

Úvod do kvantové teorie_I.

Přednášející:

RNDr. František Adamec, CSc.

Ústav fyziky a biofyziky JČU v Českých Budějovicích



Připraveno s využitím následujících učebnic:

1. Lubomír Skála, Úvod do kvantové mechaniky, Academia 2005.
2. P. Atkins, R. Friedman: Molecular quantum mechanics Fourth edition, Oxford university press 2007.
3. Feynman, Leighton, Sands: Feynmanovy přednášky z fyziky, Fragment 2000.
4. R. Penrose: Makrosvět, mikrosvět a lidská mysl, Edice Kolumbus 1997.
5. T. Hey, P. Walters: Nový kvantový vesmír, argo/dokořán 2003.

Záření černého tělesa.

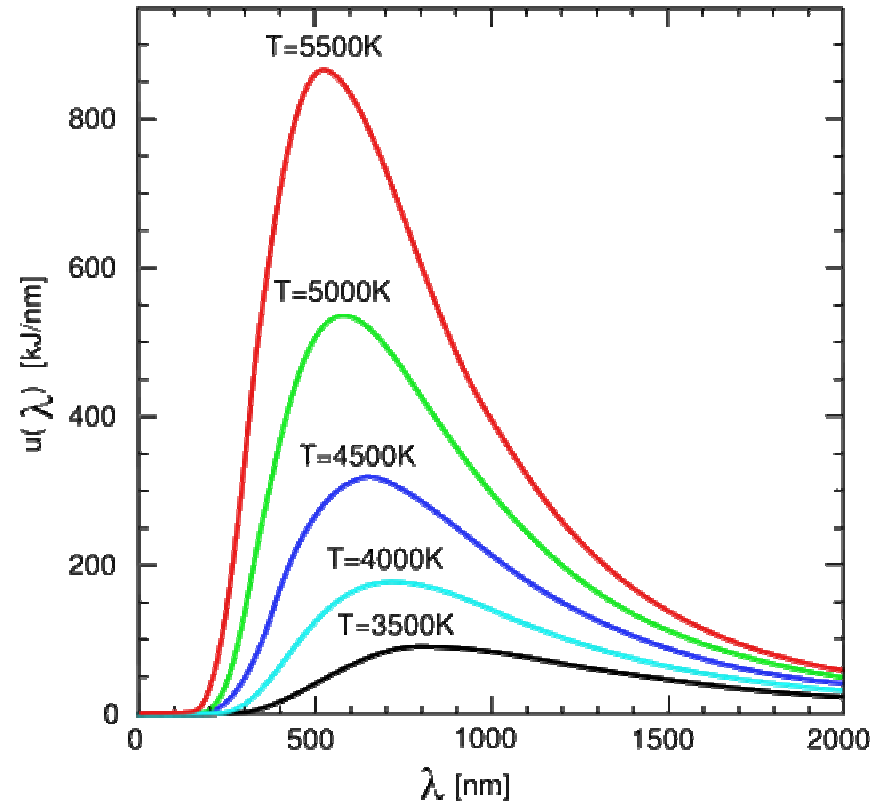


Plankův zákon [Max Planck (1900)]:

$$u(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right)} - 1}$$

Wienův posunový zákon [Wilhelm Wien (1893)]:

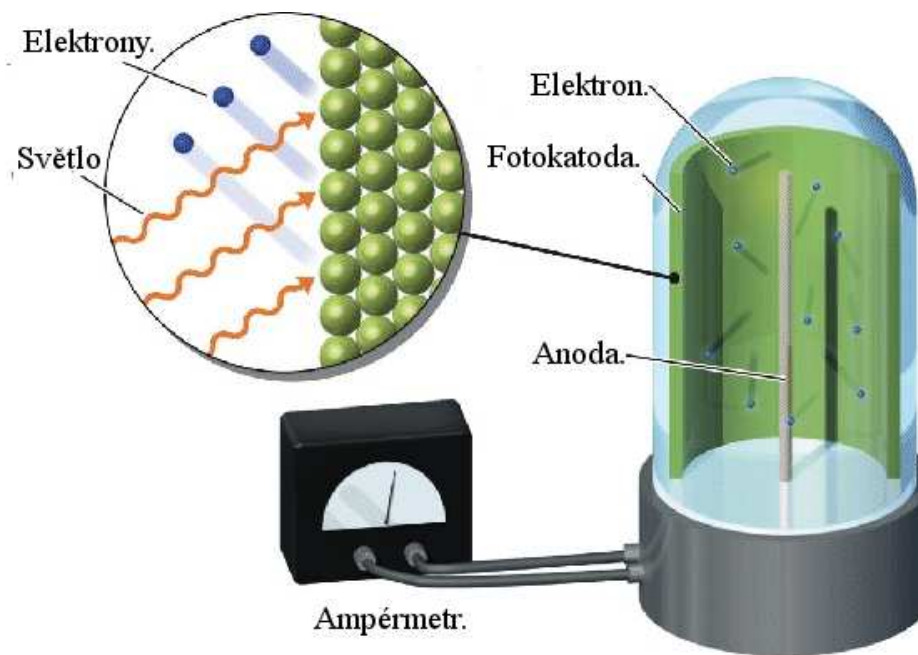
$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}, \quad b = 2,8977685(51) \times 10^{-3} \text{ mK}$$



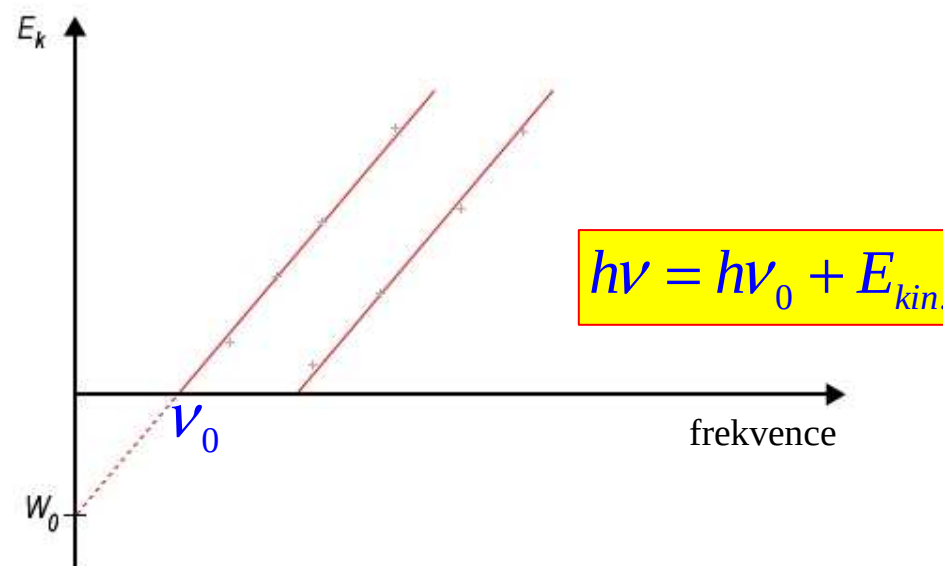


Philipp Lenard (1900).

Fotoelektrický jev.



Albert Einstein (1905).





Emisní spektra atomů.

Niels Bohr navrhl model atomu (1913), na jehož základě se podařilo vysvětlit strukturu emisní spekter vodíku. Energie elektronů se při elektronových přechodech v atomu může měnit pouze o konečné celočíselné hodnoty.

Povolené energie elektronu v Bohrově modelu atomu jsou dány vztahem:

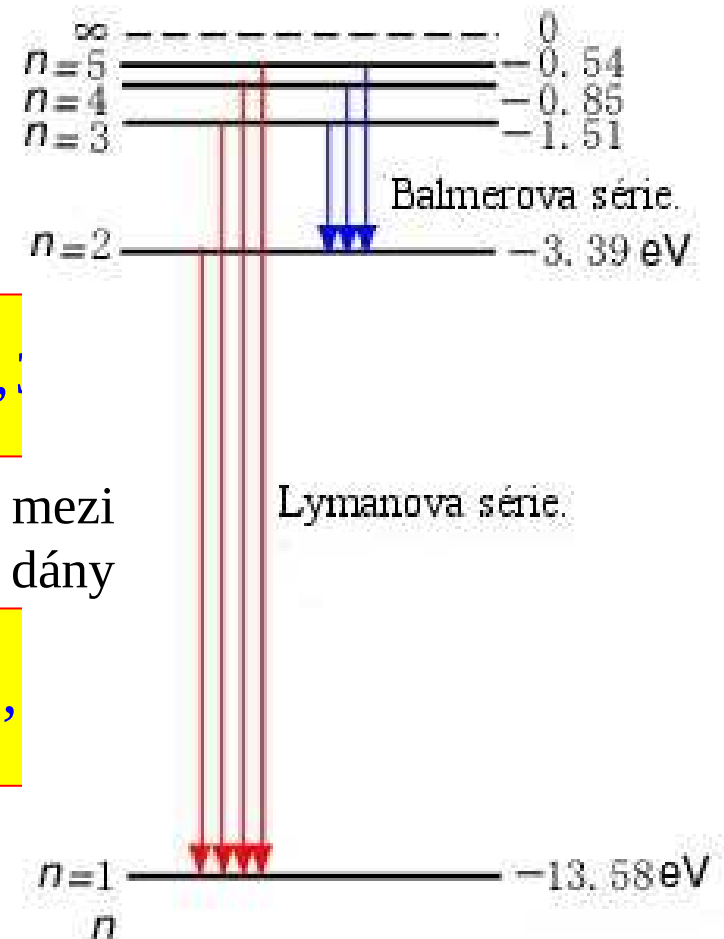
$$E_n = -Ry \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Frekvence fotonů odpovídající přechodům mezi atomárními hladinami jsou v atomu vodíku dány vztahem:

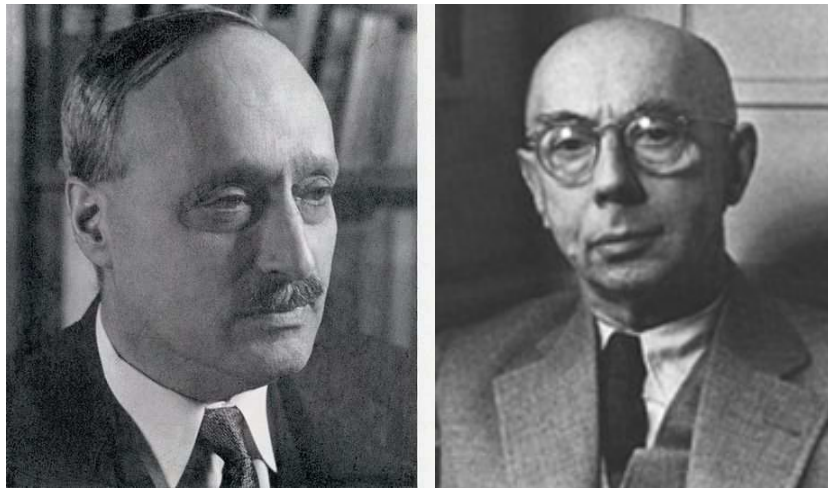
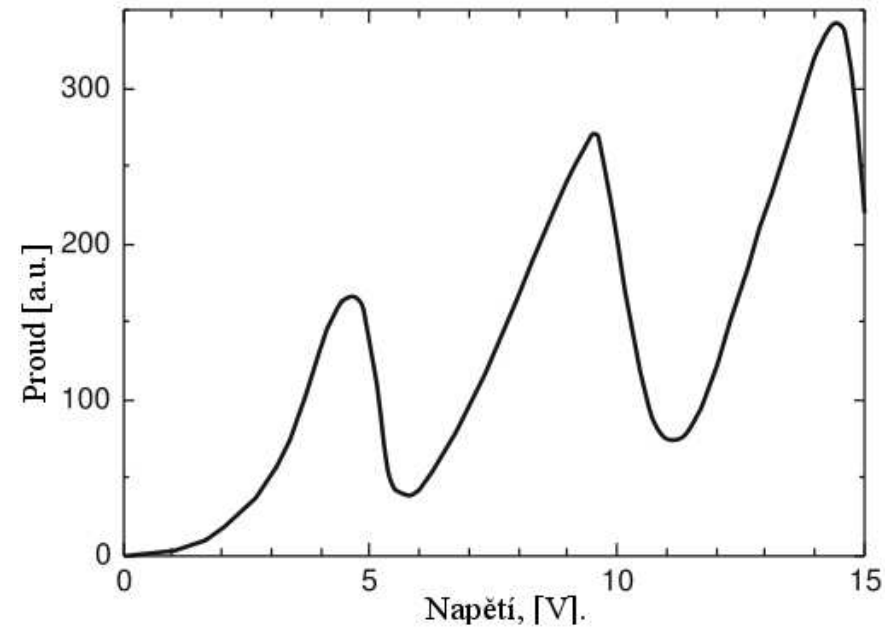
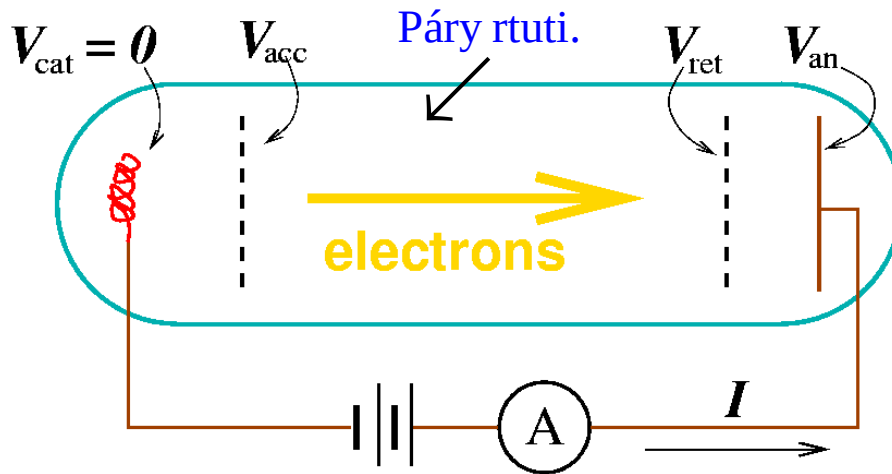
$$\nu_{mn} = cR \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Rydbergova konstanta:

$$Ry \approx 2,1799 \times 10^{-18} \text{ J} = 13,605 \text{ eV}$$



Franck-Hertz experiment.



James Franck a Gustav Ludwig Hertz, (1912-14).

Experiment podpořil Bohrův model atomu, prokázal, že atomy mohou energii pohlcovat pouze po kvantech.

Vlnově částicová dualita.

Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že volnému pohybu částic lze připsat vlnovou délku λ nebo vlnový vektor $\mathbf{k}$ určený jednoznačně hybností částice $\mathbf{p}$ vztahy:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$|\vec{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Energie E pohybující se částice je dána Plankovým vztahem:

$$E = \hbar \omega$$



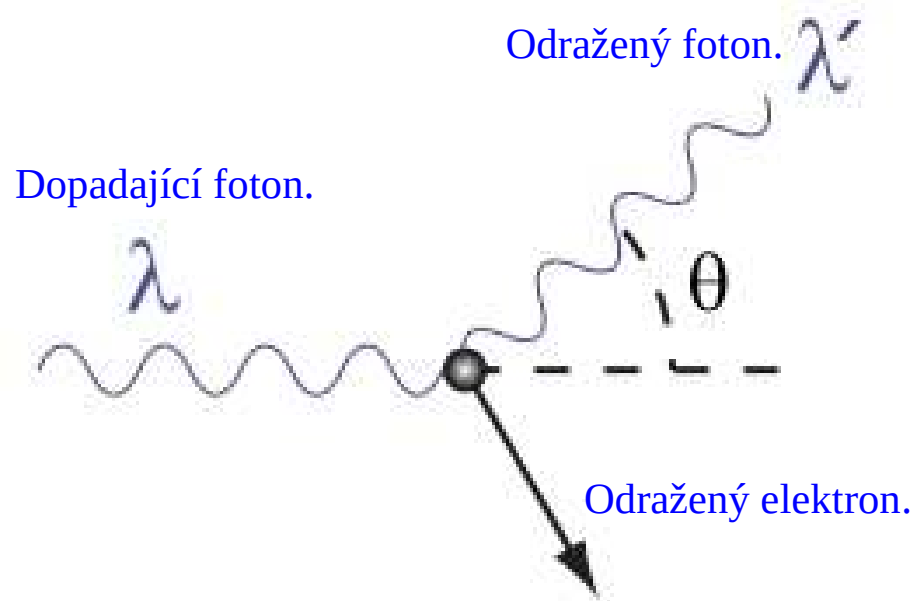
Louis-Victor-Pierre-Raymond,
7th duc de Broglie (1925)

Comptonův rozptyl.

Nep pružný rozptyl X záření na elektronu, podobně jako v případě srážky dvou hmotných těles. Foton po odražení od elektronu má kratší vlnovou délku než dopadající foton.



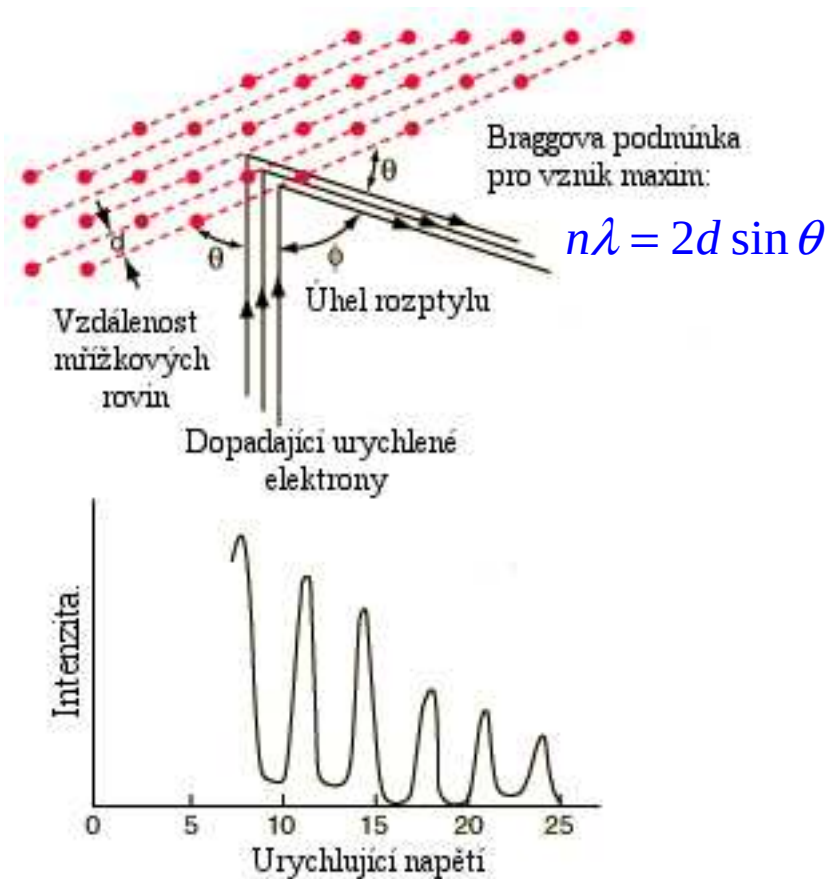
Arthur Holly Compton (1923)



$$\delta\lambda = (\lambda' - \lambda) = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Davisson–Germer experiment.

- Braggovská difrakce elektronového svazku na krystalu niklu. Elektronů jsou na periodické struktuře krystalu niklu difraktovány podobně jako fotony X záření.
- Potvrzení de Broglieho hypotézy (vlnově částicový dualizmus).



Clinton Davisson a Lester Germer (1927).

Problém měření.

Kvantová úroveň

Unitární evoluce systému – lineárnost superpozice stavů se vyvíjí jako superpozice stavů vyvíjejících se individuálně s konstantními komplexními váhami,
Schrödingerova rovnice, **Determinismus**



Proces měření

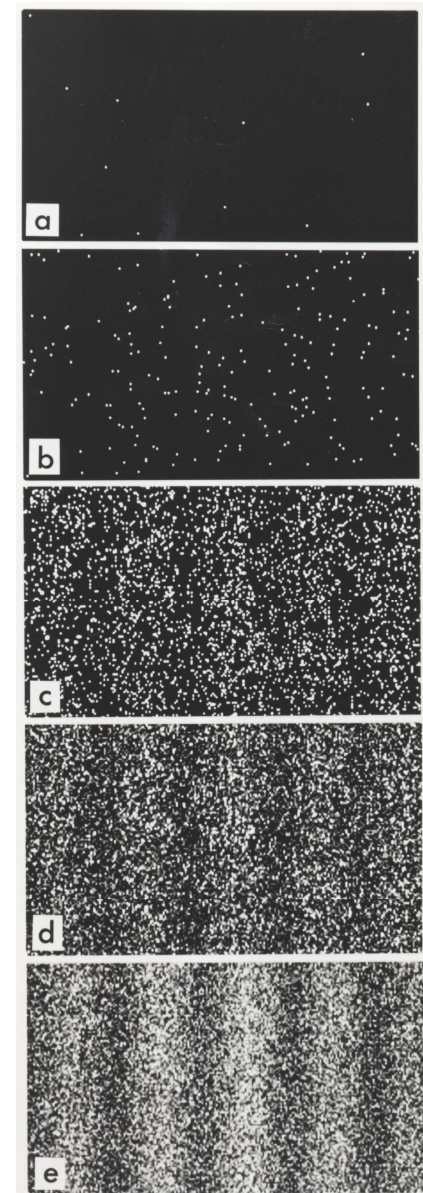
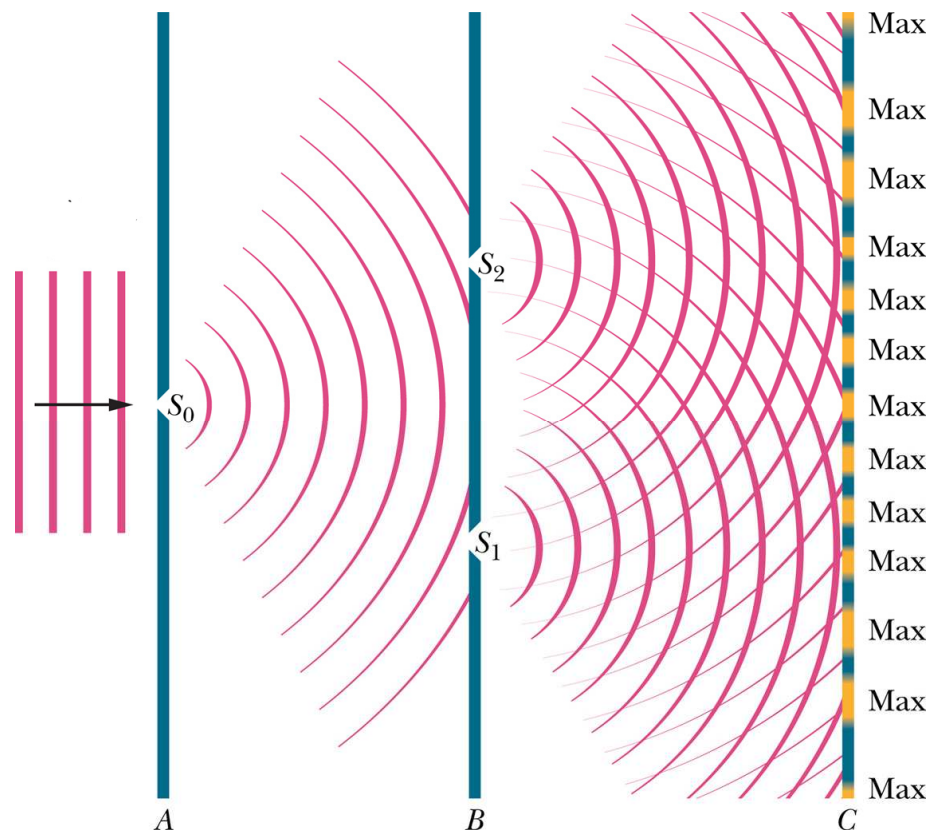
redukce stavového vektoru
teorie pravděpodobnosti

Klasická úroveň

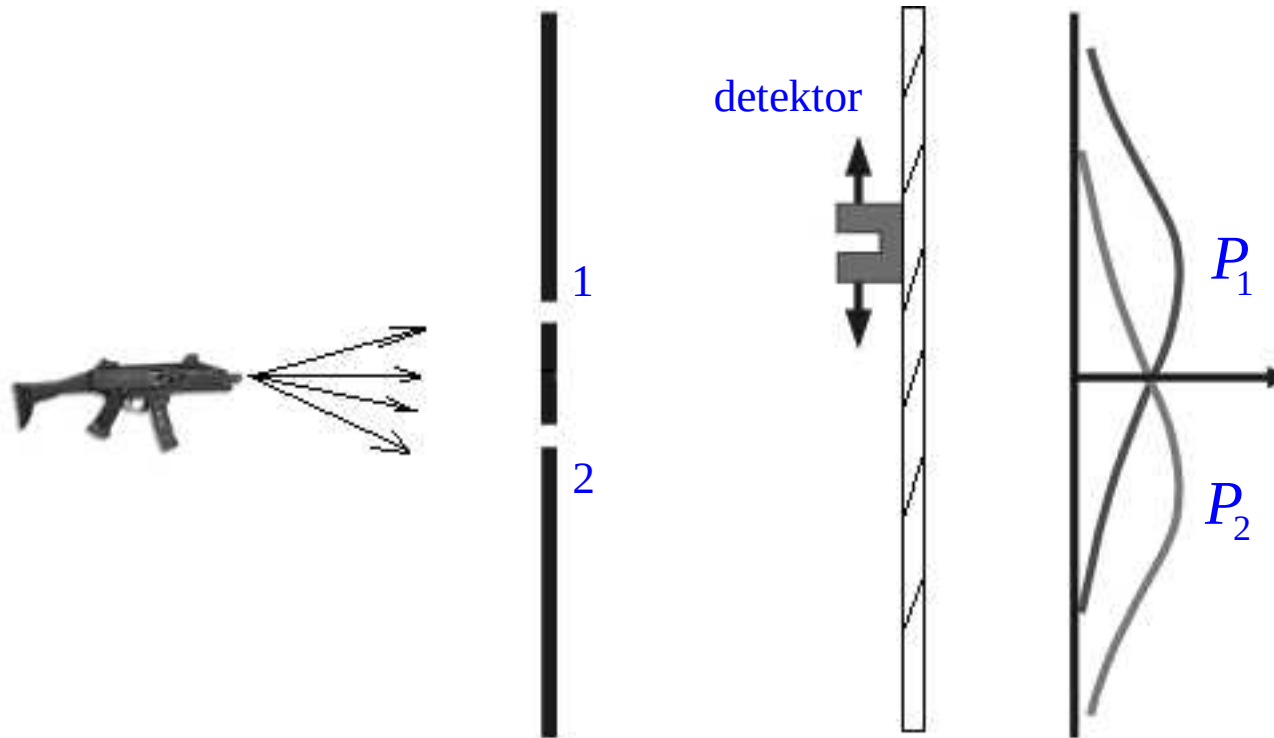
Newton, Maxwell, Einstein, determinismus

Dvou-štěrbinový experiment s fotony.

Youngův dvou-štěrbinový interferenční experiment.

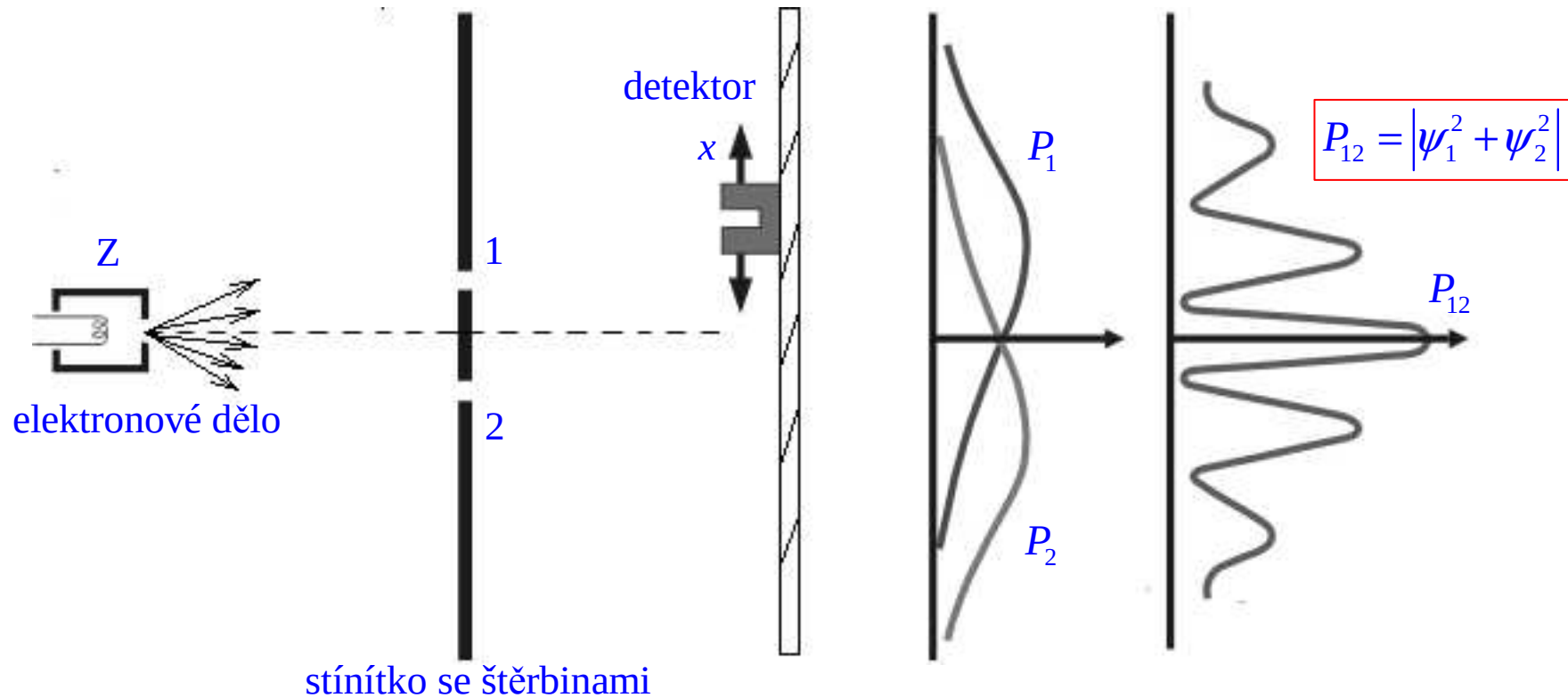


Dvou-štěrbinový experiment se střelami.



P_i $i = 1, 2$ rozdělení pravděpodobnosti dopadu střely po průchodu šterbinami 1 nebo 2.

Dvou-štěrbinový experiment s elektrony.

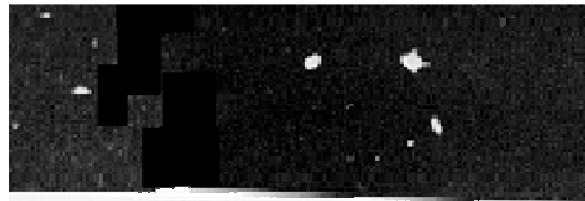


P_1 a P_2 rozdělení pravděpodobnosti dopadu elektronu po průchodu štěrbínami 1 nebo 2 při zakrytí druhé štěrbiny.

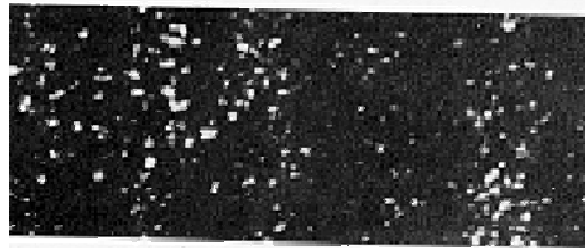
P_{12} rozdělení pravděpodobnosti dopadu elektronu při otevřených obou štěrbínách

ψ_1 , ψ_2 - amplitudy pravděpodobnosti průchodu elektronu štěrbínami 1 a 2.

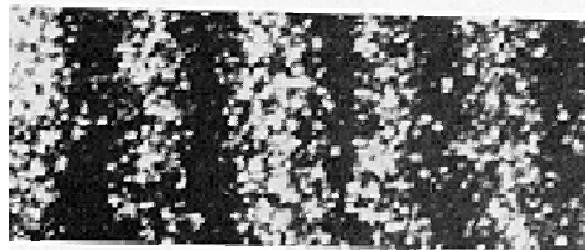
Dvou-štěrbinový experiment s elektrony, statistický charakter záznamu elektronu.



0.02s



10s

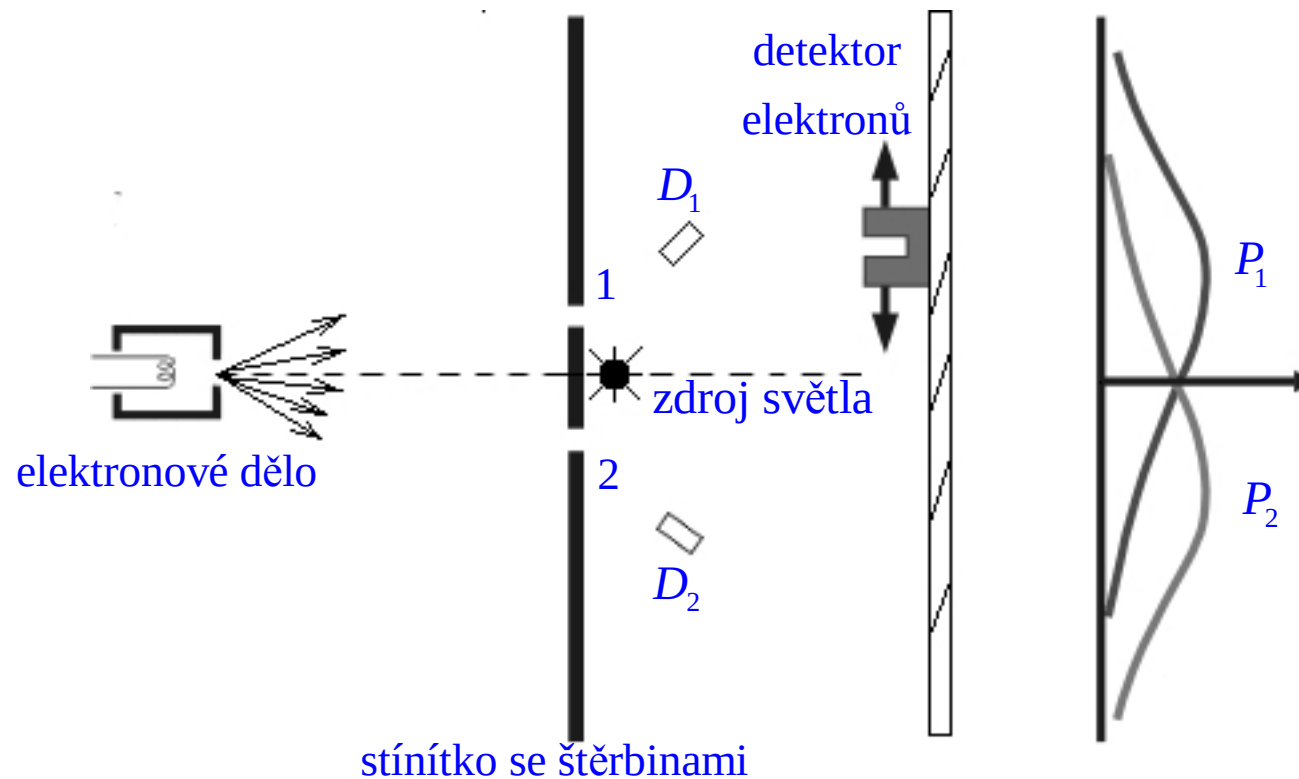


60s



120s

Experiment k určení dráhy elektronu.



P_1 a P_2 rozdělení pravděpodobnosti dopadu elektronu do detektoru elektronů po průchodu štěrbinami 1 nebo 2 rozptýlu fotonu na elektronu.

D_i $i = 1, 2$ detektory fotonů rozptýlených na elektronech procházejících štěrbinami 1 nebo 2.

Statistická interpretace vlnové funkce (amplitud pravděpodobnosti).



Max Born (1882-1970).

Na základě výsledků pokusů s difrakcí elektronů vyslovil Max Born hypotézu podle níž je intensita de Brogliových vln v daném čase a místě úměrná pravděpodobnosti výskytu částice v daném místě prostoru. Spojení vlnové funkce s pravděpodobností výskytu částice v daném místě a čase bylo potvrzeno dalším rozvojem kvantové mechaniky. Vlnová funkce je tedy pomocnou pojmem, který umožňuje získat pravděpodobnost výskytu částice (částic) v daném místě prostoru.

Výraz:

$$|\psi(\xi)|^2 d\xi = \psi^*(\xi)\psi(\xi)d\xi$$

kde $\xi = (x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots)$, $d\xi = dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \dots$

je úměrný pravděpodobnosti, že při měření najdeme hodnoty souřadnic částic v intervalu

$$(\xi, \xi + d\xi)$$



Posloupnost fotografií, z níž je zřejmé, že fotografie je kvantový proces. Počet fotonů vytvářejících tyto fotografie byl přibližně od 3000 až do 30 000 000, v případě posledního snímku.

Vlnová funkce (amplituda pravděpodobnosti).

Stav systému je plně popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)$, kde $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ jsou polohové vektory částic 1,2,.. . Vlnová funkce je pomocná veličina popisující vlastnosti atomárních objektů, je to komplexní, jednoznačná a spojitá funkce, která splňuje diferenciální rovnici – **Schrödingerovu rovnici**.

Například volný pohyb elektronu s impulsem (hybnost) $\mathbf{p}$ lze popsat vlnovou funkcí odpovídající rovinné vlně:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]}$$

kde $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \omega = \frac{E}{\hbar}$

Vlnová funkce musí splňovat princip superpozice. Může-li se systém vyskytovat ve stavech popsaných vlnovými funkcemi ψ_1 a ψ_2 , může se vyskytovat i ve stavech popsaných lineárními kombinacemi:

$$\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2$$

kde a_1 a a_2 , jsou libovolná komplexní čísla.

Vlnová funkce (amplituda pravděpodobnosti).

Princip superpozice odráží důležitou vlastnost kvantově mechanických systémů, která nemá obdobu v klasické fyzice. Uvažujme stav popsáný vlnovou funkcí

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2$$

kde:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \exp[i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega_1 t)]$$

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \exp[i(\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega_2 t)]$$

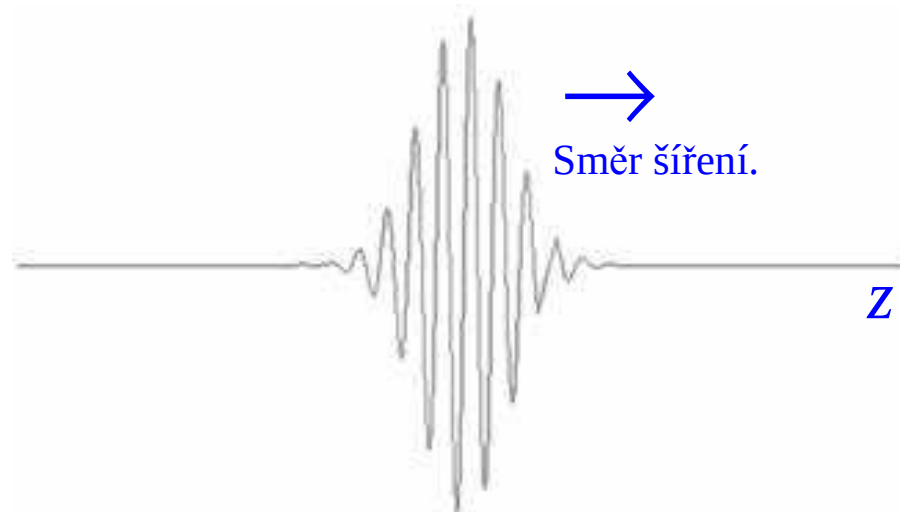
Ve stavech ψ_1 a ψ_2 , se částice pohybuje s ostrými hodnotami impulsu $\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$ a $\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2$. Ve stavu daném superpozicí uvedených stavů není pohyb částice charakterizován žádnou ostrou hodnotou impulsu, neboť tento stav se nedá uvažovat jako rovinná vlna s ostrou hodnotou impulsu. Tento stav je jistým mezistavem, který se blíží více jednomu či druhému stavu v závislosti na jeho váhovém faktoru a_i . V kvantové mechanice tedy existují stavy, které nemají ostrou hodnotu odpovídající veličiny. Vlnové funkce takových stavů lze dobře popsat vlnovým klubkem.

Vlnová funkce ve tvaru **vlnového klubka** šířícího se ve směru osy ***z***:

$$\psi(z, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) \exp[i(k \cdot r - \omega t)] dk$$

je souborem rovinných vln jejichž vlnové vektory míří ve směru osy ***z*** a mají hodnoty ležící v intervalu:

$$k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$$



Vlnová funkce (amplituda pravděpodobnosti).

Pokud integrál z $|\psi|^2$ pře všechny hodnoty souřadnic konverguje, to je pokud platí:

$$\int |\psi(\xi)|^2 d\xi = N$$

Pak můžeme zvolit vlnovou funkci téhož stavu ve tvaru $\psi' = \frac{1}{N} \psi$

Nová vlnová funkce se od původní liší pouze nenulovým komplexním činitelem a splňuje rovnici:

$$\int |\psi'(\xi)|^2 d\xi = 1$$

Tuto rovnici nazýváme **normovací podmínka**. Vlnové funkce, které ji splňují nazýváme **normované vlnové funkce**.

Veličina: $dW(\xi) = |\psi(\xi)|^2 d\xi$ určuje pravděpodobnost, že naměříme hodnoty souřadnic v intervalu $(\xi, \xi + d\xi)$.

Veličinu:

$$\rho(\xi) = \frac{dW(\xi)}{d\xi} = |\psi(\xi)|^2$$

Nazýváme **hustota pravděpodobnosti**.

Vlnová funkce (amplituda pravděpodobnosti).

Platí-li pro vlnovou funkci:

$$\int |\psi'(\xi)|^2 d\xi = \infty$$

Pak se vlnová funkce nedá normovat podle normovací podmínky a rovnice

$$\rho(\xi) = \frac{dW(\xi)}{d\xi} = |\psi(\xi)|^2$$

Není hustotou pravděpodobnosti, avšak i poměr hodnot $|\psi|^2$ pro různá ξ určuje relativní pravděpodobnost naměření odpovídajících hodnot souřadnic. Příkladem takové vlnové funkce je vlnová funkce pro volnou částici. Vlnové funkce, které nesplňují normovací podmínku lze normovat tak, že uvažujeme všechny hodnoty funkce v konečném objemu. Na okrajích pak vlnová funkce musí splňovat určité okrajové podmínky, objem je třeba volit tak velký, aby vliv okrajových podmínek na pohyb částice byl velmi malý. Zpravidla se volí okrajové podmínky tak, aby platilo:

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)$$

Vlnová funkce (amplituda pravděpodobnosti).

V čase $t = 0$ pak je normovaná vlnová funkce volné částice:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, 0) = V^{-1/2} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r})$$

Kde:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z$$

Množina všech takovýchto funkcí splňuje podmínku:

$$\int_V \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\tau = \delta_{\vec{k}' \vec{k}}$$

$$\delta_{\vec{k}' \vec{k}} = \begin{cases} 1, & \vec{k}' = \vec{k} \\ 0, & \vec{k}' \neq \vec{k} \end{cases}$$

Takto normované funkce tvoří úplný systém funkcí s ostrými hodnotami impulsu a tak lze vlnovou funkci jakéhokoliv jiného pohybového stavu vyjádřit jako lineární kombinaci těchto funkcí:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Operátory v kvantové mechanice.

Každé fyzikální veličině, jejíž hodnotu můžeme pro částici změřit je přiřazen **operátor**, který působí na vlnovou funkci částice. Operátory budeme značit stříškou nad velkým písmenem příslušného operátoru. Působí-li operátor na funkci zleva, pak tato funkce přejde v novou funkci:

$$\psi' = \hat{F}\psi$$

Střední hodnota veličiny F representovaná operátorem pro částici ve stavu ψ :

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau$$

Požadujeme, aby kvantově mechanické operátory splňovaly následující vlastnosti:

1. **Linearita operátorů:**

$$\hat{F}(c\psi) = c\hat{F}\psi$$

$$\hat{F}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{F}\psi_1 + \hat{F}\psi_2$$

2. **Hermitovské (samozdružené) operátory:**

$$\int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = \int \psi \hat{F}^* \psi^* d\tau$$

Obecně pro stavy ψ a φ :

$$\int \psi^* \hat{F} \varphi d\tau = \int \varphi \hat{F}^* \psi^* d\tau$$

Požadavek hermiticity operátoru vyplývá z toho, že měřené veličiny jsou reálná čísla, a pro jejich střední hodnoty musí platit:

$$\langle F \rangle = \langle F^* \rangle$$

Podmínka pro hermiticitu operátoru se jednoduše zapíše pomocí symbolu $+$ v horní indexu operátoru :

$$\hat{F} = \hat{F}^+$$

Součinem operátorů F a K nazýváme operátor, jehož působení na funkci se projeví jako postupné působení operátorů v příslušném pořadí:

$$\psi' = \hat{F}\hat{K}\psi = \hat{F}(\hat{K}\psi)$$

Obecně neplatí rovnost (komutativnost operátorů):

$$\hat{F}\hat{K}\psi \neq \hat{K}\hat{F}\psi$$

Podmínka pro hermiticitu součinu hermitovských operátorů:

$$\int \psi^* \hat{F}\hat{K} \varphi d\tau = \int \varphi \hat{K}^* \hat{F}^* \psi^* d\tau \quad \Rightarrow \quad (\hat{F}\hat{K}) = \hat{K}^+ \hat{F}^+ = \hat{K}\hat{F}$$

Významnou úlohu mají v kvantové fyzice **komutační relace** mezi operátory. **Komutátorem** operátorů označujeme:

$$[\hat{F}, \hat{K}] = \hat{F}\hat{K} - \hat{K}\hat{F}$$

Komutující operátory splňují pro libovolnou funkci ψ vztah:

$$[\hat{F}, \hat{K}]\psi = 0$$

Pro nekomutující hermitovské operátory platí: $[\hat{F}, \hat{K}]\psi = i\hat{M}\psi$

Užitím rovnice $\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau$ můžeme vedle středních hodnot měřitelné veličiny určit též i střední kvadratickou odchylku od střední hodnoty ve stavu ψ . Zavedeme pro odchylku od střední hodnoty $\Delta F = F - \langle F \rangle$ příslušný hermitovský operátor:

$$(\widehat{\Delta F}) = \hat{F} - \langle F \rangle$$

Pak pro střední kvadratickou odchylku píšeme:

$$\left\langle \left(\widehat{\Delta F} \right)^2 \right\rangle = \int \psi^* \left(\widehat{\Delta F} \right) \left(\widehat{\Delta F} \right) \psi d\tau$$

Z hermiticity operátoru $\left(\widehat{\Delta F} \right)$ vyplývá vztah: $\left\langle \left(\widehat{\Delta F} \right)^2 \right\rangle = \int \left| \left(\widehat{\Delta F} \right) \psi \right|^2 d\tau$

Z této rovnice vyplývá, pro stavy, v nichž má veličina F ostrou hodnotu (to je střední kvadratická odchylka rovna nule) rovnice:

$$0 = \int \left| \left(\widehat{\Delta F} \right) \psi \right|^2 d\tau \rightarrow \left(\widehat{\Delta F} \right) \psi = 0 \quad (*)$$

Rovnici přepíšeme do obvyklého tvaru: $(\hat{F} - F)\psi = 0$

Rovnice (*) je lineární homogenní rovnice pro neznámou funkci ψ . V obecném případě má rovnice pro přídatné podmínky (související s normováním) řešení pouze pro některé hodnoty veličiny F , které jsou parametry rovnice (*). Tyto parametry tvoří diskrétní řadu hodnot $F_1, F_2, \dots$ a nebo jsou spojité a leží v určitém intervalu.

Tyto význačné hodnoty nazýváme **vlastní (chrakteristické) hodnoty (čísla)** náležející příslušnému operátoru. Řešení odpovídající vlastním hodnotám nazýváme **vlastní (chrakteristické) funkce** příslušného operátoru. Jsou-li vlastní hodnoty diskrétní řadou, pak jejich množinu nazýváme **diskrétním spektrem** operátoru. Jsou –li spojité tak **spojitým spektrem**. Některé operátory mohou mít spektrum složené z diskrétních hodnot a současně též ze spojitě se měnících hodnot ležících v jistém intervalu vlastních čísel.

Abychom rozlišili vlastní funkce ψ , náležející různým vlastním hodnotám F použijeme vlastní číslo jako index odpovídající vlastní funkce ψ_F , . Má-li operátor diskrétní spektru, pak vlastní hodnoty můžeme očíslovat, $F_1, F_2, \dots F_n$, .. a jako index použít pořadové číslo vlastní hodnoty můžeme podle těchto hodnot seřadit a očíslovat:

$$\psi_{F_n} \equiv \psi_n$$

Celá čísla n , která určují vlastní hodnoty nazýváme **kvantová čísla**.

Fyzikální význam vlastních hodnot spočívá v tom, že máme-li systém popsáný vlnovou funkcí ψ , která není vlastní funkcí daného operátoru, pak množina vlastních čísel daného operátoru představuje všechny hodnoty veličiny, které při měření systému ve stavu dostaneme ψ .

V případě, kdy jedné vlastní hodnotě operátoru náleží více lineárně nezávislých vlastních funkcí (příslušná veličina má ostrou hodnotu v každém stavu popsaném těmito funkcemi) označujeme příslušný stav jako **degenerovaný stav**. Počet vlastních funkcí je pak **stupeň degenerace** stavu.

Vlastnosti vlastních funkcí operátorů s diskrétním spektrem.

Vlastní funkce operátoru F s nedegenerovaným spektrem vlastních hodnot F_n splňují rovnici:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n$$

Napišme komplexně sdruženou vlastní rovnici: $\hat{F}^*\psi_m^* = F_m\psi_m^*$

Provedením následujících úprav:

$$\begin{aligned} \psi_m^* \hat{F} \psi_n &= \psi_m^* F_n \psi_n \\ \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* &= \psi_n F_m \psi_m^* \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \psi_m^* F_n \psi_n - \psi_n F_m \psi_m^* = \psi_m^* \hat{F} \psi_n - \psi_n \hat{F}^* \psi_m^*$$

Integrací a využitím hermicity operátoru F dostaneme rovnici:

$$(F_n - F_m) = \int \psi_m^* \psi_n^* d\xi = 0$$

Je-li $m \neq n$, pak z této rovnice vyplývá ortogonalita vlastních funkcí náležejících různým vlastním hodnotám. Podmínka ortogonality takových funkcí je vyjádřena rovnicí

$$\int \psi_m^* \psi_n d\xi = 0$$

Fyzikální význam ortogonality vlastních funkcí ψ_m a ψ_n vyjadřuje to, že při měření fyzikální veličiny odpovídající operátoru F dostaneme s jistotou různé hodnoty F_n pro stav ψ_n a F_m pro stav ψ_m . Pro všechny reálné systémy se ve stavech s diskretním spektrem energie musí částice vyskytovat v omezeném prostoru, to znamená, že vlnové funkce těchto stavů musí vně oblasti rychle blížit k nule. V opačné, případě by částice mohla odletět do vzdálených míst a podobně jako volná částice nabývat libovolných hodnot energie, neexistovalo by kvantování energie. Proto je integrál

$$\int |\psi_n|^2 d\xi < \infty$$

Pro normované vlastní funkce platí podmínka ortonormality:

$$\int \psi_m^* \psi_n d\xi = \delta_{mn}$$

Vlastní funkce, které tuto podmínku splňují nazýváme ortonormální vlastní funkce.

Vlastní funkce operátoru s diskretním spektrem tvoří úplný systém funkcí, to znamená, že jakákoliv jiná vlnová funkce týchž proměnných splňující tytéž okrajové podmínky se dá vyjádřit jako lineární kombinace vlastních funkcí operátoru:

$$\psi(\xi) = \sum_n a_n \psi_n(\xi)$$

Další vlastností vlastní funkcí operátoru s diskretním spektrem pro souřadnice je vyjádřena rovnicí:

$$\sum_n \psi_n^*(\xi') \psi_n(\xi) = \delta(\xi' - \xi)$$

Kde $\delta(\xi' - \xi)$ je Diracova funkce.

V případě degenerace splňují vlastní funkce ψ_{nl} operátoru F rovnici:

$$(\hat{F} - F_n)\psi_{nl} = 0$$

Funkce ψ_{nl} vztahující se k různým vlastním hodnotám jsou ortogonální:

$$\int \psi_{ml}^*(\xi) \psi_{nk}(\xi) d\xi = 0, \quad m \neq n$$

Obecně pak předchozí vztah zapíšeme: $\int \psi_{ml}^*(\xi) \psi_{nk}(\xi) d\xi = \delta_{mn} \delta_{lk}$

Vlastní funkce $F_{n1}, F_{n2}, \dots, F_{nf}$, náležející téže vlastní hodnotě F_n obecně nejsou ortogonální.

Rozvoj vlnové funkce, která není vlastní funkcí operátoru s diskretním spektrem vlastních hodnot v případě degenerace:

$$\psi(\xi) = \sum_n \sum_l a_{nl} \psi_{nl}(\xi)$$

Střední hodnota fyzikální veličiny ve stavu charakterizovaná vlnovou funkcí, která není vlastní funkcí operátoru přiřazeného měřené fyzikální veličině vypočítáme:

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\xi$$

Z úplnosti systému vlastních funkcí operátoru dostaneme pro vlnovou funkci:

$$\psi(\xi) = \sum_n a_n \psi_n(\xi)$$

a rovnice $\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n$ za podmínky ortonormality funkcí dostaneme pro střední hodnotu měřené veličiny:

$$\langle F \rangle = \sum_n F_n |a_n|^2$$

Druhá mocnina koeficientu rozvoje určuje pravděpodobnost že při měření fyzikální veličiny ve stavu popsaném vlnovou funkcí ψ naměříme hodnotu F_n .

Z normovací podmínky dostaneme tzv. podmínku úplnosti systému vlastních funkcí:

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

Vlastnosti vlastních funkcí operátorů se spojitým spektrem.

Vlastní funkce operátoru se spojitým spektrem vlastních hodnot splňují rovnici:

$$\hat{F}\psi_F = F\psi_F$$

Vlastní funkce operátoru jsou charakterizovány vlastními hodnotami operátoru a nemůžeme je očíslovat jako v případě diskrétního spektra. Vlastní funkci pak zapíšeme:

$$\psi_F(\xi) = \psi(F, \xi)$$

Množina těchto vlastních hodnot tvoří úplný systém a tak můžeme libovolnou funkci vyjádřit:

$$\psi(\xi) = \int a_F \psi_F(\xi) dF$$

Podmínka úplnosti systému vlastních funkcí se spojitým spektrem:

$$\int \psi^*(\xi) \psi(\xi) dF = \int a_F^* a_F dF = 1$$

Normovací podmínka systému vlastních funkcí se spojitým spektrem:

$$\int \psi_{F'}(\xi) \psi_F^*(\xi) d\xi = \delta(F' - F)$$

Splňuje-li vlnová funkce normovací podmínku, pak můžeme interpretovat součin

$$|a_F|^2 dF$$

Jako pravděpodobnost, že naměříme hodnotu fyzikální veličiny F v intervalu $(F, F+dF)$.

Z normovací podmínky také vyplývá, že pro $F \neq F'$ jsou vlastní funkce ortogonální.

Podmínka současné měřitelnosti ostrých hodnot dvou různých fyzikálních

Máme dvě fyzikální veličiny charakterizované svými operátory. F_n a K_n jsou ostré hodnoty těchto veličin ve stavu ψ_n . Napíšeme pro obě veličiny rovnice:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n \quad \hat{K}\psi_n = K_n\psi_n$$

Podmínka, kterou musí splňovat operátory obou fyzikálních veličin je vyjádřena rovnicí:

$$\hat{K}\hat{F} - \hat{F}\hat{K} = 0$$

To znamená, že komutátor operátorů obou fyzikálních veličin je roven nule a tedy nezáleží na pořadí, v němž aplikujeme operátor na příslušnou funkci. Říkáme, že operátory spolu komutují.

Relace neurčitosti.

Operátory veličin, které nemohou současně nabývat ostrých hodnot nekomutují. Z komutačních relací mezi nekomutujícími operátory můžeme odvodit vztah mezi středními kvadratickými odchylkami fyzikálních veličin těchto nekomutujících operátorů. Pro nekomutující operátory veličin F a K platí:

$$[\hat{K}, \hat{F}] = \hat{K}\hat{F} - \hat{F}\hat{K} = i\hat{M} \quad (*)$$

Střední hodnoty těchto veličin jsou dány: $\langle K \rangle = \int \psi^* \hat{K} \psi d\tau$, $\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau$

Operátory středních kvadratických odchylek: $(\widehat{\Delta F}) = \hat{F} - \langle F \rangle$, $(\widehat{\Delta K}) = \hat{K} - \langle K \rangle$

Dosazením těchto operátorů do komutační relace (*) dostaneme:

$$[(\widehat{\Delta K}), (\widehat{\Delta F})] = i\hat{M}$$

Vyřešením této relace dostaneme obecný vztah mezi středním kvadratickými hodnotami nekomutujících operátorů:

$$\langle (\widehat{\Delta K})^2 \rangle \langle (\widehat{\Delta F})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle \hat{M} \rangle^2$$

Ve speciálním případě kde: $\hat{K} = x$ $\hat{F} = \hat{p}_x$

Dostaneme známý vztah pro Heisebergovu relaci neurčitosti:

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle \langle (\Delta x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Z této nerovnosti vyplývá, částice se nikdy nemůže nacházet v úplném klidu, tedy nemůžeme současně naměřit ostrou hodnotu souřadnice a impulsu.

Časová změna kvantových stavů

Vlnová funkce systému musí splňovat vlnovou rovnici – **Schrödingerovu rovnici**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

Operátor **H** vystupující na pravé straně **Schrödingerovy rovnice** je Hamiltonův operátor systému a je v případě kdy nezávisí explicitně na čase roven operátoru celkové energie systému.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \hat{U}(\vec{r})$$

V případě, kdy platí $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ hledáme řešení **S** . rovnice ve tvaru

$$\psi(\xi, t) = \psi(\xi) A(t)$$

Tento tvar řešení umožňuje separovat rovnici na dvě rovnice:

$$\hat{H} \psi_E(\xi) = E \psi_E(\xi) \quad i\hbar \frac{\partial A(t)}{\partial t} = E A(t)$$

Rovnice $\hat{H}\psi_E(\xi) = E\psi_E(\xi)$ určuje vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru, který je v případě, kdy není závislý na čase operátorem energie.

Řešení rovnice $i\hbar \frac{\partial A(t)}{\partial t} = EA(t)$ je: $A(t) = \exp\left\{-iE \frac{t}{\hbar}\right\}$

Stavy s ostrou hodnotou energie nazýváme **stacionární stavy**. Vlnová funkce stacionárních stavů pak je rovna:

$$\psi(\xi, t) = \psi_E(\xi) \exp\left\{-iE \frac{t}{\hbar}\right\}$$

Konstrukce důležitých operátorů.

Souřadnice.

$$\vec{r}$$

$$x, y, z$$

→

$$\vec{r}$$

$$x, y, z$$

Impuls (hybnost).

$$\vec{p}$$

$$p_x, p_y, p_z$$

→

$$-i\hbar\nabla$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Impulsmoment (moment hybnost).

$$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$$

→

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

$$\vec{L} = -i\hbar[\vec{r} \times \nabla]$$

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Konstrukce důležitých operátorů.

Energie (v nerelativistickém přiblížení.

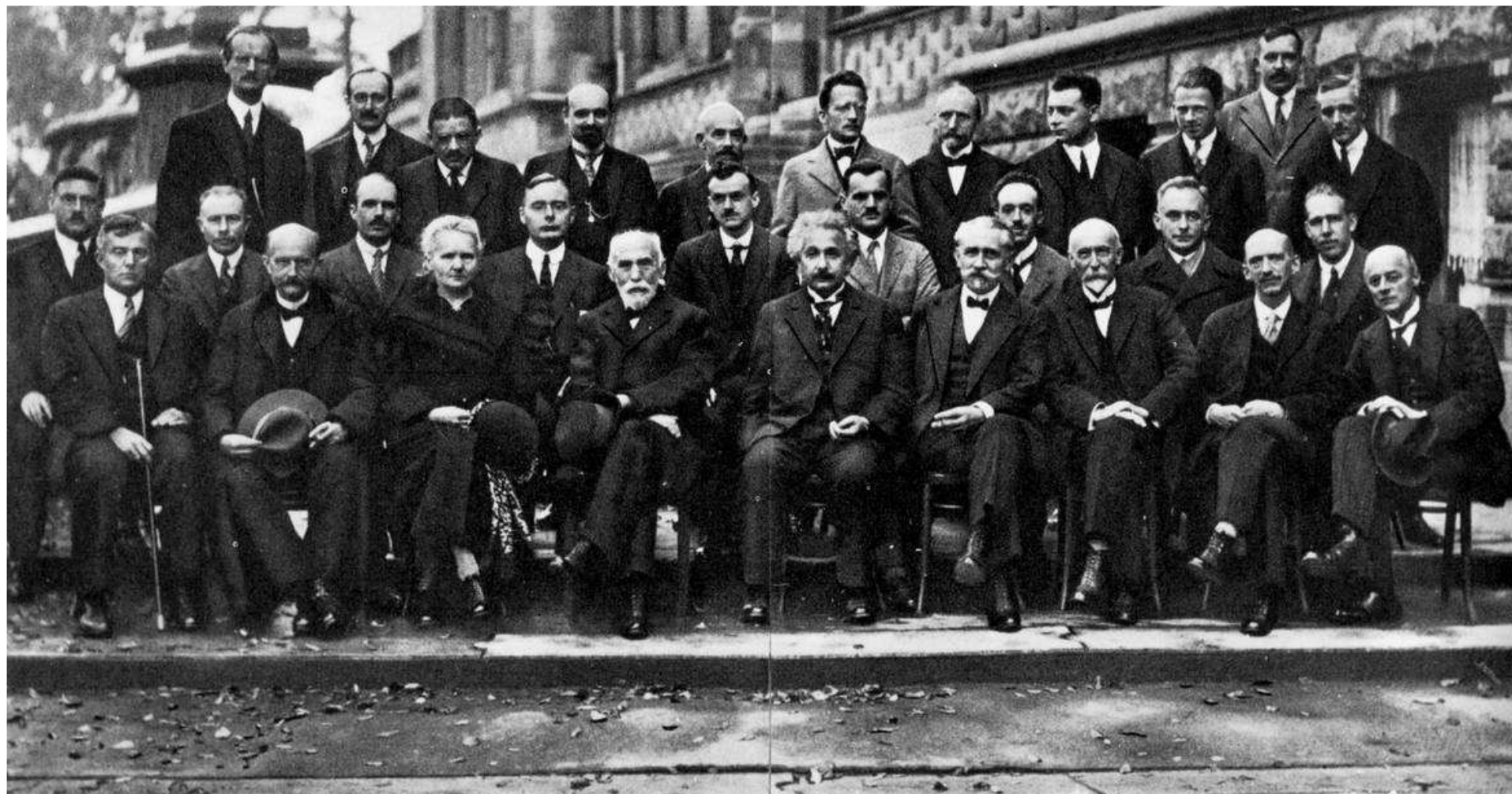
$$T = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \rightarrow$$
$$\rightarrow T = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Potenciální energie.

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \times$$

Celková energie.

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \rightarrow$$
$$\rightarrow H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



Photographie Benjamin Couprie

28, Avenue Louise, Bruxelles

							R. H. FOWLER	
A. PICCARD	E. HENRIOT		ED. HERZEN	TH. DE DONDER	E. SCHROEDINGER	W. PAULI	W. HEISENBERG	L. BRILLOUIN
		P. EHRENFEST			E. VERSCHAFFELT			
P. DEBYE	M. KNUDSEN	W. L. BRAGG	H. A. KRAMERS	P. A. M. DIRAC	A. H. COMPTON	L. V. DE BROGLIE	M. BORN	N. BOHR
I. LANGMEIR	M. PLANCK	MADAME CURIE	H. A. LORENTZ	A. EINSTEIN	P. LANGEVIN	CH. E. GUYE	C. T. R. WILSON	
								O. W. RICHARDSON