituda $C_{m,n}$ nezávislá na tom, v jakém pořadí dosadíme x_m a x_n ; definujeme-li x_m a x_n v opačném pořadí, dostaneme tutéž amplitudu. Vysvětlení rovnice (13.24) pomocí magnonů musí být nyní také jiné. Už nemůžeme říkat, že rovnice představuje *jednu* částici s vlnovým číslem k_1 a *druhou* částici s vlnovým číslem k_2 . Amplituda (13.24) vyjadřuje *jeden* stav se dvěma částicemi (magnony). Tento *stav* charakterizují dvě vlnová čísla k_1 a k_2 . Řešení vypadá jako složený stav částice s hybností $p_1 = \hbar k_1$ a jiné částice s hybností $p_2 = \hbar k_2$. V tomto stavu však nelze říci, která částice je která.

Možná jste si nyní vzpomněli na 2. kapitolu, kde jsme hovořili o identických částicích. Právě jsme si ukázali, že částice spinových vln (magnony) se chovají jako identické Boseho částice. Všechny amplitudy musí být symetrické vzhledem k souřadnicím obou částic, což je totéž jako když řekneme, že „výměnou dvou částic“ dostaneme opět tutéž amplitudu se stejným znaménkem. Můžeme si však pomyslet: „Proč jsme se rozhodli získat řešení (13.24) pomocí *sčítání* dvou členů? Proč jsme nevzali rozdíl? Vždyť při záměně x_m a x_n by nám znaménko minus změnilo pouze znaménko u $a_{m,n}$, což nám nevádí.“ Při výměně x_m a x_n se však *vůbec nic nemění* – všechny elektrony krystalu jsou přesně tam, kde byly předtím, proto neexistuje ani žádný důvod proto, aby se měnilo znaménko amplitudy. Magnony se chovají jako Boseho částice.⁵²⁾

Naše úvaha měla dva cíle: Zaprvé, říci vám něco o spinových vlnách a zadruhé, ukázat vám stav, jehož amplitudu lze získat jako *součin* dvou amplitud a jehož energie je *součet* energií příslušejících jednotlivým amplitudám. Pro *nezávislé částice* se amplituda získává součinem a energie součtem. Snadno lze ukázat, proč právě součtem. Energie – koeficient před t v imaginárním exponentu – je úměrná frekvenci. Když jedna částice z dvojice uskuteční něco s amplitudou $e^{-i E_1 t / \hbar}$ a druhá to uskuteční s amplitudou $e^{-i E_2 t / \hbar}$ a je-li amplituda toho, že to uskuteční současně, součinem jejich jednotlivých amplitud, pak se v součinu objeví jediná frekvence, která je součtem jejich frekvencí. Energie příslušící výsledné amplitudě je tedy součtem obou energií.

Uvedli jsme poměrně dlouhou argumentaci, abychom vám řekli v podstatě jednoduchou věc. Neuvažujeme-li žádné vzájemné působení mezi částicemi můžeme každou z nich popisovat

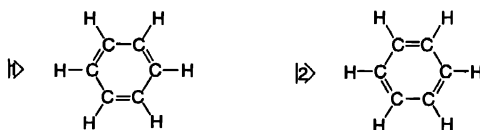
52) Kvazičástice, o nichž nyní hovoříme, se obecně mohou chovat buď jako Boseho částice, nebo jako Fermiho částice; podobně, jak je tomu u volných částic, ty, které mají celočíselný spin jsou *bosony* a ty, které mají poločíselný spin jsou *fermiony*. Magnon představuje elektron, který překlopil spin směrem dolů. *Změna* spinu je *jednotková*, takže magnon má celočíselný spin a je tedy bosonem.

nezávisle. Částice se mohou nacházet ve všech možných různých stavech, v nichž by se mohly vyskytovat, kdyby existovaly samostatně, a každá přispívá k celkové energii takovou hodnotou, jakou má, když se vyskytuje samostatně. Musíme si však pamatovat, že identické částice se mohou chovat (v závislosti na úloze) buď jako Boseho, nebo jako Fermiho částice. Například dva elektrony přidané do krystalu se projeví jako Fermiho částice. Vyměníme-li jim vzájemně polohy, musí amplituda změnit znaménko. V rovnici (13.24) musíme místo součtu napsat rozdíl. Důsledek je ten, že dvě Fermiho částice se nemohou vyskytovat v úplně stejných podmínkách, tj. nemohou mít stejné spiny a stejné k . Amplituda takového stavu je nulová.

13.4 MOLEKULA BENZENU

Kvantová mechanika sice poskytuje základní zákony, určující strukturu molekul, ty však lze přesně využít pouze v případech nejjednodušších sloučenin. Chemici proto vypracovali různé přibližné metody na výpočet některých vlastností složitých molekul. Chtěli bychom vám ukázat, jak se v organické chemii využívá přiblížení nezávislých částic. Začneme s molekulou benzenu.

Hovořili jsme o ní už v 8. kapitole, ale z jiného pohledu – tehdy jsme využívali přibližný model molekuly jako dvojhladinového systému se dvěma báзовými stavy ukázanými na *obr. 13.3*. Molekulu benzenu tvoří kruh šesti atomů uhlíku.

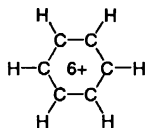


Obr. 13.3 Dva báзовé stavy molekuly benzenu, které jsme studovali v 8. kapitole

Na každý z nich je navázán jeden atom vodíku. V obvyklém obrazu valenčních vazeb je třeba předpokládat dvojitou vazbu mezi polovinou atomů uhlíku. Ve stavu s nejnižší energií existují dvě možnosti znázorněné na obrázku. Vyskytují se i další stavy s vyššími energiemi. Když jsme v 8. kapitole hovořili o benzenu, uvažovali jsme jen tyto dva stavy a všechny ostatní jsme nebrali v úvahu. Zjistili jsme, že energie základního stavu molekuly se neshoduje s energií ani jednoho ze stavů znázorněných na obrázku, ale je nižší o hodnotu úměrnou amplitudě překlopení z jednoho z těchto dvou stavů do druhého.

Nyní se budeme dívat na tutéž molekulu, ale z úplně jiného pohledu, neboť použijeme jiný druh přiblížení. Uvedené dva pohledy nám poskytují rozdílné odpovědi, když však zlepšíme oba modely, mělo by to vést ke správnému a přesnému popisu molekuly benzenu. Pokud vám nezáleží na jejich zlepšení, což je, pravda, nejčastější situace, nebuďte překvapeni, když tyto dva popisy nebudou přesně souhlasit. Přinejmenším si však ukážeme, že i s novým přiblížením bude nejnižší energie molekuly benzenu menší než energie struktur se třemi dvojnými vazbami (viz *obr. 13.3*).

Nyní využijeme následující představu. Uvažujme šest atomů uhlíku molekuly benzenu spojených pouze jednoduchými vazbami, jak je to ukázáno na *obr. 13.4*. Protože jednu vazbu tvoří dva elektrony, odstranili jsme šest elektronů, takže jsme dostali šestinasobně ionizovanou molekulu benzenu. Nyní si všimněme, co se bude dít, když budeme do benzenového jádra postupně vkládat nazpět všech šest elektronů. Předpokládáme, že se elektrony mohou volně pohybovat po celém kruhu. Také uvažujme, že všechny vazby znázorněné na *obr. 13.4* jsou nasycené, tedy si jich nemusíme dále všimnout.



Obr. 13.4 Benzenové jádro, z něhož je odstraněno šest elektronů

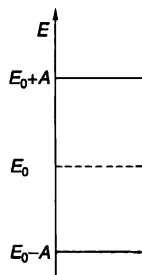


Obr. 13.5 Molekula etylenu

Co se stane, když vrátíme molekulárnímu iontu jeden elektron? Můžc se, samozřejmě, usadit v libovolné ze šesti poloh v benzenovém jádře, které představují šest básových stavů. Bude existovat i určitá amplituda (řekněme A) toho, že elektron přejde z jedné polohy do sousední. Kdybychom analyzovali stacionární stavy, zjistili bychom, že se objeví několik možných hladin energie. To je zatím změna u jednoho elektronu.

Vložme do benzenového kruhu druhý elektron a udělejme nejsměšnější přiblížení, jaké si jen dovedeme představit, totiž takové, že *elektron není ovlivněn chováním toho druhého*. Ineragovat samozřejmě budou; v důsledku coulombovských sil se navzájem odpuzují a – nacházejí-li se na tomtéž místě – bude se jejich celková energie značně odlišovat od dvojnásobku energie, kterou by na tom místě měla pouze jedna částice. Je samozřejmě, že přiblížení nezávislých částic není oprávněné, existuje-li pouze šest poloh, a obzvlášť tehdy, když tam chceme umístit *šest* elektronů. Přesto se chemici dokázali mnohemu přiučit i při takovémto přiblížení.

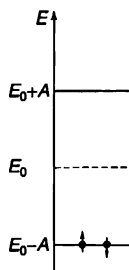
Dříve, než budeme podrobně studovat molekulu benzenu, všimněme si jednoduchého příkladu – molekuly etylenu, v níž jsou dva atomy uhlíku a na každé straně dva atomy vodíku (viz obr. 13.5). Uvedená molekula obsahuje jednu vazbu „navíc“ spojující dva elektrony ze dvou atomů uhlíku. Odstraňme nyní jeden z těchto elektronů; co vznikne? Můžeme se na to dívat jako na dvojhladinový systém, v němž může zbývající elektron být buď u jednoho, nebo u druhého uhlíku. Když to analyzujeme jako dvojhladinový systém, jsou možné energie, které dostaneme pro jeden uvedený elektron, buď $(E_0 - A)$, nebo $(E_0 + A)$ (obr. 13.6).



Obr. 13.6 Možné hladiny energie „nadbytečných“ elektronů v molekule etylenu

Nyní přidejme druhý elektron. Mohli bychom se domnívat, že máme-li dva elektrony, můžeme první z nich umístit do nižšího stavu a druhý do vyššího stavu. Úplně tak to ale není; na něco jsme totiž zapomněli. Každý stav je ve skutečnosti dvojitý. Říkáme-li, že existuje možný stav s energií $(E_0 - A)$, jsou to vlastně dva stavy. Oba elektrony mohou přejít do stejného stavu, má-li jeden z nich spin orientovaný směrem nahoru a druhý má spin orientovaný směrem dolů. (Na základě

vylučovacího principu se už další elektrony nemohou nacházet v daném stavu). Existují tedy dva možné stavy s energií $(E_0 - A)$. Na obr. 13.7 je diagram, který znázorňuje obě energetické hladiny a jejich obsazení. Elektrony budou mít nejmenší energii, budou-li se nacházet v nejnižším stavu s opačně orientovanými spiny. Energie nadbytečné vazby molekuly etylenu proto bude $2(E_0 - A)$, zanedbáme-li vzájemnou interakci dvojice elektronů.



Obr. 13.7 V dvojně vazbě molekuly etylenu mohou nejnižší energetickou hladinu obsazovat dva elektrony (jeden se spinem orientovaným nahoru a druhý se spinem orientovaným dolů)

Vraťme se zpět k molekule benzenu. Oba stavy, které jsou nakresleny na obr. 13.3, mají po třech dvojných vazbách. Každá z nich je velmi podobná vazbě etylenu a k celkové energii přispívá hodnotou $2(E_0 - A)$, přičemž E_0 nyní znamená energii, která je potřebná ke vložení elektronu do benzenu, a A je amplituda přechodu elektronu na sousední místo. Znamená to, že energie by měla být přibližně rovna $6(E_0 - A)$. O molekule benzenu už jsme hovořili dříve a tehdy jsme došli k výsledku, že energie benzenu je menší než energie struktury s třemi dvojnými vazbami. Podívejme se, zda to bude platit i z našeho nového pohledu.

Uvažujme šestinásobně ionizovaný benzenový systém se šesti stavy. I když jsme se takovým systémem ještě nezabývali, víme, jak ho řešit. Napíšeme šest rovnic pro šest amplitud atd. Můžeme si však ušetřit část práce, uvědomíme-li si, že uvedený problém jsme už vlastně vyřešili, když jsme našli řešení pro případ elektronu v nekonečném řetězci atomů. Benzen pravda není nekonečný řetězec – má 6 atomových poloh umístěných do kruhu. Představme si však, že rozvineme řetězec do přímky a očíslováme jeho atomy od 1 do 6. Na nekonečné přímce by byla další poloha označena číslem 7; budeme-li však vyžadovat, aby byla totožná s atomem číslo 1 atd., bude to vlastně totéž jako benzenové jádro. Řečeno jinými slovy, můžeme použít řešení pro nekonečný řetězec s *dodatečnou podmínkou*, že řešení musí být periodické s periodou šest atomů. Na základě 11. kapitoly víme, že elektron na přímce má stavy s přesně určenou energií, je-li amplituda v každém uzlu rovna $\exp(i k x_n) = \exp(i k b n)$. Pro každé k získává energie hodnotu

$$E = E_0 - 2 A \cos k b. \quad (13.25)$$

Vybereme pouze ta řešení, která se po každých šesti atomech opakují. Nejdříve však uveďme výsledek pro obecný případ – kruh s N atomy. Má-li mít řešení periodu N atomů, $\exp(i k b N)$ musí být rovno jedné, resp. $k b N$ musí být násobkem 2π . Je-li s libovolné celé číslo, pak naše podmínka zní

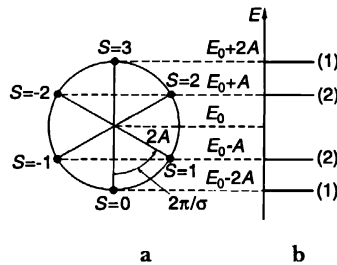
$$k b N = 2\pi s. \quad (13.26)$$

Už dávno jsme viděli, že nemá význam vybírat takové k , které leží mimo interval $\pm\pi/b$. To znamená, že chceme-li získat všechny možné stavy, stačí, když budeme brát hodnoty s z oblasti $\pm N/2$.

Zjišťujeme, že kruh složený z N atomů má N stavů⁵³⁾ s přesně určenými energiemi a jejich vlnová čísla k_s jsou určena vztahem

$$k_s = \frac{2\pi}{Nb} s. \quad (13.27)$$

Každý stav má energii danou rovnicí (13.25). Dostáváme čárové spektrum možných energetických hladin. Spektrum benzenu ($N=6$) je nakresleno na obr. 13.8b. (Čísla v závorkách označují počet různých stavů se stejnou energií.)



Obr. 13.8 Energetické hladiny v kruhu, v němž má elektron šest možných poloh (např. benzenové jádro)

V části *a* obrázku je ukázáno, jak lze pěkným způsobem znázornit uvedené šest hladin energie. Nakreslíme si kružnici se středem na úrovni E_0 a s poloměrem $2A$. Začneme od dolní části a rozdělme ji na šest stejných oblouků (pod úhly vzhledem k spodnímu bodu $k_s b = 2\pi s/N$, resp. $2\pi s/6$ pro benzen). Vertikální výšky bodů na kružnici představují řešení rovnice (13.25). Šest bodů zobrazuje šest možných stavů. Nejnižší hladina má energii $(E_0 - 2A)$, hodnotě $(E_0 - A)$ přísluší dva stavy atd.⁵⁴⁾ Jsou to stavy, které jsou možné v případě jednoho elektronu. Máme-li více než jeden elektron, mohou se v každém stavu nacházet dva elektrony (s opačně orientovanými spiny).

V případě molekuly benzenu je třeba vložit šest elektronů. Základní stav vznikne zaplněním nejnižších možných energetických stavů, tj. dva elektrony budou ve stavu $s=0$, dva $s=+1$ a dva $s=-1$. Podle modelu nezávislých částic je energie základního stavu rovna

$$E_{\text{zákl}} = 2(E_0 - 2A) + 4(E_0 - A) = 6E_0 - 8A. \quad (13.28)$$

Energie je opravdu menší (o hodnotu $2A$) než energie tří samostatných dvojných vazeb.

Porovnáním energie benzenu s energií etylenu můžeme určit A . Jeho velikost je $0,8$ eV (v chemických jednotkách 75 kJ · mol⁻¹).

Uvedený popis můžeme použít k různým výpočtům nebo k tomu, abychom porozuměli dalším vlastnostem benzenu. Pomocí obr. 13.8 můžeme např. určit možné excitace benzenu. Co se stane,

53) Mohlo by se vám zdát, že je-li N sudé číslo, bude počet stavů $N+1$. To však není pravda, protože $s = \pm N/2$ dává stejný stav.

54) Mají-li dva stavy (s různým rozdělením amplitud) tutéž energii, říkáme, že tyto stavy jsou *degenerované*. Všimněte si, že energii $E_0 - A$ mohou mít čtyři elektrony.

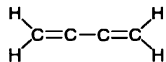
pokusíme-li se některý elektron excitovat? Může se přemístit do některého vyššího neobsazeného stavu. Nejnižší energie excitace je při přechodu z nejnižší zaplněné hladiny na nejnižší nezaplňnou hladinu. Hodnota této energie je $2A$. Benzen bude absorbovat světlo s frekvencí ν , bude-li platit $h\nu = 2A$. Kromě toho bude absorbovat i fotony s energiemi $3A$ a $4A$. Absorpční spektrum benzenu bylo, pravda, už změřeno a více méně se shoduje s naším obrázkem spektrálních čar s výjimkou nejnižšího přechodu, který probíhá v ultrafialové oblasti. Aby se údaje shodovaly s modelovou představou, je třeba vybrat hodnotu A mezi 1,4 a 2,4 eV. Znamená to, že číselná hodnota A je dva až třikrát větší než hodnota předpovězená podle chemické vazebné energie.

Chemik v takových případech musí zkoumat mnoho molekul podobného druhu, aby mohl najít nějaká empirická pravidla. Například zjistí, že k výpočtu vazebné energie je třeba použít určitou hodnotu A , ale k poměrně přesnému určení absorpčního spektra zase jinou hodnotu A . Možná, že vám to připadá absurdní. Takový přístup není příliš uspokojivý z hlediska fyzika, který se snaží chápat přírodu na základě principů. Úloha chemika je však jiná. Musí dokázat dopředu odhadnout, co se bude dít s molekulami, které se ještě nevytvořily nebo které nejsou dodatečně probádané. Potřebuje soubor empirických pravidel a je mu více méně jedno, odkud se berou. Takže teorii využívá úplně odlišným způsobem než fyzik. Pracuje s rovnicemi, v nichž je určitý náznak správnosti, ale pak musí změnit konstanty a provést empirické korekce.

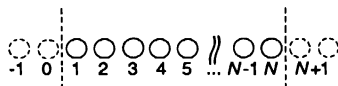
Hlavním důvodem nesrovnalostí v případě molekuly benzenu je neoprávněný předpoklad, že elektrony jsou nezávislé. Přesto v sobě obsahuje kousek pravdy, protože se zdá, že výsledky se ubírají správným směrem. Při použití zmíněných rovnic a empirických pravidel (které zahrnují různé výjimky) může organický chemik klestit cestu houštinou složitých věcí, na které se ve svém bádání zaměřil. (Nezapomínejme na to, že důvod, proč fyzik dokáže dělat výpočty ze základních principů, je ten, že řeší pouze jednoduché úlohy. Nikdy se nezabývá problémem dvaadvaceti, ba ani šesti elektronů. Proto se mu dosud podařilo poměrně přesně spočítat pouze atomy vodíku a helia.)

13.5 JEŠTĚ TROCHU ORGANICKÉ CHEMIE

Podíváme se, jak je možné tytéž myšlenky použít při studiu jiných molekul. Uvažujme např. molekulu 1,3-butadienu, jejíž tvar je schematicky znázorněn na *obr. 13.9* pomocí valenčních vazeb.



Obr. 13.9 Znázornění molekuly 1,3-butadienu pomocí valenčních vazeb



Obr. 13.10 Posloupnost N molekul

Můžeme hrát opět tutéž hru se čtveřicí nadbytečných elektronů, které odpovídají dvěma dvojným vazbám. Odstraníme-li čtyři elektrony, zůstanou čtyři atomy uhlíku v jedné přímce. Už víme, jak řešit systém atomů rozložených podél přímky. Můžete namítnout, že známe řešení pro nekonečnou přímku. Řešení pro nekonečnou přímku však zahrnují i ta pro konečné úseky. Sledujte. Necht N je počet atomů na přímce. Očíslujeme je od 1 po N tak, jako je to ukázáno na

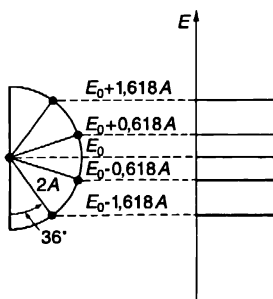
obr. 13.10. V rovnici pro amplitudu v místě 1 se neobjeví člen pro přechod z místa 0. Podobně i rovnice pro amplitudu v bodě N se bude lišit od rovnice, kterou jsme používali pro nekonečnou přímku, neboť z bodu $N+1$ nebude nic přicházet. Předpokládejme však, že dokážeme získat řešení pro nekonečnou posloupnost s následující vlastností. Amplituda toho, že se elektron nachází u atomu 0, je nulová a amplituda výskytu u atomu $N+1$ je také nulová. Pak bude i systém rovnic pro všechny polohy od 1 do N na konečném úseku splněn. Mohli byste si myslet, že takové řešení pro nekonečnou posloupnost neexistuje, protože všechna řešení mají tvar $\exp(ikx_n)$ a absolutní hodnota amplitudy je všude stejná. Určitě si však pamatujete, že energie závisí pouze na absolutní hodnotě k takže další řešení, které je pro danou energii stejně správné, má tvar $\exp(-ikx_n)$. Totéž platí pro libovolnou superpozici uvedených dvou řešení. Odečteme-li je, můžeme získat řešení $\sin kx_n$, které splňuje požadavek toho, aby amplituda v místě $x=0$ byla rovna nule. I tomuto řešení přísluší energie $E_0 - 2A \cos kb$. Vhodným výběrem veličiny k můžeme dosáhnout toho, aby byla amplituda nulová i v místě x_{N+1} . To vyžaduje, aby výraz $(N+1)kb$ byl násobkem π , neboli

$$kb = \frac{\pi}{(N+1)}s, \quad (13.29)$$

kde s je celé číslo od 1 po N . (Bereme pouze kladná k , protože každé řešení obsahuje $+k$ i $-k$; změnou znaménka k dostaneme vždy tentýž stav.) Pro molekulu butadienu se $N=4$, tedy existuje čtveřice stavů s

$$kb = \frac{\pi}{5}, \frac{2\pi}{5}, \frac{3\pi}{5} \text{ a } \frac{4\pi}{5}. \quad (13.30)$$

Hladiny energií můžeme zobrazit pomocí kruhového diagramu, podobně jako jsme to udělali pro benzen. Tentokrát použijeme půlkruh, který rozdělíme na pět stejných částí (obr. 13.11). Dolní bod odpovídá $s=0$ a nepředstavuje žádný stav. Totéž platí pro horní bod, který odpovídá $s=N+1$. Zbývající čtyři body představují čtyři přípustné energie. Existují čtyři stacionární stavy, což se dalo očekávat z toho, že jsme vycházeli ze čtyř básových stavů. Úhly v kruhovém diagramu jsou rovny $\pi/5$, tj. 36° . Nejmenší energie je $E_0 - 1,618A$. (Jaké podivnosti se v matematice objevují. Zlatý řez Řeků⁵⁵⁾ určuje nejnižší energetický stav molekuly butadienu v této naší teorii!)



Obr. 13.11 Hladiny energie butadienu

Nyní už víme, jak se mění energie molekuly butadienu, vložíme-li do ní čtyři elektrony. Zaplní dvě nejnižší hladiny a na každé z nich budou dva elektrony s opačně orientovanými spiny.

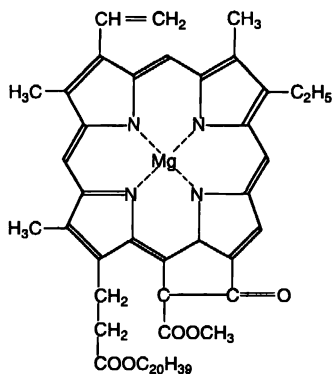
55) Poměr stran obdélníka, který lze rozdělit na čtverec a obdélník podobný původnímu.

Celková energie bude rovna

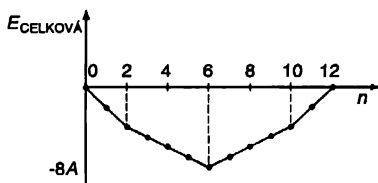
$$E = 2(E_0 - 1,618A) + 2(E_0 - 1,618A) = 4(E_0 - A) - 0,477A. \quad (13.31)$$

Výsledek vypadá poměrně rozumně. Energie je o něco menší než v případě dvou obyčejných dvojných vazeb, ale vazba není tak silná jako v benzenu. V každém případě však chemik takovýmto způsobem analyzuje organické molekuly.

Může si však pomoci nejen energiemi, ale i amplitudami pravděpodobnosti. Tím, že zná amplitudy pro každý stav a ví, které stavy jsou obsazeny, může říci, jaké je pravděpodobnost nalezení elektronu v libovolném místě v molekule. Ta místa, kde je výskyt elektronu pravděpodobnější, jsou náchylná vstupovat do takových chemických substitucí, které vyžadují další elektron, aby se podílel na vytváření vazby s nějakou skupinou atomů. Ostatní oblasti mají sklon účastnit se takových vazeb, kde se systému nabízí nadbytečný elektron.



Obr. 13.12 Molekula chlorofylu



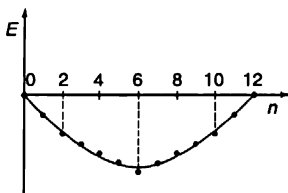
Obr. 13.13 Součet všech energií elektronů, jsou-li nejnižší stavy na obr. 13.8 zaplněny n elektrony (uvažujeme $E_0 = 0$)

Myšlenky, které jsme uvedli, nám pomohou částečně objasnit i takové složité molekuly jako je molekula chlorofylu; jeden typ je znázorněn na obr. 13.12. Všimněme si, že dvojně a jednoduše vazby, které jsme zvýraznili tlustými čarami, tvoří dlouhý uzavřený kruh složený z dvaceti úseků. Nadbytečné elektrony z dvojných vazeb se mohou pohybovat podél kruhu. Pomocí přiblížení nezávislých částic můžeme získat celou množinu energetických hladin. Z přechodů mezi těmito hladinami, které leží ve viditelné části spektra, vznikají intenzivní absorpční čáry, které dávají molekule její výraznou barvu. Tak lze studovat i jiné složité molekuly, např. molekulu xantofylu, který způsobuje červenou barvu listů.

Existuje ještě jedna myšlenka, která pochází z aplikace uvedené teorie v organické chemii. Je to asi nejuspěšnější myšlenka nebo, přinejmenším, v určitém smyslu nejpřesnější. Dává odpověď na takovou otázku: V kterých případech vzniká mimořádně silná chemická vazba? Odpověď je velmi zajímavá. Uvažujme nejdříve například molekuly benzenu. Všimneme si, co se bude dít, začneme-li do šestinasobně ionizované molekuly postupně přidávat elektrony. Budeme dostávat různé ionty benzenu – záporné nebo kladné. Zkusme graficky znázornit energii iontu (nebo neutrální molekuly) jako funkci počtu elektronů. Vezmeme-li $E_0 = 0$ (hodnotu E_0 neznáme), získáme křivku, která je ukázána na *obr. 13.13*. U prvních dvou elektronů klesá funkce lineárně. U každé další skupiny se strmost mění a mezi skupinami se na křivce vyskytují nespojitosti. Změny strmosti jsou na těch místech, kde dochází k zaplnění souboru hladin se stejnou energií a další elektron už obsazuje energeticky vyšší skupinu stavů.

Skutečná energie benzenového iontu se podstatně liší od křivky na *obr. 13.13*, neboť je třeba uvažovat i interakce elektronů a elektrostatickou energii, což jsme v našem případě zanedbali. Tyto korekce se však v závislosti na n mění poměrně málo. I kdybychom je zahrnuli, měla by výsledná křivka energie zlomy u těch hodnot n , při nichž se právě zaplní energetická hladina.

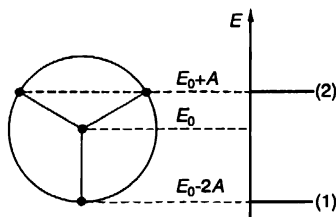
Nyní uvažujme velmi hladkou křivku, kterou v průměru spojíme všechny body (*obr. 13.14*). Můžeme říci, že body, které leží *nad* křivkou, mají hodnoty energie větší než normál a body *pod* křivkou mají hodnoty energie menší než normál.



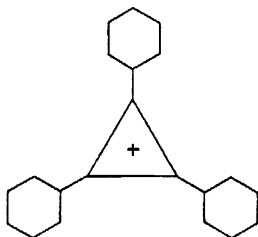
Obr. 13.14 Body z *obr. 13.12* spojené hladkou křivkou. Molekuly s $n=2, 6, 10$ jsou stabilnější než ostatní

Obecně bychom očekávali, že konfigurace, které mají energie menší než normál, budou projevovat – chemicky řečeno – nadprůměrnou stabilitu. Všimněme si, že před body, které jsou pod křivkou, se vždy nachází skupina bodů ležících na přímce – je tomu tak v případě, kdy je k dispozici dost elektronů, aby zaplnily určitou tzv. energetickou slupku. Je to velmi přesná předpověď teorie. Molekuly nebo ionty jsou mimořádně stabilní (v porovnání s podobnými konfiguracemi) právě tehdy, když elektrony zaplňují energetickou slupku.

Uvedená teorie vysvětlila a předpověděla v chemii některé velmi zvláštní skutečnosti. Vezmeme si jednoduchý příklad – kruh složený ze tří bodů. Je až neuvěřitelné, že se chemikům podařilo takový kruh sestrojít a udělat jej stabilním.



Obr. 13.15 Energetický diagram kruhu složeného ze tří bodů



Obr. 13.16 Kation trifenylyl – cyklopropanylu

Energetický kruhový diagram pro tři elektrony je na *obr. 13.15*. Na spodní hladinu umístíme dva elektrony a třetí elektron musí být už umístěn do vyššího stavu. Podle našich argumentů by taková molekula neměla být příliš stabilní, zatímco dvojelektronová struktura ano. Opravdu se ukazuje, že neutrální molekulu trifenylyl-cyklopropenyly lze sestrojít těžko, ale kladný ion, znázorněný na *obr. 13.16*, lze připravit poměrně snadno. Cykly složené ze tří bodů se nikdy snadno neseštroují, protože v organických molekulách, v nichž jsou vazby uspořádány do rovnostranného trojúhelníka, vznikají vždy velká pnutí. Aby sloučenina zůstala stabilní, je třeba strukturu určitým způsobem stabilizovat. Ukazuje se, že navážeme-li na vrcholy trojúhelníka tři benzenová jádra, bude kladný ion stabilní. (Proč benzenová jádra zlepšují stabilitu však není jasné).

Podobným způsobem můžeme analyzovat i pětiúhelník. Nakreslíme-li si energetický diagram, snadno uvidíme, že šestielektronová struktura by měla být mimořádně stabilní, tj. molekula bude nejstabilnější tehdy, bude-li tvořit záporný ion. Stejně můžeme ověřit, že kruh složený ze 4 nebo 8 vrcholů není obzvláště zajímavý, ale kruh, který má 14 nebo 10 vrcholů, bude – podobně jako kruh se šesti body – velmi stabilní v neutrální formě.

13.6 DALŠÍ POUŽITÍ TOHOTO PŘÍBLÍŽENÍ

Existují dva další podobné případy, u nichž se zastavíme jen krátce. Přemýšlíme-li o struktuře atomu, můžeme si představit elektrony, jak postupně zaplňují jednotlivé slupky. Schrödingerovu teorii pro pohyb elektronu lze bez problémů propracovat jen pro případ *jediného* elektronu v „centrálním“ poli – tj. v takovém, které závisí pouze na vzdálenosti od určitého bodu. Jak potom můžeme rozumět tomu, co se děje v atomu, v němž je 22 elektronů?! Jedna možnost je ta, že použijeme přiblížení nezávislých částic. Nejprve vypočítáme, co se stane při jednom elektronu. Získáme nějaký počet hladin energie. Elektron umístíme do stavu s nejmenší hodnotou energie. Zajímá-li nás pouze přibližný model, ukládáme elektrony do dalších slupek a jejich interakce prostě zanedbáme. Existuje však přesnější způsob, který bere v úvahu – přinejmenším do určité míry – vliv elektrického náboje elektronu. Vždy, když do atomu vložíme elektron, vypočítáme jeho amplitudu výskytu na různých místech a její pomocí odhadneme sféricky symetrické rozdělení náboje. Na základě pole tohoto rozdělení, pole kladného jádra a všech už rozmístěných elektronů vypočítáme stavy, které přicházejí v úvahu pro další elektron. Takovým způsobem můžeme dostat poměrně přesné odhady energií neutrálního atomu a různých ionizovaných stavů. Zjistíme, že existují energetické slupky, podobně jako tomu bylo u elektronů v cyklických molekulách (v aromatických sloučeninách). Atom který má jen částečně zaplněnou slupku, bude projevovat náchylnost zbavit se některých elektronů nebo přijmout další, aby se dostal do nejstabilnějšího stavu, tj. stavu, kdy má slupku zaplněnou.

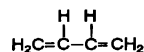
Uvedená teorie vysvětluje mechanismus základních chemických vlastností, které se projevují v periodické soustavě prvků. Inertní plyny patří k těm prvkům, v nichž je slupka právě zaplněna, a proto jen mimořádně těžko reagují. (Některé z nich reagují – např. s fluorem nebo kyslíkem; takové sloučeniny jsou však slabě vázány; inertní plyny jsou opravdu skoro inertní.) Atom, který má o jeden elektron více nebo méně než inertní plyn, snadno ztrácí nebo získává elektron, protože usiluje o mimořádně stabilní (nízkoenergetický) stav, tj. o takovou situaci, v níž bude mít zcela zaplněnou slupku; tyto atomy patří k velmi aktivním chemickým prvkům s valencí +1 nebo -1.

Další příklad můžeme najít v jaderné fyzice. V jádře atomu reagují protony a neutrony mezi sebou poměrně silně. Přesto lze opět analyzovat strukturu jádra pomocí přiblížení nezávislých částic. Bylo experimentálně zjištěno, že jádra, která obsahují určitý zvláštní počet neutronů – totiž 2, 8, 20, 28, 50 nebo 82 – jsou mimořádně stabilní. Jádra, v nichž se protony vyskytují v těchto počtech, jsou také velmi stabilní. Protože na začátku neexistovalo žádné vysvětlení těchto čísel, nazvali je *magická čísla* jaderné fyziky. Je známo že neutrony a protony silně interagují mezi sebou; mnozí proto byli velice překvapeni, když se zjistilo, že model nezávislých částic předpovídá slupkovou strukturu, která objasňuje několik prvních magických čísel. Model předpokládal, že každý nukleon (proton nebo neutron) se pohybuje v centrálním potenciálu, který je vytvářen průměrným účinkem všech ostatních nukleonů. Toto přiblížení selhalo, protože dávalo nesprávné hodnoty pro vyšší magická čísla. Marie Mayerová a nezávisle na ní Jensen se svými spolupracovníky později objevili, že použijeme-li model nezávislých částic a provedeme-li jen opravu na tzv. spin-orbitální interakci, dostaneme zlepšený model, který vysvětluje všechna magická čísla. (Spin-orbitální vazba způsobuje, že energie nukleonu je nižší, je-li jeho spin stejně orientován jako jeho orbitální moment hybnosti pocházející z pohybu v jádře.) Teorie nám nabízí víc – představa tzv. *slupkové struktury* jádra umožňuje předpovídat určité charakteristiky jádra a jaderných reakcí.

Přiblížení nezávislých částic se ukázalo užitečným v širokém rozsahu oborů – od fyziky pevných látek přes chemii a biologii až k jaderné fyzice. Často je to pouze nepřesné přiblížení, ale umožňuje nám lépe porozumět, proč vznikají mimořádně stabilní stavy, resp. proč vznikají slupky. Protože přiblížení neuvažuje složitost interakcí mezi jednotlivými částicemi, neměli bychom se divit, když se často nepodaří správně předpovědět mnohé důležité detaily.

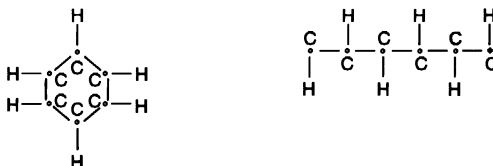
PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 13.1 ■ Strukturu molekuly butadienu můžeme znázornit následujícím způsobem:



Představme si myšlenkový pokus, při němž odstraníme čtyři elektrony vytvářející dvojné vazby a pak je budeme postupně po jednom vracet. Takovou úlohu můžeme řešit v modelu nezávislých částic. Soustavu můžeme považovat za čtveřici potenciálových jam s energiemi E_0 a maticovými prvky hamiltoniánu rovnými $-A$. Jaká bude vlnová délka záření vydávaného molekulami butadienu při přechodu z první vybuzené hladiny na základní hladinu? Berte $A=1\text{eV}$. V jednonásobně ionizované molekule butadienu jsou k dispozici jen tři elektrony pocházející z dvojných vazeb. Jak jsou tyto elektrony v molekule rozděleny?

- 13.2 ■ Máte odhadnout energii potřebnou k roztržení vazby benzenového jádra a najít rozdíl energií dvou konfigurací znázorněných na obrázku.



Použijte k tomu metodu molekulových orbitalů v přiblížení nezávislých částic. Výsledek vyjádřete v eV na molekulu a využijte tu okolnost, že při přechodu z prvního vybuzeného stavu do základního stavu molekuly benzenu vyzařují záření o vlnové délce 200 nm.

- 13.3 ■ Úvahy o spinových vlnách můžeme aplikovat i na feromagnetické materiály při velmi nízkých teplotách. Zejména pro libovolný stav k o energii $E_k \approx k^2 b^2 A$ existuje určitá pravděpodobnost, kterou lze určit z termodynamických úvah, že některé atomy najdeme ve stavu se spinem mířícím dolů, když se při nulové teplotě všechny atomy nacházely ve stavu se spinem mířícím nahoru. Ukažte, že střední počet atomů se spiny mířícími dolů je úměrný $1/(e^{E_k/k_B T} - 1)$, kde jako k_B jsme označili Boltzmannovu konstantu. Rozšíříme-li tuto úvahu na trojrozměrný případ, potom $E_k \approx A b^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ a celkový počet atomů se spinem mířícím dolů v jednotce objemu bude dán integrálem $n_{\text{dolů}} = \int \frac{d^3k/(2\pi)^3}{e^{E_k/k_B T} - 1}$. Dokažte to. V limitě při $T \rightarrow 0$ se magnetizace M blíží k saturevané hodnotě M_s . Ukažte, že při nízkých teplotách platí zákon

$$\frac{M}{M_s} = 1 - \text{konst} T^{3/2} = 1 - 2 \left(\frac{k_B T}{4\pi A} \right)^{3/2} \left[\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} \right].$$

Vypočítejte integrál pomocí rozkladu integrandu do řady.

Závislost amplitud na poloze

14.1 AMPLITUDY NA PŘÍMCE

14.2 VLNOVÁ FUNKCE

14.3 STAVY S PŘESNĚ URČENOU HYBNOSTÍ

14.4 NORMOVÁNÍ STAVŮ V PROMĚNNÉ x

14.5 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

14.6 KVANTOVANÉ HLADINY ENERGIE

14.1 AMPLITUDY NA PŘÍMCE

Nyní si pohovoříme o tom, jak se v kvantové mechanice mění amplitudy pravděpodobnosti v prostoru. V některých předcházejících kapitolách jste mohli mít poměrně nepříjemný pocit z toho, že se o některých věcech nehovořilo. Když jsme např. zmínili molekulu amoniaku, rozhodli jsme se, že ji budeme popisovat pomocí dvou bázevých stavů. Situaci, v níž byl atom dusíku „nad“ rovinou tří atomů vodíku, jsme vybrali jako jeden bázevých stav; jako druhý bázevých stav jsme vybrali případ, když byl atom dusíku „pod“ rovinou tří atomů vodíku. Proč jsme vybrali právě tyto dva stavy? Proč by se atom dusíku nemohl nacházet i ve vzdálenosti 0,2 nebo 0,3, případně i 0,4 nm nad rovinou atomů vodíku? Existuje určitě mnoho poloh, v nichž se atom dusíku může vyskytovat. Když jsme hovořili o iontu molekuly vodíku, v níž se o jeden elektron dělí dva protony, představili jsme si dva bázevých stavy: V jednom je elektron v blízkosti protonu č. 1 a ve druhém je v blízkosti protonu č. 2. Samozřejmě, vynechali jsme mnoho podrobností. Elektron se nenachází přesně u protonu č. 2, ale pouze v jeho blízkosti. Může být někde nad protonem, příp. pod ním nebo nalevo od něj, resp. napravo.

Záměrně jsme se vyhnuli upřesňování těchto podrobností. Řekli jsme, že nás zajímají jen některé rysy problému; když jsme si představovali elektron v okolí protonu č. 1, znamenalo to, že se nacházel v určitém poměrně přesně určeném stavu s přesně určeným rozdělením pravděpodobností výskytu elektronu kolem protonu. Tyto detaily nás však nezajímaly.

Můžeme však o tom uvažovat i jiným způsobem. Při diskuzi o iontu molekuly vodíku jsme se rozhodli pro přibližný popis – situaci jsme popisovali pomocí dvou bázevých stavů. Ve skutečnosti existuje takových stavů velmi mnoho. Elektron může být u protonu v nejnižším, tj. *základním* stavu, ale může se vyskytovat i v mnoha *excitovaných stavech*. V různých excitovaných stavech je rozdělení pravděpodobnosti výskytu elektronu v okolí protonu rozdílné. Tyto excitované stavy jsme ignorovali tak, že jsme řekli, že se zajímáme pouze o případy s malými energiemi. Jsou to však právě excitované stavy, které vytvářejí různá rozdělení elektronu v okolí protonu. Chceme-li podrobně popsat ion molekuly vodíku, musíme brát v úvahu všechny ostatní možné bázevové stavy. Lze to provést různými způsoby; jeden je ten, že si podrobněji všimneme těch stavů, v nichž se poloha elektronu v prostoru popisuje detailněji.

Už jsme dostatečně připraveni na to, abychom se zabývali podrobnějším postupem, který nám umožní přesněji hovořit o poloze elektronu tím, že určí amplitudu pravděpodobnosti výskytu elektronu na libovolném místě v dané situaci. Tyto úplnější teorie podporuje přiblížení, kterými jsme se už zabývali. V určitém smyslu z ní dokážeme (jako určitý druh přiblížení) odvodit námi dosud používané rovnice.

Možná se divíte, proč jsme tedy raději nezačali s úplnější teorií a z ní postupně neodvozovali různá přiblížení. Zdálo se nám, že snáze pochopíte základní aparát kvantové mechaniky, když začneme s dvojhladinovými přiblíženími a postupně se propracujeme k úplnější teorii, než kdybychom to dělali opačně. Proto je náš přístup ke kvantové mechanice opačný než ten, s nímž se setkáme v mnoha jiných učebnicích.

V této kapitole si můžete všimnout, že porušujeme pravidlo, které jsme v minulosti stále dodržovali. Při studiu každého tématu jsme se vždy snažili podat vám podle možnosti úplný popis fyziky a ukázat, kam až vedou jednotlivé myšlenky. Usilovali jsme o popis obecných důsledků teorie, jakož i některých specifických drobností, abyste viděli, kam vede teorie. Nyní to pravidlo porušíme. Ukážeme si, jak lze hovořit o amplitudách pravděpodobnosti v prostoru, a uvedeme diferenciální rovnice, které tyto amplitudy splňují. Z časových důvodů nebudeme rozebírat mnohé ze zřejmých důsledků vyplývajících z teorie. Nebudeme moci jít dokonce ani tak daleko, abychom ukázali souvislost mezi teorií a některými přibližnými formulacemi, které jsme už používali – např. molekulou vodíku nebo amoniaku. Budeme muset skončit na půl cesty a nechat otázky nedořešené. Blížíme se ke konci kurzu a musíme se spokojit s tím, že dojdeme pouze k obecným představám, naznačíme, jaké spojitosti jsou mezi tím, co jsme popisovali, a dalšími přístupy ke kvantové mechanice. Doufáme, že získáte dostatečnou představu na to, abyste dokázali dále už samostatně pokračovat a na základě studia dalších knih mohli poznat mnohá použití rovnic, které zde uvedeme. Musíte, konec konců, nechat něco i pro budoucnost.

Ještě jednou si zopakujeme, co jsme zjistili o tom, jak se pohybuje elektron podél řetězce atomů. Může-li elektron s určitou amplitudou přeskóčit od jednoho atomu k sousednímu, existují přesně určené energetické stavy, v nichž je amplituda pravděpodobnosti nalezení elektronu rozdělena podél mřížky ve tvaru postupné vlny. Pro velké vlnové délky (tj. pro malé hodnoty vlnového čísla k) je energie stavu úměrná druhé mocnině vlnového čísla. V krystalové mřížce s konstantou b , v níž je amplituda za jednotku času pro přeskok elektronu od jednoho atomu k druhému rovna A/\hbar , je souvislost mezi energií stavu a číslem k (při malých hodnotách kb) určena tímto vztahem

$$E = Ak^2 b^2 \quad (14.1)$$

(viz stať 13.3). Také jsme viděli, že skupiny vln s podobnými energiemi vytvářejí vlnový balík, který se chová jako klasická částice s hmotností m_{ef} , kde

$$m_{\text{ef}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \quad (14.2)$$

Protože vlny amplitudy pravděpodobnosti se v krystalu chovají jako částice, můžeme očekávat, že kvantově mechanický popis částice přinese stejný druh vlnového chování, jako jsme pozorovali v mřížce. Uvažujme jednorozměrnou mřížku, v níž konstantu b neustále zmenšujeme. V limitě dostáváme případ, kdy se elektron může nacházet kdekoli na přímce. Tak přejdeme ke spojitému rozdělení amplitud pravděpodobnosti. Pro libovolný bod podél přímky existuje amplituda výskytu elektronu. Je to jeden ze způsobů popisu pohybu elektronu ve vakuu. Řečeno jinými slovy, když si představíme prostor popsaný nekonečným počtem těsně sousedících bodů a když umíme najít rovnice, které dávají do souvislosti amplitudy v jednom bodě s amplitudami v sousedních bodech, dostáváme kvantově mechanické zákony pohybu elektronu v prostoru.

Nejdříve si připomeňme některé obecné principy kvantové mechaniky. Uvažujme částici, která se v kvantově mechanickém systému může vyskytovat v různých stavech. Každou situaci, v níž můžeme elektron najít, nazveme stavem, který budeme označovat stavovým vektorem, řekněme $|\varphi\rangle$. Nějakou jinou situaci označíme jiným stavovým vektorem řekněme $|\psi\rangle$. Dále uvedeme myšlenku báзовých stavů. Předpokládejme, že existuje soubor stavů $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ atd., jež mají tyto vlastnosti. Zaprvé, všechny stavy jsou zcela odlišné – říkáme, že jsou ortogonální. Tím myslíme to, že máme-li dva libovolné báзовé stavy $|i\rangle$ a $|j\rangle$, je amplituda $\langle i|j\rangle$ toho, že elektron, který se nachází ve stavu $|i\rangle$, je zároveň i ve stavu $|j\rangle$, rovna nule, pokud ovšem $|i\rangle$ a $|j\rangle$ neoznačují tentýž stav. Symbolicky to zapíšeme

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \quad (14.3)$$

Určitě si vzpomenete, že $\delta_{ij} = 0$, pro i a j různá a $\delta_{ij} = 1$, pro i a j stejná.

Za druhé, báзовé stavy $|i\rangle$ musí tvořit úplný soubor, aby pomocí nich bylo možné vyjádřit libovolný stav. To znamená, že libovolný stav $|\varphi\rangle$ lze úplně popsat, určíme-li všechny amplitudy $\langle i|j\rangle$ toho, že částici ve stavu $|\varphi\rangle$ najdeme i ve stavu $|i\rangle$. Stavový vektor $|\varphi\rangle$ je vlastně roven součtu báзовých stavů, přičemž každý z nich je vynásoben koeficientem, který je roven amplitudě toho, že stav $|\varphi\rangle$ je zároveň ve stavu $|i\rangle$

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\varphi\rangle. \quad (14.4)$$

Nakonec uvažujme dva libovolné stavy $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$. Amplitudu toho, že stav $|\psi\rangle$ bude zároveň ve stavu $|\varphi\rangle$, lze zjistit tak, že nejdříve promítneme stav $|\psi\rangle$ do báзовých stavů a pak promítneme každý báзовý stav do stavu $|\varphi\rangle$. Zapisujeme to tímto způsobem

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \sum_i \langle \varphi|i\rangle \langle i|\psi\rangle. \quad (14.5)$$

Samozřejmě je třeba sčítat přes celý soubor báзовých stavů $|i\rangle$.

Když jsme v 11. kapitole studovali, co se děje s elektronem, který je umístěn v lineární posloupnosti atomů, vybrali jsme si takový soubor báзовých stavů, v nichž se elektron nachází u jednotlivých atomů posloupnosti. Báзовý stav $|n\rangle$ představoval situaci, v níž byl elektron lokalizován u atomu s číslem n . (To, že jsme si báзовé stavy označili $|n\rangle$ místo $|i\rangle$, nehraje žádnou roli.) Trochu později jsme zjistili, že bude výhodnější, budeme-li báзовé stavy označovat souřadnicí atomu a ne jeho pořadovým číslem v posloupnosti. Stav $|x_n\rangle$ je pouze jiný zápis stavu $|n\rangle$. Pak podle obecných pravidel můžeme libovolný stav $|\psi\rangle$ popsat určením amplitud toho, že se

elektron ve stavu $|\psi\rangle$ nachází i v některém ze stavů $|x_n\rangle$. Pro zjednodušení označování těchto amplitud jsme zavedli symbol C_n

$$C_n = \langle x_n | \psi \rangle. \quad (14.6)$$

Protože báze stavy souvisejí s polohou elektronu v posloupnosti, můžeme se na amplitudu C_n dívat jako na funkci souřadnice x a zapisovat ji ve tvaru $C(x_n)$. Amplitudy $C(x_n)$ se budou obecně měnit v závislosti na čase a jsou proto taktéž funkcemi t . Nebudeme se však obecně starat o explicitní vyjádření této závislosti.

V 11. kapitole jsme předpokládali i to, že Hamiltonova rovnice (11.3) by měla vyjadřovat časovou závislost amplitud $C(x_n)$. V našem novém zápisu má uvedená rovnice tvar

$$i\hbar \frac{\partial C(x_n)}{\partial t} = E_0 C(x_n) - AC(x_n + b) - AC(x_n - b). \quad (14.7)$$

Poslední dva členy na pravé straně představují proces, v němž elektron, nacházející se u atomu $(n + 1)$ nebo $(n - 1)$, může přispět k atomu n .

Zjistili jsme, že rovnice (14.7) má řešení, která odpovídají stavům s přesně určenou energií. Zapisovali jsme je ve tvaru

$$C(x_n) = e^{-iEt/\hbar} e^{ikx_n}. \quad (14.8)$$

Ve stavech s nízkou energií jsou vlnové délky velké (k je malé) a energie souvisí s k podle vztahu

$$E = (E_0 - 2A) + Ak^2 b^2, \quad (14.9)$$

nebo, vybereme-li si takovou energii, že $(E_0 - 2A) = 0$, bude energie určena rovnicí (14.1).

Podívejme se, co by se stalo, kdybychom mřížkovou konstantu b nechali blížit se k nule a vlnové číslo k by zůstalo nezměněno. Pokud by to byla jediná změna, blížil by se poslední člen v (14.9) nule a rovnice by neměla žádný fyzikální význam. Předpokládejme však, že A a b se mění takto: blíží-li se b nule, zůstává součin Ab^2 konstantní⁵⁶⁾ – na základě rovnice (14.2) budeme Ab^2 psát jako konstantu $\hbar^2/2m_{\text{ef}}$. Za těchto okolností zůstane rovnice (14.9) nezměněná. Podívejme se, jak se změní diferenciální rovnice (14.7).

Nejdříve ji přepíšeme do tvaru

$$i\hbar \frac{\partial C(x_n)}{\partial t} = (E_0 - 2A) C(x_n) + A[2C(x_n) - C(x_n + b) - C(x_n - b)]. \quad (14.10)$$

Při našem výběru E_0 první člen vypadne. Dále uvažujme spojitou funkci $C(x)$, která plynule prochází příslušnými hodnotami $C(x_n)$ v bodech x_n . Když se konstanta b blíží nule, body x_n se posouvají blíže k sobě a (pokud se $C(x)$ mění dostatečně plynule) výraz v závorkách je právě úměrný druhé derivaci $C(x)$. Můžeme napsat rovnost (kterou snadno dostaneme, když si každý člen rozvíme do Taylorovy řady)

⁵⁶⁾

Můžeme si to představit tak, že při zmenšování vzdáleností mezi body x_n se zvětšuje amplituda A přeskoků z $x_{n\pm 1}$ do x_n .

$$2C(x) - C(x + b) - C(x - b) \approx -b^2 \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}. \quad (14.11)$$

Tedy v limitním případě, kdy se b blíží nule a $b^2 A$ je rovno $\hbar^2/2m_{\text{ef}}$, přejde rovnice (14.7) na tvar

$$i\hbar \frac{\partial C(x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ef}}} \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}. \quad (14.12)$$

Dostáváme rovnici, která říká, že časová rychlost změny $C(x)$ – amplitudy toho, že elektron najdeme v místě x – závisí na amplitudě nalezení elektronu v sousedních bodech; tato závislost je úměrná druhé derivaci amplitudy podle polohy.

Přesnou *kvantově mechanickou rovnici* pro pohyb elektronu ve volném prostoru publikoval jako první Schrödinger. Pro pohyb elektronu podél přímky nabývá přesně tvaru rovnice (14.12), je však třeba nahradit m_{ef} hmotností m volného elektronu

$$i\hbar \frac{\partial C(x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}. \quad (14.13)$$

Nechceme, abyste si mysleli, že jsme Schrödingerovu rovnici odvodili; ukazujeme vám pouze jeden ze způsobů, jak se na ni lze dívat. Když ji Schrödinger poprvé napsal, uvedl určitý druh odvození založený na několika heuristických argumentech a vynikající intuici. Některé z jeho argumentů byly sice nesprávné, to však na věci nic nemění; podstatné je to, že konečná rovnice dává pravdivý popis přírody. Cílem této diskuze je ukázat vám, že správná základní kvantově mechanická rovnice (14.13) má tentýž tvar, jako limitní případ elektronu, který se pohybuje podél posloupnosti atomů. Znamená to, že diferenciální rovnici (14.13) můžeme chápat jako vztah, který popisuje šíření amplitudy pravděpodobnosti od jednoho bodu ke druhému podél přímky. Má-li tedy elektron určitou amplitudu toho, že se nachází v určitém bodě, objeví se u něj o něco později amplituda výskytu v sousedních bodech. Rovnice je vlastně podobná difuzním rovnicím, o nichž jsme hovořili v 1. dílu kurzu. Existuje však jeden podstatný rozdíl: Imaginární koeficient před časovou derivací vede ke zcela odlišnému chování oproti obyčejné difuzi (jako je např. šíření plynu v tenké trubici). Obyčejná difuze vede k řešení s reálnými exponenciálními členy, zatímco řešením rovnice (14.13) jsou komplexní vlny.

14.2 VLNOVÁ FUNKCE

Nyní, když máme určitou představu o tom, jak to bude vypadat, vraťme se na začátek a podrobněji si všimněme popisu pohybu elektronu podél přímky, aniž bychom uvažovali stavy spojené s jednotlivými atomy mřížky. Vraťme se tedy na začátek a podívejme se, jaké myšlenky musíme použít, chceme-li popsat pohyb volné částice v prostoru. Protože nás zajímá chování částice v kontinuu, budeme pracovat s nekonečným počtem možných stavů; jak uvidíte, myšlenky, které jsme používali při popisu konečného počtu stavů, budeme muset trochu technicky upravit.

Začneme tím, že jako stavový vektor $|x\rangle$ označíme stav, v němž se částice nachází přesně v bodě, který má souřadnici x . Ke každé hodnotě x podél přímky – např. k 1,73 nebo 9,67 nebo 10,00 – existuje odpovídající stav. Uvedené stavy $|x\rangle$ si vybereme jako základní stavy a zahrneme-li do nich všechny body přímky, dostaneme úplný soubor pro pohyb v jednom rozměru. Nyní uvažujme jiný druh stavu, řekněme $|\psi\rangle$, v němž je elektron rozdělen určitým způsobem podél

přímky. Jeden ze způsobů, jak lze tento stav popsat, je určit všechny amplitudy toho, že elektron najdeme i v každém z báзовých stavů $|x\rangle$. Je nutné udat nekonečný soubor amplitud – ke každé hodnotě x jednu amplitudu. Zapišeme je ve tvaru $\langle x|\psi\rangle$. Každá z těchto amplitud je komplexním číslem a – protože každé hodnotě x přísluší jedno takovéto komplexní číslo – amplituda $\langle x|\psi\rangle$ je opravdu pouze funkcí x . Budeme ji zapisovat i ve tvaru $C(x)$

$$C(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (14.14)$$

Amplitudami, které se spojitě mění v závislosti na souřadnicích, jsme se už zabývali v 5. kapitole, když jsme hovořili o závislosti amplitudy na čase. Ukázali jsme si např., že má-li částice přesně určenou hybnost, bude se i její amplituda měnit v prostoru určitým způsobem. Má-li částice přesně určenou hybnost p a k tomu příslušející energii E , vypadá amplituda toho, že ji máme v libovolném místě x , takto

$$\langle x|\psi\rangle = C(x) \sim e^{+ipx/\hbar}. \quad (14.15)$$

Uvedená rovnice vyjadřuje důležitý *obecný princip kvantové mechaniky*, který spojuje báзовé stavy příslušející různým polohám v prostoru s jiným systémem báзовých stavů – všech stavů přesně určené hybnosti. V některých úlohách je výhodnější používat stavy s určitou hybností než stavy s určitou polohou. Obě soustavy báзовých stavů jsou ovšem pro popis kvantově mechanické situace stejně vhodné. K otázce jejich vzájemné souvislosti se vrátíme později. Nyní se budeme držet popisu pomocí stavů $|x\rangle$.

Dříve než budeme pokračovat, uděláme jednu malou změnu ve způsobu zápisu. Doufáme, že vás to příliš nepoplete. Tvar funkce $C(x)$, definované rovnicí (14.14), bude záviset na příslušném stavu $|\psi\rangle$. Měli bychom to nějakým způsobem vyznačit. Abychom např. věděli, o které funkci $C(x)$ hovoříme, můžeme připsat index, řekněme $C_\psi(x)$. Je to zcela uspokojivý zápis, ale trochu nešikovný a ve většině knih se s ním neskáče. Většina lidí písmeno C jednoduše vynechává a k definici funkce používá symbol ψ

$$\psi(x) \equiv C_\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (14.16)$$

Protože se tento zápis používá všude ve světě, bude dobré, když si na něj zvyknete, abyste nebyli vystrašení, když se s ním setkáte někde jinde. Pamatujte si však, že od této chvíle budeme používat ψ ve dvou různých významech. V rovnici (14.14) označuje ψ konkrétní fyzikální stav elektronu, zatímco na levé straně rovnice (14.16) se symbol ψ používá k definici matematické funkce x , která je rovna amplitudě přiřazené každému bodu x na přímce. Doufáme, že si na to zvyknete a nebude vás to už příliš plést. Mimochodem, funkce $\psi(x)$ se obvykle nazývá *vlňová funkce*, protože velmi často má ve svých proměnných tvar komplexní vlny.

Jelikož jsme $\psi(x)$ definovali jako amplitudu toho, že elektron ve stavu ψ najdeme na místě x , chtělo by to druhou mocninu absolutní hodnoty ψ interpretovat jako pravděpodobnost nalezení elektronu v místě x . Bohužel pravděpodobnost toho, že částici objevíme přesně v daném bodě, je rovna nule. Elektron bude obecně rozmazaný v určité oblasti přímky, a protože libovolná část přímky obsahuje nekonečný počet bodů, pravděpodobnost toho, že se bude nacházet v některém z nich, nemůže být konečné číslo. Pravděpodobnost nalezení elektronu můžeme psát pouze pomocí *rozdělení pravděpodobnosti*⁵⁷⁾, které určuje *relativní pravděpodobnost* nalezení elektronu

57)

Diskuzi o rozděleních pravděpodobnosti viz. 1. díl, stať 6.4.

v různých přibližných polohách na přímce. Necht' pravděpodobnost $(x, \Delta x)$ představuje šanci objevení elektronu na malém intervalu Δx v blízkosti x . Použijeme-li v libovolné fyzikální situaci dostatečně malé měřítko, bude se pravděpodobnost měnit plynule od místa k místu a pravděpodobnost nalezení elektronu v libovolném malém úseku Δx bude úměrná Δx . Naše definice můžeme upravit tak, aby to v nich bylo zahrnuto.

Necht' amplituda $\langle x | \psi \rangle$ představuje jakousi hustotu amplitudy všech básových stavů $|x\rangle$ v malé oblasti. Protože pravděpodobnost nalezení elektronu na malém intervalu Δx v blízkosti x má být úměrná intervalu Δx , zvolili jsme definici $\langle x | \psi \rangle$, která vyhovuje následující rovnici

$$\text{pravd. } (x, \Delta x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 \Delta x.$$

Amplituda $\langle x | \psi \rangle$ bude úměrná amplitudě toho, že elektron ve stavu ψ najdeme v básovém stavu x ; konstanta úměrnosti je zvolena takovým způsobem, aby druhá mocnina absolutní hodnoty amplitudy $\langle x | \psi \rangle$ určovala *hustotu pravděpodobnosti* nalezení elektronu v libovolné malé oblasti. Můžeme proto psát

$$\text{pravd. } (x, \Delta x) = |\psi(x)|^2 \Delta x. \quad (14.17)$$

Některé rovnice budeme muset nyní upravit, aby souhlasily s novou definicí amplitudy pravděpodobnosti. Mějme elektron ve stavu $|\psi\rangle$ a chceme vědět, jaká je amplituda toho, že ho najdeme v jiném stavu $|\varphi\rangle$, který přísluší jinému stavu rozmazání elektronu. Když jsme hovořili o nekonečném souboru diskrétních stavů, používali jsme rovnici (14.5). Ještě před změnou definice amplitudy jsme museli psát

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{\text{všechna } x} \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle. \quad (14.18)$$

Jsou-li obě tyto amplitudy normovány stejným způsobem jako jsme uvedli v předcházející části, bude součet všech stavů v malé oblasti x ekvivalentní násobení Δx a součet přes všechny hodnoty x prostě přejde na integrál. V souladu s našimi upravenými definicemi bude správný zápis vypadat takto

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{\text{všechna } x} \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx. \quad (14.19)$$

Amplitudu $\langle x | \psi \rangle$ nyní označme $\psi(x)$, podobně budeme označovat i amplitudu $\langle x | \varphi \rangle$ jako $\varphi(x)$. Vzpomeňme si, že $\langle \varphi | x \rangle$ je komplexně sdružená amplituda s $\langle x | \varphi \rangle$. Rovnici (14.18) můžeme proto psát ve tvaru

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(x) \psi(x) dx. \quad (14.20)$$

Při našich nových definicích zůstávají všechny vztahy stejné jako původní, jedině znak sumy je třeba nahradit integrálem přes x .

K tomu, co jsme dosud řekli, je třeba zmínit jedno omezení. Každý vhodný soubor básových stavů musí být úplný, aby se mohl použít k odpovídajícímu popisu toho, co se děje. Pro jednorozměrný pohyb elektronu opravdu nestačí pouze určit básově stavy $|x\rangle$, protože v každém z těchto stavů může být spin elektronu orientován buď směrem nahoru, nebo dolů. Jeden způsob, jak můžeme dostat úplný soubor, je vzít dva soubory stavů pro x : jeden pro spin nahoru, druhý pro spin dolů. Takovými komplikacemi se nyní ještě zabývat nebudeme.

14.3 STAVY S PŘESNĚ URČENOU HYBNOSTÍ

Uvažujme elektron ve stavu $|\psi\rangle$, který je popsán amplitudou pravděpodobnosti $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$. Víme, že $\psi(x)$ představuje stav, v němž je elektron rozmázan podél přímky podle určitého rozdělení, tedy pravděpodobnost nalezení elektronu na malém intervalu dx v místě x je rovna právě

$$\text{pravd. } (x, dx) = |\psi(x)|^2 dx.$$

Co lze říci o hybnosti tohoto elektronu? Můžeme se ptát, jaká je pravděpodobnost toho, že má hybnost p . Vypočítejme však nejdříve amplitudu toho, že stav $|\psi\rangle$ se nachází v jiném stavu $|\text{hyb } p\rangle$, který definujeme jako stav s přesně určenou hybností p . Uvedenou amplitudu můžeme stanovit pomocí základní rovnice pro rozklad amplitudy (14.20). Pro stav $|\text{hyb } p\rangle$ píšeme

$$\langle \text{hyb } p | \psi \rangle = \int_{x=-\infty}^{+\infty} \langle \text{hyb } p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx. \quad (14.21)$$

Pravděpodobnost toho, že elektron najdeme s hybností p , by mělo být možné vyjádřit pomocí druhé mocniny absolutní hodnoty uvedené amplitudy. Setkáváme se však opět s malým problémem, které se týká normování. Obecně můžeme hovořit pouze o pravděpodobnosti toho, že najdeme elektron s hybností p v malém intervalu dp v okolí hodnoty p . Pravděpodobnost toho, že hybnost nabývá přesně určité hodnoty p , je rovna nule (kromě případu, kdy je stav $|\psi\rangle$ stavem s přesně určenou hybností). Konečnou pravděpodobnost dostaneme pouze tehdy, když se budeme ptát na pravděpodobnost nalezení hybnosti v malém intervalu dp v okolí hybnosti p . Existuje více způsobů, jak lze dosáhnout normování. Vyberme jeden z nich, o němž si myslíme, že je nejvhodnější, i když se vám to hned nemusí zdát tak jasné.

Normu zvolíme tak, aby pravděpodobnost souvisela s amplitudou podle vztahu

$$\text{pravd. } (p, dp) = |\langle \text{hyb } p | \psi \rangle|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar}. \quad (14.22)$$

Tato definice určuje normu amplitudy $\langle \text{hyb } p | x \rangle$. Amplituda $\langle \text{hyb } p | x \rangle$ je ovšem komplexně sdružená s amplitudou $\langle x | \text{hyb } p \rangle$, která je uvedena v rovnici (14.15). Pro normování, které jsme vybrali, platí, že konstanta úměrnosti před exponenciální částí je rovna právě jedné, totiž

$$\langle \text{hyb } p | x \rangle = \langle x | \text{hyb } p \rangle^* = e^{-ipx/\hbar}. \quad (14.23)$$

Rovnice (14.21) pak přejde na tvar

$$\langle \text{hyb } p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \langle x | \psi \rangle dx. \quad (14.24)$$

Uvedená rovnice spolu s rovnicí (14.22) nám umožňuje najít rozdělení hybnosti pro libovolný stav $|\psi\rangle$.

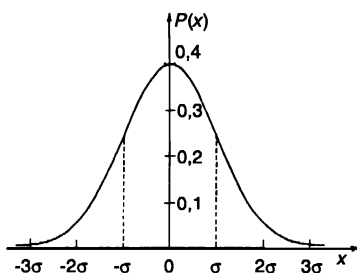
Podívejme se na jeden konkrétní případ – mějme např. elektron, který se nachází v určité oblasti kolem $x=0$. Necht' má vlnová funkce následující tvar

$$\psi(x) = Ke^{-x^2/4\sigma^2}. \quad (14.25)$$

Rozdělení pravděpodobnosti podle x pro tuto vlnovou funkci získáme umocněním absolutní hodnoty, resp.

$$\text{pravd. } (x, dx) = P(x) dx = K^2 e^{-x^2/2\sigma^2} dx. \quad (14.25)$$

Funkce hustoty pravděpodobnosti $P(x)$ je Gaussova křivka – znázorněná na obr. 14.1.



Obr. 14.1 Hustota pravděpodobnosti pro vlnovou funkci danou rovnicí (14.24)

Většina pravděpodobnosti je soustředěna v intervalu mezi $x = +\sigma$ a $x = -\sigma$. Říkáme, že pološířka křivky je σ (Přesněji řečeno, σ je rovno střední kvadratické hodnotě souřadnice x nějaké veličiny, která je rozptýlena podle uvedeného rozdělení.) Koeficient K je třeba zvolit tak, aby hustota pravděpodobnosti $P(x)$ nebyla pouze *úměrná* pravděpodobnosti (na jednotku délky x) objevení elektronu, ale aby měřítko bylo takové, aby $P(x) \Delta x$ bylo *rovno* pravděpodobnosti nalezení elektronu v intervalu Δx v okolí x . Konstantu K , která splňuje tento požadavek, lze najít z podmínky

$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = 1$, protože pravděpodobnost toho, že se elektron někde vyskytuje, musí být roven 1.

V našem případě dostaneme, že $K = (2\pi\sigma^2)^{-1/4}$. (Využili jsme to, že $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}$; 1. díl, s. 547.)

Nyní najdeme rozdělení hybnosti. Necht' $\varphi(p)$ označuje amplitudu toho, že elektron bude mít hybnost p

$$\varphi(p) \equiv \langle \text{hyb } p | \psi \rangle. \quad (14.27)$$

Po dosazení rovnice (14.25) do rovnice (14.24) dostáváme

$$\varphi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \cdot Ke^{-x^2/4\sigma^2} dx. \quad (14.28)$$

Integrál můžeme upravit na

$$Ke^{-p^2\sigma^2/\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(1/4\sigma^2)(x + 2ip\sigma^2/\hbar)^2} dx \quad (14.29)$$

a použitím substituce $u = x + 2ip\sigma^2/\hbar$ jej lze přepsat do tvaru

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2/4\sigma^2} du = 2\sigma\sqrt{\pi}. \quad (14.30)$$

(Matematici by pravděpodobně měli námitky proti způsobu, jakým jsme přišli k výsledku, přesto je však výsledek správný.)

$$\varphi(p) = (8\pi\sigma^2)^{1/4} e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}. \quad (14.31)$$

Dostali jsme zajímavý výsledek, neboť funkce amplitudy pro p má stejný matematický tvar jako funkce amplitudy pro x ; jediný rozdíl je v šířce Gaussovy křivky. Můžeme to zapsat jako

$$\varphi(p) = (2\pi\eta^2)^{-1/4} (2\pi\hbar)^{1/2} e^{-p^2/4\eta^2}, \quad (14.32)$$

přičemž pološířka η funkce rozdělení hybnosti p souvisí s pološířkou σ x -ového rozdělení podle vztahu

$$\eta = \frac{\hbar}{2\sigma}. \quad (14.33)$$

Získaný výsledek říká: Zúžíme-li šířku rozdělení pro x tím, že zvolíme malé σ , dostaneme velké η a rozdělení hybnosti bude velmi roztažené. Platí to i naopak: Úzké rozdělení hybnosti p odpovídá širokému rozdělení x . Na veličiny η a σ se můžeme dívat jako na nějaké míry neurčitosti v určení hybnosti a polohy elektronu ve stavu, který studujeme. Označíme-li si je Δp , resp. Δx , můžeme rovnici (14.33) psát takto

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \quad (14.34)$$

Je poměrně zajímavé a lze dokázat, že pro libovolný jiný tvar rozdělení podle x nebo podle p nemůže být součin $\Delta p \Delta x$ menší než ten, který jsme získali. Gaussovské rozdělení dává nejmenší možnou hodnotu součinu středních kvadratických šířek. Obecně platí

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (14.35)$$

Je to kvantitativní vyjádření *Heisenbergova principu neurčitosti*, o němž jsme z kvalitativního pohledu už mnohokrát hovořili. Většinou jsme používali přibližný odhad, podle kterého byla minimální hodnota součinu $\Delta p \Delta x$ řádově rovna \hbar .

14.4 NORMOVÁNÍ STAVŮ V PROMĚNNÉ x

Nyní se vraťme k diskuzi o úpravě základních rovnic, kterou je třeba provést, pracujeme-li se spojitymi bázovými stavy. Máme-li konečný počet diskrétních stavů, je základní podmínka, kterou musí soubor bázových stavů splňovat, tato

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (14.36)$$

Vyskytuje-li se částice v jednom báзовém stavu, je amplituda výskytu v jiném báзовém stavu nulová. Při vhodném výběru normování lze definovat amplitudu $\langle i|i \rangle$ tak, že bude rovna 1. Obě tyto podmínky vyjadřuje rovnice (14.36). Zajímá nás, jak se tento vztah musí změnit, použijeme-li báзовé stavy $|x\rangle$ částice na přímce. Víme-li, že se částice nachází v některém z báзовých stavů $|x\rangle$, jaká je amplituda toho, že se bude vyskytovat v jiném stavu $|x'\rangle$? Jsou-li x a x' dvě různá místa na přímce, je amplituda $\langle x|x'\rangle$ určitě rovna 0, což je v souladu s rovnicemi (14.36). Jsou-li však x a x' stejná, nebude amplituda $\langle x|x'\rangle$ rovna 1, což je starý problém normování. Abychom viděli, jak to lze napravit, vraťme se k rovnici (14.19) a přepíšme ji na speciální případ, kdy stav $|\varphi\rangle$ je právě báзовým stavem $|x'\rangle$. Dostáváme

$$\langle x'|\psi\rangle = \int \langle x'|x\rangle \psi(x) dx. \quad (14.37)$$

Amplituda $\langle x|\psi\rangle$ je přesně to, co jsme nazývali funkcí $\psi(x)$. Podobně i amplituda $\langle x'|\psi\rangle$, neboť se vztahuje na tentýž stav ψ , je toutéž funkcí proměnné x' , totiž $\psi(x')$. Rovnici (14.37) můžeme proto přepsat jako

$$\psi(x') = \int \langle x'|x\rangle \psi(x) dx. \quad (14.38)$$

Uvedená rovnice musí platit pro každý stav ψ , a tedy i pro libovolnou funkci $\psi(x)$. Tento požadavek by měl úplně určit charakter amplitudy $\langle x|x'\rangle$, která je konec konců pouze funkcí závislé na x a x' .

Náš úkol nyní spočívá v tom, abychom našli funkci $f(x, x')$, která po vynásobení s $\psi(x)$ a integraci přes všechna x dá právě veličinu $\psi(x')$. Ukazuje se, že taková matematická funkce, které by to dokázala, neexistuje! Alespoň ne v tom smyslu, v jakém obvykle funkci chápeme.

Vyberme si speciální případ; nechť je x' rovno 0 a amplitudu $\langle 0|x\rangle$ definujeme jako nějakou funkci x , řekněme $f(x)$. Rovnice (14.36) pak bude vypadat takto

$$\psi(0) = \int f(x) \psi(x) dx. \quad (14.39)$$

Jaký typ funkce by mohl vyhovovat této rovnici? Protože integrál musí být nezávislý na tom, jaké hodnoty nabývá funkce $\psi(x)$ pro hodnoty x různé od 0, musí být $f(x)$ rovno nule pro všechna x kromě 0. Je-li funkce $f(x)$ všude nulová, bude nulový i integrál a rovnice (14.39) nebude platit. Dostali jsme se do nemožné situace: Vyžadujeme, aby funkce nabývala nulové hodnoty všude kromě jednoho bodu a zároveň, aby dávala konečný integrál. Protože takovou funkci neumíme najít, je nejlepším východiskem říci, že funkce $f(x)$ je *definována* rovnicí (14.39) – je to prostě taková funkce, která dělá rovnici (14.39) platnou. Objevil ji Dirac a podle něj je i pojmenována. Označujeme ji $\delta(x)$. Funkce $\delta(x)$ má zvláštní vlastnost: Nahradíme-li jí funkci $f(x)$ v rovnici (14.39), získá integrál hodnotu, které $\psi(x)$ nabývá pro x rovno 0. Protože integrál musí být nezávislý na $\psi(x)$ pro všechna x kromě 0, musí být funkce $\delta(x)$ všude rovna 0 kromě $x=0$. Píšeme

$$\langle 0|x\rangle = \delta(x), \quad (14.40)$$

kde $\delta(x)$ je definováno rovnicí

$$\psi(0) = \int \delta(x) \psi(x) dx. \quad (14.41)$$

Všimněme si, co se stane, nahradíme-li funkci ψ v rovnici (14.41) speciální funkcí 1. Dostaneme výsledek

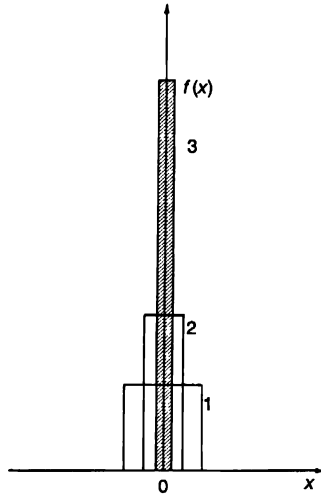
$$1 = \int \delta(x) dx, \quad (14.42)$$

tj. $\delta(x)$ má tu vlastnost, že je všude rovno nule kromě bodu $x=0$, ale hodnota integrálu je konečná a je rovna jedné. Musíme si představit, že funkce $\delta(x)$ má v jednom bodě takovou fantastickou nekonečnost, že celková plocha pod ní je rovna 1.

Jeden způsob, jak si lze představit *Diracovu δ -funkci*, je uvažovat posloupnost obdélníků (nebo libovolnou funkci s vrcholem), které jsou sice stále užší a užší, ale zároveň vyšší a vyšší, takže si zachovávají jednotkovou plochu, jak to zobrazuje obr. 14.2. Integrál takové funkce od $-\infty$ do $+\infty$ je vždy 1. Vynásobíme-li jí libovolnou funkcí $\psi(x)$ a zintegrujeme, dostaneme číslo, které je přibližně rovno hodnotě $\psi(x)$ pro $x=0$. Čím užší obdélník použijeme, tím lepší aproximaci dostaneme. Chcete-li, můžete si δ -funkci představovat jako limitu uvedené posloupnosti. Nedůležitější je však to, že δ -funkce je definována tak, aby rovnice (14.41) platila pro libovolnou možnou funkci $\psi(x)$ – to jednoznačně definuje δ -funkci, jejíž vlastnosti jsou takové, jaké jsme už uvedli.

Změníme-li argument δ -funkce z x na $x - x'$, budou odpovídající vztahy

$$\begin{aligned} \delta(x - x') &= 0, \quad x' \neq x, \\ \int \delta(x - x') \psi(x) dx &= \psi(x'). \end{aligned} \tag{14.43}$$



Obr. 14.2 Posloupnost funkcí s jednotkovou plochou, jejichž tvar stále více a více připomíná funkci $\delta(x)$

Nahradíme-li v rovnici (14.38) amplitudu $\langle x|x' \rangle$ funkcí $\delta(x - x')$, bude tato rovnost splněna. Dospěli jsme tedy k výsledku, že pro naše bázevé stavy v souřadnici x je podmínka odpovídající vztahu (14.36) následující

$$\langle x|x' \rangle = \delta(x - x'). \tag{14.44}$$

Tím jsme dokončili potřebné úpravy základních rovnic, které jsou nutné, pracujeme-li s kontinuem bázevých stavů, které odpovídají bodům na přímce. Zobecnění na tři rozměry je zcela zřejmé. Nejdříve nahradíme souřadnici x vektorem r , pak nahradíme integrování podle x integrováním podle x, y a z , tj. přejdeme k objemovým integrálům a nakonec musíme nahradit jednorozměrnou δ -funkci součinem tří δ -funkcí v x, y , a z , tj. $\delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z')$. Když to všechno uděláme, dostaneme tento systém rovnic pro amplitudy částice ve třech rozměrech

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \langle \varphi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle dV, \quad (14.45)$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}), \quad (14.46)$$

$$\langle \mathbf{r} | \varphi \rangle = \varphi(\mathbf{r}),$$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV, \quad (14.47)$$

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}') \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}'). \quad (14.48)$$

Co dělat, máme-li více než jednu částici? Podívejme se, jak je třeba pracovat s dvěma částicemi a z toho už snadno uvidíte, jak je nutné postupovat, budete-li chtít uvažovat více částic. Předpokládejme, že máme dvě částice, které označíme jako částice č. 1 a částice č. 2. Jaké bázevé stavy použijeme? Jeden velmi výhodný soubor může být popsán tak, že řekneme: Částice 1 je v místě x_1 a částice 2 je v místě x_2 , což můžeme zapsat jako $|x_1, x_2\rangle$. Všimněte si, že udání polohy *pouze jedné částice* *nedefinuje* bázevý stav. Každý bázevý soubor musí definovat situaci celého systému. Nesmíte si myslet, že se každá částice pohybuje nezávisle jako trojrozměrná vlna. Každý fyzikální stav $|\psi\rangle$ lze definovat určením všech amplitud $\langle x_1, x_2 | \psi \rangle$ toho, že najdeme příslušné dvě částice v místě x_1 a x_2 . Uvedená zobecněná amplituda je proto funkcí dvou souborů souřadnic x_1 a x_2 . Vidíte, že takováto funkce není vlnou ve smyslu vlnění, které se šíří ve třech rozměrech, a není ani jednoduchým součinem dvou samostatných vln, které bychom přiřadili každé částici zvlášť. Obecně je to určitý druh vlny v šesti rozměrech definovaných souřadnicemi x_1 a x_2 . Vyskytují-li se v přírodě dvě částice, které na sebe vzájemně působí, nelze popsat chování jedné částice jen vlnovou funkcí pro ni samotnou. Známe paradoxy, které jsme rozebrali v předcházejících kapitolách (kde se zdálo, že měření jedné částice mohou určit chování jiné částice nebo vyrušit interferenci). Tyto paradoxy způsobily mnoho problémů, protože lidé uvažovali vlnovou funkci pouze jedné samostatné částice místo toho, aby uvažovali vlnovou funkci souřadnic obou částic. Úplný a správný popis můžeme získat pouze pomocí funkcí, které obsahují souřadnice obou částic.

14.5 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

Dosud jsme se zajímali pouze o to, jak popisujeme stavy, v nichž se elektron může vyskytovat na libovolném místě v prostoru. Nyní se pokusíme zabudovat do našeho fyzikálního popisu to, co se může dít za různých podmínek. Podobně jako v předcházejících částech nás zajímá, jak se mění stavy v závislosti na čase. Máme-li stav $|\psi\rangle$, který o něco později přejde do jiného stavu $|\psi'\rangle$, budeme umět popsat situaci v libovolném časovém okamžiku, uděláme-li z vlnové funkce (což je vlastně amplituda $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle$) funkci nejen souřadnic, ale i času. Částice se tedy bude v daných podmínkách popisovat pomocí časově proměnné vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$. Tato časově proměnná vlnová funkce popisuje vývoj stavů, které se v čase postupně objevují. Uvedená „souřadnicová reprezentace“, určující průměty stavu $|\psi\rangle$ do bázevých stavů $|\mathbf{r}\rangle$, nemusí být vždy tou nejvýhodnější reprezentací, ale začneme s ní. V 6. kapitole jsme časový vývoj stavů popisovali pomocí hamiltoniánu H_{ij} . Viděli jsme, že časová změna různých amplitud byla vyjádřena členy maticové rovnice

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j. \quad (14.49)$$

Rovnice říká, že časová změna každé amplitudy C_i je úměrná všem ostatním amplitudám C_j s konstantami úměrnosti H_{ij} .

Jak bude vypadat rovnice (14.49), použijeme-li kontinuum báзовých stavů $|x\rangle$? Nejdříve si připomeňme, že rovnici (14.49) můžeme zapsat i ve tvaru

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | \hat{H} | j \rangle \langle j | \psi \rangle.$$

Nyní je už jasné, co je třeba dělat. Pro x -reprezentaci očekáváme

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle x | \psi \rangle = \int \langle x | \hat{H} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx'. \quad (14.50)$$

Součet přes báзовé stavy $|j\rangle$ je nahrazen integrálem podle x' . Protože $\langle x | \hat{H} | x' \rangle$ by měl být nějakou funkcí x a x' , zapíšeme ho jako $H(x, x')$, což odpovídá označení H_{ij} v rovnici (14.49). Rovnici (14.50) můžeme pak psát jako

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x) = \int H(x, x') \psi(x') dx', \quad (14.51)$$

kde

$$H(x, x') = \langle x | \hat{H} | x' \rangle.$$

Podle uvedené rovnice by měla rychlost změny ψ v místě x záviset na hodnotě ψ ve všech ostatních bodech x' ; člen $H(x, x')$ je amplituda za jednotku času toho, že elektron přeskóčí od x' k x . *Ve skutečnosti se však ukazuje, že tato amplituda je všude rovna 0 kromě bodů x' velmi blízkých x . Znamená to, jak jsme viděli na příkladu posloupnosti atomů na začátku kapitoly (viz rovnice (14.12)), že pravou stranu rovnice (14.15) lze úplně vyjádřit pomocí ψ a její derivaci podle x v místě x .*

Pro částici, která se volně pohybuje v prostoru a nepůsobí na ni žádné síly, ani žádné jiné rušivé vlivy, zní správný fyzikální zákon

$$\int H(x, x') \psi(x') dx' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x).$$

Odkud se to vzalo? Odnikud. Nelze to odvodit z ničeho známého. Zrodilo se to v hlavě Schrödingera při jeho zápasech o porozumění experimentálnímu pozorování reálného světa. Určitý klíč pro lepší pochopení nám poskytuje odvození rovnice (14.12), k níž jsme došli na základě pozorování šíření elektronu v krystalu.

Volná částice není, pravda, příliš zajímavá. Co se stane, začneme-li na ni působit silou? Pokud lze sílu vyjádřit pomocí skalárního potenciálu $U(x)$ – což znamená, že uvažujeme pouze elektrické síly a žádné magnetické – a přidržíme-li se nízkých energií, takže nemusíme uvažovat komplikace, pocházející z relativistického pohybu, pak pro hamiltonián, který popisuje skutečný svět, platí

$$\int H(x, x') \psi(x') dx' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x) \psi(x). \quad (14.52)$$

Určité pochopení původu této rovnice získáme, vrátíme-li se k pohybu elektronu v krystalu a všimneme si, jak se změnila rovnice, měnil-li se energie elektronu pomalu od atomu k atomu, jako kdyby bylo ke krystalu přiloženo elektrické pole. Člen E_0 v rovnici (14.7) se bude pomalu měnit v závislosti na poloze a bude odpovídat novému členu, která jsme přidali do rovnice (14.52).

(Možná se divíte, proč jsme přímo přešli od rovnice (14.51) k rovnici (14.52) a neuvedli jsme úplný výraz pro amplitudu $H(x, x') = \langle x | \hat{H} | x' \rangle$. Udělali jsme to proto, že $H(x, x')$ lze vyjádřit pouze pomocí zvláštních algebraických funkcí, zatímco celkový integrál, tj. pravá strana rovnice (14.51) se skládá z členů, na které jste zvyklí. Pokud vás to však opravdu zajímá, lze $H(x, x')$ vyjádřit v následujícím tvaru

$$H(x, x') = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(x-x') + U(x) \delta(x-x'),$$

kde δ'' znamená druhou derivaci delta funkce. Tuto poměrně divnou funkci lze nahradit o něco vhodnějším, ale zcela ekvivalentním algebraickým diferenciálním operátorem

$$H(x, x') = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \delta(x-x').$$

Poslední dvě vyjádření nebudeme používat, ale budeme pracovat přímo s rovnicí (14.52).

Dosadíme-li vyjádření integrálu (14.52) do (14.50), dostaneme následující diferenciální rovnici pro $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + U(x) \psi(x). \quad (14.53)$$

Je zřejmé, jak je třeba upravit rovnici (14.53), zajímáme-li se o trojrozměrný pohyb. Stačí změnit d^2/dx^2 na

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

a $U(x)$ nahradit $U(x, y, z)$. Amplituda $\psi(x, y, z)$ elektronu, který se pohybuje v poli s potenciálem $U(x, y, z)$, vyhovuje diferenciální rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi. \quad (14.54)$$

Nazývá se *Schrödingerova rovnice* a je to první známá kvantověmechanická rovnice. Schrödinger ji publikoval ještě dříve, než byly objeveny ostatní kvantové rovnice uvedené v tomto díle.

My jsme se k ní dostali po zcela odlišné cestě, ale velký historický okamžik – zrození kvantové mechanického popisu hmoty – nastal roku 1926, kdy Schrödinger poprvé svou rovnici napsal. Vnitřní atomová struktura hmoty byla dlouhé roky velkým tajemstvím. Nikdo nebyl schopen porozumět, co drží hmotu pohromadě, proč existuje chemická vazba a hlavně jak je možné, že atomy mohou být stabilní. Bohr sice dokázal popsat vnitřní pohyb elektronu v atomu vodíku, což zdánlivě vysvětlovalo pozorované spektrum světla vyzařované tímto atomem, ale důvod, proč se elektrony pohybovaly právě takovým způsobem, zůstal záhadou. Schrödingerův objev správných rovnic pohybu elektronů na atomové úrovni poskytl teorii, která umožňovala kvantitativně přesně

a podrobné výpočty atomových jevů. Schrödingerova rovnice je v principu schopna vysvětlit atomové jevy kromě těch, které souvisejí s magnetizmem nebo teorií relativity. Vysvětluje energetické hladiny atomu a vše, co souvisí s chemickou vazbou. Vysvětlení je však pouze principiální, neboť matematika se stává tak složitou, že přesně vyřešit lze pouze nejjednodušší případy. Jedině atomy vodíku a helia byly vypočteny s vysokou přesností. S použitím různých přiblížení (některých i velmi nepřesných) však lze vysvětlit mnohé jevy složitějších atomů a chemické vazby molekul. Některé z těchto přiblížení jsme vám ukázali v předcházejících kapitolách.

Schrödingerova rovnice, tak jak jsme ji napsali, nebere v úvahu žádné magnetické jevy. Přidáním několika členů k rovnici lze tyto jevy sice zohlednit, ale jak jsme viděli ve 2. díle, magnetismus je ve své podstatě relativistický jev, takže správný popis pohybu elektronu v libovolném elektromagnetickém poli vyžaduje vhodnou relativistickou rovnici. Správnou relativistickou rovnici pro pohyb elektronu objevil Dirac rok po tom, co Schrödinger uveřejnil svou rovnici. Diracova rovnice má zcela odlišný tvar, ale nemůžeme se jí na tomto místě zabývat.

Dříve, než budeme dále rozebírat některé důsledky Schrödingerovy rovnice, rádi bychom vám ukázali, jak vypadá její vyjádření pro systém s velkým počtem částic. Rovnici nebudeme dále používat, chceme vám ji jen ukázat pro zdůraznění toho, že vlnová funkce ψ není obyčejnou vlnou v prostoru, ale je funkcí mnoha proměnných. Je-li částic mnoho, má rovnice tvar

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \left\{ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_i^2} \right\} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \psi. \quad (14.55)$$

Funkce U v klasickém případě odpovídá celkové potenciální energii všech částic. Neexistují-li žádné vnější síly působící na částice, je U prostě elektrostatická energie interakce všech částic. To znamená, že nese-li i -tá částice náboj $Z_i q_e$, je U rovno⁵⁸⁾

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) = \sum_{\text{všechny dvojice } i, j} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} e^2. \quad (14.56)$$

14.6 KVANTOVANÉ HLADINY ENERGIE

Později si podrobněji prostudujeme řešení Schrödingerovy rovnice pro jeden konkrétní případ. Nyní vám však ukážeme jeden z nejpozoruhodnějších důsledků Schrödingerovy rovnice. Jde o to, že z diferenciálních rovnic obsahujících pouze spojité funkce spojitých prostorových proměnných vyplývají kvantové jevy, jako jsou např. diskrétní hladiny energie v atomu. Podstatná otázka, které je třeba porozumět, je následující: Jak je možné, že elektron, který je vázaný k nějaké oblasti prostoru určitým druhem potenciálové *jámy*, může nabývat energie jen z určitého přesně definovaného souboru diskrétních hodnot?

Uvažujme elektron v jednorozměrném případě, kdy potenciální energie se mění v závislosti na x tak, jak to znázorňuje křivka na obr. 14.3. Potenciál nechť je statický, tedy nemění se s časem. Jako jsme to už dělali často, podívejme se, jaká řešení přísluší stavům s přesně určenou energií, tj. s přesně určenou frekvencí. Vyzkoušejme řešení ve tvaru

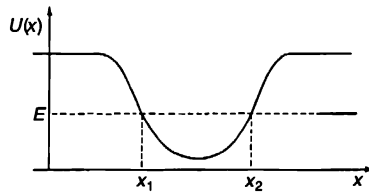
$$\psi = a(x) e^{-iEt/\hbar}. \quad (14.57)$$

⁵⁸⁾ Používáme konvenci, kterou jsme zavedli v předcházejících dílech a podle níž je $e^2 \equiv q_e^2/4\pi\epsilon_0$.

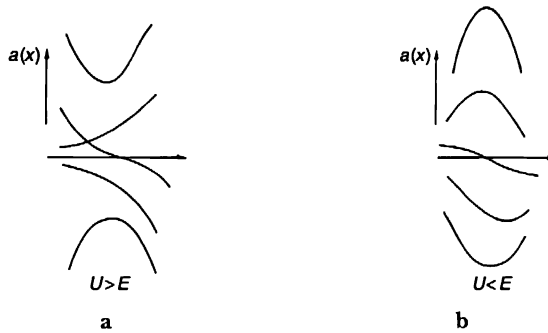
Dosadíme-li uvedenou funkci do Schrödingerovy rovnice, zjistíme, že funkce $a(x)$ musí splňovat tuto diferenciální rovnici

$$\frac{d^2 a(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E] a(x). \quad (14.58)$$

Rovnice říká, že v každém x je druhá derivace $a(x)$ podle x úměrná $a(x)$ s koeficientem úměrnosti obsahujícím $(U - E)$. Druhá derivace $a(x)$ je rychlost změny její směrnice. Je-li potenciál U větší než energie E částice, bude mít rychlost změny směrnice $a(x)$ stejné znaménko jako $a(x)$. Znamená to, že křivka $a(x)$ bude vypuklá směrem k ose, tj. bude mít v podstatě tvar kladné nebo záporné exponenciální funkce $e^{\pm x}$. V oblasti nalevo od x_1 (obr. 14.3), kde je potenciál větší než předpokládaná energie E , bude funkce $a(x)$ podobná některé z křivek nakreslených na obr. 14.4a.



Obr. 14.3 Potenciálová jáma pro částici, která se pohybuje podél osy x

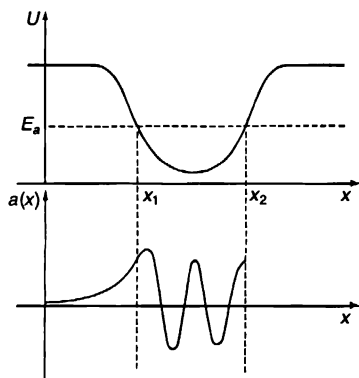


Obr. 14.4 Možné tvary vlnové funkce $a(x)$ pro $U > E$ a pro $U < E$

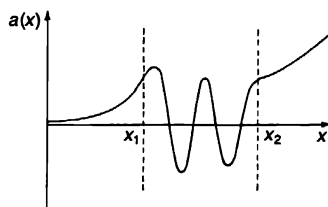
Je-li potenciální funkce U menší než energie E , bude mít druhá derivace $a(x)$ podle x opačné znaménko než $a(x)$ a křivka $a(x)$ bude vypuklá směrem od osy, např. jako křivky na obr. 14.4b. Řešení v této oblasti bude po částech připomínat sinusoidu.

Nyní se podívejme, zda dokážeme graficky sestavit funkci $a(x)$, která přísluší částici s energií E_a v potenciálu U znázorněném na obr. 14.3. Protože se pokoušíme popsat situaci, v níž je částice vázána *uvnitř* potenciálové jámy, hledáme taková řešení, v nichž amplituda vlny nabývá velmi malých hodnot pro x , která jsou mimo oblast jámy. Snadno si můžeme představit takovou křivku, jako je např. na obr. 14.5, která jde k nule při velkých záporných hodnotách x a směrem k x_1 postupně roste. V celém intervalu mezi x_1 a x_2 je veličina $U - E_a$ záporné číslo, tedy funkce $a(x)$ je vypuklá od osy a zakřivení křivky je tím větší, čím větší je rozdíl mezi E_a a U . Prodloužíme-li křivku do oblasti mezi x_1 a x_2 , její průběh by měl být přibližně takový, jaký je na obr. 14.5.

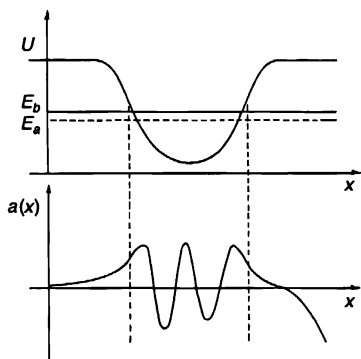
Prodlužujme naši křivku dále do oblasti za x_2 . V této části se začíná ohýbat směrem od osy a s rostoucím x nabývá řešení $a(x)$ (pro zvolenou energii E_a) stále větších a větších hodnot (obr. 14.6). *Zakřivení* se také zvětšuje, zůstává-li potenciál konstantní. Amplituda prudce roste do obrovských hodnot. Co to znamená? Prostě to, že částice není „vázána“ potenciálovou jámou. Je nekonečně pravděpodobnější, že ji najdeme *mimo* jámu než v jejím *nitru*. V řešení, které jsme sestrojili, má elektron největší pravděpodobnost výskytu v $x = +\infty$. Nepodařilo se nám však najít řešení pro vázanou částici.



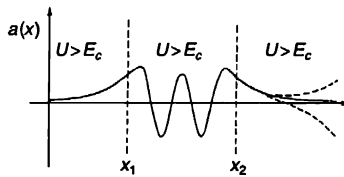
Obr. 14.5 Vlnová funkce pro energii E_a , která se blíží k nule při záporných hodnotách x



Obr. 14.6 Prodloužení funkce $a(x)$ (viz obr. 14.5) do oblasti za x_2



Obr. 14.7 Vlnová funkce $a(x)$ pro energii E_b větší než E_a

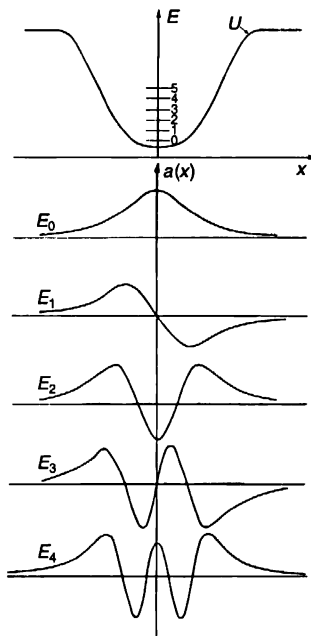


Obr. 14.8 Vlnová funkce pro energii E_c ležící mezi E_a a E_b

Vyzkoušejme jinou energii, řekněme o trochu větší než E_a např. E_b (obr. 14.7). Necht' v levé oblasti platí tytéž podmínky. Řešení pak bude vypadat tak, jak je nakresleno v dolní části obrázku 14.7. Průběh vypadá na počátku nadějně, ale nakonec křivka přechází do stejně špatného řešení, jaké jsme dostali pro E_a . Jediný rozdíl je v tom, že s rostoucí hodnotou x nabývá $a(x)$ stále větších a větších *záporných* hodnot.

Možná právě v tom je klíč k řešení. Protože malá změna energie z E_a na E_b způsobí překlopení křivky z jedné strany osy na druhou, možná existuje určitá energie v oblasti mezi E_a a E_b , pro níž se při velkých hodnotách x blíží křivka k nule. Ukazuje se, že je to skutečně pravda a jedno takové řešení jsme nakreslili na obr. 14.8.

Všimněte si, že toto řešení je velmi speciální. Kdybychom energii jen trochu zvětšili nebo zmenšili, funkce přejde do některé ze dvou křivek, jejichž průběh je podobný průběhu naznačenému přerušovanou čarou na obr. 14.8; pro vázaný stav částice bychom opět neměli splněné potřebné podmínky. Získali jsme výsledek, že částice může být vázána k potenciálové jámě pouze tehdy, když má přesně určenou energii.



Obr. 14.9 Funkce $a(x)$ pro pět energeticky nejnižších vázaných stavů

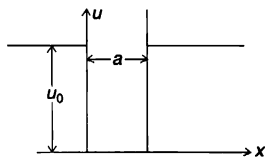
Znamená to, že částice vázaná v potenciálové jámě může mít jen jedinou energii? Ne – možné jsou i další energie, ale ne v blízkosti E_c . Všimněte si, že vlnová funkce, kterou jsme nakreslili na *obr. 14.8*, protíná osu na čtyřech místech v oblasti mezi x_1 a x_2 . Kdybychom vybrali energii menší než E_c , mohli bychom dostat řešení, které protíná osu pouze třikrát, resp. dvakrát, jednou nebo vůbec ne. Možná řešení jsou nakreslena na *obr. 14.9*. (Existují i další příslušející vyšším hodnotám energie, než které jsou zobrazeny.)

Celkový závěr je ten, že je-li částice vázaná v potenciálové jámě, může její energie nabývat pouze určitých speciálních hodnot z diskretního spektra energií. Nyní už víte, jak může diferenciální rovnice popisovat základní jevy kvantové fyziky.

Je třeba poznamenat ještě jednu věc. Převyšuje-li energie vrchol potenciálové jámy, neobjevují se žádná diskretní řešení a přípustná je libovolná hodnota energie. Taková řešení odpovídají rozptylu volných částic na potenciálové jámě. Příklady uvedených řešení jsme viděli, když jsme probírali vlivy příměsových atomů v krystalu.

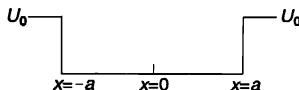
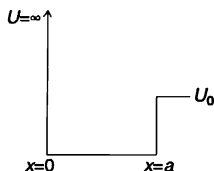
PŘÍKLADY A CVIČENÍ

- 14.1 ■ Uvažujte jednorozměrný pohyb částice o hmotnosti m v pravoúhlé potenciálové jámě (viz obrázek). Pro jednoduchost předpokládejte, že $U_0 \rightarrow \infty$.



- Ve stacionárním stavu s nejmenší energií E_0 máme $\psi_0(x,t) = u_0(x)e^{-iE_0t/\hbar}$. Musíme předpokládat, že $u_0(x) = 0$ ve všech bodech vně jámy, tedy už při $x = -\varepsilon$ nebo $x = a + \varepsilon$. Proč?
- Řešte Schrödingerovu rovnici uvnitř jámy s hraniční podmínkou uvedenou v bodě a). Najděte E_0 a znázorněte závislost $u_0(x)$. Není třeba $u_0(x)$ normovat.
- Najděte rozdíl energií prvního vybuzeného a základního stavu.
- Pro energeticky nejnižší stav znázorněte přibližně pravděpodobnost toho, že hybnost částice bude v intervalu od p do $p + dp$. Není třeba přesně integrovat ani normovat. Naznačte jen měřítko na ose hybnosti.

- 14.2 ■ Uvažujte pohyb částice o hmotnosti m v jednorozměrné potenciálové jámě, která je znázorněna na prvním obrázku.



- Najděte takovou hodnotu U_0 , při níž se energie částice v základním stavu liší o 10 % od energie základního stavu v případě $U_0 \rightarrow \infty$.
- Nechť U_0 je hodnota nalezená v bodě a). Aniž byste prováděli dlouhé výpočty, najděte energii prvního vybuzeného stavu v jámě zobrazeného na druhém obrázku a určené těmito podmínkami:

$$U = U_0, \quad x < -a,$$

$$U = 0, \quad -a < x < +a,$$

$$U = U_0, \quad x > a.$$

- 14.3 ■ Uvažujme následující jednorozměrnou úlohu. Částice o hmotnosti m se nachází v pravoúhlé potenciálové jámě

$$U = U_0, \quad |x| > a,$$

$$U = 0, \quad |x| < a.$$

Ukažte, že budou-li vlnové funkce, které jsou řešením Schrödingerovy rovnice, vyhovovat okrajovým podmínkám, musí platit vztahy $\alpha \cot \alpha a = -\beta$ nebo $\alpha \tan \alpha a = +\beta$, kde $\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar$, $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$. Bude-li $U_0 a^2 = 4\hbar^2/2m$, odhadněte hodnotu energie základního a prvního vybuzeného stavu. Kolik bude celkem existovat vázaných stavů, jestliže $U_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2/8m$?

14.4 ■ Ve 14. kapitole je uvedena neurčitost hybnosti pro případ, kdy vlnová funkce má Gaussův tvar. Avšak v obecném případě nezůstává prostorový rozměr vlnového balíku konstantní, ale zvětšuje se jako $\varphi(x, t) = K e^{-[a(t)x^2 + c(t)]}$. S použitím Schrödingerovy rovnice ukažte, že $\frac{1}{a(t)} = \frac{1}{a^0} + \frac{2i\hbar}{m}t$.

Čemu je rovno $c(t)$? Popisuje-li vlnová funkce elektron, který byl na počátku lokalizován v oblasti o šířce 0,1 nm, jaká bude šířka této oblasti za 1 s? Přetřansformujme vlnovou funkci do impulzové reprezentace, tj. určíme pravděpodobnost najít částici s danou hodnotou hybnosti p . Jak se bude měnit s časem šířka rozdělení pravděpodobnosti pro hybnosti? Ukažte, že takto nalezená neurčitost hybností souhlasí s neurčitostí rychlostí, kterou můžeme získat přímo z časové závislosti souřadnicové vlnové funkce.

Symetrie a zákony zachování

15.1 SYMETRIE

15.2 SYMETRIE A ZACHOVÁNÍ

15.3 ZÁKONY ZACHOVÁNÍ

15.4 POLARIZOVANÉ SVĚTLO

15.5 ROZPAD ČÁSTICE Λ^0

15.6 SHRUTÍ ROTAČNÍCH Matic

Přečtěte si znovu kapitolu 52, díl 1, Symetrie fyzikálních zákonů

15.1 SYMETRIE

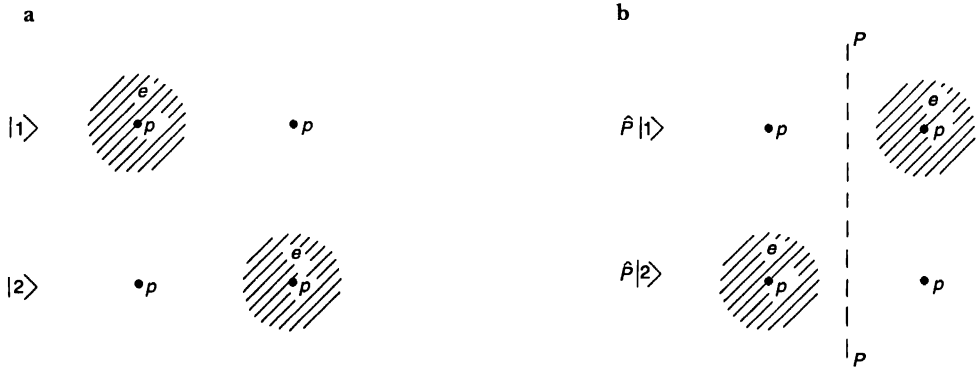
V klasické fyzice existuje nemálo *zachovávajících se* veličin (např. hybnost, energie a moment hybnosti). Teorémy o zachovávání těchto veličin existují i v kvantové mechanice. Přitom nejkrásnější na celé věci je to, že je lze v jistém smyslu odvodit z něčeho jiného, zatímco v klasické mechanice jsou prakticky začátkem, z něhož vycházíme. (I tam sice můžeme postupovat analogickým způsobem jako v kvantové mechanice, ale jen na velmi vysoké teoretické úrovni.) V kvantové mechanice jsou zákony zachování velmi úzce spojeny s principem superpozice amplitud a se symetrií fyzikálních soustav při různých změnách. To tvoří náplň této kapitoly. Ačkoliv budeme tyto myšlenky vztahovat především k zachování momentu hybnosti, je podstatné, že teorémy týkající se zachování jakýchkoliv veličin souvisejí v kvantové mechanice se symetriemi systémů.

Proto začneme studovat otázku symetrií systémů. Velmi jednoduchým příkladem je ion molekuly vodíku – stejně dobře bychom mohli vzít molekulu amoniaku – obě mají dva stavy. V případě iontu molekuly vodíku jsme do naší báze vybrali stavy, v nichž byl elektron lokalizován buď v blízkosti protonu číslo 1 (1. stav), nebo v blízkosti protonu číslo 2 (2. stav). Oba stavy – nazvali jsme je $|1\rangle$ a $|2\rangle$ – jsou opět znázorněny na *obr. 15.1a*. Protože jsou však obě jádra zcela totožná, existuje v tomto fyzikálním systému určitá *symetrie*. Chceme tím říci, že kdybychom provedli jeho *zrcadlový obraz* podle roviny umístěné v polovině vzdálenosti mezi oběma protony

(čímž rozumíme to, že vše, co se nachází na jedné straně od dané roviny, se přesune do symetrické polohy na druhé straně), dostali bychom situace znázorněné na obr. 15.1b. Jelikož jsou oba protony identické, změnní *operace zrcadlení* $|1\rangle$ na $|2\rangle$ a $|2\rangle$ na $|1\rangle$. Tuto operaci nazveme \hat{P} a píšeme

$$\hat{P}|1\rangle = |2\rangle, \quad \hat{P}|2\rangle = |1\rangle. \quad (15.1)$$

Naše \hat{P} je operátorem v tom smyslu, že se stavem „něco dělá“, aby vytvořil nový stav. Zajímavé je, že působením \hat{P} na *libovolný* stav vzniká nějaký jiný stav soustavy.



Obr. 15.1 Provedeme-li zrcadlový obraz stavů $|1\rangle$ a $|2\rangle$ podle roviny $P-P$, přejdou do stavů $|2\rangle$ a $|1\rangle$

\hat{P} podobně jako jakýkoliv jiný operátor, s nímž jsme se dosud setkali, má maticové prvky, které lze definovat pomocí obvyklého označení; tedy jako

$$P_{11} = \langle 1|\hat{P}|1\rangle \quad a \quad P_{12} = \langle 1|\hat{P}|2\rangle.$$

Dostaneme je, vynásobíme-li $\hat{P}|1\rangle$ i $\hat{P}|2\rangle$ zleva bra-vektorem $\langle 1|$. Z rovnic (15.1) vyplývá

$$\langle 1|\hat{P}|1\rangle = P_{11} = \langle 1|2\rangle = 0 \quad (15.2)$$

$$\langle 1|\hat{P}|2\rangle = P_{12} = \langle 1|1\rangle = 1.$$

Týmž způsobem získáme P_{21} a P_{22} . Matice \hat{P} vypadá *vzhledem k* *bázovému systému* $|1\rangle$ a $|2\rangle$ takto

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15.3)$$

Opět se přesvědčujeme, že v kvantové mechanice lze slova *operátor* a *matice* prakticky navzájem zaměňovat. Jsou mezi nimi jemné rozdíly, jako např. mezi slovy číslovka a číslo, ale nebudeme natolik pedanti, abychom se nad nimi trápili. Budeme proto nazývat \hat{P} jednou operátorem a jednou maticí nezávisle na tom, zda definuje operaci, nebo se vlastně používá k získání matice čísel.

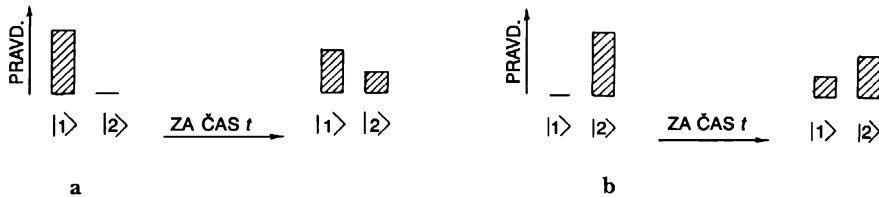
Nyní bychom rádi poukázali na jednu věc. Budeme *předpokládat*, že fyzika celé soustavy molekulárního iontu vodíku je sama o sobě *symetrická*. Nemusí být taková; závisí to např. na tom, co se ještě nachází v její blízkosti. Je-li však soustava symetrická, měla by zajisté platit následující myšlenka. Představme si, že v čase $t=0$ máme systém ve stavu $|1\rangle$ a po uplynutí časového intervalu t zjistíme, že se ocitl ve složité situaci – v nějaké lineární kombinaci obou bázových stavů. Vzpomeňte si, že v 6. kapitole jsme časový vývoj obvykle vyjadřovali vynásobením operátorem \hat{U} . To znamená, že po určité chvíli (kvůli určitosti např. po 15 s) by se soustava dostala do nějakého jiného stavu. Řekněme, že ten lze vyjádřit jako $\sqrt{2/3}$ -násobek stavu $|1\rangle$ plus $\sqrt{1/3}$ -násobek stavu $|2\rangle$; pak bychom napsali

$$|\psi \text{ za } 15 \text{ s}\rangle = \hat{U}(15,0)|1\rangle = \sqrt{2/3}|1\rangle + i\sqrt{1/3}|2\rangle. \quad (15.4)$$

Nyní se ptáme, co se stane, máme-li na začátku systém v *symetrickém* stavu $|2\rangle$ a vyčkáme-li za *týchž podmínek* 15 s? Je jasné, že je-li svět symetrický (jak předpokládáme), měli bychom dostat stav symetrický k (15.4)

$$|\psi \text{ za } 15 \text{ s}\rangle = \hat{U}(15,0)|2\rangle = \sqrt{2/3}|2\rangle + i\sqrt{1/3}|1\rangle. \quad (15.5)$$

Tytéž myšlenky jsou schematicky znázorněny na *obr. 15.2*. Takže je-li fyzika soustavy symetrická vzhledem k nějaké rovině a nám se podařilo zjistit vývoj jakéhosi konkrétního stavu, je nám známo i chování stavu, který bychom získali jako zrcadlový obraz stavu podle roviny symetrie.



Obr. 15.2 Využívá-li se v symetrickém systému čistý stav $|1\rangle$ jako v části a), bude se čistý stav $|2\rangle$ vyvíjet jako v části b)

Totéž se nyní pokusíme vyjádřit v trochu obecnější formě, což znamená trochu abstraktněji. Nechť \hat{Q} označuje libovolnou z množství operací, kterou můžeme vykonat se soustavou, *aniž bychom změnili fyziku*. Pod \hat{Q} si můžeme představit např. \hat{P} , operaci *zrcadlení* podle roviny umístěné ve středu mezi oběma atomy molekuly vodíku. V systému se dvěma elektrony bychom zase mohli mít na mysli operaci *výměny* obou elektronů. Další možnost by ve sféricky symetrické soustavě představovalo *otočení* celého systému o konečný úhel kolem nějaké osy; tím se fyzika nezmění. Samozřejmě, že v každém speciálním případě bychom \hat{Q} označili nějak jinak. Konkrétně operaci „otoč soustavu kolem osy y o úhel ϑ “ budeme obvykle označovat jako $\hat{R}(\vartheta)$. Pod \hat{Q} rozumíme libovolný z operátorů, které jsme zmínili, nebo i jakýkoliv jiný – nesmí však změnit základní fyzikální situaci. \hat{Q} budeme nazývat operátorem symetrie pro danou soustavu.

Uvedme další příklady operátorů symetrie. Máme-li atom, přičemž *vnější magnetické* nebo *vnější elektrické* pole chybí, a otočíme-li soustavu souřadnic kolem libovolné osy, fyzikální soustava zůstane tatáž. Molekula amoniaku je opět symetrická vzhledem k zrcadlení podle roviny rovnoběžné s rovinou tvořenou trojicí atomů vodíku – do té doby, dokud nepřistoupí elektrické pole. Když je zapneme, museli bychom při zrcadlovém odrazu změnit i směr elektrického pole, a to mění fyzikální úlohu. Neexistuje-li však vnější pole, molekula je symetrická.

Nyní uvažujme obecnou situaci. Předpokládejme, že na začátku máme stav $|\psi_1\rangle$, který se po nějakém čase pod vlivem daných fyzikálních podmínek ocitne ve stavu $|\psi_2\rangle$. Můžeme napsat

$$|\psi_2\rangle = \hat{U}|\psi_1\rangle. \quad (15.6)$$

(Podívejte se na vztah (15.4).) Nyní si představme, že s celou soustavou vykonáme operaci \hat{Q} . Stav $|\psi_1\rangle$ se transformuje do stavu $|\psi'_1\rangle$, který lze vyjádřit i jako $\hat{Q}|\psi_1\rangle$. Také stav $|\psi_2\rangle$ se změní na stav $|\psi'_2\rangle = \hat{Q}|\psi_2\rangle$. Je-li fyzika symetrická vzhledem k \hat{Q} (nezapomeňte na to *je-li*, není to obecná vlastnost soustav), a vyčkáme-li za týchž podmínek tentýž čas, měli bychom dostat

$$|\psi'_2\rangle = \hat{U}|\psi'_1\rangle \quad (15.7)$$

(jako v rovnici (15.5)). Ale místo $|\psi'_2\rangle$ můžeme dosadit $\hat{Q}|\psi_1\rangle$ a místo $|\psi_2\rangle$ zase $\hat{Q}|\psi_2\rangle$, takže vztah (15.7) lze přepsat do tvaru

$$\hat{Q}|\psi_2\rangle = \hat{U}\hat{Q}|\psi_1\rangle. \quad (15.8)$$

Nahradíme-li $|\psi_2\rangle$ výrazem $\hat{U}|\psi_1\rangle$ (rovnice 15.6), máme

$$\hat{Q}\hat{U}|\psi_1\rangle = \hat{U}\hat{Q}|\psi_1\rangle. \quad (15.9)$$

Není těžké pochopit, co to znamená. V případě vodíkového iontu vyjadřuje uvedená rovnice toto: „Provést zrcadlový obraz a chvíli počkat“ (výraz napravo od znaménka rovnosti) je totéž jako chvíli počkat a pak udělat „zrcadlový obraz“ (výraz na levé straně rovnice). Oba postupy by měly být totožné, nemění-li se \hat{U} při zrcadlení.

Protože vztah (15.9) platí pro *libovolný* počáteční stav $|\psi_1\rangle$, je to ve skutečnosti rovnice mezi operátory

$$\hat{Q}\hat{U} = \hat{U}\hat{Q}. \quad (15.10)$$

Právě k tomuto jsme chtěli dospět – k *matematické formulaci symetrie*. Platí-li rovnice (15.10), říkáme, že operátory \hat{U} a \hat{Q} *komutují*. Symetrii pak můžeme *definovat* takto: Fyzikální soustava je *symetrická* vzhledem k operaci \hat{Q} , komutuje-li \hat{Q} s \hat{U} , s operací plynutí času. (V maticovém jazyce je součin dvou operátorů ekvivalentní součinu matic, takže vztah (15.10) je v soustavě symetrické vzhledem k transformaci \hat{Q} splněn i pro matice Q a U .)

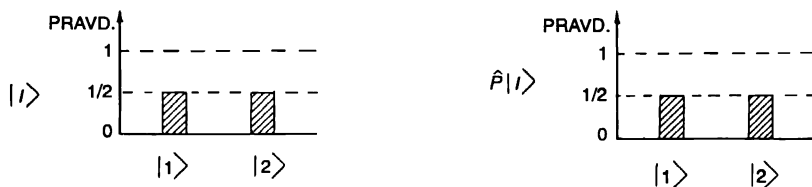
Mimochodem, jelikož pro nekonečně malý čas ε máme $\hat{U} = 1 - i\hat{H}\varepsilon/\hbar$, kde \hat{H} je obyčejný hamiltonián (viz 6. kapitola), lze snadno dokázat, že platí-li (15.10), je splněna i rovnice

$$\hat{Q}\hat{H} = \hat{H}\hat{Q}. \quad (15.11)$$

Tato rovnice je matematickou formulací podmínky pro symetrii fyzikální situace vzhledem k operátoru \hat{Q} . Ona *definuje* symetrii.

15.2 SYMETRIE A ZACHOVÁNÍ

Ještě dříve, než použijeme výsledek, k němuž jsme právě dospěli, rádi bychom si ještě trochu pohovořili o myšlence symetrie. Předpokládejme, že narazíme na velmi speciální situaci. Působení operátoru \hat{Q} na stav vás přivede k těmto stavu. Je to opravdu zvláštní případ, ale představte si, že $|\psi'\rangle = \hat{Q}|\psi_0\rangle$ je z fyzikální stránky totožné s $|\psi_0\rangle$. Znamená to, že $|\psi'\rangle$ je rovno $|\psi_0\rangle$ až na nějaký fázový faktor⁵⁹⁾. Jak k tomu může dojít? Uvažujme například ion H_2^+ ve stavu, který jsme kdysi nazvali $|I\rangle$. Tento stav má stejnou amplitudu nacházet se v básových stavech $|1\rangle$ a $|2\rangle$. Pravděpodobnosti jsou znázorněny sloupci na obr. 15.3a.



Obr. 15.3 Stav $|I\rangle$ a jeho zrcadlový obraz $\hat{P}|I\rangle$ podle roviny, umístěné v poloviční vzdálenosti mezi atomy v iontu H_2^+

Působíme-li na stav $|I\rangle$ operátorem zrcadlení \hat{P} , pak ho převrátí, přičemž změni $|1\rangle$ na $|2\rangle$ a $|2\rangle$ na $|1\rangle$. Dostaneme pravděpodobnosti naznačené na obr. 15.3b. To je však opět jen stav $|I\rangle$. Vydeme-li ze stavu $|II\rangle$, budou pravděpodobnosti před zrcadlením a po něm vypadat zcela stejně. Ve stavu $|I\rangle$ zůstanou amplitudy po zrcadlení *nezměněny*, ale ve stavu $|II\rangle$ mají opačnou znaménka. Jinými slovy

$$\begin{aligned}\hat{P}|I\rangle &= \hat{P}\left\{\frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}\right\} = \frac{|2\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |I\rangle \\ \hat{P}|II\rangle &= \hat{P}\left\{\frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}\right\} = \frac{|2\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = -|II\rangle.\end{aligned}\tag{15.12}$$

Napíšeme-li $\hat{P}|\psi_0\rangle = e^{i\delta}|\psi_0\rangle$, pak $e^{i\delta} = 1$ pro stav $|I\rangle$ a $e^{i\delta} = -1$ pro stav $|II\rangle$.

Všimněme si jiného příkladu. Předpokládejme, že máme pravotočivě polarizovaný foton, který se pohybuje ve směru osy z. Provedeme-li operaci otočení kolem z-ové osy, víme, že to vede k vynásobení amplitudy faktorem $e^{i\varphi}$, kde φ je úhel rotace. Takže v případě otočení je δ rovno úhlu rotace.

Nyní je už jasné, že *platí-li náhodou*, že v nějakém čase, řekněme $t=0$, změní operátor \hat{Q} pouze fázi, *bude to splněno jednou a navždy*. Jinak řečeno, pokud po uplynutí času t přejde stav $|\psi_1\rangle$ do stavu $|\psi_2\rangle$, tj.

⁵⁹⁾ Mimochodem, lze ukázat, že \hat{Q} musí být nutně *unitární operátor*, což znamená, že dostaneme-li jeho působením na $|\psi\rangle$ tentýž stav $|\psi\rangle$ vynásobený nějakým číslem, má tento číselný faktor tvar $e^{i\delta}$ kde δ je reálné číslo. Je to jen malá poznámka a její důkaz spočívá na tomto pozorování. Žádná operace podobná zrcadlení nebo otočení nevede ke ztrátě částic, takže normování stavů $|\psi'\rangle$ a $|\psi\rangle$ se musí shodovat; mohou se lišit jedině čistě imaginárním fázovým faktorem.

$$\hat{U}(t, 0)|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \quad (15.13)$$

a je-li symetrie fyzikální situace taková, že

$$\hat{Q}|\psi_1\rangle = e^{i\delta}|\psi_1\rangle, \quad (15.14)$$

je také splněn vztah

$$\hat{Q}|\psi_2\rangle = e^{i\delta}|\psi_2\rangle. \quad (15.15)$$

Je to zřejmé, protože

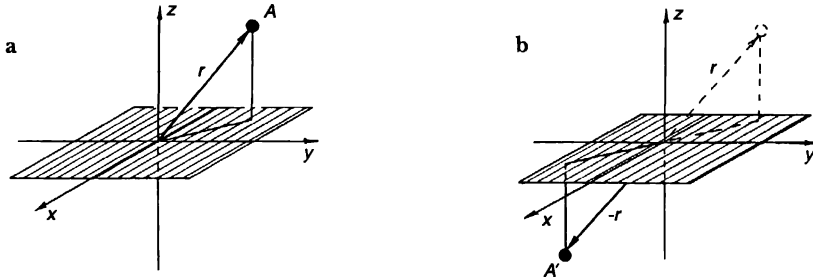
$$\hat{Q}|\psi_2\rangle = \hat{Q}\hat{U}|\psi_1\rangle = \hat{U}\hat{Q}|\psi_1\rangle,$$

a je-li $\hat{Q}|\psi_1\rangle = e^{i\delta}|\psi_1\rangle$

$$\hat{Q}|\psi_2\rangle = \hat{U}e^{i\delta}|\psi_1\rangle = e^{i\delta}\hat{U}|\psi_1\rangle = e^{i\delta}|\psi_2\rangle.$$

(Uvedené rovnice vyplývají z (15.13) a (15.10) pro symetrickou soustavu, z (15.14) a ze skutečnosti, že každé číslo a tedy i $e^{i\delta}$, komutuje s operátorem.)

Takže u určitých symetrií to, co je splněno na začátku, je splněno navždy. Není to však *zákon zachování*? Opravdu je! Říká, že podíváme-li se na počáteční stav a pomocí krátkých výpočtů kdesi na okraji zjistíme, že operace, která je operací symetrie pro danou soustavu, vede jen k vynásobení jistým fázovým faktorem, víme, že stejná vlastnost bude platit i pro konečný stav – tatáž operace vynásobí i konečný stav tímtéž fázovým faktorem. To je splněno vždy, i kdybychom nevěděli nic o vnitřním mechanismu vesmíru, který mění soustavu z počátečního do konečného stavu. I kdybychom se nestarali o podrobnosti mechanismu, který přivádí soustavu z jednoho stavu do druhého, můžeme prohlásit, že nachází-li se něco původně ve stavu s určitou symetrií, zachová si tento stav tentýž charakter symetrie na věčné časy. To je základ všech zákonů zachování kvantové mechaniky.



Obr. 15.4 Operace prostorové inverze \hat{P} . To, co se nachází v bodě $A(x, y, z)$, přejde do bodu $A'(-x, -y, -z)$

Vezměme si jeden speciální případ. Vraťme se k našemu operátoru \hat{P} . Nejdříve trochu opravíme jeho definici. Nechceme, aby operace \hat{P} představovala pouze zrcadlový obraz, protože to vyžaduje definici roviny, do které umístíme zrcadlo. Existuje však zvláštní druh zrcadlení, který takovou rovinu nepotřebuje. Předpokládejme, že operaci \hat{P} předdefinujeme takovýmto způsobem: Nejdříve najdeme zrcadlový obraz v zrcadle ležícím v rovině xy , takže souřadnice z přejde na $-z$, x zůstane x a y zůstane y . Pak otočíme soustavu o 180° kolem osy z , takže x přejde na $-x$ a y na $-y$. Celý postup se nazývá *prostorová inverze*. Každý bod se promítně středově podle počátku souřadnicové

soustavy do přesně opačné polohy. Všechny souřadnice čehokoliv změní znaménko. Pro tuto operaci, znázorněnou na obr. 15.4, budeme i nadále používat symbol \hat{P} . Je to něco výhodnější než obyčejné zrcadlení, neboť nevyžaduje určit potřebnou souřadnicovou rovinu; stačí, když definujeme bod, který je středem symetrie.

Nyní předpokládejme, že máme stav $|\psi_0\rangle$, který při aplikaci operace prostorové inverze přejde do stavu $e^{i\delta}|\psi_0\rangle$, tj.

$$|\psi'_0\rangle = \hat{P}|\psi_0\rangle = e^{i\delta}|\psi_0\rangle. \quad (15.16)$$

Představme si, že provedeme inverzi ještě jednou. Po dvou inverzích se ocitneme přesně tam, kde jsme byli na začátku: Vůbec nic se nezmění. Musíme dostat

$$\hat{P}|\psi'_0\rangle = \hat{P} \cdot \hat{P}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle.$$

Ale

$$\hat{P} \cdot \hat{P}|\psi'_0\rangle = \hat{P} e^{i\delta}|\psi_0\rangle = e^{i\delta}\hat{P}|\psi_0\rangle = (e^{i\delta})^2|\psi_0\rangle.$$

Z toho vyplývá, že

$$(e^{i\delta})^2 = 1.$$

Takže *je-li operátor inverze operací symetrie* pro nějaký stav, existují pro δ jen dvě možnosti

$$e^{i\delta} = \pm 1,$$

což znamená, že

$$\hat{P}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \quad \text{nebo} \quad \hat{P}|\psi_0\rangle = -|\psi_0\rangle. \quad (15.17)$$

Je-li v klasické fyzice stav symetrický vzhledem k operaci prostorové inverze, dostaneme po jejím provedení tentýž stav. V kvantové mechanice však existují dvě možnosti: dojdeme k *témuž*, nebo k *minus* témuž stavu. Máme-li *ten*ž stav, $\hat{P}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$, říkáme, že stav $|\psi_0\rangle$ má *kladnou paritu*. Je-li znaménko opačné, takže $\hat{P}|\psi_0\rangle = -|\psi_0\rangle$, hovoříme o *záporné paritě*. (Operátor prostorové inverze je známý i pod názvem operátor parity.) Stav $|I\rangle$ iontu H_2^+ má kladnou paritu; $|III\rangle$ má zase zápornou paritu – viz rovnice (15.12). Existují, samozřejmě, i stavy, které nejsou symetrické vzhledem k operaci \hat{P} ; tyto nemají přesně určenou hodnotu parity. Jako příklad nám může složit soustava H_2^+ ve stavu $|1\rangle$.

Říkáme-li, že jsme s *fyzikálním systémem* provedli nějakou operaci (řekněme prostorovou inverzi), lze se na to dívat dvojím způsobem. Můžeme mít na mysli buď to, že vše, co bylo v místě r , *fyzicky přemístíme* do inverzního bodu v místě $-r$, nebo všechno necháme na místě a budeme se na náš systém *dívat* z nové souřadnicové soustavy x', y', z' související se starou vztahy $x' = -x$, $y' = -y$ a $z' = -z$. Podobně uvažujeme-li rotaci, můžeme otáčet fyzikální systém jako celek nebo ho necháme pevně „sedět“ v prostoru a otáčíme souřadnic, k níž se systém vztahuje. Obecně jsou tato dvě hlediska navzájem ekvivalentní. Při rotaci jsou totožná až na to, že otočení *systému* o úhel ϑ je totéž jako otočení souřadnic o *záporný úhel* ϑ . V našich přednáškách jsme obvykle zkoumali, co se stane, provedeme-li průmět do nového souboru os. Tímto způsobem dostaneme přesně totéž, jako když osy zůstanou nehybné a celý systém otočíme směrem *dozadu* o tutéž hodnotu. Děláme-li to takto, nesmíme zapomenout změnit znaménka úhlů.⁶⁰⁾

⁶⁰⁾ V jiných knihách můžete najít vztahy s jinými znaménky; pravděpodobně jsou v nich úhly definovány jiným způsobem.

Mnohé ze zákonů fyziky, ačkoliv ne všechny, se při zrcadlení nebo při inverzi souřadnic nemění. Jsou *symetrické* vzhledem k prostorové inverzi. Například zákony elektrodynamiky budou mít stejný tvar, zaměníme-li x na $-x$, y na $-y$ a z na $-z$ ve *všech* rovnicích. Totéž platí pro gravitační zákony a pro silné interakce v jaderné fyzice. Pouze slabé interakce, zodpovědné za rozpad β , se nemohou touto symetrií chlubit. (Trochu podrobněji jsme to rozebrali v kapitole 52, 1. dílu.) Nyní však na rozpady β úplně zapomeneme. Pak pro libovolný fyzikální systém, v němž lze očekávat, že procesy β nebudou hrát nějakou významnou úlohu (jako příklad by nám mohla sloužit emise světla atomem), budou operátory \hat{H} a \hat{P} komutovat. Za těchto okolností můžeme zformulovat následující tvrzení: Má-li stav na počátku kladnou paritu a podíváme-li se na fyzikální situaci v nějakém pozdějším čase, typ parity se nezmění. Představme si, například, že atom, který má vyžářit foton, je ve stavu, o němž víme, že má kladnou paritu. Zkoumáme-li celou soustavu (včetně fotonu) po emisi, zjistíme, že parita zůstala stejná (k témuž závěru bychom dospěli i tehdy, kdybychom začínali se zápornou paritou). Tento princip se nazývá *zachování parity*. Nyní už chápete, proč se v kvantové mechanice výrazy „zachování parity“ a „symetrie vzhledem k zrcadlení“ navzájem proplétají. Není to tak dávno, co se lidé domnívali, že v přírodě se parita vždy zachovává; přišlo se však na to, že tomu tak *není*. Zjistilo se totiž, že reakce s rozpadem β nemají vlastnosti symetrie vzhledem k prostorové inverzi, jak to platí u jiných fyzikálních zákonů.

Nyní můžeme dokázat jednu zajímavou větu (která platí jen do té doby, dokud jsme oprávněni zanedbat slabé interakce): Libovolný nedegenerovaný stav s přesně určenou hodnotou energie musí mít přesně určenou paritu; buď kladnou, nebo zápornou. (Vzpomeňte si, že jsme se občas setkali se soustavami, v nichž mělo několik stavů tutéž hodnotu energie; říkáme, že takovéto stavy jsou *degenerované*. Jich se naše věta týkat nebude.)

Víme, že pro stav $|\psi_0\rangle$ s přesně určenou hodnotou energie platí

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle, \quad (15.18)$$

kde E je obyčejné číslo – energie stavu. Máme-li *libovolný* operátor \hat{Q} , který je operátorem symetrie pro danou soustavu, lze dokázat, že

$$\hat{Q}|\psi_0\rangle = e^{i\delta}|\psi_0\rangle, \quad (15.19)$$

je-li $|\psi_0\rangle$ jediný stav se zmíněnou hodnotou energie. Uvažujeme nový stav $|\psi'_0\rangle$, který dostaneme, působilme-li na $|\psi_0\rangle$ operátorem \hat{Q} . Je-li fyzika symetrická, musí být energie stavů $|\psi_0\rangle$ a $|\psi'_0\rangle$ stejné. Vybrali jsme však takovou situaci, v níž existuje pouze *jeden* stav s uvedenou energií, totiž $|\psi_0\rangle$, takže $|\psi'_0\rangle$ musí být tentýž stav – může se lišit jedině fází. To je fyzikální důvod.

Stejný výsledek dává i matematika. Naši definici symetrie vyjadřují rovnice (15.10) nebo (15.11) (platné pro libovolný stav $|\psi\rangle$)

$$\hat{H}\hat{Q}|\psi\rangle = \hat{Q}\hat{H}|\psi\rangle. \quad (15.20)$$

Uvažujeme však jen stav $|\psi_0\rangle$ s přesně určenou hodnotou energie, takže $\hat{H}|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle$. Jelikož E je obyčejné číslo, můžeme ho vynést před \hat{Q} , čímž dostaneme

$$\hat{Q}\hat{H}|\psi_0\rangle = \hat{Q}E|\psi_0\rangle = E\hat{Q}|\psi_0\rangle.$$

Takže
$$\hat{H}\{\hat{Q}|\psi_0\rangle\} = E\{\hat{Q}|\psi_0\rangle\}. \quad (15.21)$$

Proto $|\psi'_0\rangle = \hat{Q}|\psi_0\rangle$ je stavem operátoru \hat{H} s přesně určenou hodnotou energie – s tímž E . Podle naší hypotézy však takový stav existuje pouze jeden; proto musí být splněna podmínka $|\psi'_0\rangle = e^{i\delta}|\psi_0\rangle$.

To, co jsme právě dokázali, platí pro libovolný operátor \hat{Q} , který je operátorem symetrie fyzikální soustavy. Proto v situaci, kde bereme v úvahu jen elektrické síly a silné interakce (ale ne rozpad β), je symetrie vzhledem k prostorové inverzi povoleným přiblížením, takže $\hat{P}|\psi\rangle = e^{i\delta}|\psi\rangle$. Zjistili jsme však, že $e^{i\delta}$ musí být rovno buď +1, nebo -1. Proto libovolný nedegenerovaný stav s přesně určenou hodnotou energie musí mít paritu buď kladnou, nebo zápornou.

15.3 ZÁKONY ZACHOVÁNÍ

Naši pozornost nyní soustředíme na jiný zajímavý případ operace symetrie – na *rotaci*. Uvažujme speciální případ operátoru, který otočí atomovou soustavou o úhel φ kolem osy z. Tento operátor⁶¹⁾ nazveme $\hat{R}_z(\varphi)$. Budeme předpokládat, že máme takovou fyzikální situaci, v níž neexistují žádné vlivy ve směru os x a y. Libovolná elektrická nebo magnetická pole vybíráme tak, aby byla rovnoběžná s osou⁶²⁾ z, takže kolem ní otočíme celou fyzikální soustavu, ve *vnějších* podmínkách nenastane žádná změna. Například máme-li ve vakuu nějaký atom a otočíme jej kolem osy z o úhel φ , dostaneme tutěž fyzikální soustavu.

Existují *speciální stavy* s tou vlastností, že taková operace z nich vytvoří nový stav, který je roven původnímu stavu vynásobenému nějakým fázovým faktorem. Jen tak narychlo si ukážeme, že platí-li to, musí být fázový faktor úměrný úhlu φ . Představme si, že bychom provedli rotaci o úhel φ dvakrát po sobě. To je totéž jako otočení o úhel 2φ . Má-li rotace za následek to, že stav $|\psi_0\rangle$ je vynásoben fází $e^{i\delta}$, takže

$$\hat{R}_z(\varphi)|\psi_0\rangle = e^{i\delta}|\psi_0\rangle,$$

dvě rotace za sebou by způsobily vynásobení stavu faktorem $(e^{i\delta})^2 = e^{i2\delta}$, protože

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_z(\varphi)|\psi_0\rangle = \hat{R}_z(\varphi)e^{i\delta}|\psi_0\rangle = e^{i\delta}\hat{R}_z(\varphi)|\psi_0\rangle = e^{i\delta}e^{i\delta}|\psi_0\rangle.$$

Změna fáze δ musí tedy být úměrná φ ⁶³⁾. Uvažujeme proto takové speciální stavy $|\psi_0\rangle$, pro které

$$\hat{R}_z(\varphi)|\psi_0\rangle = e^{im\varphi}|\psi_0\rangle, \quad (15.22)$$

kde m je nějaké reálné číslo.

61) Přesněji, $\hat{R}_z(\varphi)$ definujeme jako otočení fyzikální soustavy o úhel $-\varphi$ kolem osy z, což je totožné s otočením soustavy souřadnic o úhel $+\varphi$.

62) Osu z můžeme vždy zvolit podél směru pole za předpokladu, že v každém čase existuje pouze jedno pole a jeho směr se nemění.

63) Při přesnějším důkazu bychom měli tyto úvahy použít pro malé rotace ε . Protože libovolný úhel φ představuje součet určitého počtu n takovýchto otočení, $\varphi = n\varepsilon$, $\hat{R}_z(\varphi) = [\hat{R}_z(\varepsilon)]^n$ a celková změna fáze je n -násobkem změny i pro úhel ε ; je proto úměrná φ .

Známe také tu pozoruhodnou skutečnost, že *je-li* soustava symetrická vzhledem k rotacím kolem osy *z* *má-li* náhodou tu vlastnost, že (17.22) platí, bude mít tuto vlastnost i později. Takže číslo *m* je velmi důležité. Známe-li jeho hodnotu na počátku, víme, jaká bude na konci celého procesu. Je to číslo, které se *zachovává* – *m* je *konstantou pohybu*. Důvod, proč hovoříme právě o *m*, je ten, že nemá nic společného s nějakým speciálním úhlem φ , a navíc v klasické mechanice má svou analogii. V kvantové mechanice nazýváme $m\hbar$ (ve stavech podobných $|\psi_0\rangle$) *momentem hybnosti vzhledem k rotaci kolem osy z*. Můžeme se přesvědčit, že v limitě pro velké soustavy je tatáž veličina rovna *z*-ové složce momentu hybnosti z klasické mechaniky. Proto máme-li stav, který nás po rotaci kolem osy *z* přivede k fázovému faktoru $e^{im\varphi}$, je to stav s přesně určenou hodnotou momentu hybnosti vzhledem k této ose – a moment hybnosti se zachovává. Je roven $m\hbar$ jednou provždy. Samozřejmě, že rotaci můžeme provést kolem jakékoliv osy a tak dostaneme zachování momentu hybnosti vzhledem k různým osám. Vidíme, že je to spjato s tím, že při otočení soustavy dostaneme tentýž stav, jen s novým fázovým faktorem.

Rádi bychom vám ukázali, nakolik má tato myšlenka obecnou platnost. Budeme ji aplikovat na jiné dva zákony zachování, které z fyzikální stránky přesně odpovídají zachování momentu hybnosti. Z klasické fyziky známe zákony zachování hybnosti a energie a je zajímavé si všimnout, že oba stejně souvisejí s nějakými fyzikálními symetriemi. Představme si, že máme fyzikální soustavu – atom, nějaké složité jádro či molekulu, nebo něco jiného – a nic se nestane, když ji jako celek přemístíme někam jinam. Hamiltonián má tedy tu vlastnost, že v jistém smyslu závisí jedině na *vnitřních souřadnicích*, a ne na *absolutní poloze* v prostoru. Za těchto okolností můžeme provést speciální operaci symetrie, která se nazývá *translace v prostoru*. Definujme $\hat{D}_x(a)$ jako operaci posunutí o vzdálenost *a* podél osy *x*. Můžeme ji aplikovat na libovolný stav, což nás přivede k novému stavu. Opět však existují velmi speciální stavy s tou vlastností, že posuneme-li je podél osy *x* o *a*, dostaneme až na fázový faktor tentýž stav. Lze dokázat (stejně jako v předcházejícím příkladu), že v takovém případě musí být fáze úměrná *a*. Pro tyto speciální stavy $|\psi_0\rangle$ můžeme napsat

$$\hat{D}_x(a)|\psi_0\rangle = e^{ika}|\psi_0\rangle. \quad (15.23)$$

Koeficient *k*, vynásobený \hbar , se nazývá *x-ová složka hybnosti*. Důvod je ten, že pro velkou soustavu je toto číslo numericky rovno klasické hybnosti p_x . Obecné tvrzení zní: Nezmění-li se hamiltonián soustavy, když ji přesuneme na jiné místo, a má-li počáteční stav přesně určenou hybnost ve směru osy *x*, její hodnota se ani v dalším čase nezmění. Celková hybnost soustavy před srážkou a po ní (nebo po výbuchu nebo čemkoliv jiném) bude jedna a tatáž.

Existuje ještě další operace dost podobná posunutí v prostoru: časový posun (*translace v čase*). Uvažujme fyzikální situaci, v níž nemáme *žádné vnější vlivy* závislé na čase; v určitém okamžiku uvedeme něco do daného stavu a necháme to napospas osudu. Kdybychom totéž udělali (v jiném experimentu) o dvě sekundy později, nebo řekněme s časovým posunem τ , a nezávisí-li nic z vnějších podmínek na absolutním čase, bude vývoj stavu stejný a oba konečné stavy si budou rovny až na to, že druhý dostaneme s časovým zpožděním τ . I za takových okolností můžeme najít speciální stavy s vlastností, že se jejich časový vývoj vyznačuje zvláštním rysem: Zpožděný stav lze vyjádřit ve tvaru součinu starého stavu a fázového faktoru. Je opět zřejmé, že v takovém případě musí být změna fáze úměrná τ . Lze psát

$$\hat{D}_t(\tau)|\psi_0\rangle = e^{-i\omega\tau}|\psi_0\rangle. \quad (15.24)$$

Při definování ω se obvykle používá záporné znaménko; $\omega\hbar$ pak představuje energii soustavy, a ta se zachovává. Soustava s přesně určenou hodnotou energie má tedy tu vlastnost, že při translaci v čase τ se její stav reprodukuje až na faktor $e^{-i\omega\tau}$. (Totéž jsme vlastně tvrdili už tehdy, když jsme definovali kvantový stav s přesně určenou energií, takže si sami sobě neodporujeme.) Znamená to, že nachází-li se soustava ve stavu s přesně určenou hodnotou energie a nezávisí-li hamiltonián na t , tak bez ohledu na to, co se s ní děje, bude mít v každém pozdějším čase tutéž energii.

Vidíme tedy, jaký je vztah mezi zákony zachování a symetrií našeho světa. Symetrie vzhledem k translacím v čase nutně vede k zachování energie; symetrie vzhledem k posunutí podél os x , y a z má za následek zachování příslušné složky hybnosti. Ze symetrie vzhledem k rotacím kolem souřadnicových os vyplývá zachování příslušných složek momentu hybnosti. Zachování parity je důsledkem symetrie vzhledem k zrcadlení. Symetrie vzhledem k vzájemné výměně dvou elektronů implikuje zachování něčeho, pro co ještě nemáme pojmenování atd. Některé z těchto základních pouček mají klasickou analogii, jiné ne. V kvantové mechanice najdeme víc zákonů zachování než v klasické mechanice, nebo přinejmenším více než těch, které se v ní obvykle využívají.

Abyste mohli studovat i jiné knihy z kvantové mechaniky, musíme udělat malou technickou odbočku a seznámit vás s jedním používaným označováním. Operace časového posunu je, samozřejmě, právě tou operací \hat{U} , o níž jsme hovořili předčasně

$$\hat{D}_i(\tau) = \hat{U}(t + \tau, t). \quad (15.25)$$

Většina fyziků raději pracuje s *nekonečně malými* (infinitesimálními) translacemi v čase, s nekonečně malými posunutími v prostoru nebo s otočeními o nekonečně malé úhly. Jelikož se k libovolnému konečnému posunutí nebo úhlu můžeme dopracovat postupně pomocí nekonečně malých posunutí nebo úhlů, je často snazší rozebrat nejdříve infinitesimální případ. Operátor nekonečně malé translace v čase o Δt (jak jsme jej definovali v 6. kapitole) má tvar

$$\hat{D}_i(\Delta t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}. \quad (15.26)$$

\hat{H} je analogické klasické veličině, kterou nazýváme energie, neboť ukáže-li se, že $\hat{H}|\psi\rangle$ je rovno konstantě krát $|\psi\rangle$, tj. $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, je tato konstanta energií soustavy.

Tentýž postup je uplatňován i při jiných operacích. Provedeme-li malé posunutí ve směru x , řekněme o hodnotu Δx , přejde *obecně* stav $|\psi\rangle$ do nějakého jiného stavu $|\psi'\rangle$. Můžeme napsat

$$|\psi'\rangle = \hat{D}_x(\Delta x)|\psi\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \Delta x\right)|\psi\rangle, \quad (15.27)$$

protože blíží-li se Δx k nule, nutně musí $|\psi'\rangle$ být rovno $|\psi\rangle$, nebo což je totéž, $\hat{D}_x(0) = 1$, a pro malá Δx musí být odchylka $\hat{D}_x(\Delta x)$ od 1 úměrná Δx . Takovým způsobem definovaný operátor \hat{p}_x se nazývá operátor hybnosti – samozřejmě, pro x -ovou složku.

Z těchto důvodů je obvyklé psát pro malé rotace

$$\hat{R}_z(\Delta\varphi)|\psi\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \Delta\varphi\right)|\psi\rangle \quad (15.28)$$

a operátor \hat{J}_z se nazývá operátor *z*-ové složky momentu hybnosti. Pro ty speciální stavy, pro které $\hat{R}_z(\varphi) |\psi_0\rangle = e^{im\varphi} |\psi_0\rangle$, můžeme pro libovolný malý úhel, řekněme $\Delta\varphi$, rozvinout pravou stranu do mocninové řady a vzít z ní pouze členy do první mocniny $\Delta\varphi$ včetně; dostaneme

$$\hat{R}_z(\Delta\varphi) |\psi_0\rangle = e^{im\Delta\varphi} |\psi_0\rangle = (1 + im\Delta\varphi) |\psi_0\rangle.$$

Porovnáním tohoto výrazu s definicí \hat{J}_z v rovnici (15.28) vidíme, že

$$\hat{J}_z |\psi_0\rangle = m\hbar |\psi_0\rangle. \quad (15.29)$$

Jinými slovy, působíme-li operátorem \hat{J}_z na stav s přesně určenou hodnotou momentu hybnosti vzhledem k ose *z*, dostaneme $m\hbar$ -násobek téhož stavu, kde $m\hbar$ je velikost *z*-ové složky momentu hybnosti. Je to zcela analogické případu, kdy na stav s přesně určenou energií necháme působit operátor \hat{H} ; výsledkem bude $E|\psi\rangle$.

Nyní vám na několika praktických příkladech ukážeme, jak se myšlenky zachování momentu hybnosti uplatňují v praxi. Ve skutečnosti jsou velmi jednoduché. Už předtím jste věděli, že má-li stav $|\psi_0\rangle$ takovou vlastnost, že po rotaci kolem osy *z* o úhel φ přejde do stavu $e^{im\varphi} |\psi\rangle$, je jeho *z*-ová složka momentu hybnosti rovna $m\hbar$. To nám zcela postačí k tomu, abychom se s úspěchem pustili do mnoha zajímavých aplikací.

15.4 POLARIZOVANÉ SVĚTLO

Především si prověříme jednu myšlenku. Ve stati 9.4 jsme poukázali na to, že díváme-li se na pravotočivě polarizované světlo ze souřadnicové soustavy otočené kolem osy *z* o úhel $\varphi^{64)}$, projeví se to tak, že jeho stav se vynásobí faktorem $e^{i\varphi}$. Znamená to snad, že fotony pravotočivě kruhově polarizovaného světla nesou moment hybnosti jednotkové velikosti⁶⁵⁾ vzhledem k ose *z*? Ano, opravdu tomu tak je. Z toho také vyplývá, že máme-li paprsek světla obsahující velké množství fotonů, které jsou všechny stejně kruhově polarizovány (jak je tomu v klasických paprscích), bude s sebou nést moment hybnosti. Je-li W celková energie, kterou svazek přeneše za určitý čas, bude všech fotonů $N = W/\hbar\omega$. Každý z nich má moment hybnosti \hbar , takže celkový moment hybnosti je dán vztahem

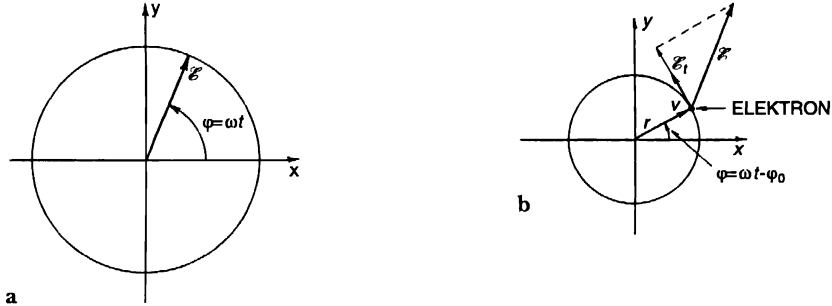
$$J_z = N\hbar = \frac{W}{\omega}. \quad (15.30)$$

Můžeme klasickým způsobem dokázat, že pravotočivě kruhově polarizované světlo má energii a moment hybnosti úměrný W/ω^2 . Vždyť je-li vše v pořádku, mělo by to jít. Před námi je případ, v němž máme možnost přejít od kvant ke klasice. Měli bychom si ověřit, zda i klasická fyzika dojde ke stejnému výsledku. Získáme představu, zda skutečně máme právo nazývat m momentem

⁶⁴⁾ Omlouváme se! Tento úhel má opačné znaménko než ten, který jsme zavedli ve stati 9.4.

⁶⁵⁾ Obvykle je velmi výhodné měřit moment hybnosti atomových soustav v jednotkách \hbar . Tak můžeme říci, že částice se spinem $1/2$ má moment hybnosti $\pm 1/2$ vzhledem k libovolné ose. Nebo obecně, že *z*-ová složka momentu hybnosti je m . Nemusíme stále opakovat \hbar .

hybnosti. Vzpomeňme si, co znamená pravotočivě kruhově polarizované světlo v klasickém jazyce. Je popsáno elektrickým polem, jehož oscilující složky x a y jsou posunuty ve fázi o 90° , takže výsledný vektor elektrického pole \mathcal{E} vytváří svým pohybem kružnici (obr. 15.5a). Nyní si představme, že takovým světlem svítíme na stěnu, která je pohltila (nebo alespoň jeho část), a uvažujme, co se z hlediska klasické fyziky děje s nějakým atomem stěny. Pohyb elektronu v atomu jsme často pokládali za pohyb harmonického oscilátoru, který je uveden do činnosti vnějším elektrickým polem. Atom budeme považovat za izotropní, takže mu nic nebrání oscilovat stejně dobře ve směrech x a y . Při kruhově polarizovaném světle jsou výchylky podél os x a y stejně velké, jen jedna z nich je opožděna za druhou o 90° . Výsledkem je pohyb elektronu po kružnici (obr. 15.5b).



Obr. 15.5 a) Intenzita elektrického pole \mathcal{E} v kruhově polarizované světelné vlně
b) Pohyb elektronu vyvolaný účinkem kruhově polarizovaného světla

Elektron se ze své rovnovážné polohy v počátku souřadnicové soustavy vychýlí do bodu r a začne kroužit s nějakým fázovým rozdílem vůči vektoru \mathcal{E} . Obrázek 15.5b znázorňuje možný vztah mezi vektory \mathcal{E} a r . Elektrické pole a výchylka vykonávají v čase rotační pohyb s toutéž frekvencí, takže jejich vzájemná orientace se nemění. Nyní se podívejme, jaká práce je spotřebována na elektron. Velikost jemu odevzdané energie za jednotku času je rovna jeho rychlosti v vynásobené složkou vektoru \mathcal{E} rovnoběžnou s touto rychlostí a nábojem elektronu e .

$$\frac{dW}{dt} = e\mathcal{E}_t v. \quad (15.31)$$

Všimněme si však, že na elektron stále působí moment síly vzhledem k počátku souřadnic, takže jeho moment hybnosti spojitě roste. Změna momentu hybnosti za jednotku času dJ_z/dt musí být rovna momentu síly $e\mathcal{E}_t r$:

$$\frac{dJ_z}{dt} = e\mathcal{E}_t r. \quad (15.32)$$

Vzpomeneme-li si, že $v = \omega r$, dostáváme

$$\frac{dJ_z}{dW} = \frac{1}{\omega}.$$

Po integraci této rovnice docházíme k výsledku, že celkový moment hybnosti, který je pohlcen, je úměrný celkové energii; konstanta úměrnosti je $1/\omega$, což souhlasí s rovnicí (15.30). Světlo opravdu přenáší moment hybnosti $+1$ (krát \hbar), je-li pravotočivě, a -1 (krát \hbar), je-li levotočivě kruhově polarizováno podél osy z .

Položme si nyní takovouto otázku: Je-li světlo lineárně polarizované ve směru osy x , jaký je jeho moment hybnosti? Světlo polarizované ve směru x si můžeme představit jako superpozici pravotočivě a levotočivě polarizovaného světla. Existuje proto určitá amplituda toho že moment hybnosti bude $+\hbar$, a nějaká amplituda toho, že bude roven $-\hbar$. Přesně určená, *jediná* hodnota momentu hybnosti pro něj tedy neexistuje. Lineárně polarizovaný foton má určitou amplitudu toho, že se objeví s hodnotou $+\hbar$, a tutéž amplitudu pro $-\hbar$. Interferencí obou amplitud vznikne lineární polarizace, která má *stejně* pravděpodobnosti ocitnout se s momentem hybnosti rovným $+1$ nebo -1 . Makroskopická měření se svazkem lineárně polarizovaného světla ukazují, že takové světlo nese nulový moment hybnosti, protože v obrovském počtu fotonů jsou pravotočivě a levotočivě fotony zastoupeny přibližně v poměru $1 : 1$; jelikož přispívají k celkovému momentu hybnosti opačnými vklady, bude střední hodnota rovna nule. V klasické teorii opravdu moment hybnosti neobjevíme, pokud nebude přítomna nějaká kruhová polarizace.

Hovořili jsme o tom, že pro libovolnou částici se spinem 1 může J_z nabývat tří hodnot: $+1, 0, -1$ (tři stavy, které jsme pozorovali v experimentu Sterna-Gerlach). Světlo však představuje výjimku; má jen dva stavy. Stav nula u něj chybí. Tato podivná absence souvisí s tím, že světlo nemůže stát na místě. Pro částici se spinem j , která je v klidu, musí existovat $2j + 1$ možných stavů s hodnotami j_z od $-j$ po j s krokem 1 . Ukazuje se však, že má-li něco spin j a jeho hmotnost je nulová, existují pouze stavy se složkami $+j$ a $-j$ podél směru pohybu. Například světlo má jen dva stavy a ne tři, ačkoliv foton je objekt se spinem 1 . Jak to souhlasí s našimi předešlymi důkazy (opírajícími se o to, co se děje při prostorových rotacích), že pro částici se spinem 1 jsou potřebné tři stavy? Částice v klidu lze otáčet kolem libovolné osy, aniž bychom změnili stav její hybnosti. Částice s nulovou klidovou hmotností (jako jsou fotony a neutrina) nemohou setrvávat v klidu; jediné rotace kolem osy podél směru pohybu zachovávají stav jejich hybnosti. A otočení kolem jedné osy nestačí na důkaz toho, že jsou třeba tři stavy, je-li dáno, že jeden z nich se při rotacích o úhel φ mění jako $e^{i\varphi}$.⁶⁶⁾

Ještě poznámka na okraj. Obecně platí, že v případě částice s nulovou klidovou hmotností vystačíme pouze s *jedním* z obou spinových stavů vzhledem ke směru pohybu ($+j, -j$). Pro neutrina (což jsou částice se spinem $1/2$) existují v přírodě pouze stavy se složkou momentu hybnosti j_z orientovanou *proti* směru pohybu, tj. $j_z = -\hbar/2$ (pro antineutrina zase jen $j_z = +\hbar/2$, tedy *ve směru* pohybu). Vyznačuje-li se soustava vlastností symetrie vzhledem k prostorové inverzi (takže je parita zachována), vyžadují se už obě složky, $+j$ i $-j$. Jako příklad slouží světlo.

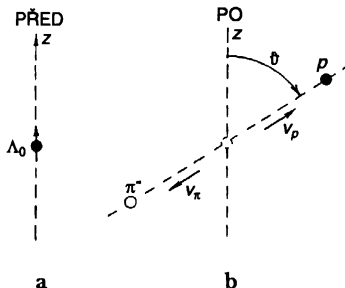
15.5 ROZPAD ČÁSTICE Λ^0

Nyní uvedeme příklad, jak lze využít větu o zachování momentu hybnosti v čisté kvantověfyzikální úloze. Zaměříme se na rozpad částice Λ^0 na proton a mezon π^- , který probíhá pod vlivem slabé interakce

$$\Lambda^0 \rightarrow p + \pi^-.$$

⁶⁶⁾ Pokusili jsme se najít alespoň důkaz toho, že pro částici s nulovou klidovou hmotností musí být složka momentu hybnosti podél směru pohybu celočíselným násobkem $\hbar/2$, a ne např. $\hbar/3$. Ačkoliv jsme použili všechny možné vlastnosti Lorentzovy transformace a co já vím, co ještě, nebyli jsme úspěšní. Možná to ani není pravda. Bylo by třeba popovídat si o tom s prof. Wignerem, který o těchto věcech ví víc.

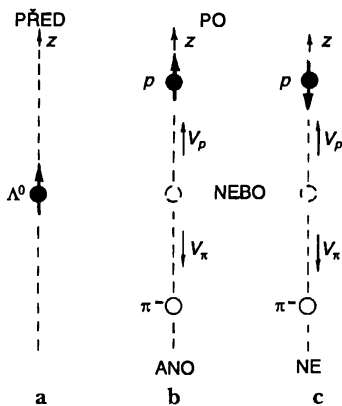
Uvědomme si, že pion má spin 0, proton $1/2$ a Λ^0 také $1/2$. Chceme vyřešit takovou úlohu: Předpokládejme, že způsob vzniku částic Λ^0 zaručuje, že všechny jsou úplně polarizovány – čímž rozumíme, že jejich spin míří řekněme nahoru vzhledem k nějaké vhodně vybrané ose z (obr. 15.6a).



Obr. 15.6 Částice Λ^0 se spinem nahoru se rozpadá na proton a pion (v soustavě hmotného středu). Jaká je pravděpodobnost toho, že proton vyletí pod úhlem ϑ ?

Otázka zní, s jakou pravděpodobností se Λ^0 rozpadne tak, že proton vyletí pod úhlem ϑ vzhledem k ose z (obr. 15.6b). Jinak řečeno, jak vypadá úhlové rozdělení tohoto procesu? Rozpad budeme zkoumat v soustavě souřadnic, v níž je Λ^0 v klidu – úhly budeme měřit v této klidové soustavě; budeme-li potřebovat, vždy je lze přetransformovat do jiné souřadnicové soustavy.

Začneme tím, že prostudujeme speciální případ, kdy je proton emitován do malého prostorového úhlu $\Delta\Omega$ podél osy z (obr. 15.7). Před rozpadem máme částici Λ^0 se spinem nahoru, jak naznačuje část a na obrázku. Za krátkou dobu (z důvodů dosud neznámých; víme jen to, že jsou spojeny se slabými rozpady) Λ^0 exploduje a vznikne proton a pion.



Obr. 15.7 Dvě možnosti rozpadu částice Λ^0 se spinem nahoru, v nichž se proton pohybuje ve směru $+z$. Jen b) zachovává moment hybnosti.

Uvažujme, že proton letí v kladném směru osy z. Ze zachování hybnosti vyplývá, že pion se musí pohybovat v opačném směru, tj. dolů. Jelikož proton je částice se spinem $1/2$, může jeho spin mířit buď nahoru nebo dolů; v principu existují dvě možnosti uvedené v částicích b a c na obrázku. Zákon zachování momentu hybnosti však vyžaduje, aby byl spin protonu orientován směrem nahoru. Nejlépe je to vidět z následující úvahy. Částice letící podél osy z nemůže žádným

způsobem získat v důsledku svého pohybu moment hybnosti vzhledem k této ose; k J_z mohou proto přispět jediné spiny. Před rozpadem je spinový moment hybnosti vzhledem k ose z roven $+\hbar/2$, takže též hodnoty musí nabývat i po něm. Protože pion nemá spin, můžeme říci, že spin protonu nutně míří nahoru.

Kdyby se vás zmocnily pochybnosti, že úvahy tohoto druhu nemusejí v kvantové mechanice platit, vyplatí se nám na chvíličku se zastavit a ukázat vám, že ony opravdu platí. Počáteční stav (před rozpadem), který můžeme nazvat $|\Lambda^0, \text{spin } +z\rangle$ má tutéž vlastnost, že otočíme-li jej kolem osy z o úhel φ , získá stavový vektor fázový faktor $e^{i\varphi/2}$. (V otočené soustavě souřadnic bude mít stavový vektor tvar $e^{i\varphi/2} \cdot |\Lambda^0, \text{spin } +z\rangle$). To je to, co chápeme pod spinem nahoru pro částici se spinem $1/2$. Jelikož chování přírody nezávisí na tom, jak vybereme osy, musí mít konečný stav (proton plus pion) stejnou vlastnost. Lze jej zapsat řekněme takto

$$|\text{proton ve směru } +z; \text{spin } +z; \text{pion ve směru } -z\rangle.$$

Ve skutečnosti však nepotřebujeme blíže určovat pohyb pionu, neboť ve zvolené soustavě souřadnic se bude pohybovat vždy v opačném směru než proton; náš zápis konečného stavu můžeme zjednodušit na tvar

$$|\text{proton ve směru } +z; \text{spin } +z\rangle.$$

Co se stane s tímto stavovým vektorem, otočíme-li souřadnicovou soustavu kolem osy z o úhel φ ?

Protože obě částice, proton i pion, letí ve směru osy z, jejich pohyb se rotací nezmění. (Právě proto jsme zvolili tento speciální případ; jinak bychom nemohli provést následující úvahu). Nebude se nic dít ani s pionem, neboť má nulový spin. Proton má však spin $1/2$. Pokud jeho spin míří nahoru, rotace způsobí změnu fáze $e^{i\varphi/2}$ - násobně. (Kdyby byl spin orientován dolů, byla by fáze změněna $e^{-i\varphi/2}$ -krát.) Má-li se zachovat moment hybnosti, musí být změna fáze v důsledku rotace před rozpadem a po něm stejná. (A také bude, protože hamiltonián neobsahuje žádné vnější vlivy.) Zbývá tedy jediná možnost: Spin protonu bude orientován nahoru. Letí-li proton nahoru, bude nahoru mířit i jeho spin.

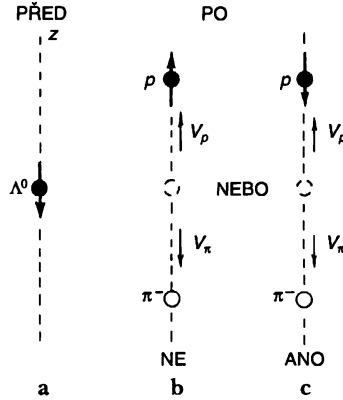
Docházíme tedy k závěru, že zachování momentu hybnosti povoluje proces znázorněný v části b na obr. 15.7, ale zakazuje proces naznačený v části c. Protože víme, že k rozpadu dochází, existuje určitá amplituda procesu na obr. 15.7b, tj. procesu „proton směrem nahoru se spinem nahoru“. Označíme ji a ; bude představovat amplitudu toho, že za nekonečně malý časový interval⁶⁷⁾ proběhne rozpad zmíněným způsobem.

Nyní se podívejme, co by se stalo, kdyby na začátku měla částice Λ^0 spin dolů. Opět se ptejme na rozpady, v nichž proton letí ve směru osy $+z$, jak ukazuje obr. 15.8. Určitě se mnou budete souhlasit, že v tom případě, zachovává-li se moment hybnosti, musí mít proton spin dolů. Amplitudu takového rozpadu nazvěme b .

O obou amplitudách a a b už nic víc říci nemůžeme. Závisí na vnitřním mechanismu částice Λ^0 a na slabých rozpadech; dodnes je nikdo neumí spočítat. Musíme je získat z experimentu. Tyto dvě amplitudy nám však *úplně stačí* na to, abychom se o úhlovém rozdělení rozpadu dozvěděli, co potřebujeme. Musíme si jen dát pozor na to, abychom vždy přesně a úplně definovali stavy, o nichž je řeč.

⁶⁷⁾ V dané chvíli předpokládáme, že mechanismus kvantové mechaniky je vám dostatečně znám, takže můžete o těchto věcech hovořit fyzikálním jazykem a neztrácet čas zapisováním všech možných matematických podrobností. Kdyby vám náš komentář nebyl zcela jasný, na konci kapitoly jsme uvedli některé chybějící detaily ve formě poznámky.

Chceme znát pravděpodobnost toho, že proton vyletí pod úhlem ϑ vzhledem k ose z (do malého prostorového úhlu $\Delta\Omega$), jak znázorňuje *obr. 15.6*. Do tohoto směru položíme novou osu z' a označme ji z' . Zajisté tušíte, co bude dál.



Obr. 15.8 Rozpad v kladném směru osy z pro Λ^0 se spinem dolů

Vzhledem k z' už částice Λ^0 nemá spin nahoru, ale existuje jistá amplituda toho, že její spin směřuje nahoru, a jistá amplituda toho, že jej najdeme ve směru dolů. Tyto záležitosti jsme vyřešili ve 4. a ještě jednou v 8. kapitole, rovnice (8.30). Amplituda pro spin nahoru je $\cos \vartheta/2$ a pro spin dolů⁶⁸⁾ $-\sin \vartheta/2$. Má-li Λ^0 vzhledem k z' spin nahoru, bude ve směru $+z'$ emitovat foton s amplitudou a . Proto amplituda najít proton vyletující ve směru $+z'$ se spinem nahoru má tvar

$$a \cos \frac{\vartheta}{2}. \quad (15.33)$$

Podobně lze zapsat i amplitudu toho, že v kladném směru osy z' se bude pohybovat i proton se spinem dolů

$$-b \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (15.34)$$

Oba procesy, k nimž se uvedené amplitudy vztahují jsou zobrazeny na *obr. 15.9*.

Položme si nyní tuto lehkou otázku: Míří-li spin částice Λ^0 nahoru vzhledem k ose z , jaká je pravděpodobnost toho, že proton z rozpadu poletí pod úhlem ϑ ? Oba spinové stavy (nahoru i dolů vzhledem k z') jsou rozlišitelné, ačkoliv nás v tuto chvíli nezajímají. Abychom dostali pravděpodobnost, je třeba amplitudy umocnit na druhou a sečíst. Proto je pravděpodobnost $f(\vartheta)$ najít proton v malém prostorovém úhlu $\Delta\Omega$ při ϑ rovna

$$f(\vartheta) = |a|^2 \cos^2 \frac{\vartheta}{2} + |b|^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}. \quad (15.35)$$

⁶⁸⁾ Osu z' jsme zvolili v rovině xz a použili jsme maticové elementy $R_y(\vartheta)$. K témuž výsledku bychom dospěli i při jakémkoliv jiném výběru os.

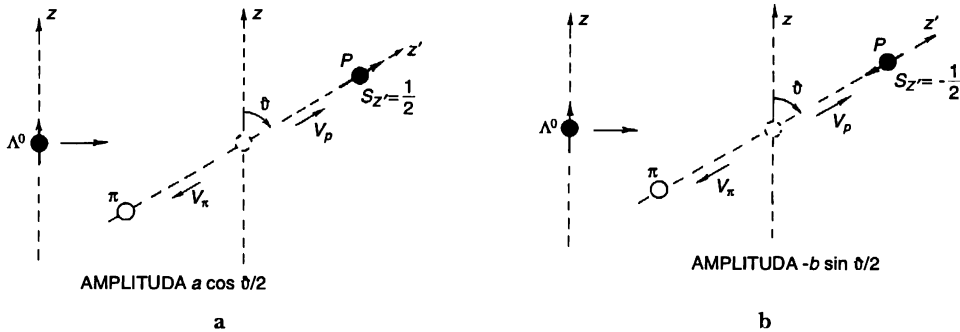
Uvědomíme-li si, že $\sin^2 \vartheta/2 = (1 - \cos \vartheta)/2$ a $\cos^2 \vartheta/2 = (1 + \cos \vartheta)/2$, můžeme $f(\vartheta)$ zapsat jako

$$f(\vartheta) = \left(\frac{|a|^2 + |b|^2}{2} \right) + \left(\frac{|a|^2 - |b|^2}{2} \right) \cos \vartheta. \quad (15.36)$$

Úhlové rozdělení má tvar

$$f(\vartheta) = \beta(1 + \alpha \cos \vartheta). \quad (15.37)$$

Jedna část pravděpodobnosti nezávisí na ϑ a druhá se mění lineárně s $\cos \vartheta$. Změřením úhlového rozdělení dokážeme zjistit α a β , a z toho pak $|a|$ a $|b|$.



Obr. 15.9 Dva možné stavy rozpadu částice Λ^0

Existuje mnoho otázek, na které můžeme najít odpověď. Co když nás zajímají pouze protony se spinem ve směru *původní* osy $+z$? Členy v (15.33) a (15.34) udávají amplitudy nalezení protonu se spinem orientovaným nahoru a dolů vzhledem k z' ($+z'$ a $-z'$). Takový stav, kdy spin míří do kladného směru staré osy, tj. $|+z\rangle$, lze vyjádřit pomocí báзовých stavů $|+z'\rangle$ a $|-z'\rangle$. Kombinací obou amplitud (15.33) a (15.34) s odpovídajícími koeficienty ($\cos \vartheta/2$ a $-\sin \vartheta/2$) dostaneme celkovou amplitudu

$$\left(a \cos^2 \frac{\vartheta}{2} + b \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right).$$

Její druhá mocnina představuje pravděpodobnost toho, že proton vyletí pod úhlem ϑ se spinem v témže směru jako Λ^0 (tj. nahoru vzhledem k ose z).

Kdyby se parita zachovávala, mohli bychom dostat ještě jednu věc. Rozpad na obr. 15.8 je vlastně zrcadlovým obrazem, řekněme v rovině yz , procesu na obr. 15.7.⁶⁹⁾ V případě zachování parity by b muselo být rovno buď a , nebo $-a$. V důsledku toho by byl koeficient α v (15.37) nulový a rozpad by byl izotropní, tj. probíhal by ve všech směrech se stejnou pravděpodobností.

Experimentální výsledky však ukazují, že při tomto rozpadu dochází k asymetrii. Změřené úhlové rozdělení má podle předpovědi průběh jako $\cos \vartheta$, a ne jako $\cos^2 \vartheta$ nebo nějaká jiná mocnina. Jelikož se vyznačuje touto závislostí, můžeme ze zmíněných experimentů usuzovat, že částice Λ^0 má spin $1/2$. Kromě toho vidíme, že parita se nezachovává. Experimentální hodnota

⁶⁹⁾ Vzpomeňme si, že spin je axiální vektor a při zrcadlení se překlápá.

koeficientu a je asi $-0,62 \pm 0,05$, takže b je zhruba dvakrát větší než a . Asymetrie vůči zrcadlení je očividná.

Vidíme, co všechno lze odvodit ze zákona zachování momentu hybnosti. V následující kapitole uvedeme několik dalších příkladů.

Poznámka pro vysvětlení. Amplitudou a v této stati rozumíme amplitudu toho, že za nekonečně malý čas dt se ze stavu $|\Lambda^0, \text{spin} +z\rangle$ vytvoří stav |proton ve směru $+z$, spin $+z\rangle$, nebo jinými slovy, že

$$\langle \text{proton ve směru } +z, \text{spin} +z | H | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle = i\hbar a, \quad (15.38)$$

kde H je hamiltonián světa, nebo přinejmenším té jeho části, která je zodpovědná za rozpad Λ^0 . Zachování momentu hybnosti znamená, že hamiltonián musí mít tuto vlastnost

$$\langle \text{proton ve směru } +z, \text{spin} -z | H | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle = 0. \quad (15.39)$$

Amplitudou b rozumíme

$$\langle \text{proton ve směru } +z, \text{spin} -z | H | \Lambda^0, \text{spin} -z \rangle = i\hbar b. \quad (15.40)$$

Ze zákona zachování momentu hybnosti vyplývá

$$\langle \text{proton ve směru } +z, \text{spin} +z | H | \Lambda^0, \text{spin} -z \rangle = 0. \quad (15.41)$$

Nejsou-li vám amplitudy (15.33) a (15.34) zcela jasné, můžeme je z matematické stránky vyjádřit trochu podrobněji. Pod (15.33) máme na mysli amplitudu toho, že se částice Λ^0 se spinem nahoru vzhledem k z rozpadne na proton pohybující se ve směru $+z'$, jehož spin je orientován taktéž podél $+z'$, tj. amplitudu

$$\langle \text{proton ve směru } +z', \text{spin} +z' | H | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle. \quad (15.42)$$

Podle obecných pravidel kvantové mechaniky ji lze zapsat jako

$$\sum_i \langle \text{proton ve směru } +z', \text{spin} +z' | H | \Lambda^0, i \rangle \langle i, \Lambda^0 | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle, \quad (15.43)$$

kde je třeba sčítat přes všechny báze stavy $|\Lambda^0, i\rangle$ částice Λ^0 v klidu. Protože Λ^0 má spin $1/2$, tyto stavy jsou právě dva, ať si báze systém vybereme jakkoliv. Zvolíme-li si za ně stavy „spin nahoru“ a „spin dolů“ vzhledem k ose z' ($+z'$, $-z'$), je amplituda (15.43) rovna součtu

$$\begin{aligned} & \langle \text{proton ve směru } +z', \text{spin} +z' | H | \Lambda^0, +z' \rangle \langle \Lambda^0, +z' | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle + \\ & + \langle \text{proton ve směru } +z', \text{spin} +z' | H | \Lambda^0, -z' \rangle \langle \Lambda^0, -z' | \Lambda^0, \text{spin} +z \rangle. \end{aligned} \quad (15.44)$$

První faktor v prvním členu je právě a (podle 15.38) a první faktor druhého členu je roven nule – ze vztahu (15.41), který zase vyplývá ze zachování momentu hybnosti. Zbývající faktor $\langle \Lambda^0, +z' | \Lambda^0, z \rangle$ v prvním členu je prostě amplituda toho, že částice se spinem $1/2$, který mffí nahoru podél nějaké osy, najdeme opět ve stavu „spin nahoru“ podél jiné osy, která je proti první pootočena o úhel ϑ , což je právě $\cos \vartheta/2$ (tab. 4.2). Takže vztah (15.44) je právě $a \cos \vartheta/2$, jak jsme napsali v (15.33). K amplitudě (17.34) dojdeme na základě týchž úvah pro částici Λ^0 se spinem dolů.

15.6 SHRUTÍ ROTAČNÍCH MATIC

Rádi bychom na jednom místě shrnuli vše, co jsme se naučili o rotacích pro částice se spinem $1/2$ a 1 ; bude to užitečné pro budoucnost. Uvedeme tabulky dvou rotačních matic $R_z(\varphi)$ a $R_y(\vartheta)$ pro částice se spinem $1/2$, 1 a pro fotony (částice se spinem 1 a nulovou klidovou hmotností). Pro každý spin uvádíme prvky matice $\langle j|R|i\rangle$ pro otočení kolem osy z nebo y . Jsou, samozřejmě, zcela ekvivalentní s amplitudami typu $\langle +|T|0S\rangle$, které jsme používali v předcházejících kapitolách. Pod $R_z(\varphi)$ rozumíme to, že stav se promítne do nové soustavy souřadnic, která je vůči staré otočena o úhel φ kolem osy z ; při definici kladného smyslu rotace se vždy opíráme o pravidlo pravé ruky. Pod $R_y(\vartheta)$ chápeme to, že souřadnicové osy jsou otočeny kolem osy y o úhel ϑ . Známe-li tyto dvě rotace, umíme spočítat libovolné otočení. Jako obvykle zapisujeme maticové elementy takovým způsobem, že stav *nalevo* je bázovým stavem *nové* (otočené) soustavy souřadnic a stav *napravo* zase staré (neotočené). Údaje v tabulkách lze interpretovat mnoha způsoby. Například $e^{-i\varphi/2}$ v tab. 15.1. znamená, že maticový element $\langle -|R|- \rangle = e^{-i\varphi/2}$. Vyjadřuje i to, že $\hat{R}|- \rangle = e^{-i\varphi/2}|- \rangle$, nebo že $\langle -|\hat{R} = \langle -|e^{-i\varphi/2}$. Všechno je jedno a totéž.

Tabulka 15.1: Rotační matice pro spin $1/2$

$R_z(\varphi)$	$ +\rangle$	$ -\rangle$	$R_y(\vartheta)$	$ +\rangle$	$ -\rangle$
$\langle + $	$e^{+i\varphi/2}$	0	$\langle + $	$\cos \vartheta/2$	$\sin \vartheta/2$
$\langle - $	0	$e^{-i\varphi/2}$	$\langle - $	$-\sin \vartheta/2$	$\cos \vartheta/2$

Dva stavy: $|+\rangle$, nahoru vzhledem k ose z , $m = +1/2$
 $|-\rangle$, dolů vzhledem k ose z , $m = -1/2$

Tabulka 15.2: Rotační matice pro spin 1

$R_z(\varphi)$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$	$ -\rangle$
$\langle + $	$e^{+i\varphi}$	0	0
$\langle 0 $	0	1	0
$\langle - $	0	0	$e^{-i\varphi}$

$R_y(\vartheta)$	$ +\rangle$	$ 0\rangle$	$ -\rangle$
$\langle + $	$\frac{1}{2}(1 + \cos \vartheta)$	$+\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta$	$\frac{1}{2}(1 - \cos \vartheta)$
$\langle 0 $	$-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta$	$\cos \vartheta$	$+\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta$
$\langle - $	$\frac{1}{2}(1 - \cos \vartheta)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta$	$\frac{1}{2}(1 + \cos \vartheta)$

Tři stavy: $|+\rangle$, $m = +1$
 $|0\rangle$, $m = 0$
 $|-\rangle$, $m = -1$

Tabulka 15.3: Fotony

$R_z(\varphi)$	$ R\rangle$	$ L\rangle$
$\langle R $	$e^{+i\varphi}$	0
$\langle L $	0	$e^{-i\varphi}$

Dva stavy: $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle)$, $m = +1$ (pravotočivě polarizovaný)

$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)$, $m = -1$ (levotočivě polarizovaný)

Moment hybnosti

16.1 ELEKTRICKÉ DIPÓLOVÉ ZÁŘENÍ

16.2 ROZPTYL SVĚTLA

16.3 ANIHILACE POZITRONIA

16.4 ROTAČNÍ MATICE PRO LIBOVOLNÝ SPIN

16.5 MĚŘENÍ SPINU JÁDRA

16.6 SKLÁDÁNÍ MOMENTŮ HYBNOSTI

Dodatek č. 1: Odvození rotační matice

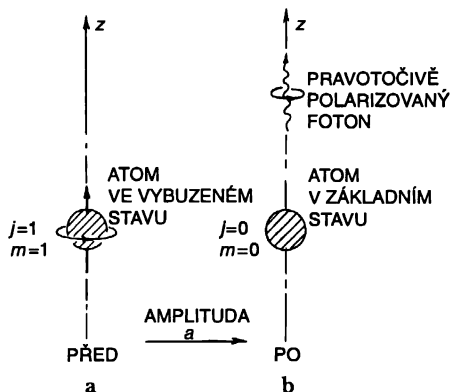
Dodatek č. 2: Zachování parity při emisi fotonu

16.1 ELEKTRICKÉ DIPÓLOVÉ ZÁŘENÍ

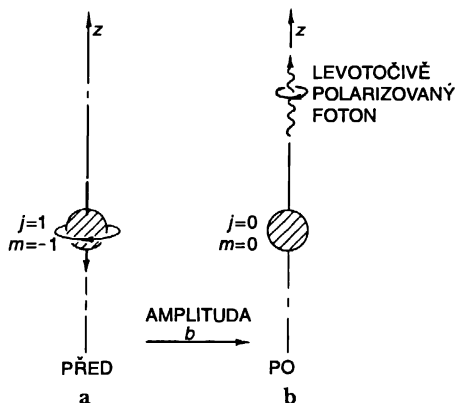
V předcházející kapitole jsme rozvedli představy o zachování momentu hybnosti v kvantové mechanice a ukázali jsme, jak je lze využít pro předpověď úhlového rozdělení protonů pocházejících z rozpadu částice Λ^0 . Nyní uvedeme několik dalších podobných ukázek toho, jaké důsledky přináší zachování momentu hybnosti v atomových soustavách. Prvním příkladem bude vyzařování světla atomem. Zachování momentu hybnosti bude určovat mezi jiným i polarizaci a úhlové rozdělení emitovaných fotonů.

Předpokládejme, že atom nacházející se v excitovaném stavu s přesně určenou hodnotou momentu hybnosti (řekněme se spinem 1) přejde emisí fotonu do nižšího energetického stavu, který má spin 0. Úkolem je vypočítat úhlové rozdělení a polarizaci fotonů. (Problém je velmi podobný rozpadu Λ^0 až na to, že částice nemají spin 1/2, ale 1.) Protože spin vyššího energetického stavu atomu je roven 1, existují tři možnosti pro jeho z-ovou složku; její hodnota by mohla být +1, 0, nebo -1. V našem příkladu vybereme $m = +1$. Když už se jednou naučíte jak na to, ostatní příklady si vypočítáte i sami. Uvažujme, že atom má spin orientován ve směru $+z$ (*obr. 16.1a*). Nyní se ptáme, s jakou pravděpodobností bude emitovat pravotočivě kruhově polarizované světlo v tomto směru, a přejde do stavu s nulovým momentem hybnosti (*obr. 16.1b*). Na tuto otázku zatím odpovědět neumíme. Víme však, že pravotočivě kruhově polarizované světlo nese jednotkový moment hybnosti ve směru svého pohybu. Takže po emisi fotonu musí situace vypadat tak, jak je znázorněno na *obr. 16.1b* – atom zůstane ve stavu, v němž je z-ová složka momentu hybnosti rovna nule,

jelikož jsme předpokládali, že nižší energetický stav atomu má nulový spin. Amplitudu takové události označme jako a . Přesněji řečeno, pod a budeme chápat amplitudu emise fotonu do určitého malého prostorového úhlu $\Delta\Omega$ se středem na ose $+z$ za čas dt . Všimněme si, že amplituda vyzáření levotočivě polarizovaného fotonu do téhož směru je rovna nule. Výsledný moment hybnosti vzhledem k ose z by byl -1 (-1 pro takovýto foton a 0 pro atom), čímž by se narušil zákon zachování.



Obr. 16.1 Atom s $m = +1$ emituje pravotočivě polarizovaný foton ve směru osy $+z$

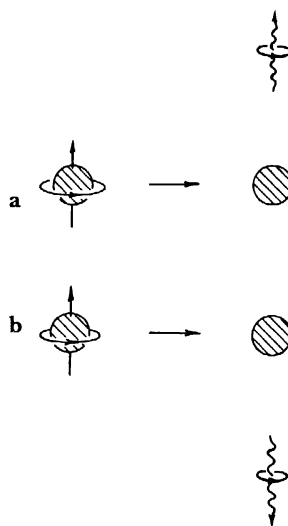


Obr. 16.2 Atom s $m = -1$ emituje levotočivě polarizovaný foton ve směru osy $+z$

Podobně, míří-li spin atomu na počátku dolů (jeho hodnota je -1 vzhledem k ose z), ve směru $+z$ může být emitován jedině levotočivě polarizovaný foton, jak ukazuje obr. 16.2. Amplitudu této události označíme jako b – opět máme na mysli amplitudu toho, že foton vyletí do téhož malého prostorového úhlu $\Delta\Omega$. Na druhé straně, je-li atom ve stavu s $m = 0$, k vyzáření fotonu ve směru $+z$ nemůže dojít vůbec, protože složka momentu hybnosti fotonu podél jeho pohybu může nabývat pouze hodnot $+1$, nebo -1 .

V dalším kroku ukážeme, že b souvisí s a . Předpokládejme, že se soustavou na obr. 16.1 provedeme prostorovou inverzi, čímž rozumíme to, že si představíme, jak by vypadala, kdybychom každou její část umístili do opačného bodu vzhledem k počátku souřadnic. To však *neznamená*, že bychom měli vzít zrcadlový obraz vektorů momentu hybnosti, protože ty jsou vytvořeny uměle.

Je třeba obrátit vlastní charakter pohybu, který náleží tomuto momentu hybnosti. Na *obr. 16.3a* a *16.3b* je znázorněno, jak vypadá situace na *obr. 16.1* před prostorovou inverzí a po ní vzhledem ke středu atomu. Všimněme si, že směr otáčení atomu se nezmění.⁷⁰⁾ V invertované soustavě na *obr. 16.3b* dostaneme atom s $m = +1$, který vyzařuje levotočivě polarizovaný foton směrem dolů.



Obr. 16.3 Transformujeme-li pomocí operace prostorové inverze vzhledem ke středu atomu proces v části a), bude vypadat jako v části b)

Otočíme-li nyní soustavu na *obr. 16.3b* o 180° kolem osy x nebo y , dostaneme přesně totéž jako na *obr. 16.2*. Zkombinování prostorové inverze a otočení obrátí druhý proces na první. Pomocí *tab 15.2* vidíme, že rotace o 180° kolem osy y prostě přehodí stav s $m = -1$ do stavu $m = +1$, takže amplituda b musí být rovna amplitudě a , *nebereme-li v úvahu možnou změnu znaménka způsobenou prostorovou inverzí*. Tato změna závisí na paritě počátečního a konečného stavu jádra.

V atomových procesech se parita zachovává, takže parita celé soustavy před emisí fotonu musí být stejná jako po ní. Co se ve skutečnosti odehraje, závisí na tom, zda je parita počátečního a konečného stavu atomu sudá nebo lichá – pro různé případy se budou úhlová rozdělení záření navzájem lišit. Vybereme si běžný případ, kdy má počáteční stav *lichou* a konečný stav *sudou* paritu; výsledkem bude tzv. elektrické dipólové záření. (Kdyby měly oba stavy stejnou paritu, říkáme, že dochází k magnetickému dipólovému záření, které svým charakterem připomíná záření smyčky s protékajícím střídavým proudem.) Má-li počáteční stav lichou paritu, změní jeho amplituda při inverzi soustavy z části *a* do *b* na *obr. 16.3* znaménko. Konečný stav atomu má sudou paritu, takže jeho amplituda znaménko nemění. Pokud se při uvedeném procesu parita zachovává, musí být amplituda b rovna a co do velikosti, ale bude mít opačné znaménko.

Docházíme k závěru, že je-li a amplituda toho, že atom ve stavu s $m = +1$ bude emitovat foton směrem nahoru, bude při předpokládaných paritách počátečního a konečného stavu amplituda

⁷⁰⁾ Při záměně souřadnic x , y , z na $-x$, $-y$, $-z$ byste si snad mohli myslet, že všechny vektory se překloupí do opačného směru. To platí pro *polární* vektory, jako jsou posunutí a rychlosti, ale *ne* pro *axiální* vektory, jakým je např. moment hybnosti nebo i jakýkoliv jiný vektor, který představuje vektorový součin dvou polárních vektorů. Složky axiálních vektorů se při prostorové inverzi nemění.

toho, že stav s $m = -1$ vyzáří levotočivě polarizované kvantum taktéž směrem nahoru, rovna hodnotě $-a$.⁷¹⁾

Máme vše, co potřebujeme vědět k tomu, abychom našli amplitudu emise fotonu pod libovolným úhlem ϑ vzhledem k ose z . Předpokládejme, že na počátku je atom polarizován tak, že $m = +1$. Tento stav můžeme rozložit do stavů $+1$, 0 a -1 vzhledem k nové ose z' , která leží ve směru pohybu fotonu. Tyto amplitudy jsou uvedeny ve spodní části *tab. 15.2*. Amplituda toho, že pravotočivě polarizovaný foton bude emitován ve směru ϑ , je proto a -násobkem amplitudy toho, že v tomto směru bude $m = +1$; totiž

$$a \langle + | R_y(\vartheta) | + \rangle = \frac{a}{2} (1 + \cos \vartheta). \quad (16.1)$$

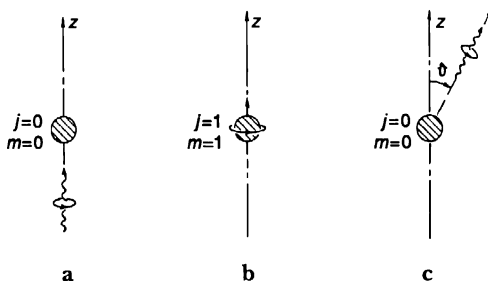
Amplituda vyzáření levotočivě polarizovaného fotonu v téměř směru je $(-a)$ -násobkem amplitudy nalezení v novém směru stavu s $m = -1$. Pomocí *tab. 15.2* zjistíme, že je rovna výrazu

$$-a \langle - | R_y(\vartheta) | + \rangle = -\frac{a}{2} (1 - \cos \vartheta). \quad (16.2)$$

Zajímáme-li se o jiné polarizace, amplitudy pro ně můžeme dostat na základě superpozice dvou uvedených výrazů. Abychom vypočítali intenzitu libovolné složky jako funkci úhlu, musíme, samozřejmě, vzít druhou mocninu modulu jednotlivých amplitud.

16.2 ROZPTYL SVĚTLA

Využijeme těchto výsledků k vyřešení trochu složitější úlohy, která má však o něco blíž k reálné skutečnosti. Předpokládejme, že tytéž atomy se nacházejí v základním stavu ($s, j=0$) a rozptylují paprsek dopadajícího světla. Řekněme, že světlo se původně šíří ve směru $+z$, takže fotony přilétají k atomu ze směru $-z$ (*obr. 16.4a*). Rozptyl světla můžeme považovat za dvojstupňový proces: Foton se nejdříve absorbuje, a pak se opět vyzáří. Máme-li na začátku pravotočivě polarizovaný foton na *obr. 16.4a* a moment hybnosti se zachovává, bude se atom po absorpci nacházet ve stavu s $m = +1$ (*obr. 16.4b*). Amplitudu tohoto procesu označíme jako c .



Obr. 16.4 Rozptyl světla na atomu jako proces skládající se ze dvou kroků

⁷¹⁾ Někteří z vás možná namítnou, že zmíněné úvahy nejsou správné, protože naše konečné stavy nemají přesně určenou hodnotu parity. V dodatku 2 na konci této kapitoly najdou důkaz, který je snad uspokojiv.

Atom pak může emitovat pravotočivě polarizovaný foton pod úhlem ϑ , jak je znázorněno na obr. 16.4c. Celková amplituda toho, že pravotočivě polarizovaný foton je rozptýlen do směru určeného úhlem ϑ , je tedy c krát výraz (16.1). Tuto amplitudu rozptylu nazveme $\langle R' | S | R \rangle$; máme

$$\langle R' | S | R \rangle = \frac{ac}{2} (1 + \cos \vartheta). \quad (16.3)$$

Existuje také amplituda procesu, že je pravotočivý foton pohlcen a emitován bude levotočivý foton. Součin obou amplitud je amplituda $\langle L' | S | R \rangle$, že pravotočivý foton je rozptýlen jako levotočivý foton. Pomocí (16.2) dostáváme

$$\langle L' | S | R \rangle = -\frac{ac}{2} (1 - \cos \vartheta). \quad (16.4)$$

Nyní se ptáme, co se děje, vstupuje-li do hry levotočivě polarizovaný foton. Po jeho absorpci přejde atom do stavu $s = -1$. Na základě podobných úvah jako v předcházející stati lze ukázat, že tato amplituda musí být rovna $-c$. Amplituda toho, že atom ve zmíněném stavu vyzáří pravotočivý foton pod úhlem ϑ , je a -násobkem amplitudy $\langle + | R_y(\vartheta) | - \rangle$, která je rovna $\frac{1}{2} (1 - \cos \vartheta)$.

Takže

$$\langle R' | S | L \rangle = -\frac{ac}{2} (1 - \cos \vartheta). \quad (16.5)$$

Konečně amplituda toho, že levotočivý foton je rozptýlen opravdu jako levotočivý foton, je dána vztahem

$$\langle L' | S | L \rangle = \frac{ac}{2} (1 + \cos \vartheta) \quad (16.6)$$

(Dvě znaménka minus se navzájem zruší.)

Měříme-li *intenzitu* rozptýleného světla pro libovolnou kombinaci kruhových polarizací, je úměrná druhé mocnině jedné ze čtyř uvedených amplitud. Například v případě, že dopadající i rozptýlené fotony jsou pravotočivě kruhově polarizované, bude se intenzita rozptýleného záření měnit jako $(1 + \cos \vartheta)^2$.

To je všechno velmi pěkné, ale představme si, že máme původně *lineárně* polarizované světlo. Co potom? Světlo polarizované ve směru osy x lze vyjádřit jako superpozici pravotočivého a levotočivého polarizovaného světla. Píšeme (viz stať 9.4)

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle + |L\rangle). \quad (16.7)$$

V případě světla polarizovaného ve směru osy y bychom měli

$$|y\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} (|R\rangle - |L\rangle). \quad (16.8)$$

Co nás nyní zajímá? Chceme znát amplitudu toho, že x -ově polarizovaný foton se rozptýlí jako

pravotočivý pod úhlem ϑ . Dojdeme k ní pomocí známého pravidla skládání amplitud. Nejdříve vynásobíme rovnici (16.7) výrazem $\langle R' | S$, čímž dostaneme

$$\langle R' | S | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle R' | S | R \rangle + \langle R' | S | L \rangle), \quad (16.9)$$

a pak za obě amplitudy dosadíme výrazy podle (16.3) a (16.5). Dojdeme k výsledku

$$\langle R' | S | x \rangle = \frac{ac}{\sqrt{2}} \cos \vartheta. \quad (16.10)$$

Pokud bychom chtěli získat amplitudu toho, že z fotonu polarizovaného ve směru x se po rozptylu stane levotočivý foton, našli bychom její vyjádření ve tvaru

$$\langle L' | S | x \rangle = \frac{ac}{\sqrt{2}} \cos \vartheta. \quad (16.11)$$

Nakonec si představme, že bychom rádi znali amplitudu toho, že si x -ově polarizovaný foton i po rozptylu zachová stejný charakter své polarizace. Chceme vědět, čemu je roven výraz $\langle x' | S | x \rangle$. Ten lze zapsat jako

$$\langle x' | S | x \rangle = \langle x' | R' \rangle \langle R' | S | x \rangle + \langle x' | L' \rangle \langle L' | S | x \rangle. \quad (16.12)$$

Využijeme-li nyní vztahy

$$|R'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x'\rangle + i|y'\rangle) \quad (16.13)$$

$$|L'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x'\rangle - i|y'\rangle), \quad (16.14)$$

zjistíme, že

$$\langle x' | R' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (16.15)$$

$$\langle x' | L' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (16.16)$$

Dojdeme k tomu, že

$$\langle x' | S | x \rangle = ac \cos \vartheta. \quad (16.17)$$

Odpověď zní, že paprsek x -ově polarizovaného světla se rozptýlí pod úhlem ϑ (v rovině xz) s intenzitou úměrnou $\cos^2 \vartheta$. Ptáme-li se na světlo polarizované ve směru y , zjistíme, že

$$\langle y' | S | x \rangle = 0. \quad (16.18)$$

Rozptýlené světlo je proto úplně polarizováno ve směru x .

Na tomto místě zjišťujeme zajímavou věc. Výsledky (16.17) a (16.18) přesně odpovídají klasické teorii rozptylu světla, kterou jsme vysvětlili ve stati 32.6, 1. dílu, kde jsme předpokládali, že elektron je vázaný k atomu lineární zpětnou silou, takže se chová jako klasický oscilátor. Můžete si pomyslet: „V klasické teorii je to mnohem jednodušší; dává-li správnou odpověď, proč se pak zatěžovat kvantovou teorií?“ Zaprvé, až dosud jsme uvažovali pouze jeden speciální (ačkoliv běžný) případ atomu, jehož excitovaný stav měl $j=1$ a základní stav $j=0$. Kdyby měl excitovaný stav spin 2, dostali bychom jiný výsledek. Také není žádný důvod, proč by musel být model elektronu upevněného na pružince a uváděného do pohybu oscilujícím elektrickým polem vhodný i pro osamocené foton. Zjistili jsme však, že opravdu vhodný je, a že polarizace i intenzity vycházejí správně. Takže v jistém smyslu se v průběhu celého kurzu blížíme ke skutečné pravdě. Zatímco v 1. dílu jsme budovali teorii indexu lomu a rozptylu světla na základě klasických představ, nyní jsme ukázali, že v nejběžnějším případě vede kvantová teorie ke stejnému výsledku. V podstatě jsme objasnili takový jev, jakým je např. polarizace denního světla, čistě kvantově mechanickými úvahami, což je jediný správný způsob.

Mělo by to být tak, že všechny klasické teorie, dávající správné předpovědi, by byly v konečném důsledku potvrzeny výlučně kvantově mechanickými argumenty. Přirozeně, jevy, jejichž vysvětlení jsme věnovali tolik času, jsme vybrali právě z těch částí klasické fyziky, které si nadále zachovávají svou platnost v kvantové mechanice. Zajisté jste si všimli, že žádný model atomu, v němž elektrony krouží po orbitách kolem jádra, jsme do velkých podrobností nerozebrali. To proto, že takovýto model nedává výsledky, které souhlasí s kvantovou mechanikou. Ale elektron na pružince (ačkoliv tak žádný atom nevypadá) je něco jiného; takový model funguje, a proto jsme jej použili v teorii indexu lomu.

16.3 ANIHILACE POZITRONIA

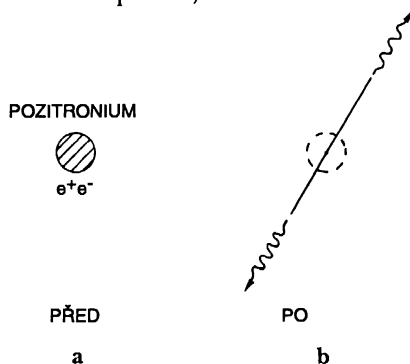
Nyní si blíže probereme jeden velmi pěkný příklad. Je poměrně zajímavý a ačkoliv o něco složitější, doufáme, že ne příliš. Jde o soustavu zvanou *pozitronium*, tj. „atom“ vytvořený z elektronu a pozitronu – vázaný stav e^+ a e^- . Vypadá jako atom vodíku až na to, že proton je nahrazen pozitronem. Tento objekt má, podobně jako vodíkový atom, mnoho stavů. Také jeho základní stav je rozštěpen a vytváří hyperjemnou strukturu díky interakci magnetických momentů. Elektron i pozitron mají spin $1/2$ a každý z nich může být orientován buď ve směru, nebo proti směru libovolné osy. (V základním stavu jiný moment hybnosti, spojený s orbitálním pohybem, nepřichází v úvahu.) Celkem máme tedy 4 stavy: 3 z nich jsou podstavy soustavy se spinem 1, přičemž všechny mají stejnou energii, a jeden stav s odlišnou energií má spin 0. Rozštěpení energie je však mnohem větší než 1420 MHz u atomu vodíku, protože magnetický moment pozitronu je asi 100-krát silnější než magnetický moment protonu.

Nejpodstatnější rozdíl však spočívá v tom, že pozitronium netrvá věčně. Pozitron je antičástice k elektronu, mohou tedy navzájem anihilovat. Obě částice zcela zmizí; jejich klidová energie se promění v záření ve formě paprsků γ (fotonů). V procesu rozpadu se dvě částice s konečnou klidovou hmotností změní na dva nebo více objektů, jejichž klidová hmotnost je rovna nule.⁷²⁾

Začneme rozbořem rozpadu pozitronia ve stavu se spinem 0, který probíhá na dvě kvanta γ se střední dobou života zhruba 10^{-10} s. Na počátku se pozitron a elektron nacházejí těsně u sebe

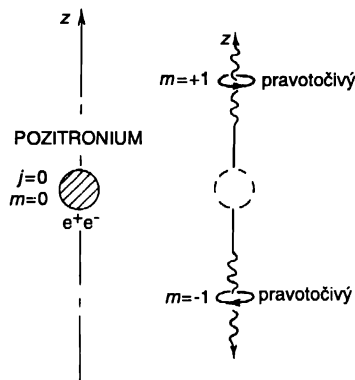
⁷²⁾ V dnešním hlubším chápání světa není snadné odpovědět na otázku, zda je energie fotonu méně „materiální“ než energie elektronu, protože – jak si jistě vzpomínáte – všechny částice se chovají velmi podobně. Jediný rozdíl je v tom, že foton má nulovou klidovou hmotnost.

s navzájem opačnými spiny a vytvářejí pozitroniovou soustavu. Po rozpadu se objeví fotony se stejnými, opačně orientovanými hybnostmi (*obr. 16.5*), protože uvažujeme-li případ anihilace v klidu, musí být celková hybnost po skončení rozpadového procesu rovna celkové hybnosti před ním, tj. nule. Není-li pozitronium v klidu, můžeme se pohybovat spolu s ním, vyřešit úlohu, a pak všechno přetransformovat zpět do laboratorní soustavy souřadnic. (Vidíte, nyní se můžeme pusit do čehokoliv; vše potřebné máme k dispozici.)



Obr. 16.5 Dvojfotonová anihilace pozitronia

Nejdříve poznamenejme, že úhlové rozdělení není nijak zvlášť zajímavé. Jelikož počáteční stav má spin 0, nemá žádnou významnou osu a je symetrický vzhledem k jakýmkoliv rotacím. Konečný stav musí mít tutéž vlastnost. To znamená, že při rozpadu jsou všechny úhly zastoupeny stejným dílem – foton má tutéž amplitudu vyletět v jakémkoliv směru. Samozřejmě, když už jednou najdeme *jeden* z nich pohybovat se určitým směrem, *druhý* musí letět právě opačně.

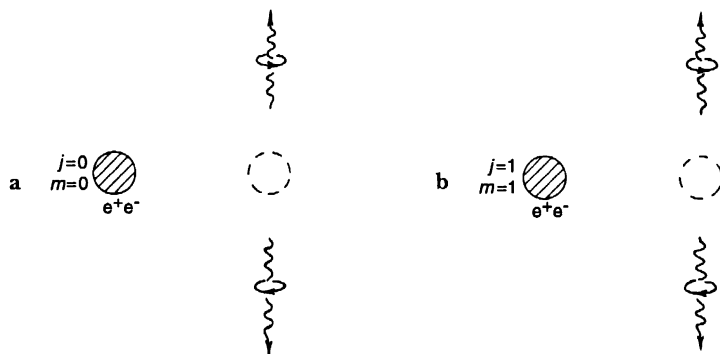


Obr. 16.6 Jedna možnost anihilace pozitronia podél osy z

Jedinou nezodpovězenou otázkou, na kterou se nyní soustředíme, je polarizace fotonů. Označme směry pohybu obou fotonů jako osy z a $-z$. Polarizační stavy fotonů můžeme vyjádřit v reprezentaci, jaké chceme; pro náš popis si zvolíme pravotočivou a levotočivou kruhovou polarizaci – vždy vzhledem ke směřům pohybu. Ihned je vidět, že letí-li nahoru pravotočivý foton, moment hybnosti se zachovává pouze tehdy, poletí-li v opačném směru kvantum světla polarizované týmž způsobem. Každé z nich nese kladný jednotkový moment hybnosti *vzhledem ke svému směru*

hybnosti⁷³⁾, což znamená +1 a -1 vzhledem k ose z. Výsledný součet je nula a momenty hybnosti před rozpadem a po něm nabývají stejné hodnoty (obr. 16.6).

Na základě těchto úvah je jasné, že je-li horní foton pravotočivě polarizovaný, dolní nemůže být polarizovaný levotočivě. Moment hybnosti konečného stavu by byl roven 2. To není povoleno, má-li počáteční stav nulový spin. Všimněme si, že takový konečný stav nepřipouští ani druhý základní stav pozitronia se spinem 1, neboť jeho moment hybnosti v libovolném směru může nabývat maximálně hodnot ± 1 .



Obr. 16.7 Pro stav pozitronia s $j = +1$ jsou procesy a) a b) (představující rotaci a) o 180° kolem osy y) zcela totožné

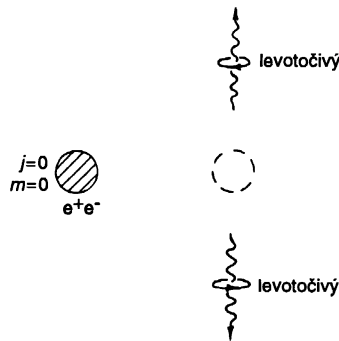
Nyní chceme ukázat, že ze stavu se spinem 1 nemůže v žádném případě dojít k dvojfotonové anihilaci. Mohli byste namítat, že vezmeme-li stav $j = 1$, $m = 0$ jehož z-ová složka momentu hybnosti je rovna nule, mohl by se eventuálně rozpadnout na dva pravotočivé fotony, protože by měl být podobný stavu se spinem 0. Zajisté, rozpad nakreslený na obr. 16.7a zachovává moment hybnosti vzhledem k ose z. Podívejme se však, co se stane, otočíme-li tuto soustavu kolem osy y o 180° ; dostaneme situaci znázorněnou na obr. 16.7b. Je naprosto totožná s částí a. Udělali jsme pouze to, že jsme navzájem vyměnili oba fotony. Fotony jsou však Boseho částice; při jejich vzájemné výměně se znaménko amplitudy nezmění, takže amplituda rozpadu podle části b obrázku musí být přesně tatáž jako podle a. Předpokládali jsme však, že na počátku máme objekt se spinem 1. Otočíme-li jej ve stavu $m = 0$ o 180° kolem osy y, změní jeho amplitudy znaménko (tab. 15.2. pro $\hat{v} = \pi$). Amplitudy procesů rozpadu podle částí a a b by tedy měly mít opačná znaménka. Z toho všeho vyplývá, že stav se spinem 1 se nemůže rozpadnout na dva fotony.

Když se vytváří pozitronium, očekávali bychom, že 1/4 času se bude nacházet ve stavu se spinem 0 a 3/4 času ve stavu se spinem 1 (s $m = -1, 0$, nebo +1), takže jen po dobu 1/4 doby bude docházet k dvojfotonové anihilaci. I ve zbývajících 3/4 času sice můžeme pozorovat proces anihilace, ale ne se vznikem dvou, ale tří fotonů. Probíhá obtížněji a doba života je 1 000-krát delší – asi 10^{-7} s. Tato fakta nám dává experiment. Hluběji se do podrobností anihilace ze stavu se spinem 1 pouštět nebudeme.

73) Všimněte si, že moment hybnosti vždy určujeme vzhledem ke směru pohybu částice. Kdybychom se ptali na moment hybnosti vzhledem k libovolné jiné ose, museli bychom vzít v úvahu možnost „orbitálního“ momentu hybnosti, pocházejícího ze členu $r \times p$. Nemůžeme např. prohlásit, že fotony vyletují přesně ze středu pozitronia. Mohly ho opusit tak, jako když otáčející se kolo vystřeluje ze svého kraje maličké kuličky. Zvolíme-li naši osu ve směru pohybu, takovéto možnosti nás trápit nemusí.

Zatím jsme dospěli k tomu, že opíráme-li se o zachování momentu hybnosti, může rozpad pozitronia ve stavu se spinem 0 probíhat na dva pravotočivé fotony. Existuje však ještě jiná možnost: V konečném stavu se mohou objevit i dva levotočivé fotony (*obr. 16.8*). Další otázka proto zní, jaký vztah je mezi amplitudami obou možných typů rozpadu? Odpověď najdeme, když vyjdeme ze zachování parity. K tomu však potřebujeme vědět, jaká je parita pozitronia. Způsobem, který není snadné vysvětlit, se teoretickým fyzikům podařilo dokázat, že parity elektronu a pozitronu (jeho antičástice) musí být navzájem opačné, takže parita pozitronia v základním stavu se spinem 0 je lichá. Tento fakt přijmeme jako předpoklad a za dostatečný důkaz jeho správnosti nám poslouží to, že naše závěry plně souhlasí s experimentem.

Podíváme se, co se stane, provedeme-li prostorovou inverzi procesu znázorněného na *obr. 16.6*. Oba fotony změni směry svého pohybu a polarizace na opačné. Obrácená situace vypadá stejně jako na *obr. 16.8*. Předpokládáme-li, že pozitronium má lichou paritu, musí mít amplitudy procesů znázorněných na *obr. 16.6* a *obr. 16.8* navzájem opačná znaménka.



Obr. 16.8 Další možný proces anihilace pozitronia

Označme jako $|R_1 R_2\rangle$ konečný stav na *obr. 16.6*, kde jsou oba fotony pravotočivě polarizované, jako $|L_1 L_2\rangle$ konečný stav na *obr. 16.8* s oběma fotony polarizovanými levotočivě. Skutečný konečný stav – nazvěme jej $|F\rangle$ – musí vypadat takto

$$|F\rangle = |R_1 R_2\rangle - |L_1 L_2\rangle. \quad (16.19)$$

Pak prostorová inverze vymění všechna R za L a naopak, a dovede nás ke stavu

$$\hat{P}|F\rangle = |L_1 L_2\rangle - |R_1 R_2\rangle = -|F\rangle \quad (16.20)$$

s opačným znaménkem než v (16.19). Konečný stav má tedy lichou paritu, která je tatáž jako parita počátečního stavu pozitronia se spinem 0. Je to jediný konečný stav, který zachovává jednak moment hybnosti a jednak paritu. Existuje určitá amplituda rozpadu do tohoto stavu; s ní si však nyní nebudeme dělat starosti, neboť nás zajímají pouze otázky týkající se polarizace.

Co znamená konečný stav (16.19) fyzikálně? Jeden z důsledků je tento: Postavíme-li oběma fotonům do cesty dva detektory, které jsou nastaveny tak, že registrují zvlášť pravotočivé a zvlášť levotočivé fotony, vždy budeme pozorovat, že do nich dopadnou najednou buď dva fotony polarizované pravotočivě, nebo dva fotony polarizované levotočivě. To znamená, že stojíme-li na jedné straně od pozitronia a někdo jiný na straně druhé, můžeme změnit polarizaci a pošeptat

svému kolegovi naproti, jakou polarizaci zjistí on. Naše šance jsou v poměru 1 : 1, že zaregistrujeme pravotočivý nebo levotočivý foton; ať to však bude jakýkoliv z nich, vždy dokážeme s určitostí říci, že kolega dostane totéž.

To, že pravotočivá a levotočivá polarizace mají stejné pravděpodobnosti, velmi silně připomíná lineární polarizaci. Ptáme se, co se stane, pozorujeme-li foton pomocí detektorů, které jsou citlivé jen na lineárně polarizované světlo. Pro paprsky γ není tak snadné změřit polarizaci jako pro světlo; neexistuje totiž polarizátor, který by při takovýchto krátkých vlnových délkách pracoval spolehlivě. Přesto si představme, že jej máme; usnadní nám to diskuzi. Předpokládejme, že náš detektor reaguje pouze na světlo polarizované ve směru osy x ; někdo na opačné straně také registruje jen lineárně polarizované světlo, ale, řekněme, ve směru osy y . Jaké jsou vyhlídky toho, že zachytíme oba anihilační fotony? Je třeba najít amplitudu toho, že se $|F\rangle$ ocitne ve stave $|x_1 y_2\rangle$. Jinými slovy, hledáme amplitudu

$$\langle x_1 y_2 | F \rangle,$$

což je, samozřejmě rovnou rozdílu

$$\langle x_1 y_2 | R_1 R_2 \rangle - \langle x_1 y_2 | L_1 L_2 \rangle. \quad (16.21)$$

Ačkoliv nyní v případě dvou fotonů pracujeme s dvojjásticovými amplitudami, můžeme k nim přistupovat tak jako k amplitudám pro jednu částici, neboť každá částice působí nezávisle na druhé. To znamená, že amplituda $\langle x_1 y_2 | R_1 R_2 \rangle$ je vlastně součinem dvou nezávislých amplitud $\langle x_1 | R_1 \rangle$ a $\langle y_2 | R_2 \rangle$. Pomocí tab. 15.3 zjistíme, že tyto amplitudy jsou rovny $1/\sqrt{2}$ a $i/\sqrt{2}$, takže

$$\langle x_1 y_2 | R_1 R_2 \rangle = +\frac{i}{2}.$$

Podobně dojdeme k tomu, že

$$\langle x_1 y_2 | L_1 L_2 \rangle = -\frac{i}{2}.$$

Odečtením těchto dvou amplitud podle (16.21) dostaneme, že

$$\langle x_1 y_2 | F \rangle = +i. \quad (16.22)$$

Existuje tedy *jednotková* pravděpodobnost⁷⁴⁾, že zaregistrujeme-li foton v našem detektoru, který přijímá jen x -ově polarizovaná kvanta γ , kolega naproti zaznamená impuls ve svém počítači citlivém pouze na polarizaci ve směru y .

Představme si, že i on si nyní nastaví přístroj tak, aby reagoval výlučně na x -ovou polarizaci. Pak se nikdy neobjeví impuls v obou detektorech současně. Pokud si to poctivě spočítáte, zjistíte, že

$$\langle x_1 x_2 | F \rangle = 0. \quad (16.23)$$

Je přirozené, že pracuje-li náš detektor v režimu „ y -ová polarizace“, budou příteli naskakovat koincidenční impulsy pouze tehdy, má-li přístroj přizpůsobený tak, že jím registruje fotony polarizované ve směru x .

⁷⁴⁾ Naše amplitudy jsme ani nenormalovali, ani jsme je nevnásobili amplitudou rozpadu do daného konečného stavu, ale je vidět, že výsledek je správný, protože podíváme-li se na druhou alternativu (rovnice (16.23)), dostaneme nulovou pravděpodobnost.

To všechno vede k zajímavé situaci. Představme si, že bychom vzali např. kousek vápence, který rozděljuje fotony na x -ové a y -ové polarizovaný svazek; do každého svazku bychom pak vložili jeden detektor. Nazvěme první z nich detektor x a druhý detektor y . Udělá-li totéž i náš přítel naproti, vždy mu můžeme říci, který svazek si zvolil jeho foton. Vždy, když se u obou najednou objeví impuls, můžeme se podívat, který z našich detektorů byl uveden do činnosti a pak mu sdělíme, který zapracoval u něj. Dejme tomu, že v důsledku určitého rozpadu nám vletí foton do detektoru x ; můžeme mu říci, že mu určitě naskočil impuls v jeho detektoru y .

Mnoho lidí, kteří studují kvantovou mechaniku obvyklým (zastaralým) způsobem, tato skutečnost znepokojuje. Obvykle uvažují asi tak, že je-li už jednou foton emitován, šíří se dále jako vlna přesně určeného charakteru. Jelikož libovolný foton má tutéž amplitudu toho, že je polarizován ve směru x nebo ve směru y , měla by existovat určitá pravděpodobnost zachytit ho buď v detektoru x , nebo v detektoru y , a přitom by vůbec neměla záviset na tom, co nějaká jiná osoba zjistí o nějakém zcela jiném fotonu. Namítají, že „pokud ještě někdo další kromě mě provádí měření, neměl by být schopen změřit pravděpodobnost toho, co zjistím já“. Kvantová mechanika však říká, že změříme-li foton číslo jedna, jsme *schopni* předpovědět zcela přesně, jaká bude polarizace fotonu číslo dva, když jej zaregistrujeme. To Einstein nikdy nepřijal a velmi ho to trápilo; považoval to za paradox, který dostal název „paradox Einsteina, Podolského a Rosena“. Popíšeme-li však celou situaci tak, jak jsme to provedli my, vůbec se nezdá, že by šlo o nějaký paradox; z našich úvah docela přirozeně vyplývá, že to, co naměříme na jednom místě, je korelováno s tím, co naměříme někde jinde. Argument pro to, že výsledek si zdánlivě protirečí, se obvykle formuluje takto:

1. Máme-li detektor, který nám řekne, zda je náš foton polarizován pravotočivě nebo levotočivě, můžeme s úplnou jistotou říci, jaký typ fotonu (pravotočivý nebo levotočivý) najde náš kolega.
2. Fotony, které registruje, musejí proto být buď čistě pravotočivé, nebo čistě levotočivé fotony; některé jednoho druhu a jiné druhého druhu.
3. Jistě nemůžeme porušit fyzikální podstatu *jeho* fotonů, změníme-li charakter pozorování, které provádíme s *našimi* fotony. Bez ohledu na to, jaká měření s nimi uskutečňujeme, u něj zůstanou fotony polarizované buď pravotočivé, nebo levotočivé.
4. Nyní si představme, že náš přítel si pomocí kousku vápence upraví svůj přístroj tak, že docílí roztěpení svých fotonů do dvou lineárně polarizovaných svazků, takže všechny letí buď ve svazku polarizovaném ve směru osy x , nebo ve svazku polarizovaném ve směru osy y . Neexistuje absolutně žádný způsob, který by podle kvantové mechaniky dokázal určit, jaký svazek si nějaký konkrétní pravotočivý foton vybere. Má poloviční naději, že si zvolí x -ový svazek, a poloviční naději, že y -ový. Totéž platí pro foton polarizovaný levotočivě.
5. Jelikož podle 2. a 3. je každý foton polarizován buď pravotočivě, nebo levotočivě, musí mít každý stejnou, poloviční pravděpodobnost dostat se do x -ového nebo y -ového svazku a není na světě způsob, který by dokázal předpovědět, který z nich to bude.
6. Teorie to však dělá; tvrdí, že *vidíme-li* procházet náš foton x -ovým polarizátorem, umíme s jistotou *dopředu říci*, že jeho foton poletí ve svazku polarizovaném ve směru y . To je spor s 5. bodem, takže jde o paradox.

Příroda však nic takového nevidí, protože experiment svědčí o tom, že předpověď podle bodu 6 opravdu platí. Způsob, jakým vysvětlit toto zdánlivé protirečení, jsme si naznačili v naší úplně první přednášce o kvantové mechanických vlastnostech (kapitola 37 1. dílu). V uvedené úvaze jsou body 1, 2, 4 a 6 správné, ale bod 3 a zároveň i jeho důsledek, bod 5, jsou chybné; nepopisují přírodu pravdivě. Bod 3 říká, že na základě našeho měření (když pozorujeme pravotočivý nebo

levotočivý foton) umíme určit, kterou ze dvou stejně pravděpodobných událostí zaznamená on (zda zjistí foton polarizovaný pravotočivě nebo levotočivě); *dokonce neprovedeme-li* měření vůbec, i tak můžeme říci, že jeho událost se odehraje buď jedním, nebo druhým způsobem. To byl ale přesně ten bod ve zmíněné 37. kapitole 1. dílu, na který jsme poukázali ihned na začátku, že tak to v přírodě zařízené není. V ní to funguje jinak; vyžaduje popis pomocí interferujících amplitud, přičemž každé alternativě přísluší jedna amplituda. Měření ke zjištění toho, která alternativa je realizována, interferenci poruší; když jej však *neuskutečníme*, stále nemáme právo tvrdit, že nastává jedna nebo druhá možnost.

Kdybychom pro každý z našich fotonů dokázali určit, zda šlo o pravotočivě nebo levotočivě polarizovaný foton, a *zároveň* zda byl polarizován ve směru osy x (všechno pro jeden a tentýž foton), opravdu bychom dospěli k paradoxu. To však udělat nedokážeme – máme před sebou příklad principu neurčitosti.

Stále ještě se domníváte, že je v tom skryt paradox? Pokud ano, pokuste se to dokázat; navrhněte takový myšlenkový experiment, pro nějž by kvantová mechanika předpovídala dvěma různými postupy navzájem se vylučující závěry. V opačném případě představuje paradox pouze rozpor mezi skutečností a vaším pocitem, jak by měla příroda vypadat.

Nebo si myslíte, že na tom není *nic* paradoxního, pouze se to zdá velmi neobvyklé? S tím můžeme souhlasit všichni. Právě to dělá fyziku tak přitažlivou.

16.4 ROTAČNÍ MATICE PRO LIBOVOLNÝ SPIN

Doufáme, že nyní už chápete, jak důležitá je myšlenka momentu hybnosti pro pochopení atomových procesů. Dosud jsme uvažovali pouze soustavy, jejichž spin (nebo celkový moment hybnosti) byl roven 0, 1/2 nebo 1. Existují však i atomové soustavy s vyššími momenty hybnosti. Na jejich zkoumání by se nám hodilo mít po ruce podobné tabulky rotačních amplitud, jaké byly ve stati 15.6. To znamená, že potřebujeme najít matice amplitud pro spin 3/2, 2, 5/2, 3 atd. Ačkoliv nebudeme podrobně uvádět, jak se k nim dopracujeme, rádi bychom vám ukázali alespoň návod, abyste se je mohli případně odvodit sami, pokud se s nimi někdy při své práci setkáte.

Jak jsme viděli už dříve, libovolná soustava se spinem nebo celkovým momentem hybnosti j může existovat v libovolném z $(2j+1)$ stavů, jejichž z -ová složka momentu hybnosti nabývá jakékoliv z diskretních hodnot v pořadí $j, j-1, j-2, \dots, -(j-1), -j$ (vše v jednotkách \hbar). Označíme-li z -ovou složku momentu hybnosti nějakého konkrétního stavu $m\hbar$, můžeme definovat stav s daným momentem hybnosti udáním číselných hodnot obou kvantových čísel j a m . Zapišeme ho ve tvaru stavového vektoru $|j, m\rangle$. V případě částice se spinem 1/2 jsou to stavy $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ a $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, pro soustavu se spinem 1 bychom je v přijaté konvenci vyjádřili jako $|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$. Pro částici s nulovým spinem samozřejmě existuje jediný stav $|0, 0\rangle$.

Nyní chceme zjistit, co se stane, promítneme-li obecný stav $|j, m\rangle$ do reprezentace, která se vztahuje k otočenému souboru souřadnicových os. Zaprvé, víme, že j je číslo charakterizující soustavu, takže se nemění. Otočíme-li osy, dostaneme směs různých hodnot m pro totéž j . Obecně bude existovat nějaká amplituda, že v otočené soustavě souřadnic najdeme soustavu ve stavu $|j, m'\rangle$, kde m' udává z -ovou složku momentu hybnosti. Rádi bychom tedy našli všechny maticové elementy $\langle j, m'|R|j, m\rangle$ pro různá otočení. Už víme, jak se projeví rotace o úhel φ kolem osy z . Nový stav vznikne ze starého obyčejným vynásobením faktorem $e^{im\varphi}$ – má stále stejnou hodnotu m . Můžeme to zapsat takto

$$R_z(\varphi) |j, m\rangle = e^{im\varphi} |j, m\rangle. \quad (16.24)$$

Nebo dáváte-li přednost jinému zápisu

$$\langle j, m' | R_z(\varphi) |j, m\rangle = \delta_{m, m'} e^{im\varphi} \quad (16.25)$$

(kde $\delta_{m, m'} = 1$ pouze v případě, že $m = m'$; jinak je rovno 0).

V případě rotace kolem libovolné jiné osy nastane promíchání různých stavů m . Mohli bychom se samozřejmě pokusit vypočítat maticové elementy pro libovolné otočení popsané pomocí Eulerových úhlů α, β a γ . Snazší však bude, vzpomeneme-li si, že takovouto nejobecnější rotaci lze složit ze tří po sobě jdoucích otočení $R_z(\gamma), R_y(\alpha)$ a $R_z(\beta)$, takže budeme-li znát maticové elementy pro rotaci kolem osy y , máme vyhráno.

Jak najít rotační matici pro otočení o úhel ϑ kolem osy y v případě částice se spinem j ? Vědomosti, které jsme dosud získali, nestačí na to, abychom vám to dokázali vysvětlit jednoduchým způsobem. Pro částici se spinem $1/2$ jsme přitom použili speciální případ soustavy skládající se ze dvou částic se spinem $1/2$. Budete-li s námi spolupracovat a přijmete za pravdivé tvrzení, že v obecném případě závisí odpověď výlučně na spinu j a vůbec ne na tom, jak jsou vnitřní části objektu vzájemně propojeny, můžeme myšlenku použitou u částice se spinem 1 rozšířit na libovolným spin. Ze tří částic se spinem $1/2$ můžeme např. dát dohromady uměle vytvořenou soustavu se spinem $3/2$. Abychom se vyhnuli možným problémům, můžeme dokonce předpokládat, že všechny částice jsou navzájem rozlišitelné, jako např. proton, elektron, mion. Transformováním každé z nich zjistíme, jak se chová celá soustava – jen je třeba si vzpomenout, že v případě kombinovaného stavu se trojice amplitud navzájem násobí. Podívejme se, jak to bude fungovat.

Předpokládejme, že všechny spiny našich vybraných částic jsou orientovány nahoru; tento stav můžeme označit $|+++ \rangle$. Hledíme-li na tuto soustavu ze soustavy souřadnic otočené o úhel φ kolem osy z , každé plus zůstane plusem, ale navíc bude vynásobeno faktorem $e^{i\varphi/2}$. Jsou dohromady tři, takže platí

$$R_z(\varphi) |+++ \rangle = e^{i(3\varphi/2)} |+++ \rangle. \quad (16.26)$$

Je zřejmé, že stav $|+++ \rangle$ představuje přesně to, co chápeme stavem s $m = +3/2$, totiž stav $|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$.

Otočíme-li nyní tuto soustavu kolem osy y , každá z částic se spinem $1/2$ bude mít tutéž amplitudu nahlížet se ve stavu plus nebo minus, takže celá soustava bude směsí *osmi* možných kombinací $|+++ \rangle, |++-\rangle, |+-+\rangle, |+--\rangle, |-++\rangle, |--+\rangle, |---\rangle$ nebo $|--- \rangle$. Je zřejmé, že je možné je rozdělit do čtyř skupin, z nichž každá odpovídá konkrétní hodnotě m . Zprv, stavu $|+++ \rangle$ patří $m = +\frac{3}{2}$. Pak jsou tu 3 stavy $|++-\rangle, |+-+\rangle$ a $|+--\rangle$ – každý se dvěma plusy a jedním minusem. Protože všechny částice mají stejnou naději objevit se po rotaci ve stavu minus, měl by být každý z nich zastoupen jednou a toutéž váhou. Vezměme kombinaci

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \{|++-\rangle + |+-+\rangle + |+--\rangle\}; \quad (16.27)$$

faktor $\frac{1}{\sqrt{3}}$ jsme přidali proto, aby byl stav normován. Otočíme-li jej kolem osy z , z každého

znaménka plus vystoupí faktor $e^{i\varphi/2}$ a z každého znaménka minus faktor $e^{-i\varphi/2}$. Před každým členem součtu tak stojí součinitel $e^{i\varphi/2}$, takže jej lze vyjmout před závorku. Takový stav vyhovuje našim představám o stavu $m = +\frac{1}{2}$; docházíme k závěru, že

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \{ |+++ \rangle + |+-+ \rangle + |-++ \rangle \} = \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (16.28)$$

Podobně lze napsat

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \{ |+-- \rangle + |-+- \rangle + |--+ \rangle \} = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (16.29)$$

což odpovídá stavu s $m = -\frac{1}{2}$. Všimněte si, že vybíráme pouze *symetrické* kombinace – žádná z nich nemá znaménko minus. Ty by příslušely stavům s týmž m , ale s různým j . (Je to úplně podobné případu se spinem 1, kde jsme zjistili, že $1/\sqrt{2} \{ |+ - \rangle + | - + \rangle \}$ byl stav $|1, 0\rangle$, zatímco kombinace $1/\sqrt{2} \{ |+ - \rangle - | - + \rangle \}$ popisovala stav $|0, 0\rangle$.) Nakonec nám ještě zbylo

$$|--- \rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle. \quad (16.30)$$

Zmíněná čtveřice stavů je shrnuta v *tab. 16.1*.

Tabulka 16.1:

$ +++ \rangle$	$= \left \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{3}} \{ +++ \rangle + +-+ \rangle + -++ \rangle \}$	$= \left \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle$
$\frac{1}{\sqrt{3}} \{ +-- \rangle + -+- \rangle + --+ \rangle \}$	$= \left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$
$ --- \rangle$	$= \left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$

Nyní nám už jen stačí vzít každý stav, otočit jej kolem osy y a podívat se, jak budou zastoupeny nové stavy – použijeme přitom naši známou rotační matici pro částice se spinem $1/2$. Můžeme postupovat přesně tak jako ve stati 10.6 pro případ se spinem 1. (Chce to jen trochu více algebraických výpočtů.) Budeme se zcela držet myšlenek z 10. kapitoly, takže si odпустíme další podrobný výklad.

Stavy v systému S označíme $\left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, S \right\rangle = |+++ \rangle$, $\left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, S \right\rangle = 1/\sqrt{3} \{ |+++ \rangle + |+-+ \rangle + |-++ \rangle \}$ atd.

Systém T dostaneme otočením S o úhel ϑ kolem osy y . Stavy v něm označíme $\left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T \right\rangle$, $\left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T \right\rangle$ atd. Samozřejmě, že $\left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T \right\rangle$ je totéž co $|+++ \rangle$ (čárky se vždy vztahují k systému

T). Podobně $|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T\rangle$ bude rovno $1/\sqrt{3}\{|+'+'-' \rangle + |+'-'+' \rangle + |-'+'+' \rangle\}$ atd. Každý stav $|+\rangle$ v soustavě souřadnic T pochází ze stavu $|+\rangle$, jakož i ze stavu $|-\rangle$ systému S a dostaneme ho pomocí maticových elementů v *tab. 10.4*.

Máme-li tři částice se spinem $1/2$, je třeba rovnici (10.47) nahradit rovnicí

$$|+++ \rangle = a^3 |+'+'+' \rangle + a^2 b \{|+'+'-' \rangle + |+'-'+' \rangle + |-'+'+' \rangle\} + ab^2 \{|+'-'-' \rangle + |-'+'-' \rangle + |-'-'+' \rangle\} + b^3 |-'-'-' \rangle. \quad (16.31)$$

Využijeme-li transformačních vztahů podle *tab. 10.4*, místo (10.48) dojdeme k rovnici

$$|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, S\rangle = a^3 |\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T\rangle + \sqrt{3} a^2 b |\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T\rangle + \sqrt{3} a^2 b |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, T\rangle + b^3 |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, T\rangle. \quad (16.32)$$

To nám už dává některé z našich maticových elementů $\langle jT|iS\rangle$. Abychom našli vyjádření pro $|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, S\rangle$, začněme s transformací stavu se dvěma plusy a jedním minusem. Například

$$|++-\rangle = a^2 c |+'+'+' \rangle + a^2 d |+'+'-' \rangle + abc |+'-'+' \rangle + bac |-'+'+' \rangle + abd |+'-'-' \rangle + bad |-'+'-' \rangle + b^2 c |-'-'+' \rangle + b^2 d |-'-'-' \rangle. \quad (16.33)$$

Přičteme-li k tomu dva podobné výrazy pro $|+-+\rangle$ a $|+--\rangle$ a ještě vydělíme $\sqrt{3}$, zjistíme, že

$$|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, S\rangle = \sqrt{3} a^2 c |\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T\rangle + (a^2 d + 2abc) |\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T\rangle + (2bad + b^2 c) |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, T\rangle + \sqrt{3} b^2 d |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, T\rangle. \quad (16.34)$$

Tabulka 16.2: Rotační matice pro částici se spinem $3/2$

$\langle jT iS\rangle$	$ \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, S\rangle$	$ \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, S\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, S\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, S\rangle$
$ \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T\rangle$	a^3	$\sqrt{3} a^2 c$	$\sqrt{3} a c^2$	c^3
$ \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T\rangle$	$\sqrt{3} a^2 b$	$a^2 d + 2abc$	$c^2 b + 2dac$	$\sqrt{3} c^2 d$
$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, T\rangle$	$\sqrt{3} a b^2$	$2bad + b^2 c$	$2cdb + d^2 a$	$\sqrt{3} c d^2$
$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, T\rangle$	b^3	$\sqrt{3} b^2 d$	$\sqrt{3} b d^2$	d^3

Koeficienty a, b, c, d jsou v *tab. 10.4*.

Budeme-li takto pokračovat dále, najdeme všechny elementy $\langle jT|iS \rangle$ transformační matice tak, jak jsou uvedeny v *tab. 16.2*. První sloupec pochází z rovnice (16.32), druhý z (16.34). Poslední dva sloupce jsme doplnili na základě stejného postupu.

Předpokládejme, že systém T vznikl rotací o úhel ϑ kolem osy y systému S . Koeficienty a, b, c, d pak nabývají hodnot (rovnice 10.54) $a = d = \cos \vartheta/2$, $c = -b = \sin \vartheta/2$. Dosadíme-li je do *tab. 18.2*, dostaneme výrazy, které odpovídají spodní části *tab. 16.2*, tentokrát však pro soustavu se spinem $3/2$.

Úvahy, z nichž jsme vycházeli, byly zobecněny na soustavu s libovolným spinem j . Stav $|j, m\rangle$ lze složit z $2j$ částic, z nichž každá má spin $1/2$. (Z nich je $j + m$ ve stavu $|+\rangle$ a $j - m$ ve stavu $|-\rangle$.) Součty se provádějí přes všechny možné způsoby, jakými je lze zkonstruovat, a stavy se normují vynásobením vhodnou konstantou. Těm z vás, které víc přitahuje matematika, se snad podaří dokázat, že konečný výsledek má takový tvar⁷⁵⁾

$$\begin{aligned} \langle j, m' | R_y(\vartheta) | j, m \rangle &= [(j+m)! (j-m)! (j+m')! (j-m')!]^{1/2} \cdot \\ &\cdot \sum_k \frac{(-1)^k (\cos \vartheta/2)^{2j+m'-m-2k} (\sin \vartheta/2)^{m-m'+2k}}{(m-m'+k)! (j+m'-k)! (j-m-k)! k!}, \end{aligned} \quad (16.35)$$

kde k probíhá přes všechny hodnoty, které ve všech faktoriálech vedou k nezáporným členům.

Tento vzorec vypadá dost hrůzostrašně, ale pomocí něho můžete ověřit správnost *tab. 15.2* pro $j = 1$ a připravit si vlastní tabulky pro větší j . Některé maticové elementy jsou mimořádně důležité a dostaly zvláštní pojmenování. Například maticové elementy pro $m = m' = 0$ a celočíselné j jsou známé pod jménem Legendroy polynomy a označujeme je $P_j(\cos \vartheta)$:

$$\langle j, 0 | R_y(\vartheta) | j, 0 \rangle = P_j(\cos \vartheta). \quad (16.36)$$

Několik prvních má tento tvar

$$P_0(\cos \vartheta) = 1, \quad (16.37)$$

$$P_1(\cos \vartheta) = \cos \vartheta, \quad (16.38)$$

$$P_2(\cos \vartheta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1), \quad (16.39)$$

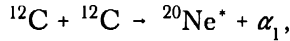
$$P_3(\cos \vartheta) = \frac{1}{2}(5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta). \quad (16.40)$$

16.5 MĚŘENÍ SPINU JÁDRA

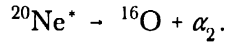
Rádi bychom uvedli jeden příklad k využití zmíněných koeficientů. Týká se zajímavého, poměrně nedávného experimentu, jemuž nyní už i vy budete schopni porozumět. Několik fyziků se soustředilo na zjištění, jaký spin mají určité excitované stavy jádra ^{20}Ne . Proto bombardovali

⁷⁵⁾ Zajímají-li vás podrobnosti, najdete je v dodatku k této kapitole.

uhlíkový terč svazkem urychlených iontů uhlíku a požadovaného excitovaného stavu ^{20}Ne (označme jej $^{20}\text{Ne}^*$) dosáhli reakcí

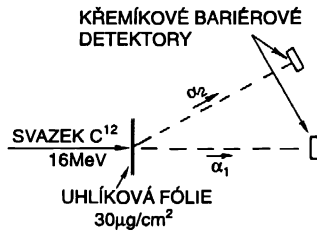


kde α_1 je částice α , tj. ^4He . Některé z excitovaných stavů ^{20}Ne vytvořených tímto způsobem jsou nestabilní a rozpadají se podle reakce



Experimentálně tedy byly pozorovány jako produkty reakce dvě částice α . Označme je α_1 a α_2 ; jelikož vylétávají s různými energiemi, lze je navzájem odlišit. Kromě toho, zvolíme-li si pro α_1 vhodnou energii, můžeme zkoumat libovolný excitovaný stav jádra ^{20}Ne .

Experiment byl sestaven podle schématu na obr. 16.9. Svazek iontů uhlíku s energií 16 MeV byl nasměrován na tenkou uhlíkovou fólii. První částici α registroval křemíkový polovodičový detektor s difuzní bariérou (označený α_1) umístěný tak, aby zachytával částice α s vhodnou energií ve směru dopředu (vzhledem k dopadajícímu svazku ^{12}C). Četnost koincidenčních signálů z α_1 a α_2 byla měřena v závislosti na úhlu ϑ .



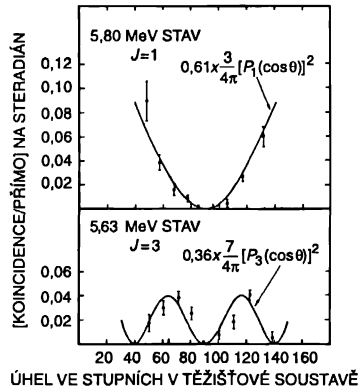
Obr. 16.9 Experimentální uspořádání k určení spinu určitých stavů ^{20}Ne

Myšlenka experimentu je následující. Nejdříve je třeba vědět, že spiny ^{12}C , ^{16}O a částice α jsou všechny rovny nule. Označíme-li směr pohybu dopadajících iontů ^{12}C jako $+z$, víme, že $^{20}\text{Ne}^*$ musí mít nulovou z -ovou složku momentu hybnosti. Ani jedna ze zbývajících částic nemá spin; ^{12}C se přibližuje ve směru osy z a α_1 letí také podél z , takže jejich pohyb nemůže přispívat k momentu hybnosti vzhledem k této ose. Ať už je spin j $^{20}\text{Ne}^*$ jakýkoliv, víme, že se dané jádro nachází ve stavu $|j, 0\rangle$. Co se nyní bude dít, když dojde k rozpadu na ^{16}O a druhou částici α ? Tu zachytí detektor α_2 a aby se zachovala hybnost, musí ^{16}O odletět opačným směrem⁷⁶⁾. Je zřejmé, že vzhledem k nové ose ve směru α_2 nemůže existovat nenulová složka momentu hybnosti. Moment hybnosti konečného stavu vůči této nové ose je roven nule, takže rozpad $^{20}\text{Ne}^*$ může probíhat tímto způsobem jedině tehdy, existuje-li pro něj jistá amplituda, že m' bude rovno nule, přičemž m' je kvantové číslo složky momentu hybnosti vzhledem k nové ose. Ve skutečnosti je pravděpodobnost registrace částice α_2 pod úhlem ϑ vlastně druhou mocninou amplitudy (nebo maticového elementu)

$$\langle j, 0 | R_y(\vartheta) | j, 0 \rangle. \quad (16.41)$$

⁷⁶⁾ Zpětný odraz, který získá $^{20}\text{Ne}^*$ při první srážce, můžeme zanedbat. Nebo ještě lépe, lze jej spočítat a provést k němu opravu.

Aby byl nalezen spin hledaného stavu $^{20}\text{Ne}^*$, byla do grafu vynesena intenzita druhých částic α v závislosti na úhlu a takto získaný průběh byl porovnán s teoretickými křivkami pro různé hodnoty j . Jak jsme uvedli v předcházející stati, amplitudy $\langle j, 0 | R_y(\vartheta) | j, 0 \rangle$ jsou vlastně funkce $P_j(\cos \vartheta)$. Takže možná úhlová rozdělení jsou vyjádřena křivkami $[P_j(\cos \vartheta)]^2$. Experimentální výsledky jsou znázorněny na obr. 16.10 pro dva excitované stavy. Je vidět, že úhlové rozdělení pro stav 5,80 MeV velmi dobře kopíruje křivku $[P_1(\cos \vartheta)]^2$, takže jeho spin musí být roven 1. Na druhé straně, údaje pro stav 5,63 MeV mají zcela odlišný průběh, nejvíce jim vyhovuje křivka $[P_3(\cos \vartheta)]^2$. Tento stav má spin 3.



Obr. 16.10 Experimentální výsledky úhlového rozdělení částic α , pocházejících z rozpadu dvou excitovaných stavů jádra ^{20}Ne , která byly získány v uspořádání podle předcházejícího obrázku. [Podle Kuehner J. A. Physical Review, 125, s. 1653, 1962].

Z výsledků tohoto experimentu jsme byli schopni zjistit, jaké jsou momenty hybnosti dvou excitovaných stavů jádra $^{20}\text{Ne}^*$. Tuto informaci lze využít při snaze porozumět tomu, jaká je konfigurace protonů a neutronů uvnitř tohoto jádra; přinese nám to nové poznatky o tajemných jaderných silách.

16.6 SKLÁDÁNÍ MOMENTŮ HYBNOSTI

Když jsme v 10. kapitole studovali hyperjemnou strukturu atomu vodíku, objevila se před námi úloha sestavit vnitřní stavy soustavy složené ze dvou částic (elektronu a protonu), z nichž každá měla spin $1/2$. Zjistili jsme, že čtyři možné spinové stavy takového systému lze začlenit do dvou skupin: Do jedné patří trojice stavů se stejnou energií, která se vnějšmu světu jevila jako částice se spinem 1, a ve druhé zůstal zbývající čtvrtý stav, který se choval jako částice se spinem 0. Dáme-li tedy dohromady dvě částice se spinem $1/2$, můžeme vytvořit soustavu s celkovým spinem 1, nebo 0. V této stati si na obecné úrovni rozebereme spinové soustavy skládající se ze dvou částic s libovolným spinem. Je to další důležitý problém týkající se momentu hybnosti v kvantové mechanických soustavách.

Nejdříve přepíšeme výsledky 10. kapitoly pro atom vodíku do tvaru, který lze snáze rozšířit na obecnější případ. Na začátku jsme měli dvě částice, které nyní nazveme částice a (elektron) a částice b (proton). Částice a měla spin $j_a \left(= \frac{1}{2} \right)$ a její z-ová složka momentu hybnosti m_a mohla

nabývat jedné z několika hodnot (v daném případě 2, totiž $m_a = +\frac{1}{2}$, nebo $m_a = -\frac{1}{2}$). Podobně i spinový stav částice b byl popsán jejím spinem j_b a jeho složkou m_b ve směru osy z . Mohli jsme utvářet různé kombinace spinových stavů obou částic, např. stav $\left| a, +\frac{1}{2}; b, -\frac{1}{2} \right\rangle$ jsme sestrojili tak, že jsme vzali částici a s $m_a = +\frac{1}{2}$ a částici b s $m_b = -\frac{1}{2}$. Obecně vytvářely složené stavy soustavy, jejíž celkový spin J (nebo jinak řečeno celkový moment hybnosti) byl roven 1, nebo 0. Z-ová složka momentu hybnosti M mohla mít hodnoty +1, 0, -1, pokud $J=1$, nebo 0, když $J=0$. Vztahy (10.41) a (10.42) můžeme v novém označení přepsat tak, jak je uvedeno v tab. 16.3.

Levý sloupec v tabulce popisuje složený stav pomocí jeho celkového momentu hybnosti J a z-ové složky M . Právý sloupec naznačuje, jakým způsobem jsou tyto stavy utvořeny z hodnot m obou částic a a b .

Tabulka 16.3: Skládání momentů hybnosti dvou částic se spinem 1/2

$$\left(j_a = \frac{1}{2}, j_b = \frac{1}{2} \right)$$

$ J = 1, M = +1\rangle = \left a, +\frac{1}{2}; b, +\frac{1}{2} \right\rangle$
$ J = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left a, +\frac{1}{2}; b, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left a, -\frac{1}{2}; b, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$
$ J = 1, M = -1\rangle = \left a, -\frac{1}{2}; b, -\frac{1}{2} \right\rangle$
$ J = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left a, +\frac{1}{2}; b, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left a, -\frac{1}{2}; b, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$

Tento výsledek bychom rádi zobecnili na stavy sestavené ze dvou objektů a a b s libovolnými spiny j_a a j_b . Začneme tím, že budeme uvažovat příklad, v němž $j_a = \frac{1}{2}$ a $j_b = 1$, totiž atom

deuteria, kde částice a je elektron (e) a částice b je jádro – deutron (d). Máme tedy $j_a = j_e = \frac{1}{2}$.

Deutron je složen z jednoho protonu a jednoho neutronu tak, že celkový spin výsledného stavu je roven 1; takže $j_b = j_d = 1$. Blíže si rozebereme hyperjemné stavy deuteria – přesně tímž způsobem, jako jsme to udělali pro vodík. Jelikož deutron může mít tři stavy s $m = +1, 0, -1$

a elektron má dva $\left(m_a = m_e = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right)$, dostáváme celkem 6 možných kombinací (používáme označení $|e, m_e; d, m_d\rangle$)

$$\begin{aligned}
 & |e, +\frac{1}{2}; d, +1\rangle \\
 & |e, +\frac{1}{2}; d, 0\rangle; |e, -\frac{1}{2}; d, +1\rangle \\
 & |e, +\frac{1}{2}; d, -1\rangle; |e, -\frac{1}{2}; d, 0\rangle \\
 & |e, -\frac{1}{2}; d, -1\rangle.
 \end{aligned} \tag{16.42}$$

Zajisté si všimnete, že všechny stavy jsme seskupili podle hodnoty součtu m_e a m_d (v pořadí od největší po nejmenší).

Nyní se vynořuje otázka: Co se stane s těmito stavy, přejdeme-li k jiné soustavě souřadnic? Je-li tato nová soustava pouze otočena kolem osy z o úhel φ , se objeví před stavem $|e, m_e; d, m_d\rangle$ faktor

$$e^{im_e\varphi} e^{im_d\varphi} = e^{i(m_e + m_d)\varphi}. \tag{16.43}$$

(Na stav se můžeme dívat jako na součin $|e, m_e\rangle |d, m_d\rangle$ a každý stavový vektor přispívá nezávisle svým vlastním exponenciálním faktorem.) Výraz (16.43) má tvar $e^{iM\varphi}$, takže z-ová složka momentu hybnosti stavu $|e, m_e; d, m_d\rangle$ je rovna

$$M = m_e + m_d. \tag{16.44}$$

Z-ová složka celkového momentu hybnosti je rovna součtu z-ových složek momentu hybnosti jednotlivých částí.

Ve výpisu (16.42) má proto stav v prvním řádku $M = +\frac{3}{2}$, dva stavy ve druhém řádku mají $M = +\frac{1}{2}$, další dva $M = -\frac{1}{2}$ a poslední stav má $M = -\frac{3}{2}$. Ihned vidíme, že jednou z možností pro spin složeného stavu (celkový moment hybnosti) musí být $J = \frac{3}{2}$, což si vyžaduje 4 stavy s $M = +\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$.

Kandidát na $M = +\frac{3}{2}$ je pouze jeden, takže už víme, že

$$|J = \frac{3}{2}, M = +\frac{3}{2}\rangle = |e, +\frac{1}{2}; d, 1\rangle. \tag{16.45}$$

Ale jak vypadá stav $|J = \frac{3}{2}, M = \frac{1}{2}\rangle$? Ve druhém řádku (16.42) máme kandidáty dva, a skutečně pro jejich libovolnou lineární kombinaci bude $M = +\frac{1}{2}$. Takže obecně musíme očekávat, že

$$|J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2}\rangle = \alpha |e, +\frac{1}{2}; d, 0\rangle + \beta |e, -\frac{1}{2}; d, 1\rangle, \tag{16.46}$$

kde α a β jsou dvě čísla. Nazývají se *Clebschovy-Gordonovy koeficienty*. Najít je bude náš další úkol.

Půjde to celkem snadno, vzpomenete-li si, že deutron se skládá z neutronu a protonu a rozepíšeme-li jeho stavy explicitněji pomocí pravidel *tab. 16.3*. Pokud to uděláme, budou stavy vyjmenované v (16.42) vypadat tak, jak uvádí *tab. 16.4*.

Tabulka 16.4: Stavy momentu hybnosti pro atom deuteria

$m = \frac{3}{2}$ $\left e, +\frac{1}{2}; d, +1 \right\rangle = \left e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle$
$m = \frac{1}{2}$ $\left e, +\frac{1}{2}; d, +0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$ $\left e, -\frac{1}{2}; d, +1 \right\rangle = \left e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle$
$m = -\frac{1}{2}$ $\left e, +\frac{1}{2}; d, -1 \right\rangle = \left e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2} \right\rangle$ $\left e, -\frac{1}{2}; d, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left e, -\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$
$m = -\frac{3}{2}$ $\left e, -\frac{1}{2}; d, -1 \right\rangle = \left e, -\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2} \right\rangle$

Jejich pomocí chceme vytvořit čtveřici stavů patřících k $J = \frac{3}{2}$. Odpověď však už známe, protože v *tab. 16.1* jsou shrnuty stavy se spinem $3/2$ utvořené ze tří částic se spinem $1/2$. První stav v *tab. 16.1* má $|J = \frac{3}{2}, M = +\frac{3}{2}\rangle$, je to $|+++\rangle$, což v našem nynějším označování znamená totéž co $|e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle$, tedy první stav v *tab. 16.4*. Ten je však totožný s prvním stavem v (16.42), takže se potvrdil náš vztah (16.45). Druhý řádek *tab. 16.1* říká (přepíšeme-li jej do nynějšího označení)

$$\begin{aligned}
 |J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \left| e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2} \right\rangle + \right. \\
 &+ \left. \left| e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle + \left| e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{16.47}$$

Je evidentní, že pravou stranu lze vyjádřit pomocí dvou údajů v druhém řádku *tab. 16.4*, vezmeme-li $\sqrt{2/3}$ -násobek prvního a $\sqrt{1/3}$ -násobek druhého členu. Rovnice (16.47) je proto ekvivalentní zápisu

$$|J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3} |e, +\frac{1}{2}; d, 0\rangle + \sqrt{1/3} |e, -\frac{1}{2}; d, 1\rangle. \quad (16.48)$$

Našli jsme tedy oba Clebschovy-Gordonovy koeficienty α a β z rovnice (16.46)

$$\alpha = \sqrt{2/3}, \quad \beta = \sqrt{1/3}. \quad (16.49)$$

Týmž postupem bychom zjistili, že

$$|J = \frac{3}{2}, M = -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{1/3} |e, +\frac{1}{2}; d, -1\rangle + \sqrt{2/3} |e, -\frac{1}{2}; d, 0\rangle. \quad (16.50)$$

A samozřejmě, i to, že

$$|J = \frac{3}{2}, M = -\frac{3}{2}\rangle = |e, -\frac{1}{2}; d, -1\rangle. \quad (16.51)$$

To jsou pravidla skládání spinů 1 a 1/2 do celkového spinu $J = \frac{3}{2}$. Vztahy (16.45), (16.48), (16.50) a (16.51) jsou shrnuty v *tab. 16.5*.

Tabulka 16.5: Stavů s $J = \frac{3}{2}$ atomu deuteria

$\left J = \frac{3}{2}, M = +\frac{3}{2} \right\rangle = \left e, +\frac{1}{2}; d, +1 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{2/3} \left e, +\frac{1}{2}; d, 0 \right\rangle + \sqrt{1/3} \left e, -\frac{1}{2}; d, 1 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{1/3} \left e, +\frac{1}{2}; d, -1 \right\rangle + \sqrt{2/3} \left e, -\frac{1}{2}; d, 0 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = -\frac{3}{2} \right\rangle = \left e, -\frac{1}{2}; d, -1 \right\rangle$

Dosud se nám podařilo sestavit čtyři stavy, zatímco soustava, kterou uvažujeme, má možných stavů šest. Z dvojice stavů ve druhém řádku (16.42) jsme využili pouze jednu lineární kombinaci k vytvoření $|J = \frac{3}{2}, M = +\frac{1}{2}\rangle$. Existuje však ještě jedna, k ní ortogonální lineární superpozice, pro kterou je také $|M = +\frac{1}{2}\rangle$, totiž

$$\sqrt{1/3} |e, +\frac{1}{2}; d, 0\rangle - \sqrt{2/3} |e, -\frac{1}{2}; d, +1\rangle. \quad (16.52)$$

Podobně i oba stavy ve třetím řádku (16.42) lze zkombinovat do dvou navzájem ortogonálních stavů, každý s $M = -\frac{1}{2}$. Druhý z nich, kolmý na (16.52), je

$$\sqrt{2/3} |e, +\frac{1}{2}; d, -1\rangle - \sqrt{1/3} |e, -\frac{1}{2}; d, 0\rangle. \quad (16.53)$$

To jsou oba zbývající stavy. Mají $M = m_e + m_d = \pm \frac{1}{2}$ a musejí odpovídat spinu $J = \frac{1}{2}$. Dostáváme tedy

$$|J = \frac{1}{2}, M = \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{1/3} |e, +\frac{1}{2}; d, 0\rangle - \sqrt{2/3} |e, -\frac{1}{2}; d, +1\rangle \quad (16.54)$$

$$|J = \frac{1}{2}, M = -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3} |e, +\frac{1}{2}; d, -1\rangle - \sqrt{1/3} |e, -\frac{1}{2}; d, 0\rangle.$$

Můžeme si ověřit, že se opravdu chovají jako stavy objektu se spinem $1/2$; stačí jen s využitím *tab. 16.3* vyjádřit deuteriovou část pomocí stavů neutronu a protonu. První stav v (16.54) je

$$\sqrt{1/6} \{ |e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2}\rangle + |e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{2/3} |e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle \} \quad (16.55)$$

a lze jej zapsat i ve tvaru

$$\begin{aligned} & \sqrt{1/3} \left\{ \sqrt{1/2} [|e, +\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2}\rangle - |e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle] + \right. \\ & \left. + \sqrt{1/2} [|e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle - |e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle] \right\}. \quad (16.56) \end{aligned}$$

Nyní si všimněme všech členů v první hranaté závorce a berme proton a elektron jako jeden celek. Dohromady vytvářejí stav se spinem 0 (viz spodní řádek *tab. 16.3*) a k momentu hybnosti nepřispívají. Zbývá jediné neutron, takže celá zmíněná závorka se při rotacích chová jako neutron, totiž jako stav v $J = \frac{1}{2}, M = +\frac{1}{2}$. Na základě týchž úvah vidíme, že v *druhé* hranaté závorce se elektron a neutron spojují dohromady, a vytvářejí stav s nulovým spinem, takže nevykompenzovaný je pouze příspěvek od protonu s jeho $m_p = \frac{1}{2}$. Proto se i tato závorka chová

jako objekt s $J = \frac{1}{2}, M = +\frac{1}{2}$. Můžeme tedy tvrdit, že celý výraz (16.56) se transformuje jako stav $|J = \frac{1}{2}, M = +\frac{1}{2}\rangle$ podle očekávání. Stav s $M = -\frac{1}{2}$ odpovídající výrazu (16.53) lze zapsat ve tvaru (záměnou příslušných hodnot $+\frac{1}{2}$ za $-\frac{1}{2}$)

$$\begin{aligned} & \sqrt{1/3} \left\{ \sqrt{1/2} [|e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2}\rangle - |e, -\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, +\frac{1}{2}\rangle] + \right. \\ & \left. + \sqrt{1/2} [|e, +\frac{1}{2}; n, -\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2}\rangle - |e, -\frac{1}{2}; n, +\frac{1}{2}; p, -\frac{1}{2}\rangle] \right\}. \quad (16.57) \end{aligned}$$

Snadno si můžete zkontrolovat, že je roven právě druhému řádku v (16.54), jak to má být, představují-li oba stavy soustavu se spinem $1/2$. Naše výsledky se tedy potvrdily. Deuteron a elektron mohou existovat v šesti stavech, z nichž čtyři se chovají jako stavy objektu se spinem $3/2$ (tab. 16.5) a dva jako stavy objektu se spinem $1/2$ (16.54).

K výsledkům shrnutým v tab. 16.5 a v rovnicích (16.54) jsme dospěli využitím té skutečnosti, že deuteron se skládá z neutronu a protonu. Pravdivost uvedených rovnic však nezávisí na této speciální okolnosti. Spojíme-li dohromady *libovolné* objekty se spinem 1 a $1/2$, jsou zákony skládání momentů hybnosti (jakož i koeficienty) vždy stejné. Systém rovnic v tab. 16.5. znamená, že otočíme-li souřadnice řekněme kolem osy y (takže stavy částic se spinem $1/2$ a 1 se změní podle tab. 16.1 a tab. 16.2), budou se lineární kombinace napravo od znaménka rovnosti transformovat tak, jak se patří pro objekt se spinem $3/2$.

Tabulka 16.6: Skládání momentů hybnosti částic se spinem $1/2$ ($j_a = \frac{1}{2}$) a 1 ($j_b = 1$)

$\left J = \frac{3}{2}, M = \frac{3}{2} \right\rangle = \left a, +\frac{1}{2}; b, +1 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{2/3} \left a, +\frac{1}{2}; b, 0 \right\rangle + \sqrt{1/3} \left a, -\frac{1}{2}; b, +1 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{1/3} \left a, +\frac{1}{2}; b, -1 \right\rangle + \sqrt{2/3} \left a, -\frac{1}{2}; b, 0 \right\rangle$
$\left J = \frac{3}{2}, M = -\frac{3}{2} \right\rangle = \left a, -\frac{1}{2}; b, -1 \right\rangle$
$\left J = \frac{1}{2}, M = +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{1/3} \left a, +\frac{1}{2}; b, 0 \right\rangle - \sqrt{2/3} \left a, -\frac{1}{2}; b, +1 \right\rangle$
$\left J = \frac{1}{2}, M = -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{2/3} \left a, +\frac{1}{2}; b, -1 \right\rangle - \sqrt{1/3} \left a, -\frac{1}{2}; b, 0 \right\rangle$

Při téže rotaci se budou stavy v (16.54) měnit jako stavy objektu se spinem $1/2$. Výsledky závisí pouze na vlastnostech obou původních částic vzhledem k rotacím (tj. na spinových stavech) a vůbec ne na tom, odkud pocházejí jejich momenty hybnosti. Jedině tohoto faktu jsme využili při výpočtu získaných vztahů, přičemž jsme uvažovali speciální případ, v němž se jedna ze složek sama skládá ze dvou částic se spinem $1/2$ v symetrickém stavu. Všechny naše dosavadní výsledky jsme shrnuli v tab. 16.6 a abychom zdůraznili obecnou platnost nalezených závěrů, použili jsme místo e a d označení a a b .

Předpokládejme, že před námi stojí obecná úloha najít stavy, které lze vytvořit složením dvou objektů s libovolnými spiny. Jeden z nich nechť má spin j_a (jehož z -ová složka m_a tedy probíhá $2j_a + 1$ hodnotami od $-j_a$ do $+j_a$) a druhý j_b (jehož složka ve směru z , m_b , nabývá hodnot od $-j_b$ po $+j_b$). Existuje $(2j_a + 1)(2j_b + 1)$ různých složených stavů $|a, m_a; b, m_b\rangle$. Jaký mohou mít celkový spin J ?

Výsledná z-ová složka momentu hybnosti M je rovna součtu $m_a + m_b$ a všechny stavy lze seřadit podle M (jako v (16.42)). Největší M je pouze jedno; odpovídá hodnotám $m_a = j_a$ a $m_b = j_b$, a proto je rovno $j_a + j_b$. Znamená to, že největší moment hybnosti J je také roven součtu $j_a + j_b$

$$J = M_{\max} = j_a + j_b.$$

Hodnotě M , menší než M_{\max} o jedno, budou patřit dva stavy (buď m_a , nebo m_b jsou o jedna menší než jejich maximum). Jeden z nich musí přispět do souboru stavů, patřících k $J = j_a + j_b$, a druhý zase do nového souboru s $J = j_a + j_b - 1$. Další hodnotu M (třetí shora seznamu) lze zkonstruovat třemi způsoby (z $m_a = j_a - 2$, $m_b = j_b$; z $m_a = j_a - 1$, $m_b = j_b - 1$ a z $m_a = j_a$, $m_b = j_b - 2$). Dva z nich patří do již zmíněných souborů; třetí nám napovídá, že do našich úvah je třeba zahrnout i stavy s $J = j_a + j_b - 2$. Tak pokračujeme dále do té doby, dokud nedosáhneme bodu, kdy už nebudeme moci snižovat ať už jedno, nebo druhé m , abychom utvořili nové stavy.

Nechť j_b je menší než j_a (jsou-li navzájem rovny, vezměme kterékoliv z nich); pak je třeba jen $2j_b$ hodnot J jdoucích jednotkovým krokem od $j_a + j_b$ do $j_a - j_b$. To znamená, že složíme-li dva objekty se spinem j_a a j_b , může být celkový moment hybnosti J soustavy roven jedné z hodnot

$$J = \begin{cases} j_a + j_b \\ j_a + j_b - 1 \\ j_a + j_b - 2 \\ \vdots \\ \vdots \\ |j_a - j_b| \end{cases} \quad (16.58)$$

(Tím, že místo $j_a - j_b$ píšeme $|j_a - j_b|$, se můžeme vyhnout nutnosti dodatečného předpokladu, že $j_a \geq j_b$.)

Pro každé z těchto J existuje $2J + 1$ stavů s různými hodnotami M (probíhajícími od $-J$ k $+J$). Každý z nich je vytvořen lineární kombinací původních stavů $|a, m_a; b, m_b\rangle$ s vhodnými faktory – Clebschovými-Gordonovými koeficienty u každého členu. Tyto koeficienty můžeme považovat za jakési faktory váhy, které nám udávají „množství“ stavu $|j_a, m_a; j_b, m_b\rangle$ objevujícího se ve stavu $|J, M\rangle$. Každý Clebschův-Gordonův koeficient má, je-li to třeba, šest indexů, které určují jeho místo ve vztazích podobných těm v tab. 16.3 a tab. 16.6. Označíme-li tyto koeficienty $C(J, M; j_a, m_a; j_b, m_b)$, mohli bychom rovnost v druhém řádku tab. 16.6 vyjádřit i takto

$$C\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; 1, 0\right) = \sqrt{2/3}$$

$$C\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, +1\right) = \sqrt{1/3}.$$

Pro žádné jiné speciální případy tu už koeficienty počítat nebudeme⁷⁷⁾. V mnoha knihách však lze tabulky najít. Možná si však vezmete do hlavy – jen tak, sami pro sebe – vyzkoušet své schop-

⁷⁷⁾ Tím spíš, že větší část práce už máme za sebou, protože známe matici pro obecnou rotaci (rovnice 16.35).

nosti; v *tab. 16.7* uvádíme konečné výsledky pro logicky následující případ složení dvou částic se spinem 1.

Tabulka 16.7: Skládání momentů hybnosti dvou částic se spinem 1 ($j_a = j_b = 1$)

$ J = 2, M = +2\rangle = a, +1; b, +1\rangle$
$ J = 2, M = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a, +1; b, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} a, 0; b, +1\rangle$
$ J = 2, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} a, +1; b, -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} a, -1; b, +1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}} a, 0; b, 0\rangle$
$ J = 2, M = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a, 0; b, -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} a, -1; b, 0\rangle$
$ J = 2, M = -2\rangle = a, -1; b, -1\rangle$
$ J = 1, M = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a, +1; b, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} a, 0; b, +1\rangle$
$ J = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a, +1; b, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} a, -1; b, +1\rangle$
$ J = 1, M = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a, 0; b, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} a, -1; b, 0\rangle$
$ J = 2, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ a, +1; b, -1\rangle + a, -1; b, +1\rangle - a, 0; b, 0\rangle \}$

Odvozené zákony skládání momentů hybnosti hrají velmi důležitou úlohu ve fyzice elementárních částic – počet jejich aplikací tam nemá konce. Bohužel, nemáme tolik místa, abychom na některé blíže podívali.

DODATEK Č. 1: ODVOZENÍ ROTAČNÍ MATICE⁷⁸⁾

Pro ty, kteří by rádi vnikli do podrobností, nyní vypočítáme obecnou rotační matic soustavu se spinem (celkovým momentem hybnosti) j . Není důležité dělat to pro obecný případ, důležité je poznat princip a výsledky si můžete najít v mnoha učebnicích. Na druhé straně, pokud jste už dospěli tak daleko, může se ve vás probudit touha přesvědčit se, že jste opravdu sch

⁷⁸⁾

Materiál uvedený v tomto dodatku byl původně obsažen v samotných přednáškách. Dnes máme poněkud méně místa, než bychom si přáli, a proto není třeba do nich zahrnovat tak podrobný výklad obecného případu.

porozumět dokonce i tak složitému vztahu kvantové mechaniky, jakým je rovnice (16.35), s níž se setkáváme při popisu momentu hybnosti.

Naše úvahy ze statě 16.4 rozšíříme na soustavu se spinem j , kterou budeme považovat za složenou z $2j$ objektů se spinem $1/2$. $|+++...+\rangle$ (s j znaménky plus) bude stav $s = j$. Pro $m = j - 1$ dostaneme $2j$ členů typu $|+++...+-\rangle$, $|+++...--\rangle$ atd. Uvažujme obecný případ s r plusy a s minusy, přičemž $r + s = 2j$. Při rotaci kolem osy z přispěje každé z r kladných znamének faktorem $e^{i\varphi/2}$ a každé z s záporných znamének faktorem $e^{-i\varphi/2}$. V důsledku toho se fáze změní o $i(r/2 - s/2)\varphi$. Vidíme, že

$$m = \frac{r - s}{2}. \quad (16.59)$$

Přesně tak jako pro $J=3/2$ musí být každý stav s daným m lineární kombinací (s kladnými znaménky) všech stavů se stejnými r a s , tj. stavů odpovídajících všem možným uspořádáním s r plusy a s minusy. Předpokládáme, že si dokážete spočítat jejich počet, který je roven $(r+s)!/r!s!$. Abychom normovali každý stav, je třeba vydělit součet druhou odmocninou tohoto čísla. Můžeme napsat

$$\left[\frac{(r+s)!}{r!s!} \right]^{-1/2} \{ |+++...+-\dots--\rangle + \text{všechny permutace} + a - \} = |j, m\rangle, \quad (16.60)$$

kde

$$j = \frac{r+s}{2}, \quad m = \frac{r-s}{2}. \quad (16.61)$$

Při dalším výpočtu nám velmi pomůže přechod k jinému označení. Když jsme už jednou stavy definovali rovnicí (16.60), určují čísla r a s stav právě tak dobře jako j a m . Snáze se nám bude pracovat, zavedeme-li

$$|j, m\rangle = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix}, \quad (16.62)$$

kde pomocí rovnic (16.61) platí

$$r = j + m, \quad s = j - m.$$

Rovnici (16.60) zapíšeme v novém *speciálním označení*

$$|j, m\rangle = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \left[\frac{(r+s)!}{r!s!} \right]^{+1/2} \left\{ |+\rangle^r |-\rangle^s \right\}_{\text{permutace}} \quad (16.63)$$

Všimněme si, že exponent vepředu stojícího faktoru jsme zaměnili na plus $1/2$. Udělali jsme to proto, že uvnitř složené závorky se nachází právě $N = (r+s)!/r!s!$ členů. Porovnáme-li (16.63) s (16.60), je nám jasné, že

$$\left\{ |+\rangle^r |-\rangle^s \right\}_{\text{perm}}$$

je pouze zkráceným zápisem výrazu

$$\{ +++...--\} + \text{všechny permutace} / N,$$

kde N je počet různých členů v závorce. Toto označení je výhodné z toho důvodu, že pokaždé, když správně provedeme rotaci, přispějí všechna znaménka plus týmž faktorem, takže ten se

objeví v r -té mocnině. Podobně všechna znaménka minus dohromady vygenerují faktor, umocněný na s bez ohledu na to, jaké je pořadí jednotlivých členů.

Nyní si představme, že naši soustavu otočíme o úhel ϑ kolem osy y . Chceme najít $R_y(\vartheta) \begin{vmatrix} r \\ s \end{vmatrix}$. Působením $R_y(\vartheta)$ na každý stav $|+\rangle$ dostaneme

$$R_y(\vartheta) |+\rangle = |+\rangle C + |-\rangle S, \quad (16.64)$$

kde $C = \cos \vartheta/2$ a $S = \sin \vartheta/2$. Působí-li $R_y(\vartheta)$ na každý stav $|-\rangle$, vznikne

$$R_y(\vartheta) |-\rangle = |-\rangle C - |+\rangle S.$$

Chceme tedy zjistit, čemu je roven výraz

$$\begin{aligned} R_y(\vartheta) \begin{vmatrix} r \\ s \end{vmatrix} &= \left[\frac{(r+s)!}{r!s!} \right]^{1/2} R_y(\vartheta) \{ |+\rangle^r |-\rangle^s \}_{\text{perm}} = \\ &= \left[\frac{(r+s)!}{r!s!} \right]^{1/2} \{ (R_y(\vartheta) |+\rangle)^r (R_y(\vartheta) |-\rangle)^s \}_{\text{perm}} = \\ &= \left[\frac{(r+s)!}{r!s!} \right]^{1/2} \{ (|+\rangle C + |-\rangle S)^r (|-\rangle C - |+\rangle S)^s \}_{\text{perm}}. \end{aligned} \quad (16.65)$$

Nyní je třeba rozepsat příslušnou mocninu každého dvojčlenu a oba výrazy navzájem vynásobit. Objeví se nám tam členy se všemi mocninami $|+\rangle$ od nuly do $(r+s)$. Všimněme si těch, které mají $|+\rangle$ umocněné na r' . Vždy je najdeme spolu s $|-\rangle$, umocněným na s' , kde $s' = 2j - r'$. Předpokládejme, že všechny takové členy shromáždíme. Před každou permutací bude stát nějaký číselný koeficient, který v sobě obsahuje faktory binomického rozvoje spolu s faktory C a S . Nazvěme jej A_r . Rovnice (16.65) pak bude vypadat takto

$$R_y(\vartheta) \begin{vmatrix} r \\ s \end{vmatrix} = \sum_{r'=0}^{r+s} \{ A_r |+\rangle^{r'} |-\rangle^{s'} \}_{\text{perm}}. \quad (16.66)$$

Řekněme, že A_r vydělíme faktorem $[(r'+s')!/r'!s']^{1/2}$ a tento podíl označíme B_r . Rovnice (16.66) je pak ekvivalentní s

$$R_y(\vartheta) \begin{vmatrix} r \\ s \end{vmatrix} = \sum_{r'=0}^{r+s} B_r \left[\frac{(r'+s')!}{r'!s'!} \right]^{1/2} \{ |+\rangle^{r'} |-\rangle^{s'} \}_{\text{perm}}. \quad (16.67)$$

(Vlastně bychom mohli pouze říci, že tato rovnice definuje B_r na základě požadavku, aby (16.67) byla totožná s výrazem (16.66).)

Zavedeme-li takovým způsobem B_r , zbývající faktory na pravé straně rovnice (16.67) jsou právě stavy $\begin{vmatrix} r' \\ s' \end{vmatrix}$. Takže máme

$$R_y(\vartheta) \begin{vmatrix} r \\ s \end{vmatrix} = \sum_{r'=0}^{r+s} B_r \begin{vmatrix} r' \\ s' \end{vmatrix}, \quad (16.68)$$

přičemž s' je vždy rovno $r+s-r'$. To, samozřejmě, znamená, že koeficienty B_r jsou právě maticovými elementy, které hledáme, totiž

$$\left\langle \begin{matrix} r' \\ s' \end{matrix} \middle| R_y(\vartheta) \middle| \begin{matrix} r \\ s \end{matrix} \right\rangle = B_r. \quad (16.69)$$

Nyní už nám nezbyvá nic jiného, jen se prokousat algebraickými výpočty, abychom našli různá B_r . Porovnáme-li (16.69) a (16.67) a uvědomíme si, že $r'+s'=r+s$, vidíme, že B_r je právě koeficient stojící u $a^r b^s$ v následujícím výrazu

$$\left[\frac{r'! s'!}{r! s!} \right]^{1/2} (aC + bS)^r (bC - aS)^s. \quad (16.70)$$

Je to už jen mechanická a nezajímavá práce vyjádřit oba rozvoje podle binomické věty a shromáždit všechny členy s danými mocninami a a b . Pokud si to celé spočítáte, zjistíte, že koeficient před $a^r b^s$ v (16.70) má tvar

$$\left[\frac{r'! s'!}{r! s!} \right]^{1/2} \sum_k (-1)^k S^{r-r'+2k} C^{s+r'-2k} \cdot \frac{r!}{(r-r'+k)!(r'-k)!} \cdot \frac{s!}{(s-k)!k!}. \quad (16.71)$$

Součet je třeba vzít přes všechna celočíselná k , pro něž jsou argumenty faktoriálu nezáporné. Tento výraz potom představuje hledaný maticový element.

Nakonec se ještě vrátíme k našemu původnímu označení pomocí j , m a m' použitím vztahů

$$r = j + m, \quad r' = j + m', \quad s = j - m, \quad s' = j - m'.$$

Po těchto substitucích dostaneme rovnici (16.35) ze statě 16.4.

DODATEK Č. 2.: ZACHOVÁNÍ PARITY PŘI EMISI FOTONU

V první stati této kapitoly jsme uvažovali emisi světla při přechodu atomu z excitovaného stavu se spinem 1 do základního stavu se spinem 0. Míří-li spin excitovaného stavu nahoru ($m=+1$), může emitovat pravotočivý foton podél osy $+z$ nebo levotočivý foton podél osy $-z$. Tyto dva fotonové stavy označme jako $|R_h\rangle$ a $|L_d\rangle$. Ani jeden z nich nemá přesně určenou hodnotu parity. Je-li \hat{P} operátor parity, platí

$$\hat{P}|R_h\rangle = |L_d\rangle \quad \text{a} \quad \hat{P}|L_d\rangle = |R_h\rangle.$$

A co náš někdejší důkaz toho, že atom ve stavu s přesně určenou energií musí mít i přesně určenou hodnotu parity? A co naše tvrzení, že v atomových procesech se parita zachovává? Neměl by mít konečný stav (stav po emisi fotonu) v této úloze přesně určenou paritu? Opravdu měl. A on ji vážně i má, uvažujeme-li *úplný* konečný stav, který v sobě zahrnuje amplitudy emise fotonu do všech možných úhlů. V první stati jsme brali v úvahu jen část úplného konečného stavu.

Nemáte-li nic proti tomu, zaměříme se pouze na konečné stavy se skutečně přesně určenou paritou. Uvažujme např. konečný stav $|\psi_F\rangle$, který má určitou amplitudu α být pravotočivým

fotonem letícím ve směru $+z$ a nějakou amplitudu β být levotočivým fotonem pohybujícím se podél osy $-z$. Můžeme napsat

$$|\psi_F\rangle = \alpha|R_h\rangle + \beta|L_d\rangle. \quad (16.72)$$

Operace parity nad ním dává

$$\hat{P}|\psi_F\rangle = \alpha|L_d\rangle + \beta|R_h\rangle. \quad (16.73)$$

Tento stav bude roven $\pm|\psi_F\rangle$, je-li $\beta = \alpha$ nebo $\beta = -\alpha$. Takže konečný stav se sudou paritou má tvar

$$|\psi_F^+\rangle = \alpha\{|R_h\rangle + |L_d\rangle\} \quad (16.74)$$

a stav s lichou paritou vypadá takto

$$|\psi_F^-\rangle = \alpha\{|R_h\rangle - |L_d\rangle\}. \quad (16.75)$$

Nyní se podívejme na rozpad excitovaného stavu s lichou paritou do základního stavu se sudou paritou. Má-li se parita zachovávat, musí mít konečný stav fotonu lichou paritu. Jediná možnost je ta, že ji lze vyjádřit jako (16.75). Je-li amplituda nalezení $|R_h\rangle$ rovna α , bude amplituda pozorování $|L_d\rangle - \alpha$.

Nyní si všimněme, co se stane, provedeme-li rotaci o 180° kolem osy y . Z počátečního excitovaného stavu atomu se stane stav $m = -1$ (podle tab. 15.2 se znaménko nemění). Rotací konečného stavu dostaneme

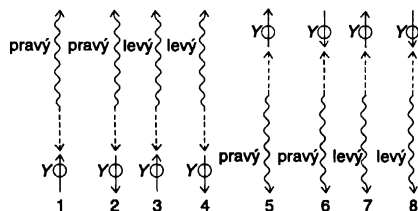
$$R_y(180^\circ)|\psi_F^-\rangle = \alpha\{|R_d\rangle - |L_h\rangle\} \quad (16.76)$$

Porovnáme-li tuto rovnici s rovnicí (16.75), vidíme, že v případě předpokládané parity konečného stavu platí: Má-li počáteční stav $m = -1$, má amplituda najít levotočivý foton ve směru $+z$ opačné znaménko než amplituda dostat z počátečního stavu $m = +1$ foton polarizovaný pravotočivě. To souhlasí s výsledkem, k němuž jsme dospěli ve stati 16.1.

PŘÍKLADY A CVIČENÍ

16.1 ■ Nějaký vybuzený stav atomu má spin 1 a může se deexcitovat vysláním fotonu, přičemž atom přejde do stavu se spinem rovným nule. Uvažujme vybuzený atom, jehož projekce momentu hybnosti na osu z je rovna nule. Nechť $A(\vartheta)$ je amplituda vyzáření fotonu s pravotočivou kruhovou polarizací do malého intervalu prostorových úhlů $\Delta\Omega$ ve směru, který svírá s osou z úhel ϑ . Jak závisí A na ϑ ?

16.2 ■ Částice X se spinem $1/2$ se rozpadá podle schématu $X \rightarrow Y + \gamma$, kde částice Y má spin $1/2$ a kladnou paritu. Míří-li spin částice X podél osy z , produkty rozpadu pohybující se podél osy z se mohou nacházet v osmi stavech ukázaných na obrázku. Vlnovka s šipkou ukazuje směr pohybu fotonu, čárkovaná čára s šipkou směr pohybu částice Y a šipka u Y směr jejího spinu.



- Které amplitudy výsledných stavů budou určitě rovny nule?
- Vypočítejte úhlové rozdělení částic Y polarizovaných ve směru jejich pohybu, jsou-li rozpadající se částice X polarizovány podél osy z .
- Vypočítejte úhlové rozdělení všech částic Y nezávisle na jejich polarizaci.
- Pečlivé experimenty neodhalily u tohoto rozpadu žádné odchylky od izotropního úhlového rozdělení. Jak je to možno fyzikálně zdůvodnit?

16.3 ■ Na synchrotronu probíhá výzkum reakce $\gamma + p \rightarrow p^* \rightarrow p + \pi^0$. Symbolem p^* je označen vybuzený stav protonu, který se rozpadá na proton a mezon π^0 . Je známo, že v určitém intervalu energií fotonu má stav p^* celkový moment hybnosti $3/2$. Předpokládejme, že svazek fotonů s pravotočivou kruhovou polarizací a o energii z uvedeného intervalu dopadá podél osy z na terč obsahující nepolarizované protony. Úhlové rozdělení v této reakci je možno analyzovat na základě následující úvahy. Foton a proton vytvářejí p^* ve stavu $|j=3/2, m=+1/2\rangle$ s amplitudou a a ve stavu $|3/2, +3/2\rangle$ s amplitudou b . Vybuzený stav se rozpadá na mezon π^0 s nulovým spinem a proton, které se pohybují v protilehlých směrech. Budiž f amplituda toho, že proton vyletí podél osy z se spinem mířícím nahoru a g amplituda toho že jeho spin bude mířit dolů. Vysvětlíte, proč ve stavu p^* jsou dovoleny pouze hodnoty $m=+3/2$ a $m=+1/2$ a v konečném stavu pouze hodnoty $m'=+1/2$ a $m'=-1/2$ (m' označuje projekci do směru pohybu). Vyjádřete úhlové rozdělení mezonů π^0 pomocí a , b a ϑ . Předpokládejte, že $f=g$.

16.4 ■ Uvažujte pružný rozptyl mezonů π^+ na nepolarizovaném protonovém terčíku. Mezony mají spin roven 0, parita se zachovává. Předpokládá se, že při rozptylu převládá proces, při němž proton přechází do vybuzeného stavu s $j=3/2$ a pohlcuje přitom mezon. (Moment $j=3/2$ vzniká skládáním spinu protonu a orbitálního momentu.) Pak je mezon znovu vyzářen a proton se vrací do základního stavu. Ukažte, že z tohoto předpokladu vyplývá úhlové rozdělení rozptýlených mezonů úměrné $1 + 3\cos^2\vartheta$.

16.5 ■ Základní stav atomu má spin rovný nule a kladnou paritu. Spin prvního excitovaného stavu je roven jedné a parita není známa. Nechť se určitý počet atomů nachází v prvním excitovaném stavu a všechny mají projekci momentu $m=1$ na osu z . Zkoumejme fotony, které jsou vyzářovány těmito atomy při přechodu do základního stavu.

- Je možné určit paritu excitovaného stavu na základě měření úhlového rozdělení vyzářovaných fotonů, aniž bychom uvažovali jejich polarizaci?
- Ukažte, že tuto neznámou paritu je možno určit, změříme-li úhlové rozdělení fotonů polarizovaných podél směru x' a y' . (Osu z' volíme ve směru pohybu fotonu v rovině $x-z$.)

Atom vodíku a periodická soustava prvků

- 17.1 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU
- 17.2 SFÉRICKY SYMETRICKÁ ŘEŠENÍ
- 17.3 STAVY S ÚHLOVOU ZÁVISLOSTÍ
- 17.4 OBECNÉ ŘEŠENÍ PRO VODÍK
- 17.5 VLNOVÉ FUNKCE ATOMU VODÍKU
- 17.6 PERIODICKÁ SOUSTAVA PRVKŮ

17.1 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU

Nejdramatičtější úspěchem v historii kvantové mechaniky bylo objasnění všech detailů ve spektrech některých jednoduchých atomů a pochopení periodického opakování různých vlastností, které nacházíme v Mendělejevově tabulce chemických prvků. V této kapitole dovedeme naše přednášky o kvantové mechanice až k tomuto bodu. Naučíme se porozumět spektru atomu vodíku. Současně si kvalitativním způsobem vysvětlíme základní vlastnosti chemických prvků. Proto si podrobně prostudujeme chování elektronu v atomu vodíku – na základě myšlenek, které jsme rozvedli ve 14. kapitole, poprvé podrobně vypočítáme prostorové rozdělení.

Při úplném popisu vodíkového atomu bychom měli vzít v úvahu pohyb protonu i elektronu. I v kvantové mechanice to lze udělat analogickým způsobem, jak se to dělá klasicky: vyjádřit pohyb všech částic vůči jejich těžišti, avšak takto postupovat nebudeme. Použijeme klasické přiblížení, v němž považujeme proton za velmi těžký, takže si můžeme představit, že je pevně fixován ve středu atomu.

Toto přiblížení nebude jediné. Zapomeneme i na to, že elektron má spin, takže bychom jej měli popisovat pomocí zákonů relativistické kvantové mechaniky. Do našeho výkladu bude nutné

zavést malé korekce kvůli tomu, že budeme vycházet z nerelativistické Schrödingerovy rovnice a zanedbáme magnetické efekty. Ty se tam objeví proto, že z hlediska elektronu je proton kroužícím nábojem, který vytváří magnetické pole. V něm bude mít elektron se spinem nahoru jinou energii, než kdyby měl spin orientovaný dolů.

Energie atomu bude trochu posunuta vůči hodnotě, kterou vypočítáme. Tohoto nepatrného energetického posunu si nebudeme všimnout. Představíme si, že elektron je podobný volnému setrvačnicku, který se pohybuje v prostoru a neustále si zachovává tentýž směr spinu. Jelikož budeme uvažovat volný atom v prostoru, nebude se celkový moment hybnosti měnit s časem. V našem přiblížení budeme předpokládat, že spin elektronu zůstává stále konstantní, takže se zachová i celý zbytek momentu hybnosti atomu (obvykle se nazývá orbitální moment hybnosti). Ve vynikajícím přiblížení si lze situaci zjednodušit tím, že se na elektron v atomu vodíku díváme jako na bezspinovou částici – jeho orbitální moment hybnosti se s časem nemění.

Vezmeme-li v úvahu všechna zmíněná přiblížení, lze amplitudu nalezení elektronu v různých bodech prostoru vyjádřit jako funkci polohy a času. Označme $\psi(x, y, z, t)$ amplitudu toho, že se elektron v čase t nachází v bodě $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Podle kvantové mechaniky je rychlost její časové změny dána působením Hamiltonova operátoru na ni samotnou. Ze 14. kapitoly víme, že

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (17.1)$$

kde

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}), \quad (17.2)$$

přičemž m je hmotnost elektronu a $U(\mathbf{r})$ je jeho potenciální energie v elektrostatickém poli protonu. Položíme-li při velkých vzdálenostech od protonu $U=0$, můžeme psát⁷⁹⁾

$$U = -\frac{e^2}{r}.$$

Vlnová funkce ψ pak musí vyhovovat rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e^2}{r} \psi. \quad (17.3)$$

Hledáme stavy s přesně určenou hodnotou energie, takže se pokusíme najít řešení ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-(i/\hbar)Et} \psi(\mathbf{r}). \quad (17.4)$$

Funkce $\psi(\mathbf{r})$ tedy musí splňovat rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi, \quad (17.5)$$

kde E je nějaká konstanta – energie atomu.

⁷⁹⁾ Jako obvykle $e^2 = q_e^2 / 4\pi \epsilon_0$.

Jelikož člen odpovídající potenciální energii závisí pouze na vzdálenosti r , ukazuje se, že je mnohem výhodnější řešit tuto rovnici ve sférických souřadnicích, než v kartézských. Tam je laplasián definován jako

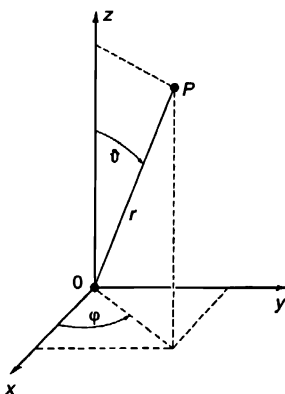
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

a chceme jej vyjádřit pomocí souřadnic r, ϑ, φ (obr. 17.1). Ty souvisejí s x, y, z vztahy

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

Vyžaduje to sice trochu únavný algebraický výpočet, ale můžete se přesvědčit, že pro libovolnou funkci $f(\mathbf{r}) = f(r, \vartheta, \varphi)$ platí

$$\nabla^2 f(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right\}.$$



Obr. 17.1 Sférické souřadnice r, ϑ, φ bodu P

Takže rovnice, jež musí $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ vyhovovat, vypadá ve sférických souřadnicích takto

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi. \quad (17.7)$$

17.2 SFÉRICKY SYMETRICKÁ ŘEŠENÍ

Nejdříve se pokusíme najít nějakou velmi jednoduchou funkci, která vyhovuje hrůzostrašné rovnici (17.7). Ačkoliv obecně bude vlnová funkce ψ záviset jak na úhlech ϑ a φ , tak i na poloměru r , můžeme se podívat na to, zda by nemohl existovat takový speciální případ, kde by ψ na úhlech *nezáviselo*. Pro takovou vlnovou funkci se žádná amplituda nijak nezmění otočíme-li soustavou souřadnic. To znamená, že všechny složky momentu hybnosti jsou rovny nule. Takové

ψ musí odpovídat stavu s nulovým celkovým momentem hybnosti. (Přesněji řečeno, jde tu o orbitální moment hybnosti, který musí být roven nule, protože stále ještě zbývá spin elektronu, ale ten nyní nebereme na vědomí.) Stav s nulovým orbitálním momentem hybnosti dostal speciální pojmenování. Nazývá se stav s ; zapamatujete si to snadno: s pro sféricky symetrický⁸⁰.

Nebude-li nyní ψ záviset na θ a φ , obsahuje celý laplasián jen první člen a rovnice (17.7) se značně zjednoduší

$$\frac{1}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi. \quad (17.8)$$

Dříve než začneme pracovat na řešení podobné rovnice, stojí za to zbavit se všech zbytečných konstant typu e^2 , m a \hbar , a to tak, že změníme měřítka. Usnadní nám to algebraické výpočty. Provedeme-li následující substituce

$$r = \frac{\hbar^2}{m e^2} \varrho \quad (17.9)$$

a

$$E = \frac{m e^4}{2\hbar^2} \varepsilon \quad (17.10)$$

rovnice (17.8) přejde na tvar (po vynásobení proměnnou ϱ)

$$\frac{d^2(\varrho\psi)}{d\varrho^2} = -\left(\varepsilon + \frac{2}{\varrho} \right) \varrho\psi. \quad (17.11)$$

Uvedené změny měřítka znamenají pouze tolik, že vzdálenost r a energii E měříme v násobcích „přirozených“ atomových jednotek. $\varrho = r/r_B$, kde $r_B = \hbar^2/m e^2$ se nazývá *Bohrův poloměr* a je roven přibližně 0,0528 nm. Podobně $\varepsilon = E/E_R$, kde $E_R = m e^4/2\hbar^2$. Tato energie dostala pojmenování Rydbergova energie a její velikost je asi 13,6 eV.

Protože součin $\varrho\psi$ se objevuje na obou stranách, je výhodnější pracovat raději s ním, než se samotným ψ . Označíme-li

$$\varrho\psi = f, \quad (17.12)$$

máme jednodušeji vypadající rovnici

$$\frac{d^2 f}{d\varrho^2} = -\left(\varepsilon + \frac{2}{\varrho} \right) f. \quad (17.13)$$

Nyní musíme najít nějakou funkci f , která vyhovuje rovnici (17.13); jinými slovy, je třeba vyřešit diferenciální rovnici. Bohužel, neexistuje obecná a za každých okolností použitelná metoda pro řešení libovolné diferenciální rovnice. S každou z nich je třeba trochu si pohrát. Ačkoliv naše rovnice nepatří mezi snadné, lidé přece zjistili, že ji lze vyřešit následujícím postupem. Zaprvé f , které je nějakou funkcí ϱ , nahradíme součinem dvou funkcí

$$f(\varrho) = e^{-\alpha\varrho} g(\varrho). \quad (17.14)$$

⁸⁰⁾

Jelikož jsou tyto speciální názvy součástí běžné slovní zásoby v atomové fyzice, budete se je muset naučit. My vám s tím však pomůžeme: O kousek dál v této kapitole je všechny shrneme v krátkém slovníčku.

Znamená to jen tolik, že z $f(\varrho)$ vytkneme faktor $e^{-\alpha\varrho}$. Docela určitě to lze provést pro libovolné $f(\varrho)$. V tomto případě se naší úlohou stane najít vhodnou funkci $g(\varrho)$.

Dosadíme-li do rovnice (17.13) vyjádření (17.14), dostaneme pro g tuto rovnici

$$\frac{d^2g}{d\varrho^2} - 2\alpha\frac{dg}{d\varrho} + \left(\frac{2}{\varrho} + \varepsilon + \alpha^2\right)g = 0. \quad (17.15)$$

Jelikož záleží pouze na nás, jak zvolíme α , vyberme

$$\alpha^2 = -\varepsilon, \quad (17.16)$$

čímž dojdeme k rovnici

$$\frac{d^2g}{d\varrho^2} - 2\alpha\frac{dg}{d\varrho} + \frac{2}{\varrho}g = 0. \quad (17.17)$$

Může se vám zdát, že na tom nejsme o moc lépe, než u rovnice (17.13), ale naštěstí to není pravda. Naše nová rovnice má tu dobrou vlastnost, že ji lze snadno vyřešit rozložením $g(\varrho)$ do mocninové řady podle ϱ . (Principiálně je možné takto postupovat i při řešení (17.13), ale je to mnohem složitější.) Říkáme, že rovnici (17.17) může vyhovovat nějaké $g(\varrho)$, které lze zapsat ve tvaru řady

$$g(\varrho) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varrho^k, \quad (17.18)$$

kde a_k jsou konstantní koeficienty. Jediné, co je třeba udělat, je najít vhodný nekonečný soubor koeficientů! Ověřme si, že takový zápis řešení má své oprávnění. První derivace uvedeného $g(\varrho)$ je

$$\frac{dg}{d\varrho} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \varrho^{k-1}$$

a druhá derivace zase

$$\frac{d^2g}{d\varrho^2} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k(k-1) \varrho^{k-2}.$$

Použijeme-li tyto výrazy v rovnici (17.17), máme

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k \varrho^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} 2\alpha k a_k \varrho^{k-1} + \sum_{k=1}^{\infty} 2 a_k \varrho^{k-1} = 0. \quad (17.19)$$

Na první pohled není zcela zřejmé, že jsme nějak uspěli, ale opravdu se propracováváme dopředu. Vše bude vypadat jasněji, nahradíme-li první sumaci nějakým jejím ekvivalentem. Protože první člen sumy je roven nule, můžeme každé k nahradit $k+1$ a na nekonečné řadě nic nezměníme. S touto úpravou lze první součet stejně dobře psát ve formě

$$\sum_{k=1}^{\infty} (k+1) k a_{k+1} \varrho^{k-1}.$$

Nyní můžeme všechny tři výrazy sloučit pod jeden sumační znak; dostaneme

$$\sum_{k=1}^{\infty} [(k+1)ka_{k+1} - 2\alpha ka_k + 2a_k] \varrho^{k-1} = 0. \quad (17.20)$$

Tato mocninová řada musí být rovna nule pro všechny možné hodnoty ϱ . To se může stát jedině tehdy, když je koeficient při každé mocnině ϱ roven nule. Řešení pro atom vodíku dostaneme, budeme-li umět najít takový soubor a_k , pro který

$$(k+1)ka_{k+1} - 2(\alpha k - 1)a_k = 0 \quad (17.21)$$

pro všechna $k \geq 1$. Sestrojit ho je opravdu jednoduché. Zvolme a_1 jaké chceme. Ostatní koeficienty vypočítáme ze vztahu

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} a_k. \quad (17.22)$$

Tak dostaneme a_2, a_3, a_4 atd., přičemž každá dvojice bude zajisté splňovat rovnici (17.21). $g(\varrho)$ bude vyjádřeno pomocí řady, která vyhovuje rovnici (17.17). S takovým $g(r)$ můžeme sestrojit vlnovou funkci ψ splňující Schrödingerovu rovnici. Všimněte si, že řešení závisí na předpokládané energii (přes α), ale pro každou hodnotu ε existuje odpovídající řada.

Řešení tedy máme, co však představuje fyzikálně? Představu o tom si můžeme udělat tak, že se podíváme, co se děje na velkých vzdálenostech od protonu – pro velké hodnoty ϱ . Tam hraji nejdůležitější úlohu členy vyššího řádu, proto bychom se měli podívat na to, jak to vypadá pro velká k . Je-li $k \gg 1$, je rovnice (17.22) prakticky totožná s rovnicí

$$a_{k+1} = \frac{2\alpha}{k} a_k,$$

což znamená, že

$$a_{k+1} \approx \frac{(2\alpha)^k}{k!}. \quad (17.23)$$

To jsou však přesně koeficienty mocninového rozvoje výrazu $e^{+2\alpha\varrho}$, g je tedy rychle rostoucí exponenciální funkce. I když ji vynásobíme $e^{-\alpha\varrho}$, abychom sestrojili $f(\varrho)$ (rovnice (17.14)), bude se pro velké $\varrho f(\varrho)$ stále chovat jako $e^{\alpha\varrho}$. Našli jsme matematické řešení, nikoliv fyzikální. Představuje takovou situaci, v níž bude mít elektron *zanedbatelnou* pravděpodobnost ocitnout se blízko protonu! Vždy bude existovat větší šance, že na něj narazíme při velkém poloměru r . Vlnová funkce *vázaného* elektronu se musí pro velké ϱ blížit nule.

Musíme uvažovat, zda neexistuje přece jen nějaký způsob, jak se z této nepříjemné situace dostat ven. Ukazuje se, že jeden se opravdu najde. Podívejte! Kdyby šťastnou náhodou bylo α rovno $1/n$, kde n je libovolné přirozené číslo, vyplynulo by z rovnice (17.22), že $a_{n+1} = 0$. Všechny členy vyššího řádu by byly také nulové. Nedostali bychom nekonečnou řadu, ale konečný polynom. Libovolná polynomická funkce roste pomaleji než $e^{\alpha\varrho}$, takže člen $e^{-\alpha\varrho}$ ji nakonec srazí dolů a funkce f se pro velká ϱ bude blížit nule. Jediná řešení pro *vázané stavy* jsou ta, pro něž $\alpha = 1/n$, kde $n = 1, 2, 3, 4$ atd.

Podíváme-li se opět na rovnici (17.16), vidíme, že pro sféricky symetrickou vlnovou rovnici mohou existovat řešení pro vázané stavy pouze tehdy, když

$$-\varepsilon = 1, \frac{1}{4}, \frac{1}{9}, \frac{1}{16}, \dots, \frac{1}{n^2}, \dots$$

Povolené hodnoty energie představují právě takovéto zlomky Rydbergovy energie $E_R = m e^4 / 2 \hbar^2$; energie n -té energetické hladiny je

$$E_n = -E_R \frac{1}{n^2}. \quad (17.24)$$

Mimochodem na tom, že energie nabývají záporných hodnot, není nic záhadného. Je to proto, že když jsme se rozhodli napsat $U = \frac{-e^2}{r}$, zvolili jsme za nulový bod energii elektronu nacházejícího se daleko od protonu. Je-li u něj blízko, jeho energie klesne, tj. je menší než nula. Energie je nejmenší (nejzápornější) pro $n=1$ a s rostoucím n stoupá k nule.

Ještě před objevením kvantové mechaniky bylo z experimentálního studia spektra atomu vodíku známo, že energetické hladiny lze popsat rovnicí (17.24), přičemž E_R , jak to vyplývá z měření, je rovno asi 13,6 eV. Tehdy se v Bohrově hlavě zrodil model, který vedl k téže rovnici a předpověděl, že E_R má být $m e^4 / 2 \hbar^2$. Prvním velkým úspěchem Schrödingerovy teorie bylo, že dokázala zreprodukovat tento výsledek vycházející ze základní rovnice pro pohyb elektronu.

Nyní, když jsme vyřešili náš první atom, si blíže všimneme vlastnosti řešení, které jsme dostali. Složíme-li všechny části dohromady, bude mít každé řešení takovýto tvar

$$\psi_n(\varrho) = \frac{f_n(\varrho)}{\varrho} = \frac{e^{-\varrho/n}}{\varrho} g_n(\varrho), \quad (17.25)$$

kde

$$g_n(\varrho) = \sum_{k=1}^n a_k \varrho^k \quad (17.26)$$

a

$$a_{k+1} = \frac{2(k/n - 1)}{k(k+1)} a_k. \quad (17.27)$$

Pokud nás zajímají zejména relativní pravděpodobnosti najít elektron na různých místech, můžeme si za a_1 zvolit libovolné číslo. Položíme $a_1 = 1$. (Obvykle se a_1 vybírá tak, že po integrování je pravděpodobnost narazit na elektron kdekoli v prostoru rovna 1. Není nutné, abychom nyní takovým způsobem postupovali.)

Stavu s nejnižší energií náleží $n=1$ a

$$\psi_1(\varrho) = e^{-\varrho}. \quad (17.28)$$

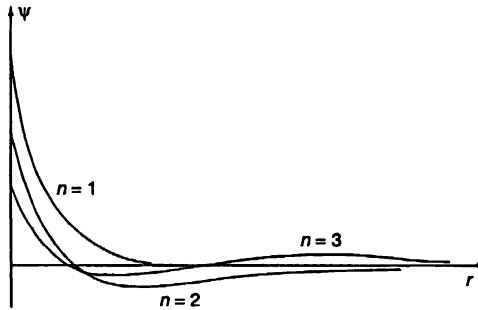
Je-li vodíkový atom v základním stavu (tj. stavu s nejnižší energií), klesá amplituda výskytu elektronu v libovolném bodě exponenciálně se vzdáleností od protonu. S největší pravděpodobností jej objevíme přímo u protonu; charakteristická vzdálenost je zhruba $\varrho=1$, neboli asi jeden Bohrovův poloměr r_B .

Položíme-li $n=2$, dostaneme další energetickou hladinu. Vlnová funkce tohoto stavu sestává ze dvou členů. Má tvar

$$\psi_2(\varrho) = \left(1 - \frac{\varrho}{2}\right) e^{-\varrho/2}. \quad (17.29)$$

Vlnová funkce pro následující hladinu vypadá takto

$$\psi_3(\varrho) = \left(1 - \frac{2\varrho}{3} + \frac{2}{27}\varrho^2\right) e^{-\varrho/3}. \quad (17.30)$$



Obr. 17.2 Vlnové funkce prvních tří stavů atomu vodíku s $l=0$. (Měřítka jsou zvolena tak, že celkové pravděpodobnosti jsou si navzájem rovny.)

Všechny tři jsou znázorněny na obr. 17.2. Obecnou tendenci už lze vypořadovat. Každá vlnová funkce několikrát osciluje a pro velká ϱ se rychle blíží nule. Ve skutečnosti je počet „hrbů“ roven číslu n , nebo je-li vám to bližší, funkce ψ_n protne nulovou osu $(n-1)$ -krát.

17.3 STAVY S ÚHLOVOU ZÁVISLOSTÍ

Zjistili jsme, že ve stavech s popsányými funkcemi $\psi_n(r)$ je amplituda pravděpodobnosti nalezené elektronu sféricky symetrická; závisí pouze na r , vzdálenosti od protonu. Takové stavy mají nulový orbitální moment hybnosti. Nyní si povíme něco o stavech, které mohou projevoval nějaké úhlové závislosti.

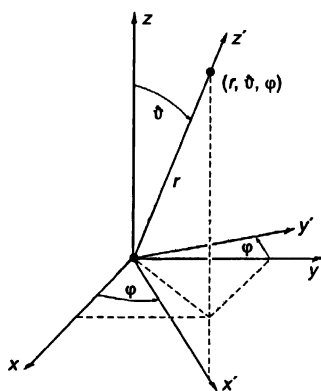
Pokud bychom chtěli, mohli bychom se věnovat čistě matematické úloze najít funkce proměnných r , ϑ , a φ , které vyhovují diferenciální rovnici (17.7); z fyzikálního hlediska bychom však zavedli dodatečnou podmínku, že přijatelnými by pro nás byly jen ty, které se pro velká r blíží nule. S takovým postupem se setkáte v mnoha učebnicích. My si celou věc zkrátíme tím, že využijeme získané poznatky týkající se prostorové závislosti amplitud na úhlech.

Atom vodíku v libovolném stavu je částice s určitým „spinem“ j – kvantovým číslem celkového momentu hybnosti. Část tohoto spinu pochází z vnitřního spinu elektronu a část z pohybu elektronu. Jelikož každá z obou těchto složek působí nezávisle na druhé (ve vynikajícím přiblížení), opět zanedbáme spinovou část a budeme brát v úvahu jen orbitální moment hybnosti. Tento orbitální pohyb se však chová podobně jako spin. Je-li např. orbitální kvantové číslo rovno l , může z -ová složka momentu hybnosti nabývat hodnot $l, l-1, l-2, \dots, -l$ (jako obvykle měřeno v jednotkách \hbar .) Také se pro něj hodí všechny přednedávne odvozené rotační matice a jiné vlastnosti. (Od této chvíle *opravdu* začneme spin elektronu zanedbávat; budeme-li hovořit o momentu hybnosti, budeme mít na mysli jen jeho orbitální složku.)

Jelikož potenciál U , v němž se elektron pohybuje, závisí pouze na r , a ne na ϑ a φ , je hamiltonián symetrický vzhledem ke každé rotaci. Z toho vyplývá, že moment hybnosti a všechny jeho složky se zachovávají. (To platí pro pohyb v libovolném centrálním poli – takovém, které závisí jedině na r – takže to není speciální vlastnost Coulombova potenciálu e^2/r .)

Nyní uvažujme nějaký možný stav elektronu; jeho vnitřní úhlová struktura bude charakterizována kvantovým číslem l . V závislosti na orientaci celkového momentu hybnosti vzhledem k ose z bude jeho z -ová složka m nabývat jedné z $2l + 1$ možných hodnot mezi $+l$ a $-l$. Řekněme, že $m = 1$. S jakou pravděpodobností najdeme elektron v nějaké vzdálenosti na ose z s nulovou. Elektron na z -ové ose *nemůže* mít žádný orbitální moment hybnosti vzhledem k této ose. V pořádku, předpokládejme, že m je rovno nule; pak může existovat určitá nenulová amplituda toho, že se elektron objeví na ose z v nějaké vzdálenosti od protonu. Tuto amplitudu označíme $F_l(r)$. Je to amplituda toho, že elektron najdeme ve vzdálenosti r na ose z , je-li atom ve stavu $|l, 0\rangle$, čímž rozumíme orbitální moment hybnosti l a jeho z -ovou složku $m = 0$.

Známe-li $F_l(r)$, víme vlastně všechno. Pro libovolný stav $|l, m\rangle$ dokážeme říci, jak vypadá amplituda $\psi_{l,m}(r)$ zastížení elektronu na *jakémkoliv* místě v atomu. Jak? Sledujte. Uvažujme atom ve stavu $|l, m\rangle$; jaká je amplituda toho, že najdeme elektron pro úhly ϑ , φ a ve vzdálenosti r od počátku? Položme ve směru definovaném oběma úhly novou osu z' (obr. 17.3), a ptejme se, jaká bude amplituda objevení elektronu ve vzdálenosti r na této ose? Víme, že se na ní nemůže nacházet, pokud jeho z' -ová složka hybnosti, např. m' , není rovna nule. Je-li však m' nulové, je uvedená amplituda právě $F_l(r)$. Výsledek lze proto vyjádřit ve tvaru součinu dvou činitelů. První z nich je amplituda toho, že atom se ve stavu $|l, m\rangle$ vzhledem k z ocitne ve stavu $|l, m' = 0\rangle$ vzhledem k z' . Vynásobíme je $F_l(r)$ a dostaneme amplitudu $\psi_{l,m}(r)$ toho, že elektron najdeme v bodě (r, ϑ, φ) vzhledem k původním osám.



Obr. 17.3 Bod (r, ϑ, φ) leží na ose z' soustavy $x' y' z'$

To, co jsme si takto slovně popsali, nyní zapíšeme. Už dříve jsme si odvodili rotační transformační matice. Abychom přešli od soustavy souřadnic x, y, z k souřadnicím x', y', z' na obr. 17.3, můžeme provést nejdříve otočení kolem osy z o úhel φ , a pak rotaci kolem nové osy y (y') o úhel ϑ . Toto složené otočení je součinem

$$R_y(\vartheta) R_z(\varphi).$$

Amplituda najít po rotaci stav $|l, m' = 0\rangle$ je

$$\langle l, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | l, m \rangle. \quad (17.31)$$

Náš výsledek pak bude

$$\psi_{l,m}(r) = \langle l, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | l, m \rangle F_l(r). \quad (17.32)$$

Orbitální pohyb může vést jen k celočíselným hodnotám l (Je-li možné elektron najít v libovolném bodě, pro který $r \neq 0$, existuje určitá amplituda toho, že v tomto směru bude mít $m = 0$. A stav s $m = 0$ existuje jen pro celočíselné spiny.) Rotační matice pro $l = 1$ jsou shrnuty v tab. 15.2. Pro vyšší hodnoty l lze použít obecné vztahy odvozené v 16. kapitole. Matice $R_z(\varphi)$ a $R_y(\vartheta)$ tam stojí samostatně, ale víme, jak je třeba je složit. V obecném případě bychom matici $R_z(\varphi)$ působili na stav $|l, m\rangle$, čímž bychom dostali nový stav $R_z(\varphi)|l, m\rangle$. Na něj bychom zase aplikovali matici $R_y(\vartheta)$ a došli bychom tak ke stavu $R_y(\vartheta)R_z(\varphi)|l, m\rangle$ (což je vlastně $e^{im\varphi}|l, m\rangle$). Vynásobením zleva bra-vektorem $\langle l, 0|$ dospějeme k maticovému elementu (17.31).

Maticové elementy operace rotace jsou algebraické funkce úhlů ϑ a φ . Ty konkrétní funkce, které se objevují ve výrazech (17.31), se vyskytují také v mnoha jiných úlohách, zahrnujících vlny na kulové ploše. Lidé jim vymysleli speciální pojmenování. Ne každý se drží téže konvence, ale jedna z nejběžnějších je tato

$$\langle l, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | l, m \rangle = a Y_{l, m}(\vartheta, \varphi). \quad (17.33)$$

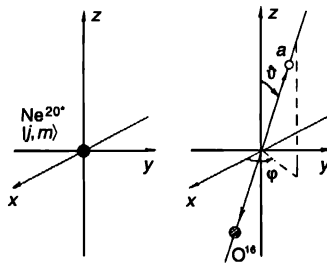
Funkce $Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$ se nazývají *kulové (sférické) funkce* a je číselný součinitel, který závisí na definici, jakou zvolíme pro $Y_{l, m}$. V případě obvyklého způsobu definice je

$$a = \sqrt{\frac{4}{2l+1}}. \quad (17.34)$$

Vlnové funkce atomu vodíku lze v tomto označení psát ve tvaru

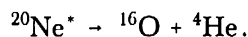
$$\psi_{l, m}(r) = Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) F_l(r). \quad (17.35)$$

Sférické funkce $Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$ sehrávají důležitou úlohu nejen v početních kvantové mechanických úlohách, ale i v mnoha oblastech klasické fyziky, jako např. v elektromagnetizmu, kde se setkáváme s Laplaceovým operátorem ∇^2 .



Obr. 17.4 Rozpad excitovaného stavu ^{20}Ne

Uvedeme další příklad jejich použití v kvantové mechanice. Uvažujme rozpad excitovaného stavu $^{20}\text{Ne}^*$ (takový, jaké jsme rozebírali v předcházející kapitole), při němž je emitována částice α a vzniká jádro ^{16}O :



Předpokládejme, že excitovaný stav má nějaký spin l (nutně celočíselný) a že jeho z -ová složka je rovna m . Mohli bychom si položit takovou otázku: Jsou-li dány l a m , jaká je amplituda toho, že částice α vyletí ve směru svírajícím s osou z úhel ϑ a s rovinou xz úhel φ obr. 17.4)?

Vyřešit uvedenou úlohu nám pomůže následující úvaha. Rozpad v jehož důsledku částice α směřuje přímo nahoru podél osy z , musí probíhat ze stavu $s\ m=0$, protože ^{16}O i ^4He mají nulový spin a jejich pohyb nemůže přispívat k momentu hybnosti vzhledem k ose z . Tuto amplitudu označme a (na jednotkový prostorový úhel). Pak abychom našli amplitudu rozpadu pod libovolným úhlem (obr. 17.4), stačí nám vědět jen to, s jakou amplitudou bude mít daný počáteční stav nulový moment hybnosti vzhledem ke směru rozpadu. Amplituda rozpadu pod úhly ϑ a φ pak bude rovna a -násobku amplitudy toho, že se stav $|l\ m\rangle$ vzhledem k ose z ocitne ve stavu $|l\ 0\rangle$ vzhledem k ose z' ležící ve směru rozpadu. Tato druhá amplituda není nic jiného než výraz (17.31). Pravděpodobnost vidět částici α pod úhly ϑ , φ je dána jako

$$P(\vartheta, \varphi) = a^2 |\langle l\ 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | l\ m \rangle|^2.$$

Pro ilustraci uvažujme počáteční stav s $l=1$ a různé hodnoty m . Pomocí tab. 15.2 získáme potřebné amplitudy. Jsou to

$$\begin{aligned} \langle 1, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | 1, +1 \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \\ \langle 1, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | 1, 0 \rangle &= \cos \vartheta \\ \langle 1, 0 | R_y(\vartheta) R_z(\varphi) | 1, -1 \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (17.36)$$

To jsou tři možná úhlová rozdělení závisející na hodnotě m počátečního jádra.

S amplitudami jako (17.36) se setkáváme tak často a jsou natolik důležité, že dostaly několik pojmenování. Je-li amplituda úhlového rozdělení úměrná libovolné z uvedených tří funkcí nebo jakékoliv jejich lineární kombinaci, říkáme: „Orbitální moment hybnosti soustavy je roven jedné.“ Nebo můžeme říci: „ $^{20}\text{Ne}^*$ emituje částici α ve tvaru vlny p .“ Nebo ještě jinak: „Částice α je emitována ve stavu $l=1$.“ Protože existuje mnoho způsobů, jak říci jedno a totéž, je užitečné mít po ruce slovníček. Chcete-li porozumět tomu, o čem se baví ostatní fyzici, nezbyde vám nic jiného, než se jejich jazyk naučit. Tab. 17.1 představuje slovníček orbitálního momentu hybnosti.

Je-li orbitální moment roven nule, nic se nezmění, otočíme-li soustavou souřadnic; závislost na úhlu chybí, má tvar konstanty, řekněme 1. Tento případ se nazývá stav s a pokud se týká jen úhlové závislosti, existuje takovýto stav jen jeden. Je-li orbitální moment hybnosti 1, lze amplitudu úhlového rozdělení vyjádřit ve tvaru libovolné ze tří uvedených funkcí (v závislosti na hodnotě m), nebo jakoukoliv jejich lineární kombinací. Nazýváme je stavy p , a jsou celkem tři. Je-li orbitální moment hybnosti roven 2, existuje takovýchto funkcí pět. Jejich libovolná lineární kombinace se nazývá amplituda pro $l=2$ nebo amplituda ve tvaru vlny d . Nyní už dokážeme ihned uhodnout, jaké bude příští písmeno. Co následuje po s , p , d ? Samozřejmě, že f , g , h a tak dále podle abecedy! Písmena nic neznamenaají. (Kdysi se jim určitý význam připisoval – znamenala ostrou (sharp), hlavní (principal), difúzní (diffuse) a základní (fundamental) sérii čar optických spekter atomů. Ale to bylo ještě v časech, kdy lidé nevěděli, odkud čáry pocházejí. Po písmenu f už zvláštní pojmenování nebylo, takže nyní prostě pokračujeme s g , h atd.)

Tabulka 17.1: Slovník orbitálního momentu hybnosti

Orbitální moment hybnosti l	z-ová složka m	Úhlová závislost amplitud	Jméno	Počet stavů	Orbitální parita
0	0	1	s	1	1
1	+1	$-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$	p	3	-1
	0	$\cos \vartheta$			
	-1	$\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$			
2	+2	$\frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$	d	5	1
	+1	$\frac{\sqrt{6}}{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$			
	0	$\frac{1}{2} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$			
	-1	$-\frac{\sqrt{6}}{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi}$			
	-2	$\frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi}$			
345	}	$\langle l, 0 R_y(\vartheta) R_z(\varphi) l, m \rangle$	f	2l+1	$(-1)^l$
		$= Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$	g		
		$= P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$	h		
⋮	⋮		⋮		
⋮	⋮		⋮		
⋮	⋮		⋮		

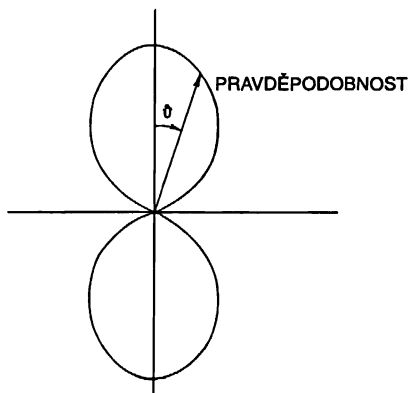
Poznámka: $j = l = \text{celé číslo}$

V tabulce uvedené úhlové funkce jsou známy pod několika jmény a jejich definování se někdy trochu liší číselnými faktory stojícími vpředu. Občas se nazývají kulové funkce a zapisují se jako $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$. Někdy je vyjadřují ve tvaru $P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$, a je-li $m = 0$, prostě jako $P_l(\cos \vartheta)$. Funkce $P_l(\cos \vartheta)$

se nazývají Legendrovy polynomy podle $\cos \vartheta$ a funkce $P_l^m(\cos \vartheta)$ jsou tzv. přidružené Legendrovy funkce. Tabulky těchto funkcí najdete v mnoha knížkách.

Mimochodem, všimněme si, že pro dané l mají všechny funkce tutéž paritu; pro lichá l při prostorové inverzi mění znaménko a pro sudá l je neměnné. Můžeme tedy psát, že parita stavu s orbitálním momentem l je $(-1)^l$.

Jak jsme viděli, tato úhlová rozdělení se mohou vztahovat k rozpadu jádra nebo nějakému jinému procesu, či k rozdělení amplitudy nalezení elektronu na nějakém místě v atomu vodíku. Je-li např. elektron ve stavu $p(l=1)$, může amplituda jeho objevení záviset na úhlu mnoha způsoby – všechny jsou však lineárními kombinacemi tří funkcí uvedených v tab. 17.1 při $l=1$. Vezměme si případ $\cos \vartheta$. Ten je zajímavý. Znamená to, že amplituda je kladná v horní části ($\vartheta < \pi/2$), záporná v dolní ($\vartheta > \pi/2$) a rovna nule pro $\vartheta = 90^\circ$. Umocníme-li ji na druhou, vidíme, že pravděpodobnost nalezení elektronu se mění s ϑ tak, jak je naznačeno na obr. 17.5 – a nezávisí na φ . Toto úhlové rozdělení je odpovědné za tu skutečnost, že v molekulové vazbě závisí přitahování elektronu ve stavu s $l=1$ k jinému atomu na směr. Zde má svůj původ směrová vazebnost chemické přitažlivosti.



Obr. 17.5 Graf funkce $\cos^2 \vartheta$ v polárních souřadnicích, který znázorňuje relativní pravděpodobnost nalezení elektronu pod různými úhly vzhledem k ose z (pro dané r), je-li atom ve stavu s $l=1$ a $m=0$

17.4 OBECNÉ ŘEŠENÍ PRO ATOM VODÍKU

V rovnici (17.35) jsme vlnové funkce atomu vodíku psali ve tvaru

$$\psi_{l,m}(r) = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) F_l(r). \quad (17.37)$$

Tyto funkce musejí být řešenými diferenciální rovnice (17.7). Podívejme se, co to znamená. Dosadíme (17.37) do (17.7); dostaneme

$$\frac{Y_{l,m}}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r F_l) + \frac{F_l}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \vartheta} \right) + \frac{F_l}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) Y_{l,m} F_l. \quad (17.38)$$

Nyní vynásobme celou rovnici výrazem r^2/F_l a uspořádejme jinak její členy. Výsledek bude

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial \varphi^2} = - \left\{ \frac{r^2}{F_l} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r F_l) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) F_l \right] \right\} Y_{l,m}. \quad (17.39)$$

Levá strana této rovnice závisí pouze na ϑ a φ , ale ne na r . Bez ohledu na to, jakou hodnotu r zvolíme, se levá strana nezmění. *Totéž musí platit i pro pravou stranu.* Ačkoliv ve veličině ve složených závorkách narazíme na r na každém kroku, jako celek na r záviset nemůže, neboť jinak by naše rovnice neplatila pro všechna r . Jak je vidět, složená závorka není ani funkcí ϑ a φ . Musí to být nějaká konstanta. Její hodnota však může souviset s hodnotou l stavu, který studujeme, jelikož funkce F_l mu musí odpovídat; tuto konstantu proto označíme K_l . Rovnice (17.39) je proto ekvivalentní dvěma rovnicím

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial \varphi^2} = -K_l Y_{l,m} \quad (17.40)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r F_l) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) F_l = K_l \frac{F_l}{r^2}. \quad (17.41)$$

Podívejme se nyní na to, co jsme udělali. Pro libovolný stav popsáný čísly l a m známe funkce $Y_{l,m}$; pro určení konstanty K_l můžeme použít rovnici (17.40). Dosadíme-li ji do rovnice (17.41), získáme diferenciální rovnici pro funkci $F_l(r)$. Dokážeme-li ji vyřešit, budou nám známy všechny součinitel v rovnici (17.37), a tedy i vlnová funkce $\psi(r)$.

Čemu je rovno K_l ? Zaprvé si všimněte, že musí být stejné pro všechna m (patřící danému l), takže pro $Y_{l,m}$, které dosadíme do (17.40), abychom z něj zjistili K_l , si můžeme vybrat m , jaké se nám zlíbí. Snad nejjednodušší bude použít $Y_{l,l}$. Z rovnice (16.24) máme

$$R_z(\varphi) |l, l\rangle = e^{il\varphi} |l, l\rangle. \quad (17.42)$$

Maticový element pro $R_y(\vartheta)$ také není složitý

$$\langle l, 0 | R_y(\vartheta) |l, l\rangle = b (\sin \vartheta)^l, \quad (17.43)$$

kde b je nějaké číslo.⁸¹⁾ Složením obou výrazů dostaneme

$$Y_{l,l} \sim e^{il\varphi} \sin^l \vartheta. \quad (17.44)$$

⁸¹⁾ S vynaložením určité námahy lze ukázat, že to vyplývá z rovnice (16.35), ale jde to snadno odvodit i ze základních principů, budeme-li postupovat podle myšlenek vysvětlených ve stati 16.4. Stav $|l, l\rangle$ lze vytvořit z $2l$ částic se spinem $1/2$, přičemž všechny spiny směřují nahoru; stav $|l, 0\rangle$ by měl l spinů nahoru a l dolů. Při rotaci je amplituda toho, že spin nahoru zůstane spinem nahoru, rovna $\cos \vartheta/2$, a amplituda toho, že se překlápí dolů, je $\sin \vartheta/2$. Ptejme se na amplitudu toho, že l spinů nezmění orientaci nahoru a zbývajících l spinů ji převrátí do opačného směru. Amplituda tohoto procesu je úměrná $(\cos \vartheta/2 \sin \vartheta/2)^l$, tedy vlastně výrazu $\sin^l \vartheta$.

Dosaříme-li tuto funkci do (17.40), dojdeme k tomu, že

$$K_l = l(l+1). \quad (17.45)$$

Nyní, když jsme určili K_l , rovnice (17.41) nám odhalí radiální funkci $F_l(r)$. Je to, samozřejmě, obyčejná Schrödingerova rovnice, v níž je úhlová část nahrazena jejím ekvivalentem $K_l F_l / r^2$. Přepíšeme rovnici (17.41) do tvaru, v jakém jsme uvedli rovnici (17.8):

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rF_l) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right\} F_l \quad (17.46)$$

U potenciální energie se objevil záhadný člen. Ačkoliv jsme k němu dospěli poměrně zdlouhavým matematickým postupem, má jednoduchý fyzikální původ. Na myšlenku, odkud se tam bere, vás můžeme přivést pomocí poloklasického argumentu. Snad se vám potom už tak tajemný zdát nebude.

Uvažujme klasickou částici pohybující se kolem nějakého silového centra. Celková energie se zachovává a je rovna součtu potenciální a kinetické energie

$$W = U(r) + \frac{1}{2} m v^2 = \text{konst.}$$

Obecně lze rychlost v rozložit na radiální složku v_r a tangenciální složku $r\dot{\phi}$; pak

$$v^2 = v_r^2 + (r\dot{\phi})^2.$$

Moment hybnost $mr^2\dot{\phi}$ se také zachovává; nechť je roven L . Proto můžeme psát

$$mr^2\dot{\phi} = L, \quad \text{nebo} \quad r\dot{\phi} = \frac{L}{mr}.$$

Energii lze vyjádřit jako

$$W = \frac{1}{2} m v_r^2 + U(r) + \frac{L^2}{2mr^2}.$$

Kdyby moment hybnosti chyběl, zbyly by nám pouze první dva členy. Jeho přidáním se energie změní tak, jako kdybychom potenciální energii rozšířili o člen $L^2/2mr^2$. Ale ten je téměř zcela shodný s nově objeveným dodatkovým výrazem v (17.46). Jediný rozdíl je v tom, že místo $l^2\hbar^2$ (jak bychom očekávali) za moment hybnosti vystoupí $l(l+1)\hbar^2$. Už dříve jsme však viděli (např. ve stati 34.7, díl 2) že obvykle je třeba vykonat právě takovou substituci, abychom sjednotili kvazi-klasická odvození se správným kvantově mechanickým výpočtem. Nový člen můžeme proto chápat jako nějaký „pseudopotenciál“ odpovědný za vznik „odstředivé síly“ a vystupující v rovnicích pro radiální pohyb rotující soustavy, (viz diskuze o nepravých silách ve stati 12.5, díl 1.)

Nyní jsme už schopni vyřešit rovnici (17.46) pro $F_l(r)$. Je velmi podobná rovnici (17.8), takže se opět uplatní tentýž postup. Vše půjde tak jako předtím, dokud se nedostaneme k rovnici (17.19), která bude obsahovat dodatečný výraz

$$-l(l+1) \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varrho^{k-2}. \quad (17.47)$$

Ten lze napsat i takto

$$-l(l+1) \left\{ \frac{a_1}{\varrho} - \sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1} \varrho^{k-1} \right\} \quad (17.48)$$

(Ze sumace jsme vybrali první sčítanec, vypsalí jsme jej zvlášť a posunuli jsme index k dolů o 1.) Místo rovnice (17.20) máme

$$\sum_{k=1}^{\infty} \{ [k(k+1) - l(l+1)] a_{k+1} - 2(\alpha k - 1) a_k \} \varrho^{k-1} - \frac{l(l+1) a_1}{\varrho} = 0. \quad (17.49)$$

Člen řádu ϱ^{-1} je pouze jeden, proto musí být roven nule. Koeficient a_1 tedy musí být nulový (za předpokladu, že $l \neq 0$; v opačném případě dojdeme k našemu předcházejícímu řešení). Pokud pro každé k , nabude výraz ve složené závorce nulové hodnoty, budou rovny nule i všechny ostatní členy. V důsledku toho přejde podmínka (17.21) do tvaru

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k. \quad (17.50)$$

To je jediná významná změna oproti sféricky symetrickému případu.

Chceme-li tak jako předtím dostat řešení, která mohou reprezentovat vázané elektrony, nesmí mít řada nekonečně mnoho členů. Skončí při $k=n$, je-li $\alpha n = 1$. Opět nacházíme tutéž podmínku, že α musí být rovno $1/n$, kde n je nějaké celé číslo. Rovnice (17.50) však v sobě skrývá ještě jedno nové omezení. Index k nemůže být roven l , neboť jmenovatel by byl nulový a a_{l+1} nekonečně velké. Jelikož $a_1 = 0$, vyplývá z rovnice (17.50), že všechny následující koeficienty a_k jsou rovny nule, dokud nedojdeme k a_{l+1} , které může být od nuly různé. To znamená, že k musí začít u $l+1$ a končit u n .

Naším konečným výsledkem tedy je, že pro libovolné l existuje mnoho možných řešení, které označíme $F_{n,l}$, kde $n \geq l+1$. Každému řešení přísluší energie

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} \right). \quad (17.51)$$

Vlnová funkce stavu s takovouto energií a úhlovými kvantovými čísly l a m vypadá takto

$$\psi_{n,l,m} = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) F_{n,l}(\varrho), \quad (17.52)$$

kde

$$\varrho F_{n,l}(\varrho) = e^{-\alpha \varrho} \sum_{k=l+1}^n a_k \varrho^k. \quad (17.53)$$

Koeficienty a_k jsou určeny rovnicí (17.50). Tak jsme nakonec dospěli k úplnému popisu stavů atomu vodíku.

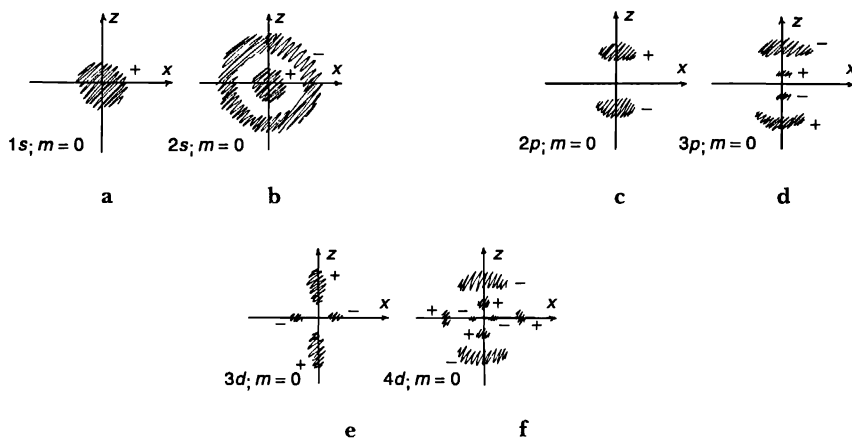
17.5 VLNOVÉ FUNKCE ATOMU VODÍKU

Zopakujme si, k čemu jsme dospěli. Stavů vyhovujících Schrödingerově rovnici pro elektron v Coulombově poli jsou charakterizovány třemi celočíselnými kvantovými čísly n , l , m . Úhlové rozdělení amplitudy elektronu může nabývat pouze určitých forem, jež označujeme $Y_{l,m}$. Index l se nazývá *kvantové číslo orbitálního momentu hybnosti* a m *magnetické kvantové číslo*, které leží v rozmezí od $-l$ do $+l$. Pro každou úhlovou konfiguraci existují různá možná radiální rozdělení $F_{n,l}(r)$ amplitudy elektronu; jsou označena *hlavním kvantovým číslem* n , které nabývá hodnot od $l+1$ do ∞ . Energie stavu závisí pouze na n a se stoupajícím n roste.

Stav s nejnižší energií, tzv. základní stav, je stav s . Má $l=0$, $n=1$ a $m=0$. Je to nedegenerovaný stav – existuje pouze jeden jediný s takovou energií a jeho vlnová funkce je sféricky symetrická. Amplituda nalezení elektronu nabývá maximální hodnoty na počátku soustavy souřadnic a monotónně klesá s rostoucí vzdáleností. Tuto amplitudu lze zobrazit malou kaňkou (obr. 17.6a).

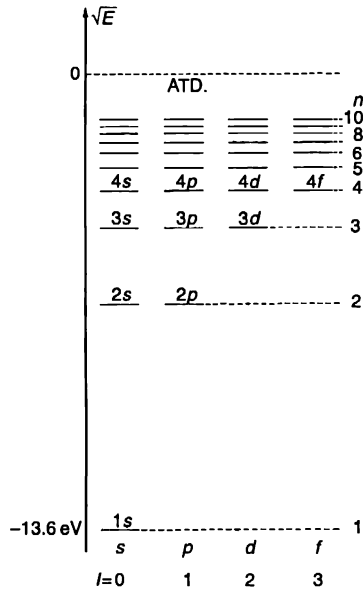
Existují jiné stavy s s vyššími energiemi pro $n=2,3,4,\dots$ a $l=0$. Každé energii náleží pouze jeden stav ($m=0$) a všechny jsou sféricky symetrické. Jejich amplitudy mění znaménko jednou nebo víckrát s rostoucím r . Existuje $n-1$ sférických uzlových ploch, tj. míst, kde ψ prochází nulou. Například stav $2s$ ($l=0$, $n=2$) bude vypadat tak, jak je ukázáno na obr. 17.6b. (Tmavá místa vyznačují oblasti s velkou amplitudou a znaménka plus a minus vyjadřují relativní fáze amplitudy.) Energetické hladiny stavů s jsou naznačeny v prvním sloupci obr. 17.7.

Pak tu máme stavy p s $l=1$. Každému n , které musí být větší, nanejvýš rovno 2, přísluší tři stavy s touž energií, po jednom pro $m=+1$, $m=0$ a $m=-1$. Energetické hladiny jsou zakresleny na obr. 17.7. Úhlové závislosti těchto stavů udává tab. 17.1.



Obr. 17.6 Přibližné náčrtky znázorňující obecný charakter některých vlnových funkcí atomu vodíku. Tmavé plochy naznačují oblasti, v nichž amplitudy nabývají velkých hodnot. Znaménka plus a minus vyjadřují relativní fáze amplitudy v každé oblasti

Například pro $m=0$, je-li amplituda pro ϑ blízké nule kladná, bude pro ϑ kolem 180° záporná. Uzlová rovina je totožná s rovinou xy . Pro $n>2$ také existují sférické uzlové plochy. Amplituda pro $n=2$, $m=0$ je naznačena na obr. 17.6c a vlnová funkce pro $n=3$, $m=0$ zase na obr. 17.6d.



Obr. 17.7 Diagram energetických hladin atomu vodíku

Mohli byste si myslet, že jelikož m představuje určitý druh orientace v prostoru, měli bychom pozorovat podobná rozdělení s vrcholy podél os x a y . Jsou snad to stavy $m = +1$ a $m = -1$? Ne, nejsou. Protože však máme tři stavy se stejnými energiemi, budou i jejich libovolné lineární kombinace stacionárními stavy s touž energií. Ukazuje se, že „ x “-ový stav, odpovídající stavu „ z “ (nebo stavu s $m = 0$) na obr. 17.6c, je lineární kombinací stavů $m = +1$ a $m = -1$. Odpovídající „ y “-ový stav je jinou kombinací. Přesněji řečeno, stavy

$$\text{„}z\text{“} = |1, 0\rangle$$

$$\text{„}x\text{“} = \frac{|1, +1\rangle + |1, -1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\text{„}y\text{“} = \frac{|1, +1\rangle - |1, -1\rangle}{\sqrt{2}}$$

vypadají stejně, vztahujeme-li je k jejich osám.

Stavy $d(l=2)$ mají pro každou hodnotu energie pět možných hodnot m , nejnižší energii odpovídá $n = 3$. Hladiny po sobě následují tak, jako na obr. 17.7. Úhlové závislosti se stávají složitějšími. Například pro stavy $m = 0$ vystupují dvě kuželovité uzlové plochy, takže pohybujeme-li se od severního pólu k jižnímu, mění vlnová funkce fázi z $+$ na $-$ a opět na $+$. Přibližný tvar amplitud stavů $n = 3$, $m = 0$ a $n = 4$, $m = 0$ je znázorněn v částech e a f obr. 17.6. Při větších hodnotách n se opět objevují sférické uzlové plochy.

Nebudeme se pokoušet popisovat žádné další možné stavy. Podrobnější výklad vlnových funkcí vodíku najdete v mnoha učebnicích. Dvě z nich vám osobně doporučujeme: Pauling L., Wilson E. B. *Introduction to Quantum Mechanics*, Mc Graw-Hill (1935) a Leighton R. B.: *Principles of Modern*

Physics, Mc Graw-Hill (1959). Najdete v nich grafy některých funkcí a grafické znázornění mnoha stavů.

Rádi bychom zmínili jednu zvláštní vlastnost vlnových funkcí pro vyšší l . Pro $l > 0$ jsou amplitudy v počátku soustavy souřadnic rovny nule. To nás nepřekvapuje, protože jen těžko může mít elektron moment hybnosti, je-li jeho rameno síly velmi malé. Z toho důvodu platí, že čím větší je l , tím víc jsou amplitudy „odlačovány“ od středu. Podíváme-li se na to, jak se radiální funkce mění při malých r , zjistíme z rovnice (19.53), že

$$F_{n,l}(r) \approx r^l.$$

Taková závislost na r znamená, že abychom dospěli k větší hodnotě amplitudy, musíme v případě větších l postoupit od bodu $r=0$ do větší vzdálenosti. Mimochodem, zmíněný průběh je podmíněn tím členem v rovnici pro radiální část vlnové funkce, který odpovídá odstředivé síle, takže totéž se bude týkat libovolného potenciálu měnícího se s malými r pomaleji než $1/r^2$ – a taková je většina atomových potenciálů.

17.6 PERIODICKÁ SOUSTAVA PRVKŮ

Nyní bychom rádi v určitém přiblížení využili teorii atomu vodíku na to, abychom alespoň trochu porozuměli periodické soustavě chemických prvků. Prvek s protonovým číslem Z má Z elektronů, které se sice elektrickou přitažlivostí jádra drží pohromadě, ale navzájem se odpuzují. Abychom dostali zcela přesné řešení, museli bychom vyřešit Schrödingerovu rovnici pro Z elektronů nacházejících se v Coulombově poli. Pro helium vypadá tato rovnice takto

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi) + \left(-\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi,$$

kde ∇_1^2 je Laplaceův operátor působící na \mathbf{r}_1 (souřadnice jednoho elektronu), ∇_2^2 působí na \mathbf{r}_2 a $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. (Spin elektronů opět zanedbáváme.) Abychom našli stacionární stavy a energetické hladiny, museli bychom hledat řešení ve tvaru

$$\psi = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-(i/\hbar)Et}.$$

Geometrická závislost je zahrnuta v f , které je funkcí šesti proměnných – současných poloh obou elektronů. Ještě nikomu se nepodařilo najít analytické řešení, ačkoliv numerickými metodami jsme se už dopracovali k řešením pro nejnižší energetické stavy.

V případě 3, 4 nebo 5 elektronů je zcela beznadějně pokoušet se dojít k přesným řešením a jsme příliš daleko od toho, abychom mohli prohlásit, že kvantová mechanika beze zbytku objasnila periodickou soustavu prvků. Ale dokonce i pomocí nepřesného přiblížení a určitých následných úprav je možné porozumět (alespoň kvalitativně) mnohým chemickým vlastnostem, které jsou jasně vidět z periodické soustavy prvků.

Chemické vlastnosti atomů jsou v převážné míře určeny jejich stavy s nejnižší energií. K nalezení těchto stavů a jim příslušejících energií lze použít následující přibližnou teorii. Zaprvé, zanedbáme spin elektronu, *ale* vezmeme v úvahu Pauliho vylučovací princip a prohlásíme, že libovolný

volný stav může být obsazen pouze jedním elektronem. To znamená, že každá orbitální konfigurace může obsahovat maximálně *dvě* takové částice – jednu se spinem nahoru, druhou se spinem dolů. V prvním přiblížení dále zanedbáme *podrobnosti* vzájemného působení elektronů a budeme předpokládat, že každá z nich se pohybuje v *centrálním poli*, které je kombinací polí jádra a všech ostatních elektronů. V případě neonu, který má 10 elektronů, říkáme, že každý z nich pocítuje vliv středního potenciálu pocházejícího od jádra a zbývajících devíti elektronů. Představíme si, že do Schrödingerovy rovnice pro každý elektron dosadíme za $U(r)$ pole $1/r$ modifikované v důsledku přítomnosti ostatních elektronů sférickou symetrickou hustotou náboje.

V tomto modelu se každý elektron chová jako nezávislá částice. Úhlové závislosti jeho vlnové funkce budou přesně stejné jako jsou ty, s nimiž jsme se setkali u atomu vodíku. Opět to budou stavy s , p atd. a budou mít různé hodnoty m . Jelikož $U(r)$ už nemá tvar úměrný $1/r$, bude se radiální část vlnových funkcí trochu lišit, ačkoliv kvalitativně se nezmění; dostaneme proto stejná hlavní kvantová čísla n . Energie stavů budou také poněkud odlišné.

VODÍK

Podívejme se, k čemu se na základě těchto představ dostaneme. Základní stav vodíku má $n = 1$ a $l = m = 0$; mluvíme o elektronové konfiguraci $1s$. Jeho energie je $-13,6$ eV. Nazýváme ji *ionizační energií* a označujeme ji W_1 . Velká hodnota ionizační energie vyjadřuje tutéž skutečnost, že je těžké elektron z atomu odtrhnout, a obecně platí, že daná látka je chemicky méně aktivní.

HELIUM

Nyní vezměme helium. Oba elektrony se mohou nacházet v téměř nejnižším stavu (jeden se spinem nahoru a druhý se spinem dolů). V něm se elektron pohybuje v poli s potenciálem, který je pro malá r podobný coulombovskému potenciálu pro $Z = 2$ a pro velká r téměř typu potenciálu, ale pro $Z = 1$. Výsledkem je vodíkopodobný stav $1s$ s o něco nižší energií. Oba elektrony jsou ve stavu $1s$ ($l = 0, m = 0$). Pozorovaná ionizační energie (nutná k odtržení *jednoho* elektronu) představuje $24,6$ eV. Jelikož je vrstva $1s$ už zaplněna (více než dva elektrony se do ní nevejdou), helium prakticky nemá tendenci přitahovat elektrony jiných atomů. Je chemicky inertní.

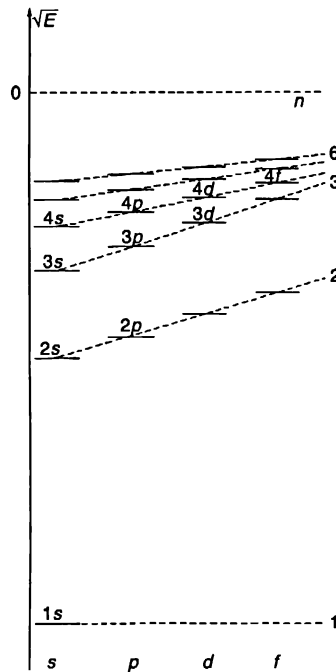
LITHIUM

Jádro lithia má náboj 3. Stavy elektronu budou opět podobné jako u vodíku a trojice elektronů zaujme tři hladiny s nejnižší energií. Dva vstoupí do stavů $1s$ a třetí přejde do stavu $n = 2$. Ale s jakým l , 0 nebo 1? Ve vodíku měly tyto stavy stejnou energii, ale u jiných atomů už tomu tak není, a to z následujícího důvodu. Vzpomeňte si, že pro stav $2s$ existuje určitá amplituda nacházet se blízko jádra, ale stav $2p$ ji nemá. To znamená, že elektron ve stavu $2s$ nějakým způsobem pocítí trojnásobný elektrický náboj lithiového jádra, zatímco elektron ve stavu $2p$ zůstává v oblasti, kde je pole podobné Coulombově poli jediného náboje. Toto dodatečné přitahování sníží energii stavu $2s$ oproti stavu $2p$. Energetické hladiny vypadají přibližně tak, jak jsou nakresleny na *obr. 17.8*; měli byste si je porovnat s odpovídajícím diagramem pro vodík na *obr. 17.7*. Jelikož tento třetí elektron má vyšší energii než ostatní dva, lze jej poměrně snadno odtrhnout. Ionizační energie lithia je jen $5,4$ eV, a proto je z chemické stránky dost aktivní.

Tak se postupně před našima očima odkrývá celá další struktura; v *tab. 17.2* jsme sepsali seznam prvních 36 prvků a zároveň jsme uvedli, jaké stavy obsazují elektrony v základním stavu každého atomu. V tabulce najdeme ionizační energii nejslaběji vázaného elektronu a počet elektronů v každé slupce – pod čímž chápeme stavy se stejným n . Jelikož se stavy s různým l liší svou energií, každé hodnotě l odpovídá podslupka s $2(2l + 1)$ možnými stavy (s různým m a spinem elektronu). Až na velmi malé efekty, které zanedbáváme, mají všechny tyto stavy stejnou energii.

Tabulka 17.2: Elektronové konfigurace prvních 36 chemických prvků

Z	Prvek	W_1 (eV)	Elektronová konfigurace											
			1s	2s	0.6	3s	0.63	3d	4s	0.7	4d	4f		
1	H vodík	13,6	1											
2	He helium	24,6	2											
3	Li lithium	5,4	ZAPLNĚNÉ (2)	1										
4	Be beryllium	9,3		2										
5	B bor	8,3		2	1									
6	C uhlík	11,3		2	2									
7	N dusík	14,5		2	3									
8	O kyslík	13,6		2	4									
9	F fluor	17,4		2	5									
10	Ne neon	21,6		2	6									
11	Na sodík	5,1		- ZAPLNĚNÉ - (2)			1							
12	Mg hořčík	7,6					2							
13	Al hliník	6,0				2	1							
14	Si křemík	8,1				2	2							
15	P fosfor	10,5				2	3							
16	S síra	10,4			(8)	2	4							
17	Cl chlor	13,0				2	5							
18	A argon	15,8				2	6							
19	K draslík	4,3	- ZAPLNĚNÉ - (2)								1			
20	Ca vápník	6,1									2			
21	Sc skandium	6,5								1	2			
22	Ti titan	6,8								2	2			
23	V vanad	6,7								3	2			
24	Cr chrom	6,8								5	1			
25	Mn mangan	7,4			(8)		(8)			5	2			
26	Fe železo	7,9								6	2			
27	Co kobalt	7,9								7	2			
28	Ni nikl	7,6								8	2			
29	Cu měď	7,7								10	1			
30	Zn zinek	9,4							10	2				
31	Ga gallium	6,0	- ZAPLNĚNÉ - (2)								2	1		
32	Ge germanium	7,9										2	2	
33	As arzen	9,8										2	3	
34	Se selen	9,7			(8)		(18)					2	4	
35	Br brom	11,8										2	5	
36	Kr krypton	14,0										2	6	



Obr. 17.8 Schematický diagram energetických hladin atomového elektronu v přítomnosti jiných elektronů. (Měřítko není totéž jako na předcházejícím obrázku.)

BERYLLIUM

Beryllium je podobné lithiu až na to, že ve stavu $2s$ má dva elektrony, stejně jako v zaplněné vrstvě $1s$.

BOR AŽ NEON

Bor má 5 elektronů. Pátý se musí nacházet ve stavu $2p$. Existuje $2 \times 3 = 6$ různých stavů $2p$, takže stále můžeme přidávat další elektrony, dokud nedostaneme celkový počet 8. Tím se dostaneme k neonu. Přidáváním elektronů zvyšujeme zároveň i Z , takže celé elektronové rozdělení se stále více a více shlukuje kolem jádra a v důsledku toho energie stavů $2p$ klesá. Ve chvíli, kdy dorazíme k neonu, naroste ionizační energie na hodnotu 21,6 eV. Neon se svého elektronu nevzdává snadno. Navíc nemá volný ani jeden stav s nižší energií, který by mohl zaplnit, proto se nebude pokoušet přisvojit si nějaký elektron navíc. Neon je chemicky inertní. Z druhé strany, fluor má prázdné místo, kam může elektron spadnout do stavu s nižší energií, proto je v chemických reakcích poměrně aktivní.

SODÍK AŽ ARGON

Jedenáctý elektron sodíku musí začít novou slupku – nachází se ve stavu $3s$. Jemu odpovídající energetická hladina leží mnohem výš; ionizační energie prudce klesne: Sodík je aktivní chemická látka. Od sodíku až po argon se stavy s a p , patřící hodnotě $n=3$, zaplňují v přesně stejném pořadí jako od lithia po neon. Úhlové konfigurace elektronů ve vnější nezaplňené slupce mají tutéž posloupnost a dost podobný je i postupný růst ionizační energie. Nyní už chápeme, proč se chemické vlastnosti s rostoucím protonovým číslem opakují. Hořčík se v chemických reakcích

chová podobně jako beryllium, křemík jako uhlík a chlor jako fluor. Argon je inertní, podobně jako neon.

Možná jste si všimli, že v posloupnosti ionizačních energií mezi lithiem a neonem, a také mezi sodíkem a argonem se setkáváme s nepatrnou zvláštností. Poslední elektron se k atomu kyslíku váže o něco slaběji, než bychom snad očekávali. U síry je to obdobné. Proč to tak má být? Pochopte to, vezmeme-li v úvahu některé stránky vzájemného působení jednotlivých elektronů. Uvažujme, co se stane, přidáme-li atomu boru první elektron ve stavu $2p$. Má 6 možností, kde může skončit – 3 stavy p a každý z nich se dvěma orientacemi spinu. Představme si, že elektron se usadí ve stavu s $m = 0$ se spinem nahoru, který jsme nazvali stav „z“, neboť míří podél osy z . Co se nyní děje v uhlíku? Elektrony ve stavu $2p$ tu jsou dva. Skončí-li jeden ve stavu „z“, kde se usadí druhý? Jeho energie bude nižší, bude-li si držet co největší odstup od prvního elektronu; uskutečnit to lze tak, že přejde řekněme do stavu x podslupky $2p$. (Vzpomeňte si, že tento stav je lineární kombinací stavů s $m = +1$ a $m = -1$.) Postoupíme-li dále k dusíku, bude energie vzájemného odpuzování tří $2p$ -elektronů nabývat nejmenší hodnoty tehdy, kdy se po jednom rozdělí do konfigurací „x“, „y“ a „z“. U kyslíku tato hra končí. Čtvrtý elektron musí zakotvit v jednom ze zaplněných stavů – s opačným spinem. Jeho partner ho bude silně odpuzovat, takže jeho energie už nebude tak nízká, jak by jinak mohla být, a tak jej lze snáze odtrhnout. To vysvětluje přerušování rostoucí posloupnosti vazebných energií, které se objevuje mezi dusíkem a kyslíkem a mezi fosforem a sírou.

DRASLÍK AŽ ZINEK

V první chvíli bychom si mohli myslet, že po argonu začnou nové elektrony zaplňovat podslupku $3d$. Není to však pravda. Jak už jsme vysvětlili dříve (a ilustrovali na *obr. 17.7*), stavům s vyšším momentem hybnosti se energie posouvají nahoru. Ve chvíli, kdy přijdeme ke stavům $3d$, se jejich energetické hladiny zvednou kousek nad energii stavu $4s$. Takže v draslíku se poslední elektron nachází ve stavu $4s$. Až když se tato podslupka zaplní (dvěma elektrony) u vápníku, začne se obsazovat podslupka $3d$; postupně dostáváme skandium, titan, vanad.

Energie stavů $3d$ a $4s$ jsou tak blízko u sebe, že nepatrné efekty mohou porušit rovnováhu buď na jednu nebo na druhou stranu. Když dojde k tomu, že do stavu $3d$ máme umístit čtvrtý elektron, posune jejich vzájemné odpuzování energii stavu $4s$ nahoru o hodnotu dostatečnou k tomu, aby převýšila hladinu $3d$, proto jeden ze $4s$ – elektronů přeskočí do stavu $3d$. V případě chromu dostáváme namísto očekávané kombinace 4,2 kombinaci 5,1. Mangan získáme přidáním nového elektronu, který opět zaplní podslupku $4s$. Stav $3d$ se pak obsazuje postupně jeden za druhým, dokud nedorazíme k mědi.

Jelikož nejsvrchnější slupka manganu, železa, kobaltu a niklu má tutéž konfiguraci, mají všechny tyto prvky podobné chemické vlastnosti. (Tento jev je mnohem výraznější u prvků patřících mezi vzácné zeminy, které mají stejnou vnější slupku, ale postupně se jim zaplňuje vnitřní, a ta má mnohem menší vliv na jejich chemické vlastnosti.)

Měď si z podslupky $4s$ uloupí jeden elektron, čímž dovrší obsazování podvrstvy $3d$. Energie kombinace 10,1 je však v jejím případě tak blízko konfiguraci 9,2, že rovnováhu může porušit obyčejný atom nacházející se někde nablízku. Z toho důvodu jsou dva poslední elektrony mědi téměř ekvivalentní, takže její vazebnost může být 1, nebo 2. (Někdy se chová tak, jako kdyby její elektrony byly v konfiguraci 9,2). Podobné věci se odehrávají i jinde v tabulce a vysvětlují tu skutečnost, že jiné kovy, jako např. železo, se chemicky vážou s jednou, nebo jinou vazebností. U zinku jsou podslupky $3d$ a $4s$ jednou a navždy zaplněny.

Gallium až krypton

Od gallia po krypton pokračuje posloupnost opět normálně; obsazuje se podslupka 4*p*. Vnější slupky, energie a chemické vlastnosti se opakují podle schématu od boru po neon a od hliníku po argon.

Krypton je, podobně jako argon a neon, znám jako vzácný plyn. Všechny tři jsou chemicky inertní. Znamená to, že jelikož mají zaplněné slupky s poměrně malou energií, budou řídké případy, v nichž by pro ně bylo energeticky výhodné vytvořit jednoduchou sloučeninu s jinými prvky. Mít zaplněnou slupku však nestačí. Beryllium a hořčík mají úplně obsazené slupky *s*, ale jejich energie je příliš velká na to, aby bylo možné hovořit o stabilitě. Podobně by člověk očekával jiný „vzácný“ prvek v případě niklu, kdyby byla energie podslupky 3*d* menší (nebo energie 4*s* větší). Na druhé straně krypton není úplně inertní; s chlorem vytváří slabě vázanou sloučeninu.

Protože se nám podařilo většinu hlavních rysů periodické soustavy objasnit, skončíme naše studium u prvku číslo 36 – vždyť ostatních je ještě asi 70!

Rádi bychom zdůraznili ještě jednu věc – nejenže dokážeme do určité míry porozumět vazebnosti, ale umíme říci i něco o směrových vlastnostech chemických vazeb. Vezměme si nějaký atom, řekněme kyslík, která má čtyři 2*p* – elektrony. První tři zaujmou stavy „*x*“, „*y*“ a „*z*“, a čtvrtý se přidá k jednomu z nich; dva stavy, např. „*x*“ a „*y*“, tak zůstanou volné. Uvažujme, co se děje v molekule H₂O. Oba vodíkové atomy jsou ochotné podělit se o své elektrony s kyslíkem a pomoci mu tak zaplnit slupku. Tyto elektrony proto budou mít tendenci obsadit prázdná místa „*x*“ a „*y*“. Molekula vody by proto měla mít vodíkové atomy vázané tak, aby svíraly vzhledem ke středu kyslíku pravý úhel. Ve skutečnosti je tento úhel 105°. Tatáž situace nastává v sirovodíku H₂S. Ale protože je atom síry větší, jsou oba vodíkové atomy od sebe víc vzdáleny, jejich vzájemné odpuzování je menší, a proto se úhel rozšíří pouze na 93°. Selen je ještě větší, takže v H₂Se je úhel roven téměř 90°.

Na základě týchž úvah můžeme porozumět i geometrickému uspořádání molekuly amoniaku NH₃. Dusík má ještě volné místo pro tři 2*p* – elektrony, po jednom na každý stav typu „*x*“, „*y*“ a „*z*“. Tři vodíkové atomy by se proto měly navázat tak, aby navzájem svíraly pravé úhly. Ve skutečnosti jsou úhly o něco větší (opět v důsledku elektrického odpuzování). Alespoň však chápeme, proč molekula NH₃ není rovinná. Úhly v molekule fosfinu H₃P jsou blízké 90°, a v H₃As ještě bližší. Předpokládali jsme, že molekula NH₃ není rovinná, když jsme ji popisovali jako dvojhladinovou soustavu. Právě této prostorovosti vděčíme za to, že amoniakový maser může fungovat. Nyní vidíme, že i tento stav dokážeme vysvětlit pomocí kvantové mechaniky.

Schrödingerova rovnice se stala jedním z velkých triumfů fyziky. Tím, že nám poskytla klíč k fundamentálnímu mechanismu, který je základem struktury atomů, nám objasnila spektra, celou chemii a fyzikální podstatu látky.

O perátory

18.1 OPERACE A OPERÁTORY

18.2 STŘEDNÍ HODNOTY ENERGIÍ

18.3 STŘEDNÍ HODNOTA ENERGIE ATOMU

18.4 OPERÁTOR POLOHY

18.5 OPERÁTOR HYBNOSTI

18.6 MOMENT HYBNOSTI

18.7 ČASOVÁ ZÁVISLOST STŘEDNÍCH HODNOT

18.1 OPERACE A OPERÁTORY

Vše, co jsme dosud dělali v rámci kvantové mechaniky, lze zvládnout pomocí obyčejné algebry, i když jsme si čas od času ukázali některé zvláštní způsoby zápisu kvantově mechanických veličin a rovnic. Nyní si trochu více pohovoříme o některých zajímavých a užitečných způsobech popisu kvantově mechanických jevů. Existuje mnoho přístupů ke kvantové mechanice a ve většině knih se setkáte s jiným, než jsme používali my. Budete-li studovat další učebnice, je možné, že ihned nezjistíte souvislost mezi tím, co v nich najdete, a tím, co jsme dělali my. Ačkoliv v této kapitole dospějeme i k některým užitečným výsledkům, její hlavní účel je jiný: Seznámit vás s různými způsoby zápisu téže fyzikální situace. Budete-li je znát, snáze porozumíte, co se říká v jiných knihách. V úplných začátcích klasické mechaniky se všechny rovnice vždy zapisovaly pomocí složek x , y , z . Pak někdo přišel s návrhem, že je možné je podstatně zjednodušit, použije-li se vektorový zápis. Pravda, potřebujeme-li něco vyčíslit, musíme vektory rozkládat na složky. Obecně platí, že používání vektorového zápisu usnadňuje vidět fyzikální stránku věci; i mnohé výpočty se s vektory uskutečňují snáze. Zavedení pojmu stavového vektoru nám zjednodušilo zápis mnohých kvantově mechanických jevů. Stavový vektor $|\psi\rangle$ samozřejmě nijak nesouvisí s geometrickými vektory v trojrozměrném prostoru; je to pouze abstraktní symbol, který *označuje fyzikální stav* s „názvem“ ψ . Je však velmi užitečný, neboť zákony kvantové mechaniky můžeme vyjadřovat jako algebraické rovnice takovýchto symbolů. Například základní zákon, že každý stav lze vyjádřit jako lineární kombinaci bázových stavů, zapíšeme ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |i\rangle, \quad (18.1)$$

kde C_i je souborem obyčejných (komplexních) čísel – amplitud $C_i = \langle i | \psi \rangle$ a $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ atd. označují báze stavy nějaké báze nebo reprezentace.

Vybereme-li si nějaký fyzikální stav a něco s ním uděláme (např. jej otočíme, nebo vyčkáme čas Δt), dostaneme jiný stav. Říkáme: „Operací nad stavem vytváříme nový stav.“ Tuto myšlenku můžeme vyjádřit rovnicí

$$|\varphi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle. \quad (18.2)$$

Operace nad stavem vytváří nový stav. Operátor \hat{A} představuje určitou konkrétní operaci. Když ji vykonáme nad nějakým stavem, řekněme $|\psi\rangle$, dostaneme nový stav $|\varphi\rangle$.

Co znamená rovnice (18.2)? Její význam *definujeme* následujícím způsobem. Vynásobíme-li rovnici bra-vektorem $\langle i |$ a stav $|\psi\rangle$, rozvineme podle rovnice (18.1), dostaneme

$$\langle i | \varphi \rangle = \sum_j \langle i | \hat{A} | j \rangle \langle j | \psi \rangle. \quad (18.3)$$

(Stavy $|j\rangle$ jsou z téhož souboru, jako $|i\rangle$.) Jde o jednoduchou algebraickou rovnici. Čísla $\langle i | \varphi \rangle$ udávají, v jakých množstvích se báze stavy nacházejí ve stavu $|\varphi\rangle$; jsou vyjádřeny pomocí lineární superpozice amplitud $\langle j | \psi \rangle$ toho, že $|\psi\rangle$ najdeme v jednotlivých báze stavech. Čísla $\langle i | \hat{A} | j \rangle$ jsou pouze koeficienty, která určují, jaká část amplitudy $\langle j | \psi \rangle$ vchází do součtu, operátor \hat{A} je číselně určen souborem čísel nebo maticí

$$A_{i,j} \equiv \langle i | \hat{A} | j \rangle. \quad (18.4)$$

Rovnice (18.2) vyjadřuje rovnici (18.3) na vyšší úrovni. Ale říká nám ještě něco víc. V rovnici (18.2) se neodvoláváme na žádný soubor báze stavy. Rovnice (18.3) je zobrazením rovnice (18.2) do nějakého souboru báze stavy. Ale jak víte, tento soubor můžeme libovolně vybrat. Právě tato myšlenka je obsažena v rovnici (18.2). Při operátorovém způsobu zápisu se vyhýbáme tomu, abychom použili konkrétní soubor. Pravda, když se chceme dopočítat k něčemu konkrétnímu, musíme si vybrat *nějaký* soubor – v tom případě použijeme rovnici (18.3). Rovnice (18.2) je abstraktnější způsob zápisu *algebraické* rovnice (18.3). Je to velmi podobné jako rozdíl mezi zápisem

$$c = a \times b$$

$$c_x = a_y b_z - a_z b_y, \quad c_y = a_z b_x - a_x b_z, \quad c_z = a_x b_y - a_y b_x.$$

První způsob je mnohem šikovnější. Chceme-li však získat *výsledky*, musíme určit složky vzhledem k nějaké soustavě souřadnicových os. Podobně to je, když chceme konkrétně vyjádřit operátor \hat{A} ; musíme napsat matici A_{ij} pomocí nějakého souboru báze stavy. Máme-li na mysli určitý soubor čísel A_{ij} , představuje rovnice (18.2) totéž, jako rovnice (18.3). (Pamatujte si, že když už jednou známe matici pro nějaký konkrétní výběr báze stavy, vždy umíme vypočítat matici, která přísluší jinému výběru báze. Matici můžeme transformovat z jedné reprezentace do druhé.)

Operátorová rovnice (18.2) však podněcuje i nové myšlenky. Mějme nějaký operátor \hat{A} . Když jím působilme na libovolný stav $|\psi\rangle$, vytvoříme nový stav $|\hat{A} \psi\rangle$. Stav, který takto získáme, může být velice neobvyklý – může znázorňovat takovou *fyzikální situaci*, která se v přírodě vůbec nevyskytuje. (Například můžeme dostat stav, který není normován tak, aby popisoval jediný

elektron.) Jinými slovy, někdy můžeme dostat stavy, které jsou uměle matematicky vykonstruované. I takovéto „umělé stavy“ jsou často užitečné, zejména při počítání mezivýsledků.

Už jsme si uvědomili mnoho příkladů kvantově mechanických operátorů. Setkali jsme se s operátorem otočení $\hat{R}_y(\vartheta)$, který ze stavu $|\psi\rangle$ vytvoří nový stav, představující původní stav z pohledu pootočené soustavy souřadnic. Zavedli jsme operátor parity (nebo inverze) P , který vytvoří nový stav překlopením všech souřadnic. Měli jsme i operátory $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ pro částice se spinem $1/2$.

Operátor \hat{J}_z byl definován v 15. kapitole pomocí operátoru otočení o malý úhel ε

$$\hat{R}_z(\varepsilon) = 1 + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_z. \quad (18.5)$$

Neznamená to nic jiného, než

$$\hat{R}_z(\varepsilon)|\psi\rangle = |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_z |\psi\rangle. \quad (18.6)$$

V tomto případě získáme stav $\hat{J}_z|\psi\rangle$ tak, že nejdříve otočíme $|\psi\rangle$ o malý úhel ε , odečteme původní stav (tak získáme stav, který je *rozdílem* dvou stavů) a vynásobíme součinitelem $\hbar/i\varepsilon$.

Uvedme si ještě jeden příklad. Zavedli jsme operátor \hat{p}_x , který jsme nazvali operátor hybnosti (složky x) a byl definován rovnicí podobnou rovnici (18.6). Nechtě $\hat{D}_x(L)$ je operátor, který posune stav ve směru osy x o vzdálenost L . Operátor \hat{p}_x je pak definován takto

$$\hat{D}_x(\delta) = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \hat{p}_x, \quad (18.7)$$

kde δ znamená malé posunutí. Posunutím stavu $|\psi\rangle$ ve směru osy x o malou vzdálenost δ dostáváme nový stav $|\psi'\rangle$. Říkáme, že nový stav je starý stav plus malý kousek

$$\frac{i}{\hbar} \delta \hat{p}_x |\psi\rangle.$$

Operátory, o nichž nyní hovoříme, působí na stavový vektor, např. $|\psi\rangle$, který je abstraktním popisem fyzikální situace. Jsou zcela odlišné od operátorů, které působí na matematické funkce. Například „operátor“ d/dx mění funkci $f(x)$ na novou funkci $f'(x) = df/dx$. Dalším příkladem je operátor ∇^2 . Je vidět, proč se v obou případech používá totéž slovo, ačkoliv bychom měli mít stále na paměti, že tyto dva druhy operátorů jsou odlišné. Kvantově mechanický operátor \hat{A} nepůsobí na algebraickou funkci, ale na stavový vektor, jakým je $|\psi\rangle$. Oba druhy operátorů se používají v kvantové mechanice a později uvidíme, že se často vyskytují v podobných typech rovnic. Je-li to vaše první seznamování s kvantovou mechanikou, mějte uvedený rozdíl stále na paměti. Později, když se s předmětem blíže seznámíte, zjistíte, že není třeba výrazně odlišovat zmíněné dva druhy operátorů. Dokonce zjistíte, že většina knih označuje oba typy stejným způsobem!

Pojďme však dále a podívejme se, jaké užitečné věci lze vykonat s operátory. Nejdříve však ještě jednu poznámku. Mějme operátor \hat{A} , jehož matice má v určité bázi prvky $A_{ij} \equiv \langle i|\hat{A}|j\rangle$. Amplituda toho, že se stav $\hat{A}|\psi\rangle$ vyskytuje v nějakém jiném stavu $|\varphi\rangle$ je $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$. Má význam udělat komplexně sdruženou amplitudu? Měli bychom být schopni ukázat, že platí

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle, \quad (18.8)$$

kde \hat{A}^* (čti A s křížkem) je operátor, jehož maticové prvky jsou

$$A_{i,j}^* \equiv (A_{j,i})^*. \quad (18.9)$$

Abychom doslati i , j -tý prvek operátoru A^* , musíme vzít prvek j , i operátoru \hat{A} (indexy jsou v opačném pořadí) a udělat komplexní sdružení. Amplituda toho, že se stav $\hat{A}^*|\varphi\rangle$ nachází ve stavu $|\psi\rangle$, je komplexně sdružená k amplitudě toho, že $\hat{A}|\psi\rangle$ je v $|\varphi\rangle$. Operátor \hat{A}^* se nazývá *hermitovskys sdružený* k operátoru \hat{A} . Mnohé důležité operátory kvantové mechaniky mají tuto speciální vlastnost: Uděláme-li k nim hermitovské sdružení, dostaneme opět tentýž operátor. Je-li \hat{B} takovým operátorem, pak

$$\hat{B}^* = \hat{B}$$

a \hat{B} se nazývá *samosdružený* nebo *hermitovský* operátor.

18.2 STŘEDNÍ HODNOTY ENERGIÍ

Dosud jsme upozorňovali hlavně na to, co už známe. Nyní přejděme k nové otázce. Jak bychom zjistili *střední* hodnotu energie nějakého systému, řekněme atomu? Nachází-li se atom v určitém stavu, s přesně určenou energií, naměříme určitou hodnotu energie E . Provedeme-li měření v celé sadě atomů, které jsou všechny v téměř stavu, všude dostaneme E a střední hodnota měření bude samozřejmě rovna E .

Co se však stane, uskutečníme-li měření nějakého stavu $|\psi\rangle$, který *není* stacionární? Protože systém nemá přesnou energii, dá jedno měření jednu energii a totéž měření pro jiný atom, v téměř stavu, dá jinou energii atd. Jaká bude střední hodnota energie celé takovéto série měření?

Otázku můžeme odpovědět, když si promítneme stav $|\psi\rangle$ na soubor stavů s přesně určenými energiemi. Abychom si uvědomili, že jde o speciální bázeový soubor, označíme tyto stavy $|\eta_i\rangle$. Každý stav $|\eta_i\rangle$ má přesně určenou hodnotu energie E_i . V takovéto reprezentaci

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |\eta_i\rangle. \quad (18.10)$$

Změříme-li energii, a dostaneme nějakou hodnotu E_i , znamená to, že systém byl ve stavu η_i . Každé měření však může dát jinou hodnotu. Jednou naměříme E_1 , pak E_2 , jindy E_3 atd. Pravděpodobnost toho, že získáme hodnotu E_1 , je rovna pravděpodobnosti nalezení systému ve stavu $|\eta_1\rangle$, tj. druhé mocnině absolutní hodnoty amplitudy $C_1 = \langle \eta_1 | \psi \rangle$. Pravděpodobnost toho, že naměříme hodnotu E_i , je

$$P_i = |C_i|^2. \quad (18.11)$$

Jak souvisí uvedené pravděpodobnosti se střední hodnotou celé posloupnosti měření energie? Představme si, že v sérii měření získáváme tyto hodnoty: $E_1, E_7, E_{11}, E_9, E_1, E_{10}, E_7, E_2, E_3, E_9, E_6, E_4$ atd. Provedeme, řekněme, tisíc měření. Když skončíme, sečteme všechny hodnoty a vydělíme je počtem měření; tj. číslem tisíc. Dostaneme střední hodnotu. Sčítání však můžeme udělat i jednodušeji. Spočítáme, kolikrát se vyskytuje hodnota E_1 , nechť je to N_1 -krát, pak sečteme výskyt E_2 , nechť je to N_2 -krát atd. Součet všech energií je určitě roven

$$N_1 E_1 + N_2 E_2 + N_3 E_3 + \dots = \sum_i N_i E_i.$$

Střední hodnotu získáme, vydělíme-li uvedenou sumu celkovým počtem měření, což je vlastně součet všech N_i , který označme N ; potom

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i N_i E_i}{N}. \quad (18.12)$$

Už jsme skoro u cíle. Pravděpodobnost, že určitá událost nastane, je rovna počtu případů, v nichž očekáváme, že událost nastane, dělená celkovým počtem měření. Poměr N_i/N byl měl být pro velká N blízký hodnotě P_i , tj. pravděpodobnosti nalezení stavu $|\eta_i\rangle$. Z důvodů statistických fluktuací však nebude přesně roven P_i . Označme předpovězenou (nebo „očekávanou“) střední hodnotu energie jako $\langle E \rangle$, pak můžeme psát

$$\langle E \rangle = \sum_i P_i E_i. \quad (18.13)$$

Stejně úvahy platí při měření libovolné veličiny. Střední hodnota nějaké měřené veličiny A je rovna

$$\langle A \rangle = \sum_i P_i A_i,$$

kde A_i jsou možné hodnoty měřené veličiny a P_i jsou odpovídající pravděpodobnosti toho, že naměříme příslušnou hodnotu.

Vraťme se zpět k našemu kvantově mechanickému stavu $|\psi\rangle$. Jeho střední hodnota energie je

$$\langle E \rangle = \sum_i |C_i|^2 E_i = \sum_i C_i^* C_i E_i. \quad (18.14)$$

Nyní si všimneme následujícího triku! Nejdříve napíšeme součet ve tvaru

$$\sum_i \langle \psi | \eta_i \rangle E_i \langle \eta_i | \psi \rangle. \quad (18.15)$$

Na levý člen $\langle \psi |$ se budeme dívat jako na společný „faktor“. Vytkneme jej před součet a napíšeme

$$\langle \psi | \{ \sum_i | \eta_i \rangle E_i \langle \eta_i | \psi \rangle \}.$$

Tento výraz má tvar

$$\langle \psi | \varphi \rangle,$$

kde $|\varphi\rangle$ je „zkonstruovaný“ stav definovaný takto

$$|\varphi\rangle = \sum_i | \eta_i \rangle E_i \langle \eta_i | \psi \rangle. \quad (18.16)$$

Řečeno jinými slovy, je to stav, který získáme, když každý bázový stav $|\eta_i\rangle$ bude zastoupen váhou $E_i \langle \eta_i | \psi \rangle$.

Uvědomme si, co znamenají stavy $|\eta_i\rangle$. Představují stacionární stavy, tj. pro každý z nich platí

$$\hat{H}|\eta_i\rangle = E_i|\eta_i\rangle.$$

Protože E_i je pouze číslo, můžeme pravou stranu psát i jako $|\eta_i\rangle E_i$ a součet v rovnici (18.16) můžeme vyjádřit jako

$$\sum_i \hat{H}|\eta_i\rangle \langle \eta_i | \psi \rangle.$$

Znáмым způsobem sečteme přes index i a tím dosáhneme toho, že se vnitřní část součtu změní na jednotku

$$\sum_i \hat{H}|\eta_i\rangle \langle \eta_i | \psi \rangle = \hat{H} \sum_i |\eta_i\rangle \langle \eta_i | \psi \rangle = \hat{H}|\psi\rangle.$$

Neuvěřitelné! Rovnice (18.16) je ekvivalentní s rovnicí

$$|\varphi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle. \quad (18.17)$$

Střední hodnotu energie stavu $|\psi\rangle$ můžeme proto elegantně zapsat jako

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (18.18)$$

Abychom dostali střední energii, musíme působit operátorem \hat{H} na $|\psi\rangle$ a zleva vynásobit členem $\langle \psi |$. Je to velmi jednoduchý předpis.

Tento nový „recept“ na určení střední hodnoty energie je nejen pěkný, ale i užitečný, protože je možné jej používat, aniž bychom znali nějaký konkrétní soubor bázových stavů. Dokonce nepotřebujeme znát ani všechny energetické hladiny. Provádíme-li výpočet, musíme si stavy vyjádřit pomocí *nějakého* souboru bázových stavů; známe-li však Hamiltonovu matici H_{ij} tohoto souboru, známe vlastně i střední hodnotu energie. Rovnice (18.18) říká, že pro *libovolný* soubor bázových stavů $|i\rangle$ se střední hodnota vypočte podle vztahu

$$\langle E \rangle = \sum_{ij} \langle \psi | i \rangle \langle i | \hat{H} | j \rangle \langle j | \psi \rangle, \quad (18.19)$$

kde amplitudy $\langle i | H | j \rangle$ jsou prvky matice H_{ij} .

Uvedený výsledek si ověříme na speciálním případě, kdy $|i\rangle$ představují stavy s přesně určenými hodnotami energií. Potom platí $\hat{H}|j\rangle = E_j|j\rangle$, takže $\langle i | H | j \rangle = E_j \delta_{ij}$ a

$$\langle E \rangle = \sum_{ij} \langle \psi | i \rangle E_i \delta_{ij} \langle j | \psi \rangle = \sum_i E_i \langle \psi | i \rangle \langle i | \psi \rangle,$$

což je správný výsledek.

Rovnici (18.19) můžeme, mimochodem, rozšířit i na další měření, která jsme schopni vyjádřit ve tvaru operátoru. Například \hat{L}_z je operátor z-ové složky momentu hybnosti L . Střední hodnota této složky ve stavu $|\psi\rangle$ je

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle.$$

Jeden způsob, jak si to můžeme ověřit, je uvažovat situaci, v níž je energie úměrná momentu hybnosti. Všechny úvahy se opakují jako v předcházejícím případě.

Proveďme shrnutí: Je-li k fyzikální měřitelné veličině A přiřazen vhodný kvantově mechanický operátor \hat{A} , je střední hodnota dané veličiny ve stavu $|\psi\rangle$ určena vztahem

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (18.20)$$

Pod uvedeným zápisem rozumíme

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle, \quad (18.21)$$

kde

$$|\varphi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle. \quad (18.22)$$

18.3 STŘEDNÍ HODNOTA ENERGIE ATOMU

Chceme vědět, jaká je střední hodnota energie atomu ve stavu, který je popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r})$; jak ji zjistit? Nejdříve uvažujme jednorozměrný případ, v němž je stav $|\psi\rangle$ definován amplitudou $\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$. Zajímá nás speciální případ – vyjádření vztahu (18.19) v souřadnicové reprezentaci. Podle standardního postupu zaměníme stavy $|i\rangle$ a $|j\rangle$ členy $|x\rangle$ a $|x'\rangle$ a součty nahradíme integrály.

Dostaneme

$$\langle E \rangle = \iint \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{H} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx dx'. \quad (18.23)$$

Integrál můžeme zapsat i takto

$$\int \langle \psi | x \rangle \langle x | \varphi \rangle dx, \quad (18.24)$$

přičemž

$$\langle x | \varphi \rangle = \int \langle x | H | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx'. \quad (18.25)$$

S tímto integrálem jsme se už setkali ve 14. kapitole (viz rovnice (14.50) a (14.52)). Je roven

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x) \psi(x).$$

Proto můžeme psát

$$\langle x | \varphi \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \psi(x). \quad (18.26)$$

Vzpomeňme si, že platí $\langle \psi | x \rangle = \langle x | \psi \rangle^* = \psi^*(x)$; pomocí této rovnosti můžeme střední energii v (18.23) zapsat jako

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U \right\} \psi(x) dx. \quad (18.27)$$

Známe-li vlnovou funkci $\psi(x)$, můžeme pomocí uvedeného integrálu vypočítat střední hodnotu energie. Začíná se jasněji rýsovat, jak lze přejít od stavového vektoru k vlnové funkci a zpět.

Výraz v závorce v rovnici (18.27) je algebraický operátor. („Operátor“ $U(x)$ znamená „vynásob $U(x)$ “.) Budeme ho značit \mathcal{H} :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U.$$

Při takovémto označení přejde rovnice (18.23) do tvaru

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(x) \hat{\mathcal{H}} \psi(x) dx. \quad (18.28)$$

Algebraický operátor, který jsme si tu zavedli, samozřejmě není totožný s kvantově mechanickým operátorem \hat{H} . Nový operátor působí na funkci polohy $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ a vytváří novou funkci proměnné x , $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$, zatímco operátor \hat{H} účinkuje na stavový vektor $|\varphi\rangle$ a vytváří další stavový vektor $|\psi\rangle$, aniž by používal souřadnicovou nebo libovolnou jinou reprezentaci. Ale ani v souřadnicové reprezentaci není $\hat{\mathcal{H}}$ úplně totéž jako \hat{H} . Rozhodneme-li se pracovat v této reprezentaci, musíme vyjádřit operátor \hat{H} pomocí matice $\langle x | \hat{H} | x' \rangle$, která určitým způsobem závisí na obou „indexech“ x a x' ; to znamená, že lze očekávat (na základě rovnice (18.25)), že $\langle x | \varphi \rangle$ souvisí přes integrál se všemi amplitudami $\langle x' | \psi \rangle$. Na druhé straně zjišťujeme, že \mathcal{H} je diferenciální operátor. V části 14.5 jsme už odvodili vztah mezi $\langle x | \hat{H} | x' \rangle$ a algebraickým operátorem \mathcal{H} .

Naše výsledky potřebují jedno upřesnění. Předpokládali jsme, že amplituda $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ je normována, což znamená, že měřítko jsme vybrali tak, aby

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

takže pravděpodobnost toho, že *někde* najdeme elektron, je jednotková. Rozhodneme-li se pracovat s nenormovanou vlnovou funkcí $\psi(x)$, musíme psát

$$\langle E \rangle = \frac{\int \psi^*(x) \hat{\mathcal{H}} \psi(x) dx}{\int \psi^*(x) \psi(x) dx}. \quad (18.29)$$

Je to však totéž.

Všimněme si podobnosti mezi rovnicemi (18.28) a (18.18). Tyto dva způsoby zápisu jednoho a téhož výsledku se často objevují, když pracujeme v x -reprezentaci. Můžeme přejít od prvního k druhému pro jakékoli A , za předpokladu, že A je *lokální* operátor, tj. takový, který v integrálu

$$\int \langle x | \hat{A} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx'$$

může být zapsán jako $\hat{\mathcal{A}} \psi(x)$, kde $\hat{\mathcal{A}}$ představuje algebraický diferenciální operátor. Existují však operátory, pro něž to neplatí. V tom případě musíme používat původní rovnice (18.21) a (18.22).

Derivaci lze snadno rozšířit na trojrozměrný případ. Výsledek je⁸²⁾

$$\langle E \rangle = \int \psi(\mathbf{r}) \hat{\mathcal{H}} \psi(\mathbf{r}) dV, \quad (18.30)$$

⁸²⁾ Objemový element zapisujeme dV , samozřejmě tím myslíme, $dx dy dz$ a integrace probíhá od $-\infty$ do $+\infty$ ve všech třech rozměrech.

kde

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}), \quad (18.31)$$

přičemž předpokládáme, že

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (18.32)$$

Rovnice lze poměrně jednoduchým způsobem rozšířit i na systémy s více elektrony, tím se však nyní nebudeme zabývat.

Pomocí rovnice (18.30) umíme vypočítat střední energii stavu atomu, aniž bychom znali jeho energetické hladiny. Jediné, co potřebujeme, je vlnová funkce. Je to velmi důležitý zákon. Uvedme si jedno zajímavé použití. Předpokládejme, že chceme znát energii základního stavu nějakého systému, řekněme atomu helia. Vyřešit Schrödingerovu rovnici pro danou vlnovou funkci je velmi těžké, protože v ní vystupuje příliš mnoho proměnných. Zkusme však odhadnout vlnovou funkci (vybereme si libovolnou funkci) a vypočítáme střední hodnotu energie. To znamená, že pomocí rovnice (18.29) (rozšířené pro trojrozměrný případ) vypočítáme, jaká by byla střední hodnota energie, kdyby byl atom opravdu ve stavu popsaném naší funkcí. Tato hodnota energie bude určitě větší než energie základního stavu, v němž má atom nejnižší možnou energii⁸³⁾. Nyní si vybereme další funkci a vypočítáme příslušnou hodnotu energie. Je-li menší než v prvním případě, dostali jsme se blíže ke skutečné energii základního stavu. Jsme-li šikovni, vyzkoušíme pár funkcí, které mají několik volných parametrů. Vypočítaná energie na nich bude záviset. Nejnižší možnou energii hledáme tak, že měníme parametry, čímž vlastně zkoušíme celou třídu funkcí najednou. Nakonec zjišťujeme, že čím dále postupujeme, tím hůře se energie snižuje. Nakonec dojdeme k přesvědčení, že jsme se dostali poměrně blízko k nejnižší možné energii. Atom helia byl vyřešen právě takovýmto způsobem – neřešila se diferenciální rovnice, ale byla sestavena speciální funkce s velkým počtem volných parametrů, kterým se nakonec přiřadila čísla, aby bylo dosaženo nejnižší možné střední hodnoty energie.

18.4 OPERÁTOR POLOHY

Jaká je střední hodnota polohy elektronu v atomu? Jaká je střední hodnota souřadnice x v libovolném stavu $|\psi\rangle$? Budeme pracovat jen v jednom rozměru a rozšíření na trojrozměrný případ nebo na systém s více částicemi necháme vám. Uvažujme stav, který popisuje vlnová funkce $\psi(x)$ a v němž mnohokrát měříme souřadnici x . Jaká je její střední hodnota? Už víme, že to je

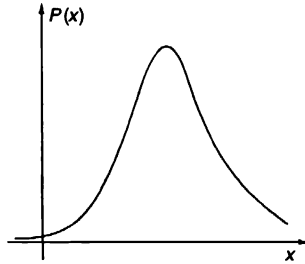
$$\int xP(x) dx,$$

kde $P(x)dx$ je pravděpodobnost toho, že najdeme elektron v malém úseku dx v místě x . Předpokládejme, že hustota pravděpodobnosti $P(x)$ se mění v závislosti na x tak, jako to ukazuje obr. 18.1. Elektron objevíme s největší pravděpodobností v blízkosti vrcholu křivky. Střední hodnota x bude též někde v okolí vrcholu. Přesněji řečeno, bude to v těžišti plochy pod křivkou.

⁸³⁾ Můžeme se na to dívat i jinak. Libovolnou funkci (stav), kterou si vybereme, můžeme zapsat jako lineární kombinaci báze stavů, tj. stavů s přesně určenými energiemi. Protože se v takovéto kombinaci vyskytuje směs s vyššími energiemi spolu se stavem s nejnižší energií, bude střední hodnota vyšší než energie základního stavu.

Už dříve jsme viděli, že $P(x)$ je rovno $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$, proto můžeme psát střední hodnotu takto

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (18.33)$$



Obr. 18.1 Křivka hustoty pravděpodobnosti, znázorňující lokalizovanou částici

Uvedená rovnice má stejný tvar jako rovnice (18.28). Při výpočtu střední hodnoty energie se operátor \mathcal{H} objevuje mezi dvěma funkcemi ψ , při výpočtu střední hodnoty polohy je na jeho místě x . (Chcete-li, můžete se dívat na x jako na algebraický operátor „vynásob x “.) Pokračujeme-li v analogii ještě dále, můžeme vyjádřit střední hodnotu ve tvaru rovnice (18.18). Předpokládejme, že jsme zapsali

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \alpha \rangle, \quad (18.34)$$

kde

$$|\alpha\rangle = \hat{x} |\psi\rangle \quad (18.35)$$

a nyní se pokusíme najít operátor \hat{x} , který generuje takový stav $|\alpha\rangle$, že rovnice (20.34) dá stejný výsledek jako rovnice (20.33). Znamená to, že musíme hledat takové $|\alpha\rangle$, aby platilo

$$\langle \psi | \alpha \rangle = \langle x \rangle = \int \langle \psi | x \rangle x \langle x | \psi \rangle dx. \quad (18.36)$$

Napíšeme nejdříve $\langle \psi | \varphi \rangle$ v x -reprezentaci

$$\langle \psi | \alpha \rangle = \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \alpha \rangle dx. \quad (18.37)$$

Nyní porovnejme integrály v posledních dvou rovnicích. Vidíme, že v x -reprezentaci platí

$$\langle x | \alpha \rangle = x \langle x | \psi \rangle. \quad (18.38)$$

Působení operátorem \hat{x} na stav $|\psi\rangle$ s cílem získání stavu $|\alpha\rangle$ je ekvivalentní vynásobení rovnice $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ a x , abychom získali rovnici $\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle$. Je to definice operátoru \hat{x} v souřadnicové reprezentaci.⁸⁴⁾

⁸⁴⁾ Z rovnice (18.38) nevyplývá, že $|\alpha\rangle = x|\psi\rangle$. Nemůžeme totiž vytknout $\langle x |$, neboť faktor x před členem $\langle x | \psi \rangle$ je číslo, které je pro každý stav jiné. Je to hodnota souřadnice elektronu ve stavu $|x\rangle$. Viz rovnici (18.40).

(Nezabývali jsme se hledáním vyjádření matice operátoru \hat{x} v x -reprezentaci. Chcete-li se o to pokusit, nejdříve ukážeme, že

$$\langle x | \hat{x} | x' \rangle = x \delta \langle x - x' \rangle. \quad (18.39)$$

Nakonec dojdete k zábavnému výsledku

$$\hat{x} | x \rangle = x | x' \rangle. \quad (18.40)$$

Operátor \hat{x} má tu zajímavou vlastnost, že působíme-li jím na bázevý stav $| x \rangle$, je to ekvivalentní vynásobení stavu $| x \rangle$ číslem x .

Chcete znát střední hodnotu x^2 ? Je rovna

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx. \quad (18.41)$$

Nebo chceme-li, můžeme psát

$$\langle x^2 \rangle = \langle \psi | \alpha' \rangle,$$

kde

$$| \alpha' \rangle = \hat{x}^2 | \psi \rangle \quad (18.42)$$

\hat{x}^2 znamená $\hat{x}\hat{x}$, tj. operátory působí následně za sebou. Druhý zápis (18.42) umožňuje vypočítat $\langle x^2 \rangle$ v libovolné reprezentaci (při libovolných bázevých stavech). Nyní už víme, jak lze získat střední hodnotu veličiny x^n i libovolného polynomu x .

18.5 OPERÁTOR HYBNOSTI

Zajímá nás, jak lze vypočítat střední hodnotu *hybnosti* elektronu. Omezíme se znovu na jedno-rozměrný případ. Nechť $P(p)dp$ je pravděpodobnost, že při měření získáme hybnosti mezi p a $p + dp$. Potom

$$\langle p \rangle = \int p P(p) dp. \quad (18.43)$$

Nechť $\langle p | \psi \rangle$ je amplituda toho, že $| \psi \rangle$ se nachází ve stavu s přesně určenou hybností $| p \rangle$. Je to tatáž amplituda, kterou jsme ve stati 14.3 nazvali $\langle \text{hyb } p | \psi \rangle$; je funkcí p , tak jako je $\langle x | \psi \rangle$ funkcí x . Amplituda byla normována, proto

$$P(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} |\langle p | \psi \rangle|^2. \quad (18.44)$$

Z toho vyplývá, že

$$\langle p \rangle = \int \langle \psi | p \rangle p \langle p | \psi \rangle \frac{dp}{2\pi\hbar}. \quad (18.45)$$

Tvar je velmi podobný tomu, který jsme měli pro $\langle x \rangle$.

Chceme-li, můžeme zopakovat přesně tutéž hru, jakou jsme dělali s $\langle x \rangle$. Nejdříve přepíšeme uvedený integrál do tvaru

$$\int \langle \psi | p \rangle \langle p | \beta \rangle \frac{dp}{2\pi\hbar}. \quad (18.46)$$

Tento výraz je třeba chápat pouze jako rozšíření zápisu amplitudy $\langle \psi | \beta \rangle$ pomocí bázových stavů určité hybnosti. Z rovnice (18.45) vyplývá, že stav $|\beta\rangle$ je v *hybnostní reprezentaci*⁸⁵⁾ definován jako

$$\langle p | \beta \rangle = p \langle p | \psi \rangle, \quad (18.47)$$

a můžeme tedy psát

$$\langle p \rangle = \langle \psi | \beta \rangle, \quad (18.48)$$

kde

$$|\beta\rangle = \hat{p} |\psi\rangle, \quad (18.49)$$

přičemž operátor \hat{p} je definován v p -reprezentaci rovnicí (18.47).

(Můžete se opět pokusit dokázat, že maticový tvar \hat{p} je

$$\langle p | \hat{p} | p' \rangle = p \delta(p - p') \quad (18.50)$$

a že

$$|\hat{p} | p' \rangle = p | p' \rangle. \quad (18.51)$$

Postup je stejný jako pro x .)

Nyní se nabízí zajímavá otázka. Hodnotu $\langle p \rangle$ můžeme zapsat tak, jak jsme to udělali v rovnici (18.45) a (18.48); známe také význam operátoru \hat{p} v *hybnostní reprezentaci*. Jaká je však interpretace \hat{p} v *souřadnicové reprezentaci*? Potřebujeme ji tehdy, když známe vlnovou funkci $\psi(x)$ a chceme vypočítat její střední hodnotu hybnosti. Ujasníme si, co tím myslíme. Je-li $\langle p \rangle$ určeno rovnicí (18.48), můžeme ji v p -reprezentaci rozvinout a převést zpět na tvar (18.45). Známe-li hybnostní popis stavu, tj. amplitudu $\langle p | \psi \rangle$, která je algebraickou funkcí hybnosti p , můžeme z rovnice (18.47) získat $\langle p | \beta \rangle$ a pokračovat ve vyčíslení integrálu. Otázka nyní zní: Co je třeba udělat, je-li stav vyjádřen v x -reprezentaci, totiž vlnovou funkcí $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$?

Začneme rozvojem rovnice (18.48) do x -reprezentace. Dostaneme

$$\langle p \rangle = \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \beta \rangle dx. \quad (18.52)$$

Dále však potřebujeme vědět, jak vypadá stav $|\beta\rangle$ v x -reprezentaci. Když to zjistíme, můžeme vypočítat integrál. Úkolem je tedy najít funkci $\beta(x) = \langle x | \beta \rangle$.

K tomu můžeme dojít následujícím způsobem. Ve stati 14.3 jsme viděli, jak souvisí $\langle p | \beta \rangle$ s $\langle x | \beta \rangle$. Podle rovnice (14.24) máme

$$\langle p | \beta \rangle = \int e^{-i p x / \hbar} \langle x | \beta \rangle dx. \quad (18.53)$$

Známe-li $\langle p | \beta \rangle$, umíme z této rovnice vypočítat $\langle x | \beta \rangle$. Potřebujeme však vyjádřit výsledek pomocí funkce $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, o níž předpokládáme, že je známá. Začneme rovnicí (18.47) a s využitím rovnice (14.24) napíšeme

$$\langle p | \beta \rangle = p \langle p | \psi \rangle = p \int e^{-i p x / \hbar} \psi(x) dx. \quad (18.54)$$

Protože integrujeme přes x , můžeme p přesunout do integrálu a psát

$$\langle p | \beta \rangle = \int e^{-i p x / \hbar} p \psi(x) dx. \quad (18.55)$$

⁸⁵⁾

V kvantové mechanice se obvykle říká „impulzová reprezentace“. (Pozn. red.)

Porovnejme to s (18.53). Řekli byste, že $\langle x|\beta\rangle$ je rovno $p\psi(x)$? V žádném případě ne! Vlnová funkce $\langle x|\beta\rangle = \beta(x)$ závisí pouze na x a nezávisí na p . V tom je celý problém.

Naštěstí, někdo důvtipný zjistil, že výraz v (18.55) lze integrovat per partes. Protože derivace $e^{-ipx/\hbar}$ podle x je $(-i/\hbar)pe^{-ipx/\hbar}$, bude integrál v (18.55) ekvivalentní

$$-\frac{\hbar}{i} \int \frac{d}{dx} (e^{-ipx/\hbar}) \psi(x) dx.$$

Integrujeme-li po částech, dostaneme

$$-\frac{\hbar}{i} \left[e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{\hbar}{i} \int e^{-ipx/\hbar} \frac{d\psi}{dx} dx.$$

Zajímají-li nás pouze vázané stavy, půjde $\psi(x)$ k nule pro $x = \pm\infty$ a výraz v závorkách bude roven nule, tedy

$$\langle p|\beta\rangle = \frac{\hbar}{i} \int e^{-ipx/\hbar} \frac{d\psi}{dx} dx. \quad (18.56)$$

Porovnejme tento výsledek s rovnicí (18.53). Vidíme, že

$$\langle x|\beta\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x). \quad (18.57)$$

Máme vše potřebné, co je nutné k řešení rovnice (18.52). Výsledná odpověď zní

$$\langle p\rangle = \int \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) dx. \quad (18.58)$$

Ukázali jsme si, jak vypadá rovnice (18.48) v souřadnicové reprezentaci.

Možná jste si všimli, že se objevuje zajímavá podobnost. Když jsme se ptali na střední hodnotu energie stavu $|\psi\rangle$, řekli jsme si, že

$$\langle E\rangle = \langle \psi|\varphi\rangle, \text{ kde } |\varphi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle.$$

Totéž můžeme v souřadnicové reprezentaci zapsat tako

$$\langle E\rangle = \int \psi^*(x) \varphi(x) dx, \text{ kde } \varphi(x) = \hat{\mathcal{H}}\psi(x).$$

$\hat{\mathcal{H}}$ je algebraický operátor, který působí na funkci x . Když nás zajímala střední hodnota souřadnice x , ukázali jsme, že můžeme psát

$$\langle x\rangle = \langle \psi|\alpha\rangle, \text{ kde } |\alpha\rangle = \hat{x}|\psi\rangle.$$

Odpovídající rovnice v souřadnicovém zápisu jsou

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) \alpha(x) dx, \text{ kde } \alpha(x) = x\psi(x).$$

Když jsme chtěli znát střední hodnotu hybnosti p , psali jsme

$$\langle p \rangle = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle, \text{ kde } |\beta\rangle = \hat{p}|\psi\rangle,$$

což v souřadnicové reprezentaci můžeme vyjádřit takto

$$\langle p \rangle = \int \psi(x) \beta(x) dx, \text{ kde } \beta(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x).$$

Ve všech třech případech jsme začali stavem $|\psi\rangle$ a pomocí *kvantově mechanického* operátoru jsme vytvořili (hypotetický) stav. V souřadnicové reprezentaci jsme odpovídající vlnovou funkci získali působením *algebraického* operátoru na vlnovou funkci $\psi(x)$. V jednorozměrných případech existují následující vzájemná přiřazení

$$\hat{H} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

$$\hat{x} \rightarrow x \tag{18.59}$$

$$\hat{p}_x \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}.$$

Zavedli jsme nový symbol $\hat{\mathcal{P}}_x$, který označuje algebraický operátor $(\hbar/i)\partial/\partial x$:

$$\hat{\mathcal{P}}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \tag{18.60}$$

Index x u písmene $\hat{\mathcal{P}}$ nám má připomínat, že pracujeme pouze s x -ovou složkou hybnosti.

Výsledky můžeme snadno rozšířit na všechny tři rozměry. Zbývající dvě složky hybnosti jsou

$$\hat{p}_y \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Můžeme si dokonce zavést operátor *vektoru* hybnosti

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathcal{P}} = \frac{\hbar}{i} \left(\mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

kde e_x , e_y a e_z jsou jednotkové vektory ve třech směrech. Můžeme použít ještě elegantnější zápis

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathcal{P}} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (18.61)$$

Konečný výsledek je ten, že přinejmenším k některým kvantově mechanickým operátorům existují příslušné algebraické operátory v souřadnicové reprezentaci. Všechny dosavadní výsledky (v trojrozměrném tvaru) jsou shrnuty v *tab. 18.1*.

Tabulka 18.1

Fyzikální veličina	Operátor	Souřadnicový zápis
Energie	\hat{H}	$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$
Poloha	\hat{x}	x
	\hat{y}	y
	\hat{z}	z
Hybnost	\hat{p}_x	$\hat{\mathcal{P}}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
	\hat{p}_y	$\hat{\mathcal{P}}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$
	\hat{p}_z	$\hat{\mathcal{P}}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$

Každý operátor má dva ekvivalentní zápisy:⁸⁶⁾

$$|\varphi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle \quad (18.62)$$

nebo

$$\varphi(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{A}} \psi(\mathbf{r}). \quad (18.63)$$

Uvedeme si nyní několik příkladů použití těchto myšlenek. První poukazuje pouze na vztah mezi $\hat{\mathcal{P}}$ a $\hat{\mathcal{H}}$. Použijeme-li $\hat{\mathcal{P}}_x$ dvakrát po sobě, dostaneme

$$\hat{\mathcal{P}}_x \hat{\mathcal{P}}_x = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Znamená to, že můžeme psát rovnost

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \{ \hat{\mathcal{P}}_x \hat{\mathcal{P}}_x + \hat{\mathcal{P}}_y \hat{\mathcal{P}}_y + \hat{\mathcal{P}}_z \hat{\mathcal{P}}_z \} + U(\mathbf{r}),$$

⁸⁶⁾ V mnoha učebnicích se pro \hat{A} a $\hat{\mathcal{A}}$ používá stejný symbol, neboť obě vyjadřují stejnou fyziku a je i výhodnější používat pouze jedno písmeno. Z kontextu je obvykle zřejmé, o který význam jde.

nebo ve vektorovém tvaru

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \cdot \hat{\mathcal{P}} \cdot \hat{\mathcal{P}} + U(\mathbf{r}). \quad (18.64)$$

(Všechny členy v algebraickém operátoru, nad nimiž není značka operátoru $\hat{}$, představují obyčejné násobení.) Uvedená rovnice je velmi sympatická, neboť se snadno pamatuje, pokud jste nezapomněli základní kurz fyziky. Každému je známo, že (nerelativistická) energie je rovna právě kinetické energii $p^2/2m$ plus potenciální energie a \mathcal{H} je právě operátor celkové energie.

Uvedený výsledek zapůsobil na některé učitele fyziky v takové míře, že začali studentům vloukat do hlavy celou klasickou fyziku ještě před kurzem kvantové mechaniky. (My smýšlíme jinak.) Takovéto paralely jsou často klamné z jednoduchého důvodu: V operátorových rovnicích je důležité pořadí jednotlivých faktorů, ale v klasických rovnicích to není podstatné.

V 15. kapitole jsme definovali operátor \hat{p}_x pomocí operátoru posunutí \hat{D}_x takto (viz rovnici (15.27))

$$|\psi'\rangle = \hat{D}_x(\delta)|\psi\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \delta\right)|\psi\rangle, \quad (18.65)$$

kde δ představuje *malé* posunutí. Ukážeme si, že je to ekvivalentní s naší nynější definicí. Podle toho, co jsme dosud uvedli, můžeme rovnici přepsat do tvaru

$$\psi'(x) = \psi(x) + \frac{\partial \psi}{\partial x} \delta.$$

Pravá strana není nic jiného, než Taylorův rozvoj stavu $\psi(x + \delta)$, který dostaneme posunutím stavu doleva o δ (nebo posunem souřadnic doprava a tutéž hodnotu). Obě definice \hat{p} jsou stejné!

Použijeme tuto skutečnost na další ilustraci. Uvažujme, že v nějakém složitém systému máme skupinu částic označených 1, 2, 3, ... (Abychom záležitost nekomplikovali, budeme se držet jednorozměrného případu.) Vlnová funkce, která popisuje stav, je funkcí všech souřadnic x_1, x_2, x_3, \dots . Budeme ji označovat jako $\psi(x_1, x_2, x_3, \dots)$. Posuňme nyní celý systém (doleva) o δ . Novou vlnovou funkci

$$\psi'(x_1, x_2, x_3, \dots) = \psi(x_1 + \delta, x_2 + \delta, x_3 + \delta, \dots)$$

můžeme psát jako

$$\psi'(x_1, x_2, x_3, \dots) = \psi(x_1, x_2, x_3, \dots) + \left\{ \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + \dots \right\}. \quad (18.66)$$

Podle rovnice (18.65) je operátor hybnosti stavu $|\psi\rangle$ (nazvěme jej *celková* hybnost) roven

$$\hat{\mathcal{P}}_{\text{celk}} = \frac{\hbar}{i} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} + \dots \right\}.$$

Je to totéž jako

$$\hat{\mathcal{P}}_{\text{celk}} = \hat{\mathcal{P}}_{x_1} + \hat{\mathcal{P}}_{x_2} + \hat{\mathcal{P}}_{x_3} + \dots \quad (18.67)$$

Pro operátory hybnosti platí pravidlo, že celková hybnost je rovna součtu hybností jednotlivých částí. Vidíme, že všechno pěkně ladí a je konzistentní.

18.6 MOMENT HYBNOSTI

Podívejme se jen tak pro zajímavost na další operaci – operaci orbitálního momentu hybnosti. V 15. kapitole jsme definovali operátor \hat{J}_z pomocí $\hat{R}_z(\varphi)$, operátoru otočení o úhel φ kolem osy z . Uvažujme systém popsáný jednoduchou vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r})$, která je pouze funkcí souřadnic, a neuvažujeme to, že elektron může mít spin orientovaný buď směrem nahoru, nebo dolů. Znamená to, že budeme zanedbávat *vnitřní* spinový moment hybnosti a uvažovat pouze *orbitální* složku. Aby nedošlo k nejasnostem, označíme orbitální operátor \hat{L}_z a definujeme jej pomocí operátoru rotace o nekonečně malý úhel ε

$$\hat{R}_z(\varepsilon) |\psi\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_z \right) |\psi\rangle.$$

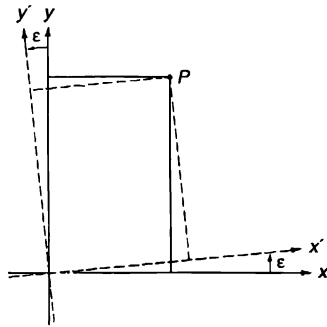
(Nezapomínejme, že tato definice se týká stavu $|\psi\rangle$, který nemá vnitřní spinové proměnné a závisí pouze na souřadnicích $\mathbf{r} = (x, y, z)$.) Podíváme-li se na stav $|\psi\rangle$ z nové souřadnicové soustavy, která je otočena kolem osy z o malý úhel ε , uvidíme nový stav

$$|\psi'\rangle = \hat{R}_z(\varepsilon) |\psi\rangle.$$

Rozhodneme-li se vyjádřit stav $|\psi\rangle$ v souřadnicové reprezentaci, tj. pomocí jeho funkce $\psi(\mathbf{r})$, očekáváme, že by mělo platit

$$\psi'(\mathbf{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{\mathcal{L}}_z \right) \psi(\mathbf{x}). \quad (18.68)$$

Co je $\hat{\mathcal{L}}$? Vysvětlíme si to. Necht' má bod P v nové souřadnicové soustavě souřadnice x a y . (Správně bychom měli psát x' a y' ; čárky však budeme vynechávat). Jeho původní souřadnice byly $x - \varepsilon y$ a $y + \varepsilon x$, jak je vidět z obr. 18.2.



Obr. 18.2 Rotace os kolem osy z o malý úhel ε

Protože amplituda výskytu elektronu v bodě P se rotací souřadnic nemění, můžeme psát

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x + \varepsilon y, y - \varepsilon x, z) = \psi(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial \psi}{\partial x} - \varepsilon x \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

(nezapomínejme, že ε je malý úhel). Znamená to, že

$$\hat{\mathcal{L}}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (18.69)$$

To je hledaná odpověď. Všimněme si, že to je ekvivalentní se zápisem

$$\hat{\mathcal{L}}_z = x \hat{\mathcal{P}}_y - y \hat{\mathcal{P}}_x. \quad (18.70)$$

Vrátíme-li se ke kvantově mechanickým operátorům, můžeme psát

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x. \quad (18.71)$$

Vzorec je snadno zapamatovatelný, protože je podobný známému vztahu z klasické mechaniky; vyjadřuje z-vou složku rovnice

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (18.72)$$

Při dosavadních operátorových výpočtech jsme mohli pozorovat zajímavou vlastnost, že mnohé klasické rovnice přecházejí do kvantově mechanického tvaru. Existují však i takové, pro které to neplatí? Zřejmě ano; kdyby se totiž všechny rovnice daly přenést, kvantová mechanika by se nijak neodlišovala od klasické a nemohla by se objevit ani žádná nová fyzika. Uvedme si příklad. V klasické fyzice platí rovnice

$$x \dot{p}_x - \dot{p}_x x = 0.$$

Jakou hodnotu má pravá strana v kvantové mechanice?

$$\hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} = ?.$$

Počítejme v x -reprezentaci. Abychom viděli, co děláme, přidáme k výrazu nějakou vlnovou funkci $\psi(x)$. Máme

$$x \hat{\mathcal{P}}_x \psi(x) - \hat{\mathcal{P}}_x x \psi(x)$$

neboli

$$x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \psi(x).$$

Nezapomínejme, že derivace působí vždy doprava. Dostáváme

$$x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{\hbar}{i} \psi(x). \quad (18.73)$$

Odpověď tedy zní: *nenulovou*. Celá operace je vlastně pouze obyčejné násobení faktorem $-\hbar/i$:

$$\hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} = -\frac{\hbar}{i}. \quad (18.74)$$

Kdyby Planckova konstanta byla rovna nule, byly by výsledky klasické a kvantové fyziky stejné a nebylo by třeba učit se žádnou kvantovou mechaniku!

Mimochodem, je-li výraz složený z operátorů \hat{A} a \hat{B} následujícím způsobem

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

nenulový, říkáme, že „operátory nekomutují“. Rovnice, jako je např. (18.74), se nazývá *komutační pravidlo*. Snadno se můžeme přesvědčit, že komutační pravidlo pro \hat{p}_x a \hat{y} je

$$\hat{p}_x\hat{y} - \hat{y}\hat{p}_x = 0.$$

Existuje další velmi důležité komutační pravidlo pro složky momentu hybnosti

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z \quad (18.75)$$

Chcete-li získat zručnost v práci s operátory \hat{x} a \hat{p} , dokážete uvedený vztah sami.

Je zajímavé si všimnout, že nekomutující operátory se objevují i v klasické fyzice. Narazili jsme na ně, když jsme hovořili o otočeních v prostoru. Vezmeme-li si například knihu a otočíme ji nejdříve o 90° kolem osy x a pak o 90° kolem osy y , dostaneme něco zcela jiného, než když ji otočíme nejdříve kolem osy y a pak kolem osy x . Právě tato vlastnost prostoru je odpovědná za rovnici (18.75).

18.7 ČASOVÁ ZÁVISLOST STŘEDNÍCH HODNOT

Nyní se zamyslíme ještě nad jednou zajímavou otázkou: Jak se mění střední hodnoty v závislosti na čase? Na chvíli předpokládejme, že máme operátor \hat{A} , který žádným přímým způsobem na čase nezávisí. Máme na mysli operátory, jako jsou \hat{x} nebo \hat{p} . (Vyloučíme ty operátory, které přímo závisí na čase, např. operátor vnějšího potenciálu $U(x, t)$.) Předpokládejme, že vypočteme $\langle A \rangle$ v nějakém stavu $|\psi\rangle$, tj.

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (18.76)$$

Jak bude $\langle A \rangle$ záviset na čase? A proč by na něm vlastně mělo záviset? Jeden důvod by mohl být ten, že samotný operátor je explicitně závislý na čase – např. souvisí-li s časově-proměnným potenciálem $U(x, t)$. Ale i když operátor nezávisí na čase, řekněme operátor $\hat{A} = \hat{x}$, příslušná střední hodnota na něm může záviset. Opravdu, střední hodnota polohy částice se může měnit s časem. Jak to však vyplývá z rovnice (18.76), když přece \hat{A} neobsahuje žádnou časovou závislost? Souvisí to s tím, že stav $|\psi\rangle$ se může měnit s časem. Při nestacionárních stavech jsme časovou závislost vyjadřovali přímo zápisem stavu $|\psi(t)\rangle$. Ukážeme si, že časovou změnu $\langle A \rangle$ určuje nový operátor, který označíme \hat{A} . Pamatujte, že \hat{A} je operátor, a proto tečka v našem případě neznamená časovou derivaci; je to pouze zápis *nového* operátoru \hat{A} , který je definován takto

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (18.77)$$

Naši úlohou je určit operátor \hat{A} .

Víme, že rychlost změny stavu je určena hamiltoniánem následujícím způsobem

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (18.78)$$

Je to vlastně abstraktní tvar zápisu naší původní definice hamiltoniánu

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_{ij} H_{ij} C_j. \quad (18.79)$$

Komplexním sdružením získáme rovnici, která je ekvivalentní s rovnicí

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}. \quad (18.80)$$

Podívejme se, co se stane, budeme-li rovnici (18.76) derivovat podle času. Protože každé ψ závisí na t , dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi | \right) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left(\frac{d}{dt} | \psi \rangle \right). \quad (18.81)$$

Vyjádríme-li derivace pomocí rovnic (18.78) a (18.80), dojdeme nakonec k rovnici

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \{ \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle \},$$

což je totéž, jako

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) | \psi \rangle.$$

Porovnáním s rovnicí (18.77) vidíme, že

$$\hat{A} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}). \quad (18.82)$$

Je to zajímavý výsledek, který platí pro libovolný operátor \hat{A} .

Mimočodem, kdyby byl operátor \hat{A} přímo závislý na čase, dostali bychom

$$\hat{A} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}. \quad (18.83)$$

Na nějakém příkladu si ověříme, zda vztah (18.82) má skutečně smysl. Například, jaký operátor přísluší \hat{x} ? Tvrdíme, že by mělo platit

$$\hat{x} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{x} - \hat{x} \hat{H}). \quad (18.84)$$

Co to vlastně je? Jeden způsob, jak to můžeme zjistit, je ten, že uvedený komutátor přepíšeme do souřadnicové reprezentace s využitím algebraického tvaru operátoru $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}}x - x\hat{\mathcal{H}} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} x - x \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\}.$$

Necháme-li celý výraz působit na vlnovou funkci $\psi(x)$ a rozepíšeme všechny derivace, které známe, dostaneme nakonec výsledek

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2},$$

což je totéž, jako

$$-i \frac{\hbar}{m} \hat{\mathcal{P}}_x \psi.$$

Zjistili jsme tedy, že

$$\hat{\mathcal{H}}\hat{x} - \hat{x}\hat{\mathcal{H}} = -i \frac{\hbar}{m} \hat{p}_x \quad (18.85)$$

neboli

$$\hat{x} = \frac{\hat{p}_x}{m}. \quad (18.86)$$

Sympatický výsledek. Říká, že mění-li se střední hodnota x s časem, je rychlost těžiště rovna střední hybnosti dělené m . Přesně jako v klasické mechanice.

Uvedme další příklad. Jaká je rychlost změny střední hodnoty hybnosti? Počítáme opět stejným způsobem. Operátor časové změny je roven

$$\hat{p} = \frac{i}{\hbar} (\hat{\mathcal{H}}\hat{p} - \hat{p}\hat{\mathcal{H}}). \quad (18.87)$$

Výpočet můžeme provést, jak obvykle, v x -reprezentaci. Pamatuje, že \hat{p} přejde na $\frac{\hbar}{i} (d/dx)$, což znamená, že derivaci budeme aplikovat na potenciální energii U (obsaženou v $\hat{\mathcal{H}}$), ale pouze ve druhém členu. Ukáže se, že je to jediný člen, který zůstane, tedy

$$\hat{\mathcal{H}}\hat{p} - \hat{p}\hat{\mathcal{H}} = i\hbar \frac{dU}{dx},$$

odkud

$$\hat{p} = -\frac{dU}{dx}. \quad (18.88)$$

Opět klasický výsledek. Na pravé straně je síla, což znamená, že jsme odvodili Newtonův zákon! Pamatuje si však, že zákony pro operátory dávají střední hodnoty veličin, ale nepopisují podrobně, co probíhá uvnitř atomu.

Podstatný rozdíl kvantové mechaniky je v tom, že $\hat{p}\hat{x}$ není rovno $\hat{x}\hat{p}$. Navzájem se liší jen nepatrně – o malou hodnotu \hbar . Ale všechny nádherné komplikace s vlnami, interferencemi a ostatními věcmi vyplývají z nepatrného faktu, že $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$ není rovno přesně nule.

Zajímavá je i historie této myšlenky. V průběhu několika měsíců v roce 1926 objevili Heisenberg a Schrödinger – nezávisle na sobě – zákony popisující mechaniku atomů. Schrödinger zavedl vlnovou funkci $\psi(x)$ a našel k ní rovnici. Heisenberg na druhé straně zjistil, že přírodu lze popisovat klasickými rovnicemi s výjimkou toho, že $xp - px$ bude muset být rovno $i\hbar$. Dosáhl toho tím, že rovnice přepsal do tvaru speciálních matic. Řečeno naším dnešním jazykem, použil maticovou energetickou reprezentaci. Oba přístupy, Heisenbergova maticová algebra i Schrödingeroва diferenciální rovnice vysvětlily atom vodíku. O několik měsíců později se podařilo Schrödingerovi dokázat, že obě teorie jsou ekvivalentní – o čemž jsme se částečně přesvědčili. Tyto dva rozdílné matematické přístupy však byly objeveny nezávisle na sobě.

Schrödingerova rovnice v klasickém kontextu: Seminář o supravodivosti

- 19.1 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE V MAGNETICKÉM POLI
- 19.2 ROVNICE KONTINUITY PRO PRAVDĚPODOBNOSTI
- 19.3 DVA DRUHY HYBNOSTI
- 19.4 INTERPRETACE VLNOVÉ FUNKCE
- 19.5 SUPRAVODIVOST
- 19.6 MEISSNERŮV JEV
- 19.7 KVANTOVÁNÍ TOKU
- 19.8 DYNAMIKA SUPRAVODIVOSTI
- 19.9 JOSEPHSONŮV JEV

19.1 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE V MAGNETICKÉM POLI

Tuto přednášku uvádím jen pro rozptýlení. Rád bych ji podal v trochu jiném stylu – zajímá mě totiž výsledný účinek. Není součástí tohoto kurzu, takže se na ni nedívejte jako na mou snahu vás za pět minut naučit něco nového. Spíš mám představu, že bych rád v rámci semináře nebo výzkumné zprávy seznámil s danou problematikou pokročilejší posluchače, kteří toho z kvantové

mechaniky znají poměrně dost. Hlavní rozdíl mezi seminářem a normální přednáškou je v tom, že referující nevsvětluje látku krok za krokem a nevykonává všechny algebraické výpočty. Místo toho, aby se pouštěl do všech podrobností, řekne: „Uděláte-li to a to, vyjde vám toto.“ Takže v této přednášce popíšu všechny myšlenky jednu za druhou, ale uvedu pouze *výsledky* výpočtů. Měli byste si uvědomit, že od vás nikdo neočekává, že budete všemu ihned rozumět, ale bylo by dobré, kdybyste uvěřili (více nebo méně) tomu, že doplníte-li si chybějící kroky sami, dojdete najednou k přesvědčení, že je to tak správně.

To vše zmiňuji jen tak na okraj. Hlavní však je, že o tomto tématu hovořit *chci*. Je poměrně nové a moderní a bylo by bez pochyby zcela logické věnovat se mu v rámci vědeckého semináře. Týká se Schrödingerovy rovnice v klasickém kontextu – případu supravodivosti.

Vlnová funkce, která se objevuje ve Schrödingerově rovnici, je obvykle vztažena jen na jednu nebo dvě částice. Sama o sobě nepředstavuje něco, co má klasický význam – na rozdíl od vektorového pole, nebo vektorového potenciálu, nebo něčeho podobného. Vlnová funkce jediné částice je „pole“ (v tom smyslu, že je funkcí polohy), ale obecně řečeno, nemá klasický význam. Přesto se však vyskytují situace, v nichž má kvantově mechanická vlnová funkce *přece jen* klasický význam, a právě jimi bych se nyní rád začal zabývat. Svěrázné kvantově mechanické chování látky v mikroskopickém měřítku se obvykle neprojevuje v makroskopickém světě, nebereme-li v úvahu standardní závěry týkající se toho, že jsou jím podmíněny Newtonovy zákony – zákony klasické mechaniky. Jsou však jisté situace, v nichž vlastnosti kvantové mechaniky mohou vystoupit do popředí i v makroskopickém měřítku.

Při nízkých teplotách, když se energie soustavy sníží na velmi, velmi malou hodnotu, dochází k tomu, že místo ohromného množství stavů do hry vstupuje jen velmi malý počet z nich: jen ty, které se nacházejí blízko základního stavu. Za těchto okolností se jeho kvantově mechanický charakter může projevit i navenek. Účelem této přednášky je poukázat na souvislost mezi kvantovou mechanikou a makroskopickými jevy – tedy ne obvyklá diskuze o tom, jak Newtonova mechanika vystihuje či reprodukuje kvantovou mechaniku, pracujeme-li se středními hodnotami veličin. Jde o speciální situaci, v níž kvantová mechanika vytváří vlastní, pro ni charakteristické jevy v makroskopickém měřítku.

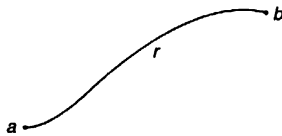
Začnu tím, že vám připomenu některé vlastnosti Schrödingerovy rovnice.⁸⁷⁾ Pomocí ní *chci* totiž popsat chování částice v magnetickém poli, protože supravodivé jevy jsou spjaty s magnetickými poli. Vnější magnetické pole popisujeme vektorovým potenciálem, takže úloha zní: Jaké jsou zákony kvantové mechaniky v poli vektorového potenciálu? Princip, který určuje kvantově mechanické chování částice ve vektorovém potenciálu, je velmi jednoduchý. Amplituda toho, že v přítomnosti pole přejde částice z jednoho místa na druhé do nějaké dráze, je rovna amplitudě toho, že po téže dráze projde tehdy, když pole neexistuje, vynásobené faktorem e^{ix} , kde x představuje součin elektrického náboje a křivkového integrálu vektorového potenciálu vyděleného Planckovou konstantou⁸⁸⁾ (obr. 19.1):

$$\langle b | a \rangle_A = \langle b | a \rangle_{A=0} \cdot \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar} \int_a^b \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right\}. \quad (19.1)$$

Je to základní tvrzení kvantové mechaniky.

⁸⁷⁾ Fakticky vám je nepřipomínám, protože některé z těchto rovnic jsem předtím neodvodil, mějme však na paměti duch tohoto semináře.

⁸⁸⁾ Stať 15.5, díl 2.



Obr. 19.1 Amplituda přechodu z a do b po dráze r je úměrná $\exp(iq/\hbar) \int_a^b A \cdot ds$

V nepřítomnosti vektorového potenciálu má Schrödingerova rovnice pro nabitou, nerelativistickou, bezspinovou částici tvar

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi + q\varphi \psi, \quad (19.2)$$

kde φ je elektrický potenciál, takže $q\varphi$ je potenciální energie.⁸⁹⁾ Rovnice (19.1) je ekvivalentní tvrzení, že v magnetickém poli jsou gradienty v hamiltoniánu pokaždé nahrazeny gradientem minus qA , takže rovnice (19.2) bude vypadat takto

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \psi + q\varphi \psi. \quad (19.3)$$

To je Schrödingerova rovnice pro nerelativistickou, bezspinovou částici s nábojem q , pohybující se v elektromagnetickém poli A, φ .

Pro ilustraci pravdivosti uvedeného tvrzení bych rád uvedl jednoduchý případ, v němž místo spojité funkce budeme uvažovat řadu atomů rozestavených podél osy x tak, že vzdálenost mezi libovolnými dvěma sousedy je b a budeme předpokládat, že v nepřítomnosti pole přeskakuje elektron od jednoho atomu ke druhému s amplitudou⁹⁰⁾ $-K$. Existuje-li ve směru x vektorový potenciál $A_x(x, t)$, změní se podle rovnice (19.1) amplituda přeskoğu ze své původní hodnoty o faktor $\exp[i(q/\hbar) A_x b]$, kde exponent představuje $(i q/\hbar)$ násobek vektorového potenciálu integrovaného od jednoho atomu k druhému. Pro jednoduchost budeme psát $(q/\hbar) A_x \equiv f(x)$, jelikož A_x je obecně závislé na x . Označíme-li amplitudu toho, že elektron najdeme u atomu „ n “ v místě x jako $C(x) \equiv C_n$, rychlost její změny je dána rovnicí

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} C(x) = E_0 C(x) - K e^{-ibf(x+b/2)} C(x+b) - K e^{+ibf(x-b/2)} C(x-b). \quad (19.4)$$

Skládá se ze tří částí: Zaprvé, elektron sedící na místě x má nějakou energii E_0 . Tu, jako obvykle, udává člen $E_0 C(x)$. Dále tu máme výraz $-KC(x+b)$, představující amplitudu toho, že elektron vykonal od atomu „ $n+1$ “ v místě $x+b$ jeden skok směrem dozadu. Protože to udělal ve vektorovém potenciálu, musí se fáze amplitudy posunout v souladu s pravidlem určeným rovnicí (19.1). Pokud se A_x na meziatomové vzdálenosti příliš nemění, můžeme integrál nahradit součinem integrační dráhy b a hodnotou A_x v jejím středu. Takže $(i q/\hbar)$ krát integrál je vlastně

⁸⁹⁾ Jen si, prosím vás, toto φ nepleťte s naším bývalým používáním φ pro označení stavu nebo dokonce úhlu!

⁹⁰⁾ K je tatáž veličina, kterou jsme v kapitole 11 v úloze o lineární mřížce v nepřítomnosti pole označovali písmenem A .

$bf(x + b/2)$. Protože elektron skáče směrem dozadu, vzal jsem posun fáze se záporným znaménkem. Tím je vysvětlen druhý člen. Podobně existuje určitá amplituda toho, že elektron přiskočil z opačné strany, takže tentokrát potřebujeme vynásobit vzdálenost b vektorovým potenciálem v bodě $(x - b/2)$. Tak dostaneme třetí člen. Jejich součet představuje rovnici pro amplitudu toho, že elektron nacházející se v poli charakterizovaném vektorovým potenciálem najdeme v bodě x .

Dále víme, že je-li funkce $C(x)$ dostatečně hladká (bereme limitu velkých vlnových délek) a přiblížíme-li atomy blíže k sobě, bude rovnice (14.7) přibližně popisovat chování elektronu ve vakuu. V dalším kroku tedy provedeme rozvoj obou stran rovnice (18.4) do řady podle mocnin b , předpokládáme-li, že b je velmi malé. Například, je-li b rovno nule, zbude z pravé strany jen $(E_0 - 2K)C(x)$, takže v nulové aproximaci je energie $E_0 - 2K$. Pak přijdou na řadu mocniny b . Protože však mají obě exponenciály opačná znaménka, zůstanou jen sudé z nich. Provedeme-li Taylorův rozvoj funkcí $C(x)$, $f(x)$ a exponenciál a pak vezmeme všechny členy s b^2 , dostaneme

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial C(x)}{\partial t} = E_0 C(x) - 2KC(x) - Kb^2 [C''(x) - 2if(x)C'(x) - if'(x)C(x) - f^2(x)C(x)]. \quad (19.5)$$

(Čárky znamenají derivaci podle x .)

Toto hrůzostrašné nahromadění různých symbolů vypadá dost složitě. Z matematické stránky však znamená přesně totéž, co

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial C(x)}{\partial t} = (E_0 - 2K)C(x) - Kb^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} - if(x) \right] \left[\frac{\partial}{\partial x} - if(x) \right] C(x). \quad (19.6)$$

Působením druhé závorky na $C(x)$ získáme $C'(x)$ minus $if(x)C(x)$. Působí-li na dva členy první závorky, dostaneme člen $C''(x)$, členy obsahující první derivaci $f(x)$ nebo $C(x)$, a nakonec ještě $-f^2(x)C(x)$. A nyní si vzpomeňme, že pro nulové magnetické pole (stať 11.3) představují řešení částici s efektivní hmotností m_{ef} danou vztahem

$$Kb^2 = \frac{\hbar}{m_{ef}}.$$

Položíme-li pak $E_0 = -2K$ a za $f(x)$ dosadíme původní výraz $(q/\hbar)A_x$, snadno si ověříme, že rovnice (19.6) je totožná s první částí rovnice (19.3). (Původ členu s potenciální energií je dobře známý, takže jsem se nenamáhal ho do této diskuze zahrnout.) Tvzení (19.1), týkající se toho, že vektorový potenciál mění všechny amplitudy o exponenciální faktor, je ekvivalentní pravidlu, že operátor hybnosti $(\hbar/i)\nabla$ se nahradí operátorem

$$\frac{\hbar}{i} \nabla - qA,$$

jak je to v Schrödingerově rovnici (19.3).

19.2 ROVNICE KONTINUITY PRO PRAVDĚPODOBNOSTI

Nyní přejdu k druhému bodu. Se Schrödingerovou rovnicí pro jednu částici je spojena důležitá myšlenka, že pravděpodobnost najít částici na nějakém místě je daná druhou mocninou

absolutní hodnoty vlnové funkce. Taktéž je pro kvantovou mechaniku charakteristické, že pravděpodobnost se zachovává v lokálním smyslu. Když pravděpodobnost nalezení elektronu někde klesá a jinde zase narůstá (přičemž celková pravděpodobnost zůstává nezměněná), musí se něco dít mezi tím. Jinými slovy, elektron má vlastnost spojitosti v tom smyslu, že pokud se pravděpodobnost na jednom místě zmenšuje a na druhém zase zvětšuje, musí mezi oběma místy existovat určitý druh toku. Postavíme-li tam do cesty stěnu, bude to mít určitý vliv na pravděpodobnosti, které už nebudou mít tytéž hodnoty. Takže zachování pravděpodobnosti není samo o sobě vyčerpávající formulací zákona zachování, tak jako zachování energie v sobě nemá takovou hloubku a důležitost jako *lokální* zachování energie (stať 27.1, díl 2). Mizí-li energie, musí z daného místa existovat odtok energie. Podobným způsobem bychom rádi našli také „proudění“ pravděpodobnosti, že dochází-li k nějaké změně hustoty pravděpodobnosti (pravděpodobnost být nalezen v jednotkovém objemu), lze ji považovat za důsledek přítoku nebo odtoku pravděpodobnosti způsobeného nějakým prouděním. Toto proudění by byl vektor a mohl by být interpretován takto: x -ová složka by vyjadřovala výslednou pravděpodobnost (za jednotku času a na jednotku plochy) toho, že částice projde ve směru osy x plochou rovnoběžnou s rovinou yz . Průchod ve směru $+x$ je považován za kladný a průchod v opačném směru za záporný.

Existuje takové proudění? Víme, že hustota pravděpodobnosti $P(\mathbf{r}, t)$ je vyjádřena pomocí vlnové funkce jako

$$P(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (19.7)$$

Ptám se: Existuje takový tok J , že

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot J? \quad (19.8)$$

Vezmu-li časovou derivaci rovnice (19.7), dostanu dva členy

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (19.9)$$

Nyní využijme Schrödingerovu rovnici (rovnici (19.3)) na vyjádření $\partial \psi / \partial t$, vezmeme rovnici k ní komplexně sdruženou, abychom dostali $\partial \psi^* / \partial t$ – u každého i se změní znaménko. Dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} \psi^* \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \psi + q\varphi \psi^* \psi - \\ & - \psi \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + qA \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + qA \right) \psi^* - q\varphi \psi^* \psi. \end{aligned} \quad (19.10)$$

Členy obsahující potenciál a ještě mnoho dalších se navzájem vyruší. Ukazuje se, že to, co zůstane, lze opravdu vyjádřit jako přesnou divergenci. Celá rovnice je ekvivalentní zápisu

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot \frac{1}{2m} \left\{ \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \psi + \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right) \psi^* \right\}. \quad (19.11)$$

Ve skutečnosti to není tak složité, jak to vypadá na první pohled. Dostali jsme symetrickou kombinaci ψ^* vynásobenou určitou operací působící na ψ , plus ψ vynásobenou komplexně

sduženou operací působící na ψ^* . Je to nějaká veličina plus její vlastní komplexně sdružená hodnota, takže jako celek je tento výraz reálný – jak by se i patřilo. Operaci si můžeme zapamatovat asi takto: Je to operátor hybnosti \mathcal{P} minus qA . Tok v rovnici (19.8) bych mohl zapsat jako

$$J = \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{\hat{\mathcal{P}} - qA}{m} \psi \right]^* \psi + \psi^* \left[\frac{\hat{\mathcal{P}} - qA}{m} \psi \right] \psi \right\}. \quad (19.12)$$

Existuje tedy tok J , který splňuje rovnici (19.8).

Rovnice (19.8) vyjadřuje, že pravděpodobnost se zachovává v lokálním významu. Zmizí-li částice z nějaké oblasti, nemůže se objevit v jiné, aniž by se něco dělo mezi nimi. Představme si, že první oblast je obklopena uzavřenou plochou v tak velké vzdálenosti, že pravděpodobnost najít částici na ní je rovna nule. Celková pravděpodobnost zastihnout ji někde uvnitř plochy je dána integrováním P přes příslušný objem. Podle Gaussovy věty je však objemový integrál divergence J roven plošnému integrálu toku J . Je-li ψ na ploše nulové, říká rovnice (19.12), že J je rovno nule, takže celková pravděpodobnost najít částici uvnitř se nemůže měnit. Pouze přiblíží-li se nějaká část pravděpodobnosti k hranici, může z ní něco prosáknout ven. Lze říci, že unikne jedině povrchem – a to je právě lokální zachování.

19.3 DVA DRUHY HYBNOSTI

Rovnice pro tok je poměrně zajímavá a občas s sebou přináší určité starosti. Podle našich představ by mohl být tok vyjádřen jako hustota částic krát rychlost. Hustota částic by vypadala jako $\psi\psi^*$, což je v pořádku. A každý člen v rovnici (19.12) nám připomíná typický výraz pro střední hodnotu operátoru

$$\frac{(\hat{\mathcal{P}} - qA)}{m}, \quad (19.13)$$

takže bychom ho snad měli považovat za rychlost toku. Zdá se, jako kdyby rychlost souvisela s hybností dvojím způsobem, protože stejně dobře bychom mohli prohlásit, že je určena hybností vydělenou hmotností, tj. jako $\hat{\mathcal{P}}/m$. Obě možnosti se liší vektorovým potenciálem.

Věc se má tak, že zmíněné možnosti byly objeveny ještě v klasické fyzice, kde se přišlo na to, že hybnost lze definovat dvěma způsoby.⁹¹⁾ Jedna z nich se nazývá *kinematická hybnost*, ale aby nedošlo k nedorozumění, budu jí v této přednášce říkat *mv-hybnost*. Získáme ji tak, že hmotnost vynásobíme rychlostí. Druhá je matematictější a abstraktnější; někdy se jí říká *dynamická hybnost* a já ji budu označovat *p-hybnost*. Obě možnosti jsou tedy tyto

$$mv\text{-hybnost} = mv \quad (19.14)$$

$$p\text{-hybnost} = mv + qA. \quad (19.15)$$

Ukazuje se, že v kvantové mechanice obsahující magnetická pole je to právě *p-hybnost*, která je spojena s operátorem gradientu $\hat{\mathcal{P}}$; z toho tedy vyplývá, že (19.13) je operátor rychlosti.

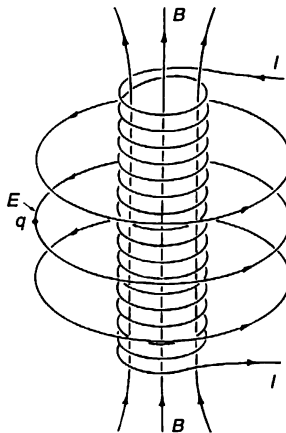
⁹¹⁾ Viz např. J. D. Jackson: Classical electrodynamics, John Wiley and Sons, Inc. New York (1962) s. 408.

Rád bych udělal malou stručnou odbočku a ukázal vám, odkud to všechno pochází – proč se v kvantové mechanice setkáváme s něčím takovým jako s rovnicí (19.15). Vlnová funkce se mění s časem podle Schrödingerovy rovnice (19.3). Kdybych najednou vyvolal změnu vektorového potenciálu, nepocítila by ji vlnová funkce ihned; rychlost její změny by byla jiná. Nyní uvažujeme, co by se stalo v následujícím případě. Předpokládejme, že nedaleko dlouhé cívky, v níž můžeme vytvořit tok magnetického pole (pole \mathbf{B}), jak znázorňuje obr. 19.2, „sedí“ nabitá částice. Představme si, že tento tok téměř okamžitě vyskočí z nuly na nějakou hodnotu. Na počátku mám nulový vektorový potenciál a pak jej zapnu. To znamená že, v určitém okamžiku najednou vyrobím na obvodu vektorový potenciál A . Určitě si vzpomenete, že křivkový integrál potenciálu A po smyčce je roven toku pole \mathbf{B} smyčkou (kapitola 14, díl 2). Co se tedy stane, zapnu-li najednou vektorový potenciál? Podle kvantové mechanické rovnice nevyvolá náhlá změna A okamžitou změnu ψ ; vlnová funkce je stále stejná. Gradient se proto také nemění.

Vzpomeňte si však, co se děje z elektrické stránky, zapneme-li najednou tok. Po dobu krátkého časového intervalu, v němž tak narůstá, je generováno elektrické pole, jehož integrál po uzavřené křivce je roven časové změně magnetického toku

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (19.16)$$

Mění-li se tok velmi rychle, nabývá elektrické pole obrovské hodnoty a na částici působí silou. Tu dostaneme jako součin náboje a elektrického pole, takže podobu nárůstu toku částice získá celkový impulz (tj. změnu mv) – qA . Jinými slovy, zapneme-li najednou vektorový potenciál v blízkosti elektrického náboje, okamžitě nabere mv -hybnost rovnou – qA .



Obr. 19.2 Elektrické pole vně cívky, v níž narůstá proud

Je tu však něco, co se okamžitě nezmění, a to rozdíl mezi mv a $-qA$. Pak $\hat{p} = mv + qA$ představuje veličinu, která nepodléhá okamžité změně, změníme-li náhle vektorový potenciál. Právě ji nazýváme p -hybnost; má důležitý význam nejen v klasické dynamice, ale významnou roli hraje i v kvantové mechanice. Závisí na charakteru vlnové funkce a v přítomnosti magnetického pole přísluší právě jí operátor

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla.$$

19.4 INTERPRETACE VLNOVÉ FUNKCE

Když Schrödinger objevil po něm pojmenovanou rovnici, našel zákon zachování vyjádřený vztahem (19.8), který z něj vyplývá jako důsledek. Mylně si však představoval, že P je hustota elektrického náboje elektronu a že J je hustota proudu elektrické náboje, takže si myslel, že elektrony interagují s elektrickým polem prostřednictvím těchto nábojů a proudů. Když řešil svou rovnici pro atom vodíku a počítal ψ , vůbec přitom nepočítal pravděpodobnost něčeho (v těch časech amplitudy ještě neexistovaly) – jeho interpretace byla zcela jiná. Podle něj bylo jádro nehybné, ale kolem něj tekly proudy; náboje P a proudy J generovaly elektromagnetická pole, a to všechno dohromady vyzářovalo světlo. Při řešení mnoha úloh však zanedlouho zjistil, že tato jeho představa není zcela správná. A právě v tom okamžiku přišel Born se svým podstatným vkladem k našemu chápání kvantové mechaniky. Byl to právě on, kdo správně (pokud je nám známo) interpretoval ψ v Schrödingerově rovnici jako amplitudu pravděpodobnosti, kdo poprvé vstoupil s netriviální myšlenkou, že druhá mocnina amplitudy nepředstavuje hustotu náboje, ale jen pravděpodobnost nalezení elektronu v jednotkovém objemu na nějakém místě, a že když už ho tam najdeme, je tam i s celým svým nábojem. Za celou tuto myšlenku vděčíme Bornovi.

Vlnová funkce $\psi(r)$ elektronu v atomu tedy nepopisuje rozmazaný elektron se spojitě se měnící hustotou náboje. Elektron je tam nebo tady, nebo někde jinde, ale kdekoliv už je, vždy představuje bodový náboj. Na druhé straně uvažujeme situaci, v níž existuje obrovské množství částic přesně v tomtéž stavu, přesnou s toutž vlnovou funkcí. Co pak? Jedna z nich je tady, druhá tam a pravděpodobnost najít libovolnou z nich na daném místě je úměrná $\psi\psi^*$. Protože je jich však tak moc, podíváme-li se do jakéhokoliv objemu $d\mathbf{x}dydz$, najdeme tam přibližně $\psi\psi^* d\mathbf{x}dydz$ částic. Takže v případě, že ψ představuje vlnovou funkci každé jednotlivé z obrovského počtu částic, které jsou v témže stavu, je možné $\psi\psi^*$ interpretovat jako hustotu částic. Nese-li navíc každá částice tentýž náboj q , můžeme jít ve skutečnosti ještě dále a považovat $\psi\psi^*$ za hustotu náboje. Za normálních okolností má součin $\psi\psi^*$ rozměr hustoty pravděpodobnosti, takže chceme-li dostat rozměr hustoty náboje, musíme ho vynásobit veličinou q . Pro naše nynější účely je možné zahrnout tento konstantní faktor do ψ (přesněji řečeno, jeho druhou odmocninu) a považovat samotné $\psi\psi^*$ za hustotu elektrického náboje. V takovém pojetí má J (tok pravděpodobnosti, který jsem vypočítal) přímo význam hustoty proudu elektrického náboje.

V případech, kdy můžeme mít velmi mnoho částic přesně v témž stavu, je tedy možná nová fyzikální interpretace vlnových funkcí. Hustota náboje a elektrický proud lze vypočítat přímo z vlnových rovnic, které získávají fyzikální smysl sahající do klasických, makroskopických situací.

Něco podobného se může stát i s neutrálními částicemi. Vlnová funkce jednoho fotonu představuje amplitudu pravděpodobnosti jeho výskytu na nějakém místě. Ačkoliv jsme to dosud nezmiňovali, existuje rovnice pro vlnovou funkci fotonu, analogická Schrödingerově rovnici pro elektron. Fotonová rovnice je vlastně totožná s Maxwellovými rovnicemi elektromagnetického pole a vlnová funkce s vektorovým potenciálem A . Fyzika kvant světla je shodná s klasickou fyzikou, protože fotony jsou neinteragující Boseho částice a mnohé z nich se mohou nacházet v témž stavu – a jak víme, *velmi se jim to líbí*. V té chvíli, kdy máme miliardy fotonů v témž stavu (tj. v téže elektromagnetické vlně), můžeme změřit vlnovou funkci, která představuje vektorový potenciál, přímo. Z historické stránky to samozřejmě bylo jinak. První pozorování se týkala situací s mnoha fotony ve stejném stavu, a tak se podařilo objevit správnou rovnici pro jednotlivý foton tak, že jsme sledovali přímo, na vlastní oči, charakter vlnové funkce na makroskopické úrovni.

U elektronů spočívá problém v tom, že do jednoho a téhož stavu nemůžeme dostat více než jeden z nich. Proto fyzici dlouho věřili tomu, že vlnová funkce Schrödingerovy rovnice se nikdy

neprojeví makroskopicky podobně jako se projevují amplitudy fotonů. Ale nyní je už zřejmé, že právě takový případ představuje objev supravodivosti.

19.5 SUPRAVODIVOST⁹²⁾

Jak víte, velmi mnoho kovů se při teplotách nižších než určitá hraniční teplota⁹³⁾ (ta je pro různé kovy různá) stává supravodivými. Snížíme-li teplotu na dostatečně nízkou hodnotu, začnou kovy vést elektrický proud bez jakéhokoliv odporu. Tento jev byl pozorován u mnoha kovů. Ale ne u všech, a teorie, která by jej úspěšně vysvětlila, způsobila fyzikům nemálo starostí. Trvalo velmi dlouho, než jsme porozuměli tomu, co se odehrává uvnitř supravodičů; popíšeme zde jen to, co je pro naše současné potřeby nevyhnutelné. Ukazuje se, že v důsledku interakcí elektronů s vibracemi atomů v mřížce dochází ke slabému efektivnímu *přitahování* mezi elektrony. Vyjádříme-li se velmi kvalitativně a hrubě, tak výsledkem je, že elektrony vytvářejí vázané páry.

Je vám známo, že každý elektron je Fermiho částice. Vázaný pár se však bude chovat jako Boseho částice, neboť vyměníme-li navzájem dva z nich mezi sebou, musíme vyměnit dva a dva elektrony; znaménko vlnové funkce se změní dvakrát a vše zůstane při starém. Vázaný pár je Boseho částicí.

Energie spárování (tj. energie přitahování elektronů) je velmi, velmi slabá. Nepatrná teplota stačí na to, aby je tepelný pohyb odtrhl od sebe a udělal z nich „normální“ elektrony. Necháme-li klesnout teplotu na dostatečně nízkou hodnotu, musí elektrony vynaložit všechny své síly, aby se dostaly do absolutně nejnižšího stavu; pak se opravdu shlukují do párů.

Byl bych nerad, kdybyste si představovali, že každý pár k sobě poutá elektrony tak silně, že jeny lze považovat za bodovou částici. Ve skutečnosti tomu tak není, a právě v tom spočívala jedna z největších obtíží při snaze porozumět zmíněnému jevu. Elektrony tvořící jeden pár jsou od sebe značně vzdálené; střední vzdálenost mezi páry je menší než rozměr jednotlivého páru. Několik párů zabírá současně tentýž prostor. Velkým triumfem se tehdy stalo jednak objasnění příčiny, proč se elektrony v kovu seskupují do párů, a jednak odhad energie, která je přitom uvolněna. Tento fundamentální fakt v teorii supravodivosti byl poprvé vysvětlen v práci Bardeena, Coopera a Schrieffera⁹⁴⁾, ale to není předmětem tohoto semináře. Prostě přijmeme jako fakt myšlenku, že elektrony tak či onak působí v párech a na tyto páry se lze dívat tak, že se chovají více méně jako částice; máme tedy právo hovořit o vlnové funkci „páru“.

Vlnová funkce páru bude více méně podobná rovnici (19.3). Jediný rozdíl je v tom, že náboj q bude dvojnásobkem náboje elektronu. Neznáme také setrvačnost (nebo efektivní hmotnost) páru v krystalové mřížce, takže nevíme, jakou hodnotu dosadit za m . A také by bylo nesprávné předpokládat, že přejdeme-li k velmi vysokým frekvencím (nebo krátkým vlnovým délkám), zůstane tvar rovnice správný, neboť kinetická energie, která odpovídá velmi rychle se měnícím vlnovým

92) Od doby vydání Feynmanových přednášek došlo v oblasti supravodivosti a makroskopických kvantových jevů k celé řadě převratných objevů a bylo za ně uděleno několik Nobelových cen. K nejznámějším patří objev vysokoteplotní supravodivosti (J. G. Bednorz a A. Müller 1986). O tomto vývoji viz např. publikaci M. Odehnal: Supravodivost a jiné kvantové jevy, Praha, Academia 1992. (Pozn. red.)

93) První to bylo pozorováno Onnesem v roce 1911; H. K. Onnes, Comm. Phys. Lab., Univ. Leyden, No 119; 120, 122 (1911). Pěkný současný výklad problematiky najdeme v knize E. A. Lynton, Superconductivity, John Wiley and Sons, Inc. New York, 1962.

94) J. Bardeen, L. N. Cooper a J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).

funkcím, může nabývat tak velké hodnoty, že se páry roztrhnou. Při konečných teplotách existuje vsouladu s obecně známou Boltzmanovou teorií vždy několik porušených párů. Praviděpodobnost porušení je úměrná $\exp(-E_{\text{pár}}/kT)$. Elektronky, které nejsou vázány do párů, se nazývají „normální“ a pohybují se po krystalu obvyklým způsobem. Budeme však uvažovat jen takovou situaci, kdy je teplota opravdu rovna nule, neboť v každém případě nebudu brát v úvahu komplikace způsobené nespárovanými elektrony.

Jelikož elektronové páry jsou bosony, nacházejí-li se mnohé z nich v určitém stavu, existuje obzvlášť velká amplituda, že se do něj dostanou i další páry. Takže prakticky všechny páry se nahromadí na nejnižší energii *v jednom a též stavu*—jen velice těžko se podaří některému přeskóčit do jiného stavu. Pro každý z nich je amplituda vstoupit do obsazeného stavu \sqrt{n} -krát větší než amplituda zaujmout neobsazený stav (kde je dobře známý faktor \sqrt{n} dán počtem párů nacházejících se v nejnižším stavu). Máme proto právo očekávat, že všechny páry se budou pohybovat ve stejném stavu.

Jak potom bude vypadat naše teorie? Vlnovou funkci elektronového páru nacházejícího se v nejnižším energetickém stavu označím ψ . Jelikož $\psi\psi^*$ bude úměrné hustotě náboje ρ , můžu stejně dobře zapsat ψ jako součin druhé odmocniny nábojové hustoty a nějakého fázového faktoru

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})} e^{i\theta(\mathbf{r})}, \quad (19.17)$$

kde ρ a θ jsou reálné funkce \mathbf{r} . (Libovolnou komplexní funkci lze, samozřejmě, takovým způsobem vyjádřit.) Je jasné, co chápeme nábojovou hustotou, ale jaký je fyzikální význam fáze θ vystupující ve vlnové funkci? Podívejme se, co dostaneme, dosadíme-li $\psi(\mathbf{r})$ do rovnice (19.12) a vyjádříme hustotu proudu náboje pomocí nových proměnných ρ a θ . Jde jen o obyčejnou změnu proměnných, proto tu vynechám všechny doprovodné algebraické výpočty; nakonec však vyjde, že

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \left(\nabla\theta - \frac{q}{\hbar}\mathbf{A} \right) \rho. \quad (19.18)$$

Protože hustota proudu i nábojová hustota mají pro supravodivý elektronový plyn přímý fyzikální význam, jsou ρ a θ reálné veličiny. Fázi lze stejně dobře pozorovat jako ρ ; tvoří část hustoty proudu náboje \mathbf{J} . Absolutní fáze pozorovatelná není; je-li však znám její gradient v každém bodě, známe i fázi s přesností na konstantu. Definujeme-li její hodnotu v jednom místě, bude ve všech ostatních bodech určena jednoznačně.

Mimochodem, rovnici pro proud lze analyzovat i elegantněji, uvědomíme-li si, že hustota proudu náboje \mathbf{J} je *ve skutečnosti* součin hustoty náboje a rychlosti pohybu elektronové kapaliny, tedy $\rho\mathbf{v}$. Rovnice (19.18) je tedy ekvivalentní rovnici

$$m\mathbf{v} = \hbar\nabla\theta - q\mathbf{A}. \quad (19.19)$$

Všimněme si, že $m\mathbf{v}$ -hybnost se skládá ze dvou členů; jeden pochází z vektorového potenciálu a druhý z průběhu vlnové funkce. Jinými slovy, veličina $\hbar\nabla\theta$ je právě námi zavedená p -hybnost.

19.6 MEISSNERŮV JEV

Nyní můžeme přistoupit k popisu některých jevů týkajících se supravodivosti. Především tu neexistuje elektrický odpor. Chybí proto, že všechny elektrony se kolektivně nacházejí v témž

stavu. Teče-li obyčejný proud, jsou elektrony náhodně vyráženy z rovnoměrného toku a postupně kazí celkovou hybnost. V našem případě je však velmi těžké přinutit jeden elektron, aby dělal něco jiného než ostatní, neboť všechny Boseho částice mají snahu přejít do téhož stavu. Když už jednou začal proud téct, tak teče navěky.

Také lze snadno pochopit, že vezmeme-li kousek kovu v supravodivém stavu a zapneme ne příliš silné magnetické pole (nebudeme zacházet do podrobností vzhledem k tomu, jak silné může být), pole nemůže proniknout do kovu. Kdyby v procesu jeho vytváření zesílilo magnetické pole uvnitř kovu, i když jen zcela nepatrně, měnil by se magnetický tok určitou rychlostí, objevilo by se elektrické pole, které by okamžitě vyvolalo elektrický proud, a ten by podle Lenzova pravidla působil svými účinky proti toku. Protože všechny elektrony se pohybují společně, bude nekonečně malé elektrické pole generovat dostačený proud pro vykompenzování libovolného přiloženého magnetického pole. Takže ochladíme-li kov do supravodivého stavu a pak zapneme pole, toto pole dovnitř nepronikne.

Ještě zajímavější je s tím související jev, který experimentálně objevil W. Meissner.⁹⁵⁾ Vezmeme-li kousek kovu za normální teploty (tj. obyčejný vodič), vytvoříme v něm magnetické pole a teplotu pak snížíme pod kritickou hodnotu (takže se z něj stane supravodivý materiál), *pole bude vypuzeno*. Jinak řečeno, kov si začne vytvářet vlastní proud přesně takové velikosti, aby vnější pole vykompenzoval.

Příčinu toho lze pochopit z rovnic, a nyní bych rád vysvětlil, jak. Předpokládejme, že vezmeme kompaktní kousek supravodivého materiálu. Divergence proudu v libovolném ustáleném stavu pak musí být rovna nule, protože ten se nemá kam ztrácet. Je výhodné zvolit A tak, aby jeho divergence byla všude nulová. (Měl bych vysvětlit, proč tato volba nezpůsobuje žádnou újmu na obecnosti, ale nebudu tím ztrácet čas.) Najdeme-li divergenci rovnice (19.18), dostaneme, že laplasiján θ je roven nule. Ale okamžik. A co variace nábojové hustoty ρ ? Zapomněl jsem zmínit ještě jednu důležitou věc. V kovu existuje pozadí kladného náboje, tvořené ionty atomů mřížky. Je-li ρ homogenní, nebude existovat ani přebytečný náboj, ani elektrické pole. Kdyby se v jedné oblasti nahromadily elektrony, nebyl by náboj zneutralizován a velmi silné odpuzování by je rozptýlilo po celém objemu kovu⁹⁶⁾. Za normálních okolností je tedy nábojová hustota elektronů v supravodiči téměř ideálně homogenní – můžeme proto považovat ρ za konstantu. Jediný způsob, jak dosáhnout, aby $\nabla^2 \theta$ bylo rovno nule všude uvnitř kousku kovu, je ten, že θ je konstanta. A to znamená, že p -hybnost kJ nepřispívá. Rovnice (19.18) pak říká, že hustota proudu je úměrná součinu $\rho \cdot A$. Takže všude v kousku supravodivého materiálu je nutně úměrná vektorovému potenciálu

$$J = -\rho \frac{q}{m} A. \quad (19.20)$$

Jelikož ρ a q mají stejné (záporné) znaménko a kromě toho ρ je konstanta, můžeme položit $\rho q/m = -(\text{nějaká konstanta})$; pak

$$J = -(\text{nějaká konstanta}) A. \quad (19.21)$$

⁹⁵⁾ W. Meissner a R. Ochsenfeld, *Naturwiss.* 21, 787 (1933).

⁹⁶⁾ Vlastně, kdyby bylo elektrické pole příliš silné, páry by se trhaly a „normální“ vytvořené elektrony by pronikaly do oblastí s přebytkem kladného náboje a pomáhaly by ho neutralizovat. V každém případě je však k vytvoření těchto normálních elektronů třeba vynaložit energii, takže základní myšlenka, že prakticky homogenní hustota náboje ρ je energeticky velmi výhodná, je správná.

Tuto rovnici původně navrhli bratři Londonové⁹⁷⁾ ve snaze vysvětlit experimentální pozorování supravodivosti – dávno předtím, než lidé pochopili kvantově mechanický původ tohoto jevu.

Rovnici (19.20) můžeme dosadit do rovnic elektromagnetizmu a vypočítat pole. Vektorový potenciál souvisí s hustotou proudu náboje vztahem

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \mathbf{J}. \quad (19.22)$$

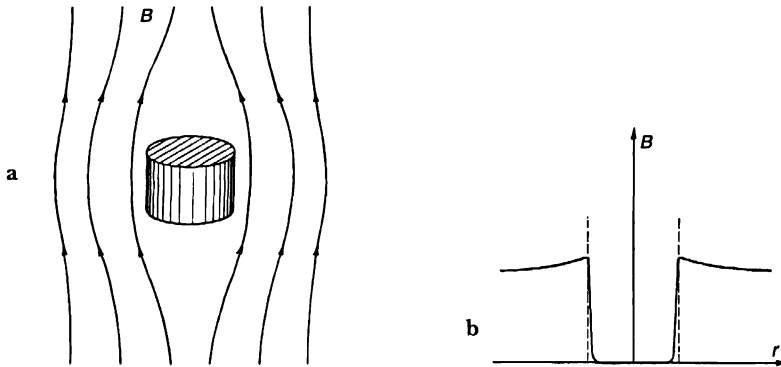
Vyjádríme-li \mathbf{J} podle rovnice (19.21), dostaneme

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \lambda^2 \mathbf{A}, \quad (19.23)$$

kde λ^2 je pouze nová konstanta

$$\lambda^2 = \rho \frac{q}{\epsilon_0 m c^2}. \quad (19.24)$$

Můžeme se pokusit vyřešit tuto rovnici vzhledem k \mathbf{A} a podrobněji si všimnout, co se tam odehrává. Například v jednorozměrném případě by měla rovnice (19.23) exponenciální řešení ve tvaru $e^{-\lambda x}$ a $e^{+\lambda x}$. Ta znamenají, že postupujeme-li od povrchu materiálu do jeho nitra, musí vektorový potenciál exponenciálně klesat. (Nemůže narůstat – došlo by k výbuchu.) Je-li daný kousek kovu velmi velký v porovnání s $1/\lambda$, pronikne pole jen do tenoučké povrchové vrstvy – tloušťky přibližně $1/\lambda$. Celé zbývající nitro je bez pole, tak jak je ukázáno na obr. 19.3. Na tom je založeno vysvětlení *Meissnerova jevu*.



Obr. 19.3 a) Supravodivý válec v magnetickém poli, b) magnetické pole B jako funkce r

Jak velká je vzdálenost λ ? Vzpomeňme si, že elektromagnetický poloměr elektronu r_0 ($2,8 \cdot 10^{-13}$ cm) je dán vztahem

$$m c^2 = \frac{q_e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0}.$$

⁹⁷⁾ H. London a F. London, Proc. Roy. Soc. (London) A 149, 71 (1935); Physica 2, 341 (1935).

Taktéž si uvědomme, že q v rovnici (19.24) je dvojnásobkem náboje elektronu, takže

$$\frac{q}{\epsilon_0 m c^2} = \frac{8 \pi r_0}{q_e}.$$

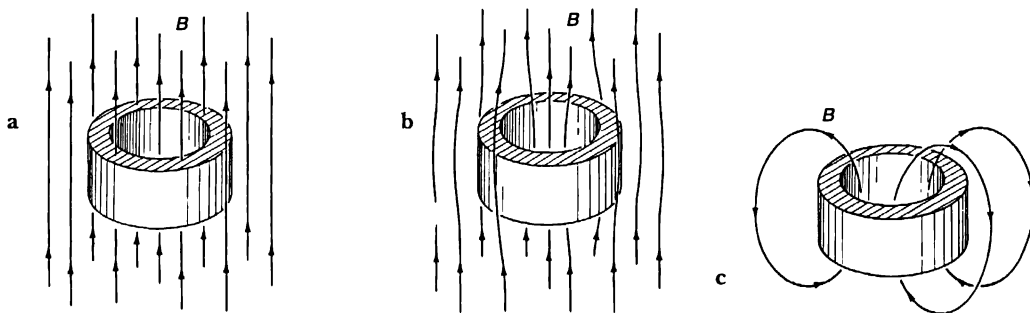
Vyjádríme-li ρ jako $q_e N$, kde N je počet elektronů v cm^3 , dostaneme

$$\lambda^2 = 8 \pi N r_0. \quad (19.25)$$

Takový kov jako olovo obsahuje asi $3 \cdot 10^{22}$ atomů v cm^3 , a když každý z nich poskytne jen jeden vodivostní elektron, bude $1/\lambda$ rovno přibližně $2 \cdot 10^{-6}$ cm. Takový je řádový odhad.

19.7 KVANTOVÁNÍ TOKU

Rovnice Londonů (19.21) byla navržena s cílem vysvětlit pozorované skutečnosti týkající se supravodivosti včetně Meissnerova jevu. Později bylo objeveno ještě několik překvapujících předpovědí. Jedna z nich, pocházející opět od Londona, byla tak podivná, že až donedávna jí nikdo nevěnoval velkou pozornost. U ní se nyní podrobněji zastavíme. Tentokrát předpokládejme, že místo kompaktního kousku kovu vezmeme vzorek ve tvaru *prstence*, jehož tloušťka je v porovnání s $1/\lambda$ velká, a pokusíme se podívat na to, co se stane, vložíme-li jej nejdříve do magnetického pole, pak ochladíme do supravodivého stavu a nakonec odstraníme původní zdroj pole B .



Obr. 19.4 Prstenek v magnetickém poli: a) v normálním stavu, b) v supravodivém stavu, c) po odstranění vnějšího pole

Posloupnost jednotlivých úkonů je znázorněna na *obr. 19.4*. V normálním stavu (část *a* obrázku) bude v prstenci existovat magnetické pole. Stane-li se prstenek supravodivým, jak jsme viděli, bude z něj pole vytlačeno ven. Jeho otvorem však bude procházet určitý tok magnetického pole (část *b* obrázku). Odstraníme-li vnější pole, siločáry pole procházejícího otvorem budou „uvězněny“ (část *c*). Tok Φ středem φ prstence nemůže klesat, neboť $\partial\Phi/\partial t$ musí být rovno křivkovému integrálu intenzity E po prstenci, a E je v supravodiči nulové. Vypínáme-li tedy vnější pole, v prstenci začíná téct supravodivý proud takový, že indukční tok prstencem zůstává neměnný. (Je to stará myšlenka o vířivých proudech, jen s nulovým odporem.) Všechny tyto proudy však tečou

blízko povrchu (do hloubky asi $1/\lambda$); lze to ukázat podobně, jako jsme to udělali pro kompaktní vzorek. Dokážou nejen zabránit proniknutí magnetického pole do nitra prstence, ale zároveň je i udržet celou dobu kolem něj.

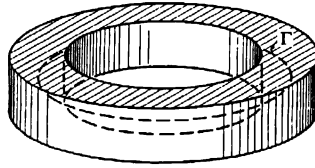
Existuje tu však jeden podstatný rozdíl, který způsobuje, že naše rovnice vedou k předpovědi překvapujícího jevu. Dříve uvedený argument týkající se toho, že v kompaktním kousku kovu musí být fáze Θ rovna konstantě, *neplatí pro prstenc*, jak je vidět z následujícího zdůvodnění.

Uvnitř tělesa prstence je hustota proudu J rovna nule; z rovnice (19.18) pak vyplývá

$$\hbar \nabla \Theta = qA. \quad (19.26)$$

Nyní uvažujme, co dostaneme, budeme-li počítat křivkový integrál potenciálu po křivce Γ procházející prstencem v blízkosti středu jeho příčného průřezu, takže se nikdy nepřiblíží k povrchu (obr. 19.5). Z rovnice (19.26) máme

$$\hbar \oint \nabla \Theta \cdot d\mathbf{s} = q \oint A \cdot d\mathbf{s}. \quad (19.27)$$



Obr. 19.5 Křivka Γ uvnitř supravodivého prstence

Víme však, že křivkový integrál potenciálu A po libovolné uzavřené smyčce je roven toku intenzity magnetického pole B smyčkou

$$\oint A \cdot d\mathbf{s} = \Phi.$$

Rovnice (19.27) tak přejde do tvaru

$$\oint \nabla \Theta \cdot d\mathbf{s} = \frac{q}{\hbar} \Phi. \quad (19.28)$$

Křivkový integrál gradientu z jednoho bodu do druhého (řekněme z bodu 1 do bodu 2) představuje rozdíl hodnot funkce v daných dvou bodech. Tedy

$$\int_1^2 \nabla \Theta \cdot d\mathbf{s} = \Theta_2 - \Theta_1.$$

Ztotožníme-li oba koncové body, čímž vytvoříme uzavřenou smyčku, mohli byste si myslet, že Θ_2 bude rovno Θ_1 , takže integrál v rovnici (19.28) bude nabývat nulové hodnoty. To by platilo pro uzavřenou smyčku v kompaktním kousku supravodiče, ale pro prstencovitý tvar to není bezpodmínečně nutné. Jediný fyzikální požadavek, který si můžeme klást, je ten, že *pro každý bod musí existovat jen jedna hodnota vlnové funkce*. Ať se v našem pohybu po prstenci mění fáze Θ jakýmkoliv způsobem, dorazíme-li do výchozího bodu, musí nám zaručit tutéž hodnotu vlnové funkce

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\theta}.$$

To se stane tehdy, když se Φ změní o $2\pi n$, kde n je libovolné celé číslo. Takže absolvujeme-li jeden úplný okruh po prstenci, musí být levá strana rovnice (19.27) rovna $\hbar 2\pi n$. Využitím rovnice (19.28) dostáváme

$$2\pi n\hbar = q\Phi. \quad (19.29)$$

Uvězněný tok musí být vždy celočíselným násobkem $2\pi\hbar/q$! Kdybyste se na prstencem dívali jako na klasický objekt s ideální (tj. nekonečnou) vodivostí, byli byste toho názoru, že v něm musí zůstat celý jím procházející tok, ať už je jeho velikost jakákoliv, tj. že lze uvěznit tok libovolně velký. Kvantově mechanická teorie supravodivosti však říká, že tok může být buď nulový, nebo $2\pi\hbar/q$, nebo $4\pi\hbar/q$, nebo $6\pi\hbar/q$ atd., ale nemůže nabývat žádné hodnoty mezi tím. Musí být celočíselným násobkem základní kvantově mechanické jednotky $2\pi\hbar/q$.

London⁹⁸⁾ předpovídal, že tok zachycený supravodivým prstencem bude kvantovaný a že možné hodnoty budou dány rovnicí (19.29), je-li q rovno náboji elektronu q_e . Podle Londona by základní jednotka toku měla být rovna $2\pi\hbar/q_e$, což je přibližně $4 \cdot 10^{-15}$ Wb. Abyste si o ní udělali představu, uvažujme malý váleček o průměru jedné desetiny milimetru; teče-li jím tok takovéto velikosti, dosahuje magnetické pole v jeho nitru přibližně jednoho procenta hodnoty magnetického pole Země. Pomocí citlivých magnetických měření by mělo být možné takový magnetický tok pozorovat.

V roce 1961 dokázali existenci zmíněného kvantovaného toku Deaver a Fairbank⁹⁹⁾ ze Stanfordské univerzity v USA a souběžně s nimi Doll a Nabauer¹⁰⁰⁾ v Německu.

V experimentu Deavera a Fairbanka sehrál hlavní úlohu maličký supravodivý váleček, zhotovený elektrolytickým nanesením tenké vrstvičky cínu na měděný drátek (průměr $1,3 \cdot 10^{-3}$ cm) délky 1 cm. Cín přechází do supravodivého stavu při teplotě nižší než 3,8 K, zatímco měď zůstává normálním kovem. Drátek byl vložen do malého regulovatelného magnetického pole a teplota se snižovala do té doby, dokud se cín nestal supravodivým. Pak se vnější zdroj pole odstranil. Právem očekáváte, že podle Lenzova zákona to způsobilo vznik proudu, snažícího se svým účinkem zabránit poklesu toku uvnitř válečku. Ten v důsledku toho získal magnetický moment úměrný toku ve svém nitru. Jádrem experimentu bylo právě měření tohoto magnetického momentu, které bylo provedeno tak, že drátek nechali kmitat nahoru a dolů (jako jehlu šicího stroje, ale s frekvencí 100 kmitů za sekundu) uvnitř dvou maličkých cívek umístěných na koncích cínového válečku. Mírou magnetického momentu bylo indukované napětí na cívkách.

Po uskutečnění experimentu dospěli Deaver a Fairbank k výsledku, že tok je skutečně kvantovaný, ale že *základní jednotka toku má jen poloviční velikost, než byla hodnota předpovězená Londonem*. Doll a Nabauer zjistili totéž. Zpočátku to vypadalo dost záhadně¹⁰¹⁾, ale nyní už chápeme, proč tomu tak má být. Podle teorie supravodivosti, pocházející od Bardeena, Coopera a Schrieffera, je q objevující se v rovnici (19.29) náboj elektronového páru, a proto je roven $2q_e$. Základní jednotka toku pak je

$$\Phi_0 = \frac{\pi\hbar}{q_e} \approx 2 \cdot 10^{-15} \text{ Wb}, \quad (19.30)$$

tedy poloviční, než předpověděl London. Teď do sebe všechno zapadá a měření svědčí o existenci předpovězeného čistě kvantově mechanického, ale makroskopického jevu.

98) F. London, *Superfluids*; John Wiley and Sons, Inc., New York, 1950, Vol. I, p. 152.

99) B. S. Deaver, Jr. a W. M. Fairbank, *Phys. Rev. Letters* 7, 43 (1961).

100) R. Doll a M. Nabauer, *Phys. Rev. Letters* 7, 51 (1961).

101) Takovou možnost kdysi navrhl Onsager (viz citovaná kniha F. Londona), ale nikdo jiný nechápal, proč.

19.8 DYNAMIKA SUPRAVODIVOSTI

Meissnerův jev a kvantování indukčního toku potvrzují naše obecné myšlenky. Pro úplnost bych vám rád názorně předvedl, jak budou z tohoto hlediska vypadat úplné rovnice supravodivé kapaliny – je to poměrně zajímavé. Až dosud jsem neudělal nic jiného, jen jsem dosadil výraz pro ψ do rovnic pro hustotu náboje a proudu. Dosadím-li ho do úplné Schrödingerovy rovnice, dostanu rovnice pro ϱ a Θ . Je zajímavé se podívat, co z toho vyjde, protože před sebou máme „kapalinu“ elektronových párů s nábojovou hustotou ϱ a se záhadným Θ – pokusíme se zjistit, jak rovnice takovéto „kapaliny“ vypadají! Dosadíme tedy vlnovou funkci (19.17) do Schrödingerovy rovnice (19.3) a vzpomene si, že ϱ a Θ jsou reálné funkce x, y a z . Oddělíme-li reálnou část od imaginární, dostaneme dvě rovnice. Abych zkrátil jejich zápis, použiji v souladu s rovnicí (19.19) vyjádření

$$\frac{\hbar}{m} \nabla \Theta - \frac{q}{m} \mathbf{A} = \mathbf{v}. \quad (19.31)$$

Jedna z rovnic, které dostaneme, bude mít tvar

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\nabla \cdot \varrho \mathbf{v}. \quad (19.32)$$

Jelikož $\varrho \mathbf{v}$ je rovno právě \mathbf{J} (rovnice 19.18), je to jen zopakovaná rovnice kontinuity. Druhá rovnice, kterou získám takovým způsobem, mi říká, jak se mění Θ . Vypadá takto

$$\hbar \frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\frac{m}{2} v^2 + q\varphi - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\sqrt{\varrho}} \nabla^2 (\sqrt{\varrho}) \right]. \quad (19.33)$$

Identifikujeme-li $\hbar\Theta$ jako „potenciál rychlostí“, ti z vás, kteří se důkladně vyznají v hydrodynamice (jsem si jist, že pár takových se mezi vámi určitě najde), v ní poznají rovnici pohybu elektricky nabitě kapaliny – až na to, že poslední člen, který by měl představovat energii stlačení kapaliny, má trochu divnou závislost na hustotě ϱ . V každém případě rovnice říká, že rychlost změny veličiny $\hbar\Theta$ je určena členem $mv^2/2$, popisujícím kinetickou energii, plus členem $q\varphi$, vyjadřujícím potenciální energii, a plus dodatečným členem, který obsahuje faktor \hbar^2 a mohli bychom ho nazvat „kvantově mechanická energie“. Viděli jsme, že uvnitř je v důsledku působení elektrostatických sil hustota náboje ϱ téměř dokonale homogenní, takže za předpokladu, že máme pouze jednu supravodivou oblast, můžeme tento člen téměř v každé praktické úloze zanedbat. Kdyby šlo o rozhraní mezi dvěma supravodiči (nebo o nějaké jiné okolnosti, v důsledku kterých by se hodnota ϱ mohla rychle měnit, je už situace jiná a jeho význam by mohl narůst.

Pro ty, kteří nejsou v hydrodynamice úplně doma, vyjádříme použitím rovnice (19.31) Θ pomocí \mathbf{v} a přepíšeme rovnici (19.33) do fyzikálně jasnějšího tvaru. Vezmeme-li gradient celé rovnice (19.33) a vyjádříme $\nabla\Theta$ pomocí \mathbf{A} a \mathbf{v} (rovnice (19.31)), dojdeme k

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \frac{q}{m} \left(-\nabla \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \nabla \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sqrt{\varrho}} \nabla^2 \sqrt{\varrho} \right). \quad (19.34)$$

Co tato rovnice znamená? Zprvčé, vzpomeňte si, že

$$-\nabla\varphi - \frac{\partial A}{\partial t} = \mathbf{E}. \quad (19.35)$$

Dále si všimněte, že aplikujeme-li operaci rotace na rovnici (19.19), dostaneme

$$\nabla \times \mathbf{v} = -\frac{q}{m} \nabla \times \mathbf{A}, \quad (19.36)$$

protože rotace gradientu je vždy rovna nule. Ale $\nabla \times \mathbf{A}$ je magnetické pole takže první dva členy lze zapsat ve tvaru

$$\frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Nakonec byste si měli ujasnit, že $\partial v / \partial t$ označuje rychlost změny rychlosti kapaliny v daném bodě. Soustředíme-li se na konkrétní částici, její zrychlení vyjadřuje *totální* derivace \mathbf{v} podle času (v dynamice kapalin se někdy nazývá i doprovodné zrychlení), která souvisí s $\partial v / \partial t$ vztahem (stať 40.2, díl 2)

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}. \quad (19.37)$$

Tento dodatečný člen vystupuje i na pravé straně rovnice (19.34). Převédeme-li jej na druhou stranu, můžeme přepsat rovnici (21.34) takto

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\varrho}} \nabla^2 \sqrt{\varrho} \right). \quad (19.38)$$

Z rovnice (19.36) také vyplývá, že

$$\nabla \times \mathbf{v} = -\frac{q}{m} \mathbf{B}. \quad (19.39)$$

Uvedená dvojice rovnic představuje pohybové rovnice supravodivé elektronové kapaliny. První rovnice vlastně vyjadřuje Newtonův zákon pro nabitou kapalinu nacházející se v elektromagnetickém poli. Říká, že zrychlení každé částice kapaliny s nábojem q pochází od obyčejné Lorenzovy síly $q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ plus dodatečné síly dané gradientem nějakého záhadného kvantově mechanického potenciálu – síly, která obvykle není moc velká; výjimku tvoří jen rozhraní mezi dvěma supravodiči. Druhá rovnice říká, že kapalina je „ideální“ – rotace \mathbf{v} má nulovou divergenci (divergence \mathbf{B} je vždy rovna nule). Znamená to, že rychlost lze vyjádřit pomocí potenciálu rychlostí. Obvykle se pro ideální kapalinu píše $\nabla \times \mathbf{v} = 0$, ale pro *ideální nabitou kapalinu v magnetickém poli* se tento vztah modifikuje na rovnici (19.39).

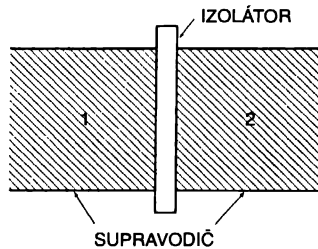
Takže Schrödingerova rovnice pro elektronové páry v supravodiči nám dává pohybové rovnice elektricky nabitě ideální kapaliny. Teorie supravodivosti je totožná s úlohou hydrodynamiky nabitých ideálních kapalin. Chcete-li vyřešit libovolný problém týkající se supravodičů, vezměte tyto rovnice pro kapalinu (nebo ekvivalentní pár rovnic (19.32) a (19.33)) a zkombinujte je s Maxwellovými rovnicemi, abyste dostali pole. (Náboje a proudy, které používáte k tomu, abyste

zjistili pole, musí samozřejmě, zahrnovat jednak náboje a proudy samotného supravodiče a jednak náboje a proudy vnějších zdrojů.)

Mimochodem, myslím, že rovnice (19.38) není zcela správná, protože by k ní bylo třeba přidat ještě jeden člen obsahující hustotu. Ten není podmíněn kvantovou mechanikou, ale pochází z obyčejné energie souvisící se změnami hustoty právě tak, jako v rovnicích běžné kapaliny by měla být hustota potenciální energie úměrná druhé mocnině odchylky ρ od neporušené hustoty ρ_0 (která je v našem případě rovna i hustotě náboje krystalové mřížky). Jelikož tu budou vystupovat síly úměrné gradientu této energie, měl by se v rovnici (19.38) objevit další výraz typu konst $\nabla(\rho - \rho_0)^2$. V našem rozboru jsme na něj nenarazili, neboť má svůj původ v interakcích mezi částicemi, které jsme zanedbali a opírali jsme se o přiblížení nezávislých částic. Je to právě ta síla, na kterou jsem se odvolával, když jsem prováděl kvantitativní zdůvodnění toho, že elektrostatické síly uvnitř supravodiče vyvíjejí velkou snahu, aby udržely ρ na přibližně konstantní hodnotě.

19.9 JOSEPHSONŮV JEV

Dále bych se rád podrobněji věnoval velmi zajímavé situaci, které si poprvé všiml Josephson¹⁰²⁾, když analyzoval, k čemu může docházet na rozhraní mezi dvěma supravodiči. Předpokládáme, že máme dva supravodiče spojené tenkou vrstvou izolačního materiálu (obr. 19.6). Takovému uspořádání se nyní říká Josephsonův přechod.



Obr. 19.6 Dva supravodiče oddělené tenkou vrstvou izolátoru

Je-li izolační vrstva tlustá, elektrony jí projít nemohou; ale je-li dostatečně tenká, může pro ně existovat značná kvantově mechanická amplituda přeskočení. Je to vlastně další příklad průchodu bariérou. Josephson tuto situaci prozkoumal a zjistil, že přitom musí docházet k mnoha podivným jevům.

Při analýze takového přechodu nazvu amplitudu nalezení elektronu na jedné straně ψ_1 a amplitudu jeho nalezení na druhé straně ψ_2 . V supravodivém stavu je vlnová funkce ψ_1 společnou vlnovou funkcí všech elektronů jedné strany a ψ_2 zase odpovídající funkce strany druhé. Mohl bych řešit tuto úlohu pro různé druhy supravodičů, ale zvolme si velmi jednoduchou situaci, kdy máme na obou stranách stejný materiál, takže přechod je symetrický a jednoduchý. Na chvíli také neuvažujme žádná magnetická pole. Obě amplitudy by pak spolu měly souviset následujícím způsobem

102)

B. D. Josephson, Physics Letters 1, 251 (1962).

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = W_1 \psi_1 + K \psi_2,$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = W_2 \psi_2 + K \psi_1.$$

Konstanta K je charakteristická pro daný přechod. Kdyby bylo K rovno nule, obě rovnice by popisovaly nejnižší energetický stav (s energií W_i) každého supravodiče. Ale obě strany jsou navzájem vázány amplitudou K toho, že může docházet k přeskokům z jedné strany na druhou. (Je to právě ta nám známá amplituda přeskočků dvojhladinové soustavy.) Kdyby byly obě strany totožné, bylo by W_1 rovno W_2 a mohl bych je prostě odečíst. Nyní si však představme, že obě supravodivé oblasti připojíme k pólovým výstupům baterie, takže k přechodu bude přiložen potenciálový rozdíl U . Potom $W_1 - W_2 = qU$. Abych si situaci usnadnil, mohu definovat nulovou energii uprostřed mezi W_1 a W_2 ; obě rovnice pak budou mít tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{qU}{2} \psi_1 + K \psi_2, \tag{19.40}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{qU}{2} \psi_2 + K \psi_1.$$

To jsou standardní rovnice pro dva vázané kvantově mechanické stavy. Tentokrát však přistoupíme k jejich rozboru jinak. Provedme substituce

$$\psi_1 = \sqrt{\varrho_1} e^{i\theta_1}, \tag{19.41}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\varrho_2} e^{i\theta_2},$$

kde θ_1 a θ_2 jsou fáze na obou stranách přechodu a ϱ_1 a ϱ_2 jsou hustoty elektronů v těchto dvou bodech. Vzpomeňme si, že v praktickém případě se ϱ_1 a ϱ_2 téměř zcela shodují a jsou rovny ϱ_0 , normální hustotě elektronů v supravodivém materiálu. Dosadíme-li nyní tato vyjádření pro ψ_1 a ψ_2 do (19.40) a pokaždé porovnáme reálné a imaginární části napravo i nalevo, dostaneme čtyři rovnice. Položíme-li kvůli stručnosti $\theta_2 - \theta_1 = \delta$, dojdeme k výsledku

$$\dot{\varrho}_1 = +\frac{2}{\hbar} K \sqrt{\varrho_2 \varrho_1} \sin \delta \tag{19.42}$$

$$\dot{\varrho}_2 = -\frac{2}{\hbar} K \sqrt{\varrho_2 \varrho_1} \sin \delta$$

$$\dot{\theta}_1 = +\frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\varrho_2}{\varrho_1}} \cos \delta - \frac{qU}{2\hbar} \tag{19.43}$$

$$\dot{\theta}_2 = +\frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{\varrho_1}{\varrho_2}} \cos \delta + \frac{qU}{2\hbar}.$$

První dvojice rovnic říká, že $\dot{\varrho}_1 = -\dot{\varrho}_2$. „Ale vždyť musí být obě rovny nule, jsou-li ϱ_1 a ϱ_2 konstanty rovné ϱ_0 “, namítnete. Ne docela. Tyto rovnice nezahrmují všechno. Tvrdí jen, jaké by byly $\dot{\varrho}_1$ a $\dot{\varrho}_2$, kdyby neexistovaly dodatečné elektrické síly způsobené nerovnováhou mezi kapalinou elektronů a pozadím kladných iontů. Dávají nám vědět, jak by se hustoty začaly měnit, a proto popisují proud, který by začal téct. Tento proud z oblasti 1 do oblasti 2 by byl roven právě $\dot{\varrho}_1$ (nebo $-\dot{\varrho}_2$); tedy

$$J = \frac{2K}{\hbar} \sqrt{\varrho_1 \varrho_2} \sin \delta. \quad (19.44)$$

Zanedlouho by nabíl oblast 2, kdybychom však *nezapomněli* na to, že obě strany jsou dráty spojeny s baterií. Proto ji nebude nabíjet (a zároveň vybijet oblast 1), neboť začnou téct proudy, aby vyrovnaly potenciál. Uvedené proudy z baterie nejsou obsaženy v našich rovnicích. Zahrneme-li je do nich, nebudou se ϱ_1 a ϱ_2 ve skutečnosti měnit, ale proud přechodem bude i tak dán rovnicí (19.44).

Jelikož ϱ_1 a ϱ_2 opravdu zůstávají konstantní a rovné ϱ_0 označme $2K\varrho_0/\hbar = J_0$ a píšeme

$$J = J_0 \sin \delta. \quad (19.45)$$

J_0 , podobně jako K , je pak číslo charakterizující daný přechod.

Druhý pár rovnic, (19.43), nám říká o θ_1 a θ_2 . Zajímáme se o rozdíl $\delta = \theta_2 - \theta_1$, abychom mohli použít rovnici (19.45); dostaneme

$$\dot{\delta} = \dot{\theta}_2 - \dot{\theta}_1 = \frac{qU}{\hbar}. \quad (19.46)$$

Znamená to, že můžeme napsat

$$\delta(t) = \delta_0 + \frac{q}{\hbar} \int U(t) dt, \quad (19.47)$$

kde δ_0 je hodnota v čase $t=0$. Vzpomeňme si také, že q je náboj páru, tj. $q=2q_e$. V rovnicích (19.45) a (19.47) je shrnut důležitý výsledek, obecná teorie Josephsonova přechodu.

Jaké jsou její důsledky? Přiložme nejdříve konstantní napětí U_0 . Argument funkce sinus bude mít tvar $(\delta_0 + (q/\hbar) U_0 t)$. Jelikož je \hbar velmi malé číslo (v porovnání s běžnými napětími a časy), sinus osciluje poměrně rychle a celkově žádný proud téct nebude. (V praktických případech v důsledku toho, že teplota není rovna nule, bude existovat malý proud způsobený vodivostí „normálních“ elektronů.) Na druhé straně, připojíme-li k přechodu nulové napětí, proud dostaneme! Za takových okolností může proud nabývat libovolné hodnoty mezi $+J_0$ a $-J_0$ (v závislosti na hodnotě δ_0). Jakmile se však pokusíte přiložit k přechodu napětí, proud klesne na nulu. Toto podivné chování bylo nedávno pozorováno experimentálně.^{103f}

Existuje ještě jeden způsob, jak získat nenulový proud: Přiložením vysokofrekvenčního napětí ke konstantnímu napětí. Položme

$$U = U_0 + u \cos \omega t,$$

kde $u \ll U$. Potom $\delta(t)$ vypadá takto

$$\delta(t) = \delta_0 + \frac{q}{\hbar} U_0 t + \frac{q}{\hbar} \frac{u}{\omega} \sin \omega t.$$

Pro malé Δx platí

$$\sin(x + \Delta x) \approx \sin x + \Delta x \cos x.$$

Použitím tohoto přiblížení pro $\sin \delta$ dospějeme k výrazu

$$J = J_0 \left[\sin \left(\delta_0 + \frac{q}{\hbar} U_0 t \right) + \frac{q}{\hbar} \frac{u}{\omega} \sin \omega t \cos \left(\delta_0 + \frac{q}{\hbar} U_0 t \right) \right].$$

První člen je v průměru roven nule, ale druhý ne, je-li

$$\omega = \frac{q}{\hbar} U_0.$$

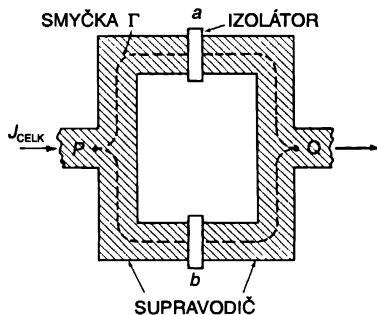
Proud by měl téct, pokud by frekvence střídavého napětí nabývala právě této hodnoty. Shapiro¹⁰⁴⁾ oznámil, že zmíněný rezonanční efekt pozoroval.

Podíváte-li se na práce o této problematice, zjistíte, že vztah pro proud se v nich často uvádí ve tvaru

$$J = J_0 \sin \left(\delta_0 + \frac{2q_e}{\hbar} \int A \cdot d\mathbf{s} \right), \quad (19.48)$$

kde se integruje po dráze procházející přechodem. Důvod spočívá v tom, že nachází-li se přechod v poli vektorového potenciálu, modifikuje se fáze amplitudy překlápění způsobem objasněným na začátku kapitoly (rovnice (19.1)). Zabudujete-li takový fázový posun všude, dojdete k uvedenému vztahu.

Nakonec bych rád popsal velmi dramatický a zajímavý experiment týkající se interference proudů, procházejících dvěma přechody.



Obr. 19.7 Dva Josephsonovy přechody v paralelním zapojení

V kvantové mechanice se obvykle setkáváme s interferencí amplitud od dvou různých štěrbin. Nyní se budeme zabývat interferencí proudů tekoucích dvěma přechody mezi supravodiči. Je

¹⁰⁴⁾

S. Shapiro, Phys. Rev. Letters 11, 80 (1963).

způsobena fázovým rozdílem, s nímž se stékají proudy po průchodu dvěma různými cestami. Na obr. 19.7 jsem znázornil dva různé přechody a a b , spojené paralelně. Konce P a Q jsou zapojeny na naše elektrické přístroje, jimiž měříme proud. Vnější proud J_{celk} bude součtem proudů procházejících oběma přechody. Označme je J_a , J_b a jejich fáze δ_a , δ_b . Fázový rozdíl vlnových funkcí mezi body P a Q musí být jeden a tentýž, ať jdeme po jedné cestě, nebo po druhé. Vydáme-li se po horní cestě, přechodem a , je fázový rozdíl roven součtu δ_a a příslušného křivkového integrálu vektorového potenciálu

$$\Delta \text{ fáze}_{P \cdot Q} = \delta_a + \frac{2q_e}{\hbar} \int_{\text{horní}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}. \quad (19.49)$$

Proč? Protože fáze θ souvisí s A rovnicí (19.26). Zintegrujeme-li tuto rovnici po nějaké křivce, dostaneme na levé straně rozdíl fází, který pak bude úměrný křivkovému integrálu vektorového potenciálu A přesně tak, jak jsme napsali. Změnu fáze po spodní cestě lze zapsat podobně

$$\Delta \text{ fáze}_{P \cdot Q} = \delta_b + \frac{2q_e}{\hbar} \int_{\text{dolní}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}. \quad (19.50)$$

Levé strany obou rovnic si jsou rovny: odečteme-li je, zjistíme, že rozdíl mezi deltami je vyjádřen křivkovým integrálem potenciálu A po uzavřené křivce

$$\delta_b - \delta_a = \frac{2q_e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}.$$

Integrujeme po uzavřené křivce Γ naznačené na obr. 19.7 a protínající oba přechody. Příslušný integrál představuje magnetický tok Φ smyčkou. Obě delty se budou lišit o $2q_e/\hbar$ -násobek magnetického toku Φ , procházejícího dvěma větvemi obvodu:

$$\delta_b - \delta_a = \frac{2q_e}{\hbar} \Phi. \quad (19.51)$$

Tento fázový rozdíl můžeme regulovat změnou magnetického pole v obvodu; nastavíme ho tedy a podíváme se, zda se v celkovém proudu tekoucím oběma přechody projeví interference mezi jeho dvěma částmi. Celkový proud bude součtem J_a a J_b . Je výhodné napsat

$$\delta_a = \delta_0 + \frac{q_e}{\hbar} \Phi, \quad \delta_b = \delta_0 - \frac{q_e}{\hbar} \Phi.$$

Potom

$$J_{\text{celk}} = J_0 \left[\sin \left(\delta_0 + \frac{q_e}{\hbar} \Phi \right) + \sin \left(\delta_0 - \frac{q_e}{\hbar} \Phi \right) \right] = 2J_0 \sin \delta_0 \cos \frac{q_e \Phi}{\hbar}. \quad (19.52)$$

O δ_0 nic konkrétního nevíme a příroda si ho může v závislosti na okolnostech přizpůsobit, jak se jí zlíbí. Konkrétně to bude záviset na vnějším napětí, jaké přiložíme k přechodu. Ale bez ohledu na to, co uděláme, $\sin \delta_0$ nemůže nikdy nabývat hodnoty větší než 1. Takže pro libovolné Φ je *limitní proud* dán vztahem

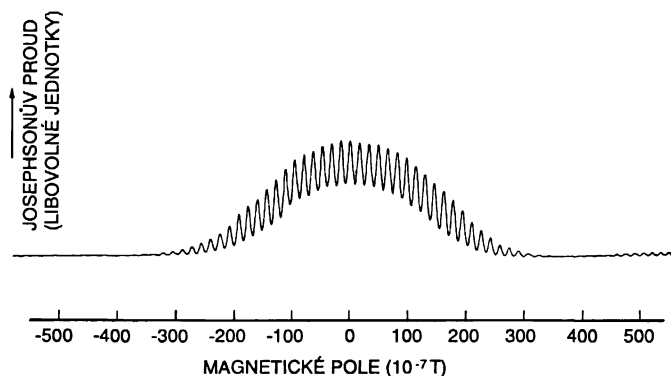
$$J_{\max} = 2J_0 \left| \cos \frac{q_e \Phi}{\hbar} \right|.$$

Bude se měnit s Φ a sám bude dosahovat maxima vždy, když

$$\Phi = n \frac{\pi \hbar}{q_e},$$

kde n je nějaké celé číslo. Jinými slovy, tento proud dosahuje svého maxima, když magnetický tok nabývá právě těch kvantových hodnot, které jsme našli v rovnici (19.30)!

Josephsonův proud dvojitým přechodem byl naměřen¹⁰⁵⁾ jako funkce magnetického pole v oblasti mezi větvemi. Výsledky jsou znázorněny na obr. 19.8. Pozorujeme zde obecné pozadí od proudů, pocházejících z různých efektů, které jsme zanedbali, ale rychlé oscilace proudu se změnou magnetického pole jsou způsobeny interferenčním členem $\cos q_e \Phi / \hbar$ v rovnici (19.52).



Obr. 19.8 Záznam proudu tekoucího dvěma Josephsonovými přechody jako funkce magnetického pole v oblasti mezi dvěma přechody (obr. 19.7). (tento záznam poskytli R. C. Jaklevic, J. Lambe, A. H. Silver a J. E. Mercereau z Vědecké laboratoře Fordovy automobilové společnosti.)

Jednou z velmi zajímavých otázek kvantové mechaniky je otázka, zda existuje vektorový potenciál v místě, kde není magnetické pole.¹⁰⁶⁾ Experiment, který jsem právě popsal, byl uskutečněn i tak, že mezi oběma přechody byla umístěna malá cívka, takže jediné významné magnetické pole B existovalo jen v jejím nitru a na supravodivé vodiče z něj připadla jen zanedbatelně malá část. Ukazuje se však, že velikost proudu v závislosti na magnetickém toku uvnitř cívky má oscilační průběh, ačkoliv se magnetické pole vodičů vůbec nedotkne. To je další důkaz „fyzikální realnosti“ vektorového potenciálu (viz stať 15.5, 2. dílu).

Co přijde dále, nevím. Podíváme se však, co by se dělat dalo. Zaprvé, všimněme si, že interferenci mezi dvěma přechody lze využít k sestrojení citlivého magnetometru. Je-li plocha ohraničená oběma větvemi řekněme 1 mm^2 , budou maxima křivky na obr. 19.8 navzájem oddělena $2 \cdot 10^{-10} \text{ T}$. Určitě je možné pozorovat, kdy se nacházíme v $1/10$ vzdálenosti mezi dvěma vrcholy;

¹⁰⁵⁾ Jaklevic, Lambe, Silver a Mercereau, Phys. Rev. Letters 12, 159 (1964).

¹⁰⁶⁾ Jaklevic, Lambe, Silver a Mercereau, Phys. Rev. Letters 12, 274 (1964).

takový přechod by se tedy měl dát použít na měření magnetických polí řádu $2 \cdot 10^{-11}$ T – nebo na měření větších polí s takovouto přesností. Člověk by dokonce mohl zajít ještě dále. Představme si např., že těsně vedle sebe rozestavíme 10 nebo 20 přechodů ve stejné vzdálenosti od sebe. Nastane interference mezi 10 nebo 20 štěrbinami; jak měníme magnetické pole, dostaneme velmi ostrá maxima nebo minima. Místo dvojtěrbinové interference můžeme zkonstruovat 20- nebo dokonce až 100-štěrbinový interferometr na měření magnetických polí. Snad můžeme vyslovit předpověď, že využitím jevů kvantově mechanické interference se uvedené měření stane téměř stejně přesným jako měření vlnové délky světla.

To je ještě jeden názorný příklad toho, co se děje v poslední době – objev tranzistoru, laseru, a nyní takových supravodivých přechodů, jejichž praktické využití ještě úplně neznáme. Kvantová mechanika, objevená roku 1926, měla za sebou skoro 40 let rozvoje, když se jí téměř najednou dostalo praktického využití. Skutečně začínáme ovládat přírodu na velmi jemné a krásné úrovni.

Je mi líto, ale musím vám říci, že chcete-li se zúčastnit tohoto dobrodružství, je pro vás naprosto nevyhnutelné, abyste se kvantovou mechaniku naučili co nejdříve. Doufali jsme, že pomocí těchto přednášek se nám podaří odkrýt před vámi tajemství této části fyziky v nejranějším možném okamžiku.

Dva roky trvaly moje přednášky a nyní končím. Za některé věci bych se chtěl omluvit, za některé ne. Doufám, ba vlastně vím, že dva až tři tucty z vás dokázaly všechno sledovat s velkým nadšením a strávily přitom pěkné chvíle. Jsem si však též vědom toho, že „vyučování přináší velmi malý užitek až na několik výjimečných případů, kdy je vlastně zbytečné“. Takže těm z vás, kteří jste všemu rozuměli, můžu říci jen tolik, že jsem vám pouze ukázal jak se věci mají. Co se týká ostatních, bylo by mi líto, kdyby někdo kvůli mně začal tento předmět nenávidět. Nikdy jsem dosud nepřednášel základní kurz fyziky, a proto mi promiňte. Doufám, že jsem vám život příliš neztrpčil a že se k této vzrušující oblasti neotočíte zády. Věřím, že někdo jiný vás to dokáže naučit způsobem, který vám nezpůsobí zažívací problémy a že jednoho dne nakonec zjistíte, že to není tak hrozné, jak to vypadá.

Nakonec bych rád připomněl, že hlavním posláním mých přednášek nebylo připravit vás na nějakou zkoušku – ba ani na práci v průmyslu nebo armádě. Hlavně jsme chtěl, abyste dokázali ocenit nádheru tohoto světa a dokázali jste se na ni dívat fyzikálním způsobem, neboť jsem přesvědčen, že to patří k hlavní části skutečné kultury dnešní doby. (Někteří přednášející z jiných oborů budou mít pravděpodobně námitky, ale jsem přesvědčen, že se úplně mylí.)

A možná nezůstane jen u oceňování této kultury, ale dokonce se budete sami chtít zapojit do tohoto největšího dobrodružství, do jakého se kdy lidská mysl pustila.

Výsledky a návody ke cvičením

KAPITOLA 1

- 1.1** Předpokládáme izotropní zdroj světla, takže amplitudy pro otevřenou první a druhou šterbinu jsou rovny téže konstantě $\langle 1 | Z \rangle = \langle 2 | Z \rangle = A$. S použitím vztahu (1.7) pro nekonečně úzké šterbiny určíme pravděpodobnosti $P_1 = \frac{|A|^2}{r_1^2}$, $P_2 = \frac{|A|^2}{r_2^2}$, $P_{12} = |A|^2 \left(\frac{e^{ikr_1}}{r_1} + \frac{e^{ikr_2}}{R_2} \right)^2$, kde r_1 a r_2 jsou vzdálenosti šterbin od bodu x na stínítku a $k = 2\pi/\lambda$. Vyjádříme P_{12} jako funkci x rozestupu šterbin a . Derivováním P_{12} podle x můžeme určit polohy maxim a minim a z parametrů experimentu na obr. (1.1) i vlnovou délku λ . V přiblížení $r_1 = r_2 \approx r_0 + a$, $r_2 - r_1 = ax/r_0$, kde r_0 je vzdálenost roviny šterbin od stínítka, můžeme upravit P_{12} na tvar $P_{12} = \frac{2|A|^2}{r_0^2} \left(1 + \cos \frac{kax}{r_0} \right)$, odkud dostaneme podmínky maxima $kax/r_0 = 2\pi n$, n celé. Je-li vzdálenost centrálního a prvního vedlejšího maxima rovna b , dostaneme vlnovou délku $\lambda = ab/r_0$. Pravděpodobnosti P_1 a P_2 jsou funkcemi x a nepřímo úměrné r_1^2 resp. r_2^2 . Můžeme je odhadnout podle obr. 1.1. Pak dostaneme pro P_{12} v maximum $P_{12} = (\sqrt{P_1} + \sqrt{P_2})^2$ a v minimum $P_{12} = (\sqrt{P_1} - \sqrt{P_2})^2$.
- 1.2** a) V použitím přiblížení bude fázový rozdíl paprsků dopadajících na stínítku ze dvou šterbin $\Delta\varphi = (ka/r_0)(x + Dr_0/L)$, kde L je vzdálenost zdroje od roviny šterbin. Celý interferenční obrazec se tedy posune dolů o Dr_0/L .
b) Jak plyne z výsledku cvičení 1.1, vzdálenosti mezi maximy se zmenší na polovinu.
c) Zdvoujnásobí se amplituda pro druhou šterbinu. V přiblížení cvičení 1.1 bude $P_{12} = \frac{|A|^2}{r_0^2} \left(5 + 4 \cos \frac{kax}{r_0} \right)$, zvětší se výšky maxim 9/4krát a minima budou představovat 1/4 výšky maxim.
- 1.3** Koefficient propustnosti, tj. poměr intenzit prošlého a dopadajícího světla $T = \cos^2 \theta$. Pokud foton polaroidem projde, bude polarizován podél osy jeho propustnosti.
- 1.4** Krystalky fólie jsou orientovány chaoticky a je-li $\lambda < 2d$ (kde d je vzdálenost dvou sousedních atomových rovin v krystalu), vždy se najde krystalek orientovaný tak, aby byla splněna podmínka difrakčního maxima $n\lambda = 2d \sin \theta$. Difrakční obrazec musí být proto symetrický vzhledem k ose svazku. Je-li L vzdálenost fólie od fotografické desky, bude poloměr prstenců $R_n = L \tan 2\theta \approx n\lambda L/d$. Vyjádříme-li $\lambda = 2\pi h/p$ jako délku de Broglieovy vlny, dosadíme zadané hodnoty a vezmeme za d mřížkovou konstantu $a = 2,88 \cdot 10^{-10}$ m, vyjde nám $R_1 = 0,3$ cm. Pro další poloměry prstenců musíme vzít v úvahu, že krystalová soustava zlata je krychlová, plošně centrovaná a podle toho musíme uvažovat i jiné vzdálenosti atomových rovin ($d = a/\sqrt{2}$ apod.).
- 1.5** Vyjádříme $a_1 = |a_1| e^{i\varphi_1}$, $a_2 = |a_2| e^{i\varphi_2}$. Podobným způsobem jako ve cvičení 1.1 dostaneme intenzitu $P(x) = \frac{1}{r_0^2} \left[|a_1|^2 + |a_2|^2 + 2|a_1||a_2| \cos \left(kx \frac{a}{r_0} + \varphi_2 - \varphi_1 \right) \right]$.
- 1.6** a) V daném přiblížení $P_{12}(x) = \frac{4|A|^2}{r_0^2} \cos^2 \left(\frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2} \right)$, kde A je konstanta a $\varphi_2 - \varphi_1 = kxa/r_0$. Odtud $b = 2\pi h r_0 / p_0 a$.
b) Bez komentáře.
c) Plyne ze zákona zachování energie.
d) Fázový rozdíl vyjádříme pomocí rozdílu hybností a použijeme vztah dokázaný v bodě b).
- 1.7** a) $P(x) = |\alpha|^2 |\langle x | 1 \rangle \langle 1 | Z \rangle + \langle x | 2 \rangle \langle 2 | Z \rangle|^2$, b) $P(x)/P(x) = |\alpha|^2/|\beta|^2$, c) $P(x) = \frac{1}{2} P(x) + \frac{1}{2} P(x)$.
nahoru nahoru dolu
- 1.8** Vyjádříme-li v amplitudách relativní intenzitu v maximum a minimum (α nechť je amplituda průchodu první šterbinou), dostaneme $P_{\max}/P_{\min} = |\alpha + 0,1\alpha|^2/|\alpha - 0,1\alpha|^2 = 1,5$.
- 1.9** Koincidence nastává, dopadnou-li do obou detektorů současně dva fotony ze zdrojů A a B. Celková pravděpodobnost bude $P_{12} = [|\langle a | A \rangle \langle b | B \rangle + \langle a | B \rangle \langle b | A \rangle|^2 + \langle a | A \rangle \langle b | A \rangle^2 + |\langle a | B \rangle \langle b | B \rangle|^2] N = 2|c|^4 [2 + \cos 2k(R_2 - R_1)] N$, kde N je celkový tok fotonů. Pro $R = D$, dplatí $R_2 - R_1 = D/d/2R$ máme $P_{12} = 2|c|^4 [2 + \cos 2\pi D d/R\lambda]$. Provedeme-li měření pro dvě různá d ta, abychom dostali stejný počet koincidence, můžeme určit vzdálenost D ze vztahu $D = R\lambda/(d_2 - d_1)$. Dosadíme-li fázové hodnoty vzdálenosti a rozměrů hvězd, zjistíme, že $d_2 - d_1$ má rozumnou velikost řádu metru.

- 1.9 Koincidence nastává, dopadnou-li do obou detektorů současně dva fotony ze zdrojů A a B. Celková pravděpodobnost bude $P_{12} = [|\langle a|A\rangle\langle b|B\rangle + \langle a|B\rangle\langle b|A\rangle|^2 + |\langle a|A\rangle\langle b|A\rangle|^2 + |\langle a|B\rangle\langle b|B\rangle|^2] N = 2|c|^4 [2 + \cos 2k(R_2 - R_1)] N$, kde N je celkový tok fotonů. Pro $R \gg D$, dplatí $R_2 - R_1 = Dd/2R$ a máme $P_{12} = 2|c|^4 [2 + \cos 2\pi Dd/R\lambda]$. Provedeme-li měření pro dvě různá d tak, abychom dostali stejný počet koincidence, můžeme určit vzdálenost D ze vztahu $D = R\lambda/(d_2 - d_1)$. Dosadíme-li řádové hodnoty vzdáleností a rozměrů hvězd, zjistíme, že $d_2 - d_1$ má rozměrnou velikost řádu metru.

KAPITOLA 2

- 2.1 a) $4,14 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$; b) $1,5 \cdot 10^{27}$.
- 2.2 a) $(\omega^2/\pi^2 c^2) kT$, $(\hbar\omega^3/\pi^2 c^2) e^{-(\hbar\omega/kT)}$;
 b) $x = \hbar\omega/kT$, kde $x = 2,822$ je řešením transcendentní rovnice $x = 3(1 - e^{-x})$
 c) $x = 2\pi\hbar\omega/\lambda kT$, kde $x = 4,965$ je řešením transcendentní rovnice $x = 5(1 - e^{-x})$
 d) $T = 5800 \text{ K}$.
- 2.3 Ve vybuzeném stavu bude magnetický moment dvojice elektronů roven $\sim 2\mu_B$ (μ_B je Bohrov magneton). Má-li jeden z těchto elektronů energii $\hbar\omega$, bude v magnetickém poli energie vybuzeného stavu $\hbar\omega - 2\mu_B B$. Pro $B \gg \hbar\omega/2\mu_B$ bude tato energie záporná, což odpovídá situaci, kdy oba elektrony jsou orientovány stejně ve směru pole. Po dosažení číselných hodnot dostaneme $B \gg 2 \cdot 10^4 \text{ T}$.
- 2.4 Pokud by v jádře byly elektrony, musel by být atom dusíku tvořen 28 fermiony ($14p + 14n$) a mít celočíselný spin („dusíková katastrofa“).
- 2.5 Použijeme vztahy (2.25) – (2.33).
 a) $N_i/N_0 = N_2/N_1 = \bar{n}/(\bar{n} + 1)$;
 b) viz (2.32);
 c) $\bar{n}(\omega) = \exp(-\hbar\omega/kT)$, $\bar{n}(\omega) = kT/\hbar\omega$.
- 2.6 Ne, neutrino je fermion.
- 2.7 Jestliže částice nejsou totožné, $P(ac \cdot bd) = |\langle bd|ad\rangle|^2 = |\langle b|a\rangle|^2 |\langle d|c\rangle|^2 = P_{ab} P_{cd}$. Jsou-li totožné, nelze je rozlišit a platí $P(ac \cdot bd) = |\langle b|a\rangle\langle d|c\rangle + \langle d|a\rangle\langle b|c\rangle|^2$.
- 2.8 Dva deuterony se mohou nacházet celkem v 9 různých spinových stavech. Mají-li oba deuterony stejnou projekci spinu, nelze je odlišit; mají-li různou projekci, odlišit lze. V prvním případě musíme počítat amplitudy, v druhém pravděpodobnosti. Výsledná pravděpodobnost registrace bude tedy $P(\vartheta) = \frac{1}{3} |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2 + \frac{2}{3} [|f(\vartheta)|^2 + |f(\pi + \vartheta)|^2]$.
- 2.9 a) Případy rozptylu pionu na protonu a na neutronu lze rozlišit, takže $P(\vartheta) = 2P_1 + 2P_2 = 2|f_1(\vartheta)|^2 + 2|f_2(\vartheta)|^2$.
 b) Pokud nevíme, na kterém nukleonu se pion rozptýlí, musíme počítat amplitudy: $P(\vartheta) = 4|f_1(\vartheta) + f_2(\vartheta)|^2$. Zapišeme-li $f_1(\vartheta) = \sqrt{P_1} \exp(i\varphi_1)$, $f_2(\vartheta) = \sqrt{P_2} \exp(i\varphi_2)$, a budeme-li předpokládat, že fáze φ_1 a φ_2 jsou si blízké, zjistíme, že pravděpodobnost nepružného rozptylu je větší než pružného.
- 2.10 a) $|f(\varphi) - f(\pi - \vartheta)|^2 = 0$;
 b) Jsou dva možné případy: dopadající neutron nezmění směr spinu a je zaregistrován, nebo dopadající neutron změní směr spinu a místo něho je zaregistrován neutron zpětného rázu. V obou případech je pravděpodobnost $|f + g|^2$.
 c) Bude-li spin neutronů svazku mířit nahoru, bude pravděpodobnost rovna nule, bude-li mířit dolů, bude rovna $2|f + g|^2$. Výsledná pravděpodobnost je $|f + g|^2$.
 d) Uvážíme-li všechny možné orientace spinů, dostaneme pro výslednou pravděpodobnost $|f + g|^2$.
 e) Protože protony a neutrony lze rozlišit, bude pravděpodobnost $|f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 = 2|f|^2$.
- 2.11 a) Hybnosti v těžiškově soustavě před i po srážce jsou si všechny rovny, v laboratorní soustavě posrážce $\mathbf{p}'_1 = \mathbf{p}'_1 + m\mathbf{V}$, kde \mathbf{V} je rychlost těžiště. Po rozeptání do složek a s uvažováním toho, že $\mathbf{p}'_1 = m\mathbf{V}$, dostaneme $\tan \alpha = \tan(\vartheta/2)$, $\alpha = \vartheta/2$.
 b) $f(\pi - \vartheta) + g(\vartheta)$.
 c) Existují 4 možnosti kombinace spinů a může též dojít k převrácení spinu. Výsledná pravděpodobnost $P(\vartheta) = \frac{1}{2} [|f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2 + |f(\vartheta) + g(\pi - \vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta) + g(\vartheta)|^2]$.
 d) Použijeme výsledek c), $A = 3/4$, $B = 1/4$.
- 2.12 Ve stavu s nejmenší možnou energií (degenerovaný elektronový plyn) jsou nižší hladiny zaplněny vždy dvěma elektrony až po hladinu $\epsilon_{\text{max}} = p_{\text{max}}^2/2m$. Počet kvantových stavů v intervalu vlnových čísel $k \rightarrow k+dk$ ($k = p/\hbar$) je $dN = 2V \cdot 4\pi k^2 dk / (2\pi)^3$. Integrací od 0 do p_{max} dostaneme $N = V p_{\text{max}}^3 / (3\pi^2 \hbar^3)$.
 Energie všech elektronů $E = \int_0^{p_{\text{max}}} \frac{p^2}{2m} dN = \frac{V p_{\text{max}}^5}{10\pi^2 \hbar^3 m} = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m} N$.
 Tlak elektronového plynu najdeme jako $P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{5} \left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} \frac{\hbar^2}{m}$, a tedy $\gamma = 5/3$.
- 2.13 Podle 2.12 dostaneme $A = \frac{1}{10} \left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{2/3} \frac{1}{m_p^{5/3}} \frac{\hbar^2}{m}$. Protože tlak je nepřímo úměrný hmotnosti částic, uplatní se převážně elektronový plyn. Uvedené rovnice vyjadřují rovnováhu mezi gravitačními silami a tlakem elektronového plynu.

KAPITOLA 3

- 3.1** Můžeme si myslet, že mezi přístroji A a B je vložen přístroj T, který propouští všechny tři stavy k a rozdělí tak proces na dva – vstup do A ve stavu χ a výstup z A ve stavu k , a dále vstup do B ve stavu k a výstup z B ve stavu φ . Amplitudy těchto procesů pak můžeme vynásobit a součiny sečíst.
- 3.2** Obecně pro amplitudu φ - j platí $\langle jS | STS | \varphi \rangle = \sum_{i,k} \langle jS | kT \rangle \langle kT | iS \rangle \langle iS | \varphi \rangle$. Je-li v T otevřena jen jedna štěrbina, bude $\langle jS | STS | \varphi \rangle = \langle jS | kT \rangle \sum_i \langle kT | iS \rangle \langle iS | \varphi \rangle$ a poměr pravděpodobností pro výsledné stavy j_1 a j_2 nebude záviset na počátečním stavu φ (součty přes i se vyruší). Pro dvě a tři otevřené štěrbiny bude na počátečním stavu záležet (pro tři štěrbiny $P_j = |\langle jS | \varphi \rangle|^2$).
- 3.3** a) Spoužitím vztahů (3.38) dostaneme $N_2 = N \sum_{\mp} \langle iT | +S \rangle \langle +S | \varphi \rangle^2 = \frac{3}{4} N_1$ (N je intenzita dopadajícího svazku, $|\langle +S | \varphi \rangle|^2 = N_1/N$, iT nabývá dvou hodnot 0T a -T).
 b) $N_3 = |\langle -S | STS | \varphi \rangle|^2 = N_1/16$;
 c) $N_2 = N_1, N_3 = 0$.
- 3.4** a) Pomocí vztahů (3.38) a (3.39) odvodíme amplitudy pro $\langle jT | iS \rangle$. Platí $\langle jS' | STS | \varphi \rangle = \sum_{kT \pm T} \langle jS' | kT \rangle \langle kT | 0S \rangle \langle 0S | \varphi \rangle$. Uvážíme, že $\langle jS' | kT \rangle = \langle kT | jS' \rangle^*$ a že přístroje S, S' jsou stejně orientovány, dále normujeme $|\langle 0S | \varphi \rangle|^2 = N_0$ a dostaneme $N_{S'} - N_0 \left| \sum_{kT \pm T} \langle jS' | kT \rangle \langle kT | 0S \rangle \right|^2$, odkud $N_{S'} = N_{S''} = 0, N_{0S'} = N_0$.
 b) Použijeme-li výraz pro $N_{S'}$ z a), dostaneme dva členy odpovídající mezitavům +T a -T. Tak najdeme $N_{S'} = N_{S''} = N_0/4, N_{0S'} = N_0/2, N_{T'} = |\langle kT | 0S \rangle \langle 0S | \varphi \rangle|^2, N_{T'} = N_{T''} = N_0/2, N_{0T'} = 0$.
 c) Nezmění se.
 d) $N_{S'} = N_0/8, N_{0S'} = 3N_0/4, N_{S''} = N_0/8$.
 e) Přítomnost přístroje S neovlivní výsledek, $N_{jS'} = \frac{1}{3} N_0 \sum_{iT \pm T} |\langle jS' | kT \rangle|^2$, tj. $N_{S'} = N_{S''} = N_0/6, N_{0S'} = N_0/3$.

KAPITOLA 4

- 4.1** Obecně amplituda objevení atomu v bodě Q je $\langle Q | P \rangle = \sum_{iS, jT} \langle Q | jT \rangle \langle jT | iS \rangle \langle iS | P \rangle$. První přístroj propouští jen stav +S a druhý stav +T. Podle tabulky 4.1 $\langle +T | +S \rangle = \cos \frac{\alpha}{2} e^{i\beta} e^{i\gamma/2}$. Počet atomů na výstupu $N_Q = \frac{1}{2} N \cos^2 \frac{\alpha}{2}$. V jednotlivých případech a) až h) stačí dosadit za úhel α hodnoty 0, $\pi/2, \pi/2, \pi/2, \pi/4, \pi/2, \pi/2, 0$.
- 4.2** Je-li částice původně v nějakém spinovém stavu φ , bude zaregistrována ve stavu ψ s amplitudou $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | + \rangle \langle + | \psi \rangle + \langle \varphi | - \rangle \langle - | \psi \rangle = aX + bY$, kde $\langle + | \psi \rangle = a, \langle - | \psi \rangle = b, \langle \varphi | + \rangle = X, \langle \varphi | - \rangle = Y$. Má-li spin vletající částice směr nahoru (dolů), bude $|a| = 1, b = 0$ ($a = 0, |b| = 1$). Míří-li podél osy $+x$ ($-x$), bude $a = b = 1/\sqrt{2}$ ($a = -1/\sqrt{2}, b = i/\sqrt{2}$). Míří-li spin pod obecným úhlem, použijeme (4.36) a dostaneme $a = \cos(\vartheta/2) e^{-i\varphi/2}, b = \sin(\vartheta/2) e^{i\varphi/2}$. Náhodné rozdělení spinů realizované uvedenými třemi způsoby vede ve všech případech k pravděpodobnosti zaregistrování částice $P = \frac{1}{2} (|X|^2 + |Y|^2)$.
- 4.3** $N = N_0 \sum_k |\langle +U | kT \rangle \langle kT | -S \rangle|^2$.
 a) Spoužitím tabulky 4.2 $\langle +T | -S \rangle = 1, \langle -T | -S \rangle = 0$;
 b) $\langle +U | -S \rangle = \sum_{k,j} \langle +U | kS \rangle \langle kS' | jS \rangle \langle jS' | -S \rangle$ a dosadíme-li R_x a R_y z tabulky 4.2, najdeme $\langle +U | -S \rangle = i \sin(\vartheta/2)$ můžeme zkusit sůzně poslopnosti pootočení).
 c) Pro $\vartheta = 0$ $\langle +U | -S \rangle = 0$, pro $\vartheta = \pi$ $\langle +U | -S \rangle = i$.
 Při $\vartheta = \pi$ jsou soustavy T a U vzájemně otočeny o úhel π kolem osy za amplitudy $\langle +T | -S \rangle, \langle +U | -S \rangle$ se liší fázovým koeficientem $\exp(i\pi/2)$.
- 4.4** Z transformačních vztahů pro otočení soustavy souřadnic kolem osy z o úhel ϑ $E_x = E_x \cos \vartheta + E_y \sin \vartheta, E_y = -E_x \sin \vartheta + E_y \cos \vartheta$ dostaneme $\langle xT | xS \rangle = \cos \vartheta, \langle yT | yS \rangle = \sin \vartheta, \langle yT | xS \rangle = -\sin \vartheta, \langle yT | yS \rangle = \cos \vartheta$.
- 4.5** Pro transformaci příčných složek intenzity elektrického pole polarizovaného světla máme $E'_x = \langle x | A | x \rangle E_x + \langle x | A | y \rangle E_y, E'_y = \langle y | A | x \rangle E_x + \langle y | A | y \rangle E_y$.
 a) $\langle x | A | x \rangle = 1$, ostatní nulové;
 b) Pootočení přístroje ekvivalentní transformacím jako v př. 4.4, dále $E'_x = E_x \cos \vartheta, E'_y = E_x \sin \vartheta$ a $\langle x | A | x \rangle = \cos^2 \vartheta, \langle y | A | x \rangle = \langle y | A | y \rangle = \sin \vartheta \cos \vartheta, \langle y | A | y \rangle = \sin^2 \vartheta$
 c) jako v případě a)
 d) jako v případě b)
 e) $\langle x | A | x \rangle = e^{i\vartheta}, \langle x | A | y \rangle = \langle y | A | x \rangle = 0, \langle y | A | y \rangle = 1$
 f) $\langle x | A | x \rangle = \langle y | A | y \rangle = e^{i\vartheta}, \langle x | A | y \rangle = \langle y | A | x \rangle = 0$
 g) $\langle x | A | x \rangle = \langle y | A | y \rangle = \frac{1}{2}(i+1), \langle x | A | y \rangle = \langle y | A | x \rangle = \frac{1}{2}(i-1)$
 h) $\langle x | A | x \rangle = i, \langle x | A | y \rangle = \langle y | A | x \rangle = 0, \langle y | A | y \rangle = 1$
 i) Pro průchodu destičky dloužky d se rovina polarizace paprsků x a y stočí o $\phi_x = \omega d n_x / c, \phi_y = \omega d n_y / c$, kde n_x a n_y jsou odpovídající indexy lomu. Proto $\langle x | A | x \rangle = e^{i\omega d n_x / c}, \langle y | A | y \rangle = e^{i\omega d n_y / c}$, ostatní nulové.
 j) $\langle x | A | x \rangle = \langle y | A | y \rangle = \cos \vartheta, \langle z | A | x \rangle = -\langle x | A | z \rangle = \sin \vartheta$
 k) $\langle x | A | x \rangle = \langle x | A | y \rangle = 0, \langle y | A | x \rangle = i, \langle y | A | y \rangle = 1$
 l) Intenzita světla na vstupu bude $|E_x|^2 + |E_y|^2$ (E_x a E_y komplexní) a na výstupu $|E_x + iE_y|^2 = |E_x|^2 + |E_y|^2 + 2|E_x||E_y| \cos \alpha$, kde α je fázový rozdíl mezi E_x a E_y . Pokud cos $\alpha > 0$, bude intenzita na výstupu větší než na vstupu. Ve skutečnosti však paprsky x a y jsou prostorově ohraničeny, nelze je považovat za rovinné vlny a po spojení na výstupu se objevují interferenční maxima a minima.

$$4.6 \quad a) \quad P_{\text{nahoru}} = \frac{\left(1 - \frac{v}{c}\right) \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}{1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta}, \quad P_{\text{dolů}} = \frac{\left(1 + \frac{v}{c}\right) \cos^2 \frac{\vartheta}{2}}{1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta};$$

$$b) \quad \text{Použijeme tabulku 4.2, } P_{,x} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \vartheta}{1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta}} \right), \text{ u } P_{,x} \text{ v závorce znaménko minus.}$$

$$c) \quad P_{,y} = \frac{1}{2}$$

$$d) \quad \text{Integrací pravděpodobností dostaneme } P_{\text{nahoru}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{v}{c} \right), \quad P_{\text{dolů}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{v}{c} \right).$$

KAPITOLA 5

5.1 Použijeme-li (5.33) pro odchýlení částice v nehomogenním poli, dostaneme malé odchylky $\delta\varphi(\pm 1) = \pm \frac{\mu M l \omega}{p^2} \frac{\partial B}{\partial y}$, $\delta\varphi(0) = 0$.

Při $t = 0$ míří B ve směru $+z$ a spin ve směru $+x$. Uvážíme změnu amplitudys časem $C_{jz}(\vartheta) = e^{i\omega\rho t} C_{jz}(0)$, kde $\omega\rho = \mu B_0/h$ a jprobíhá hodnoty $-1, 0, +1$, a dosadíme hodnoty $C_{jz}(0) = \langle jz | x \rangle$ z tabulky 3.38. Máme $C_{,z}(\vartheta) = \frac{1}{2} e^{i\omega\rho t}$. Kurčněním veličiny můžeme použít jednakměření rozštěpení svazku metodou Sterna-Gerlacha, jednak metodu paramagnetické rezonance.

KAPITOLA 6

6.1 Pro $t = 0$ amplitudy pro spin mířící nahoru a dolů podél osy z jsou $C_+ = 1, C_- = 0$. Řešením rovnic pro časovou změnu těchto amplitud dostaneme $C_+(\vartheta) = \cos \omega t, C_-(\vartheta) = i \sin \omega t, \omega = \mu B_0/h$. Spin bude mířit dolů v okamžicích T_n daných vztahem $\mu B_0 T_n/h = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, n = 0, 1, 2, \dots$. Všechny částice projdou, bude-li $T = T_n, B > \pi \hbar/2 \mu T$.

6.2 Řešíme rovnice pro časovou změnu amplitud spočátečními podmínkami $C_+ = 1, C_- = 0$. K transformaci Hamiltonovy rovnice do báze z stavů $|+\rangle, |-\rangle$ použijeme tabulku 4.2. Najdeme $C_+(\vartheta) = \cos \omega t + \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \omega t, C_-(\vartheta) = \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \omega t, \omega = \mu B/h$. Amplituda pro $J_x = \hbar/2$ je $C_{,x}(\vartheta) = \langle +x | + \rangle C_+(\vartheta) + \langle +x | - \rangle C_-(\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \omega t + i \sin \omega t$, pravděpodobnost $P_{,x}(\vartheta) = \frac{1}{2} (1 + \sin^2 \omega t)$, podobně $P_{,y}(\vartheta) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2 \omega t \right)$.

6.3 a) Situace je analogická příkladu 6.1, $C_+(\vartheta) = \cos \omega t, C_-(\vartheta) = i \sin \omega t, \omega = A/\hbar, P = \cos^2 \omega t$;

$$b) \quad C_1(\vartheta) = C_2(\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t}, \text{ energie } E_1 = -A$$

$$C'_1(\vartheta) = -C'_2(\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t}, \text{ energie } E_2 = A;$$

c) Je-li φ úhel, který svírá tento směr z' s osou z bude $C_{,z}(\vartheta) = \cos(\omega t + \varphi/2), C_{,z}(\vartheta) = i \sin(\omega t + \varphi/2)$ tedy $\dot{\varphi} = -2\omega t$;

d) Částice se spinem $1/2$ v magnetickém poli rovnoběžném s osou x .

KAPITOLA 7

7.1 Pro pravděpodobnost indukované emise a pravděpodobnost absorpce mezi dvěma hladinami platí $P_{21} = P_{12}$, a vztah k Einsteinovým koeficientům B_{21}, B_{12} je dán jako $P_{12} = B_{12} I(\omega_0) T$ - viz (7.55). Einsteinův koeficient A spontánní emise za jednotku času zavedený v kap. 42 dílu 1 můžeme odvodit i pomocí kvantové mechanických amplitud. Čtverec této amplitudy pro přechod $1 \rightarrow 2$ s pohlcením jednoho fotonu odpovídá $|C|^2 = B_{12} \hbar \omega / V$. Zpětný přechod s vyzářením fotonu za jednotku času dostaneme vynásobením amplitudy počtem stavů fotonu - viz (2.42). Máme $P_{21} = |C|^2 \frac{V \omega^2 \Delta \omega}{\pi^2 c^2} = A \Delta \omega$, odkud plyne $A = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^2} B_{12}$. Intenzita spontánní emise je $\Delta I = \hbar \omega \frac{c}{V} A \Delta \omega$.

7.2 Sestavíme Hamiltonovu matici a budeme řešit rovnice pro časové změny amplitud; použijeme přitom tabulku 4.1. Rezonance nastane při $\omega = \omega_0 \cos \vartheta$, hledaná pravděpodobnost je $P_{\text{dolů}}(\vartheta) = \sin^2 \gamma t$, kde $\gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2 - 2 \omega \omega_0 \cos \vartheta}, \omega_0 = 2 \mu B/h$.

KAPITOLA 8

8.1 Osu znamíříme proti magnetickému poli B_0 , osu x ve směru B_x , takže $B_x = 2 B_0 \cos \omega t, B_y = -B_0, B_z = 0$. Rovnice pro časovou změnu amplitud spinových stavů (8.23) budou totožné s rovnicemi (7.38) a (7.39). Řešíme-li je s počátečními podmínkami $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$, dostaneme hledanou pravděpodobnost $P = \left(\frac{\omega_n}{2\alpha} \right)^2 \sin^2 \alpha T$, kde $\alpha = \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_n^2}, \omega_n = 2 \mu B_n/h$. Při rezonanci $\omega = \omega_0 = 2 \mu B_0/h, P = \sin^2 \omega_n T/2$.

KAPITOLA 9

9.1 Musíme dokázat, že Pauliho matice se při otočení soustavy souřadnic transformují jako složky vektoru. Využijeme toho, že Hamiltonova matice se přitom nemění. Součin $T_x T_y T_z = i \begin{pmatrix} 10 \\ 01 \end{pmatrix}$.

- 9.2 a) Použijeme rovnici (9.62) a za bázové stavy vybereme ty, v nichž elektron je u prvního kyslíku, u uhlíku a u druhého kyslíku s energiemi $H_{11} = H_{33} = E_O$, $H_{22} = E_C$. Dále označíme $H_{12} = H_{32} = h$, $H_{21} = H_{23} = h^*$. Řešením determinantové rovnice dostaneme $E_{1,2} = \frac{1}{2}(E_O + E_C) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_O - E_C)^2 + 2|h|^2}$, $E_3 = E_O$.
- b) Pro $E_O = E_C = E_0$ máme $E_{1,2} = E_0 \pm \sqrt{2}|h|$ a amplitudy bázových stavů jsou $C_1 = C_3 = 1/2$, $C_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha}$ (kde $h = |h| e^{i\alpha}$) a dále $E_3 = E_0$, $C_1 = -C_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $C_2 = 0$.
- 9.3 Sestavíme Hamiltonovu matici s uvážením symetrie molekuly, $H_{11} = H_{22} = H_{33} = H_{44} = E_0$, $H_{12} = H_{21} = H_{13} = H_{31} = h$. Řešením determinantové rovnice (9.62) dostaneme $E_1 = E_2 = E_3 = E_0 - h$, $E_4 = E_0 + 3h$.
- 9.4 Sestavíme Hamiltonovu matici, označíme diagonální prvky jako E_0 a nenulové mediagonální prvky jako $-A$. Pro energie šesti stacionárních stavů platí $E_I = E_0 - 2A \cos\left[\frac{\pi}{3}(I-1)\right]$, $\delta = \frac{2\pi}{6}(I-1)$, $I = 1, \dots, 6$. Vzdálenosti mezi hladinami jsou rovny A .
- 9.5 a) Z determinantové rovnice určíme energie $E_{1,2} = E_0 + A$, $E_3 = E_0 - 2A$.
b) První dvě hladiny se rozštěpí na vzdálenost $(1/3)|\epsilon A|$ a vzdálenost mezi první a třetí hladinou se změní na $|3A - (2/3)\epsilon A|$.

KAPITOLA 10

- 10.1 Vyjdeme ze vztahů (10.37) a (10.38) Ve slabém magnetickém poli jsou frekvence přechodů $f_{1,2} = f_0 \pm \frac{\mu B}{2\pi\hbar}$, $f_3 = f_0 = 1420$ MHz, v silném magnetickém poli $f_1 = \frac{1}{2}f_0 + \frac{|\mu_e|B}{\pi\hbar}$, $f_2 = \frac{1}{2}f_0 + \frac{\mu_p B}{\pi\hbar}$, $f_3 = \frac{\mu' B}{\pi\hbar}$, $\mu' = \mu_p - \mu_e > 0$.

KAPITOLA 11

- 11.1 V tomto a následujících příkladech napíšeme rovnice pro amplitudy přítomnosti elektronu u některého z atomů, dosadíme řešení v podobě stacionárních stavů $C_n = a_n e^{-iE_n t/\hbar}$ a řešíme soustavu lineárních rovnic pro a_n . Podmínka řešitelnosti nám dá vztah pro určení hodnot energie. $E_{1,2} = \frac{1}{2}[E_i \pm E_j + \sqrt{(E_i - E_j)^2 + 16B^2 \cos^2 kb}] - 2A \cos kb$, kde k je libovolná konstanta. V limitních případech $E_{1,2} = E_{i,j} - 2A \cos kb$, $E_{1,2} = (1/2)(E_i + E_j) - 2(A \mp B) \cos kb$.
- 11.2 Hledáme amplitudy ve tvaru $C_n^{(a)} = \alpha \exp[i(kx_n^{(a)} - E\nu\hbar)]$, $C_n^{(b)} = \beta \exp[i(kx_n^{(b)} - E\nu\hbar)]$, dostaneme $E = E_0 \pm \sqrt{(\Delta E)^2 + (2A \cos k a)^2}$, omezení $0 < k < \pi/2c$.
- 11.3 Postupujeme podobně jako ve stati 11.6 $\beta = \frac{(A^2 - B^2) \cos kb}{(B^2 - A^2) \cos kb + iB^2 \sin kb}$, $\gamma = \beta + 1$.
- 11.4 Bez komentáře.
- 11.5 a) Standardním postupem odvodíme soustavu rovnic pro energie vlevo a vpravo od dělicí čáry. Dostaneme jednak $E_0 - 2A \cos kb = E_0' - 2A' \cos k'b$, a dále podmínku pro γ a β , kterou máme dokázat.
b) $\beta = -\frac{AA' e^{ikb} - B^2 e^{ik'b}}{AA' e^{-ikb} - B^2 e^{-ik'b}}$, úplný odraz pro $|E_0 - E_0'| \geq 2(|A| + |A'|)$ Grupové rychlosti $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{b}{\hbar} 2A \sin kb$, a podobně pro čárkované veličiny. Použijeme výsledek a) a b). Koeficienty γ a β jsou úměrné hustotě toku částic v_g/b .

KAPITOLA 12

- 12.1 Řešení rovnice bez komentáře. Pohlcovaný výkon $P = q \text{Re } v_x \text{Re } E_x$, kde $\text{Re } E_x = E_0 \cos \omega t$ a $\text{Re } v_x$ dostaneme z odvozeného vztahu pro v_x/E_x . Vystředujeme-li výkon za periodu, dostaneme $\langle P \rangle = \frac{1}{2} q E_0^2 \text{Re}(v_x/E_x)$. Pro $\omega_e \tau \gg 1$ $\text{Re}\left(\frac{v_x}{E_x}\right) = \frac{1}{1 + (\omega - \omega_e)^2 \tau^2} \frac{q\tau}{2m^*}$ a rezonance nastává na $\omega = \omega_e$, pološířka rezonanční křivky je $2/\tau$. Z těchto údajů lze určit m^* a τ . Kdyby $\omega_e \tau \ll 1$, pohyb elektronů mezi srážkami by nebyl periodický.
- 12.2 Je-li koncentrace děr v oblasti N a P n_N , n_p a U_0 je rozdíl potenciálů mezi těmito oblastmi v rovnováze, bude děrový proud $I_d = I_g - I_r = I_p \left(\frac{n_N}{n_p} e^{qU_0/kT} e^{qU/kT} - 1 \right)$, $n_N/n_p = e^{qU_0/kT}$, takže $I_d = I_p (e^{qU/kT} - 1)$. Pro celkový proud nahradíme I_p soumou $I_p + I_r$.

KAPITOLA 13

- 13.1 Řešením determinantové rovnice pro stacionární stavy dostaneme $E_s = E_0 - 2A \cos(\pi s/5)$, $s = 1, 2, 3, 4$, $\cos \frac{\pi}{5} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}}$, $\cos \frac{2\pi}{5} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 - \sqrt{5}}{2}}$. Vzhledem k přítomnosti dvojnásobné vazby jde o přechod $E_3 - E_2$, a tomu odpovídá $\lambda = 10^{-10}$ cm. Řešíme-li rovnice pro amplitudy, dostaneme normované amplitudy pravděpodobnosti $a_n^{(j)} = a^{(j)} \sin \frac{\pi s n}{5}$ (např. $a_1^{(1)} = a^{(1)} = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{5}}}$, $a_2^{(1)} = a_3^{(1)} = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{5}}}$, atd.) a pro pravděpodobnosti výskytu elektronů v ionizované molekule $P_n = 2|a_n^{(1)}|^2 + |a_n^{(2)}|^2$. Po dosazení $P_1 = P_4 = 0,638$, $P_2 = P_3 = 0,861$, tj. u krajních uhlíků 0,64, u středních 0,86.

- 13.2 Podle (13.28) energie základního stavu u benzenu $E_a = 6E_0 - 8A$. U roztržené molekuly benzenu použijeme (13.25) a dostaneme energii základního stavu $E_b = 6E_0 - 4A \left(\cos \frac{\pi}{7} + \cos \frac{2\pi}{7} + \cos \frac{3\pi}{7} \right)$ (na třech základních hladinách jsou vždy 2 elektrony). Určíme-li A z dané vlnové délky (odpovídá změně energie o $2A$), najdeme $E_b - E_a = 3,1 \text{ eV}$.
- 13.3 Můžeme použít představu magnonech (stať 13.1) s efektivní hmotností (13.14) s efektivním spinem rovným 1. Odtud plyne výraz pro střední počet magnonů (jsou to bosony). Magnetizace M je magnetický moment připadající na jednotku objemu, tj. $M = \frac{\mu}{V}(N_+ - N_-) = \frac{\mu}{V}(N - 2N_-)$, kde N_+ a N_- je počet atomů se spiny mřícími nahoru a dolů, $N = N_+ + N_- = V/b^3$. Proto $M = \frac{\mu}{b^3} \left(1 - 2b^3 \int \frac{d^3 k / (2\pi)^3}{e^{E_k/k_B T} - 1} \right)$. Při nízkých teplotách $E_k = Ab^2 k^2$. Označíme $x = \sqrt{A/k_B T} bk$, integrujeme přes úhlové proměnné, označíme $M_1 = \mu/b^3$ a dostaneme požadovaný vztah. Rozklad do řady vede na hodnotu Riemannovy ζ funkce $\zeta(3/2) = 2,612$. Výsledek $M/M_1 = 1 - 5,224 (k_B T / 4\pi A)^{3/2}$.

KAPITOLA 14

- 14.1 a) Plyne z podmínky na řešení Schrödingerovy rovnice, částice se nemůže nacházet v oblasti s nekonečně velkým potenciálem.
 b) $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, $\mu_0(x) = A \sin \frac{\pi x}{a}$, $0 \leq x \leq a$
 c) $E_1 - E_0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$
 d) $dW(\rho) = 2A^2 a^2 \pi \hbar^3 \frac{\cos^2(\rho a/2\hbar)}{\pi^2 \hbar^2 - \rho^2 a^2} d\rho$.
- 14.2 a) Hodnoty energie udává vztah $k \cot ka = -\kappa$, kde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$. Hledaná hodnota $U_0 = 400 \hbar^2/2ma^2$.
 b) Uvážíme-li, že v prvním vybuzeném stavu musí vlnová funkce procházet uvnitř jámy nulou (při $x=0$) a vezmeme-li v úvahu výsledek příkladu 14.1, 14.2a a podmínku kladenou na U_0 , dostaneme $E_1 = 1,1 \pi^2 \hbar^2/2ma^2$.
- 14.3 Uvedené okrajové podmínky odpovídají sudým a lichým vlnovým funkcím. Tyto transcendentní rovnice můžeme řešit graficky hledáním průsečíku křivek $y = -x \cot \gamma$, $y = -x \tan x$, a kružnice $x^2 + y^2 = 2mU_0 a^2/\hbar^2$, kde $x = \alpha a$, $\gamma = \beta a$. Pro daný potenciál $E_0 = \pi^2 \hbar^2/18ma^2$, $E_1 = 3,6 \hbar^2/2ma^2$. Bude existovat pouze jeden vázaný stav.
- 14.4 Dosazením ϕ do Schrödingerovy rovnice dostaneme $\frac{d\alpha}{dt} = \frac{2\hbar}{im} a^2$, $\frac{d\epsilon}{dt} = \frac{i\hbar}{m} a$. Odtud integrací plyne jednak vztah, který máme dokázat, jednak $c(t) = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{2\hbar a_0 t}{m} \right)^2 \right] + \frac{i}{2} \arctg \left(\frac{2\hbar a_0 t}{m} \right)$. Šířka oblasti lokalizace se mění s časem jako $\sigma = \sigma_0 \sqrt{1 + (2\hbar a_0 t/m)^2}$, pro elektron vzroste zasekunduz 0,1 nm na 2300 km. V impulzové reprezentaci $\phi(\rho, t) = K \frac{1}{\sqrt{2\hbar a}} \exp \left(-\frac{\rho^2}{4\hbar^2} a - c \right)$. Neurčitost hybnosti zůstává v čase konstantní.

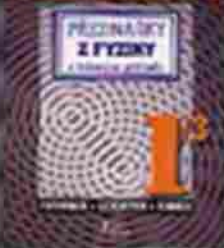
KAPITOLA 16

- 16.1 Pravotočivý foton může být vyslán jen atomem ve stavu s projekcí spinu na daný směr $m' = +1$. Proto $A(\vartheta) = \text{konst} (+1) |R_1(\vartheta)| = \text{konst} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta$.
- 16.2 a) Všechny kromě 2 a 8.
 b) $P_x(\vartheta) = |a|^2 |(-1/2)R_1(\vartheta)R_1(\vartheta) + 1/2|^2 = (1/2) |a|^2 (1 - \cos \vartheta)$, $P_y(\vartheta) = |b|^2 (1 + \cos \vartheta)$
 c) $P(\vartheta) = (1/2) (|a|^2 + |b|^2 + (|b|^2 - |a|^2) \cos \vartheta)$
 d) Procesy s amplitudou a a b jsou zrcadlově symetrické, izotropní rozdělení $|a| = |b|$ plyne ze zákona zachování parity.
- 16.3 Ve výchozím stavu pravotočivý foton přispívá projekcí +1, proton $\pm 1/2$, v konečném stavu máme jen projekci momentu protonu zpětného rázu. Použijeme (16.25) a tabulku 16.2. Sestavíme amplitudy pro vznik pionu při srážce fotonu s protonem. Označíme μ' projekci spinu protonu do směru jeho pohybu po srážce, μ projekci spinu protonu do směru zpřed srážkou.
 Pro $\mu = \frac{1}{2}$, $\mu' = \frac{1}{2}$ máme $C_1 = fa \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2} |R_1(\vartheta)R_1(\vartheta)|, \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right) = af \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \vartheta \cos \frac{\vartheta}{2} e^{3i\varphi/2}$,
 pro $\mu = \frac{1}{2}$, $\mu' = -\frac{1}{2}$ máme $C_2 = ag \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \vartheta \sin \frac{\vartheta}{2} e^{3i\varphi/2}$,
 pro $\mu = -\frac{1}{2}$, $\mu' = \frac{1}{2}$ máme $C_3 = bf \frac{1}{2} (3 \cos \vartheta - 1) \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi/2}$,
 pro $\mu = -\frac{1}{2}$, $\mu' = -\frac{1}{2}$ máme $C_4 = -bg \frac{1}{2} (3 \cos \vartheta + 1) \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi/2}$.
 Odtud při $f=g$, $P(\vartheta) = \frac{1}{8} |f|^2 [3|a|^2 \sin^2 \vartheta + |b|^2 (3 \cos^2 \vartheta + 1)]$.
- 16.4 Postupujeme podobně jako v pf. 16.3.
- 16.5 Úhlové rozdělení kruhově polarizovaných fotonů nezávisí na paritě vybuzeného stavu. Pro lineárně polarizované fotony máme v případě sudé parity $P_x(\vartheta) = \frac{1}{2} |a'|^2$, $P_y(\vartheta) = \frac{1}{2} |a'|^2 \cos^2 \vartheta$, v případě liché parity $P_x(\vartheta) = \frac{1}{2} |a'|^2 \cos^2 \vartheta$, $P_y(\vartheta) = \frac{1}{2} |a'|^2$, kde aa' jsou příslušné amplitudy. Paritu vybuzeného stavu tak můžeme určit. Osa x' leží v rovině směru spinu vybuzeného stavu a směru pohybu fotonu, osa y' je k ní kolmá.

REJSTŘÍK VYBRANÝCH POJMŮ A JMEN

- A**
absolutně černé těleso 39
amplituda pravděpodobnosti 12
- B**
Bardeen 411
baryonové číslo 190
bázové stavy 60
benzen 162
Bohr 296
Bohrův poloměr 360
Born 11, 410
Boseho částice 30
- C**
Clebschův-Gordonův koeficient 346
Cooper 411
- D**
Deaver 417
de Broglie 99
Dirac 11, 12, 113, 292, 297
díry 238
Doll 417
- E**
Einstein 39
entropie 95
Eulerovy úhly 88
exciton 238
- F**
Fairbank 417
Fermiho částice 30
fuchsín 165
- G**
Gell-Mann 189
- H**
Hallův jev 254
Hamilton 122
Hamiltonova matice 122
Hamiltonový operátor 181
Heisenberg 402
Heisenbergův princip neurčitosti 291
hermitovský operátor 395
hyperjemné rozštěpení 205
- CH**
chemická vazba 47
- I**
identické částice 12, 29
- J**
Jensen 280
Josephson 420
Josephsonův přechod 420
- K**
klidová energie 95
komutační pravidlo 399
- L**
laser 145
London 414
- M**
magická čísla 280
magnony 267
maser 129
Mayerová 280
Meissner 413
Meissnerův jev 414
mezon 157
- N**
Nabauer 417
Nishijima 189
- O**
operátor parity 310
operátor 116, 181, 393
- P**
Pais 189
paradox Einsteina, Podolského
a Rosena 336
parita 310
Pauli 31
Pauliho matice 176
podivnost 189
polarizace 185
polarizovatelnost molekuly 139
polovodiče 246
pozitronium 331
- R**
reprezentace 117
- S**
Schrieffer 411
Schrödinger 11, 286, 296, 402
Schrödingerova rovnice 11, 15, 286, 296
Sharpíro 423
silné interakce 189
slabé interakce 189
slupkové struktury jádra 280
spektrum absolutně černého tělesa 44
spinové vlny 267
stacionární stav 96
stav excitovaný 39
stav základní 39
stavový vektor 112
Stemův-Geřlachův experiment 52
supravodivost 411
- T**
transformační matice 68
tunelový jev 104
- V**
vlnová funkce 287
vodivostní pás 247
vylučovací princip 46
výměnný operátor 213
- Y**
Yukawa 157
Yukawův potenciál 158
- Z**
zachování parity 311
zákon zachování podivnosti 189
Zeemanův jev 219

FEYNMANOVY FEYNMANOVY FEYNMANOVY



Kompletní vydání světově
proslulého kurzu fyziky
Richarda P. Feynmana.

- | | | | |
|----|--------------------------------------|----|--|
| 1 | AMPLITUDY PRAVDĚPODOBŇNOSTI | 12 | POLOVODIČE |
| 2 | IDENTICKÉ ČÁSTICE | 13 | PŘIBLIŽENÍ NEZÁVISLÝCH ČÁSTIC |
| 3 | SPIN JEDNA | 14 | ZÁVISLOST AMPLITUD NA POLOZE |
| 4 | SPIN 1/2 | 15 | SYMETRIE A ZÁKONY ZACHOVÁNÍ |
| 5 | ZÁVISLOST AMPLITUD NA ČASE | 16 | MOMENT HYBNOSTI |
| 6 | HAMILTONOVA MATICE | 17 | ATOM VODÍKU A PERIODICKÁ SOUSTAVA PRVKŮ |
| 7 | AMONIÁKOVÝ MASER | 18 | OPERÁTORY |
| 8 | JINÉ DVOJHLADINOVÉ SOUSTAVY | 19 | SCHRÖDINGEROVA ROVNICE V KLASICKÉM KONTEXTU. |
| 9 | DALŠÍ DVOJHLADINOVÉ SOUSTAVY | | SEMINÁŘ O SUPRAVODIVOSTI |
| 10 | HYPERJEVNÉ ROZŠTĚPENÍ V ATOMU VODÍKU | | |
| 11 | POHYB ELEKTRO | | |

ISBN 80-7200-421-2



9 788072 400421 >