

1 ELEMENTÁRNA KVANTOVÁ MECHANIKA

1.1 ÚVODNÁ POZNÁMKA

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

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

1.2 PREDMET KVANTOVEJ MECHANIKY

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

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

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

1.3 KVANTOVANIE ENERGIE AKO EMPIRICKÝ FAKT

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

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

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

Experimentálne je jednoznačne ukázané, že možné hodnoty energie atómu tvoria diskretnu množinu. Hovoríme, že energia atómov je kvantovaná. Ako príklad uvádzame možné hodnoty energie atómu vodíka na *obr. 1.1*. Pri znázorňovaní možných hodnôt energie je zvykom orientovať os, na ktorú vynášame energiu zvisle; možné hodnoty energie potom nazývame energetickými hladinami a hovoríme o „vyšších“ či „nižších“ hladinách. Ako je dobre známe, energia sústavy je určená až na aditívnu konštantu a pri určovaní energie atómu vodíka je zvykom voliť túto konštantu tak, aby energia sústavy protón – elektrón, ktoré sú oba v pokoji a veľmi ďaleko (∞) od seba, bola rovná nule. Ak z takejto začiatkovej situácie vznikne viazaný stav (atóm vodíka), príslušná väzbová energia sa uvoľní, napríklad v podobe žiarenia. Energia sústavy tým poklesne a v našej

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

konvencii bude záporná. Stav, ktorému na obrázku odpovedá najnižšia energia³ (−13,6 eV) nazývame základným stavom atómu vodíka, stavy s vyššou energiou nazývame excitovanými stavmi.



Obr. 1.1

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

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

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

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

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

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

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

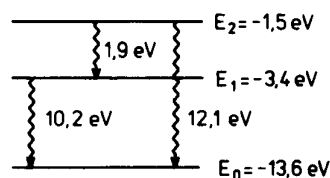
1. Atóm sa môže nachádzať iba v určitých diskkrétnych stavoch, ktorým prislúchajú diskkrétne hodnoty energií.

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

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

kde \hbar je Planckova konštanta.

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



Obr. 1.2

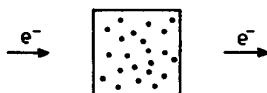
Tretí postulát sa nepodarilo úspešne použiť už pri výpočte spektra druhého najľahšieho prvku – hélia. Kvantovanie momentu hybnosti sa neskôr stalo jednou z podstatných črt kvantovej mechaniky, ale jeho vysvetlenie je dnes podstatne iné ako v Bohrovom modeli.

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

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

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

Zjednodušená základná myšlienka jedného z pokusov je znázornená na obr. 1.3. Zväzok elektrónov známej energie E prechádza cez zriedený plyn. Po prechode plynom budú mať niektoré elektróny energiu E , iné E' , ďalšie E'' atď. Podstatné je to, že zmena energie elektrónu je diskretná. Vysvetlenie je jednoduché: pri prechode zväzku elektrónov plynom dochádza k zrážkam elektrónov s atómami plynu. Pokiaľ sa pri týchto zrážkach nemení stav atómu, nebude sa meniť ani energia elektrónov.⁵ Ak sa však atóm pri zrážke excituje a prejde do stavu s vyššou energiou, potom elektrón stráca práve toľko energie, koľko treba na excitáciu atómu do príslušného vyššieho stavu. Rozdiely energií elektrónov ($E - E'$, $E - E''$ atď.), potom priamo udávajú rozdiely energií medzi excitovanými stavmi a základným stavom. Hodnoty namerané vo Franckových a Hertzových pokusoch boli opäť diskretné a rovnaké ako hodnoty získané zo spektier atómov.



Obr. 1.3

1.4 TYPICKÉ HODNOTY VELIČÍN V ATÓMOVEJ FYZIKE

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Pripomeňme si najprv jeden vzťah známy z klasickej fyziky. Predstavme si ľahkú klasickú časticu s nábojom $-e$ a hmotnosťou m pohybujúcu sa po kružnici o polomere r v Coulombovom poli budenou ťažkou časticou s nábojom e ,

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

nachádzajúcou sa v začiatku súradnicovej sústavy. Hmotnosť častice násobená dostredivým zrýchlením musí byť rovná elektrostatickej príťažlivej sile⁷

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

Po násobení oboch strán faktorom $r/2$ dostaneme

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

a pre celkovú energiu máme

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

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

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

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

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

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

Pokúsime sa teraz odhadnúť typické rýchlosti elektrónu v atóme vodíka, pretože tento odhad potrebujeme prinajmenšom na to, aby sme vedeli, či pohyb elektrónu musíme uvažovať ako relativistický (a to by sme museli, keby typické rýchlosti boli takého rádu ako je rýchlosť svetla), alebo či nám stačí nerelativistické

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

priblíženie. Na základe (1) a (2) očakávame, že rádovú veľkosť rýchlosti elektrónu v atóme vodíka možno odhadnúť zo vzťahu

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

Pre rádovú veľkosť rýchlosti odtiaľ dostávame

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

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

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

$$L \approx mvr$$

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

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

Rádová zhoda tejto veličiny s Planckovou konštantou

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

je isto nápadná.

Poznámka

Pozrime sa teraz na základné veličiny atómovej fyziky z trocha iného hľadiska. Predpokladáme, že v atóme bude mať dôležitú úlohu coulombovská interakcia, do ktorej vstupuje elementárny náboj v kombinácii Ke^2 (kde $K = 1/(4\pi\epsilon_0)$), ďalej bude dôležitá veľkosť hmotnosti elektrónu m_e a ak je dynamika sústavy kvantová, objaví sa v teórii určite Planckova konštanta \hbar . Rozmery týchto veličín sú po rade

$$[\hbar] = \text{Js} = \text{kg m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$[Ke^2] = \text{Nm}^2 = \text{kg m}^3 \text{ s}^{-2}$$

$$[m_e] = \text{kg}$$

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

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

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

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

Porovnaním rozmerov na obidvoch stranách dostaneme podmienky

$$1 = 2\alpha + 3\beta$$

$$0 = \alpha + \beta + \gamma$$

$$0 = \alpha + 2\beta$$

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

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

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

$$v_1 = \frac{Ke^2}{\hbar} = \frac{1}{137} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$E_1 = \frac{1}{2} \frac{m_e (Ke^2)^2}{\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$$

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

Predchádzajúca jednoduchá rozmerová analýza naznačuje, že v atómovej fyzike budú mať fyzikálne veličiny rozmeru dĺžky, rýchlostí a energie veľkosť rádové rovnú a_1 , v_1 , E_1 . Myslené je to tak, že pri jednoduchej teórii „šitej na mieru“ daného okruhu problémov je prirodzené dostať vo výsledkoch číselné

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

faktory typu $1/4$, 2 , $\pi/2$ a pod., ale je menej prirodzené prísť pre niektorú z veličín k výsledku typu $1,74192632 \cdot 10^{11}$. Ak je kvantová teória „šitá na mieru“ problémov atómovej fyziky, potom naozaj očakávame, že veličiny charakterizujúce štruktúru atómu, ktoré majú rozmery dĺžky, rýchlosti, energie a momentu hybnosti sú rádové rovné a_1 , v_1 , E_1 , \hbar . Pri riešení kvantovomechanických problémov je preto spravidla užitočné prejsť k bezrozmerným premenným, čo prakticky znamená, že dĺžku meriame v jednotkách a_1 , energiu v jednotkách E_1 atď. Toto je fyzikálny obsah viet typu „pomocou substitúcie.... prejdeme k bezrozmerným premenným“, s ktorými sa ešte viackrát stretneme pri riešení Schrödingerovej rovnice⁹ Výsledok získaný predchádzajúcou jednoduchou rozmerovou analýzou možno zhrnúť takto: najjednoduchšie veličiny s rozmermi dĺžky, rýchlosti, energie a momentu hybnosti skonštruované z veličín \hbar , Ke^2 , m_e majú veľkosti typické pre veľkosti základných veličín atómovej fyziky. O tom, že tento fakt je netriviálny sa najjednoduchšie presvedčíme tým, že skúsime niečo čo „nepracuje“. Predstavme si napríklad, že by sme chceli „vyrobiť“ *nekvantovú relativistickú* teóriu štruktúry atómu. Potom by základnými veličinami boli m_e , Ke^2 a rýchlosť svetla c (pretože teória by bola nekvantová, Planckova konštanta by nehrala podstatnú úlohu). V tejto situácii by sme pre jednoduchú veličinu s rozmerom energie získali výraz $m_e c^2 = 0,511 \cdot 10^6$ eV, pre veličinu s rozmerom dĺžky $Ke^2/m_e c^2 = 2,818 \cdot 10^{-15}$ m, pre rýchlosť, prirodzene, $c = 3 \cdot 10^8$ ms⁻¹ a pre moment hybnosti Ke^2/c , čo je približne 137-krát menšie ako Planckova konštanta \hbar .

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

1.5 KVANTOVÉ VLASTNOSTI ŽIARENIA

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

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

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

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

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

Ak fotónu priradíme $m_0 = 0$, dostaneme

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

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

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

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

1.6 VLNOVÉ VLASTNOSTI ČASTÍC

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

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

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

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

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

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

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

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

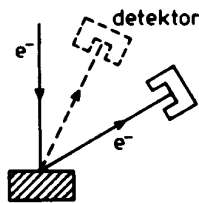
Tu vidno dôvod, prečo sa pri elektrónovom lúči v obrazovke televízora (čo je približne situácia odpovedajúca takto urýchlenným elektrónom) nemôžu prejavovať vlnové vlastnosti elektrónov. Rozmery elektród v obrazovkách sú totiž rádovo podstatne väčšie ako nájdená vlnová dĺžka. Pre elektróny urýchlenné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

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

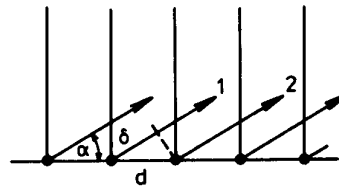
De Broglieho hypotéza prirodzene vysvetľuje pozorované zákonitosti v intenzitách rozptýlených elektrónov ako dôsledok interferencie de Broglieho vln odrazených od jednotlivých atómov v kryštáli. V uhlovom rozložení rozptýlených elektrónov je potom prirodzené očakávať typické interferenčné maximá a minimá.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

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

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



Obr. 1.4



Obr. 1.5

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

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

vlastnosti častíc boli vždy vo veľmi dobrej zhode s predpoveďami vyplývajúcimi z de Broglieho vzťahov.

1.7 KVANTOVÉ STAVY ELEKTRÓNU VIAZANÉHO NA ÚSEČKU

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

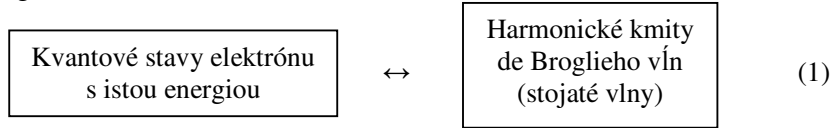
Predovšetkým si treba uvedomiť, že ak existuje vzťah medzi energiou častice a frekvenciou vlny, ktorá prislúcha k tejto častici, potom vysvetliť kvantovanie energie znamená nájsť dôvod pre to, že existujú iba diskkrétne možné hodnoty frekvencie vlnenia odpovedajúceho stavu častice.

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

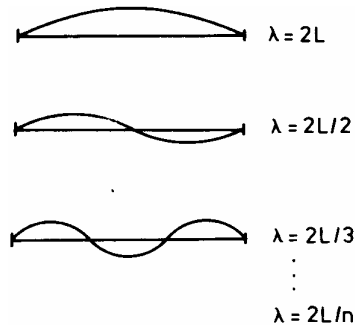
Túto myšlienku si ukážeme podrobnejšie na konkrétnom prípade elektrónu viazaného na úsečku a budeme uvažovať analógiu medzi stavmi takéhoto elektrónu a stojatými vlnami na strune určitej dĺžky. Príklad elektrónu viazaného na úsečku nie je celkom akademický. V prírode existujú dlhé lineárne organické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

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

neurčitá, má istú neurčitosť. V prípade de Broglieho vln istá hodnota frekvencie znamená istú hodnotu energie. Ak sa teda zaujímate o také kvantové stavy elektrónu, v ktorých je jeho energia striktne určená, prichádzame intuitívne k analógii



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



Obr. 1.6

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

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

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

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

a energia

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

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

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

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

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

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

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

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

pre energetické hladiny elektrónu pohybujúceho sa pozdĺž reťazca¹².

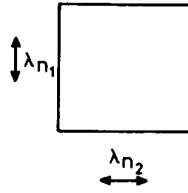
Dostali sme teda energie v elektrónvoltovej oblasti. To ukazuje, že sme na správnej ceste.

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

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

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

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



Obr. 1.7

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

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

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

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

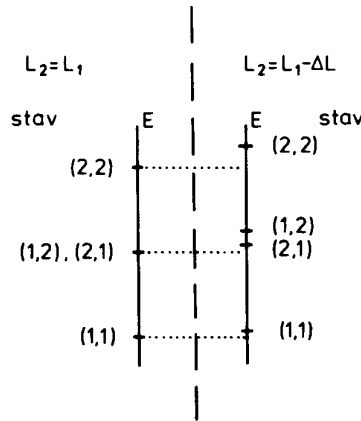
Všimnime si zaujímavú skutočnosť. Stavom líšiacim sa zámienou $n_1 \leftrightarrow n_2$, napríklad stavu $(n_1, n_2) = (3, 4)$ a stavu $(n_1, n_2) = (4, 3)$ odpovedá v analógii iný pohyb membrány, ale podľa vzťahu (4) majú tieto stavy rovnakú energiu. Pojem energetická hladina a pojem stav sústavy teda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

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

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

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

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



Obr. 1.8

1.8 SPIN A MAGNETICKÝ MOMENT ELEKTRÓNU

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

Podľa teórie elektromagnetického poľa je magnetický moment slučky s plochou S , obtekanej prúdom I daný vzťahom $\mu = IS$ a má tiež smer kolmý na rovinu slučky. Časticu pohybujúcu sa po kružnici si môžeme predstaviť ako slučku,

okolo ktorej tečie prúd rovný náboju prenesenému istým miestom na slučke za jednotku času. Takto máme

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

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

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

Odtiaľ vyplýva vzťah medzi magnetickým momentom a momentom hybnosti

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

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

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

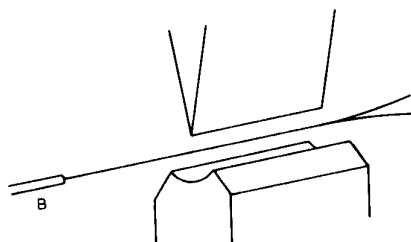
V týchto experimentoch prechádzal zväzok atómov s jediným valenčným elektrónom (zväzok atómov striebra) cez silne nehomogénne magnetické pole v usporiadaní, ktorého princíp je znázornený na *obr. 1.9*. Pólové nástavce magnetu majú taký tvar, aby medzi nimi vzniklo silne nehomogénne pole. Atómy s jediným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

Silu, ktorá pôsobí v nehomogénnom magnetickom poli na časticu s magnetickým momentom μ určíme takto: Energia častice vo vonkajšom poli je $W =$

$= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Sila pôsobiaca na časticu je $\mathbf{F} = -\text{grad } W$. Ak je \mathbf{B} rovnobežné s osou z , potom sila bude mať zložku iba v smere osi z a pre jej veľkosť máme

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

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



Obr. 1.9

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

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

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

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

čo sa líši faktorom 2 od klasického vzťahu (1). Gyromagnetický pomer μ_z/s_z bol meraný aj v experimentoch Einsteina a de Haasa (1915), ale interpretácia výsledkov tu bola pomerne zložitá a v prvých štúdiách sa objavili aj experimentálne chyby. Presná hodnota gyromagnetického pomeru bola touto metódou získaná až neskôr v prácach Becka (1919), Avidssona (1920) a Stewarta (1918). Úplné a presvedčivé vysvetlenie týchto výsledkov, potvrdzujúce vzťah (3) bolo dosiahnuté ešte o niekoľko rokov neskôr, po vysvetlení povahy feromagnetického stavu. Veľmi pekne napísaný a v mnohom poučný prehľad o experimentoch typu Einsteina a De Haasa možno nájsť v knižke Frenkela a Javelova¹³.

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

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

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

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

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

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

1.9 SPIN ELEKTRÓNU A PAULIHO PRINCÍP

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

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

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

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

Aby sme si všimli dôsledky Pauliho princípu, uvažujme sústavu piatich elektrónov viazaných na štvorec. Naivne by sme očakávali, že sústava skladajúca sa z piatich častíc má stav s najnižšou energiou (t. j. základný stav) taký, že všetkých päť častíc je v najnižšom jednočasticovom stave, teda v našom prípade by všetky elektróny mali byť v stave $(n_1, n_2) = (1, 1)$. To však protirečí Pauliho princípu. Ľahko prídeme na to, ako bude vyzeráť správny základný stav. Päť elektrónov obsadí napríklad stavy

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

Energia základného stavu bude

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

Zatiaľ čo naivne by sme očakávali

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

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

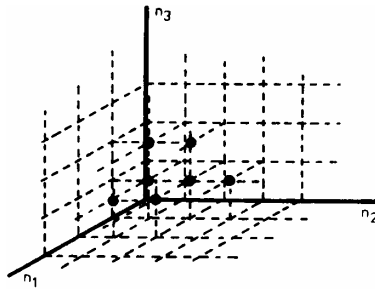
1.10 PLYN VOĽNÝCH ELEKTRÓNŮV

V praxi sa často stretávame so sústavou mnohých voľných elektrónov viazaných na ohraničenú oblasť priestoru. Typickým príkladom sú vodivostné elektróny

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

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

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



Obr. 1.10

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

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

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

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

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

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

Pre Fermiho energiu takto dostaneme

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

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

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

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

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

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

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

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

1.11 INTERPRETÁCIA VLNOVEJ FUNKCIE VLNOVÁ FUNKCIA A STAV ČASTICE

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

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

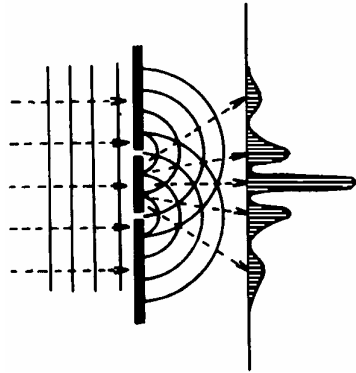
¹⁵ Klasický myšlienkový „dvojštrbinový experiment“ sotva možno rozobrať lepšie, ako to urobil Feynman [17], časť 2, kap. 37. Odporúčame čitateľovi prečítať si Feynmanov originálny výklad a oceniť tak krásu fyziky samej ako aj Feynmanovo pedagogické majstrovstvo.

škvrnu, ale videli by sme i to, že celkový interferenčný obraz vznikajúci dopadom mnohých elektrónov je rovnaký ako predtým. Výsledky by sa dali zhrnúť takto:

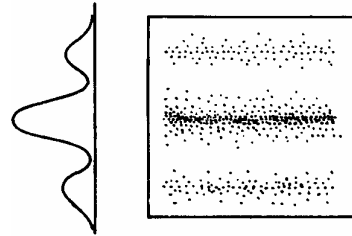
1. Zväzok elektrónov prechádzajúcich cez dvojštrbinu vyvolá presne taký interferenčný obraz, aký by sme očakávali od rovinatej vlny s vlnovou dĺžkou $\lambda = 2\pi\hbar/p$

2. Interferenčný obraz nezávisí od intenzity dopadajúceho zväzku, a preto nie je dôsledkom vzájomnej interakcie elektrónov zväzku.

3. Každý elektrón vyvolá „bodové“ sčernenie fotografickej platne a interferenčný obraz je súčtom sčernení spôsobených jednotlivými elektrónmi.



Obr. 1.11



Obr. 1.12

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

Historicky prvou bola interpretácia, považujúca de Broglieho vlny za vlnenie „hmotnostného poľa“ (Schrödinger). Elektrón sa tu považoval za vlnový balík¹⁶ hmotnostného poľa. Reálnosť hmotnostných vln sa chápala v klasickom zmysle a interpretácia sa stretla s vážnymi ťažkosťami. Hypotéza síce vysvetľuje vznik interferenčného obrazu, ale ťažko ju možno uviesť do súladu s tým, že každý elektrón vyvoláva „bodové“ sčernenie. Vlnový balík de Broglieho vln v interferenčnom pokuse má totiž rozmery celého interferenčného obrazu a jednotlivý elektrón by mal spôsobiť nie bodové sčernenie, ale celý (hoci slabý) interferenčný obraz.¹⁷

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

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

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

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

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

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

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

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

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

S podmienkou typu (2) sa budeme často stretávať a budeme ju nazývať *podmienkou normovanosti* a o vlnovej funkcii, ktorá ju spĺňa budeme hovoriť, že je normovaná. V našom prípade bude vlnová funkcia normovaná ak pre dosiaľ

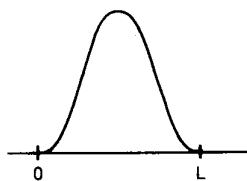
¹⁸ O motivácii tohto predpokladu poznamenajme, že napríklad sčernenie fotoplatne pri dopade svetelnej vlny je úmerné jej intenzite, ktorá je daná druhou mocninou amplitúdy vlnenia. Pretože vlnová funkcia nezodpovedá nejakému reálnemu hmotnému vlneniu, nenazývame $\psi(\mathbf{r}, t)$ amplitúdou vlny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

neurčenú konštantu A platí $|A| = \sqrt{2/L}$. Zvoľme pre určitosť $A = \sqrt{2/L}$. Hustota pravdepodobnosti nájsť elektrón v okolí bodu x na úsečke je potom podľa Bornovej interpretácie

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

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

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



Obr. 1. 13

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

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

V naivnej analógii s mechanickými kmitmi struny by sme predpokladali závislosť

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

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

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

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

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

kde

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

kde $\Phi(x)$ už nezávisela od času.

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

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

1.12 PRINCÍP SUPERPOZÍCIE

Pri diskusii odrazu elektrónov od kryštálu v článku 1.6 i pri diskusii dvojštrbinového experimentu v článku 1.11 sme už hovorili o tom, že de Broglieho vlny interferujú rovnako, ako by interferovali klasické vlny s tou istou vlnovou dĺžkou. Pri formálnejšom opise by sme interferenciu v dvojštrbinovom experimente opísali takto. Uvažujme nejaký bod na fotografickej doske, jeho polohu označme \mathbf{r} . Predstavme si, že pri pokuse zakryjeme štrbinu „1“. Nech v tomto usporiadaní stavu

častice v nejakom čase t_0 odpovedá vlnová funkcia $\psi_1(\mathbf{r}, t_0)$. Ak by sme naopak zakryli štrbinu „2“, príslušnému stavu v čase t_0 by odpovedala vlnová funkcia $\psi_2(\mathbf{r}, t_0)$. Ak sú obidve štrbiny pri pokuse otvorené, potom fakt, že sa na fotoplatni objaví interferenčný obrazec, ukazuje, že v tomto prípade stavu častice v okamihu t_0 musí byť priradená vlnová funkcia¹⁹

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

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

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

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

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

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

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

Uveďme si na jeho ilustráciu niekoľko príkladov.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

kde δ_{mn} je Kroneckerov symbol

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

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

S využitím (3) dostaneme pre koeficienty c_n jednoduchú podmienku

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

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

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

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

Pozrime sa teraz na fyzikálny význam stavov, ktorým sú priradené vlnové funkcie (2). Stacionárne stavy sú význačné tým, že im odpovedá určitá hodnota energie sústavy. Ak v superpozícii (2) sú nenulové aspoň dva koeficienty c_n , potom predpokladáme, že stav, ktorému je priradená vlnová funkcia (2) nebude mať

určitú hodnotu energie, hovoríme o neurčitosti energie takého stavu. V našej mechanickej analógii s kmitajúcou strunou takýmto stavom odpovedajú kmity struny, ktoré sú superpozíciou stojatých vln, ktorým prislúchajú rôzne vlnové dĺžky a frekvencie. O takýchto kmitoch struny sme v článku 1.7 hovorili, že ich frekvencia je neurčitá. Podľa de Broglieho hypotézy o súvise energie a frekvencie má teda stav, ktorému prislúcha vlnová funkcia (2) neurčitú energiu. Experimentálny význam tohto tvrdenia si priblížime v článku 1.14.

Ako druhý príklad na ilustráciu princípu superpozície uvažujeme voľnú časticu v jednorozmernom prípade. Stacionárnym stavom v tomto prípade prislúcha nielen určitá hodnota energie ale aj hybnosti a vlnové funkcie, ktoré im napr. v čase $t = 0$ prislúchajú, podľa (11.10) sú

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

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

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

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

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

1.13 VZŤAH NEURČITOSTI

V klasickej mechanike je stav častice v istom okamihu daný jej polohou a rýchlosťou, alebo, čo je to isté, jej polohou a hybnosťou. Ukážeme si teraz, že v tomto bode sa kvantová mechanika od klasickej podstatne líši: neexistuje totiž

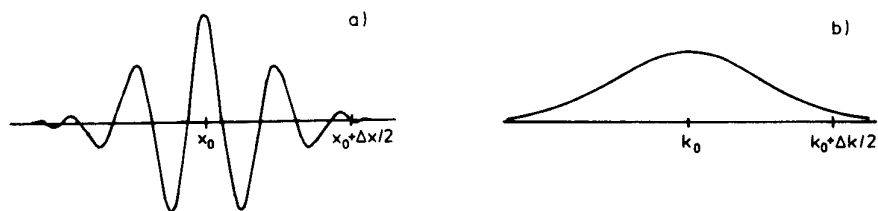
²⁰ Funkcia $\psi(x)$ musí v skutočnosti spĺňať niektoré podmienky, aby sa dala vyjadriť v tvare (8). Ich presnejšou formuláciou sa tu nebudeme zaoberať. Vzťah (8) je zovšeobecnením rozkladov známym z teórie Fourierových radov. Tam sa ukazuje, že „každú“ funkciu danú na intervale dĺžky L môžeme rozložiť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

kvantovomechanický stav častice, v ktorom by bola súčasne určená aj poloha aj hybnosť tejto častice. Presnejšia matematická formulácia tohto tvrdenia je obsiahnutá v *Heisenbergovom vzťahu neurčitosti*. Formálne odvodenie tohto vzťahu si ukážeme až v nasledujúcej kapitole, tu sa obmedzíme len na kvalitatívnu diskusiu a uvedieme niekoľko ilustrácií. Ukážeme si, že neexistuje vlnová funkcia, o ktorej by sme mohli predpokladať, že by bola priradená takému stavu, v ktorom je poloha i hybnosť častice súčasne určená. Usúdime z toho potom, že takýto stav vôbec neexistuje.

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

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

takú aby príslušná hustota pravdepodobnosti $|\psi(x)|^2$ bola od nuly rôzna len v nejakom malom intervale dĺžky Δx . Hodnota Δx potom zrejme reprezentuje neurčitost' polohy častice v stave, ktorému je priradená vlnová funkcia (1). Vlnové funkcie, ktoré sú v uvedenom zmysle lokalizované do nejakej malej priestorovej oblasti sa niekedy nazývajú vlnovými balíkmi. Príklad²¹ takého vlnového balíka je na obr. 1.14a. Na obrázku je znázornená len reálna časť vlnovej funkcie, predpokladáme však, že aj jej imaginárna časť je nenulová len v úzkom intervale dĺžky Δx . Reálna časť funkcie $c(k)$, odpovedajúca balíku z obrázka 1.14a je znázornená na obr. 1.14b. Vidíme, že funkcia $c(k)$ je nenulová v istom intervale k -priestoru o dĺžke Δk . Znamená to, že vlnočet prislúchajúci vlnovej funkcii (1) nie je presne



Obr. 1.14

určený, hodnota Δk reprezentuje mieru jeho neurčitosti. Podľa de Broglieho hypotézy o súvisi vlnočtu a hybnosti ($k = p/\hbar$) potom usudzujeme, že v stave, ktorému odpovedá vlnová funkcia (1) nie je hybnosť častice presne určená, jej

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

neurčitost' je $\Delta p = \Delta k/\hbar$. Ak by sa nám podarilo skonštruovať vlnovú funkciu, pre ktorú by neurčitosti Δx aj Δk mohli byť ľubovoľne malé, potom by sme mohli povedať, že takáto vlnová funkcia prislúcha stavu s určenou polohou aj hybnosťou častice.

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

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

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

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

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

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

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



Obr. 1.15

Odčítaním oboch rovníc a násobením 4π máme

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Pre klasickú časticu platí

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

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

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

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

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

Dôležitý interval v priestore hybnosti potom bude

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

Odtiaľ opäť máme

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

a vzťah neurčitosti (4) je splnený.

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

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

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

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

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

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

Celková energia oscilátora je daná ako súčet kinetickej a potenciálnej energie

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

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

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

a teda

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

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

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

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

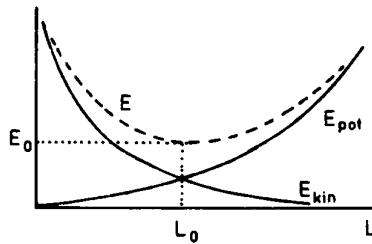
Lahko zistíme, že výraz (12) nadobúda minimálnu hodnotu pre

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

a príslušná energia je

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

Zhodou okolností sme dostali presný výsledok, ako sa o tom ešte presvedčíme presným riešením neskôr v článku 4.6. Náš postup v skutočnosti nemohol zaručiť viac ako veľmi približný odhad výsledku a to, že dal celkom presný výsledok, je dielom (trocha regulovanej) náhody. Vráťme sa ešte na chvíľu ku vzťahu (12). (Pozri tiež obr. 1.16.) Prvý člen odpovedá kinetickej a druhý potenciálnej energii. S rastúcim L potenciálna energia rastie. Z hľadiska potenciálnej energie je výhodné, aby vlnová funkcia bola lokalizovaná v čo najmenšej oblasti okolo začiatku. Intuitívne je to zrejmé, lebo je to lokalizácia okolo klasickej rovnovážnej polohy $x = 0$. Prvý člen vo vzťahu (12) odpovedá kinetickej energii, jeho hodnota rastie pri zmenšujúcom sa L . To je prejav vzťahu neurčitosti. Ak chceme stav viac lokalizovať (t. j. zmenšiť $\Delta x = 2L$), môžeme to urobiť iba za cenu zvýšenia neurčitosti $\Delta p = 2P$ a teda za cenu zvýšenia kinetickej energie častice. Vlnová funkcia sa „bráni“ proti stláčaniu. Tu vidíme ešte raz príčinu toho, prečo základný kvantovomechanický stav neodpovedá klasickej predstave o častici v klúde v rovnovážnej polohe.



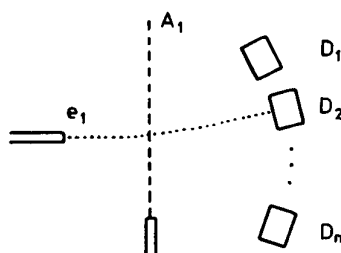
Obr. 1.16

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

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

1.14 VLNOVÉ FUNKCIE A MERANIE FYZIKÁLNYCH VELIČÍN

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



Obr. 1.17

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

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

daných vzťahom

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

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

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

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

splňajúci vzťah

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

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

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

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

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

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

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

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

1, 2, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 1, 1, ...

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

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

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

Vďaka normovacej podmienke (6) platí

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

a) $\sum P_i = 1$

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

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

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

Príklad, ktorý veľmi silne ukazuje nevyhnutnosť interpretácie v už uvedenom zmysle je príklad *merania polarizácie fotónu*. Tento problém, pravdu povediac,

nepatrí do nerelativistickej kvantovej mechaniky, lebo fotón sa pohybuje rýchlosťou svetla a je ultrarelativistickým objektom. Pri meraní polarizácie však jeho rýchlosť nehrá podstatnú úlohu a toto meranie je opísané kvantovou mechanikou. Výhodou merania polarizácie je to, že proces má dobre známy klasický analóg – meranie polarizácie klasických elektromagnetických vln. Pripomenieme si preto najprv klasický prípad.²⁴

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

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

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

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

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

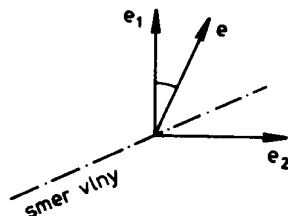
Skúsme teraz kvantovomechanicky opísať prechod lineárne polarizovaného svetla nikolom tak, aby tento opis bol konzistentný s výsledkami získanými v klasickej optike.

Najprv si všimneme poučenie vyplývajúce z bodu b). V kvantovej fyzike totiž kruhová frekvencia fotónu súvisí s jeho energiou vzťahom $E = \hbar\omega$ a to, že ω sa pri prechode nikolom nemení nám hovorí, že fotón buď prejde nikolom „celý“, alebo sa „celý“ pohltí. Bod c) vraví, že intenzita je daná vzťahom $I' = I \cos^2 \alpha$. Intenzita je ale úmerná celkovej energii prenášanej žiarením, a teda celkovému počtu fotónov, ktoré prejdú polarizátorom za sekundu. Prichádzame teda k záveru, že pravdepodobnosť prechodu fotónu je rovná $\cos^2 \alpha$ a pravdepodobnosť jeho

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

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

pohltenia je $\sin^2 \alpha$. Všimnime si ale dôležitú skutočnosť. Všetky fotóny, ktoré prešli prvým polarizujúcim nikolom, majú rovnakú polarizáciu danú vektorom \mathbf{e} a sú všetky v rovnakom stave. Určiť pravdepodobnosť prechodu je jednoduché.



Obr. 1.18

Podľa obr. 1.18 môžeme rozložiť vektor polarizácie dopadajúcej vlny takto

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

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

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

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

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

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

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

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

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

objektu tak, že opakovaným meraním už s určitou nameranou hodnotou meranej veličiny ako pri prvom meraní.²⁶

Ako ďalší príklad na súvis vlnovej funkcie a výsledkov merania si všimneme meranie priemetu spinu na určitý smer, napríklad na os z . Takéto meranie sa prevádza, v princípe v Sternovom-Gerlachovom prístroji, spomínanom v článku 1.8. Ak máme merať priemet spinu do osi z , potom volíme smer nehomogenity magnetického poľa v smere tejto osi. Predstavme si najprv, že do prístroja vchádza zväzok elektrónov²⁷, z ktorých každý má priemet spinu do osi z rovný $+\hbar/2$ a magnetický moment $\mu = -e\hbar/2m$. Znamienko dB/dz nech je také, aby sa tento zväzok vychýlil smerom hore. Ak za prístroj umiestnime fotografickú platňu, potom sa na nej po prechode zväzku prístrojom objaví sčernenie nad miestom, do ktorého by dopadol zväzok pri neprítomnosti magnetického poľa. Stav elektrónu so spinom $+\hbar/2$ označíme ako ψ_+ . Ak na sústavu dopadá zväzok elektrónov, v ktorom každý má spin $-\hbar/2$, potom sa každý z elektrónov vychýli smerom dolu a na fotoplatni sa objaví sčernenie pod miestom, do ktorého by dopadol nevychýlený zväzok. Stav elektrónu so spinom „dolu“ označíme ako ψ_- . Predstavme si teraz, že na sústavu dopadá zväzok elektrónov, z ktorých každý je v spinovom stave²⁸

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Napokon sa ešte vrátíme k otázke merania polohy častice v kvantovej mechanike. Pri analýze dvojštrbinového experimentu v článku 1.11 sme totiž prišli k záveru, že pravdepodobnosť nájsť časticu v istom elemente Δs plochy fotografickej platne je úmerná výrazu $|\psi(x, y, z)|^2 \Delta s$, teda $|\psi|^2$ udáva hustotu pravdepodobnosti výskytu častice. Na prvý pohľad by sa snáď mohlo zdať, že tento spôsob určovania pravdepodobnosti výsledkov merania je iný ako je všeobecná schéma opísaná rovnicami (16) a (17). Ukážeme si však, že sú to fyzikálne rovnaké schémy a že funkcia $\psi(x, y, z)$ má pri meraní polohy takú istú úlohu ako koeficienty c_n vystupujúce vo výraze (15) pri meraní veličiny A . Predstavme si pre určitost', že fotografická platňa na obr. 1.11 je kolmá na os x a pretína ju v bode x_0 . Vlnová funkcia častice v oblasti platne je teda $\psi(x_0, y, z)$.

Podľa už opísanej všeobecnej schémy musíme najprv nájsť vlnové funkcie, ktoré odpovedajú častici lokalizovanej v okolí istého bodu platne. Pre názornosť si predstavme, že celá platňa je rozdelená na štvorčeky, z ktorých každý má plochu Δ približne rovnú ploche zrnka fotografickej emulzie. Stred určitého štvorčeka má

súradnice (y_i, z_k) , pričom súradnicu x nevyepisujeme, lebo všetky štvorčeky ležia v rovine $x = x_0$. Tento štvorček nazveme štvorčekom (i, k) a zavedieme funkciu

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

Zrejme platí

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \psi(x_0, y, z) &= \sum_{ik} c_{ik} \varphi_{ik}(y, z) \\ c_{ik} &= \sqrt{\Delta} \psi(x_0, y_i, z_k) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

Poznámka

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

1.15 ZHRNUTIE

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$P_i = |c_i|^2$$

Tabuľka 1.1

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

* Odhadnuté nasledovne. Pole B budené v strede kruhovej slučky o polomere a_1 obtekanej prúdom I je $B = (\mu/2)I/a_1$, kde $\mu = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ SI}$, za a_1 zoberieme Bohrov polomer, I vyjadříme ako súčin náboja elektrónu a typickej atómovej frekvencie $v_1 = E_1/2\pi\hbar$.

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

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

1.16 PRÍKLADY A PROBLÉMY

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

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

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

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

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

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