

## 2 ZÁKLADY VLNOVEJ MECHANIKY

### 2.1 ÚVOD. POJEM STAVU V KVANTOVEJ MECHANIKE

Úplný nadpis tejto kapitoly by vlastne mal byť „Základy vlnovej mechaniky jedinej bezspinovej častice v silovom poli“. Vzhľadom na to, že kvantová mechanika je univerzálnou teóriou javov v oblasti atómovej fyziky, je to téma pomerne úzka, ale umožňuje postupné budovanie matematického aparátu teórie i jeho fyzikálnej interpretácie. V predchádzajúcej kapitole sme sa síce zaoberali s jednoduchými kvantovými systémami, ale výklad bol založený na intuitívnych argumentoch a na analógiách. V tejto kapitole bude výklad o čosi systematickejší a viac pozornosti budeme venovať rozvoju formalizmu.

Základnou myšlienkou, z ktorej budeme vychádzať je to, že stav častice v určitom okamihu  $t_0$  je úplne charakterizovaný stavovou vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ . Časová závislosť vlnovej funkcie  $\psi(\mathbf{r}, t)$  bude potom udávať časový vývoj stavu.

Už v predchádzajúcej kapitole sme sa – na intuitívnej úrovni – zaoberali súvisom stavu kvantovomechanickej sústavy a vlnovej funkcie. Keď teraz predpokladáme, že stav častice je *úplne* charakterizovaný vlnovou funkciou, znamená to, že tieto dva pojmy vlastne stotožňujeme, že „zadať stav“ znamená to isté, čo „zadať vlnovú funkciu“, tak, ako v klasickej mechanike „zadať stav“ znamenalo „zadať polohu a hybnosť častice“.<sup>29</sup>

Aby takéto chápanie pojmu stav malo aj praktický význam, musíme si ukázať ako na základe znalosti vlnovej funkcie možno predpovedať (v pravdepodobnostnom zmysle) výsledok merania ľubovoľnej fyzikálnej veličiny v danom okamihu. Budeme tiež musieť nájsť pre vlnové funkcie príslušnú pohybovú rovnicu, aby bolo možné na základe známej vlnovej funkcie v danom okamihu predpovedať, aká bude vlnová funkcia – a teda stav systému – v budúcnosti.

Skôr však, ako sa začneme zaoberať s takýmito otázkami, všimneme si na príklade voľnej častice niektoré súvislosti medzi tým, ako chápeme stav v kvantovej mechanike a ako ho chápeme v klasickej mechanike. Intuitívne je jasné, že súvislosť tu musí byť, inak by sme rýchlo prišli k vážnym problémom. Vieme totiž, že klasická fyzika je veľmi dobrou teóriou pre pohyb „častíc“ s hmotnosťou

---

<sup>29</sup> Odporúčame čitateľovi oboznámiť sa s článkom W. Heisenberga, O vývoji pojmu stavu v histórii kvantovej teórie, publikovanom v českom preklade v Čs. čas. fyz., ročník A 25, rok 1975, str. 397.

okolo  $10^{-3}$  kg alebo väčšou. V skutočnosti vieme i to, že je to dobrá teória pre opis pohybu častíc i s oveľa menšími hmotnosťami. Na druhej strane vieme, že pre pohyb elektrónov s hmotnosťou  $9.10^{-31}$  kg už platí kvantová mechanika. Ak si teraz predstavíme, že po rebríčku hmotnosti postupujeme postupne dolu, pýtame sa na to, kedy, t. j. pri ktorej hmotnosti prestane platiť klasická mechanika a začne platiť kvantová mechanika. Akosi ťažko uveriť, že by existovala takáto striktná hranica, nad ktorou by platila jedna teória a pod ňou druhá teória, úplne iná. V skutočnosti je tento prechod plynulý, klasická mechanika sa stáva so zmenšovaním sa hmotností a rozmerov čoraz horším a horším priblížením ku skutočnosti a začína platiť kvantová mechanika. Naopak, ak začneme z oblasti platnosti kvantovej mechaniky a postupujeme „smerom ku klasickej“, vidíme, že klasická mechanika sa postupne stáva lepším a lepším priblížením a i opis stavov sústavy postupne prechádza od kvantovomechanického ku klasickému. Túto skutočnosť, ktorá je špeciálnym prípadom Bohrovho princípu korešpondencie, si podrobnejšie všimneme na začiatku tejto kapitoly. Potom sa budeme zaoberať Schrödingerovou rovnicou a neskôr sa budeme venovať tomu, ako v kvantovej mechanike opisujeme fyzikálne veličiny.

## 2.2 VLNOVÉ FUNKCIE VOĽNEJ ČASTICE

Častici, ktorá sa pohybuje voľne (nenachádza sa v silovom poli) a má určitú hybnosť  $\mathbf{p}$ , je podľa de Broglieho hypotézy priradená vlnová funkcia  $A \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t)$ , kde  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ ,  $\omega = E/\hbar = \mathbf{p}^2/(2m\hbar)$ . V určitom čase  $t_0$  je stav častice charakterizovaný vlnovou funkciou

$$\Phi_p(\mathbf{r}) = C \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar) \quad (1)$$

kde  $C$  je komplexná konštanta (v predchádzajúcom označení  $C = A \exp(-i\omega t_0)$ ). Časová závislosť stavu voľnej častice je charakterizovaná vlnovou funkciou

$$\Phi_p(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (2)$$

Čistá rovinná vlna (1) opisujúca stav voľnej častice s hybnosťou  $\mathbf{p}$  v celom (nekonečnom) priestore spĺňa  $|\Phi|^2 = |C|^2$  a preto nemožno vybrať  $C$  tak, aby platilo

$$\int |\Phi_p(\mathbf{r})|^2 dV = 1 \quad (3)$$

t. j. tak, aby vlnová funkcia bola normovaná na jednotku v celom objeme.<sup>30</sup> Túto formálnu ťažkosť možno obísť dvoma spôsobmi. Pri prvom z nich pracujeme s nekonečným objemom a vlnové funkcie potom normalizujeme tak, ako je to obvyklé v teórii Fourierových integrálov, t. j. používame funkcie

$$(2\pi\hbar)^{-3/2}[\exp i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar] \quad (4)$$

ktoré sú, ako fyzici vravia, „normované na  $\delta$ -funkciu“. Takéto funkcie budeme tiež neskôr používať, ale predtým sa s  $\delta$ -funkciami budeme musieť oboznámiť.

Druhá možnosť je jednoduchšia a spočíva v normovaní „na konečný objem“. Fyzikálne je jasné, že keby sme si predstavili svet ako konečný a uzavretý v kocke s hranou, povedzme  $10^{10}$  svetelných rokov, nezmenilo by to nič na správaní sa elektrónu v atóme vodíka, alebo na vlastnostiach iných atomárnych objektov, ktorých rozmery sú rádovo  $10^{-10}$  m. Stavové vlnové funkcie voľných častíc môžeme teda písať ako

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (5)$$

kde  $V = L^3$  je náš „normovači objem“ (kocka s hranou  $L$ ).

Vo výraze (5) hodnota hybnosti  $\mathbf{p}$  sa môže meniť spojité a dostávame tak „spojito nekonečnú“ množinu možných stavov, líšiacich sa hodnotou  $\mathbf{p}$ . Nie všetky z týchto stavov sú však lineárne nezávislé,<sup>31</sup> niektoré z nich môžeme dostať ako lineárne kombinácie ostatných a možnosť vytvárania stavov lineárnymi kombináciami je daná už princípom superpozície. Pýtame sa preto na to, ako by sme mohli dostať systém lineárne nezávislých stavov typu (5). Odpoveď na túto otázku je známa z teórie Fourierových radov. Stačí vybrať iba tie hodnoty  $p_x, p_y, p_z$ , pre ktoré je funkcia  $\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  periodická v každej z premenných  $x, y, z$  na intervale  $(0, L)$ . Napríklad pre premennú  $x$  to značí

$$e^{ip_x x/\hbar} = e^{ip_x(x+L)/\hbar}$$

<sup>30</sup> Nemožnosť normovania súvisí s tým, že stav (1) je iba istou idealizáciou a nemožno ho experimentálne pripraviť. Každá elektrónová vlna totiž v istom čase niekde vzniká a je preto lokalizovaná v každom čase v istej konečnej priestorovej oblasti (hoci obrovskej, ale konečnej). Skutočne realizovateľné sú iba vlnové balíky. Ale rovinná vlna je tak užitočnou idealizáciou, že by nebolo rozumné sa jej zrieknuť kvôli formálnym ťažkostiam.

<sup>31</sup> Naša terminológia nie je presná. Pojem lineárnej závislosti býva obvykle vyhradený pre konečné lineárne kombinácie. My tu pripúšťame i superpozície nekonečného počtu funkcií. Navyše by sa žiadalo precizovať definičné obory funkcií, o ktorých hovoríme a zmysel konvergenencie príslušných radov. Vyhýbame sa tu týmto (z hľadiska matematiky podstatným) otázkam, lebo v danej situácii pre pochopenie fyzikálnej podstaty nie sú nevyhnutné.

Odtiaľ dostávame podmienku

$$p_1 L / \hbar = 2\pi n_1 \quad n_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6a)$$

a podobne pre ostatné dve zložky hybnosti

$$p_2 L / \hbar = 2\pi n_2 \quad n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6b)$$

$$p_3 L / \hbar = 2\pi n_3 \quad n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6c)$$

Už sme použili označenie

$$p_x \equiv p_1, \quad p_y \equiv p_2, \quad p_z \equiv p_3$$

ktoré podobne ako

$$x \equiv x_1, \quad y \equiv x_2, \quad z \equiv x_3$$

budeme často používať v ďalšom.

Aby sme sa vyhli stálemu písaniu symbolu  $\hbar$  v menovateli exponentu v (5) je užitočné používať radšej vlnový vektor a kruhovú frekvenciu

$$\omega \equiv \omega(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p})/\hbar; \quad k_i = p_i/\hbar \quad i = 1, 2, 3$$

a písať stavové vlnové funkcie reprezentujúce systém stavov (5) v tvare

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Phi_{k_1, k_2, k_3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (7a)$$

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7b)$$

Stavové vlnové funkcie typu (7) príslušné k rôznym hodnotám  $(k_1, k_2, k_3)$  sú nielen lineárne nezávislé, ale ak trojica  $(k_1, k_2, k_3)$  prebieha všetky hodnoty (7b), tvoria aj úplný systém v zmysle teórie Fourierových radov; t. j. každú funkciu  $f(x, y, z)$  možno vnútri nášho normalizačného objemu rozvinúť do radu

$$f(x, y, z) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

kde sčítujeme cez všetky  $\mathbf{k}(k_1, k_2, k_3)$  prípustné podmienkou (7).

Koeficienty  $c_{\mathbf{k}}$  vystupujúce v rovnici (8) ľahko určíme, ak si všimneme, že vlnové funkcie  $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  spĺňajú podmienku

$$\int_V \Phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dV = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (9)$$

kde na pravej strane máme *Kroneckerov symbol*, ktorý je rovný jednej ak  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  a rovný nule ak  $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ .

Takto stačí rovnicu (8) násobiť vlnovou funkciou  $\Phi_q^*(\mathbf{r})$  a preintegrovať cez normalizačný objem  $V$ . Ak môžeme zameniť poradie sumy a integrálu (a to budeme predpokladať), dostaneme

$$\int_V \Phi_q^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) dV = \sum_k \int \Phi_q^*(\mathbf{r})\Phi_k(\mathbf{r}) dV$$

Integrál na pravej strane je ale rovný Kroneckerovmu symbolu  $\delta_{k,q}$  to znamená, že je nulový pri všetkých  $k$ , s výnimkou jedného jediného prípadu  $k = q$  a vtedy je integrál rovný jednej. Celá pravá strana sa teda rovná  $c_q$ , a máme konečný výsledok

$$c_q = \int_V \Phi_q^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) dV \quad (10)$$

ktorý ukazuje postup ako určiť koeficienty v rozklade (8) pri známej funkcii  $f(\mathbf{r})$ .

Postup, ktorý sme tu použili, sa v kvantovej mechanike používa tak často, že si zasluhuje niekoľko poznámok.

**1.** Rozklad funkcie  $f(\mathbf{r})$  do radu (8) nie je viazaný na špeciálny tvar funkcií (7), ale môžeme ho použiť vždy, ak máme istý úplný systém funkcií  $\{\Phi_n\}$ . Možnosť rozkladu (8) je vlastne vyjadrením pojmu úplnosti systému  $\{\Phi_n\}$ . Koeficient  $c_n$  v takomto rozklade možno určiť pomocou rovnice typu (10), ak súbor funkcií  $\{\Phi_n\}$  je ortonormovaný, t. j. ak platí

$$\int \Phi_n^* \Phi_m dV = \delta_{nm}$$

kde na pravej strane je Kroneckerov symbol rovný 1 pre  $n = m$  a rovný nule pre  $n \neq m$

**2.** Stavov povolené podmienkou (7b) si môžeme znázorniť bodmi v abstraktnom  $k$ -priestore. Je to trojrozmerný priestor, v ktorom na jednotlivé osi vynášame zložky vektora  $\mathbf{k}$ , na prvú os  $k_1$  na druhú  $k_2$  a na tretiu  $k_3$ . Predstavme si teraz, že celý  $k$ -priestor je zaplnený kockami s dĺžkou hrany  $2\pi/L$ . Vlnové funkcie povolené podmienkou (7b) sú práve tie, pri ktorých hodnoty vektora  $\mathbf{k}$  (zakreslené v  $k$ -priestore) splývajú s vrcholom niektorej kocky. Kocka má 8 vrcholov a každý vrchol je spoločný 8 kockám. Na jednu kocku s hranou  $2\pi/L$  pripadá preto práve jedna „povolená“ hodnota  $\mathbf{k}$ . Pre veľa aplikácií je užitočné zaviesť pojem hustoty povolených hodnôt  $\mathbf{k}$  v  $k$ -priestore. Táto hustota je rovná počtu „povolených“ vektorov  $\mathbf{k}$  pripadajúcich na objemovú jednotku v  $k$ -priestore. Pretože na objem  $(2\pi/L)^3$  pripadá práve jedno „povolené“  $\mathbf{k}$ , dostaneme pre túto hustotu označenú symbolom  $\rho(\mathbf{k})$  výraz

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (12)$$

Niekedy sa stáva, že z fyzikálneho postavenia problému je zrejmé, že koeficienty  $c_{\mathbf{k}}$  v rovnici typu (8) sú pomaly sa meniacimi funkciami vektora  $\mathbf{k}$ . Vtedy je užitočné prejsť od sumy v (8) k integrálu. Pretože na jednotkový objem pripadá  $\rho(\mathbf{k})$  povolených vektorov  $\mathbf{k}$ , bude mať prepis rovnice (8) tvar

$$f(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{k}) \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} \quad (13)$$

kde  $c(\mathbf{k})$  je pomaly sa meniacia hladká funkcia premennej  $\mathbf{k}$ , ktorá v „povolených“ bodoch  $\mathbf{k}$ -priestoru nadobúda hodnotu  $c_{\mathbf{k}}$ . Pre dostatočne veľký normovací objem  $V$  je takéto nahradenie sumy integrálom prakticky vždy dobrým priblížením.

Po dosadení za  $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  a  $\rho(\mathbf{k})$  môžeme rovnicu (13) prepísať (zatiaľ bez zrejmejšieho účelu) ako

$$f(\mathbf{r}) = \int \left[ c(\mathbf{k}) \frac{V}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{V}} \right] \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{k}$$

Ak výraz v hranatej zátvorke označíme ako  $a(\mathbf{k})$  máme<sup>32</sup>

$$f(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{k}) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{k} \quad (14)$$

**3.** Normovací objem  $V$ , ktorý sme vyššie používali je značne ľubovoľný. Žiadali sme len to, aby bol obrovský v porovnaní s rozmermi atomárnych sústav. Na základe intuície možno očakávať, že fyzikálne výsledky získané pri rôznych voľbách veľkosti  $V$  od tohto  $V$  nebudú závisieť. Ukazuje sa, že je to skutočne tak a v ďalších článkoch sa ešte stretne s ilustráciami tohto tvrdenia.

– Výber rovinných vln „normovaných na objem  $V$ “ tak, ako sme ho uviedli, sa môže zdať trochu ľubovoľný. Prišli sme k nemu tak, že sme hľadali systém funkcií: a) typu rovinných vln; b) normovaných na jednotku v konečnom objeme  $V$ ; c) lineárne nezávislých. Tieto funkcie totiž opisujú súbor fyzikálnych stavov a na základe princípu superpozície vieme, že lineárnou kombináciou vlnových funkcií dostávame vlnovú funkciu prislúchajúcu určitému možnému stavu. Ako súbor „bázických“ stavov sústavy potom prirodzene musíme vybrať súbor lineárne nezávislých vlnových funkcií. Toto by sme už mohli urobiť rôznymi spôsobmi, ale všetky by boli ekvivalentné v tom zmysle, že „bázické“ funkcie nového systému by boli lineárnymi kombináciami systému (7). Systém (7) používame preto, že je pre praktické použitie najvhodnejší.

<sup>32</sup> Poznamenajme, že vzťah (14) je formálne podobný rozkladu do rovinných vln „normovaných na  $\delta$ -funkciu“, o ktorom budeme hovoriť neskôr.

– Toto vlastne nie je poznámka, ale „rada do života“<sup>33</sup> pre čitateľov, ktorí dočítali až sem, ale doteraz sa s teóriou Fourierových radov a integrálov podrobnejšie nestretli. Pre ďalšie čítanie tejto knihy a pochopenie jej fyzikálneho obsahu tých niekoľko pomerne povrchných poznámok, ktoré sme uviedli, je dostačujúce. Ak si čitateľ predchádzajúce trochu premyslí, môže čítať ďalej. Dokonca sa mu môže stať, že s takýmito znalosťami vystačí i v iných praktických fyzikálnych aplikáciách. Môže to však ľahko zviest' na podcenenie rigorózneho matematiky, a to by sme rozhodne nechceli. Sú situácie, keď podrobná a presná znalosť je rozhodujúca. Rozhodne si treba nájsť niekedy čas a aspoň raz v živote si prečítať niečo z matematickej literatúry o Fourierových radoch.<sup>34</sup>

### 2.3 VLNOVÉ BALÍKY. GRUPOVÁ RÝCHLOSŤ DE BROGLIEHO VLN A PRINCÍP KOREŠPONDENCIE

Časový vývoj stavu častice opisujeme v kvantovej mechanike vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r}, t)$ . Tento opis nemá zdanlivo nič spoločné s opisom častíc v klasickej mechanike. V tomto článku ukážeme, že istý vzťah medzi klasickým a kvantovým opisom predsa len existuje a že isté typy vlnových procesov sú v určitom zmysle príbuzné pohybu klasických častíc po trajektóriách. Najprv si však pripomenieme niekoľko pojmov súvisiacich s matematickým opisom vlnových javov.

Rovinnú vlnu šíriacu sa v smere vlnového vektora  $k$  zapisujeme v tvare

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = C e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

kde  $C$  je vo všeobecnosti komplexné číslo. *Vlnoplocha* nazývame plochu, na ktorej na fáza konštantnú hodnotu, teda

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{konšt}$$

*Fázová rýchlosť* je definovaná ako rýchlosť, ktorou sa posúva v priestore daná vlnoplocha. Ak máme pre jednoduchosť rovinnú vlnu pohybujúcu sa v smere  $x$ , potom rovnica vlnoplochy je  $kx - \omega t = \text{konšt}$  a pre fázovú rýchlosť máme

$$v_f = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} \quad (1)$$

<sup>33</sup> Vášne dávať rady do života je choroba, ktorej sa pedagóg, najmä v stredných a vyšších rokoch ťažko vyhne. Nech nám čitateľ túto chorobu z povolania prepáči.

<sup>34</sup> Môže to byť napríklad kniha G. J. Šilov: Matematická analýza, Alfa, Bratislava 1974. Táto kniha je pre fyzika užitočná nielen kvôli Fourierovým radom.

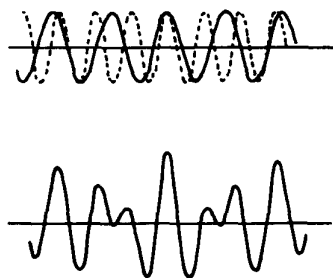
Rovinné vlny sú idealizáciou skutočných vlnových procesov. Reálne vlny sú vždy lokalizované v istej oblasti priestoru a ich trvanie v čase je tiež obmedzené. Ak je priestorová oblasť, v ktorej je vlnenie nenulovo malé, hovoríme o vlnovom balíku. Každý takýto vlnový balík však možno zapísať ako superpozíciu (lineárnu kombináciu) rovinných vln.<sup>35</sup> Zaujímame sa teraz o to, ako sa takýto vlnový balík pohybuje. Najprv uvidíme jednoduchý argument pre reálne klasické vlny a potom prediskutujeme realistickejší prípad skladania komplexných de Broglieho vln. Predstavme si teda superpozíciu dvoch vln, ktorých vlnové vektory a kruhové frekvencie sa len o málo odlišujú a amplitúdy sú rovnaké.

$$U_1(x, t) = A \sin[(k - \Delta k)x - (\omega - \Delta \omega)t]$$

$$U_2(x, t) = A \sin[(k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t]$$

Ak použijeme známy vzťah  $\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta) = 2 \sin \alpha \cos \beta$ , po úprave dostaneme

$$U_1 + U_2 = 2 \sin(kx - \omega t) \cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$$



Obr. 2.1

Prvý člen na pravej strane je približne pôvodná vlna, druhý je modulačný faktor, ktorý vedie k vzniku výrazných miním a maxím vlnenia, znázornených na obr. 2.1. Rýchlosť šírenia sa týchto maxím, z ktorých každé vlastne odpovedá vlnovému balíku, je daná členom  $\cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$  a poloha maxima je daná rovnicou

$$\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t = 0$$

<sup>35</sup> Toto tvrdenie po matematickej stránke vyplýva z úplnosti sústavy rovinných vln a v tomto kontexte sme o ňom už hovorili v predchádzajúcom článku.



Odtiaľ máme pre rýchlosť šírenia sa maxima, nazývanú tiež grupovou rýchlosťou

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

Pre malé  $\Delta k$  píšeme

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Teraz uvedieme realistickejší príklad. Uvažujme superpozíciu rovinných vln, šíriacich sa v smere osi  $x$

$$\Phi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (4)$$

závislosť ( $a(k)$ ) vyberieme takú, aká prislúcha voľnej častici (2.2), t. j.

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

a  $c(k)$  zvolíme napríklad v tvare

$$c(k) = A \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2\kappa^2}\right) \quad (6)$$

Uvažujeme teda príklad superpozície rovinných vln, ktorých vlnové vektory sú gaussovsky „rozmazané“ v okolí hodnoty  $k_0$  s neurčitnosťou  $\Delta k \approx \kappa$

Po dosadení (S) a (6) do (4) a substitúcií  $k - k_0 = q$  dostaneme

$$\Phi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-q^2 \left(\frac{1}{2\kappa^2} + \frac{i\hbar t}{2m}\right) + iq \left(x - \frac{k_0 \hbar}{m} t\right)\right] dq$$

keď sme označili  $\omega_0 = \omega(k_0)$ .

Využitím známeho Laplaceovho integrálu dostaneme

$$\Phi(x, t) = \left\{ A \left[ \frac{2\pi\kappa^2 m}{m + i\hbar\kappa^2 t} \right]^{1/2} \exp\left[ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{2 \left(\frac{1}{\kappa^2} + \frac{i\hbar t}{m}\right)} \right] \right\} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

Výraz (7) (ako aj celý náš príklad) je trošku technicky komplikovaný, ale veľmi poučný. Vo vzťahu (7) totiž ľahko rozpoznáme exponenciálny fázový faktor  $\exp[i(k_0 x - \omega_0 t)]$  predstavujúci rovinnú vlnu, avšak modulovanú (komplexným) amplitúdovým faktorom – výrazom v zložených zátvorkách. Aby sme si urobili lepšiu predstavu o charaktere vlnového balíka, ktorý výraz (7) predstavuje, uvedomme si, že pre posúdenie pravdepodobností výskytu častice je rozhodujúca absolútna hodnota vlnovej funkcie

$$|\Phi(x,t)| = |A| \cdot \left[ \frac{4\pi^2 \kappa^4 m^2}{m^2 + \hbar^2 \kappa^4 t^2} \right]^{1/4} \left\{ \exp \frac{-\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\frac{2}{\kappa^2} + 2\left(\frac{\hbar t \kappa}{m}\right)^2} \right\} \quad (7')$$

Hlavným činiteľom, ktorý určuje tvar vlnového balíka je zrejme exponenciálny výraz vo vzťahu (7'). Je zrejmé, že poloha maxima vlnového balíka je daná vzťahom

$$x - \frac{\hbar k_0}{m} t = 0 \quad \Rightarrow \quad x = \frac{\hbar k_0}{m} t \quad (8)$$

Teda vlnový balík (jeho maximum) sa pohybuje rýchlosťou

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (9)$$

čo odpovedá vzťahu (3), ak doň dosadíme z (5)

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{d}{dk} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \right|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

Z predchádzajúceho je zrejmé, že k časticam klasickej fyziky majú najbližšie lokalizované vlnové balíky a princíp korešpondencie žiada, aby v klasickej limite opis pomocou takýchto balíkov prešiel na opis blízky k opisu pohybu častíc pomocou klasickej trajektórií. Takto sme intuitívne vedení k priradeniu

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{častica v klasickej} \\ \text{mechanike} \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{vlnový balík} \\ \text{de Broglieho vln} \end{array} \right\}$$

V takom prípade ale rýchlosť častice v klasickej mechanike musí byť rovná rýchlosti pohybu maxima vlnového balíka, teda

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{rýchlosť častice} \\ \text{v klasickej mechanike} \end{array} \right\} \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{grupová rýchlosť} \\ \text{de Broglieho vln} \end{array} \right\}$$

Zo vzťahu (9) je hneď zrejmé, že takéto priradenie je možné. Platí totiž

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

Výraz  $p_0/m$  je však práve rýchlosť klasickej častice s hybnosťou  $p_0$ .

Analógia medzi vlnovými balíkmi a časticami klasickej fyziky má však svoje ohraničenia. Jedno z nich vidno napríklad z *rozplývania* sa vlnových balíkov. Túto vlastnosť vidno aj zo vzťahu (7')- Je zrejmé, že tam uvedená amplitúda pre  $x$

rozdielne od hodnoty (8) rýchlo klesá k nule. Rýchlosť tohto poklesu je v prevažnej miere daná menovateľom v exponenciálnom faktore vo výraze (7). Rozmer vlnového balíka teda možno ľahko odhadnúť a dostaneme

$$(\Delta x)^2 \approx \frac{1}{x^2} + \frac{\hbar^2 k^2 t^2}{m^2}$$

Vidíme, že rozmer balíka s časom neustále rastie.

Nebudeme sa tu snažiť o podrobnejšiu matematickú analýzu tohto javu, ale uvedieme iba fyziku, ktorá je za ním. Predstavme si, že v čase  $t_0 = 0$  máme vlnový balík s „rozmerom“  $(\Delta x)_0$ . Podľa vzťahu neurčitosti budú mať de Broglieho vlny, ktorých superpozíciou bol balík vyrobený, hybnosti v intervale  $\Delta p \sim \hbar/(\Delta x)_0$ . Príslušné rýchlosti  $v = p/m$  budú mať takto neurčitosť

$$\Delta v \sim \frac{\Delta p}{m} \sim \frac{\hbar}{m(\Delta x)_0}$$

Tieto neurčitosti v rýchlosti povedú k zväčšovaniu „rozmerov“ balíka s rastúcim časom, pričom dodatočné rozplynutie bude približne

$$(\Delta x)' \sim \Delta v \cdot t \sim \frac{\hbar t}{m(\Delta x)_0}$$

Presnejšia analýza by nám ukázala, že správny vzťah pre skladanie pôvodného a dodatočného rozmazania je

$$(\Delta x)^2 = (\Delta x)_0^2 + (\Delta x)'^2$$

Výraz (10) má skutočne presne takúto štruktúru.

Rozplývajúce vlnové balíky znemožňujú chápať vlnové funkcie priradené stavom častíc ako hmotnostné vlny v pôvodnom Schrödingerovom zmysle. Po dostatočne dlhom čase sa totiž vlnový balík rozplynie do veľkých rozmerov, prestane byť lokalizovaný a nemožno ho stotožniť so samotnou časticou.

## 2.4 ČASOVÝ VÝVOJ STAVU. SCHRÖDINGEROVA ROVNICA

Schrödingerova rovnica (ďalej zväčša len SchR) je základným pohybovým zákonom kvantovej mechaniky. Ak poznáme stav sústavy v čase  $t_0$ , daný vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  Schrödingerova rovnica vedie k jednoznačnému stavu  $\psi(\mathbf{r}, t)$  pre ľubovoľné  $t > t_0$ . Jej úloha v schéme kvantovej mechaniky je teda analogická s úlohou Newtonových pohybových rovníc v klasickej mechanike.

Pre jednu časticu nachádzajúcu sa v silovom poli s potenciálnou energiou  $V(\mathbf{r})$  má SchR tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

kde  $\Delta$  je Laplaceov operátor

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Vzhľadom na  $t$  je to diferenciálna rovnica prvého rádu a zadaním začiatočného stavu  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  je jej riešenie dané jednoznačne. SchR takto určuje časový vývoj stavu sústavy. Na zdôraznenie tejto skutočnosti ju budenie nazývajú niekedy časovou Schrödingerovou rovnicou.

Táto rovnica je základným zákonom kvantovej mechaniky. Nemôžeme ju preto odvodiť z klasickej fyziky práve tak, ako nemožno odvodiť Newtonove zákony z výsledkov prednewtonovskej fyziky. Základné zákony novej teórie treba vždy v istom zmysle „uhádnuť“. Aby sme túto skutočnosť zdôraznili uviedli sme tvar SchR rovno, bez predbežného komentára. Pravda, vždy možno uviesť dôvody, ktoré autora novej teórie, v tomto prípade E. Schrödingera, viedli (r. 1926) k danej formulácii zákona. Reprodukovanie pôvodného Schrödingerovho heuristického postupu<sup>36</sup> by však zabralo priveľa miesta. Uvedieme tu preto iba niekoľko argumentov, ktoré by mohli urobiť SchR prijateľnejšou.

Začneme tým, že nájdeme rovnicu, ktorú spĺňa vlnová funkcia voľnej častice

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)} \quad (2)$$

kde  $A$  je konštanta a  $E \equiv E(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$ .

Derivovaním tohto  $\psi(\mathbf{r}, t)$  podľa času dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = AE(\mathbf{p})e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)} = E(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

Vďaka vzťahu medzi energiou a hybnosťou môžeme pravú stranu tiež prepísať a máme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi$$

Ak sa ale pozrieme na  $\psi(\mathbf{r}, t)$  dané rovnicou (2) vidíme, že hybnosti môžeme dostať z exponentu pred vlnovou funkciou aj tak, že budeme derivovať  $\psi$  podľa súradníc. Skutočne, ak derivujeme  $\psi(\mathbf{r}, t)$  podľa súradnice  $x$  a výsledok násobíme faktorom  $(\hbar/i)$ , dostaneme

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}_x \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

<sup>36</sup> Archimedes po objavení svojho zákona bežal vrah nahý ulicami Syrakúz volajúc „Heuréka“ (našiel som). Heuristicky postup je postup pre nachádzanie niečoho nového.

Keby sme to isté urobili ešte raz, dostaneme

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}_x^2 \psi(\mathbf{r}, t)$$

Ak urobíme to isté aj s ostatnými súradnicami, ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \equiv \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 \psi$$

kde  $\Delta$  na ľavej strane je Laplaceov operátor. Na pravej strane (6) máme ale to isté čo na pravej strane (4) a vidíme, že pre rovinnú vlnu platí

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t)$$

Koeficienty v tejto rovnici nezávisia od hybnosti a energie danej rovinatej vlny a preto tejto rovnici vyhovuje každá rovinná vlna tvaru (2) za predpokladu, že vzťah medzi energiou a hybnosťou je taký, ako má byť, t. j.  $E = \mathbf{p}^2/2m$ . Rovnica je lineárna a preto ju spolu s každými dvoma riešeniami spĺňa aj ľubovoľná lineárna kombinácia týchto riešení. Odtiaľto prídeme hneď k záveru, že rovnicu (7) spĺňa ľubovoľná kombinácia rovinných de Broglieho vln a teda i všetky vlnové balíky. Porovnaním (7) a (1) vidíme, že (7) je SchR pre prípad nulovej potenciálnej energie  $V(\mathbf{r})$ . Podstatným pre získanie tejto rovnice bol vzťah  $E = \mathbf{p}^2/2m$  platný pre energiu voľnej častice. Pre časticu nachádzajúcu sa v silovom poli s potenciálnou energiou  $V(\mathbf{r})$  možno očakávať, že pre získanie správnej rovnice bude treba v niektorej z predchádzajúcich urobiť zmenu výrazu odpovedajúceho kinetickej energii na výraz odpovedajúci celkovej energii. V rovnici (7) máme na pravej strane výraz  $-(\hbar^2/2m)\Delta$ , ktorý podľa (6) skutočne odpovedá kinetickej energii. Ak v (7) urobíme na pravej strane zmenu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r})$$

a aplikujeme pravú stranu na  $\psi$ , dostaneme práve SchR (1).

Tomuto formálnemu argumentu možno pridať istý fyzikálny zmysel ak si predstavíme pohyb častice v poli s veľmi pomaly sa meniacou potenciálnou energiou  $V(\mathbf{r})$  ( $V(\mathbf{r})$  sa mení len veľmi málo na vzdialenosti približne rovnjej vlnovej dĺžke de Broglieho vlny). Ak sa  $V(\mathbf{r})$  mení len pomaly znamená to, že sily pôsobiace na časticu sú malé (sila je rovná  $-\text{grad } V(\mathbf{r})$ ) a možno očakávať, že vlnová funkcia bude približne vyzerat' ako

$$\psi \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r} - Et)\right\} \quad (8)$$

pričom  $\mathbf{p}(\mathbf{r})$  závisí od polohy tak, že platí

$$\frac{[\mathbf{p}(\mathbf{r})]^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E = \text{konšt} \quad (9)$$

Pri derivovaní pravej strany v (8) podľa súradníc môžeme zanedbať derivácie  $\mathbf{p}(\mathbf{r})$  podľa  $x, y, z$ , pretože sa  $\mathbf{p}(\mathbf{r})$  mení s polohou len veľmi pomaly a vzhľadom na (9) bude vlnová funkcia (8) spĺňať SchR (1).

Pripomeňme ešte raz, že tieto argumenty nemali byť a ani neboli „dôkazom“ Schrödingerovej rovnice. Ich účel bol skôr pedagogický; argumenty mali urobiť SchR prijateľnou a trochu objasniť jej zmysel. V teórii ale SchR vystupuje ako postulát, ktorého správnosť sa dokazuje súhlasom teórie s experimentom.

Na záver článku ešte upozorníme čitateľa na niekoľko postupov, s ktorými sme sa tu stretli, a s ktorými sa stretneme ešte veľakrát v ďalšom. V rovnici (5) vidíme, že pôsobením výrazu  $(\hbar/i)\partial/\partial x$  na rovinnú vlnu dostávame zas tú istú rovinnú vlnu, ale násobenú hodnotou  $p_x$ . Výraz  $(\hbar/i)\partial/\partial x$  je špeciálnym prípadom operátora, t. j. predpisu, ktorým istej funkcii  $f(x)$  priradíme funkciu  $g(x)$ , v našom prípade

$$f(x) \rightarrow g(x); \quad g(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

Operátor  $(\hbar/i)\partial/\partial x$  zrejme súvisí s  $x$ -ovou komponentou hybnosti častice, lebo z rovinnnej vlny v zmysle rovnice (5) „vylúpne“ práve hodnotu  $p_x$ . Podobne operátor  $-(\hbar^2/2m)\Delta$  „vylúpne“ z rovinnnej vlny kinetickú energiu častice, tak ako to vidieť z rovnice (6). V ďalšom uvidíme, že toto je v kvantovej mechanike všeobecným javom a každej fyzikálnej veličine je priradený istý operátor, ktorý pracuje podobne ako pracujú tie dva, čo sme práve spomínali v súvislosti s rovnicami (5) a (6).

## 2.5 STACIONÁRNE STAVY

Z kvalitatívnych úvah v kapitole 1 sme prišli k tomu, že diskretným kvantovým stavom s určitými hodnotami energie odpovedajú stojaté vlny (harmonické kmity) de Broglieho vln. Takéto stavy boli charakterizované tým, že ich časový vývoj bol daný jedinou frekvenciou tu, stojatá vlna mala tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

a energia stavu bola daná vzťahom  $E = \hbar\omega$ . Takéto stavy sa nazývajú aj stacionárnymi stavmi. Ak vlnová funkcia (1) má opisovať časový vývoj stavu, potom musí vyhovovať časovej SchR. To zrejme nebude možné pre ľubovoľnú funkciu  $\Phi(\mathbf{r})$ .

Pokúsme sa teraz nájsť podmienky, ktoré musí spĺňať funkcia  $\Phi(\mathbf{r})$ , aby výraz typu (1) bol riešením SchR (4.1). Po dosadení (1) do (4.1), dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r})] = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] e^{-i\omega t} \Phi(\mathbf{r})$$

Ak na ľavej strane vykonáme naznačenú deriváciu a obe strany vykrátime faktorom  $\exp(-i\omega t)$  dostaneme podmienku

$$\hbar\omega\Phi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r})$$

Vzhľadom na to, že  $\hbar\omega$  je práve energia stacionárneho stavu, máme

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Argument by sme mohli obrátiť nasledovne: Ak existuje číslo  $E$  a funkcia  $\Phi(\mathbf{r})$  také, že je splnená podmienka (2) a ak  $\Phi(\mathbf{r})$  spĺňa štandardné podmienky pre to, aby mohla reprezentovať stav uvažovanej sústavy<sup>37</sup>, potom funkcia  $\psi(\mathbf{r}, t)$  daná výrazom (1) je riešením časovej SchR a opisuje časový vývoj stacionárneho stavu sústavy.

Podmienka (2) sa niekedy nazýva bezčasovou Schrödingerovou rovnicou. Názov ale nie je veľmi šťastne zvolený, pretože ľahko vedie k zámene dvoch principiálne odlišných rovníc: Schrödingerovej rovnice (4.1), čo je pohybová rovnica, ktorú musí spĺňať každá vlnová funkcia reprezentujúca časový vývoj stavu sústavy a bezčasovej Schrödingerovej rovnice (2), čo je podmienka stacionárnosti stavov. Nebezpečie zámeny je tým väčšie, že v hovorovej reči sa aj o bezčasovej Schrödingerovej rovnici zväčša hovorí iba ako o Schrödingerovej rovnici.

Zatiaľ sme bezčasovú Schrödingerovu rovnicu chápali trochu v pasívnom zmysle – ako kontrolu stacionárnosti uvažovaného stavu.

V praxi ju ale používame v aktívnom zmysle a určujeme pomocou nej možné stacionárne stavy danej sústavy a možné hodnoty energie týchto stavov. Ukazuje sa totiž, že rovnica (2) má fyzikálne prijateľné riešenia iba pri istých hodnotách parametra  $E$ . Tieto hodnoty sú často diskrétny a vtedy určujú možné hodnoty energie (diskrétnych) kvantových stavov sústavy. Pod riešením bezčasovej SchR (2) rozumieme: a) nájdenie možných hodnôt energie, b) nájdenie príslušných riešení. Takto sa v kvantovej mechanike určujú hodnoty energie stacionárnych

<sup>37</sup> Tieto podmienky sú fyzikálnej povahy a závisia do istej miery od toho, aký systém skúmame. Je to napríklad normovateľnosť vlnovej funkcie, jej jednoznačnosť a pod. S takýmito podmienkami sa stretne ešte v ďalšom pri diskusii riešení SchR v konkrétnych fyzikálnych situáciách.

stavov nielen pre jednoduché sústavy ako lineárny harmonický oscilátor a atóm vodíka, ale i pre oveľa komplikovanejšie sústavy.

## 2.6 ČASTICA VIAZANÁ NA ÚSEČKU

Teraz si na veľmi jednoduchom príklade ukážeme ako bezčasová SchR vedie k určeniu hodnôt energie a vlnových funkcií stacionárnych stavov. Budeme sa zaoberať prípadom elektrónu, ktorý sa môže pohybovať iba v jednom smere a je viazaný na úsečku  $0 \leq x \leq L$ . Túto situáciu si môžeme predstaviť realistickejšie ako elektrón pohybujúci sa v poli potenciálu  $V(x)$ , pričom  $V(x) = 0$  vnútri uvažovanej úsečky a mimo nej  $V(x)$  nadobúda veľmi vysokú hodnotu  $V_0$ . Neskôr sa podrobnejšou analýzou presvedčíme o tom, že táto situácia vedie k tomu, že elektrón nemôže preniknúť mimo úsečky a jeho vlnová funkcia je teda mimo uvažovanej úsečky nulová. Ak vlnová funkcia má byť spojitá (podrobnejšiu diskusiu tejto požiadavky zatiaľ odložíme), potom musí byť nulová aj v okrajových bodoch úsečky.

Stavová vlnová funkcia stacionárneho stavu musí spĺňať vnútri úsečky bezčasovú Schrödingerovu rovnicu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = E\Phi(x)$$

a podľa predchádzajúceho aj okrajové podmienky

$$\Phi(0) = 0 \quad (2a)$$

$$\Phi(L) = 0 \quad (2b)$$

Pre  $E > 0$  (čo odpovedá fyzikálnej požiadavke kladenej na energiu voľnej častice) môžeme rovnicu (1) prepísať do tvaru

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\alpha^2\Phi(x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3)$$

Všeobecným riešením (3) je funkcia

$$\Phi(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x)$$

Okrajová podmienka (2a) je splnená len pri  $B = 0$  a máme

$$\Phi(x) = A \sin(\alpha x) \quad (4)$$

Ak toto riešenie dosadíme do (2b), máme podmienku

$$\Phi(L) = A \sin(\alpha L) = 0 \quad (5)$$



Keby platilo  $A = 0$ , máme triviálne riešenie  $\Phi(x) = 0$ , ktoré neopisuje žiadny stav. Fyzikálne prijateľné riešenia dostaneme teda len pre určité hodnoty parametra  $\alpha$ , menovite pre tie, pre ktoré

$$\alpha = \alpha_n, \quad \alpha_n L = n\pi, \quad n \text{ celé} \quad (6)$$

Parameter  $\alpha$  je ale zviazaný s energiou vzťahom (3). Ak toto vyjadrenie  $\alpha$  pomocou  $E$  dosadíme do (6), pridáme k tomu, že (6) je splnené len pre hodnoty  $E_n$  dané podmienkou

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (7a)$$

a ku každej hodnote  $E_n$  máme podľa (4) stavovú vlnovú funkciu stacionárneho stavu

$$\begin{aligned} \Phi_n(x) &= A \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right), & \text{pre } 0 \leq x \leq L \\ \Phi_n(x) &= 0 & \text{pre } x \text{ mimo úsečky } (0, L) \end{aligned}$$

Konštantu  $A$  určíme z normovacej podmienky

$$\int_0^L |\Phi_n(x)|^2 dx = 1$$

ktorá fyzikálne odpovedá tomu, že pravdepodobnosť pre nájdenie častice na úsečke  $(0, L)$  je rovná jednej. Riešením tejto podmienky je napríklad

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

a takto prichádzame k sústave stavových vlnových funkcií<sup>38</sup>

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (7b)$$

<sup>38</sup> V rovnici (7b) už uvažujeme iba kladné hodnoty  $n$ . Zmena  $n \rightarrow -n$  by totiž len zmenila znamienko vlnovej funkcie a to je pri stacionárnom stave ekvivalentné len zmene fázy  $\exp(-i\omega t) \rightarrow \exp(-i\omega t + i\pi)$  čo z fyzikálnych dôvodov odpovedá tomu istému stavu. Takisto zámena  $A \rightarrow Ae^{i\beta}$  pri reálnom  $\beta$  mení len fázu, ale nemení fyzikálny stav.

Hodnoty energie k nim príslušné sú dané vzťahom (7a). Časová závislosť stacionárnych stavov potom bude

$$\psi_n(x, t) = \exp(-iE_n t/\hbar) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \quad (8)$$

Výsledky, ktoré sme tu dostali riešením bezčasovej SchR sú presne rovnaké ako tie, ktoré sme na základe analógie kvantových stavov s určitou energiou a harmonických kmitov klasických strún „uhádli“ už v predchádzajúcej kapitole.

Je užitočné všimnúť si podrobnejšie „mechanizmus kvantovania“. Samotná bezčasová SchR (3) má riešenie pri ľubovoľnej hodnote energie. Isté diskkrétne hodnoty energie sú tu vlastne vybrané spoluprácou okrajových podmienok (2a) a (2b). S analógiami tejto jednoduchej situácie sa ešte stretne neskôr pri zložitejších sústavách.

## 2.7 STREDNÉ HODNOTY FYZIKÁLNYCH VELIČÍN

Poznanie stavu sústavy umožňuje predpovedať pravdepodobnosti výsledkov merania fyzikálnych veličín. Úplná predpoveď výsledkov merania určitej fyzikálnej veličiny  $K$  v stave  $\psi$  obsahuje:

- súbor hodnôt  $\{K_n\}$ , ktoré môžu byť výsledkom merania veličiny  $K$ ,
- súbor pravdepodobností  $\{P_n\}$ , kde  $P_n$  je pravdepodobnosť namerať v stave  $\psi$  hodnotu  $K_n$ .

Pretože meranie vo všeobecnosti mení stav sústavy, musíme uvedenú predpoveď verifikovať meraním veličiny  $K$  buď na viacerých sústavách, ktoré sú všetky pred meraním v stave  $\psi$ , alebo musíme jedinou študovanú sústavu pred každým meraním uviesť do stavu  $\psi$ .

Často sa ale stáva, že nepotrebujeme úplnú informáciu o výsledkoch merania danej veličiny a stačí nám poznať jej strednú hodnotu, prípadne i strednú kvadratickú odchýlku. V tomto článku sa budeme zaoberať tým, ako takéto veličiny môžeme vypočítať pri danom stave a fyzikálnej veličine  $K$ . Najprv si pripomenieme niekoľko pojmov známych z teórie pravdepodobností a štatistiky.

Predpokladajme, že veličina  $K$  môže nadobúdať hodnoty  $K_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , a v stave  $\psi$  ich nadobúda s pravdepodobnosťami  $p_i$ .

Strednú hodnotu veličiny  $K$ , označenú symbolom  $\bar{K}$ , potom definujeme vzťahom

$$\bar{K} = \sum_{i=1}^n K_i p_i \quad (1)$$

Stredná hodnota veličiny v danom stave je prirodzene definovaná ako stredná hodnota výsledkov meraní tejto veličiny na veľkom súbore identických sústav nachádzajúcich sa v uvažovanom stave.

Jednotlivé výsledky meraní budú viac alebo menej rozptýlené okolo strednej hodnoty  $\bar{K}$ . Užitočnou mierou takéhoto rozptylu je stredná kvadratická odchýlka definovaná vzťahom

$$\overline{(\Delta K)^2} = \sum_{i=1}^n (K_i - \bar{K})^2 p_i \quad (2)$$

Ak rozložíme výraz  $(K_i - \bar{K})^2$  a využijeme definíciu  $\bar{K}$ , dostaneme vyjadrenie užitočnejšie pre praktické použitie

$$\overline{(\Delta K)^2} = \overline{K^2} - \bar{K}^2 \quad (3)$$

kde  $\bar{K}^2$  je definované ako

$$\overline{K^2} = \sum_{i=1}^n K_i^2 p_i \quad (4)$$

Ak pre skúmaný stav  $\psi$  veličina  $K$  môže nadobúdať iba jedinú hodnotu<sup>39</sup>  $K_1$ , potom  $\bar{K} = K_1$  a  $\overline{(\Delta K)^2} = 0$ . Hovoríme tiež, že v tomto stave nadobúda veličina  $K$  ostrú hodnotu.

Príkladom na takúto situáciu sú stacionárne stavy, v ktorých má energia ostrú hodnotu. Častejšie sa však stretávame so situáciou, kde  $\overline{(\Delta K)^2} > 0$ . Stredná kvadratická odchýlka predstavuje mieru neurčitosti veličiny  $K$  v danom stave. V kvantovej mechanike sa často stretávame so situáciami, keď skúmaná veličina môže v danom stave nadobúdať hodnoty spojito rozložené na nejakom intervale. Ak túto veličinu označíme ako  $k$  a zavedieme hustotu pravdepodobnosti  $p(k)$ , potom jednoduchým zovšeobecnením vzťahov (1) a (2) dostaneme

$$\bar{k} = \int k p(k) dk \quad (5)$$

$$\overline{(\Delta k)^2} = \int (k - \bar{k})^2 p(k) dk \quad (6)$$

Pritom  $p(k)dk$  je pravdepodobnosť pre nájdenie hodnoty  $k$  z intervalu  $(k, k + dk)$ .

Pre mnohé aplikácie postačí, ak poznáme iba stredné hodnoty a stredné kvadratické odchýlky niektorých veličín v uvažovanom stave a na základe tejto informácie si vieme vytvoriť dostatočnú predstavu o skúmanom stave. V nasledujúcich článkoch budeme preto systematickejšie študovať výpočty stredných hodnôt

<sup>39</sup> Vtedy sa  $p_1 = 1$  a všetky ostatné  $p_i$  sú rovné nule.

a stredných kvadratických odchýlok fyzikálnych veličín v stavoch daných stavovými vlnovými funkciami.

Predtým ale uvidíme jednoduché príklady súvisiace s časticou viazanou na úsečku. Predstavme si najprv, že elektrón viazaný na úsečku  $\langle 0, L \rangle$  je v základnom stave opísanom stavovou vlnovou funkciou

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

Jeho energia je vtedy presne  $E_1$ , takže platí

$$\begin{aligned} \bar{E} &= E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \\ \overline{(\Delta E)^2} &= 0 \end{aligned}$$

Hustota pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu v okolí bodu  $x$  v intervale  $\langle 0, L \rangle$  je

$$p(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right)$$

a podľa vzťahov (5) a (6) integrovaním per partes nájdeme

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_0^L x \frac{2}{L} \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx = \frac{L}{2} \\ \overline{x^2} &= \int_0^L x^2 \frac{2}{L} \sin^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx = L^2 \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right) \end{aligned}$$

odtiaľ podľa (3)

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = L^2 \cdot \frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2} \quad (8)$$

## 2.8 STREDNÉ HODNOTY VELIČÍN ZÁVISIACICH OD SÚRADNICE

V tomto a v nasledujúcom článku sa naučíme vypočítať stredné hodnoty veličín v stave, ktorého časová závislosť je opísaná vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r}, t)$ .

V klasickej mechanike jedinej častice vo vonkajšom silovom poli môžeme každú fyzikálnu veličinu vyjadriť pomocou súradnice  $\mathbf{r}$  a hybnosti  $\mathbf{p}$ . Ako príklad uveďme energiu

$$E = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r})$$

alebo moment hybnosti

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Najjednoduchší príklad predstavujú veličiny závislé iba od súradnice; takou veličinou je napríklad potenciálna energia  $V(\mathbf{r})$ , samotná poloha častice  $\mathbf{r}$ , alebo jej druhá mocnina  $r^2$  atď.

Výpočet stredných hodnôt takýchto veličín v kvantovej mechanike nie je problémom, pretože už vieme, že  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  je hustotou pravdepodobnosti pre nájdenie častice v okolí bodu  $\mathbf{r}$  (v čase  $t$ ). Ak máme klasickú veličinu  $F$  závislú od súradnice častice vzťahom  $F = F(\mathbf{r})$ , potom prirodzene predpokladáme, že v kvantovom prípade strednú hodnotu  $F$  vypočítame zo vzťahu

$$\overline{F(t)} = \int F(\mathbf{r}) \cdot |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \equiv \int \psi^*(\mathbf{r}, t) F(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

Vo všeobecnosti bude stredná hodnota  $F$  závislá od času, vďaka tomu, že  $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$  obsahuje časovú závislosť.

Špeciálnym prípadom je samotný polohový vektor častice  $\mathbf{r}$ . Stredná hodnota polohy častice je daná vzťahom

$$\overline{\mathbf{r}(t)} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (2)$$

Fyzikálne je  $\overline{\mathbf{r}(t)}$  kvantovomechanickým analógom klasickej trajektórie častice a určuje časovú závislosť polohy „stredú“ vlnového balíka.

## 2.9 VELIČINY ZÁVISLÉ OD HYBNOSTI

Zadanie stavovej vlnovej funkcie úplne určuje stav sústavy a preto vlnová funkcia musí obsahovať i informáciu o hybnosti častice a o veličinách závislých od hybnosti. Pravda, „zakódovanie“ tejto informácie do vlnovej funkcie nie je také jednoduché ako v prípade veličín závislých iba od súradnice.

Ak máme (v normalizácii na konečný objem podľa článku 2.2) časticu v určitom čase v stave opísanom stavovou vlnovou funkciou (2.5)

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \quad (1)$$

ktorá odpovedá de Broglieho vlne s hybnosťou  $\mathbf{p}$ , potom je zrejmé, že pri meraní hybnosti v tomto stave nameriame určite hybnosť  $\mathbf{p}$ . Predstavme si teraz, že máme časticu v stave

$$\psi(\mathbf{r}) = c_1 \Phi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{r}) + c_2 \Phi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

kde pri splnení normovacej podmienky

$$\int_V \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV$$

vďaka ortogonálnosti a normovanosti (pozri článok 2.2) funkcií  $\Phi_{p_1}$ ,  $\Phi_{p_2}$  platí

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (3)$$

Pýtame sa teraz na to, aké hodnoty hybnosti môžeme namerať v stave (2), ak urobíme experiment, v ktorom meriame hybnosť. Intuitívne sa zdá, že v stave (2), ktorý je superpozíciou de Broglieho vln s hybnosťami  $\mathbf{p}_1$ ,  $\mathbf{p}_2$  môžeme namerať iba tieto hodnoty hybnosti. Tento názor je potvrdený aj diskusiou procesu merania v článku 1.14.

Podľa tejto diskusie je tiež zrejmé, že musíme predpokladať, že pravdepodobnosti  $P_1$  a  $P_2$  namerať hodnoty  $\mathbf{p}_1$ , resp.  $\mathbf{p}_2$  sú dané vzťahom

$$P_1 = |c_1|^2, \quad P_2 = |c_2|^2 \quad (4)$$

pričom vďaka platnosti vzťahu (3) je splnená dôležitá vlastnosť pravdepodobností

$$P_1 + P_2 = 1 \quad (5)$$

Celá schéma kvantovej mechaniky ukazuje, že predpoklad (4) je správny a jeho zovšeobecnenie (stretne sa s ním neskôr) patrí k základným postulátom kvantovej mechaniky.

Teraz je už zrejmé, k čomu povedie meranie hybnosti v stave, ktorý je všeobecnou superpozíciou rovinných vln

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}} \Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

kde sčítujeme iba cez hodnoty  $\mathbf{p}$  povolené podmienkou (2.6). Vďaka ortonormovanosti systému  $\Phi_{\mathbf{p}}$  normovanosť  $\psi(\mathbf{r})$  zase žiada

$$\sum_{\mathbf{p}} |c_{\mathbf{p}}|^2 = 1 \quad (7)$$

Zovšeobecnením (4) prídeme k tomu, že v stave (6) nameriame jednotlivé hodnoty hybnosti s pravdepodobnosťami

$$P_{\mathbf{p}} = |c_{\mathbf{p}}|^2 \quad (8)$$

Strednú hodnotu hybnosti potom počítame štandardným postupom

$$\bar{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} P_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} |c_{\mathbf{p}}|^2 \quad (9)$$

Vďaka tomu, že rovinné vlny (1) tvoria úplný systém, možno ľubovoľnú funkciu písať v tvare superpozície (6) a teda pre ľubovoľný stav sústavy môžeme takýmto postupom získať úplnú informáciu o meraní hybnosti.

Pre výpočet v realistickej situácii by však táto schéma bola trochu príliš zdĺhavá, pretože vlnovú funkciu  $\psi(\mathbf{r})$  nemáme od začiatku danú ako superpozíciu (6) de Broglieho vln. V princípe to nie je problém, lebo (podľa článku 2.2) môžeme koeficienty  $c_p$  vypočítať podľa vzťahu

$$c_p = \int_V \Phi_p^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})dV \quad (10)$$

Zdĺhavosť procedúry je v tom, že pri výpočte  $\mathbf{p}$  musíme podľa predchádzajúceho a) z daného  $\psi(\mathbf{r})$  spočítať podľa (10) koeficienty  $c_p$ ; b) podľa (8) určiť pravdepodobnosti  $P_p$ ; c) podľa (9) spočítať  $\bar{\mathbf{p}}$ .

Našťastie celá schéma sa dá podstatne zjednodušiť a  $\bar{\mathbf{p}}$  môžeme dostať rovno podľa vzťahu

$$\bar{\mathbf{p}} = \int_V \psi^*(\mathbf{r})\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\mathbf{r})dV \quad (11)$$

Podme sa o tom presvedčiť. Do (11) dosadíme rozvoj funkcie  $\psi(\mathbf{r})$  zapísaný v (6) a máme

$$\bar{\mathbf{p}} = \int_V \left\{ \sum_p c_p^* \Phi_p^* \right\} \frac{\hbar}{i} \nabla \left\{ \sum_k c_k \Phi_k \right\} dV$$

Celý trik je v tom, že operátor  $(\hbar/i)\nabla$  „vylúpne“ z každej de Broglieho vlny príslušnú hybnosť, lebo, ako sa ľahko presvedčíme

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\Phi_k(\mathbf{r}) = \mathbf{k}\Phi_k(\mathbf{r})$$

Ak toto dosadíme do (12) a prehodíme poradie súm a integrálov, dostaneme

$$\bar{\mathbf{p}} = \sum_p \sum_k c_p^* c_k \mathbf{k} \int \Phi_p^* \Phi_k dV \quad (13)$$

Ako sme už spomínali v článku 2.2 funkcie  $\Phi_p$  splňajú podmienku

$$\int \Phi_p^* \Phi_k dV = \delta_{p,k} \quad (14)$$

kde  $\delta$  je Kroneckerov symbol. Po dosadení (14) do (13) z dvojnej sumy vypadnú všetky členy s  $\mathbf{k} \neq \mathbf{p}$  a ostane nám

$$\bar{\mathbf{p}} = \sum_p c_p^* c_p \mathbf{p} = \sum_p \mathbf{p} |c_p|^2$$

a to je presne vzťah (9).

Celkom analogicky možno prísť i k vzťahom pre výpočet stredných hodnôt vyšších mocnín hybností.

Čitateľ sa napríklad ľahko presvedčí o tom, že

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Phi_p(\mathbf{r}) = (p_x)^n \Phi_p(\mathbf{r})$$

a tento výsledok spolu s postupom medzi rovnicami (11) až (15) vedie rýchlo k tomu, že

$$\int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi dV = \sum_p (p_x)^n |c_p|^2$$

Pravá strana v tomto vzťahu je ale práve rovná  $\overline{(p_x)^n}$ . Takto máme

$$\overline{(p_x)^n} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi dV \quad (16)$$

V špeciálnom prípade  $n = 2$  dostaneme

$$\overline{(p_x)^2} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi dV = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi dV \quad (16')$$

Strednú kvadratickú odchýlku  $x$ -ovej komponenty hybnosti potom môžeme spočítať podľa vzťahu

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{(p_x)^2} - \bar{p}_x^2 \quad (17)$$

Všimnime si ešte, že podľa predchádzajúceho článku sme pre strednú hodnotu súradnice mali vzťah

$$\bar{x} = \int \psi^* x \psi dV \quad (18)$$

Výrazy (11) a (18) majú už na prvý pohľad rovnakú štruktúru a podobnú štruktúru majú i ostatné výrazy pre stredné hodnoty, ktoré sme uvádzali vyššie. Skôr, než urobíme zovšeobecnenie tejto štruktúry na výpočet strednej hodnoty ľubovoľnej veličiny je však potrebné zaviesť pojem operátora.

Na záver tohto článku ešte splatíme dva dlhy čitateľovi.

V článku 2.2 sme hovorili, že odpovede na fyzikálne dobre postavené otázky nezávisia od veľkosti normovacieho objemu  $V$ . Uvedme teraz typický príklad na to, ako objem  $V$  vypadne z konečných výsledkov. Nech  $\psi(\mathbf{r})$  je stavová vlnová funkcia opisujúca stav sústavy v určitom čase  $t_0$ . Zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou nameriame hybnosť častice v intervale  $I$ , kde

$$\begin{aligned} I: \quad & p_1 \leq p_x \leq p_1 + \Delta_1 \\ & p_2 \leq p_y \leq p_2 + \Delta_2 \\ & p_3 \leq p_z \leq p_3 + \Delta_3 \end{aligned} \quad (19)$$



pričom  $\Delta_i$  sú podstatne väčšie ako „vzdialenosť medzi susednými stavmi hybnosti“, t. j. (podľa 2.6)

$$\Delta \gg \frac{2\pi\hbar}{L}$$

Toto je dobre postavená otázka. Keby sme sa ale pýtali na to, s akou pravdepodobnosťou nameriame danú hodnotu hybnosti, mali by sme príklad na fyzikálne zle postavenú otázku (matematicky je otázka korektná). Dôvod je v tom, že pri veľkom normovacom objeme  $V$  sú stavy povolené podmienkou (2.6) tak tesne pri sebe, že žiadny detektor neodlíši dva „susedné“ stavy. Pravdepodobnosť nájsť stav s danou presnou hodnotou hybnosti je podľa (10) a (1)

$$P_p = |c_p|^2 \left| \frac{1}{\sqrt{V}} \int e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) dV \right|^2$$

V tejto pravdepodobnosti sa teda objaví faktor  $1/V$ , ktorý závisí od veľkosti normovacieho objemu. Pravdepodobnosť nájsť časticu v intervale  $I$  danom rovnicou (19) je rovná súčtu výrazov  $|c_p|^2$  pre všetky  $\mathbf{p}$  z intervalu  $I$ . Počet stavov dovolených podmienkou (2.6) je ale úmerný normovaciemu objemu  $V$ ; tento počet je totiž úmerný hustote povolených stavov danej rovnicou (2.12). Z výrazu pre pravdepodobnosť nájdania hybnosti častice v istom intervale  $I$  teda normalizačný objem vypadne.

Druhým dlhom je diskusia o hybnosti častice viazanej na úsečku, ktorú sme v článku 1.13 urobili iba kvalitatívne. Ak sa častica nachádza v stave

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n x}{L}, & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (20)$$

potom pravdepodobnosť namerať určitú hybnosť  $\mathbf{p}$  je daná vzťahom

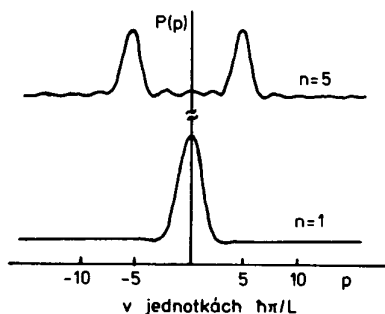
$$P(p) = |c(p)|^2 \quad \text{kde} \quad c_p = \int_{-A/2}^{A/2} \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx$$

kde  $A$  je „normovací objem“. Predpokladáme  $A \gg L$ . Integrál ľahko vypočítame a dostaneme

$$c(p) = \frac{\hbar}{\sqrt{2LA}} \left\{ \frac{1}{p - p_n} [e^{-iL(p-p_n)/\hbar} - 1] - \frac{1}{p + p_n} [e^{-iL(p+p_n)/\hbar} - 1] \right\}$$

kde sme označili  $p_n = \pi\hbar n/L$ .

Graf funkcie  $|c(p)|^2$  pre  $n = 1$  a  $n = 5$  je na obr. 2.2. Výpočet je poučný preto,<sup>40</sup> lebo ukazuje, že hoci energia častice je kvantovaná, hybnosť kvantovaná nie je. Len pre dostatočne veľké hodnoty  $n$  sú v rozdelení pravdepodobnosti výrazné maximá v okolí bodov  $p = \pm p_n$ .



Obr. 2.2

V diskusii v článku 1.13 sme v skutočnosti potrebovali iba neurčitosť  $\Delta p_x$ . Pre stav (20) ju ľahko zrátame. Pre strednú hodnotu  $p_x$  podľa (11) a (20) máme

$$\bar{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 0$$

a pre  $\overline{p_x^2}$  dostaneme podľa (16')

$$- \quad \overline{p_x^2} = -\hbar^2 \frac{2}{L} \int \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{L^2}$$

Strednú kvadratickú odchýlku potom nájdeme podľa (17)

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - \bar{p}_x^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{L^2}$$

a pre neurčitosť v hybnosti definovanú ako

$$\Delta p = \sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}}$$

<sup>40</sup> Podrobnejšiu diskusiu možno nájsť v príspevku A. Lacinu, Poznámka k analógii „stacionárny kvantový stav – stojatá vlna na struně“, v materiáloch konferencie Pedagogicko-fyzikálna problematika kvantovej fyziky, Luhačovice, 12. – 14. 5. 1981, red. M. Černohorský, Bmo 1981.

máme

$$\Delta p = \frac{\hbar \pi x}{L}$$

a toto spolu so vzťahom (7.8) vedie k presnejšiemu odhadu súčinu neurčitostí  $\Delta p \Delta x$  pre časticu viazanú na úsečku v základnom stave.

## 2.10 OPERÁTORY

V tomto článku zavedieme pojem operátora, ktorý hrá centrálnu úlohu vo formalizme kvantovej mechaniky.

**Definícia:** Nech  $D_1$  a  $D_2$  sú dve množiny funkcií. Predpis, ktorým každej funkcii z množiny  $D_1$  priradíme funkciu z množiny  $D_2$ , nazývame operátorom.

*Príklad 1.* Nech  $D$  je množina funkcií definovaných na intervale  $(0, 1)$ . Definujme operátor násobenia konštantou  $c$  tak, že každej funkcii priradíme jej  $c$ -násobok:  $f(x) \rightarrow cf(x)$ .

*Príklad 2.* Nech  $D$  je množina funkcií, ktoré sú definované na  $(0, 1)$  a majú v každom bode tohto intervalu prvú deriváciu. Potom môžeme zaviesť operátor, ktorý každej funkcii  $f(x) \in D$  priradí jej deriváciu

$$f(x) \rightarrow \frac{df(x)}{dx}$$

Operátory spravidla budeme označovať groteskovými písmenami, čiže  $A, B, a, \alpha$  pod. Ak  $A$  je operátor definovaný na množine funkcií  $D$ , a ak  $f \in D$ , tak symbol  $Af$  označuje funkciu, ktorú operátor  $A$  priraduje funkcii  $f$ . Často používaný symbol  $Af(x)$  znamená hodnotu funkcie  $Af$  v bode  $x$ , a nie pôsobenie operátora  $A$  na číslo  $f(x)$ .

Ďalej bude obor definície operátora zvyčajne zrejmý z kontextu. Vtedy ho spravidla nebudeme explicitne uvádzať.

V kvantovej mechanike sa najčastejšie stretávajú s lineárnymi operátormi.

**Definícia:** Operátor  $A$ , definovaný na množine funkcií  $D$ , nazývame lineárnym, ak pre ľubovoľné dve funkcie  $f_1, f_2 \in D$  a pre ľubovoľné dve komplexné čísla  $a_1, a_2$  platí:

$$A(a_1f_1 + a_2f_2) = a_1Af_1 + a_2Af_2$$

Obidva operátory uvedené v predchádzajúcich príkladoch boli lineárnymi operátormi. *Súčin dvoch operátorov* je definovaný nasledovne. Nech funkcia  $f_1$  patrí do oboru definície operátora  $A$  a nech funkcia  $f_2 = Af_1$  patrí do oboru

definície operátora B. Operátor  $C = BA$  je potom zobrazenie  $f_1 \rightarrow f_3 \equiv Cf_1$ , kde  $Cf_1 = B(Af_1)$ . Celkom analogicky definujeme mocninu operátora.

## 2.11 PRIRADENIE OPERÁTOROV FYZIKÁLNYM VELIČINÁM

Výrazy pre stredné hodnoty súradnice (8.2), hybnosti (9.11) a pre ďalšie veličiny, ktoré sme už vyššie spomínali, sú konštruované podľa formálne podobného predpisu. Vo všetkých prípadoch mal výraz pre strednú hodnotu  $A$  veličiny  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$  tvar

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r}) A \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

kde  $A$  bol určitý operátor súvisiaci s veličinou  $A$ . Pozrime sa na túto schému podrobnejšie.

Súradnici  $x$  priradíme operátor  $x$ , ktorý zavádzame ako jednoduché násobenie súradnicou. Ak  $f(x)$  je funkcia súradnice  $x$ , potom platí:

$$x f(x) = x f(x) \quad (2)$$

Zložke hybnosti  $p_x$  priradíme operátor

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad p_x f = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \quad (3)$$

Mocninám hybnosti  $p_x, p_y, p_z$  priradíme mocniny operátorov

$$(p_x)^n f = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n f = \left( \frac{\hbar}{i} \right)^n \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \quad \text{a pod.}$$

Podobne mocninám  $x$  priradíme operátory násobenia príslušnou mocninou, napríklad

$$x^n f(x) = x^n f(x)$$

Vzťahy pre stredné hodnoty zložiek hybnosti a pre súradnice (v určitom stave) potom píšeme v tvare

$$\begin{aligned} \bar{p}_x &= \int \psi^*(\mathbf{r}) p_x \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ \bar{x} &= \int \psi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4)$$

Vidíme, že výrazy majú štruktúru typu (1) a môžeme očakávať, že (1) je všeobecný typ vzťahu pre výpočet stredných hodnôt fyzikálnych veličín. Postup, ktorý sme použili v predchádzajúcich článkoch by sme mohli rozšíriť aj na veličiny ako  $x p_y$  a pod. a tiež by sme prišli k vzťahu typu (1). Ako všeobecne

platné tvrdenie by sme tento spôsob výpočtu strednej hodnoty museli postulovať, pričom postulát by mal zhruba nasledujúci tvar:

V kvantovej mechanike je každej fyzikálnej veličine  $A$  priradený istý operátor  $\hat{A}$  tak, že v stave  $\psi$  je stredná hodnota  $A$  daná vzťahom (1).

Tento postulát je povahy skôr matematickej ako fyzikálnej a nehovorí nám nič o tom, čo si v kvantovej mechanike máme (alebo môžeme) pod fyzikálnou veličinou predstavovať. Pozrime sa preto na tento problém podrobnejšie a začnime tým, ako situácia vyzerá v klasickej fyzike. Stav častice je v klasickej fyzike daný jej polohovým vektorom  $\mathbf{r}$  a hybnosťou  $\mathbf{p}$ . Mechanické veličiny sú funkciami  $\mathbf{r}$  a  $\mathbf{p}$ , a preto zadanie stavu tu určuje aj hodnoty všetkých fyzikálnych veličín. Ak v istom „stave“ meriame povedzme hybnosť dostaneme vždy ten istý výsledok a keď meriame (stále v danom stave) súradnicu, vždy dostaneme tú istú hodnotu  $r$  (danú zadaním klasického stavu).

V kvantovej mechanike je situácia podstatne odlišná. Zadaním stavu, t. j. zadaním vlnovej funkcie určujeme len možnosti výsledkov rôznych meraní. Ak sa napríklad rozhodneme, že budeme merať, povedzme, hybnosť v danom stave  $\psi$ , potom to znamená, že postupne pripravíme veľa sústav – pričom každá je v stave  $\psi$  – a u každej z nich meriame hybnosť. Ako výsledok dostaneme rad čísel – výsledkov merania hybnosti.

$$p_1, p_2, p_3, \dots, p_n, \dots \quad (5)$$

Ak sa rozhodneme pre meranie súradnice, postavíme celkom iný experiment, v ktorom ako výsledky merania dostaneme rad nameraných hodnôt súradnice, t. j. niečo ako

$$x_1, x_2, \dots, x_n, \dots \quad (6)$$

Stredná hodnota hybnosti  $p$  je strednou hodnotou čísel v postupnosti (5) a stredná hodnota súradnice  $x$  je strednou hodnotou čísel v rade (6). Vidieť takto, že  $x$  a  $p$ , a tým aj operátory  $\hat{x}$  a  $\hat{p}_x$  vystupujúce v (4) odpovedajú iným fyzikálnym situáciám. Operátor  $\hat{x}$  odpovedá experimentu, v ktorom meriame súradnicu a  $\hat{p}_x$  experimentu na meranie hybnosti.

Operátory priradené fyzikálnym veličinám nie sú teda spojené so stavom sústavy, ale s procesom, v ktorom danú fyzikálnu veličinu meriame. Ak si chceme urobiť istú predstavu o fyzikálnej veličine v kvantovej mechanike, môžeme si predstaviť istý prístroj, ktorým túto veličinu meriame. Na prvý pohľad by sa mohlo zdať divné, že fyzikálna veličina tak tesne súvisí s meracím prístrojom a mohlo by sa tiež zdať, že sa týmto do interpretácie vnáša subjektívny element. Ale nie je to pravda. Výsledky pre  $\bar{x}$ ,  $(\Delta x)^2$  a pod. nezávisia od toho, či súradnicu meriame sčernením na fotografickej platni, Geigerovým-Müllerovým počítačom, mikroskopom, drôtovou komorou alebo iným spôsobom. Meraniu súradnice všetkými týmito spôsobmi je priradený ten istý operátor  $\hat{x}$ . Možno teda povedať, že tento

operátor je priradený interakcii atomárneho objektu so všetkými makroskopickými prístrojmi, ktoré vedú k lokalizácii častice.<sup>41</sup>

Podobne operátor priradený istej veličine  $F$  je priradený všetkým interakciám atomárneho objektu s makroskopickým objektom, ktoré vedú k určitej hodnote veličiny  $F$ . Zdôraznime ešte raz, že tu je podstatný rozdiel medzi kvantovou a klasickou fyzikou, v ktorej sú fyzikálne veličiny jednoznačne dané stavom a to bez ohľadu na akékoľvek interakcie sústavy s inými objektmi.

Správnosť výberu operátora priradeného k istej veličine je závažnou otázkou a neexistuje na ňu univerzálny návod. V konečnom dôsledku tento operátor treba „uhádnuť“. V niektorých prípadoch je však toto „hádanie“ veľmi jednoduché. Ak napríklad hľadáme operátor priradený veličine, ktorá má klasický analóg, potom podľa princípu korešpondencie očakávame, že vyjadrenie tohto operátora pomocou operátorov súradnice a hybností bude rovnaké ako vyjadrenie príslušnej klasickej veličiny pomocou súradnice a hybnosti platné v klasickej mechanike. V nasledujúcom článku si ukážeme príklady takéhoto postupu.

Doteraz sme nehovorili o tom, ako môžeme pri danej fyzikálnej veličine  $K$  a danej sústave nájsť hodnoty  $K_i$ , ktoré môžeme pri meraní  $K$  nájsť. S touto otázkou sa budeme zaoberať podrobnejšie v článku 2.14. Zdôraznime ale už na tomto mieste, že súbor  $K_i$  nezávisí od stavu sústavy, ale je určený samotnou veličinou  $K$  a sústavou, na ktorej  $K$  meriame.

## 2.12 OPERÁTORY ENERGIE A MOMENTU HYBNOSTI, PRINCÍP KOREŠPENDENCIE

*Operátor energie* (Hamiltonov operátor). V klasickej mechanike sa celková energia (označujeme ju  $H$ ) častice rovná súčtu kinetickej a potenciálnej energie

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\mathbf{r})$$

kde  $\mathbf{p}$  je hybnosť,  $m$  hmotnosť a  $\mathbf{r}$  polohový vektor častice. Operátor energie  $H$  (Hamiltonov operátor alebo hamiltonián) dostaneme tak, že  $p_x, p_y, p_z$  nahradíme príslušnými operátormi

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2) + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

<sup>41</sup> Absolútne stotožnenie meracieho prístroja s operátorom nie je možné už i preto, že každý operátor musí pôsobiť na určité premenné a tieto premenné sa musia vyskytovať vo vlnových funkciách priradených stavom, o ktoré sa zaujímate. Preto je snád' vhodnejšie priraďovať operátor typu interakcie ako priamo meraciemu prístroju. Napríklad Sternov a Gerlachov prístroj (článok 1.8) meria spin elektrónu, ale práve tak môže merať aj hodnoty magnetických momentov iného pôvodu.

Operátor príslušný k funkcii  $V(\mathbf{r})$  sa redukuje podobne ako v rovniciach (8.1) a (10.2) na jednoduché násobenie funkciou  $V(\mathbf{r})$ .

Operátor momentu hybnosti. V klasickej mechanike je moment hybnosti definovaný vzťahom  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . Táto vektorová rovnica predstavuje tri rovnice

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

Operátor momentu hybnosti dostaneme opäť nahradením súradníc a zložiek hybnosti operátormi. Dostaneme

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y = i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= zp_x - xp_z = i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= xp_y - yp_x = i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

Operátor druhej mocniny momentu hybnosti je definovaný vzťahom

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3)$$

Pomocou trochu zdĺhavých ale štandardných úprav (ktoré prenechávame čitateľovi ako cvičenie) možno operátory  $L_x, L_y, L_z$  a  $L^2$  vyjadriť v sférických súradniciach  $r, \vartheta, \varphi$  zviazaných s  $x, y, z$  vzťahmi

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta \\ r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \quad \vartheta = \arccos \frac{z}{r}, \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (4)$$

Konečné vzorce sú

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left( -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (5)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (6)$$

Podobným spôsobom možno nájsť operátory príslušné k ďalším veličinám, ktoré majú klasický analóg. Tento postup však nie je vždy jednoznačný. Ak sa vo vyjadrení klasickej veličiny vyskytuje súčin  $xp_x$  alebo  $yp_y$  a pod., potom nevieme, či príslušný operátor bude  $xp_x$  alebo  $p_x x$ . Súčin klasických veličín je totiž komutatívny  $xp_x = p_x x$ , zatiaľ čo súčin dvoch operátorov v kvantovej mechanike vo všeobecnosti komutatívny nie je. Ľahko sa o tom presvedčíme na príklade operátorov  $x$  a  $p_x$ . Pôsobením operátora  $xp_x$  na ľubovoľnú funkciu  $f(x)$  dostaneme

$$xp_x f(x) = -i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \quad (7)$$

zatiaľ čo pôsobením operátora  $p_x x$  na tú istú funkciu dostaneme funkciu

$$p_x x f(x) = p_x (x f(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x f) = -i\hbar f - i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \quad (8)$$

Pravé strany v rovniciach (7) a (8) sú rôzne. Vidíme teda, že pôsobenie operátora  $xp_x - p_x x$  na funkciu  $f$  dá výsledok

$$(xp_x - p_x x)f = -i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} - \left( -i\hbar f - i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} \right) = i\hbar f \quad (9)$$

Keďže tento vzťah platí pre ľubovoľnú funkciu  $f$  (a dva operátory  $A, B$  sa rovnajú, ak pre ľubovoľné  $f$  platí  $Af = Bf$ ), môžeme (9) zapísať ako operátorovú rovnosť

$$xp_x - p_x x = i\hbar \quad (10)$$

Operátorové výrazy tohto typu sú natoľko dôležité, že je pre ne zavedené zvláštne označenie

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (11)$$

Operátor  $[A, B]$  nazývame komutátorom operátorov  $A, B$ .

Vráťme sa teraz k problému priradenia „správneho“ operátora klasickému súčinu  $xp_x$ . Pretože operátory  $x, p$ , nekomutujú, je rozdiel, či klasický výraz  $xp_x$  nahradíme operátorom  $xp_x$ , alebo  $p_x x$ , alebo  $(xp_x + p_x x)/2$  atď. Univerzálny predpis neexistuje, ale najčastejšie vedie k cieľu posledná z troch spomínaných možností. Táto nejednoznačnosť nie je „chybou“ kvantovej mechaniky, ukazuje len obmedzenie použiteľnosti princípu korešpondencie.

V istom zmysle sa toto obmedzenie vzťahuje i na operátor momentu hybnosti. V rovniciach (2) sa síce nekomutujúce operátory na pravých stranách nevyskytujú, takže vyjadrenia pre  $L_x, L_y, L_z$  v (2) dostaneme jednoznačne z princípu korešpondencie. Problém je v tom, že napr. pre elektrón predstavuje *orbitálny moment hybnosti daný* rovnicami (2) iba časť celkového momentu hybnosti. Aby sme dostali operátor celkového momentu hybnosti, musíme k (2) ešte pridať *spinový moment hybnosti* a jeho vyjadrenie nemožno získať z princípu korešpondencie.



## 2.13 HERMITOVSKÉ OPERÁTORY, VLASTNÉ FUNKCIE, VLASTNÉ HODNOTY

Videli sme, že operátory budú mať jednu z hlavných úloh vo formalizme kvantovej mechaniky. Uvedieme preto niekoľko definícií a viet matematického charakteru, ktoré budeme potrebovať pri ďalšom budovaní formalizmu. Pritom si budeme všimnúť najmä tzv. hermitovské operátory, lebo práve tieto sú priradené fyzikálnym veličinám.

Lineárny operátor  $A$  definovaný na množine funkcií  $D$  nazývame lineárnym hermitovským operátorom, ak pre ľubovoľnú funkciu  $\Phi(x) \in D$  platí

$$\left[ \int \Phi^*(x) A \Phi(x) dx \right]^* = \int \Phi^*(x) A \Phi(x) dx \quad (1a)$$

Túto definíciu možno pomocou výrazov pre stredné hodnoty preformulovať nasledovne:

Operátor  $A$  je lineárny hermitovský operátor, ak všetky jeho stredné hodnoty sú reálne čísla.

Stredné hodnoty fyzikálnych veličín musia byť v rozumnej teórii reálnymi číslami, a preto musíme požadovať, aby každý operátor priradený reálnej fyzikálnej veličine bol hermitovským operátorom. Z definície (1a) vyplýva dôležitá vlastnosť hermitovských operátorov. Nech  $\psi_1$  a  $\psi_2$  sú dve ľubovoľné funkcie z oboru definície hermitovského operátora  $A$ .

Potom platí:

$$\int \psi_1^* A \psi_2 dx = \int (A \psi_1)^* \psi_2 dx \quad (1b)$$

Tento vzťah dostaneme priamo z rovnice (1a), ak za  $\Phi$  raz dosadíme  $(\psi_1 + \psi_2)$  a raz  $(\psi_1 + i\psi_2)$ . Pre výrazy typu  $\int \psi_1^* A \psi_1 dx$  použijeme priamo rovnicu (1a) a vytvoríme vhodné lineárne kombinácie získaných rovníc.

Nech  $A$  je operátor definovaný na množine funkcií  $D$ . Ak operátor  $A^+$  je definovaný na tej istej množine funkcií, a ak pre všetky  $\psi_1, \psi_2 \in D$  platí:

$$\int (A^+ \psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* A \psi_2 dx \quad (1c)$$

tak hovoríme, že  $A^+$  je operátor hermitovsky združený k operátoru  $A$ . Operátor hermitovsky združený s daným budeme označovať krížikom, tak ako v (1c). Na základe vzťahu (1c) sa dá ľahko dokázať, že  $(A^+)^+ = A$  a že  $(AB)^+ = B^+A^+$ .

Z porovnania (1c) a (1b) vidno, že operátor  $A$  je hermitovský, ak platí  $A = A^+$ .

Na ilustráciu teraz ukážeme, že operátor hybnosti je hermitovským operátorom na množine vlnových balíkov  $\Phi(\mathbf{r})$ , ktoré dosť rýchlo klesajú k nule pre  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ . Pre zjednodušenie uvažujeme len operátor  $p_x$  a jednorozmerný vlnový

balík  $\Phi(x)$ . Podľa (1a) máme dokázať platnosť rovnice

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) p_x \Phi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} [p_x \Phi(x)]^* \Phi(x) dx$$

alebo po dosadení  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right]^* \Phi(x) dx$$

Tento výsledok však vyplýva priamo z integrovania per partes, ak pod „dost' rýchlym“ poklesom  $\Phi(x)$  pre  $|x| \rightarrow \infty$  rozumieme splnenie podmienky

$$\Phi^*(x) \Phi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } |x| \rightarrow \infty$$

Podobne s využitím vzťahu

$$\Phi^* \nabla^2 \Phi - (\nabla^2 \Phi)^* \Phi = \nabla \cdot [\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*]$$

Gaussovej vety a predpokladu o dostatočne rýchlym poklese  $\Phi(\mathbf{r})$  a  $\nabla \Phi(\mathbf{r})$  pre  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  možno ukázať, že Hamiltonov operátor  $H = (-\hbar^2/2m) \nabla^2 + V(\mathbf{r})$  je hermitovským operátorom. Tak isto sa dá ľahko ukázať, že zložky operátora momentu hybnosti  $L_x$ ,  $L_y$ , a  $L_z$  sú hermitovské operátory.

Pri zisťovaní toho, či daný operátor je hermitovský, je často užitočné nasledujúce tvrdenie.

Nech operátory  $A$ ,  $B$  sú hermitovské a definované na množine funkcií  $D$ . Nech  $A\Phi \in D$ ,  $B\Phi \in D$  pre každé  $\Phi \in D$  a nech napokon operátory  $A$ ,  $B$  komutujú, t. j. nech pre každé  $\Phi \in D$  platí vzťah  $A[B\Phi] = B[A\Phi]$ . Potom operátor  $C = AB$  je hermitovským operátorom.

Pri dôkaze stačí verifikovať platnosť rovnice

$$\int (C\Phi_2)^* \Phi_1 d^3r = \int \Phi_2^* C\Phi_1 d^3r$$

pre ľubovoľné  $\Phi_1, \Phi_2 \in D$ . Túto rovnicu získame nasledovne:

$$\begin{aligned} \int \Phi_2^* C\Phi_1 d^3r &= \int \Phi_2^* A[B\Phi_1] d^3r = \int (A\Phi_2)^* B\Phi_1 d^3r = \\ &= \int [B(A\Phi_2)]^* \Phi_1 d^3r = \int (C\Phi_2)^* \Phi_1 d^3r \end{aligned}$$

kde sme využili hermitovosť a komutatívnosť operátorov  $A$ ,  $B$ . Teraz zavedieme dôležité pojmy *vlastnej hodnoty* a *vlastnej funkcie* operátora.

Nech  $A$  je operátor definovaný na množine funkcií  $D$ . Ak funkcia  $f(x) \in D$  spĺňa rovnicu

$$A f(x) = A f(x) \quad (2a)$$

kde  $A$  je číslo, hovoríme, že  $f(x)$  je vlastnou funkciou a  $A$  vlastnou hodnotou operátora  $A$ . Operátor  $A$  môže mať viacero vlastných funkcií; ak ich je konečný

počet (alebo spočítateľne veľa), jednotlivé vlastné funkcie odlišujeme indexom a píšeme

$$A f_n(x) = A_n f_n(x) \quad (2b)$$

Ak vlastné hodnoty operátora  $A$  nadobúdajú všetky hodnoty z istého intervalu, tak namiesto (2b) píšeme

$$A f_\alpha(x) = A(\alpha) f_\alpha(x) \quad (2c)$$

Množinu vlastných hodnôt operátora nazývame jeho spektrom. V prípade opísanom rovnicou (2b) hovoríme o diskretnom, v prípade (2c) o spojitom spektre. Ak jednej vlastnej hodnote patrí viacero vlastných funkcií, hovoríme, že príslušná vlastná hodnota je degenerovaná alebo stručne hovoríme o degenerácii.

*Príklad:* Vlastnými funkciami operátora  $p_x$  sú de Broglieho vlny  $\psi_q(x) = \exp(iqx/\hbar)$ . Ak využijeme definíciu operátora  $p_x$ , dostaneme:

$$p_x \psi_q(x) = q \psi_q(x) \quad (3)$$

Použitý zápis odpovedá rovnici (2c), v ktorej platí  $A(\alpha) = \alpha$ . Platí dôležité tvrdenie:

*Vlastné hodnoty hermitovského operátora, príslušné k normovateľným vlastným funkciám, sú reálne čísla.*<sup>42</sup>

*Dôkaz:* Nech  $A$  je hermitovský operátor,  $f(x)$  normovateľná vlastná funkcia a  $A$  príslušná vlastná hodnota. Podľa (1a) sú stredné hodnoty hermitovského operátora reálne čísla. Teda

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) A f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) A f(x) dx = A \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$$

je reálne číslo. Ak funkcia  $f(x)$  je normovateľná, integrál vystupujúci na pravej strane poslednej rovnice je konečný a kladný, takže vlastná hodnota  $A$  bude reálnym číslom.

Dôležitá vlastnosť vlastných funkcií hermitovského operátora je daná nasledujúcim tvrdením.

*Vlastné funkcie, príslušné k rôznym vlastným hodnotám hermitovského operátora, sú navzájom ortogonálne.*

**Dôkaz:** Nech  $A$  je hermitovský operátor, a nech podľa predpokladu platí:

$$\begin{aligned} A \varphi_n(x) &= A_n \varphi_n(x) \\ A \varphi_k(x) &= A_k \varphi_k(x) \quad A_k \neq A_n \end{aligned}$$

Násobme prvú rovnicu funkciou  $\varphi_k^*(x)$ , druhú funkciou  $\varphi_n^*(x)$  a integrujme získané rovnice cez obor definície vlastných funkcií. Dostaneme:

$$\begin{aligned} \int \varphi_k^*(x) A \varphi_n(x) dx &= A \int \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) dx \\ \int \varphi_n^*(x) A \varphi_k(x) dx &= A \int \varphi_n^*(x) \varphi_k(x) dx \end{aligned} \quad (4)$$

<sup>42</sup> Niekedy sa vlastnými funkciami nazývajú len normovateľné riešenia rovnice (2a).

K druhej z týchto rovníc nájdeme rovnicu komplexne združenú. Využijeme (1b) a reálnosť  $A_k$ . Dostaneme

$$\int \varphi_k^*(x) A \varphi_n(x) dx = A_k \int \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) dx$$

Odčítaním tohto vzťahu od prvej rovnice (4) dostaneme výsledok

$$(A_k - A_n) \int \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) dx = 0$$

ktorý dokazuje vetu.

Rovnica  $A \varphi_n(x) = A_n \varphi_n(x)$  je lineárnou homogénnou rovnicou. Teda spolu s funkciou  $\varphi_n(x)$  bude vlastnou funkciou operátora  $A$  aj funkcia  $c \varphi_n(x)$  ( $c$  je ľubovoľná konštanta). Túto vlastnosť možno využiť na to, aby vlastné funkcie boli normované na jednotku.

Ak je istá vlastná hodnota degenerovaná, teda ak vlastnej hodnote  $A_s$  patria dve lineárne nezávislé funkcie  $\varphi_s^{(1)}(x)$  a  $\varphi_s^{(2)}(x)$ :

$$A \varphi_s^{(1)}(x) = A_s \varphi_s^{(1)}(x)$$

$$A \varphi_s^{(2)}(x) = A_s \varphi_s^{(2)}(x)$$

potom funkcie  $\varphi_s^{(1)}(x)$  a  $\varphi_s^{(2)}(x)$  nemusia byť podľa predchádzajúceho navzájom ortogonálne. Možno však zostrojiť také lineárne kombinácie<sup>43</sup>

$$\begin{aligned} \varphi_{s1} &= c_{11} \varphi_s^{(1)} \\ \varphi_{s2} &= c_{21} \varphi_s^{(1)} + c_{22} \varphi_s^{(2)} \end{aligned} \tag{5}$$

že funkcie  $\varphi_{s1}$  a  $\varphi_{s2}$  budú normované a navzájom ortogonálne. Nájdanie vhodných koeficientov  $c_{11}$ ,  $c_{21}$ ,  $c_{22}$  prenechávame čitateľovi ako cvičenie.

To isté možno urobiť, ak vlastná hodnota je  $N$ -násobne degenerovaná, t. j. ak vlastnej hodnote  $A$ , patrí  $N$  lineárne nezávislých funkcií.

Keď zhrnieme predchádzajúce výsledky, môžeme povedať: Vlastné funkcie hermitovského operátora  $A$  určené rovnicou  $A \varphi_n = A_n \varphi_n$  tvoria ortonormovaný systém. Splňajú vzťahy

$$\int \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{nk} \tag{6}$$

kde  $\delta_{nk}$  je Kroneckerov symbol. Ak vlastné hodnoty sú degenerované, tak rovnica (6) platí pre ortogonalizované funkcie, pričom rôznym ortogonalizovaným funkciám priradíme rôzne indexy  $n$ .

<sup>43</sup> Napríklad Schmidtovým ortogonalizačným postupom.

Predpokladá sa, že systémy vlastných funkcií príslušné k operátorom priradeným dôležitým fyzikálnym veličinám (energii, momentu hybnosti a pod.) tvoria úplné systémy, teda ľubovoľnú funkciu  $\Phi(x)$  možno rozložiť do radu pomocou vlastných funkcií takéhoto operátora.<sup>44</sup>

Inými slovami: pre „ľubovoľnú“ funkciu platí:

$$\Phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad (7)$$

kde  $f_n(x)$  splňajú podmienku (6) a vyhovujú rovnici (2b). Koefficienty  $c_n$  v tomto rozklade určíme jednoducho, ak využijeme ortonormovanosť<sup>45</sup> systému funkcií  $f_n$ . Násobme rovnicu (7) funkciou  $f_m$  a integrujme cez celý priestor. Dostaneme

$$\begin{aligned} \int f_m^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} &= \int f_m^*(\mathbf{r})\left[\sum_n c_n f_n(\mathbf{r})\right]d^3\mathbf{r} = \\ &= \sum_n c_n \int f_m^*(\mathbf{r})f_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m \end{aligned}$$

pričom sme využili ortonormovanosť sústavy  $\{f_n\}$ :

$$\int f_m^*(\mathbf{r})f_n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{mn} \quad (8)$$

a predpokladali sme, že môžeme zameniť poradie sumy a integrálu. Dostali sme teda vyjadrenie

$$c_m = \int f_m^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (9)$$

Predchádzajúce vzťahy sme písali pre prípad diskrétného spektra operátora A. Pre spojité spektrum existujú podobné vzťahy, ale prídeme k nim až neskôr.

## 2.14 FYZIKÁLNE VELIČINY – VŠEOBECNÝ FORMALIZMUS

Teraz už môžeme prediskutovať podrobnejšie základné myšlienky kvantovej mechaniky týkajúce sa fyzikálnych veličín a ich merania. Budeme sa teda zaoberať tým, ako je v stavovej vlnovej funkcii  $\psi(\mathbf{r})$  priradenej stavu sústavy v istom čase  $t_0$  a v operátore  $A$  priradenom istej fyzikálnej veličine  $A$  zakódovaná informácia o výsledkoch merania tejto veličiny v danom stave.

<sup>44</sup> Pre niektoré jednoduché sústavy možno tvrdenie dokázať. Všeobecne však treba úplnosť systému vlastných funkcií predpokladať alebo postulovať.

<sup>45</sup> Systém funkcií nazývame ortonormovaným, ak sú splnené vzťahy (6).

Ak nám postačí neúplná informácia pozostávajúca v zadaní strednej hodnoty veličiny  $A$  a prípadne aj strednej kvadratickej odchýlky, postup je jednoduchý. Strednú hodnotu veličiny  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$  určíme zo vzťahu<sup>46</sup>

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r}) A \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

a stredná kvadratická odchýlka bude

$$\overline{(\Delta A)^2} = \int \psi^*(\mathbf{r}) (A - \bar{A})^2 \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (2)$$

Niekedy však potrebujeme poznať úplnú predpoveď pozostávajúcu

a) zo zadaní všetkých možných hodnôt  $A_n$ , ktoré môžu byť výsledkom jednotlivých meraní veličiny  $A$ ,

b) zo zadaní pravdepodobností  $P_n$  pre nájdenie hodnoty  $A_n$  pri meraní  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$ .

Túto úlohu sme už riešili v článku 2.9 pre špeciálny prípad merania hybnosti častice. Všeobecná metóda je celkom analogická postupu použitému v článku 2.9 a podstatne využíva vlastné funkcie operátora  $A$  a ich fyzikálnu interpretáciu, ktorú si zaraz všimneme bližšie.

Predpokladajme, pre jednoduchosť, že operátor  $A$  má diskrétné spektrum, jeho vlastné funkcie označíme ako  $\Phi_n$  a príslušné vlastné hodnoty ako  $A_n$ . Platí teda

$$A\Phi_n = A_n\Phi_n \quad (3)$$

Stredná hodnota veličiny  $A$  v stave  $\Phi_n$  je

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) A \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) A_n \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= A_n \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = A_n \end{aligned} \quad (4)$$

Pritom sme použili vzťah (3) a normovanosť funkcie  $\Phi_n(\mathbf{r})$ .

Stredná hodnota veličiny  $A$  v stave opísanom vlastnou funkciou<sup>46</sup>  $\Phi_n$  je teda rovná príslušnej vlastnej hodnote. Vypočítajme ešte strednú kvadratickú odchýlku veličiny  $A$  v jej vlastnom stave  $\Phi_n$ .

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta A)^2} &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) (A - \bar{A})^2 \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= \int \Phi_n^*(\mathbf{r}) (A - A_n)(A - A_n) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (5)$$

---

<sup>46</sup> Takýto stav budeme nazývať aj vlastným stavom operátora  $A$ , alebo vlastným stavom veličiny  $A$ .

Pretože  $\mathbf{A}$  je hermitovský a vlastná hodnota  $A_n$  je reálne číslo, bude aj  $(\mathbf{A} - A_n)$  hermitovským operátorom a ostatný vzťah môžeme prepísať do tvaru

$$\overline{(\Delta A)^2} = \int [(\mathbf{A} - A_n)\Phi_n(\mathbf{r})]^* [(\mathbf{A} - A_n)^2\Phi_n(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} = 0$$

kde sme využili napokon rovnicu (3).

Stredná kvadratická odchýlka veličiny  $A$  v jej vlastnom stave  $\Phi_n$  je teda nulová, a to značí, že pri meraní  $A$  v jej vlastnom stave  $\Phi_n$  nájdeme s určitou vlastnú hodnotu  $A_n$ .

Tvrdenie platí i obrátene. Ak v nejakom stave  $\Phi_\alpha$  má veličina  $A$  „ostrú“ hodnotu  $A_\alpha$  (t. j. pri meraní nájdeme s určitou hodnotu  $A_\alpha$ ), potom stav  $\Phi_\alpha$  je vlastným stavom operátora  $\mathbf{A}$  s vlastnou hodnotou  $A_\alpha$ . Dôkaz je jednoduchý.

Ak v stave  $\Phi_\alpha$  pri každom meraní veličiny  $A$  nameriame hodnotu  $A_\alpha$ , platí

$$\overline{A} = A_\alpha, \quad \overline{A^2} = A_\alpha^2$$

Odtiaľ máme

$$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - \overline{A}^2 = 0$$

Podľa predchádzajúceho

$$0 = \overline{(\Delta A)^2} = \int |(\mathbf{A} - \overline{A})\Phi_\alpha|^2 d^3\mathbf{r} = \int |(\mathbf{A} - A_\alpha)\Phi_\alpha|^2 d^3\mathbf{r}$$

Preto musí platiť  $(\mathbf{A} - A_\alpha)\Phi_\alpha = 0$ , t. j.

$$\mathbf{A}\Phi_\alpha = A_\alpha\Phi_\alpha$$

Ostatná rovnica hovorí, že  $A_\alpha(\mathbf{r})$  je vlastnou funkciou operátora  $\mathbf{A}$  a  $A_\alpha$  je príslušnou vlastnou hodnotou.

Vlastné hodnoty  $A_\alpha$  operátora  $\mathbf{A}$  priradeného k fyzikálnej veličine  $A$  sú teda určite možnými výsledkami merania tejto fyzikálnej veličiny, lebo sme našli stavy, v ktorých určite tieto hodnoty nameriame. Skúsenosť však ukazuje, že sú to jediné možné výsledky merania veličiny  $A$ , a to bez ohľadu na to, v akom stave sa meraná sústava nachádza. Ilustrujme to na jednoduchom príklade. Vždy, keď sa merala energia atómu vodíka, našla sa jedna z hodnôt energií odpovedajúcich stacionárnym stavom. Podľa článku 2.5 sú ale stacionárne stavy opísané vlnovými funkciami (5.1), v ktorých vlnová funkcia  $\Phi(\mathbf{r})$  je riešením rovnice (5.2), t. j.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (6)$$

Výraz na ľavej strane je však podľa predchádzajúceho článku operátorom energie – hamiltoniánom  $\mathbf{H}$ , takže (6) môžeme prepísať ako

$$\mathbf{H}\Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

Vlnové funkcie stacionálnych stavov sú takto vlastnými funkciami operátora energie a energie stacionárnych stavov sú vlastnými hodnotami operátora energie. Pri meraní energie môžeme, ako ukazuje experiment, nájsť len tie hodnoty  $E_n$ , pre ktoré má (7) riešenie, t. j.

$$H\Phi_n(\mathbf{r}) = E_n\Phi_n(\mathbf{r}) \quad (8)$$

K podobným záverom vedú aj poznatky získané z meraní iných fyzikálnych veličín.

Vo všeobecnosti toto tvrdenie zavádzame ako jeden zo základných postulátov kvantovej mechaniky:

*Pri meraní fyzikálnej veličiny  $A$ , opísanej operátorom  $\mathbf{A}$ , môžeme ako výsledok jednotlivého merania získať len jednu z vlastných hodnôt operátora  $\mathbf{A}$ .*

Existuje aj teoretický argument, ktorý ukazuje, že pri meraní určitej veličiny  $A$  môžeme namerať len jednu z vlastných hodnôt  $A_\alpha$ . Predpokladajme, že sústava (napríklad atóm vodíka) je v čase  $t_0$  v stave  $\Phi(\mathbf{r}, t_0)$  a pri meraní veličiny  $A$  (napríklad energie) v tomto čase nájdeme hodnotu  $A'$ . Ak meranie veličiny opakujeme po veľmi krátkom čase  $\delta t$ , potom je rozumné predpokladať, že musíme namerať opäť tú istú hodnotu  $A'$ . Toto ale znamená,<sup>47</sup> že tesne pred druhým meraním musela byť sústava v stave  $\Phi'$ , ktorý je vlastným stavom operátora  $\mathbf{A}$  (len v takýchto stavoch nameriame s istotou určitú hodnotu veličiny  $A$ ). Hodnota  $A'$ , ktorú sme našli pri opakovanom meraní, je preto jednou z vlastných hodnôt operátora  $\mathbf{A}$ . Pretože opakované meranie dalo rovnakú hodnotu ako prvé meranie, museli sme už pri ňom nájsť jednu z vlastných hodnôt operátora  $\mathbf{A}$ .

Poznamenajme ešte, že: **1.** Pri meraní zachovávaajúcej sa veličiny, napr. energie, nemusí byť časový úsek  $\delta t$  veľmi malý. **2.** Pri diskusii sme predpokladali, že prístroj použitý pri meraní veličiny  $A$  je dostatočne presný – jeho rozlišovacia schopnosť je dostatočná na rozlíšenie dvoch susedných vlastných hodnôt.

Týmto je vyriešená prvá časť otázky – vieme aké hodnoty fyzikálnej veličiny môžeme nájsť pri jednotlivých meraniach. Ostáva nám ešte odpovedať na druhú z otázok – ak meriame veličinu  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$ , s akou pravdepodobnosťou nameriame hodnotu  $A_n$ .

Odpoveď na túto otázku v špeciálnom prípade merania hybnosti sme našli už v článku 2.9, tu len zopakujeme tamojšiu diskusiu vo všeobecnejšom formalizme.

Využijeme to, že vlastné funkcie  $\Phi_n(\mathbf{r})$  operátora  $\mathbf{A}$  tvoria úplný systém a rozložíme vlnovú funkciu  $\psi(\mathbf{r})$  do systému  $\{\Phi_n\}$

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (10)$$

---

<sup>47</sup> Pripomeňme, že meranie vo všeobecnosti môže viesť k zmene stavu meranej sústavy. Podrobnejšie pozri v nasledujúcom článku.



Ak žiadame, aby funkcia  $\psi(\mathbf{r})$  bola normovaná na jednotku a využijeme ortonormovanosť systému  $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ , t. j.

$$\int \Phi_n^*(\mathbf{r})\Phi_m(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{mn} \quad (11)$$

dostaneme

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (12)$$

Tento výsledok naznačuje (pozri tiež diskusiu v článku 2.9), že výrazy  $|c_n|^2$  možno interpretovať ako pravdepodobnosti  $P_n$  namerania hodnôt  $A_n$ . Ak je to pravdou, potom stredná hodnota veličiny  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$  musí byť daná vzťahom

$$\bar{A} = \sum_n A_n P_n = \sum_n A_n |c_n|^2 \quad (13)$$

Na výpočet strednej hodnoty však máme už predpis (1), takže ak je naše stotožnenie  $P_n = |c_n|^2$  správne, potom predpis (1) musí viesť tiež k výsledku (13). Pozrime sa na to bližšie. Ak do vzťahu (1) dosadíme rozklad (10), máme

$$\bar{A} = \int \left\{ \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \right\}^* A \left\{ \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{r}) \right\} d^3\mathbf{r}$$

Teraz prehodíme poradie súčtov a integrálov a využijeme to, že  $A\Phi_i = A_i\Phi_i$ , čím dostaneme

$$\bar{A} = \sum_n \sum_i c_n^* c_i A_i \int \Phi_n^*(\mathbf{r})\Phi_i(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

Ak využijeme ešte (10), prídeme k

$$\bar{A} = \sum_n \sum_i c_n^* c_i A_i \delta_{in} = \sum_n c_n^* c_n A_n = \sum_n |c_n|^2 A_n$$

a to je presne vzťah (13). Vidíme teda, že priradenie  $P_n = |c_n|^2$  je konzistentné s výpočtom strednej hodnoty pomocou vzťahu (1). Podobne by sme sa mohli presvedčiť o tom, že toto priradenie je konzistentné so vzťahom (2) pre výpočet strednej kvadratickej odchýlky.

Predchádzajúcimi argumentmi sme chceli urobiť priradenie  $P_n = |c_n|^2$  prijateľným. V rámci všeobecnej formulácie kvantovej teórie patrí k jej základným postulátom. Sformulujme ho preto ešte raz.

Ak v stave  $\psi(\mathbf{r})$  meriame veličinu  $A$ , potom pravdepodobnosť, že nameriame vlastnú hodnotu  $A_n$  je daná výrazom

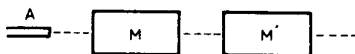
$$P_n = |c_n|^2$$

kde  $c_n$  je koeficient v rozklade  $\psi(r)$  do ortonormovaného systému vlastných funkcií operátora  $A$

$$\psi(r) = \sum_i c_i \Phi_i(r)$$

## 2.15 ZMENA STAVU PRI MERANÍ

Predstavme si idealizovaný myšlienkový experiment znázornený na obr. 2.3, ktorý zhrňa a zjednodušuje veľa reálnych experimentov.<sup>48</sup>



Obr. 2.3

Riedky zväzok atómov z  $A$  dopadá na merací prístroj  $M$ . Predpokladáme, že všetky atómy vo zväzku sa nachádzajú v stave  $\psi$ , ktorý je superpozíciou dvoch stacionárnych stavov  $\Phi_1, \Phi_2$  s energiami  $E_1, E_2$ :

$$\psi = c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 \quad (1)$$

Z normovanosti funkcie  $\psi$  vyplýva, že  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$  a výrazy  $P_1 = |c_1|^2, P_2 = |c_2|^2$  sú pravdepodobnosti pre nájdenie hodnôt  $E_1, E_2$  pri meraní energie. Prístroj  $M$  je konštruovaný tak, aby zmeral energiu atómu a prepustil atóm ďalej k prístroju  $M'$ , ktorý tiež meria energiu atómu. Výsledky merania energie sa zapisujú na magnetickú pásku v tvare  $(E_a, E_b)$ , kde  $E_a$  je hodnota nameraná prístrojom  $M, E_b$  to isté pre prístroj  $M'$ . Keby sme si potom prečítali pásku, našli by sme niečo takéhoto

$$(E_1, E_1), (E_2, E_2), (E_2, E_2), (E_1, E_1), (E_2, E_2), (E_1, E_1), (E_1, E_1), \dots$$

pričom pravdepodobnosti dvojíc  $(E_i, E_i)$  by boli úmerné  $|c_i|^2$ . Vyskytovali by sa teda len dvojice, v ktorých obidva prístroje namerali rovnakú energiu a nenašli by sme žiadne záznamy typu  $E_1, E_2$  alebo  $E_2, E_1$ . Toto na prvý pohľad nie je prekvapujúce a zdá sa nám prirodzené, že prístroj  $M'$  nameria rovnakú energiu ako prístroj  $M$ . Ak sa ale pýtame na to, v akom stave je atóm po meraní energie v prístroji  $M$ , prideme nutne k záveru:

Ak prístroj  $M$  nameria energiu  $E_1$ , potom  $M'$  nameria vždy energiu  $E_1$  a teda, pred meraním v  $M'$  bol atóm v stave  $\Phi_1$ . Podobne prideme k tomu, že ak prístroj

<sup>48</sup> Tento myšlienkový experiment je podrobnou ilustráciou všeobecného argumentu uvedeného v predchádzajúcom článku za tvrdením 14.9.

$M'$  našiel energiu  $E_2$ , atóm sa nutne dostal do stavu  $\Phi_2$  a prístroj  $M'$  potom nutne našiel tiež energiu  $E_2$ . Schematicky to môžeme znázorniť takto

$$c_1\Phi_1 + c_2\Phi_2 \begin{array}{l} \xrightarrow{E_1} \Phi_1 \\ \xrightarrow{E_2} \Phi_2 \end{array} \quad (2)$$

kde šípka znázorňuje zmenu stavu pri meraní.

Odporúčame (naliehavo) čitateľovi, aby si z tohto hľadiska premyslel meranie spinu elektrónu v experimente s prístrojom typu Sterna a Gerlacha a meranie polarizácie fotónu pomocou polarizátorov (pozri diskusiu v článku 1.14).

Po tomto maximálne zjednodušenom príklade môžeme prejsť k všeobecnejšej formulácii problému a povedať rovno, čo o ňom hovorí kvantová mechanika. Predstavme si, že v stave  $\psi(\mathbf{r})$  meriame fyzikálnu veličinu  $A$ , reprezentovanú operátorom  $A$ . Podľa toho, čo sme hovorili v predchádzajúcom článku, môžeme namerať iba jednu z vlastných hodnôt  $A_i$  operátora  $A$ :

$$A\Phi_i(\mathbf{r}) = A_i\Phi_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

a pravdepodobnosť  $P_i$  nájsť túto hodnotu sa rovná  $|c_i|^2$ , kde  $c_i$  je koeficient v rozvoji

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Pýtame sa teraz na to, v akom stave bude sústava tesne po tom, ako sme namerali istú hodnotu  $A_n$ . Kvantová mechanika postuluje, že ihneď po meraní bude sústava v stave opísanom vlastnou funkciou  $\Phi_n(\mathbf{r})$  príslušnou k nameranej vlastnej hodnote  $A_n$ . Tento postulát je motivovaný mnohými experimentmi podobnými tej zjednodušenej situácii, ktorú sme diskutovali vyššie. Jeden skutočný experiment však zohral pri rozvoji interpretácie kvantovej mechaniky významnú úlohu, a preto ho tu aspoň stručne spomenieme. Je to problém vysvetlenia toho, ako vzniká „dráha“ nabitých častíc v hmlovej komore. Predstavme si, že vo Wilsonovej hmlovej komore je rádioaktívne jadro, ktoré sa rozpadá a emituje elektrón. Tento elektrón je opísaný vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , ktorá odpovedá vlnovému balíku šíriacemu sa na všetky strany, podobne ako by sa pohyboval povrch nafukovaného gumeného balónika.<sup>49</sup> Pohybujúci sa elektrón ionizuje však atómy a tieto hrajú v komore úlohu kondenzačných centier. Predpokladajme, že jadro sa rozpadlo práve vtedy, keď bola komora „citlivá“ a vtedy môžeme vidieť dráhu elektrónu ako viac-menej priamu čiaru, skladajúcu sa z mnohých kvapôčok, ktoré sa vytvorili na kondenzačných centrách. Vzniká prirodzene otázka, ktorá

<sup>49</sup> Nebudeme sa tu snažiť opísať takúto vlnovú funkciu podrobnejšie, ani nebudeme vysvetľovať, prečo je vlnová funkcia takouto sférickou vlnou.

tránila zakladateľov kvantovej mechaniky, ako je možné, že zo začiatočnej sférickej vlny vznikne priama stopa častice. Vysvetlenie je v zmene vlnovej funkcie stavu pri meraní. Začiatočná sférická vlnová funkcia vedie k istej pravdepodobnosti pre vytvorenie kondenzačných centier z jednotlivých atómov plynu. Hneď ako takéto centrum vznikne, dochádza k zmene stavu elektrónu. Pôvodnú sférickú vlnu si totiž môžeme predstaviť ako superpozíciu vlnových balíkov šíriacich sa v rôznych smeroch. Keď elektrón vytvoril kondenzačné centrum v smere jednotkového vektora  $n$ , potom sa pôvodný stav zmenil na vlnový balík šíriaci sa v tomto smere a vytvárajúci „dráhu“ častice. Pritom každé vytvorenie kvapôčky je vlastne meraním polohy častice a pri každom takomto meraní dochádza k zmene stavu.<sup>50</sup>

Vráťme sa teraz k diskusii všeobecného prípadu. Ak pri meraní fyzikálnej veličiny  $A$ , opísanej operátorom  $A$ , nájdeme vlastnú hodnotu  $A_n$ , vieme, že ihneď po meraní je sústava vo vlastnom stave  $\Phi_n(\mathbf{r})$ . Keby sme na tomto stave vykonali opäť meranie veličiny  $A$  (a keby časový rozdiel oboch meraní bol taký malý, aby sa stav pri vývoji opísanom SchR nezmenil) dostali by sme ako výsledok opäť hodnotu  $A_n$ .

Z diskusie v tomto článku je zrejmé, že v rámci kvantovej mechaniky existujú dva rôzne typy zmien stavu:

a) zmeny stavu dané vlastnou dynamikou atomárneho objektu a jeho interakciou s inými takými objektami, alebo so žiarením. Takéto zmeny sú opísané Schrödingerovou rovnicou;

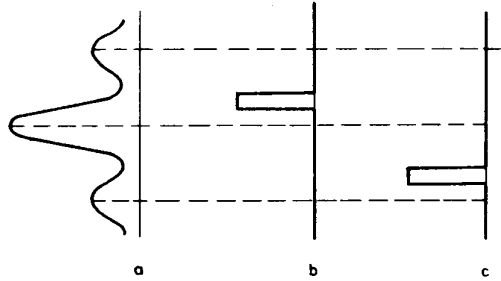
b) zmeny stavu, ku ktorým dochádza pri meraní, t. j. pri interakcii kvantomechanického objektu s klasickým (makroskopickým) meracím prístrojom. Pritom nastáva zmena stavu, t. j. prechod systému „skokom“ do nového stavu, ktorý je vlastným stavom operátora priradeného meranej fyzikálnej veličine.

Základy takéhoto rozlíšenia dvoch typov interakcií a dvoch typov zmien vlnovej funkcie sú už implicitne obsiahnuté v Bornovej pravdepodobnostnej interpretácii vlnovej funkcie. Zmenu vlnového balíka pri meraní sme už vlastne opísali pri diskusii dvojštrbinového experimentu v článku 1.11. Keď elektrón prechádza cez exp. zariadenie, príslušná funkcia  $|\Phi(\mathbf{r})|^2$  má tvar znázornený na obr. 2.4a. Skutočné sčernenie odpovedajúce jedinému elektrónu bude oveľa „bodovejšie“ a vlnová funkcia elektrónu po interakcii s fotoplatňou bude silne lokalizovaná, ako je to znázornené na obr. 2.4b, resp. pre iný elektrón na obr. 2.4c.

Nezaoberali sme sa zatiaľ otázkou, či postulovanie zmien stavu je skutočne nevyhnutné, t. j. či zmena stavu pri meraní nie je dôsledkom Schrödingerovej rovnice použitej pre sústavu atomárny objekt plus makroskopický merací prístroj. K tejto problematike sa vrátíme v poslednej kapitole.

---

<sup>50</sup> Stručný komentár k tomuto problému a jeho závažnosti v rozvoji interpretácie kvantovej mechaniky nájde čitateľ v článku W. Heisenberga, citovanom v článku 2.1, podrobnejšia diskusia je vo vynikajúco napísanej klasickej knihe Heisenberg, W.: *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Chicago, 1930.



Obr. 2.4

Pripojme nakoniec ešte jednu poznámku. Z toho, čo sme doteraz o meraní v kvantovej mechanike povedali, je zrejmé, že problém typu „Zistite (meraním), v akom stave sa nachádza daná sústava“ je neriešiteľný. Meranie ľubovoľnej veličiny stav vo všeobecnosti mení, preto, hoci vieme povedať, v akom stave je sústava po meraní<sup>51</sup>, o stave pred meraním sa dozvieme menej. Jedine azda to, že koeficient v rozvoji typu (4) zodpovedajúci zistenej hodnote veličiny bol nenulový. Ak je k dispozícii len jediná sústava, potom niet inej možnosti zistiť jej stav ako presledovať „históriu vzniku“ tohto stavu až k poslednej interakcii tejto sústavy s makroskopickým objektom, t. j. k poslednému meraniu. Tesne po tomto meraní je stav známy a jeho ďalší vývoj určíme pomocou Schrödingerovej rovnice.

Iná situácia je, keď máme k dispozícii veľký súbor identických sústav, o ktorých vieme, že sa všetky nachádzajú v rovnakom (hoci neznámom) stave. Zmeraním vhodných veličín na takomto súbore sústav možno ich stav pred meraním určiť.

## 2.16 VLASTNÉ FUNKCIE KOMUTUJÚCICH OPERÁTOROV

V tomto článku sa budeme zaoberať otázkou, nakoľko je stav sústavy určený zadaním vlastnej hodnoty istého operátora. Z fyzikálneho hľadiska by sme otázku formulovali takto: máme určitú sústavu, ktorá sa nachádza v nám neznámom stave. Ak zmeriame na nej veličinu  $F$  a nájdeme vlastnú hodnotu  $F_n$ , poznáme už presne stav sústavy po takomto meraní?

Uvedme najprv niekoľko príkladov.

– Uvažujme elektrón viazaný na úsečku o dĺžke  $L$ . Pri meraní energie sme našli hodnotu

$$E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} 3^2$$

<sup>51</sup> Podrobnejšie pozri nasledujúci článok.

Aký bude stav po meraní? Vzhľadom na to, že sústava nie je degenerovaná vieme, že stav po meraní je daný vlnovou funkciou

$$\psi_3(x) = e^{i\alpha} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{3\pi x}{L}$$

kde  $\alpha$  je reálne číslo a  $\exp(i\alpha)$  je fázový faktor, ktorý nemá fyzikálny význam.<sup>52</sup> Až na nepodstatný fázový faktor je teda  $\psi_3(x)$  dané jednoznačne zadaním hodnoty  $E_3$ .

– Predstavme si teraz časticu pohybujúcu sa voľne v celom priestore a predpokladajme, že poznáme presne aj hodnotu zložky jej hybnosti  $p_1$ . Pýtame sa zas na to, či táto informácia stačí na jednoznačné určenie vlnovej funkcie. Odpoveď je záporná, pretože každá funkcia typu

$$e^{ip_1x/\hbar} \varphi(y, z)$$

je vlastnou funkciou operátora  $p_x$ , príslušnou k vlastnej hodnote  $p_1$ . Vidno hneď, že na to, aby sme vlnovú funkciu zadali jednoznačne, musíme zadať súčasne vlastné hodnoty  $p_1, p_2, p_3$  troch operátorov  $p_x, p_y, p_z$ . Vtedy vlnová funkcia musí mať tvar

$$A \exp \{i(p_1x + p_2y + p_3z)/\hbar\}$$

kde  $A$  je konštanta.

Môžeme si tiež všimnúť, že operátory, ktorých vlastné hodnoty súčasne zadávame, t. j.  $p_x, p_y, p_z$  navzájom komutujú. Pretože tieto operátory navzájom komutujú a súčasné zadanie ich vlastných hodnôt jednoznačne určuje vlnovú funkciu, nazývame ich *úplným systémom komutujúcich operátorov*. Prirodzene sa môžeme pýtať na to, či by mohol byť takýto úplný systém tvorený aj operátormi, ktoré nekomutujú (ukazuje sa, že to nie je možné). Takýmto otázkam je venovaný zvyšok tohto článku. Diskusia bude už robená všeobecnejšie, ale čitateľ si pri nej môže predstaviť predchádzajúce jednoduché príklady ako ilustrácie.

Na začiatok uvedieme niekoľko tvrdení povahy skôr matematickej. Predovšetkým platí tvrdenie:

Ak operátory  $A, B$  komutujú, t. j.  $[A, B] = 0$ , a ich spektrá sú nedegenerované, potom každá vlastná funkcia operátora  $A$  je aj vlastnou funkciou operátora  $B$  a naopak.

Skutočne: označme vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátorov  $A, B$  takto:

$$A\psi_n = A_n\psi_n \quad B\Phi_n = B_n\Phi_n$$

<sup>52</sup> Fyzikálny význam v kvantovej mechanike majú stredné hodnoty fyzikálnych veličín, t. j. výrazy typu  $A = \int \psi^* A \psi dx$  a druhé mocniny absolútnych hodnôt koeficientov v rozklade vlnových funkcií, t. j. výrazy  $|c_n|^2$  v rozklade  $\psi = \sum c_n \varphi_n$ , kde  $\varphi_n$  je sústava vlastných funkcií istého operátora. Ani  $A$  ani  $|c_n|$  sa nemenia pri zámene  $\psi \rightarrow \psi \exp(i\alpha)$ .

Podľa predpokladu  $[A, B] = 0$ , teda aj

$$AB\Phi_n = BA\Phi_n$$

Využijeme teraz to, že  $\Phi_n$  je vlastnou funkciou operátora  $B$  a dostaneme

$$B(A\Phi_n) = A(B\Phi_n) = B_n(A\Phi_n) \quad (1)$$

Funkcia  $A\Phi_n$  je takto vlastnou funkciou operátora  $B$ , príslušnou k vlastnej hodnote  $B_n$ . Podľa predpokladu je však táto vlastná funkcia zadaná (až na multiplikatívny faktor) jednoznačne (nedegenerované vlastné hodnoty). Musí preto existovať číslo  $\alpha_n$ , také, že platí:

$$A\Phi_n = \alpha_n \Phi_n \quad (2)$$

Potom je však  $\alpha_n$  jednou z vlastných hodnôt operátora  $A$  a príslušná vlastná funkcia je jednoznačne určená. Pri vhodnom výbere číslovania vlastných hodnôt a vlastných funkcií operátora  $A$  môžeme docieliť to, že  $\alpha_n = A_n$  a  $\Phi_n = \psi_n$ .

Predstavme si teraz, že vlastná hodnota  $B_n$  je  $N$ -krát degenerovaná, existuje teda  $N$  lineárne nezávislých funkcií  $\Phi_{nk}$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots, N$  takých, že platí:

$$B\Phi_{nk} = B_n\Phi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N$$

ináč všetky predpoklady zostali nezmenené. Ak budeme postupovať rovnako ako v predchádzajúcom prípade, dostaneme rovnicu

$$B(A\Phi_{nk}) = B_n(A\Phi_{nk}), \quad k = 1, 2, 3, \dots, N$$

z ktorej teraz vyplýva:

$$A\Phi_{nk} = \sum_{j=1}^N c_{kj} \Phi_{nj}$$

Pre hermitovský operátor  $A$  možno dokázať<sup>53</sup>, že existuje práve  $N$  lineárnych kombinácií funkcií  $\Phi_{nk}$ ,  $k = 1, 2, \dots, N$

$$\chi_{nk} = \sum_{j=1}^N d_{jk} \Phi_{nj}$$

---

<sup>53</sup> Ide vlastne o diagonalizáciu hermitovskej matice typu  $N \times N$ . Na tomto mieste sa uvedeným tvrdením nebudeme bližšie zaoberať, stane sa zrejším až preberieme všeobecný formalizmus kvantovej mechaniky.

takých, že bude platiť

$$\mathbf{A}\chi_{nk} = A_{nk}\chi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (3)$$

čiže  $\chi_{nk}$  budú vlastnými funkciami operátora  $\mathbf{A}$ . Lahko sa možno presvedčiť tiež o tom, že  $\chi_{nk}$  sú vlastnými funkciami operátora  $\mathbf{B}$ , príslušnými k vlastnej hodnote  $B_n$

$$\mathbf{B}\chi_{nk} = B_n\chi_{nk}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (4)$$

S týmto upresnením možno aj v prípade degenerovaných spektier povedať, že komutujúce operátory majú spoločné vlastné funkcie.

Pre úplnosť uvedieme ešte obrátené tvrdenie, ktoré si čitateľ môže dokázať sám ako cvičenie. Platí:

Ak dva operátory  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  majú spoločné všetky vlastné funkcie a ak tieto tvoria úplný systém, potom operátory  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  komutujú.

Vráťme sa teraz k problematike merania a zmeny stavu sústavy pri meraní. Skúmame prípad, keď zmeriame najprv veličinu  $A$  a vzápätí za tým vykonáme meranie veličiny  $B$ . Predpokladáme pritom, že operátory  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  komutujú a majú diskrétnu, nedegenerované spektrum. Ak sme pri prvom meraní našli hodnotu  $A_i$ , vieme, že sústava je po meraní vo vlastnom stave  $\psi_i$ , operátora  $\mathbf{A}$ . Podľa predchádzajúceho je tento stav zároveň vlastným stavom operátora  $\mathbf{B}$  a pri meraní  $B$  nájdeme určite hodnotu  $B_n$ , ale stav sústavy už nezmeníme. Prípad degenerovaných spektier je komplikovanejší. Nech sa pred meraním sústava nachádza v neznámom stave  $\psi$ . Pri meraní veličiny  $A$  dostaneme zas jednu z vlastných hodnôt operátora  $\mathbf{A}$ , napríklad  $A_i$ . Nech je táto hodnota  $N$ -krát degenerovaná. Pri meraní nastane zmena stavu, ale vzhľadom na to, že vlastnej hodnote  $A_i$  odpovedá viacero vlastných funkcií  $\Phi_{ik}$  s  $k = 1, 2, \dots, N$  nepoznáme stav ani po meraní presne; vieme iba to, že môže byť iba lineárnou kombináciou stavov  $\Phi_{ik}$  (s *fixovaným*  $i$ ). Pre všetky tieto  $\Phi_{ik}$  totiž platí

$$\mathbf{A}\Phi_{ik} = A_i\Phi_{ik}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (5)$$

a bude to platiť aj pre ich ľubovoľnú lineárnu kombináciu, teda

$$\mathbf{A}\left(\sum_k c_{ik}\Phi_{ik}\right) = A_i\left(\sum_k c_{ik}\Phi_{ik}\right) \quad (6)$$

Ako sme už ukázali, je možné vybrať funkcie  $\Phi_{ik}$  tak, aby boli vlastnými funkciami operátora  $\mathbf{B}$ , t. j. aby platilo<sup>54</sup>

$$\mathbf{B}\Phi_{ik} = B_{ik}\Phi_{ik}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (7)$$

<sup>54</sup> Predpokladáme stále, že  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  komutujú a používame tvrdenia dokázané už vyššie v tomto článku.



Ak predpokladáme, že tieto hodnoty  $B_{ik}$  sú (pri danom  $i$  a meniacom sa  $k$ ) navzájom rôzne, potom pri meraní  $B$  v stave  $\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}$  nájdeme jednu z vlastných hodnôt  $B_{ij}$  a lineárna kombinácia  $\sum_k c_{ik} \Phi_{ik}$  meraní zmení na stav  $\Phi_{ij}$ . Súčasným zadaním dvoch vlastných hodnôt  $A_i$  a  $B_{ij}$  takto jednoznačne špecifikujeme stav.

Ak by sa medzi hodnotami  $B_{ij}$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$  vyskytovali niektoré, ktoré by neboli navzájom rôzne, potom by stav ešte nebol jednoznačne určený a na jeho jednoznačné určenie by sme potrebovali nájsť ďalší operátor  $C$ , ktorý by komutoval s  $A$  aj s  $B$ , a zopakovať predchádzajúcu procedúru.

Takto postupujeme prípadne aj ďalej až príde k takej sústave navzájom komutujúcich operátorov  $A, B, C, D, \dots, G$ , že súčasné zadanie vlastných hodnôt všetkých týchto operátorov už určuje jednoznačne ich spoločnú vlastnú funkciu. Takúto sústavu operátorov nazývame úplnou sústavou komutujúcich operátorov. To, že operátory navzájom komutujú je podstatné, lebo ináč by podľa predchádzajúcich matematických tvrdení nemohli mať spoločné všetky vlastné funkcie a meranie ďalšieho by vo všeobecnosti neupresnilo informáciu získanú v predchádzajúcich, ale „vyviedlo“ by stav von z množiny, do ktorej sa už predchádzajúcimi meraniami dostal.

Vidíme teda, že súčasné zadanie vlastných hodnôt úplnej sústavy komutujúcich operátorov charakterizuje stav sústavy práve tak, ako priame zadanie stavu pomocou vlnovej funkcie. Toto tvrdenie je podstatné pri výstavbe všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky.

## 2.17 VZŤAH NEURČITOSTI

V predchádzajúcom článku sme videli, že komutujúce operátory majú spoločný systém vlastných funkcií. Ak sa sústava nachádza v stave opísanom takouto vlastnou funkciou, potom obidve veličiny v ňom majú „ostré“ hodnoty (rovné príslušným vlastným hodnotám). Pre nekomutujúce operátory a im prislúchajúce veličiny je situácia iná. Ako príklad tu prediskutujeme podrobne súradnicu a priemet hybnosti na príslušnú os.

Komutačné vzťahy medzi operátormi súradníc a hybnosti nájdeme ľahko.

V označení

$$\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \equiv (p_1, p_2, p_3)$$

platí

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= 0 \\ [p_i, p_j] &= 0 \\ [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (1)$$

Ukážeme si teraz, že dôsledkom komutačných vzťahov (1) sú vzťahy neurčitosti pre dvojice veličín  $(x_i, p_i)$ . Ako sme už na kvalitatívnej úrovni diskutovali v 1. kapitole, tieto vzťahy podstatným spôsobom obmedzujú možnosť súčasného zadania súradnice a príslušnej hybnosti častice. Komutačný vzťah

$$[x, p_x] = i\hbar \quad (1')$$

totiž ukazuje, že operátory  $x$  a  $p_x$  nemajú spoločnú žiadnu vlastnú funkciu. Naozaj, ak by existovala funkcia  $\Phi$  taká, že by platilo

$$x\Phi = x\Phi; \quad p_x\Phi = p_x\Phi$$

potom by platilo tiež

$$[x, p_x]\Phi = [xp_x - p_x x]\Phi = (xp_x - p_x x)\Phi = 0$$

čo je v spore so vzťahom (1), podľa ktorého musí platiť

$$[x, p_x]\Phi = i\hbar\Phi \neq 0$$

Pristúpme teraz k formálnemu odvodeniu vzťahu neurčitosti. Nech je teda stav častice daný stavovou vlnovou funkciou  $\Phi(x)$ . Pre jednoduchosť uvažujeme iba jednorozmerný prípad a nevypisujeme časovú premennú, lebo všetky úvahy sa týkajú jediného času  $t_0$ .

Vlnová funkcia  $\Phi(x)$  reprezentuje istý vlnový balík. Ak vyberieme súradnicovú sústavu tak, aby jej začiatok splýval so stredom vlnového balíka a tak, aby sa sústava pohybovala spolu s týmto stredom, potom v tejto sústave bude platiť

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)x\Phi(x)dx = 0 \quad (2)$$

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\Phi(x)dx = 0$$

V ďalšom budeme predpokladať, že tieto dve podmienky sú splnené. Predpokladáme ďalej, že vlnová funkcia je normovaná

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x)\Phi(x)dx = 1 \quad (3)$$

a stredné kvadratické odchýlky

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) x^2 \Phi(x) dx = 0 \quad (4)$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 \Phi(x) dx = 0 \quad (5)$$

sú konečné. Vzhľadom na (4) vlnová funkcia  $\Phi(x)$  musí preto dosť rýchlo klesať pre  $|x| \rightarrow \infty$ ; musí platiť

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^3 |\Phi(x)|^2 = 0 \quad (6)$$

Utvorme teraz čisto formálne pre ľubovoľné reálne  $\xi$  výraz

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \xi x \Phi(x) + \frac{d\Phi(x)}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \quad (7)$$

ktorý musí byť evidentne nezáporný. Integrál  $I(\xi)$  možno okamžite zapísať v tvare

$$I(\xi) = \xi^2 A - \xi B + C = 0 \quad (8)$$

kde

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Phi(x)|^2 dx = \overline{(\Delta x)^2} \quad (9)$$

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Phi^*}{dx} \frac{d\Phi}{dx} dx, \quad -B = \int_{-\infty}^{\infty} x \left( \frac{d\Phi^*}{dx} \Phi + \Phi^* \frac{d\Phi}{dx} \right) dx$$

Upravíme teraz výraz  $B$ . Vidno, že

$$-B = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx} (\Phi^* \Phi) dx$$

Po integrovaní per partes dostaneme

$$-B = - \int_{-\infty}^{\infty} (\Phi^* \Phi) dx + [x \Phi^* \Phi]_{-\infty}^{\infty} \quad (10)$$

V dôsledku rovnice (6) sa druhý člen v (10) rovná nule, a teda  $B = 1$ . Podobne integrujeme per partes vo výraze  $C$  a dostaneme

$$C = \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{\hbar^2} \quad (11)$$

Podľa definície (7) výrazu  $I(\xi)$  nemôže byť diskriminant výrazu (8) kladný. Preto

$$B^2 - 4AC \leq 0$$

ak sem dosadíme za  $A$ ,  $B$ ,  $C$  výrazy, ktoré sme práve našli, dostaneme:

$$\overline{(\Delta x)^2 (\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (12)$$

Nerovnosť (12) je známa ako *Heisenbergov vzťah neurčitosti*, ktorý mal významnú úlohu v rozvoji kvantovej mechaniky. Postup, ktorý sme pri jeho odvodení použili, pochádza od H. Weyla.

Z odvodenia nerovnosti (12) vidno, že rovnosť ľavej a pravej strany môže nastať len pre prípad vlnového balíka, ktorý spĺňa podmienku

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} + \xi x \Phi(x) = 0 \quad (13)$$

kde  $\xi$  je konštanta. Riešením tejto diferenciálnej rovnice je funkcia<sup>55</sup>

$$\Phi(x) = C \exp(-x^2 \xi / 2) \quad (14)$$

čiže podmienka (13) je splnená len pre balíky takého typu.

Vzťah neurčitosti (12) je priamym dôsledkom základných postulátov kvantovej mechaniky týkajúcich sa popisu stavu sústavy pomocou vlnovej funkcie, interpretácie tejto funkcie ako hustoty pravdepodobnosti a predpisu pre pravdepodobnosti namerania určitých hodnôt hybnosti.

Je síce pravdou, že na prvý pohľad by sa nám mohlo zdať – a to sa zdá takmer každému pri zoznamovaní sa s kvantovou mechanikou – že „v skutočnosti“ je elektrón predsa len bodovou časticou a „v skutočnosti“ má predsa len istú hodnotu hybnosti a že teda „v princípe“ musí existovať experiment, ktorý by zmeral súradnicu a hybnosť elektrónu presnejšie ako je obmedzenie zadané vzťahom (12). Chyba v takomto argumente je v tom, že termín „v skutočnosti“ chápeme ako skutočnosť klasickej fyziky. Ale takáto „skutočnosť“ by nevedla – ako sme diskutovali podrobne v prvej kapitole – k vzniku kvantových stacionárnych stavov v atómoch, nevysvetlila by spektrá atómov ani experimenty Davissona a Germera, ani dvojštrbinové experimenty, ani prechod fotónov polarizátormi. V atómovej

<sup>55</sup> Vlnové balíky typu (14) nazývame aj minimálnymi či minimalizujúcimi vlnovými balíkmi.

fyzike skutočnosť nie je „skutočnosťou“ klasickej mechaniky. A ak raz opisujeme stav elektrónu pomocou vlnovej funkcie a ak túto interpretujeme pravdepodobnostne, potom sa vzťahu neurčitosti nevyhneme.

Vzťah neurčitosti teda nie je ani tak zakotvený v technických podrobnostiach konštrukcie meracích prístrojov, ale je dôsledkom základných predstáv kvantovej mechaniky, menovite spôsobu, akým kvantová mechanika opisuje stavy sústavy.

Ak by sme sa teda chceli vyhnúť vzťahu neurčitosti, museli by sme začať hlbšie a zmeniť už kvantovomechanický opis stavov pomocou vlnových funkcií. Takéto pokusy sa už robili, spravidla sa pri nich opis stavu pomocou vlnovej funkcie považuje za neúplný a zavádzajú sa „skryté parametre“. Tieto teórie však nič užitočného nedali: veľmi prácne a neprirodzene reprodukovujú niektoré jednoduché výsledky kvantovej mechaniky, majú svoje vnútorné ťažkosti, menovite nelokálnosť interakcie<sup>56</sup> a všade tam, kde sa dalo očakávať, že ich predpovede sa budú odlišovať od kvantovej mechaniky, experiment potvrdil kvantovú mechaniku. O teóriách so skrytými parametrami sa ešte zmienime podrobnejšie v kapitole venovanej procesu merania a otázkam interpretácie. Prikláňame sa preto k názoru, že vzťah neurčitosti nie je dôsledkom iba spôsobu opisu stavu v kvantovej mechanike, ale že je „schovaný“ vo fyzikálnom stave samotnom.

Najhlbšiu analýzu otázok súvisiacich so vzťahom neurčitosti previedli Niels Bohr a Werner Heisenberg a výslednú analýzu pochádzajúcu od Bohra tu uvedieme trochu podrobnejšie.

**Stanovisko Nielsa Bohra.** Bohrova, dnes všeobecne uznávaná, interpretácia vzťahu neurčitosti je založená na princípe komplementarity. Pri jeho formulovaní Bohr vychádzal z analýzy možností pojmovej štruktúry fyzikálnej teórie. Podľa jeho názoru spôsob, akým je daný experiment postavený a získané experimentálne výsledky musia byť: opísané jazykom, ktorý umožňuje nedvojzmyselnú interpretáciu a reprodukovateľnosť výsledkov. Takýmto jazykom je práve jazyk klasickej fyziky. Na druhej strane je však pojmový aparát klasickej fyziky získaný zo skúsenosti s makroskopickými predmetmi, a preto nemôžeme očakávať, že tento jazyk sa hodí aj na opis javov z oblasti atómovej fyziky. Preto nemôžeme vylúčiť možnosť, že pojmy klasickej fyziky ako je súradnica, hybnosť a pod., bude možné aplikovať vo fyzike atómu len s určitými obmedzeniami. Heisenbergov vzťah neurčitosti sa potom chápe ako obmedzenie súčasnej použiteľnosti pojmov klasickej fyziky v oblasti atómovej fyziky. Vo svojich prednáškach o kvantovej teórii<sup>57</sup> Bohr neformuloval princíp komplementarity vo forme matematickej vety – takáto formulácia je nakoniec vylúčená samotným charakterom tohto princípu.

---

<sup>56</sup> V teórii sa skrytými parametrami elektrón v dvojštrbinovom experimente prechádza „v skutočnosti“ iba cez jednu štrbinu. Na to, aby sa „dozvedel“, že aj druhá je otvorená a správal sa podľa toho (vytvoril interferenčný obraz), potrebuje nelokálne interakcie.

<sup>57</sup> Bohr, N.: *Atomtheorie und Naturbeschreibung*. Berlín 1931 Bohr, N.: *Atomphysik und menschliche Erkenntnis*, I., II. Braunschweig 1964, 1966. Podrobnú diskusiu Bohrových myšlienok možno nájsť aj v kap. 6, 7, 8, 22 a 23 Bohmovej učebnice (4).

Princíp komplementarity je totiž skôr princípom z teórie poznania ako princípom výlučne fyzikálnym a – chápaný všeobecne – hovorí o aplikovateľnosti pojmov istej teórie v rámci teórie, ktorá je jej ďalším vývojovým štádiom. Pokusy aplikovať princíp komplementarity v nefyzikálnych oblastiach možno tiež nájsť v citovaných Bohrových prácach.

Pokus o zúženie formuláciu princípu komplementarity by vyzeral asi nasledovne:

Ak daný systém v rámci klasickej fyziky možno úplne opísať pomocou dvojice veličín napr. súradnice a hybnosti, potom na úplný opis toho istého systému v rámci kvantovej mechaniky možno použiť tú istú dvojicu premenných, ale každá z nich je presnejšie určená len za cenu zvýšenia nepresnosti druhej. Obidve premenné sa takto dopĺňajú (komplementarita) pri opise sústavy, ale ich použitia v zmysle klasickej fyziky sa navzájom vylučujú.

Pretože pojmy súradnice a hybnosti nemožno v klasickej zmysle použiť na opísanie pohybu častice v oblasti kvantovej fyziky, nemožno tu používať ani pojem trajektórie.

Pod trajektóriou v klasickej fyzike rozumieme závislosť polohového vektora  $\mathbf{r}$  od času  $t$ . Ak však poznáme funkciu  $\mathbf{r}(t)$ , môžeme v každom čase  $t$  vypočítať aj hybnosť častice

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

Pojem trajektórie v klasickej zmysle predpokladá, že častica môže mať súčasne presne danú aj súradnicu, aj hybnosť, čo v kvantovej teórii nie je možné<sup>58</sup>

**Konzistentnosť vzťahu neurčitosti s experimentom.** Vzťah neurčitosti bol odvodený z predpokladu, že častica je opísaná vlnovým balíkom, a že hodnoty súradnice a hybnosti a stredné kvadratické odchýlky od týchto stredných hodnôt sú dané vzťahmi (2), (4) a (5). Keby bolo experimentálne možné zmerať súčasne súradnicu a hybnosť presnejšie, než predpisuje vzťah neurčitosti, svedčilo by to pre mechanistickú interpretáciu princípu neurčitosti a zároveň by to dokazovalo, že kvantová mechanika nemôže byť úplnou teóriou. V sérii myšlienkových experimentov (podľa nemeckého originálu sa dnes všeobecne nazývajú „Gedankenexperimentami“) Heisenberg a Bohr<sup>59</sup> ukázali, že pri dôslednej aplikácii zákonov kvantovej mechaniky nemožno súradnicu a hybnosť merať súčasne presnejšie, ako predpisuje vzťah neurčitosti.

Na ukážku takých Gedankenexperimentov uvedieme Heisenbergov príklad na meranie polohy častice mikroskopom. Usporiadanie experimentu je znázornené

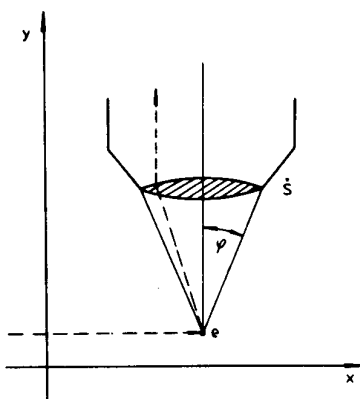
---

<sup>58</sup> Ako sme videli, použitie pojmu trajektórie v klasickej zmysle vedie rýchlo k ťažkostiam pri interpretácii interferenčných pokusov (napr. v dvojštrbinovom experimente).

<sup>59</sup> Heisenberg, W.: The Physical Principles of the Quantum Theory. Chicago 1930. Bohrov článok v knihe A. Einstein – Philosopher Scientist. New York 1951, s. 201-241.

na obr. 2.5, kde pre jednoduchosť je celý mikroskop reprezentovaný šošovkou Š, elektrón je pre názornosť (hoci nesprávne) znázornený bodom e v osi mikroskopu a svetlo, ktorým elektrón pozorujeme, je naznačené prerušovanou čiarou. Nech svetlo, ktorým elektrón pozorujeme má vlnovú dĺžku  $\lambda$ . Podľa zákonov vlnovej optiky je rozlišovacia schopnosť mikroskopu daná vzťahom<sup>60</sup>

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varphi} \quad (15)$$



Obr. 2.5

Nepresnosť hybnosti elektrónu bude spôsobená nepresnosťou v určení hybnosti odovzdanej elektrónu rozptýleným svetlom. Ak zanedbáme zmenu vlnovej dĺžky svetla, uvážime, že pri meraní sa nepozoruje miesto šošovky, ktorým prechádza rozptýlený fotón, a ak podľa fotónovej hypotézy predpokladáme, že hybnosť fotónu s dĺžkou vlny  $\lambda$  je

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

dostaneme pre nepresnosť odovzdanej hybnosti v smere osi  $x$  vzťah

$$\Delta p_x \sim |\mathbf{p}| \sin \varphi = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \sin \varphi$$

<sup>60</sup> Tento vzťah je prirodzený, mikroskop nemôže mať lepšiu rozlišovaciu schopnosť ako je dĺžka vlny použitého svetla, a zmenšením uhla  $\varphi$  (pozri obr. 2.5) strácame informáciu o tom, odkiaľ prišlo svetlo, ktoré dopadlo do mikroskopu.

Odtiaľ

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim 2\pi\hbar \quad (16)$$

čo je v súlade s Heisenbergovým vzťahom neurčitostí. Niekedy sa tomuto Gedankenexperimentu vyčíta, že je nerealistický, pretože jeden fotón nestačí na vytvorenie zobrazenia. Na argumente sa však nič nezmení, ak prístroj registruje len prípady, keď elektrón rozptýli dva fotóny dopadajúceho svetla. V konečnom výsledku sa len zmení (zväčší) numerický faktor ( $2\pi$ ) na pravej strane v (16). Podstatné pre Heisenbergovu diskusiu merania polohy častice mikroskopom je to, že

1. svetlo použité pri meraní má vlastností, typické pre kvantovú teóriu. Monochromatickému svetlu s vlnovou dĺžkou zodpovedá „roj fotónov“ s hybnosťou  $|p|=2\pi\hbar/\lambda$ ;

2. pokus je postavený tak, že „trajektória“ rozptýleného svetla vnútri mikroskopu nie je sama meraná ďalším experimentálnym zariadením.

Bod 1 ukazuje, že kvantová teória je vnútorne konzistentná len vtedy, ak je aplikovaná dôsledne. V uvažovanom prípade sa môžeme rýchlo dostať do rozporu so vzťahom neurčitosti, keď budeme považovať svetlo použité pri meraní polohy za vlnový proces v rámci klasickej fyziky. Vtedy sa totiž odovzdaná hybnosť dá ľubovoľne zmenšiť (zoslabením intenzity svetla). Bod 2 sa často interpretoval ako prítomnosť „principiálne nekontrolovateľného kvanta“ v procese merania, čo poskytovalo dôvod k ťažkostiam filozofického charakteru, pretože „principiálna nekontrolovateľnosť“ interakcie je typicky agnosticistický termín.<sup>61</sup> Použitie termínu „nekontrolovateľné kvantum“ v uvažovanom prípade však predpokladá, že aj počas merania môžeme považovať meraný elektrón za izolovanú sústavu a chápať ho stále „ako taký“, a že podobne meraciu sústavu môžeme chápať ako izolovanú sústavu. Navyše, ak chceme byť presní, v uvedenej situácii pojem „trajektórie fotónu“ nemôžeme vôbec použiť. Pri interakcii vedúcej k meraniu polohy treba elektrón, mikroskop, zdroj svetla a prípadne fotografickú platňu, ktorou registrujeme výsledok pozorovania polohy elektrónu, chápať ako jedinú sústavu. Termín „nekontrolovateľné kvantum“ je najskôr obrazným opisom procesu merania, založenom na použití názorných, ale nie celkom korektne aplikovaných pojmov.

Vráťme sa naspäť k meraniu polohy elektrónu. Ak pri meraní použijeme svetlo s veľmi krátkou vlnovou dĺžkou, dostaneme ako výsledok merania veľmi malé hodnoty  $\Delta x$ , ale veľké rozmazanie (veľké  $\Delta p_x$ ) v určení hybnosti elektrónu. Elektrón by sa javil v takýchto meraniach ako pomerne lokalizovaný objekt. Pri meraní polohy pomocou svetla s veľkou vlnovou dĺžkou by sme naopak dostávali

---

<sup>61</sup> Agnosticizmus – idealistický smer vo filozofii, ktorý tvrdí, že veci sú poznateľné len po určité hranicu.



veľké hodnoty  $\Delta x$  a elektrón by vyzeral ako priestorovo rozmazaný objekt s pomerne dobre definovanou hybnosťou.<sup>62</sup>

Z uvedeného vidno, že elektrón sa správa rôzne v rôznych interakciách, a že tvrdenie o elektróne „ako takom“ (bez špecifikácie interakcie elektrónu s okolím) môžu ľahko viesť k chybným záverom. Toto platí špeciálne o často diskutovanej otázke, či elektrón je vlna alebo častica. V niektorých experimentoch (napr. interferencia) elektrón výrazne prejavuje vlnové vlastnosti, v iných (meranie polohy svetlom s krátkou vlnovou dĺžkou) sa správa ako lokalizovaný objekt – častica. Vzťah neurčitosti v tomto kontexte tvrdí, že v rámci kvantovej mechaniky nie je možný taký experiment, v ktorom by sa elektrón správal ako vlna s vlnovou dĺžkou určenou s chybou menšou ako  $\Delta\lambda$  (čiže s hybnosťou s chybou menšou ako

$$\Delta p \sim \left| \frac{\partial p}{\partial \lambda} \right| \Delta \lambda )$$
 a zároveň ako lokalizovaná častica s nepresnosťou v určení polohy

menšou ako  $\Delta x$ . Táto nepresnosť je určená vzťahom  $\Delta x \Delta p \sim \hbar/2$ .

V klasickej fyzike bolo možné predstaviť si sústavu interagujúcich objektov v podstate tak ako hodinový stroj. Každú súčiastku možno vybrať, študovať nezávisle od ostatných a opísať ju „ako takú“. Po vložení do stroja súčiastka zostáva zo začiatku taká, ako bola pred vložením, neskôr sa interakciou s ostatnými súčiastkami síce môže meniť, ale stále si zachováva svoju individualitu, pretože zmeny prebiehajú spojito.

V kvantovej mechanike dve sústavy, ktoré vstúpia do interakcie, stávajú sa časťou jednej zloženej sústavy a o ich individualite má zmysel hovoriť len v tom priblížení, v akom platí klasická fyzika.

Napokon si dovoľíme ako poznámku dať čitateľovi „radu do života“. Filozofické otázky kvantovej mechaniky sú veľmi pekná a zaujímavá vec. V minulosti sa o nich viedli búrlivé diskusie, ale ako to už pri búrlivých diskusiách býva, nie všetci účastníci diskutovali so znalosťou veci. Ak sa fyzik na takejto diskusii zúčastňuje alebo ak sa chce o takéto veci hlbšie zaujímať, musí poznať kvantovú mechaniku skutočne veľmi dôkladne. Odporúčame preto čitateľovi, aby sa k týmto otázkam vrátil až po „treťom“ čítaní (a to nielen tejto, ale aj ďalších učebníc), potom, keď bude mať prečítané a premyslené práce citované v tomto článku a práce citované ďalej v kapitole venovanej meraniu a interpretácii kvantovej mechaniky a až potom, keď bude poznať „remeslo“.

---

<sup>62</sup> Heisenbergov mikroskop nie je najjednoduchšou ilustráciou vzťahu neurčitosti. Jednoduchším príkladom je prechod častice cez štrbinu. Príklad pochádza tiež od Heisenberga [28] a možno sa s ním oboznámiť aj v Bornovej učebnici [3] alebo – spolu s viacerými ďalšími príkladmi – v Zbierke úloh [30].

## 2.18 ZHRNUTIE

V tejto kapitole sme sa zoznámili so všetkými základnými postulátmi kvantovej mechaniky vo formalizme vlnových funkcií. Zopakujeme tu stručne základné myšlienky na prípade jednoduchej sústavy – častice v silovom poli opísanom potenciálnou energiou  $V(\mathbf{r})$ .

1. Stav fyzikálnej sústavy v určitom čase  $t_0$  je priradená stavová vlnová funkcia  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ .

2. Pravdepodobnostná interpretácia stavovej vlnovej funkcie:  $|\psi(\mathbf{r}, t_0)|^2$  je hustota pravdepodobnosti v  $\mathbf{r}$ -priestore.

3. Znalosť stavovej vlnovej funkcie  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  v istom čase  $t_0$  umožňuje predpovedať stav sústavy  $\psi(\mathbf{r}, t)$  v ľubovoľnom neskoršom čase  $t$ . Pohybovou rovnicou je Schrödingerova rovnica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$$

Vlnová funkcia v čase  $t = t_0$  vystupuje v príslušnom riešení ako začiatočná podmienka.

4. Fyzikálnej veličine  $A$  je priradený hermitovský operátor  $\hat{A}$ . Strednú hodnotu a strednú kvadratickú odchýlku veličiny  $A$  v čase  $t_0$  určíme zo vzťahu

$$\bar{A} = \int \psi^*(\mathbf{r}, t_0) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t_0) dV$$

$$(\Delta A)^2 = \int \psi^*(\mathbf{r}, t_0) (\hat{A} - \bar{A})^2 \psi(\mathbf{r}, t_0) dV$$

5. Významnú úlohu pre meranie veličiny  $A$  majú stavy, ktorých stavové vlnové funkcie sú vlastnými stavmi operátora  $\hat{A}$ :

$$\hat{A} \Phi_n = A_n \Phi_n \quad (\text{predpokladáme diskkrétne spektrum})$$

Stavy  $\Phi_n$  spravidla tvoria úplný ortonormovaný systém, t. j.

$$\int \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_m(\mathbf{r}) dV = \delta_{nm}$$

a ľubovoľnú funkciu  $\psi(\mathbf{r})$  možno rozvinúť do radu

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

Fyzikálna interpretácia: pri meraní veličiny  $A$  v stave  $\psi(\mathbf{r})$  môže byť výsledkom merania len niektorá z hodnôt  $A_n$ , a to s pravdepodobnosťou

$$P_n = |c_n|^2$$

6. Meranie v kvantovej mechanike predstavuje vo všeobecnosti podstatný zásah do sústavy. Stav sústavy sa pri meraní vo všeobecnosti zmení. Po meraní veličiny  $A$ , pri ktorom sa získala hodnota  $A_i$ , sa sústava bude nachádzať vo vlastnom stave (prípadne v niektorom z vlastných stavov – pri degenerovanom spektre) operátora  $A$  prislúchajúcom hodnote  $A_i$ .

7. V prípade degenerovaných spektier zmeranie jednej veličiny neurčuje jednoznačne stav sústavy po tomto meraní. Stav bude ale určený jednoznačne, ak zmeriame všetky veličiny patriace do niektorého súboru, ktorému v priestore operátorov prislúcha úplný systém komutujúcich operátorov.

8. Opis stavu pomocou vlnovej funkcie a pravdepodobnostná interpretácia tejto funkcie vedú priamo k vzťahu neurčitostí. Podľa neho je stredná kvadratická odchýlka súradnice  $\Delta x$  a hybnosti  $\Delta p$  viazaná vzťahom  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ . Analýza myšlienkových (i reálnych) experimentov ukazuje, že vzťah neurčitosti je konzistentný s experimentálnymi možnosťami povolenými kvantovými zákonitostami.

## 2.19 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Rovinná monochromatická vlna dopadá na tienidlo. V tienidle je otvor, ktorý sa otvorí na dobu  $\tau$ . Nájdite rozloženie kruhových frekvencií vo vlnovom balíku prepustenom uzáverom. Uvážte potom prípad s energiou elektrónov  $E = 400$  eV a s uzáverom otvoreným na čas  $\tau = 10^{-8}$  s. Ako sa bude meniť s časom dĺžka balíka prepusteného uzáverom?
2. Častica s hmotnosťou  $m$  sa pohybuje v poli potenciálu  $m\omega^2 x^2/2$  (lineárny harmonický oscilátor). Vlnová funkcia základného stavu je

$$\psi_0(x) = (\pi x_0^2)^{-1/4} \exp(-x^2/2x_0^2), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Energia základného stavu je  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Nájdite maximálnu vzdialenosť častice s touto energiou od rovnovážnej polohy, povolenú klasickou mechanikou. S akou pravdepodobnosťou nájdeme časticu za touto vzdialenosťou podľa kvantovej mechaniky? Pri riešení budete potrebovať

$$\int_1^{\infty} \exp(-x^2) dx \doteq 0,16 \cdot \sqrt{2\pi}$$

3. Elektrón je viazaný na úsečku dlhú  $L$  a opísaný vlnovou funkciou  $Ax(x-L)$ . Nájdite normalizačnú konštantu  $A$ . Aké hodnoty energie môžeme namerať v tomto stave (pri meraní energie)? S akými pravdepodobnosťami nájdeme jednotlivé hodnoty  $E_n$ ?
4. Elektrón v základnom stave atómu vodíka je opísaný vlnovou funkciou

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp(-r/a), \quad \text{kde } a = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$$

- a) Nájdite strednú vzdialenosť elektrónu od jadra.
- b) Nájdite strednú potenciálnu energiu elektrónu v tomto stave. Porovnajte s hodnotou potenciálnej energie v strednej vzdialenosti.

c) Ukážte, že stredný elektrostatický potenciál budený atómom vodíka je

$$\Phi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) e^{-2r/a}$$

d) Nájďte stredné hodnoty  $x^2$  a  $p_x^2$  v základnom stave atómu vodíka a vysvetlite výsledok z hľadiska vzťahu neurčitosti.

5. Nech  $p = -i\hbar d/dx$ . Nájďte komutátory  $[x, p^n]$  a  $[x^n, p]$ .
6. Nájďte komutačné vzťahy operátorov momentu hybnosti  $L_1 = L_x, L_2 = L_y, L_3 = L_z$  s operátormi  $p_1 = p_x, p_2 = p_y, p_3 = p_z$  a s operátormi  $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$ .
7. Ukážte, že operátor  $\lambda = \hat{L} \cdot \hat{p} \equiv L_1 p_1 + L_2 p_2 + L_3 p_3$  komutuje s operátormi  $p_x, p_y, p_z$ .
8. Nájďte také lineárne kombinácie funkcií  $f_1(x) = x, f_2(x) = x^2$ , ktoré budú ortonormálne na intervale  $(0, 1)$ .
9. Operátor  $P$  nech je definovaný vzťahom

$$P\psi(r) = -\psi(-r)$$

Nájďte jeho vlastné hodnoty. Ukážte, že vlastné funkcie prislúchajúce k rôznym vlastným hodnotám sú ortogonálne.

10. Ukážte, že  $\exp(-x^2/2)$  je vlastnou funkciou operátora  $(-d^2/dx^2 + x^2)$  príslušnou k vlastnej hodnote  $\lambda_0 = 1$ . Podobne ukážte, že  $x \exp(-x^2/2)$  je vlastnou funkciou toho istého operátora a nájďte vlastnú hodnotu. Ukážte, že tieto dve funkcie sú ortogonálne na intervale  $-\infty < x < \infty$  a zdôvodnite výsledok všeobecným tvrdením.
11. Nech  $A$  je hermitovský operátor a nech  $B = A^2 = AA$ . Dokážte, že stredná hodnota operátora  $B$  v ľubovoľnom stave je nezáporná a že všetky vlastné hodnoty operátora  $B$  sú nezáporné.
12. Stav častice je opísaný vlnovou funkciou  $\psi(\mathbf{r})$ . Naznačte spôsob, ktorým by ste počítali pravdepodobnosť toho, že  $z$ -ovú súradnicu častice nájdeme v intervale  $(z_1, z_2)$  a  $y$ -ovú zložku hybnosti v intervale  $(p_{y1}, p_{y2})$  pri súčasnom meraní súradnice  $z$  a hybnosti  $p_y$ .