KVANTOVÁ FYZIKA

1) Úvod, historie, de Broglieho hypotéza, Schrödingerova rovnice

2) Matem. aparát: Hilbertův prostor, bra-, ket- vektory, operátory $\Leftrightarrow$ pozorovatelné, vlastní čísla, vlastní vektory, princip korespondence

3) 1-rozměrný harmonický oscilátor – odvození v souřadnicové representaci

4) — " — — " — pomocí posunovacích operátorů, srovnání s klasickou fyzikou

5) Měření, pravděpodobnosti, relace neurčitosti, úplná množina pozorovatelných

6) Moment hybnosti L^2, L_z, nalezení vl. čísel a vlastních funkcí, kulové funkce

7) Sféricky symetrické potenciály, poznámka o 3-rozměrném harmonickém oscilátoru, vodíkový atom

8) vodíkový atom dokončení

9) Časový vývoj, integrály pohybu, časový vývoj středních hodnot, Ehrenfestovy věty

10) Částice v elektromagnetickém poli, spin, interakce spinu s $\vec{B}$

11) Systémy více částic, přechod do těžišťové soustavy, nerozlišitelné částice:

12) bosony, fermiony, vztah mezi spinem a statistikou, kvalitativní popis periodické soustavy

1) Historie, de Broglieho hypotéza, Schrödingerova rovnice

Literatura: L. Hlavatý: Slabikář kvantové mechaniky, WWW stránky KF FJFI
J. Formánek: Úvod do kvantové teorie, Academia
P.A.M. Dirac: Principles of Quantum Mechanics, CUP

Historie: rozpory mezi experimenty a předpověďmi klasické fyziky na přelomu 19. a 20. století

a) čárová spektra chemických prvků

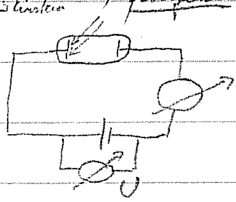
b) stabilita atomů (dle klas. teorie vyzařování pohybujících se nábojů v EM poli $\Rightarrow$ pád elektronů na atomová jádra za cca 10^{-10} s)

1900 c) záření absolutně černého tělesa (ideálního objektu pohlcujícího veškeré záření, které naň dopadá)

dle klasického popisu EM záření hustota energie připadající na interval frekvencí $\langle \nu, \nu + d\nu \rangle$ při dané teplotě je $\varrho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 kT \, d\nu$, experimentu odpovídá Planckova rozdělovací funkce $\boxed{\varrho(\nu,T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu}$, kde h je tzv. Planckova konstanta $h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ J s.

Je vidět, že $\varrho(\nu, T)$ jsou prakticky shodné pro $h\nu \ll kT$, zásadně se liší pro $\nu \to \infty$.
Planckovu rozdělovací funkci je možné odvodit obdobným postupem jako klasickou (Rayleigh–Jeansovu) formuli za předpokladu, že vyzářené EM pole o frekvenci ν nemůže mít libovolnou energii, jeho energie musí být násobkem elementárního kvanta $\boxed{E_0 = h\nu}$ (tzv. fotonu). To bylo odpovídalo představě EM záření jako proudu částic o této energii, ale pak není jasné, jak vysvětlit difrakci světla apod.

1887 Hertz, 1905 Einstein d) fotoefekt: v experimentu dopadá monochromatické světlo o frekvenci ν na fotokatodu, vyražené elektrony jsou napětím U vraceny zpět na fotokatodu. Bylo naměřeno, že proud I prochází obvodem pouze pokud napětí U je menší než max. napětí U_S a že hodnota $U_S = \frac{h}{e}(\nu - \nu_0)$. Pokud proud prochází, je úměrný intenzitě dopadajícího světla.



Interpretace: elektron interaguje pouze s jedním kvantem EM záření (fotonem), který mu předá celou svou energii $h\nu$. Pokud je tato energie vyšší než energie potřebná k opuštění povrchu katody E_{ion}, je elektron vyražen z katody s energií $h\nu - E_{ion}$. Počet fotonů je úměrný intenzitě světla a tedy výsledný procházející proud je úměrný intenzitě. Pro srovnání, dle klasické fyziky elektron interaguje přímo s EM vlnou a získává energii úměrnou intenzitě, což evidentně nesouhlasí s experimentem.

1923 c) Comptonův rozptyl – rozptyl rentgenového záření na krystalech. Měřena byla změna vlnové délky záření v závislosti na úhlu mezi dopadajícím a vyzářeným zářením. Naměřená závislost $\boxed{\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\Theta)}$.
Tento vztah lze odvodit za předpokladu, že záření interaguje s elektrony v podobě částic – fotonů s energií $E = h\nu$ a hybností $|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda}$. Vzorec odvozený z vlnové teorie světla nesouhlasí při malých vlnových délkách.

=> Z experimentů vyplývá, že 1) světlo se za určitých okolností chová jako proud částic - fotonů, za jiných okolností jako vlnění.

2) některé fyzikální veličiny mohou nabývat hodnot z diskrétní množiny (viz např. a), c))

=> různé pokusy v letech 1900-1920 o vybudování konzistentního popisu těchto jevů (Bohr, Sommerfeld), ale nepříliš úspěšné

1923 <u>De Broglieova hypotéza</u> - Podobně jako světelným vlnám je třeba při popisu některých jevů přiřadit částice - fotony - s energií $E = h\nu$ a hybností $p = \frac{h}{\lambda}$, je třeba při popisu jevů na atomární úrovni přiřadit hmotným částicím rovinnou vlnu o frekvenci E/h a vlnové délce h/p

tj.:

$$\boxed{\psi_{E,\vec{p}}(\vec{x},t) = C \exp\left(i\, 2\pi\left(\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{h} - \frac{E\cdot t}{h}\right)\right) = C \exp\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - E\cdot t)\,,\quad \hbar = \frac{h}{2\pi}}$$

Tato hypotéza byla vyslovena čistě na základě analogie, experimentální ověření vlnových vlastností částic, např. difrakce elektronů na krystalech, bylo získáno až později (1927 Davisson, Germer).

Ovšem je známo, že rovinné vlny ve fyzice vždy představují idealizaci a skutečné, reálně existující vlny jsou jejich superpozicí, tj. vlnové balíky. Lze očekávat, že i v tomto případě reálným částicím ve skutečnosti přísluší nikoliv rovinné vlny, ale vlnové balíky lokalizované v prostoru

$$\boxed{\psi(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}\; f(\vec{p}) \exp\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - E_{\vec{p}}\, t)} \qquad E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \text{ pro volné částice}$$

Je otázkou, zda lze pro $\psi(\vec{x})$ najít nějakou rovnici a zbavit se nutnosti zápisu pomocí rovinných vln =>
lze si povšimnout, že $\vec{p}$ lze dostat před $\psi_{E,\vec{p}}$ derivací podle $\vec{x}$, E derivací dle t, uvažujeme-li pouze volnou částici $E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$ => $\psi_{E,\vec{p}}(\vec{x})$ vyhovuje rovnici $0 = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - E\right)\psi_{E,\vec{p}}(\vec{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi_{E,\vec{p}}(\vec{x},t)$, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

stejné rovnici vyhovuje i superpozice $\psi(\vec{x},t)$ =>

Schrödingerova rovnice pro volnou částici $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x},t)}$

v případě, že částice se pohybuje ve vnějším potenciálním poli $V(\vec{x})$, Schrödinger postuloval (1925):

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x},t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x},t)}$$ <u>Schrödingerova rovnice</u>

Nejasné ovšem zpočátku zůstávalo, v jakém smyslu vlnová funkce $\psi(\vec{x},t)$ popisuje stav fyzikální částice v čase t a jakým způsobem lze fyzikálnímu stavu v určitý čas t_0 přiřadit vlnovou funkci, aby bylo možné řešit Schröd. rovnici pro následující časy $t > t_0$ a tedy určit časový vývoj. Tento problém úzce souvisí s otázkou, co vlastně lze v mikrosvětě měřit a jak měření ovlivňuje stav systému. Odpovědím na tyto otázky a důsledkům, které z toho vyplývají pro vlastnosti objektů mikrosvěta, budou věnovány následující přednášky.

2) Matematický aparát

Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ nad $\mathbb{C}$:

1) vektorový prostor nad $\mathbb{C}$, $\dim \mathcal{H} \le \infty$
2) skalární součin $(\ ,\ ) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$

   $(\varphi, \alpha\psi + \rho) = \alpha(\varphi, \psi) + (\varphi, \rho) \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}, \varphi, \psi, \rho \in \mathcal{H}$

   $(\varphi, \psi) = \overline{(\psi, \varphi)}$

   $(\varphi, \varphi) > 0 \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}, \varphi \neq \vec{0}$

   $\Rightarrow$ def. normu $\|\varphi\| \equiv \sqrt{(\varphi, \varphi)}$ $\Rightarrow$ lze hovořit o limitách, spojitosti apod.
3) úplný, tj.: $\forall \{\psi_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H} : (\forall \varepsilon > 0\ \exists n_0 > 0 : \forall n, m > n_0\ \|\psi_n - \psi_m\| < \varepsilon) \Rightarrow \exists \psi \in \mathcal{H} : \psi_n \to \psi$

Př.: $\mathbb{C}^n$, $L^2(\mathbb{R}^k, d^k x)$

$\dim = n$; $\dim = \infty$, $(\psi, \varphi) \equiv \int_{\mathbb{R}^k} \overline{\psi(\vec{x})} \varphi(\vec{x})\, d^k \vec{x}$

Značení: bra-, ket-vektory

prvky Hilbertova prostoru $|\psi\rangle$, $\overbrace{|i\rangle, |i, j\rangle}^{\text{náhrada } \psi_i, \psi_{ij} \text{ atd}}$ apod

lineární funkcionály $\langle\psi|, \dots$ definované způsobem

$\langle \psi | \equiv (\psi, \cdot) \quad (= (|\psi\rangle, \cdot))$

$\Rightarrow \langle \psi | \varphi \rangle \equiv (\psi, \varphi)$

ON báze Hilbertova prostoru: $\{|i\rangle\}_{i \in J}$, J nejvýše spočetná indexová množina, obvykle $\hat{n}$ nebo $\mathbb{N}$

ON $\Leftrightarrow$ $\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad \forall i, j \in J$

$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} : |\psi_m\rangle \equiv \sum_{i \le m} \langle i | \psi \rangle |i\rangle \Rightarrow |\psi_m\rangle \to |\psi\rangle$ tj: $\forall \varepsilon > 0\ \exists m_0 : \forall m > m_0\ \|\psi_m - \psi\| < \varepsilon$

obvykle píšeme $|\psi\rangle = \sum_{i \in J} |i\rangle \langle i | \psi \rangle$

Hilbertův prostor v QM:

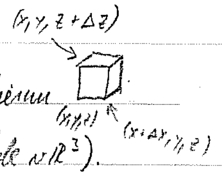
Každému QM systému je přiřazen Hilb. prostor, stav systému v daný časový okamžik je úplně popsán zadáním vektoru $\neq \vec{0}$ (stavového vektoru, vlnové funkce) z Hilbertova prostoru.

Upřesnění: $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\exists \alpha \in \mathbb{C}, \alpha \neq 0$, $|\varphi\rangle = \alpha |\psi\rangle \Rightarrow$ stejný stav, proto obvykle vyžadujeme normalizaci $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, zůstává neurčená fáze $|\psi'\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle$, $\alpha \in \mathbb{R}$

Srovnání s klas. mechanikou: v klas. mech. stav zadán bodem ve fázovém prostoru (např. polohou a rychlostí)

KM: fázový prostor, např. $\mathbb{R}^6$ pro volnou částici; stav zadán 6 čísly

QM: Hilbertův prostor, např. $L^2(\mathbb{R}^3, d^3 x)$ pro volnou částici; stav zadán ∞-mnoha čísly $\langle i | \psi \rangle$ v libovolné zvolené bázi $\mathcal{H}$

Fyzikální interpretace $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, dx)$: $|\psi(x,y,z)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$ udává pravděp. nalezení částice v malém objemu 

(Born)

za předpokladu normalizace $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 dx\,dy\,dz = 1$ (částice se s jistotou najde někde v $\mathbb{R}^3$).

Operátory .. lineární operátory v Hilb. prostoru .. předmět funkcionální analýzy, 2 semestry

Hrubý návod: používat dodavně jako lin. operátory na konečnědim. prostorech s vědomím možných rozdílů

$\hat{A}: \mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H} \qquad \hat{A}: |\psi\rangle \to \hat{A}|\psi\rangle$

def. $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|(\hat{A}|\psi\rangle)$, pak ve zvolené ON bázi $\{|i\rangle\}$ kde platí $\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|$ (tzv. relace úplnosti viz def. ON báze)

$\Rightarrow \hat{A} = \sum_{i,j} |i\rangle \underline{\langle i|\hat{A}|j\rangle} \langle j|$

tzv. maticový element op. $\hat{A}$ v bázi $\{|i\rangle\}$, např. platí $\langle i|\hat{A}\hat{B}|j\rangle = \sum_k \langle i|\hat{A}|k\rangle\langle k|\hat{B}|j\rangle$

Nejpodstatnější rozdíly vůči konečnědim. případu

1) $\mathcal{D}(\hat{A})$ nemusí být celé $\mathcal{H}$, požadujeme, aby $\exists$ ON báze $\mathcal{H}$ $\{|i\rangle\} \subset \mathcal{D}(\hat{A})$

2) $\|\hat{A}\| \equiv \sup_{\langle\psi|\psi\rangle = 1} \|\hat{A}|\psi\rangle\| \Rightarrow \|\hat{A}\|$ nemusí být $< \infty$, např. $\frac{d}{dx}$ na $L^2(\mathbb{R}, dx)$ není omezený

Fyzikální interpretace: lin. operátory odpovídají pozorovatelným (tj. měřitelným veličinám - poloha, hybnost, energie a pod.),

naměřit lze pouze číselné hodnoty ležící ve spektru přísl. operátoru.

Spektrum: vlastní čísla λ: $\exists |\psi\rangle \neq \vec{0}$ $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ + tzv. spojitá část spektra $\exists \{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{D}(\hat{A})$, $\| |\psi_n\rangle \| = 1$, $\| \hat{A}|\psi_n\rangle - \lambda|\psi_n\rangle \| \to 0$

$\wedge \nexists |\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$: $|\psi_n\rangle \to |\psi\rangle$

Fyz. přístroje dávají reálné výsledky $\Rightarrow$ potřebujeme operátory s reálným spektrem $\Rightarrow$ postulujeme samosdruženost operátorů odpovídajících pozorovatelným:

Sdružený operátor $\hat{A}^+$: $\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle}$, $\forall\varphi \in \mathcal{D}(\hat{A})$, $\forall\psi \in \mathcal{D}(\hat{A}^+)$ (v obvyklém mate. zápisu $(\hat{A}^+\varphi, \psi) = (\varphi, \hat{A}\psi)$)

Samosdružený operátor: $\mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^+)$, $\forall\varphi,\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$: $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle}$ tj. $\hat{A}^+ = \hat{A}$

v libov. ON bázi $\langle i|\hat{A}|j\rangle = \overline{\langle j|\hat{A}|i\rangle}$

$\Rightarrow$ reálná vlastní čísla $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \lambda \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{\in\mathbb{R}^+} = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle} = \bar{\lambda}\,\overline{\langle\psi|\psi\rangle} = \bar{\lambda}\langle\psi|\psi\rangle$

$\langle\psi|\psi\rangle > 0 \Rightarrow \lambda = \bar{\lambda}$

Př: $\hat{X} = x\cdot$ na $L^2(\mathbb{R}, dx)$ $\quad (\hat{X}\varphi, \psi) = \int \overline{\varphi(x)x}\,\psi(x)\,dx = (\varphi, \hat{X}\psi)$

$\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ -"- $\quad (\hat{P}\varphi, \psi) = \overline{-i\hbar}\int \overline{\varphi'(x)}\psi(x)\,dx \overset{\text{per partes}}{=} i\hbar\cdot\left(\underbrace{[\ ]_{-\infty}^{+\infty}}_{0 \ (\varphi,\psi \in L^2(\mathbb{R},dx))} - \int\bar{\varphi}\psi'\,dx\right) = (\varphi, \hat{P}\psi)$

Též vlastní vektory přísl. různým vl. číslům jsou OG:

$\hat{A}|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle$, $\hat{A}|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle \Rightarrow \lambda_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle = \overline{\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle} = \bar{\lambda}_2\overline{\langle\psi_1|\psi_2\rangle} = \lambda_2\langle\psi_2|\psi_1\rangle$, $\lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow \langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$

Jak přiřadit pozorovatelným operátory? $\nexists$ obecný předpis, vždy důležité porovnat s experimentem

Pro částici v potenciálním poli obvykle funguje vyjádření klas. pozorovatelných jako funkcí x_i, p_j

a pak nahrazení pozorovatelných polohy a hybnosti operátory $\hat{X}_i$: $\hat{X}_i\,\psi(\vec{x}) = x_i\,\psi(\vec{x})$

a $\hat{P}_j\,\psi(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\psi(\vec{x})$.

Př: energie částice v potenc. poli $V(\vec{x})$: $E(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \longrightarrow \hat{E} \equiv \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$

Problém: v klas. vyjádření nezávisí na pořadí x_i a p_j (reálné fce na fázovém prostoru), v QM pojetí na pořadí záleží $\hat{X}_i\hat{P}_j \neq \hat{P}_j\hat{X}_i$ $\quad \left(\hat{X}_i\hat{P}_j\psi - \hat{P}_j\hat{X}_i\psi = -i\hbar\left(x_i\frac{\partial\psi}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(x_i\psi)\right) = +i\hbar\,\delta_{ij}\,\psi\right.$

tj. $\hat{X}_i\hat{P}_j - \hat{P}_j\hat{X}_i \equiv [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbb{1}$, operátory nekomutují), řešením je porovnání výsledků různých možností s experimentem.

3) Jednorozměrný harmonický oscilátor

Obvyklý první krok při zkoumání daného QM systému – nalezení možných hodnot energie.

1-D harm. oscilátor klasicky $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2}, \quad \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$$

$? E \in \mathbb{R}, \psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, dx) : \quad \hat{H}\psi = E\psi$ tj. $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x)$

1. krok .. substituce $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi$, $\quad E = \frac{\hbar\omega}{2}\Lambda$ $\qquad \boxed{\psi''(\xi) - \xi^2\psi(\xi) + \Lambda\psi(\xi) = 0}$

2. krok .. chování ψ v $\pm\infty$ .. člen $\Lambda\psi$ zanedbatelný vzhledem k $\xi^2\psi \Rightarrow \psi'' - \xi^2\psi \approx 0$

$\Rightarrow \psi \sim e^{\pm\xi^2/2}$ pro $\xi \to \pm\infty$ (protože $\psi'' \sim \xi^2 e^{\pm\xi^2/2} \underbrace{\pm e^{\pm\xi^2/2}}_{\text{zanedb. ve srovnání s 1. členem}}$)

$\wedge\ \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx) \Rightarrow \psi \sim e^{-\xi^2/2}$

$\Rightarrow$ substituce $\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}u(\xi)$

$\Rightarrow \psi'' = \xi^2 e^{-\xi^2/2}u(\xi) - e^{-\xi^2/2}u(\xi) - 2\xi e^{-\xi^2/2}u'(\xi) + e^{-\xi^2/2}u''(\xi)$

$\Rightarrow \psi'' - \xi^2\psi + \Lambda\psi = \cancel{\xi^2 e^{-\xi^2/2}u(\xi)} - e^{-\xi^2/2}u(\xi) - 2\xi e^{-\xi^2/2}u'(\xi) + e^{-\xi^2/2}u''(\xi) - \cancel{\xi^2 e^{-\xi^2/2}u(\xi)} + \Lambda e^{-\xi^2/2}u(\xi) = 0$

$$\Rightarrow \boxed{u''(\xi) - 2\xi u'(\xi) + (\Lambda - 1)u(\xi) = 0}$$

3. krok řešení dif. rovnice pomocí rozvoje u do Taylorovy řady $u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2a_k k\,\xi^{k-1+1} + \sum_{k=0}^{\infty}(\Lambda-1)a_k\xi^k = 0$$

$\Rightarrow$ stačí $k = 2, \ldots$

posunutí indexu

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left((k+2)(k+1)a_{k+2} - 2a_k k + (\Lambda-1)a_k\right)\xi^k = 0$$

rovnost má platit $\forall \xi \in \mathbb{R} \Rightarrow$ každý koef. u ξ^k musí být roven $0 \Rightarrow$ rekurentní vzorec

$$\boxed{a_{k+2} = \frac{-\Lambda + 1 + 2k}{(k+2)(k+1)}\,a_k} \quad (*)$$

pro $k \to \infty$ přibližně $a_{k+2} \sim \frac{2}{k}a_k \Rightarrow a_{2k+2} \sim \frac{2}{2k}a_{2k} = \frac{1}{k}a_{2k} \Rightarrow u \sim \exp(\xi^2)$

$\Rightarrow \psi \sim \exp(\xi^2/2) \Rightarrow \psi \notin L^2(\mathbb{R}, dx)$.

Jediné možné východisko .. polynom místo nekonečné řady, $\exists m \in \mathbb{N}: a_m \neq 0,\ a_{m+1} = 0 \Rightarrow \forall k \geq m+2$ též $a_k = 0$

pak asymptotika ψ v pořádku, $\psi \in L^2(\mathbb{R}, dx)$

$$(*) \Rightarrow \quad 0 = \frac{1-\Lambda+2m}{(m+2)(m+1)} a_m \quad \wedge \quad 0 = \frac{1-\Lambda+(2m-2)}{(m+1)\,m} a_{m-1} \quad \wedge \; a_m \neq 0$$

$$\Rightarrow \quad 1-\Lambda+2m=0 \quad \Rightarrow \quad \Lambda = 2m+1, \quad 0 = \frac{\cancel{1}-\cancel{2m}-\cancel{1}+\cancel{2m}-2}{m(m+1)} a_{m-1} \Rightarrow a_{m-1} = 0$$

matem. indukcí snadno ověřím že $a_{m-1-2k} = 0$, $\forall k \Rightarrow u(\xi)$ polynom obs. pouze sudé nebo pouze liché mocniny, vzhledem k $(*)$ tedy nejnižší člen je buď konst. nebo polynom 1. stupně

pro $\Lambda = 2m+1$ ozn. $\boxed{u(\xi) = H_m(\xi) \text{ s volbou } a_m = 2^m}$, rekur. vztah $a_k = \frac{2(k-m-2)}{k(k-1)} a_{k-2}$

$$\Rightarrow \quad a_{k-2} = \frac{k(k-1)}{2(k-m-2)} a_k \quad \text{tj.} \quad a_{m-2} = \frac{m(m-1)}{2\cdot 2(-1)} 2^m = (-1)\, m(m-1)\, 2^{m-2}$$

matem. indukcí

$$\boxed{a_{m-2k} = (-1)^k \cdot \frac{m!}{k!\,(m-2k)!} 2^{m-2k}}$$

$\Rightarrow$ Závěr: Vlastní čísla operátoru $\hat{H}$ jednorozměrného harmonického oscilátoru, tj. hodnoty energie, které je možno naměřit, jsou

$$\boxed{E_m = \frac{\hbar\omega}{2}(2m+1) = \hbar\omega\left(m+\frac{1}{2}\right)}, \quad m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

a příslušné vlastní funkce jsou $\boxed{\psi_m(x) = A_m\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_m\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right)}$, kde A_m je normalizační konstanta,

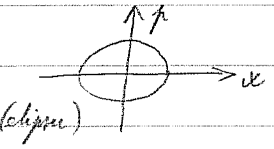
$$\boxed{H_m(\xi) = \sum_{k=0}^{[\frac{m}{2}]} (-1)^k \frac{m!}{k!\,(m-2k)!} 2^{m-2k} \xi^{m-2k}}$$ jsou Hermitovy polynomy.

Poznámka: Matematici ukázali, že $\psi_m(x)$ tvoří ON bázi prostoru $L^2(\mathbb{R}, dx)$ a že vlastní čísla v tomto případě tvoří celé spektrum operátoru $\hat{H}$ (tj. spojitá část spektra je prázdná).

Př: Explicitní tvar Hermitových polynomů pro malé m

$m = 0$	$H_0(\xi) = 1$
$m = 1$	$H_1(\xi) = 2\xi$
$m = 2$	$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$
$m = 3$	$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

4) Jednorozměrný harmonický oscilátor – porovnání s klasickou mechanikou

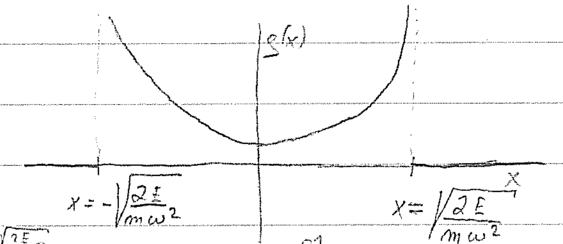


Klasická mechanika: harm. oscilátor může mít libovolnou energii (≥0), při dané energii opisuje uzavřenou křivku ve fázovém prostoru (elipsu)
určená rovnicí $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$

Pravděpodobnost nalezení v intervalu $(x, x+dx)$: určena jako podíl času stráveného v intervalu a půlperiody $\rho(x)\,dx = \frac{T(x,x+dx)}{T/2} = \frac{dx}{v(x)}\cdot\frac{\omega}{\pi}$ $\quad(\omega = \frac{2\pi}{T})$

$v(x)$: $\quad E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}$

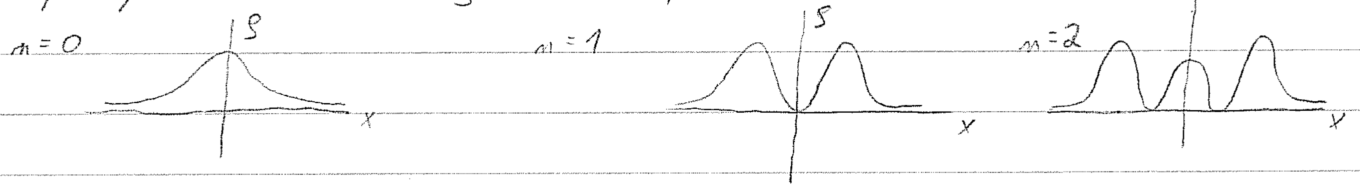
$$\Rightarrow \rho(x)\,dx = \frac{\omega}{\pi\sqrt{\frac{2}{m}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}$$



$\rho(x) = 0, \quad \forall x: |x| > \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

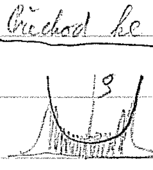
Pozn: ověření normalizace $\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)\,dx = \int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \frac{\omega}{\pi\sqrt{\frac{2}{m}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}\,dx \underset{z=\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}x}{=} \int_{-1}^{1}\frac{dz}{\pi\sqrt{1-z^2}} = \frac{1}{\pi}\left[\arcsin 1 - \arcsin(-1)\right] = \underline{\underline{1}}$

QM:
- harm. oscilátor může mít pouze hodnoty energie z diskrétní množiny $\{\hbar\omega(n+\frac{1}{2})\}_{n\in\mathbb{N}\cup\{0\}}$
- energie určuje stav jednoznačně (vlnová funkce určena až na násobek, tj. normalizaci a fázi)
- pravděpodobnost nalezení $\rho(x)\,dx = |\psi(x)|^2\,dx$



$\rho(x)$ je nulová pouze v konečném počtu bodů (kořeny H_n), pro $x \to \pm\infty$ exponenciálně ubývá, ale není nulová! $\Rightarrow$ oscilátor je v principu možné najít v okolí libovolného bodu, ale pravděpodobnost může být hodně malá.

Přechod ke klasické mechanice: velké n (zároveň energie velká v porovnání s $\hbar\omega \Leftarrow \hbar \sim 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$)



$\Rightarrow \rho$ silně oscilující funkce (n kořenů), klasický tvar $\rho(x)$ teprve po zprůměrování ρ přes oscilace ($\Leftarrow$ experimentální rozlišení vzdáleností je podstatně horší než vzdálenost mezi sousedními kořeny H_n)

Posunovací operátory - jiný způsob odvození spektra harmonického oscilátoru

$$\hat{a} = \frac{\hat{P}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{X}, \quad \hat{a}^+ = \frac{\hat{P}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{X}$$

$$\Rightarrow \hat{a}^+\hat{a} = \frac{\hat{P}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{X}^2 - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\underbrace{(\hat{P}\hat{X} - \hat{X}\hat{P})}_{[\hat{P},\hat{X}] = -i\hbar\mathbb{1}} = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}\mathbb{1}, \text{ obdobně } \hat{a}\hat{a}^+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}\mathbb{1}$$

$$\Downarrow \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)}, \quad [\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega\hat{a}^+\underbrace{[\hat{a},\hat{a}]}_{=0} + \hbar\omega[\hat{a}^+,\hat{a}]\hat{a} = -\hbar\omega\hat{a}$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+$$

pp., že známe $|\psi\rangle$: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow \hat{H}\hat{a}^+|\psi\rangle = [\hat{H},\hat{a}^+]|\psi\rangle + \hat{a}^+\hat{H}|\psi\rangle = (E+\hbar\omega)\hat{a}^+|\psi\rangle$

obdobně $\hat{H}\hat{a}|\psi\rangle = (E-\hbar\omega)\hat{a}|\psi\rangle$

$\Rightarrow$ působením $\hat{a}^+$, resp. $\hat{a}$ na vl. stav získáme vl. stav odpov. energii $E+\hbar\omega$, resp. $E-\hbar\omega$ <u>nebo</u> nulový vektor - ověříme výpočtem normy:

pp $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ $\Rightarrow$ $\|\hat{a}^+|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{a}\hat{a}^+|\psi\rangle = \langle\psi|(\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2})|\psi\rangle = (\frac{1}{\hbar\omega}E + \frac{1}{2})\langle\psi|\psi\rangle$

$\|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{a}^+\hat{a}|\psi\rangle = \langle\psi|(\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2})|\psi\rangle = (\frac{1}{\hbar\omega}E - \frac{1}{2})\langle\psi|\psi\rangle$

dle def $\|\ \|^2 \geq 0 \Rightarrow \frac{1}{\hbar\omega}E \geq \frac{1}{2}$, tj. $E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$

abychom opakovaným působením $\hat{a}$ nezískali stav s zápornou normou, musí existovat $|0\rangle$: $\|\hat{a}|0\rangle\|^2 = 0$, tj. $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

stavy s vyšší energií získáme opakovaným působením $\hat{a}^+$ na $|0\rangle$, po normalizaci

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

Kontrola normalizace $\langle n|n\rangle = \frac{1}{n!}\langle 0|\hat{a}^n(\hat{a}^+)^n|0\rangle = \frac{1}{n!}\langle 0|\hat{a}^{n-1}\underbrace{[\hat{a},\hat{a}^+]}_{1}(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle + \frac{1}{n!}\langle 0|\hat{a}^{n-1}\hat{a}^+\hat{a}(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle$

$(\hat{a}|0\rangle = 0)$ $= \ldots = \frac{1}{n!}n\langle 0|\hat{a}^{n-1}(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle = \frac{1}{(n-1)!}\langle 0|\hat{a}^{n-1}(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle = \ldots = 1$ matem. indukcí

obdobně lze ukázat $\langle n|m\rangle = 0, \forall n \neq m$, tj. $\boxed{\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}}$

Nalezení explicitního vyjádření $|n\rangle$, tj. vlnových funkcí

$|0\rangle$: $\hat{a}|0\rangle = 0$, tj. $-i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\psi_0 - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d}{dx}\psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$

$\Rightarrow \boxed{\psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$, A určeno požadavkem $\langle 0|0\rangle = 1$ až na fázi

$|n\rangle$: použitím vzorce výše, již jen opakované derivování a násobení - lze matem. indukcí

Shrnutí: Spektrum tímto způsobem nalezeno snadněji, explicitní tvar vlnových funkcí lze též najít, ale náročnost výpočtu je již obdobná jako předtím.

5) Výsledky měření

Již víme, že QM postuluje, že výsledkem měření libovolné pozorovatelné může být pouze číslo ležící ve spektru příslušného operátoru. Otázkou zůstává, které číslo ze spektra naměříme při měření na konkrétním stavu $|\psi\rangle$. Ukazuje se, že odpověď má pouze pravděpodobnostní charakter.

1) Nejjednodušší situace: S jakou pravděpodobností naměříme vlastní hodnotu α pozorovatelné A, jíž přísluší jednorozměrný vlastní podprostor generovaný vektorem $|\alpha\rangle$ při měření na stavu $|\psi\rangle$?

$$\boxed{W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = \frac{|\langle\alpha|\psi\rangle|^2}{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\psi|\psi\rangle}}$$

pokud $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ $\Rightarrow$ $\boxed{W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2}$

2) Pokud α má vícerozměrný vlastní podprostor, nalezneme jeho ON bázi $\{|\alpha,i\rangle\}_{i\in J}$ a platí

$$\boxed{W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = \sum_{i\in J} \frac{|\langle\alpha,i|\psi\rangle|^2}{\langle\alpha,i|\alpha,i\rangle\langle\psi|\psi\rangle}}$$

při normalizovaných $|\alpha,i\rangle$, $|\psi\rangle$ $\boxed{W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = \sum_{i\in J} |\langle\alpha,i|\psi\rangle|^2}$

Formalismus QM postuluje, že po naměření hodnoty α pozorovatelné $\hat{A}$ se systém nachází ve stavu popsaném vl. vektorem $\sum_{i\in J}|\alpha,i\rangle\langle\alpha,i|\psi\rangle$ operátoru $\hat{A}$ příslušejícím vl. hodnotě α $\Rightarrow$ při dalším měření naměříme opět α, pokud stav nezměníme měřením jiné pozorovatelné (nebo ho nenecháme vyvíjet s časem dle Schröd. rce).

Pozn: korektnost definice $W_{A=\alpha,|\psi\rangle}$: $\boxed{\sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})} W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = 1}$ Dk: pp $\exists$ ON báze $|n\rangle$ tvořená vl. vektory přísl. vl. hodnotám λ_n, ne nutně navzájem různým

$\Rightarrow$ $\hat{A}$ lze vyjádřit $\hat{A} = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n|$ (ověření: evidentně platí při působení na vektory ON báze + linearita)

$$\Rightarrow \sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})} W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = \sum_n |\langle n|\psi\rangle|^2 = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle \overset{\text{relace}}{\underset{\text{úplnosti}}{=\!=}} \langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad Q.E.D.$$

3) α leží ve spoj. části spektra $\Rightarrow$ matem. komplikované, fyzikově řeší zavedením "zobecněných vlastních funkcí" ležících mimo Hilbertův prostor, tj. fyzikálně nerealizovatelných stavů (obdoba rovinných vln v EM)

Př: vlastní funkce $\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ $\quad -i\hbar\frac{d}{dx}\psi_p(x) = p\,\psi_p(x) \Rightarrow \boxed{\psi_p(x) = C_p e^{i\frac{p}{\hbar}x}} \notin L^2(\mathbb{R},dx)$, $\forall p\in\mathbb{R}$

$\Rightarrow$ pravděpodobnost naměření hybnosti v intervalu (p_1,p_2) na stavu popsaném normalizovanou vlnovou funkcí $\psi(x)$ je

$$\boxed{W_{p\in(p_1,p_2),\psi} = \int_{p_1}^{p_2} dp \left(\left| \int_{-\infty}^{\infty} C_p^* e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \psi(x)\,dx \right|^2 \right)}$$

C_p je určeno z požadavku $W_{p\in\mathbb{R},\psi} = 1$, $\forall\psi\in\mathcal{H}$ $\Rightarrow$ $C_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

Př: vlastní funkce $\hat{X} = x\cdot$ $\quad \hat{X}\psi_\varkappa(x) = \varkappa\,\psi_\varkappa(x) \Rightarrow \psi_\varkappa(x)$ je tzv. "δ-funkce", $\psi_\varkappa(x) = \delta(x-\varkappa)$

splňující $\delta(x-\varkappa) = 0$, $\forall x\neq\varkappa$, $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-\varkappa)\,dx = 1$

$$\Rightarrow \boxed{W_{x\in(x_1,x_2),\psi} = \int_{x_1}^{x_2} dy \left(\left| \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)\psi(x)\,dx \right|^2 \right) = \int_{x_1}^{x_2} dx\, |\psi(x)|^2}$$

$\Rightarrow$ dříve postulovaná interpretace $|\psi(x)|^2$ jako

*) $\boxed{\Delta_\psi(A)\,\Delta_\psi(B) \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle_\psi|}$ Dk: $\langle[A,B]\rangle_\psi = \overline{\langle\psi|[A,B]^+|\psi\rangle} \underset{A=A^+, B=B^+}{=} \overline{\langle\psi|[B,A]|\psi\rangle} = -\overline{\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle} = -\overline{\langle A,B\rangle_\psi} \Rightarrow \in \mathrm{Im}(\mathbb{C})$

$\underbrace{\text{př. } \langle\psi|\psi\rangle = 1, \lambda\in\mathbb{R}, \text{ ozn. } C^+}$

$\langle\psi|((A-\langle A\rangle)+i\lambda(B-\langle B\rangle))(A-\langle A\rangle)-i\lambda(B-\langle B\rangle))|\psi\rangle = \langle\psi|C^+C|\psi\rangle = \|C|\psi\rangle\|^2 \geq 0 \Rightarrow \Delta^2_\psi(\hat{A}) - i\lambda\langle[\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle, \hat{B}-\langle\hat{B}\rangle]\rangle_\psi + \lambda^2\Delta^2_\psi\hat{B} \geq 0$

položím $\lambda = \frac{i}{2}\frac{\langle[A,B]\rangle_\psi}{\Delta^2_\psi(B)} \Rightarrow \Delta^2_\psi(A) + \frac{1}{4}\frac{\langle[A,B]\rangle^2_\psi}{\Delta^2_\psi(B)} \geq 0$, $\langle[A,B]\rangle^2 \leq 0 \Leftarrow \langle\ \rangle \in \mathrm{Im}(\mathbb{C})) \Rightarrow \Delta^2_\psi(A)\Delta^2_\psi(B) \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle_\psi|^2$ $\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle_\psi$ QED

hustoty pravděpodobnosti nalezení v okolí bodu x

Součinem vl. funkcí v kartézských směrech lze najít společné zobecněné vlastní fce operátorů $\hat{P}_i$, resp. $\hat{X}_i$

v $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ $\quad \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$ resp. $\delta^3(\vec{x}-\vec{x}') = \delta(x_1-x_1)\,\delta(x_2-x_2)\,\delta(x_3-x_3)$.

Střední hodnoty pozorovatelných

Předpokládejme, že jsme experimentálně schopni systém opakovaně přivádět do stavu $|\psi\rangle$ a provádět na něm měření hodnoty pozorovatelné A. Jaká je střední hodnota těchto měření?

$$\boxed{\langle\hat{A}\rangle_\psi} \equiv \sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})} \alpha\, W_{A=\alpha,|\psi\rangle} = \sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})} \alpha \sum_i \langle\psi|\alpha,i\rangle\langle\alpha,i|\psi\rangle = \langle\psi|\underbrace{\Big(\sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})}\sum_i \alpha|\alpha,i\rangle\langle i,\alpha|\Big)}_{\hat{A} \text{ viz dříve}}|\psi\rangle$$

$$= \boxed{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}$$, v případě, že ψ nebylo normalizované, je $\boxed{\langle\hat{A}\rangle_\psi = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}}$

Stejný vzorec platí i v případě, že spektrum $\hat{A}$ obsahuje spojitou část.

Střední kvadratická odchylka měření A na $|\psi\rangle$: $\quad \Delta_\psi(A) = \sqrt{\langle\hat{A}^2 - \langle\hat{A}\rangle^2_\psi\rangle_\psi}$ $\quad$ viz statistika

udává rozptyl kolem $\langle A\rangle_\psi$, v němž se nachází většina výsledků měření pozorovatelné A

čím je menší $\Delta_\psi(A)$, tím přesněji je A ve stavu $|\psi\rangle$ určena, pro $|\psi\rangle$ vlastní fci A platí $\Delta_\psi(A) = 0$

Pokud na daném stavu měříme dvě pozorovatelné A, B, pak platí vztah mezi $\Delta_\psi(A), \Delta_\psi(B)$

$$\Delta_\psi(A)\,\Delta_\psi(B) \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle_\psi|.$$ (Odvození lze nalézt v literatuře*)

Konkrétně pro $A = \hat{X}_i$, $B = \hat{P}_j$ dostáváme Heisenbergovy relace neurčitosti

$$\boxed{\Delta_\psi(\hat{X}_i)\,\Delta_\psi(\hat{P}_j) \geq \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}}$$

Tj. máme-li stav s dobře určenou hybností v určitém směru ($\Delta_\psi(\hat{P}_j)$ malé), pak v tomto směru můžeme naměřit prakticky libovolnou polohu ($\Delta_\psi(\hat{X}_j)$ velké) a naopak. Vzhledem ke velikosti $\hbar$ se však tyto jevy projevují pouze v oblasti mikrosvěta, u objektů s malou hmotností (např. e^- $m_e \sim 10^{-30}$ kg), protože rychlost částic v nerelat. QM musí být $\leq 10^8$ m s^{-1} a tedy i neurčitost v jejím určení je max. $\sim 10^8$ m s^{-1}, $\hbar \sim 10^{-34}$ Js.

Kompatibilita měření – ? $\exists$ množiny pozorovatelných takových, že měření libovolné z nich na stavu s určenou hodnotou a pozorovatelné A (ozn. B) nezmění a? (tj. následné měření A dá opět a?) – Ano existují, jsou to pozorovatelné, u nichž $\exists$ společná ON báze z jejich vlastních vektorů.

Př: A, B, $\exists\{|a,b,i\rangle\}$: $\hat{A}|a,b,i\rangle = a|a,b,i\rangle$, $\hat{B}|a,b,i\rangle = b|a,b,i\rangle$, $\langle a,b,i|a',b',j\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{ij}$,

$\mathbb{1} = \sum_{a,b,i}|a,b,i\rangle\langle a,b,i| \Rightarrow$ stav s přesně urč. hodnotou a: $|\psi\rangle = \sum_{b\in B_{a,i}} c_{b,i}|a,b,i\rangle \Rightarrow$ měření B převede do vl. stavu $|\varphi\rangle$

$|\varphi\rangle = \sum_{a',j}|a',b,j\rangle\langle a',b,j|\Big(\sum_{b\in B_{a,i}} c_{b,i}|a,b,i\rangle\Big) = \sum c_{b,i}|a,b,i\rangle$ a b musí ležet v B_a. Další měření A dá opět a, protože $|\varphi\rangle$ je vl. vek. A.

Jiná, matematicky ekvivalentní, formulace $\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = 0}$ (Odvození: rovnost platí na bazických vektorech $|a,b,i\rangle$, dále linearitou)

Význačnou úlohu pro daný fyzikální systém hrají systémy kompatibilních pozorovatelných $\{A_k\}_{k\leq m}$ ($[A_i,A_j]=0$) jejichž spol. vlastní podprostory jsou 1-dim.,

tj. $|a_1,\dots,a_n\rangle$ tvoří ON bázi... $\{A_k\}_{k\leq m}$ úplná množina pozorovatelných. Po změření ÚMP víme, že systém je v odpovídajícím stavu $|a_1,\dots,a_n$

6) Moment hybnosti

V klasické mechanice $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, tj. $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$ => v QM složkám momentu hybnosti přiřadíme operátory $\boxed{\hat{L}_i = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} \hat{X}_j \hat{P}_k}$ (při této definici je $\hat{L}_i$ bez fyzikálního rozměru, $[\hat{L}] = 1$)

$$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \frac{1}{\hbar^2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} [\hat{X}_k \hat{P}_l, \hat{X}_m \hat{P}_n] = \frac{1}{\hbar^2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (\hat{X}_m [\hat{X}_k, \hat{P}_n] \hat{P}_l + \hat{X}_k [\hat{P}_l, \hat{X}_m] \hat{P}_n) =$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + (\hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}) = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

$$= \frac{i\hbar}{\hbar^2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (\delta_{kn} \hat{X}_m \hat{P}_l - \delta_{lm} \hat{X}_k \hat{P}_n) = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmk} \hat{X}_m \hat{P}_l - \varepsilon_{imk} \varepsilon_{jkl} \hat{X}_m \hat{P}_l) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\delta_{lj} \delta_{im} - \cancel{\delta_{lm} \delta_{ji}} - \cancel{\delta_{il} \delta_{mj}} + \delta_{ij} \delta_{ml}) \hat{X}_m \hat{P}_l = \frac{i}{\hbar} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kml} \hat{X}_m \hat{P}_l = \boxed{i \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k}$$

def. $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ => $\boxed{[L^2, L_3] = [L_1^2 + L_2^2, L_3] = L_1(-iL_2) + (-iL_2)L_1 + iL_1L_2 + iL_2L_1 = 0}$

=> má smysl hledat společné vlastní vektory L^2 a L_3 .. velmi důležité při popisu sféricky symetrických fyzikálních soustav

1 postup: využití konkrétního tvaru operátorů na $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ $\hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$, $\hat{X}_i = x_i \cdot$, převedení do sférických souřadnic(r, ϑ, φ) => $\boxed{\hat{L}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}^2 = -\left[\frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)\right]}$

dále hledání spektra $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ a spol. vlastních vektorů

snadno lze nalézt spektrum $\hat{L}_3$ .. $-i\frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \vartheta, \varphi) = \lambda \psi(r, \vartheta, \varphi)$ => $\boxed{\psi = f(r, \vartheta) e^{+i\lambda\varphi}}$

požadavek jednoznačnosti def. $\psi(r, \vartheta, \varphi)$: $\psi(r, \vartheta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ => $\boxed{\lambda = m \in \mathbb{Z}}$

=> spektrum $\hat{L}_3$ tvoří celá čísla .. kvantování momentu hybnosti

hledání spol. vl. vektorů $\hat{L}^2, \hat{L}_3$ a spektra $\hat{L}^2$ => řešení netriviálních diferenciálních rovnic

> Výsledek: Spektrum $\hat{L}^2$ je tvořeno čísly tvaru $l(l+1)$, $l \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, při daném l může $\hat{L}_3$ nabývat hodnot $\{-l, .., l\}$, spol. vlastní vektory se obvykle značí $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ a nazývají kulové funkce.

Pozn: $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$, $Y_{1-1}(\vartheta, \varphi) = \sin\vartheta\, e^{-i\varphi}$, $Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \cos\vartheta$, $Y_{11}(\vartheta, \varphi) = \sin\vartheta\, e^{i\varphi}$

$Y_{2-2}(\vartheta, \varphi) = \sin^2\vartheta\, e^{-2i\varphi}$, $Y_{2-1}(\vartheta, \varphi) = \sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{-i\varphi}$, $Y_{20}(\vartheta, \varphi) = (3\cos^2\vartheta - 1)$, $Y_{21}(\vartheta, \varphi) = \sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{i\varphi}$,

$Y_{22}(\vartheta, \varphi) = \sin^2\vartheta\, e^{2i\varphi}$

2. postup – vyjádření komutačních relací ~~ve~~ pomocí posunovacích operátorů

$$\boxed{\hat L_\pm = \hat L_1 \pm i \hat L_2} \quad \Rightarrow \quad [\hat L^2, \hat L_\pm] = 0 \quad (\Leftarrow [L^2, \hat L_i] = 0)$$

$$[\hat L_3, \hat L_\pm] = i\hat L_2 \pm i(-i\hat L_1) = \pm(\hat L_1 \pm i\hat L_2) = \pm \hat L_\pm$$

$$[\hat L_+, \hat L_-] = [\hat L_1 + i\hat L_2, \hat L_1 - i\hat L_2] = 2\hat L_3$$

$$\hat L_1 = \frac{1}{2}(\hat L_+ + \hat L_-) \qquad \hat L_2 = \frac{i}{2}(\hat L_- - \hat L_+)$$

$$\Rightarrow \hat L^2 = \frac{1}{4}(\cancel{\hat L_+^2} + \hat L_+\hat L_- + \hat L_-\hat L_+ + \cancel{\hat L_-^2}) - \frac{1}{4}(\cancel{\hat L_-^2} - \hat L_-\hat L_+ - \hat L_+\hat L_- + \cancel{\hat L_+^2}) + \hat L_3^2 = \frac{1}{2}(\hat L_+\hat L_- + \hat L_-\hat L_+) + \hat L_3^2$$

$$\boxed{= \hat L_-\hat L_+ + \hat L_3 + \hat L_3^2 \ , \text{ resp. } = \hat L_+\hat L_- - \hat L_3 + \hat L_3^2}$$

$[\hat L_+, \hat L_-] = ..$

předpokládejme, že je stav $|\psi\rangle$: $\hat L^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, $\hat L_3|\psi\rangle = \mu|\psi\rangle$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$\Rightarrow \hat L^2(\hat L_\pm|\psi\rangle) = \hat L_\pm \hat L^2|\psi\rangle = \lambda \hat L_\pm|\psi\rangle, \ \hat L_3(\hat L_\pm|\psi\rangle) = (\hat L_\pm \hat L_3 \pm \hat L_\pm)|\psi\rangle = (\mu \pm 1)\hat L_\pm|\psi\rangle$$

⇒ působením $\hat L_\pm$ na $|\psi\rangle$ získáme vlastní vektor $\hat L^2$ se stejnou hodnotou λ a $\hat L_3$ s vlastní hodnotou $\mu \pm 1$ nebo nulový vektor ⇒ nutno spočítat normu

$$\| L_\pm|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi| L_\mp L_\pm|\psi\rangle = \langle\psi|(L^2 - L_3^2 \mp L_3)|\psi\rangle = (\lambda - \mu^2 \mp \mu)\langle\psi|\psi\rangle = \lambda - \mu(\mu \pm 1)$$

$\|\ \|^2 \geq 0$ z def. ⇒ $\lambda \geq \mu(\mu \pm 1)$ pro obě znaménka

působením $\hat L_\pm$ zvyšujeme, resp. snižujeme μ o 1, aby nebyla po opakovaném působení $\hat L_+$ porušena nerovnost $\lambda \geq \mu(\mu+1)$, musí existovat stav $|\psi\rangle$ s maximálním μ pro dané λ takový, že $\hat L_+|\psi\rangle = 0$
⇒ $\lambda = \mu(\mu+1)$. Působením $\hat L_-$ na $|\psi\rangle$ dostáváme postupně stavy se stejným λ, ale s vl. hodnotou $\hat L_3$ rovnou $\mu - k$, musí platit $\lambda \geq (\mu-k)(\mu-k-1)$. Tato nerovnice neplatí $\forall k \in \mathbb{N}$
⇒ musí existovat k takové, že $(\hat L_-)^k|\psi\rangle \neq 0$, $(\hat L_-)^{k+1}|\psi\rangle = 0$ ⇒ z výpočtu normy výše plyne

$$0 = \lambda - (\mu-k)(\mu-k-1) \xrightarrow{\lambda = \mu(\mu+1)} \cancel{\mu^2} + \mu - \cancel{\mu^2} + 2k\mu - k^2 + \mu - k \Rightarrow (1+k)(k-2\mu) = 0$$

⇒ $\boxed{k = 2\mu}$ ⇒ μ musí být celé nebo polocelé, ozn. $\mu = m$, $\lambda = l(l+1)$.

⇒ Z komutačních relací plyne následující omezení na spektrum: $\hat L^2$ může mít vlastní čísla tvaru $\boxed{l(l+1), \text{ kde } 2l \in \mathbb{N} \cup \{0\}}$, při dané hodnotě $\hat L^2$ lze naměřit hodnoty $\hat L_3$ rovné $\boxed{-l, .., l}$.
Označíme-li vlastní funkce $|l,m\rangle$: $\hat L^2|l,m\rangle = l(l+1)|l,m\rangle$, $\hat L_3|l,m\rangle = m|l,m\rangle$, lze $\boxed{|l,m\rangle \text{ až na normalisaci najít jako } (\hat L_-)^{l-m}|l,l\rangle}$, stavy $|l,l\rangle$ je nutno určit řešením dif. rovnic, pokud existují. $|l,m\rangle$ lze po vyjádření ve tvaru obvyklých funkcí ztotožnit s Y_{lm}.

Z dřívějšího odvození víme, že $\hat L_3$ má pouze celočíselné vlastní hodnoty. Stavy s $l = k + \frac{1}{2}$, $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ a tedy poločís. m tedy neexistují v úloze založené na naší definici $\hat L_i$. Takto definovaný moment hybnosti se nazývá orbitální. Poločíselný moment hybnosti se objevuje v úlohách zahrnujících tzv. spin, druh vnitřního momentu hybnosti kvantových částic nemající klasickou analogii. Ten splňuje stejné komutační relace, ale není definován pomocí algebrodif. operátorů a setkáme se s ním později.

7) Sféricky symetrické potenciály, vodíkový atom

sféricky symetrické potenciály ... $V(\vec{x}) = V(r)$

v tomto případě je vhodné hamiltonián vyjádřit ve sférických souřadnicích

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\right)\right] + \hat{V}(r)}$$

uvědomíme-li si, že $\hat{L}_3 = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$, $\hat{L}^2 = -\left[\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\right]$

tzv. odstředivý potenciál, viz klasický pohyb v centrálně symetrickém poli

$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\hat{L}^2\right) + \hat{V}(r)$, též ze záměnnosti derivací je vidět, že $[\frac{\partial}{\partial r}, \hat{L}^2] = 0 = [\frac{\partial}{\partial r}, \hat{L}_3]$ a dále z nezávislosti $\hat{V}(r)$ na ϑ, φ $[\hat{V}(r), \hat{L}_3] = [\hat{V}(r), \hat{L}^2] = 0$

$\Rightarrow \boxed{[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_3] = [\hat{L}^2, \hat{L}_3] = 0}$ ukazuje se, že $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ tvoří ÚMP

Heuristické zdůvodnění: diferenciální rce pro vlastní funkce: $\hat{L}_3$ určí závislost na φ ($\sim e^{im\varphi}$), $\hat{L}^2$ určí následně závislost na ϑ ($\Rightarrow$ kulové funkce Y_{lm}), zbývající volnost ve funkční závislosti spol. vlastní funkce, tj. závislost na r, je určena rovnicí $\hat{H}\psi = E\psi$

Společné vlastní vektory tedy mají tvar $\boxed{\psi_{E,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}$, tvar $R(r)$ a spektrum možných energií závisí na konkrétním tvaru $V(r)$

Tímto způsobem lze hledat např. vlastní funkce 3-rozměrného harmonického oscilátoru. Tuto úlohu řešit nebudeme, jeho energetické spektrum lze totiž určit již ze znalosti spektra jednorozměrného harmonického oscilátoru. Hamiltonián lze totiž rozložit na 3 operátory, z nichž každý v jednom z kartézských směrů působí jako hamiltonián 1-rozměrného harm. oscilátoru a v ostatních jako jednotkový operátor $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$, $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{M\omega^2}{2}x_i^2$.

Vlastní funkce příslušející energii $E = E_1 + E_2 + E_3$ pak mají tvar $\psi_{E_1,E_2,E_3}(\vec{x}) = \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(y)\psi_{E_3}(z)$

$(\hat{H}\psi = (\hat{H}_1\psi_{E_1}(x))\psi_{E_2}(y)\psi_{E_3}(z) + \psi_{E_1}(x)(\hat{H}_2\psi_{E_2}(y))\psi_{E_3}(z) + \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(y)(\hat{H}_3\psi_{E_3}(z)) = (E_1 + E_2 + E_3)\psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(y)\psi_{E_3}(z)$.

Tímto způsobem zjistíme, že spektrum izotropního harmonického oscilátoru má tvar

$\boxed{E = \hbar\omega\left(\frac{3}{2} + n_1 + n_2 + n_3\right),\ n_i \in \mathbb{N}\cup\{0\}}$ a vidíme, že všechny excitované energetické hladiny jsou degenerované, tj. jedné energii přísluší více vlastních vektorů. Upozornění: takto nalezené vlastní vektory nejsou vlastními vektory $\hat{L}^2, \hat{L}_3$. Báze tvořená spol. vlastními vektory $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ je jinou bází $\mathcal{H}$

Vodíkový atom $\quad V(r) = -\frac{Q}{r} \qquad Q = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \qquad e = 1{,}602\cdot 10^{-19}\,C,\ \varepsilon_0 = 8{,}854\cdot 10^{-12}\,F m^{-1}$

pp. $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ tj. $\hat L^2 \psi(r,\vartheta,\varphi) = l(l+1)\,\psi(r,\vartheta,\varphi)$, $\hat L_3 \psi(r,\vartheta,\varphi) = m\,\psi(r,\vartheta,\varphi)$

=> rovnici pro vlastní funkce $\hat H$ lze psát ve tvaru

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(R''(r) + \frac{2}{r}R'(r)\right) + V_{eff}(r)R(r) - E R(r)\right]\cdot \cancel{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)} = 0} \quad \text{kde} \quad \boxed{V_{eff}(r) = -\frac{Q}{r} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{l(l+1)}{r^2}}$$

efektivní potenciál

1. úprava: substituce $R(r) = \frac{1}{r}\chi(r)$ => $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2M}\chi''(r) + V_{eff}(r)\chi(r) - E\chi(r) = 0}$

2. úprava: asymptotika pro $r\to\infty$ => $\chi(r) \sim e^{-r/a}$, $a = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2ME}}$, $E<0$ (použita podmínka integrability => $\chi(r)\to 0$ $r\to\infty$)
zanedbání členů s r ve jmenovateli

=> vhodná další substituce $\chi(r) = f(r)e^{-r/a}$

$$\Rightarrow \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{a}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2M}{\hbar^2}Q\frac{1}{r}\right)f(r) = 0$$

Obdobně jako pro jednorozměrný harmonický oscilátor hledáme řešení ve tvaru řady, pp. $\boxed{f(r) = r^s\sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k,\ c_0\neq 0}$
s nepředpokládáme nutně celočíselné

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty}\left\{c_k(s+k)(s+k-1)r^{s+k-2} - \frac{2(s+k)}{a}c_k r^{s+k-1} - l(l+1)c_k r^{s+k-2} + \frac{2M}{\hbar^2}Qc_k r^{s+k-1}\right\} = 0$$

=> po posunutí indexu v $\sum_k \cdot r^{s+k-1}$ a formálním dodefinování $c_{-1} = 0$ přepíšeme ve tvaru

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{c_k\left[(s+k)(s+k-1) - l(l+1)\right] - c_{k-1}\left[\frac{2(s+k-1)}{a} - \frac{2M}{\hbar^2}Q\right]\right\} r^{s+k-2} = 0$$

=> rekurentní vztah $\boxed{c_k\left[(s+k)(s+k-1) - l(l+1)\right] = c_{k-1}\left[\frac{2(s+k-1)}{a} - \frac{2M}{\hbar^2}Q\right]}$

Protože výsledná vlastní funkce musí být kvadraticky integrabilní => podmínky na chování $\chi(r)\to 0$ pro $r\to 0$ a $\chi(r)\to 0$ pro $r\to\infty$ (odvození je složitější, vynecháváme, též souvisí se samosdružeností (jinak by stačilo $s>-\frac{1}{2}$)

$r\to 0$ => $f(r)\sim c_0 r^s$ => $s>0$ => $c_{-1} = 0 \wedge c_0\neq 0$ vede na rovnici $s(s-1) = l(l+1)$

=> $s = l+1 \vee s = -l$ nesplňuje s tj. $\boxed{s = l+1}$

$r\to\infty$ => $c_k/c_{k-1} \sim \frac{2}{a(s+k)}$ => $f(r) \sim \sum_k \frac{1}{k!}\left(\frac{2}{a}r\right)^k = e^{\frac{2r}{a}}$ => opět problém s integrabilitou

=> místo nekonečné řady musí být polynom => $c_k\neq 0$, $c_{k+1} = 0$ => $\boxed{\frac{2(s+k)}{a} - \frac{2M}{\hbar^2}Q = 0}$

podmínka na a => $a = \frac{2(k+l+1)\hbar^2}{2mQ}$ => $E = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2(k+l+1)^2}$

tj. spektrum energií vodíkového atomu je $\boxed{E = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2 n^2}}$, $n\in\mathbb{N}$ $\quad (n = k+l+1)$

8) Vodíkový atom

Tvrzení: Společné vlastní vektory operátorů $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ jsou v případě vodíkového atomu parametrizovány třemi celými čísly:

1) hlavní kvantové číslo $\boxed{n \in \mathbb{N}}$, určuje hodnotu energie .. $E_n = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2 n^2}$

po dosazení numerických hodnot $E_n = -\frac{13{,}6\,eV}{n^2}$,

2) vedlejší kvantové číslo $\boxed{l \in \mathbb{N},\ 0 \leq l < n}$, určuje hodnotu kvadrátu momentu hybnosti $L^2 = l(l+1)$, často z historických důvodů hodnoty l značeny písmeny $s, p, d, f,$

3) magnetické kvantové číslo $\boxed{m \in \mathbb{Z},\ |m| \leq l}$ určuje hodnotu třetí složky momentu hybnosti $L_z = m$.

Spektrum možných energií vysvětluje pozorované čárové spektrum záření vodíkového atomu - vodíkový atom může vyzařovat pouze fotony o energii rovné rozdílu mezi dvěma energetickými hladinami $E_\nu = (13{,}6\,eV) \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$, tj. frekvence vyzařovaného světla je $\boxed{\nu = \frac{E_\nu}{2\pi\hbar} = \frac{MQ^2}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)}$

... odpovídá empiricky nalezenému Rydberg-Ritzovu principu, pro pevné $n_1 = 1, 2, \dots$ dostáváme frekvence odpovídající experimentálně měřeným frekvencím Lymanovy, Balmerovy, .. série spektrálních čar.

Degenerace energetických hladin:

na n-té energetické hladině je $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = \cancel{2}(n-1)\frac{n}{\cancel{2}} + n = \underline{\underline{n^2}}$ ON vlastních vektorů

to, že hodnota energie vodíkového atomu nezávisí na l je důsledkem konkrétního tvaru potenciálu, neboť neplatí pro libovolný sfér. symetrický potenciál (naproti nezávislost E na m samozřejmě zůstává) .. tzv. náhodná degenerace

=> při přibližných výpočtech energetických hladin jiných atomů je obvyklé brát v prvním zpřesnění v úvahu průměrné sfér. symetrické elstat. pole od ostatních elektronů

=> energie hladin např. $2s$ a $2p$ se pro tyto atomy liší (tzv. sejmutí náhodné degenerace)

(Další zpřesnění výpočtu může vést např. i k závislosti E na m, ale to je řádově menší efekt.) díky nesymetrii potenciálu

Spojitá část spektra

nalezené spektrum není úplné, existuje ještě spojitá část spektra s vlastními čísly z intervalu $\langle 0, \infty)$. Odpovídající nenormované vlastní stavy lze najít výše naznačeným postupem s uvolněním podmínek na kvadr. integrabilitu vlastních funkcí (chování v ∞ jako $e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}$). Takováto řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice fyzikálně odpovídají situacím, kdy elektron není vázán v okolí atomového jádra (největší pravděpodobnost jeho nalezení je v ∞ vzdálenosti od centra). Stavy tohoto typu jsou relevantní při popisu rozptylových experimentů na atomech, srážkách iontů apod. Těmito problémy se nebudeme z časových důvodů zabývat.

Pozn: Pro výpočty je vhodné znát konkrétní tvar vlastních funkcí. Ten lze nalézt dosazením konkrétního $a = \frac{n\hbar^2}{mQ}$ do dříve uvedených rekurentních vztahů pro koeficienty řady $f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^{k+l+1}$ a obvyklým provedením všech substitucí. Výsledkem jsou následující vlastní funkce pro $n = 1, 2$ apod.

$n = 1 \quad l = 0 \quad (1s) \qquad m = 0 \qquad \psi_{100} = C_{100}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$, kde $a_0 = \frac{\hbar^2}{mQ}$

$n = 2 \quad l = 0 \quad (2s) \qquad m = 0 \qquad \psi_{200} = C_{200} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$

$\qquad\quad l = 1 \quad (2p) \qquad m = -1 \qquad \psi_{21-1} = C_{21-1} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\vartheta\, e^{-i\varphi}$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad m = 0 \qquad \psi_{210} = C_{210} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\vartheta$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad m = 1 \qquad \psi_{211} = C_{211} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\vartheta\, e^{i\varphi}$

9) Časový vývoj

Časový vývoj systému z počátečního stavu $|\psi_0\rangle$ v čase t_0 je popsán Schrödingerovou rovnicí

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat H|\psi(t)\rangle}$$ s počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$.

Významnou roli hrají stavy s přesně určenou energií $\boxed{\hat H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle}$ $\Longrightarrow |\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}|\psi_E\rangle$ je řešení Schrödingerovy rovnice neboť $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}E|\psi_E\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\hat H|\psi_E\rangle = \hat H e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}|\psi_E\rangle =$
$= \hat H|\psi_E(t)\rangle$, tj. jako fyzikální stav se stav s přesně určenou energií s časem nemění, mění se pouze fáze, která je neměřitelná... stacionární stavy

Pozn: z tohoto důvodu se rovnice $\hat H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$ nazývá bezčasová Schrödingerova rovnice

Pokud je známa ON báze Hilbertova prostoru $\mathcal H$ tvořená vlastními vektory $\hat H$ $\{|\psi_j\rangle\}_j$, $\hat H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$, lze určit časový vývoj libovolného stavu $|\psi_0\rangle$ takto: $|\psi_0\rangle$ rozložíme do této báze $|\psi_0\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi_0\rangle$ a využijeme linearity Schrödingerovy rovnice ($i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi_1(t)\rangle = \hat H|\varphi_1(t)\rangle$, $i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi_2(t)\rangle = \hat H|\varphi_2(t)\rangle$
$\Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}(\alpha|\varphi_1(t)\rangle+\beta|\varphi_2(t)\rangle) = \hat H(\alpha|\varphi_1(t)\rangle+\beta|\varphi_2(t)\rangle)$, $\forall\alpha,\beta\in\mathbb C$) k nalezení řešení s počáteční podmínkou $|\psi_0\rangle$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_j |\psi_j(t)\rangle\langle\psi_j|\psi_0\rangle = \sum_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t-t_0)}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi_0\rangle}$$

Ověření: $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \sum_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t-t_0)} \underbrace{E_j|\psi_j\rangle}_{\hat H|\psi_j\rangle}\langle\psi_j|\psi_0\rangle = \hat H\sum_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t-t_0)}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\psi_0\rangle = \hat H|\psi(t)\rangle$

Časový vývoj středních hodnot

Př. $\hat A$ nezávisející explicitně na čase, např. X_i, P_i, J_i, H, jak se s časem mění střední hodnoty $\langle\hat A\rangle_{|\psi(t)\rangle}$; tj. např. jak se mění střední hodnota polohy volné částice – měla by v jistém smyslu popisovat rovnoměrný přímočarý pohyb.

Nejprve pomocná odvození: $\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = ?$ $\quad \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\varphi\rangle = \frac{d}{dt}\overline{\langle\varphi|\psi(t)\rangle} = \overline{\langle\varphi|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle} =$
$= \overline{\langle\varphi|-\frac{i}{\hbar}\hat H|\psi(t)\rangle} = \frac{i}{\hbar}\overline{\langle\varphi|\hat H\psi(t)\rangle} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat H^+|\varphi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat H|\varphi\rangle$, $\forall\varphi$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat H$

dále $\boxed{\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\frac{i}{\hbar}\hat H - \frac{i}{\hbar}\hat H|\psi(t)\rangle = 0}$

$\Rightarrow$ normalizace se s časem nemění, pokud je normalizovaná poč. podmínka, budou normalizovány odpovídající stavové vektory i pro všechny následující časy, nadále pp. $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) = \\ = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[\hat{H},\hat{A}]|\psi(t)\rangle}$$

Tj. $$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \left\langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\right\rangle_{|\psi(t)\rangle}}$$

Definujeme-li tzv. <u>časovou derivaci operátoru</u> $\frac{d\hat{A}}{dt}$ způsobem $\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \left\langle\frac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle_{|\psi(t)\rangle}$

$\forall\, \psi(t)$ vyhovující Schröd. rovnici (a na nichž je $\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ definován), vidíme, že

$\boxed{\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]}$ pokud $\hat{A}$ není explicitně závislé na čase, pak $\boxed{\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}}$

Tímto způsobem v QM definujeme pozorovatelné, jež v klasické mechanice jsou vyjádřeny jako derivace jiných pozorovatelných, k nimž již známe odpovídající operátor. Např. operátor rychlosti částice v potenciálním poli $\frac{d\hat{X}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{X}_i]$.

<u>Integrály pohybu</u>

<u>Integrály pohybu v QM jsou ty pozorovatelné, jejichž střední hodnoty v libov. stavu nezávisejí na čase.</u>

Tj. pozorovatelná A nezávisející explicitně na čase je integrál pohybu $\Leftrightarrow \frac{d\hat{A}}{dt} = 0 \Leftrightarrow \boxed{[\hat{H},\hat{A}] = 0}$

$\Rightarrow$ <u>máme-li stav s přesně určenou hodnotou $\hat{A}$</u>: $\hat{A}|\psi_0\rangle = a|\psi_0\rangle$ v čase t_0, pak stav $|\psi(t)\rangle$, který z něj vznikne časovým vývojem dle Schröd. rovnice bude <u>v libovolném čase t opět stavem s přesně určenou hodnotou pozorovatelné $\hat{A}$</u>, neboť $\frac{d}{dt}\hat{A}|\psi(t)\rangle = \hat{A}\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{A}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\hat{H}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle =$
$= -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\hat{A}|\psi(t)\rangle)$, též $\frac{d}{dt}a|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}a|\psi(t)\rangle$, v čase $t = t_0$ $\hat{A}|\psi(t_0)\rangle = a|\psi(t_0)\rangle \Rightarrow$ z věty o $\exists_1$ řeš. dif. rovnice máme $\hat{A}|\psi(t)\rangle = a|\psi(t)\rangle$

To spolu s poč. podmínkou $\hat{A}|\psi_0\rangle = a|\psi_0\rangle$ dokazuje, že $\hat{A}|\psi(t)\rangle = a|\psi(t)\rangle$, $\forall t$.

($\Rightarrow$ užitečnost ÚMP obsahujících H pro jednoduchý popis časového vývoje, např. $\{H, L^2, L_z\}$ pro sfér. symetr. potenciály)

<u>Ehrenfestovy teorémy</u>

$$\boxed{\frac{d\hat{X}_j}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{X}_j] = \frac{i}{\hbar}\left[+\frac{\hat{P}_k\hat{P}_k}{2m},\hat{X}_j\right] = \frac{2}{2}\frac{1}{m}\frac{i}{\hbar}\left(-i\hbar\,\delta_{jk}\,\mathbb{1}\right)\hat{P}_k = \frac{\hat{P}_j}{m}}, \text{ tj. } \boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{X}_j\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \left\langle\frac{\hat{P}_j}{m}\right\rangle_{|\psi(t)\rangle}}$$

$$\boxed{\frac{d\hat{P}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{P}_i] = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{V}(x), -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right] = -\frac{\partial\hat{V}(x)}{\partial x_i}}, \text{ tj. } \boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{P}_i\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \left\langle-\frac{\partial\hat{V}(x)}{\partial x_i}\right\rangle_{|\psi(t)\rangle}}$$

Tyto rovnice připomínají obdobným způsobem zapsané rovnice klasické mechaniky a naznačují, že rovnice klasické mechaniky vyplývají z QM jako rovnice pro střední hodnoty pozorovatelných P_i, X_j, za předpokladu, že $\Delta_{|\psi(t)\rangle}(\hat{X}_i)$, $\Delta_{|\psi(t)\rangle}(\hat{P}_i)$ jsou nepozorovatelně malé a že $V(x)$ se znatelně nemění na oblasti lokalizace částice. Pak

10) Částice v elektromagnetickém poli, spin

klasicky $H = \frac{1}{2M}(\vec P - e\vec A)^2 + e\varphi$ kalibrační transf. $\vec A' = \vec A + \nabla\chi$, $\varphi' = \varphi - \frac{\partial}{\partial t}\chi$

nemění $\vec B = \text{rot}\,\vec A$, $\vec E = -\frac{\partial \vec A}{\partial t} - \nabla\varphi$ a tedy ani pohyb. rovnice

při QM popisu pohybu částice ve vnějším, tj. zadaném EM poli přiřadíme pozorovatelným operátory,
$\hat{\vec P} = -i\hbar\nabla$, $\hat{\vec A} = \vec A$, $\hat\varphi = \varphi$.

$$\boxed{\hat H = \frac{1}{2M}\Big(\hat{\vec P}^2 \underbrace{- e\hat{\vec P}\cdot\hat{\vec A} - e\hat{\vec A}\cdot\hat{\vec P}}_{} + e^2\hat{\vec A}^2\Big) + e\hat\varphi}$$

v tomto případě lze splnit i $\hat H = \hat H$

není jasné, zda tento člen má mít uvedený tvar nebo např. $-2e\hat{\vec A}\cdot\hat{\vec P}$ ... <u>problém uspořádání</u>

Abychom se problému uspořádání vyhnuli, zvolíme kalibraci $\nabla\cdot\vec A = 0 \Rightarrow \hat{\vec P}\cdot\hat{\vec A} = \hat{\vec A}\cdot\hat{\vec P}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat H = \frac{1}{2M}\Big(-\hbar^2\Delta + 2ie\hbar\vec A\cdot\nabla + \underbrace{e^2\vec A^2}_{}\Big) + e\varphi \qquad \nabla\cdot\vec A = 0}$$

obvykle (pro slabá pole) lze zanedbat ve srovnání s $2i\hbar\vec A\cdot\nabla$

<u>Konstantní magnetické pole</u> $\vec B \Rightarrow \vec A = \frac12 \vec B\times\vec X$, je splněna kalibrační podmínka $\nabla\cdot\vec A = 0$

$$\Rightarrow \hat H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + e\frac{i\hbar}{2M}(\vec B\times\vec X)\cdot\nabla + e\varphi = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + e\varphi - \left(\frac{e\hbar}{2M}\right)\vec B\cdot\vec L \qquad (\vec L = -i\vec X\times\vec\nabla)$$

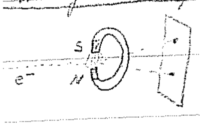
<u>Jak takové magn. pole pozmění energetické hladiny sfér. symetr. potenciálu?</u>

vybereme souřadnice tak, že $\vec B \parallel$ osa $\vec z$, pp. známe $\psi_{n,l,m}$ v nepřítomnosti magn. pole (ozn. $H_0 = H|_{\vec B=0}$)

$\Rightarrow \hat H_0\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm}$, $\hat L_z\psi_{nlm} = m\psi_{nlm}$, $\hat L^2\psi_{nlm} = l(l+1)\psi_{nlm}$, $\vec B = (0,0,B_z)$

$$\boxed{\hat H\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} - \left(\frac{e\hbar}{2M}\right)B_z\cdot m\,\psi_{nlm} = \left(E_n - m\left(\frac{e\hbar}{2M}\right)B_z\right)\psi_{nlm}}$$

$\Rightarrow \psi_{nlm}$ zůstávají vlastními vektory $\hat H$, ale energie <u>závisí též na m</u> ($\Leftarrow \hat H$ není sfér. symetrický, $[\hat H, \hat L_x] \neq 0$)
každá energetická hladina určená n, l se rozštěpila na $(2l+1)$ podhladin o konstantních <u>rozestupech</u> $\left(\frac{e\hbar}{2M}\right)|\vec B|$
(též se značí $\mu_0|\vec B|$, kde $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2M}$ je pro $M = m_e$ tzv. <u>Bohrův magneton</u>)
... <u>sejmutí degenerace</u> ... 1-dim. vlastní podprostory $\hat H$ (pokud $\hat H_0$ nemá vyšší symetrii, tzv. náhodnou degeneraci)
... ovšem <u>nesouhlas s experimentem</u> (pozorování rozštěpení spektrálních čar, <u>Zeemanův jev</u>), ve skutečnosti je větší počet podhladin, štěpí se i základní stav $\Rightarrow$ přehlédli jsme nějaký další stupeň volnosti $\Rightarrow$ tzv. vnitřní moment hybnosti neboli <u>spin</u> (moment hybnosti proto, že by měl s $\vec B$ interagovat obdobně jako $\vec L$) ... $\hat{\vec S}$, s ním je spojen vnitřní magnetický moment $\hat{\vec\mu}_{vnitř} = \alpha\cdot\vec S$



Stern - Gerlachův pokus - pozorování průchodu proudu elektronů s praktický nulovou hybností nehomogenním magn. polem

$\Rightarrow$ na stínítku překvapivě 2 maxima $\Rightarrow$ musí $\exists$ nějaký vnitřní stupeň volnosti, tj. spin a měl by nabývat pouze 2 hodnot

Komut. relacím momentu hybnosti vyhovují 2×2 herm. matice $\frac{1}{2}\sigma_i$, $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$[\frac{1}{2}\sigma_i, \frac{1}{2}\sigma_j] = i\varepsilon_{ijk}\frac{1}{2}\sigma_k$, $\sum_{k=1}^{3}\sigma_k\sigma_k = \frac{3}{4}\mathbb{1} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\mathbb{1}$, tj. $\boxed{l = \frac{1}{2}}$, spektrum $\frac{1}{2}\sigma_i = \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$

$\Rightarrow$ zřejmě $\frac{1}{2}\sigma_i$ mohou odpovídat složkám operátoru $\hat{\vec{S}}$, jak je ale spojit s ostatními stupni volnosti?

$$\mathcal{H} \stackrel{!}{=} L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2 = \left\{ \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix} \middle|\ \psi, \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \right\}, \quad \left(\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \varphi_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \right) \stackrel{!}{=} (\psi_1, \psi_2) + (\varphi_1, \varphi_2)$$

formálně: je-li $\{|i\rangle_1\}_{i\in N}$ báze $\mathcal{H}_1$, $\{|j\rangle_2\}_{j\in N}$ báze $\mathcal{H}_2$, pak $\boxed{\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2}$ je Hilbertův prostor s bází $\{|i,j\rangle = |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2\}_{i,j\in N}$

a skalárním součinem $\langle i,j | k,l \rangle = \langle i|k \rangle \langle j,l \rangle = \delta_{ik}\delta_{jl}$ ... tenzorový součin Hilbertových prostorů

Pozn: $\dim \mathcal{H}_1 = n_1$, $\dim \mathcal{H}_2 = n_2 \Rightarrow \dim \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = n_1 \cdot n_2$

Pozn: obvykle značíme $(|\varphi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2)^+ = \langle\psi|_2 \otimes \langle\varphi|_1$, tj. $\langle i,j| = \langle j|_2 \otimes \langle i|_1$

Operátorům známým z dřívějška přiřadíme na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$ operátor $\hat{A} \to \begin{pmatrix} \hat{A} & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix}$, naopak spinu přiřadíme operátor $\boxed{\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}}$, který na funkce z $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ tvořící složky $\begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix}$ působí jako identický operátor

Př: $S_1 \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \varphi \\ \psi \end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ ÚMP pro vodíkový atom je např. H, L^2, L_z, S_z, $|n,l,m,s\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{n,l,m} \cdot \delta_{s,+\frac{1}{2}} \\ \psi_{n,l,m} \cdot \delta_{s,-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix}, & s = \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix}, & s = -\frac{1}{2} \end{cases}$

ale lze vybrat např. též $H, L^2, L_z, S_x \Rightarrow |n,l,m,+\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix}$, $|n,l,m,-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ -\psi_{nlm} \end{pmatrix}$

Pozn: $\vec{S}^2 = \frac{3}{4}\mathbb{1} \Rightarrow \vec{S}^2$ nemá smysl měřit, v teorii je pevně určeno: elektrony jsou částice se spinem $\frac{1}{2}$

mohou existovat částice s jiným spinem, např. W se spinem 1, graviton se spinem 2 apod., ale vždy je hodnota $\vec{S}^2$ určena druhem částice

Interakce spinu s EM polem

$\vec{\mu}_{vnitř} = 2\mu_0 \cdot \vec{S}$ (2. plyne z experimentu nebo relativistické QM) $\Rightarrow$ interakce v $\hat{H}$: $-\vec{\mu}_{vnitř} \cdot \vec{B} = -\begin{pmatrix} \mu_0 B_z & \mu_0 B_x - i\mu_0 B_y \\ \mu_0 B_x + i\mu_0 B_y & -\mu_0 B_z \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \hat{H}$ už není tvaru $\hat{H}_0 \otimes \mathbb{1} = \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_0 \end{pmatrix}$, závisí na spinu

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + e\varphi - \mu_0 \hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} - \mu_0 B_z, & -\mu_0 B_x + i\mu_0 B_y \\ -\mu_0 B_x - i\mu_0 B_y, & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + e\varphi - \mu_0 \hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} + \mu_0 B_z \end{pmatrix}$$

Pauliho hamiltonián

př. $\vec{B} = (0,0,B_z) \Rightarrow \hat{H}$ diagonální

$\hat{H}\begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix} = (E_{n,l} - \mu_0 m B_z - \mu_0 B_z)\begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix} = (E_{n,l} - \mu_0(m+1)B_z)\begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix}$, $\hat{H}\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix} = (E_{n,l} - \mu_0(m-1)B_z)\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ základní stav (a jiné stavy s $l=0$) se rozštěpí na 2 energ. hladiny s rozestupem $2\mu_0|\vec{B}|$, ostatní hladiny se štěpí na $(2l+1)+2$ podhladin s rozestupy $\mu_0|\vec{B}|$, z toho pouze 4 krajní ($E_{n,l} \pm \mu_0(l+1)B_z$) hladiny jsou nedegenerované

... experimentálně potvrzený popis normálního Zeemanova jevu (tj. $|\vec{B}|$ dostatečně silné), anomální Zeemanův jev ... interakce mezi $\vec{L}$ a $\vec{S}$

11) Systémy více částic

Jaký Hilbertův prostor se má přiřadit systému složenému z více částic?

Př: Mějme systém dvou rozlišitelných (např. elektron + neutron) neinteragujících ($\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$) částic. Předpokládejme, že $\hat{H}_1$ i $\hat{H}_2$ mají čistě bodové spektrum a že energetické hladiny jsou nedegenerované $\Rightarrow$ ON báze $\mathcal{H}_1$ $\{|i\rangle_1\}_{i\in N}$, ON báze $\mathcal{H}_2$ $\{|j\rangle_2\}_{j\in N}$

Protože částice neinteragují, je celková energie rovna součtu energií $\Rightarrow \forall E = E_i^1 + E_j^2$ musí existovat vlastní vektor $|i,j\rangle$ (obecně není žádný spec. vztah mezi $\hat{H}_1$ a $\hat{H}_2$ $\Rightarrow \exists_1$ rozklad $E = E_i^1 + E_j^2$.)

$\Rightarrow$ potřebujeme Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ s bází indexovanou $i \in N, j \in N$ a s názorným rozkladem na $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$

$\Rightarrow$ vhodný objekt je tenzorový součin

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad \text{báze } \mathcal{H}: \ \{|i,j\rangle \equiv |i\rangle_1 |j\rangle_2 \equiv |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2\}_{i,j\in N}$$

$$\hat{H}_1(|\varphi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2) \stackrel{!}{=} (\hat{H}_1|\varphi\rangle_1) \otimes |\psi\rangle_2, \quad \hat{H}_2(|\varphi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2) \stackrel{!}{=} |\varphi\rangle_1 \otimes (\hat{H}_2|\psi\rangle_2)$$

$$\hat{H}|i,j\rangle = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)|i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2 = (\hat{H}_1|i\rangle_1) \otimes |j\rangle_2 + |i\rangle_1 \otimes (\hat{H}_2|j\rangle_2) = (E_1 + E_2)|i,j\rangle$$

Obecně definujeme:

> Systému více rozlišitelných částic přiřadíme Hilbertův prostor, který je tenzorovým součinem Hilbertových prostorů přiřazených jednotlivým částicím
>
> $$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_k.$$
>
> Pozorovatelné, která popisuje vlastnosti pouze j-té částice (např. hybnost, poloha j-té částice) přiřadíme operátor, který na $\mathcal{H}_j$ působí jako odpovídající jednočásticový operátor a na ostatních složkách tenzorového součinu působí jako jednotkový operátor.

Pokud systém více částic obsahuje interakci mezi částicemi, hamiltonián již <u>není</u> součtem jednočásticových hamiltoniánů! (tj. existují pozorovatelné, jejichž operátory nejsou součtem jednočásticových operátorů)

Př: <u>Vodíkový atom</u> jako systém proton + elektron s Coulombovskou interakcí (bez magn. pole $\Rightarrow$ nebereme v úvahu spin), $H = \frac{\vec{P_1}^2}{2M_p} + \frac{\vec{P_2}^2}{2M_e} - \frac{Q}{|\vec{x_1} - \vec{x_2}|}$

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \equiv L^2(\mathbb{R}^6, d^6x)$$

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M_p}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2M_e}\Delta_2 - \frac{Q}{|\vec{x_1} - \vec{x_2}|}} \qquad \Delta_1 = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_{1i}^2}, \ \Delta_2 = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_{2i}^2}$$

Vybereme vhodnější souřadnice – přechod do těžišťové soustavy

$$X_i = \frac{1}{M_p+M_e}\left(M_p x_{1i} + M_e x_{2i}\right) \qquad x_i = x_{1i} - x_{2i}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x_{1i}} = \frac{M_p}{M_p+M_e}\frac{\partial}{\partial X_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial}{\partial x_{2i}} = \frac{M_e}{M_p+M_e}\frac{\partial}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad |\vec{x}_1 - \vec{x}_2| = |\vec{x}|$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_{i=1}^{3}\left[-\frac{\hbar^2}{2M_p}\left\{\frac{M_p^2}{(M_p+M_e)^2}\frac{\partial^2}{\partial X_i^2} + \cancel{2\frac{M_p}{M_p+M_e}\frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial x_i}} + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right\} - \frac{\hbar^2}{2M_e}\left\{\frac{M_e^2}{(M_p+M_e)^2}\frac{\partial^2}{\partial X_i^2} - \cancel{2\frac{M_e}{M_p+M_e}\frac{\partial^2}{\partial X_i\,\partial x_i}} + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right\}\right] - \frac{Q}{|\vec{x}|}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2(M_p+M_e)}\Delta_X - \frac{\hbar^2(M_e+M_p)}{2\,M_e\cdot M_p}\Delta_x - \frac{Q}{|\vec{x}|}$$

$\Rightarrow$ v nových souřadnicích $\hat{H}$ vypadá jako součet dvou "1-částicových" operátorů. Jedna část popisuje pohyb systému jako celku a vypadá jako hamiltonián volné částice o hmotnosti $M_e + M_p$ – není zajímavá, druhá část popisuje pohyb částice o redukované hmotnosti $\frac{M_e\cdot M_p}{M_e+M_p}$ v Coulombovském potenciálu $-\frac{Q}{r}$. Další postup výpočtu je shodný s dřívějším výpočtem energ. spektra částice ve vnějším Coulomb. poli, do výsledku je nutné dosadit $M = \frac{M_e M_p}{M_e+M_p}$ $(< M_e)$.

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{M Q^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{M_e M_p\, Q^2}{2\hbar^2 n^2 (M_e+M_p)} \overset{\left(\text{Taylor } \frac{1}{1+x} \sim 1-x\right)}{\approx} -\frac{M_e Q^2}{2\hbar^2 n^2}\left(1 - \frac{M_e}{M_p}\right) = -\frac{R}{n^2}\left(1-\frac{M_e}{M_p}\right)} \qquad R = \frac{M_e Q^2}{2\hbar^2}$$

Tato odchylka od původní aproximace byla spektroskopicky naměřena, ještě výraznější je změna hodnot energie, pokud $M_1 \sim M_2$ (mezoatom = proton + μ mezon, pozitronium = elektron + pozitron)

Systémy nerozlišitelných částic

V mikrosvětě nejsme schopni částice stejného druhu (např. elektrony) vzájemně rozlišit. Tento experimentální fakt musíme zahrnout do našeho matematického popisu.

2 nerozlišitelné částice $\quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2,\ \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$, def. $\hat{P}_{12}:\ \hat{P}_{12}(|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \Rightarrow \hat{P}_{12}^2 = \mathbb{1}$

$$\hat{P}_{12}^{+}:\ \langle\beta|\otimes\langle\alpha|\left(\hat{P}_{12}^{+}|\varphi\rangle\otimes|\psi\rangle\right) = \overline{\langle\psi|\otimes\langle\varphi|\left(\hat{P}_{12}|\alpha\rangle\otimes|\beta\rangle\right)} = \overline{\left(\langle\psi|\otimes\langle\varphi|\right)\left(|\beta\rangle\otimes|\alpha\rangle\right)} = \overline{\langle\varphi|\beta\rangle\langle\psi|\alpha\rangle} = \left(\langle\beta|\otimes\langle\alpha|\right)\left(|\psi\rangle\otimes|\varphi\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \hat{P}_{12}^{+} = \hat{P}_{12} \qquad = \langle\beta|\otimes\langle\alpha|\left(\hat{P}_{12}|\varphi\rangle\otimes|\psi\rangle\right)$$

Při měření v mikrosvětě vlastně měříme různé střední hodnoty pozorovatelných v různých stavech, nerozlišitelnost znamená, že střední hodnota v libov. stavu a stavu, který získáme působením operátoru P_{12} je stejná, tj. $\forall\,|a\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\hat{P}_{12}\hat{A}\hat{P}_{12}|a\rangle \Rightarrow \hat{A} = \hat{P}_{12}\hat{A}\hat{P}_{12}\ /\ \hat{P}_{12} \Rightarrow \hat{A}\hat{P}_{12} = \hat{P}_{12}\hat{A} \Rightarrow \boxed{[\hat{A},\hat{P}_{12}] = 0}$$

tj. všechny fyzikální pozorovatelné komutují s operátorem výměny částic $\hat{P}_{12}$ $\Rightarrow$ pokud na počátku byl systém ve vlastním podprostoru $\hat{P}_{12}$, zůstane v něm navždy (žádné měření či časový vývoj stav nepřevede mimo tento podprostor) $\Rightarrow$ veškerá fyzika se děje na vlastních podprostorech P_{12}, nikoliv na celém $\mathcal{H}$. Též vyplývá z postulátu, že fyzikálnímu stavu je přiřazen 1-dim podprostor Hilb. prostoru (jinak bychom stavu přiřadili např. $\underbrace{[|\varphi\rangle\otimes|\psi\rangle,\ |\psi\rangle\otimes|\varphi\rangle]}_{}{}_{\lambda}$).

12) Systémy nerozlišitelných částic

2 částice, $\mathcal{H}_1 \cong \mathcal{H}_2$, př. ON báze $\mathcal{H}_1$ $\{|j\rangle\}_{j\in\mathbb{N}}$

$\hat{P}_{12}$: $\hat{P}_{12}(|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$, $\hat{P}_{12}^2 = \mathbb{I}$, $\hat{P}_{12}^\dagger = \hat{P}_{12}$, $[\hat{P}_{12}, \hat{A}] = 0$ $\forall \hat{A}$ fyzikální pozorovatelné

vlastní podprostory $\hat{P}_{12}$: S_2 = podprostor s OG bází $\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|i\rangle \otimes |j\rangle + |j\rangle \otimes |i\rangle\right)\right\}_{i \geq j \in \mathbb{N}}$

A_2 = —— " —— $\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|i\rangle \otimes |j\rangle - |j\rangle \otimes |i\rangle\right)\right\}_{i > j \in \mathbb{N}}$

To, zda částice "žijí" v S_2 nebo A_2 je určeno jejich druhem, konkrétně spinem.
Z kvantové teorie pole vyplývá, že pro popis <u>2 nerozlišitelných částic s celočíselným spinem</u> (např. fotony, intermediální bosony, jádra helia) je třeba použít symetrický podprostor S_2. Takové částice se nazývají <u>bosony</u> (vyhovují Bose–Einsteinově statistice).
Pro popis <u>2 nerozlišitelných částic s poločíselným spinem</u> (např. elektrony, protony, neutrony) je třeba použít antisymetrický podprostor A_2. Takové částice se nazývají <u>fermiony</u> (vyhovují Fermi–Diracově statistice).

Máme-li systém více, řekněme N, nerozlišitelných částic, zavedeme na $\overbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}^{N\text{-krát}}$ operátory výměny i-té a j-té částice $\hat{P}_{ij}|\varphi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_i\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_j\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_N\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_j\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_i\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_N\rangle$, $i < j \leq \mathbb{N}$ (a lineárně dodefinujeme na celé $\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$). Pak podobně jako pro 2 částice musí operátor libovolné fyzikální pozorovatelné $\hat{A}$ komutovat s $\hat{P}_{ij}$, $\forall i, j$, tj. $\boxed{[\hat{A}, \hat{P}_{ij}] = 0}$

Veškerá fyzika se tedy bude opět odehrávat na vlastních podprostorech $\hat{P}_{ij}$, existují pouze 2 společné vlastní podprostory ($[\hat{P}_{ij}, \hat{P}_{kl}] \neq 0$, např. $\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\gamma\rangle = |\beta\rangle \otimes |\gamma\rangle \otimes |\alpha\rangle$
$\neq \hat{P}_{13}\hat{P}_{12}|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\gamma\rangle = |\gamma\rangle \otimes |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$, takže nelze celé $\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}$ rozložit na Σ spol. vlastních podprostorů $\hat{P}_{ij}$)

S_N = podprostor s OG bází $\left\{\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in P_N \text{ - grupa permutací}} |j_{\pi_1}\rangle \otimes |j_{\pi_2}\rangle \otimes \dots \otimes |j_{\pi_N}\rangle\right\}_{j_{\pi_1} \leq j_{\pi_2} \leq \dots \leq j_{\pi_N} \in \mathbb{N}}$

... prostor úplně symetrických vektorů ... pro popis <u>bosonů</u>

A_N = podprostor s ON bází $\left\{\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in P_N} \operatorname{sgn}\pi \cdot |j_{\pi_1}\rangle \otimes |j_{\pi_2}\rangle \otimes \dots \otimes |j_{\pi_N}\rangle\right\}_{j_{\pi_1} < j_{\pi_2} < \dots < j_{\pi_N} \in \mathbb{N}}$

... prostor úplně antisymetrických vektorů ... pro popis <u>fermionů</u>

Důsledek: <u>Pauliho vylučovací princip</u>
Dva identické fermiony, např. dva elektrony, nemohou být ve stejném stavu, tj. např. ve stavu popsaném stejnými zadanými hodnotami ÚMP. Dk: 1-částicový stav $|\varphi\rangle \Rightarrow$ 2 částicím ve stejném stavu je přiřazen $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle - |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = 0$

2N Pro naši práci s vektory popisujícími systémy stejných fermionů vyjádřenými nejč. pomocí 1-částicových stavových funkcí je výhodné zavést tzv. Slaterovy determinanty

$$|\psi_1,\dots,\psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_1(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \dots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad \left(\text{obecně } = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\psi_1\rangle_1 & \dots & |\psi_1\rangle_N \\ \vdots & & \\ |\psi_N\rangle_1 & \dots & |\psi_N\rangle_N \end{vmatrix}, \right.$$

kde index mimo $|\,\rangle$ značí pořadí v tenzorovém součinu)

na př. $\psi_i(x) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$

Důsledky pro strukturu atomů, periodická tabulka prvků

Jestliže započítáme vliv vzájemné interakce mezi elektrony v atomu, dostaneme následující pořadí energetických hladin

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s

Protože elektrony jsou fermiony, Pauliho vylučovací princip říká, že na každé hladině s daným n, l může být maximálně $2(2l+1)$ elektronů ($2(2l+1)$ je počet různých stavů s daným n, l, tj. počet různých kombinací magn. kvant. čísla m a spinu s).

Degenerace:	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s ...
	2	2	6	2	6	2	10	6	2

Pokud jsou atomy v základním, tj. energeticky nejnižším, stavu, jsou obsazeny nejnižší energetické hladiny. Např. chlor má obsazeny hladiny 1s, 2s, 2p, 3s a 5 elektronů v 3p. Protože chemických reakcí se účastní prakticky výhradně elektrony z od jádra nejvzdálenější slupky, je tímto vysvětleno obdobné chování prvků uvedených ve stejném sloupci periodické tabulky, např. fluoru (1s, 2s, 5e^- v 2p) a chloru. Chemických reakcí se elektrony účastní tím ochotněji, čím větší je jejich pravděpodobnost nalezení ve velké vzdálenosti od jádra. To vysvětluje větší reaktivnost prvků uvedených ve sloupci v periodické tabulce níže (např. větší reaktivnost chloru ve srovnání s fluorem nebo sodíku ve srovnání s lithiem či vodíkem). Naopak lze z energetických důvodů očekávat, že sloučeniny atomů v daném sloupci výše umístěných budou stabilnější.

13) Důsledky pro chování bosonů

Mějme systém N identických bosonů ve stejném stavu $|a\rangle$, stavový vektor $\overbrace{|a\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle}^{N\text{-krát}}$ ... stav $|2\rangle$

Spočítáme pravděpodobnost, že systém ve stavu, v němž $N-1$ bosonů je ve stavu $|a\rangle$ a jeden je v jiném stavu $|x\rangle$ přejde do stavu $|2\rangle$:

Předpokládáme, že $\langle x|x\rangle = 1$, $\langle a|a\rangle = 1$, $|\langle x|a\rangle| \in \langle 0,1\rangle$

$$\Rightarrow \quad |1\rangle = \alpha \cdot \big(\underbrace{|x\rangle \otimes |a\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle + |a\rangle \otimes |x\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle + \dots + |a\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle \otimes |x\rangle}_{N \text{ členů}}\big)$$

$$\boxed{P_{|1\rangle \to |2\rangle}} = \frac{|\langle 1|2\rangle|^2}{\langle 1|1\rangle\langle 2|2\rangle} = \frac{|(\langle a|\otimes \dots \otimes \langle a|)(|x\rangle \otimes |a\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle + \dots + |a\rangle \otimes \dots \otimes |a\rangle \otimes |x\rangle)|^2}{(\underbrace{\langle x|x\rangle\langle a|a\rangle^{N-1} + \langle x|a\rangle\langle a|x\rangle\langle a|a\rangle^{N-2} + \dots}) \cdot 1} =$$

N^2 členů, N je rovno $\langle x|x\rangle \cdot \langle a|a\rangle^{N-1} = 1$, ostatní jsou rovny $\langle a|x\rangle\langle x|a\rangle \cdot \langle a|a\rangle^{N-2} = |\langle a|x\rangle|^2$

$$= \boxed{\frac{|N \langle a|x\rangle|^2}{N + (N^2 - N)|\langle a|x\rangle|^2}}$$

$\Rightarrow$ ověříme konzistenci $|x\rangle = |a\rangle \Rightarrow P_{|2\rangle \to |2\rangle} = \frac{N^2}{N^2} = 1$, $\langle a|x\rangle = 0 \Rightarrow P_{|1\rangle \to |2\rangle} = 0$ O.K.

Pokud $|\langle a|x\rangle|^2$ je nenulové, ale dost malé, lze ve jmenovateli odhadnout $(N^2 - N)|\langle a|x\rangle|^2 << N$ a máme

$$\boxed{P_{|1\rangle \to |2\rangle} \approx N \cdot |\langle a|x\rangle|^2}$$

Pravděpodobnost, že boson přejde do stavu v němž již je $N-1$ bosonů, je N-krát větší než pravděpodobnost, že přejde do stejného stavu za situace, že v tomto stavu žádný boson není. Vše prostředí lze interpretovat jako stále prováděné měření, tj. systém se stále převádí do stavů více. bosonů.

$\Rightarrow$ Pokud máme soubor bosonů při velmi nízké teplotě, kdy lze zanedbat náhodné excitace bosonů do vyšších energ. hladin vlivem tepelných oscilací, budou bosony s velkou pravděpodobností skoro všechny ve stejném stavu ... <u>Bose-Einsteinův kondenzát</u>.

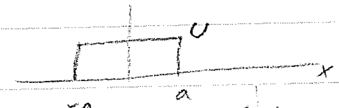
$\Rightarrow$ <u>supratekutost He^4</u> ... He^4 se chová jako boson (jeho celkový moment hybnosti je součtem momentů hybnosti 6 fermionů ($2p, 2n, 2e^-$) a tedy nutně celočíselný (6× poloviční číslo dává celé číslo)

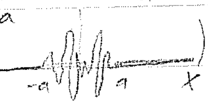
$\Rightarrow$ kapalné helium při teplotách blízkých absolutní nule je tvořeno atomy ve stejném stavu a pohybuje se proto bez vnitřního tření ... ideální "nuda"

tj. nevazká kapalina

Pozn: izotop He^3 se naopak chová jako fermion (5 × poloviční = poloviční) a tedy není supratekuté (pokud nevytvoří dvouatomové molekuly) supravodivost – při nízkých teplotách se v některých materiálech tvoří slabě vázané stavy dvou elektronů, tzv. Cooperovy páry. Tyto Cooperovy páry pak vytvářejí systém bosonů. Pokud je více těchto bosonů uvedeno do jednoho stavu např. vnějším elektrickým polem, s velkou pravděpodobností do tohoto stavu budou přecházet i další páry a pohybovat se látkou jako celek, s malou pravděpodobností přechodu do jiných stavů, tj. s malou pravděpodobností rozptylu na atomech, tj. bez tření. Toto chování je základem supravodivosti.

Tunelový jev

nejjednodušší příklad rozptylu, tj. máme částici na přímce s potenciálem 

v čase $t << 0$ předpokládáme, že stav částice je popsán vlnovým balíkem (nebo [illegible] ) lokalizovaným v oblasti $X << 0$, zajímá nás chování částice pro $t \to \infty$.

Pro popis se zavádí koeficient průchodu T a koeficient odrazu R.

$$T = \lim_{t\to\infty} \frac{\int_a^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}, \qquad R = \lim_{t\to\infty} \frac{\int_{-\infty}^{a} |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}$$

V praxi nás zajímá závislost koeficientů na střední počáteční hybnosti p (či energii $E = \frac{p^2}{2m}$) $T(p), R(p)$.

Při řešení lze nejprve nalézt nenormalizovatelné vlastní stavy s energií E a asymptotickým chováním

$$\psi_E(x)\Big|_{x\to-\infty} = e^{\frac{ipx}{\hbar}} + B(p)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}, \qquad \psi_E(x)\Big|_{x\to+\infty} = C(p)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

a řešení hledat jako superpozici těchto stacionárních stavů. Pro počáteční vlnové balíky dobře lokalizované v poloze i hybnosti ($\Delta x \Delta p \simeq \frac{\hbar}{2}$) lze ukázat, že koeficienty průchodu a odrazu jsou určeny $B(p)$ a $C(p)$ pro p rovnou střední počáteční hodnotě hybnosti,

$$T(p) = |C(p)|^2 \qquad R(p) = |B(p)|^2 \qquad R(p) + T(p) = 1$$

Např. pro potenciál $V = \begin{cases} U & |x| \le a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$ při označení $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$, $k = \frac{p}{\hbar}$, $E = \frac{p^2}{2m}$

lze vyřešit rovnici $H\psi_E = E\psi_E$ s výše uvedeným chováním mimo interval $(-a,a)$ (a s chováním uvnitř jako $De^{\kappa x} + Ee^{-\kappa x}$) a nalézt $C(p), B(p)$ a tedy $T(p), R(p)$

Výsledek pro $T(p)$ je

$$T(p) = \frac{16|\kappa|^2 k^2}{\left|e^{2\kappa a}(k+i\kappa)^2 + e^{-2\kappa a}(\kappa+ik)^2\right|^2}$$

Tento výraz je nenulový pro $k\kappa \neq 0$, kromě těchto spec. případů ($E=0, E=U$) tedy vždy pro $E<U$ i $E>U$ dochází k částečnému odrazu a částečnému průchodu dopadající částice.

19) Odvození koeficientu průchodu obdélníkovou potenciálovou bariérou

$$\psi(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad x < -a \qquad \Rightarrow -\psi'' = k^2\psi = \frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$
$$\psi(x) = De^{\kappa x} + Ee^{-\kappa x} \qquad x \in (-a, a) \qquad \Rightarrow -\psi'' = -\kappa^2\psi = \frac{2m(U+E)}{\hbar^2}\psi$$
$$\psi(x) = Ce^{ikx} \qquad x > a \qquad \Rightarrow -\psi'' = \frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

V bodech $x = \pm a$ požaduji spojitost a hladkost

$$\Rightarrow \quad e^{-ika} + Be^{ika} = De^{-\kappa a} + Ee^{\kappa a}$$
$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = \kappa(De^{-\kappa a} - Ee^{\kappa a})$$
$$De^{\kappa a} + Ee^{-\kappa a} = Ce^{ika}$$
$$\kappa(De^{+\kappa a} - Ee^{-\kappa a}) = ik\,Ce^{ika}$$

$$\Rightarrow \quad D = \tfrac{1}{2}e^{-\kappa a}\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)Ce^{ika}$$
$$E = \tfrac{1}{2}e^{\kappa a}\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)Ce^{ika}$$

$$\Rightarrow \quad e^{-ika} + Be^{ika} = \frac{C}{2}e^{ika}\left(\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-2\kappa a} + \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)e^{2\kappa a}\right)$$
$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = \frac{C}{2}e^{ika}\kappa\left(\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)e^{-2\kappa a} - \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)e^{2\kappa a}\right) \qquad / : ik$$
$+$

$$\Rightarrow \quad e^{-ika} = \frac{C}{4}e^{ika}\left(\underbrace{\left(\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) - i\frac{\kappa}{k}\left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)\right)}_{\frac{k\kappa + ik^2 - i\kappa^2 + k\kappa}{k\kappa} = \frac{-i(\kappa + ik)^2}{k\kappa}}e^{-2\kappa a} + \underbrace{\left(\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) + i\frac{\kappa}{k}\left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)\right)}_{\frac{k\kappa - ik^2 + i\kappa^2 + k\kappa}{k\kappa} = \frac{-i(k + i\kappa)^2}{k\kappa}}e^{2\kappa a}\right)$$

$$\Rightarrow \quad C = e^{-2ika} \cdot \frac{4ik\kappa}{\left(e^{2\kappa a}(k + i\kappa)^2 + e^{-2\kappa a}(\kappa + ik)^2\right)}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{T(p) = \frac{16\,|\kappa|^2 k^2}{\left(e^{2\kappa a}(k + i\kappa)^2 + e^{-2\kappa a}(\kappa + ik)^2\right)}}$$