



JAROSLAV ZAMASTIL
JAKUB BENDA

**KVANTOVÁ MECHANIKA
A ELEKTRODYNAMIKA**

KAROLINUM

Kvantová mechanika a elektrodynamika

Jaroslav Zamastil
Jakub Benda

Recenzovali:

Mgr. Roman Čurík, Ph.D.

Mgr. Tomáš Maňchal, Ph.D.

Vydala Univerzita Karlova v Praze

Nakladatelství Karolinum

Obálka Jan Šerých

Sazba Jakub Benda

První dotisk prvního vydání

© Univerzita Karlova v Praze, 2016

© Jaroslav Zamastil, Jakub Benda, 2016

ISBN 978-80-246-3223-0

ISBN 978-80-246-3253-7 (online : pdf)



Univerzita Karlova
Nakladatelství Karolinum 2017

www.karolinum.cz
ebooks@karolinum.cz

Obsah

Obsah	5
Předmluva	11
Značení	17
1 Základy kvantové mechaniky	21
1.1 Základní principy	21
1.2 Matematické schéma kvantové teorie	24
1.2.1 Sternovy-Gerlachovy experimenty	24
1.2.2 Operátory	31
1.2.3 Časový vývoj v kvantové teorii	31
1.2.4 Stacionární stavy	32
1.2.5 Vlastnosti hermitovských operátorů	34
1.2.6 Nejednoznačnost v určení stavu	36
1.2.7 Rabiho metoda měření magnetických momentů	37
1.3 Systémy s větším počtem stupňů volnosti	39
1.3.1 Střední hodnoty operátorů a jejich časový vývoj	39
1.3.2 Kanonické kvantování	40
1.3.3 Harmonický oscilátor	42
1.3.4 Abstraktní řešení	43
1.3.5 Maticová reprezentace	45
1.3.6 Diracova δ -funkce	46
1.3.7 Souřadnicová reprezentace	47
1.3.8 Hybnostní reprezentace	50
1.3.9 Gaussovo klubko a vztah neurčitosti	51
1.4 Poznámky na závěr	53
2 Přibližné metody kvantové mechaniky	55
2.1 Variační metoda	56
2.1.1 Ritzův variační princip	56
2.1.2 Optimalizace nelineárních parametrů	56
2.1.3 Optimalizace lineárních parametrů	57
2.2 Poruchová metoda	61
2.2.1 Samostatné hladiny	61

2.2.2	Degenerované hladiny	63
2.2.3	Poznámka o chybě poruchové metody	65
3	Atom vodíku a struktura jeho spektrálních čar	67
3.1	Částice v elektromagnetickém poli	67
3.2	Hrubá struktura	68
3.2.1	Problém 2 částic	68
3.2.2	Elektrostatický potenciál	69
3.2.3	Jednotky	70
3.2.4	Sférické souřadnice	71
3.2.5	Řešení pro s -stavy	72
3.2.6	Porovnání s experimentem	74
3.3	Hyperjemná struktura	75
3.3.1	Magnetické pole dipólu	75
3.3.2	Hamiltonián částice se spinem ve vnějším elektromagnetickém poli	78
3.3.3	Hyperjemné štěpení základního stavu atomu vodíku	80
3.3.4	Klasifikace stavů pomocí integrálů pohybu	82
3.4	Orbitální moment hybnosti	87
3.4.1	Význam momentu hybnosti	87
3.4.2	Úhlové funkce p -stavů	89
3.4.3	Náhodná degenerace	91
3.5	Jemná struktura	92
3.5.1	Relativistické korekce	92
3.5.2	Jemné štěpení hladiny $n = 2$	95
3.5.3	Klasifikace stavů pomocí integrálů pohybu	97
3.6	Hamiltonián dvou částic s přesností do α^4	98
3.6.1	Magnetické pole pohybujícího se náboje	99
3.6.2	Hamiltonián dvou částic ve vnějším elektrostatickém poli	101
3.6.3	Případ heliu podobného atomu	103
3.6.4	Případ vodíku podobného atomu	104
3.6.5	Poznámky na závěr	104
4	Poklady ukryté v komutátorech	105
4.1	Obecné řešení momentu hybnosti	105
4.2	Skládání momentů hybnosti	108
4.3	Rungeho-Lenzův vektor	114
4.3.1	Rungeho-Lenzův vektor v klasické mechanice	114
4.3.2	Rungeho-Lenzův vektor v kvantové mechanice	116
4.4	Maticové elementy vektorových operátorů	117
4.4.1	Motivace	117
4.4.2	Komutační relace	118
4.4.3	Výběrová pravidla v m	118
4.4.4	Výběrová pravidla v l	119
4.4.5	Nenulové maticové elementy – závislost na m	120
4.4.6	Zobecnění	122

4.4.7	Zeemanův jev	123
4.4.8	Nenulové maticové elementy – závislost na l a n	125
4.4.9	Tvar kulových funkcí	125
4.5	Atom vodíku – obecné řešení	127
4.5.1	Maticové elementy Rungeho-Lenzova vektoru	127
4.5.2	Energetické spektrum atomu vodíku	128
4.5.3	Starkův jev	129
4.5.4	Radiální funkce atomu vodíku	130
4.5.5	Parabolické souřadnice	131
4.6	Rozklad rovinné vlny do kulových vln	132
4.7	Ještě jeden způsob řešení atomu vodíku	135
4.7.1	Algebra radiálních operátorů a úplná diskretní báze	135
4.7.2	Vztah vodíkové a úplné diskretní báze	137
4.8	Poznámky na závěr	138
5	Atom helia	139
5.1	Oddělení pohybu těžiště	140
5.2	Symetrie v atomu helia	140
5.2.1	Antisymetrie vlnové funkce a hodnota celkového spinu	141
5.2.2	Odkud se bere nerozlišitelnost?	143
5.2.3	Další symetrie	143
5.2.4	Spektroskopické značení	143
5.3	Variační metoda s Hartree-Fokovou funkcí	144
5.3.1	Multipólový rozvoj	145
5.3.2	Poznámka o Legendreových polynomech	147
5.3.3	Výpočet integrálů	148
5.3.4	Optimalizace parametrů	150
5.4	Variační metoda – konfigurační interakce	152
5.4.1	Přizpůsobení báze symetrii	153
5.4.2	Úhlová integrace – Wignerův-Eckartův teorém	155
5.4.3	Úhlová integrace – výpočet redukováných maticových elementů	158
5.4.4	Výpočet jednoelektronových maticových elementů	159
5.4.5	Integrace přes radiální proměnné	159
5.4.6	Konvergence variační metody	163
5.4.7	Porovnání s experimentem	164
5.4.8	Poznámka o paritě	165
5.4.9	Poznámka o složitějších atomech	165
5.5	Poznámky na závěr	166
6	Dynamika – nerelativistická teorie	169
6.1	Kvantování elektromagnetického pole	170
6.1.1	Proč kvantovat?	170
6.1.2	Jak kvantovat?	170
6.1.3	Klasická elektrodynamika v obvyklém formalismu	170
6.1.4	Kalibrační invariance a počet stupňů volnosti	172
6.1.5	Coulombova kalibrace	172

6.1.6	Hamiltonián volného elektromagnetického pole	173
6.1.7	Klasická elektrodynamika v Hamiltonově formalismu	174
6.1.8	Polarizace	177
6.1.9	Kvantované elektromagnetické pole	177
6.1.10	Přechod ke komplexní bázi	178
6.1.11	Přechod ke spojitě bázi	180
6.1.12	Stavy pole	180
6.2	Spontánní emise	181
6.2.1	Úvodní poznámky	181
6.2.2	Interakční reprezentace	182
6.2.3	Časová poruchová metoda a Fermiho zlaté pravidlo	183
6.2.4	Integrace stupňů volnosti EM pole	184
6.2.5	Elektrické dipólové záření	185
6.2.6	Polarizace a úhlové rozdělení vylétávajících fotonů	187
6.2.7	Doba života stavů	188
6.2.8	Kruhové stavy a souvislost s klasickou teorií	190
6.2.9	Zakázané přechody	192
6.2.10	Záření spojené se změnou spinu	193
6.3	Fotoelektrický jev	194
6.3.1	Úvodní poznámky	194
6.3.2	Parabolické souřadnice	198
6.3.3	Vlnové funkce spojitého spektra	199
6.3.4	Přechod z diskrétní do spojitě části spektra	203
6.3.5	Úhlové a energetické rozdělení vylétávajících elektronů	206
6.3.6	Převod jednotek	207
6.3.7	Excitace a ionizace atomu elektronem	209
6.4	Rozptyl fotonu na atomu	213
6.4.1	Lippmannova-Schwingerova rovnice	213
6.4.2	Integrace stupňů volnosti EM pole	215
6.4.3	Rayleighův, Ramanův a rezonanční rozptyl	219
6.4.4	Sčítání a středování přes polarizace a úhly	223
6.4.5	Výpočet výrazů obsahujících funkci Hamiltonova operátoru	224
6.4.6	Vlnové funkce spojitého a diskrétního spektra ve sférických souřadnicích	225
6.4.7	Rozptyl fotonu na atomu vodíku	229
6.4.8	Thomsonův rozptyl	231
6.5	Virtuální procesy	232
6.5.1	Úvodní poznámky	232
6.5.2	Lambův-Retherfordův experiment	233
6.5.3	Vlastní energie – Betheho odhad	233
6.5.4	Vylepšený Betheho odhad	237
6.5.5	Výměna fotonu – okamžité působení	239
6.5.6	Výměna fotonu – vliv zpoždění	241
6.5.7	Výměna dvou fotonů – nízké energie	244
6.6	Formalismus druhého kvantování	247
6.6.1	Kvantování volných polí	247

6.6.2	Stavy volného elektronového pole	250
6.6.3	Elektronové pole působící samo na sebe	251
6.7	Poznámky na závěr	253
7	Dynamika – relativistická teorie	255
7.1	Relativistická rovnice pro elektron	256
7.1.1	Relativistické značení	256
7.1.2	Kleinova-Gordonova rovnice	258
7.1.3	Diracova rovnice	259
7.1.4	Vnější EM pole	261
7.1.5	Potíže s fyzikálním výkladem Diracovy rovnice a jejich rozuzlení	262
7.2	Hamiltonián kvantové elektrodynamiky	263
7.2.1	Kvantování elektron-pozitronového pole	263
7.2.2	Interakční hamiltonián	266
7.2.3	Poznámka o nábojové symetrii	268
7.2.4	Poznámka o kalibrační invarianci	270
7.3	Obyčejná poruchová metoda	271
7.3.1	Interakce vázaného elektronu s fluktuacemi polí	272
7.3.2	Positronium I	277
7.4	Feynmanův časoprostorový přístup	287
7.4.1	Elektron ve vnějším EM poli	287
7.4.2	Elektron interagující se svým vlastním EM polem	294
7.4.3	Propagátor fotonu a časově uspořádaný součin operátorů	295
7.4.4	Vlastní energie elektronu – vyjádření pomocí Greenových funkcí	297
7.4.5	Integrace přes k_0	298
7.4.6	Vlastní energie elektronu – vyrušení nekovariantních členů	300
7.4.7	Polarizace vakua – kovariantní vyjádření	302
7.4.8	Diskuse relativistické invariance	303
7.4.9	Jaký pohled na pozitrony je správný?	305
7.4.10	Poznámka o Feynmanových diagramech a Feynmanových pravidlech	306
7.5	Vlastní energie elektronu – výpočet	309
7.5.1	Regularizace	309
7.5.2	Integrace čtyř-hybnosti virtuálního fotonu	310
7.5.3	Renormalizace hmotnosti	315
7.5.4	Výpočet pozorovatelné části efektu	318
7.5.5	Nízkoenergetická část efektu	323
7.5.6	Vysokoenergetická část efektu	325
7.5.7	Anomální magnetický moment elektronu	326
7.5.8	Lambův posun	327
7.5.9	Započtení pohybu jádra	328
7.6	Polarizace vakua – výpočet	329
7.6.1	Rozvoj propagátoru	329
7.6.2	Kalibrační invariance a stupeň divergence	334
7.6.3	Poznámka o hmotném vektorovém poli	335
7.6.4	Renormalizace náboje	336

7.6.5	Výpočet pozorovatelné části efektu	338
7.6.6	Porovnání s experimentem	339
7.7	Výměna dvou fotonů – vysoké energie	341
7.7.1	Podélné fotony	342
7.7.2	Výměna dvou fotonů ve Feynmanově pohledu	343
7.7.3	Propagátor fotonu a časově uspořádaný součin operátorů . . .	343
7.7.4	Poznámka o kalibrační invarianci	347
7.7.5	Podélná část interakce	348
7.7.6	Zbývající část interakce	351
7.7.7	Porovnání s experimentem	352
7.8	Pozitronium II	353
7.8.1	Virtuální anihilace pozitronia ve Feynmanově pohledu	353
7.8.2	Korekce od polarizace vakua	354
7.8.3	Korekce od výměny fotonu mezi elektronem a pozitronem . . .	356
7.8.4	Korekce od dvoufotonové anihilace	366
7.8.5	Porovnání s experimentem	367
7.9	Poznámky na závěr	369
	Seznam úkolů	371
	Literatura	373
	Rejstřík	377

Předmluva

„We have not redefined quantum theory; we carry it to its logical conclusion. (...) We learned it second or third hand, as an established discipline whose rules and techniques we came to feel as intuitive and natural, not as a peculiar displacement of classical: we found and find it almost painful to do 19-th century physics. The great Bohr-Einstein philosophical debates which fascinate historians and the philosophers are to us a bit wrong-headed (...)“ [1]

Pár slov na vysvětlenou

V současné době, kdy existuje řada učebnic kvantové mechaniky, z nichž některé jsou výborné a dnes patří již mezi „klasiku“ (např. pro začátečníky [2], [3], mírně pokročilé [4]–[6], pokročilé [7]), a kdy se objevují další pozoruhodné výklady (např. [8]), kdy dále existuje řada učebnic kvantové elektrodynamiky, popř. kvantové teorie pole, z nichž je opět řada výborných (opět v široké stupnici od snazších, např. [9]–[13], po náročnější, např. [14]–[18]), a kdy přes internet je možno takřka jakoukoliv učebnici vyhledat, stáhnout a vytisknout, cítíme potřebu předeslat omluvu, či pár slov na vysvětlenou za to, že přicházíme s další učebnicí zabývající se výkladem kvantové mechaniky a elektrodynamiky.¹

1. Symetrie jako parita, moment hybnosti, atd. a jejich využití pro řešení kvantově-mechanických úloh, např. Wignerův-Eckartův teorém, se většinou vykládá na tak obecné úrovni, že nezasvěcenému, pokud je vůbec pochopí, není vůbec jasné k čemu jsou dobré. Z tohoto důvodu věnujeme značnou pozornost řešení nejjednodušších fyzikálně zajímavých problémů, jež není možné vyřešit přesně, jako anharmonický oscilátor a heliový atom. Toto řešení, oproti jiným učebnicím, dotáhneme do konce, nikoliv jen „nahodíme“. V době, kdy program na diagonalizaci matic je standardní součástí knihoven pokročilých programovacích jazyků jako Maple, Matlab, Mathematica, Octave, Scilab, Maxima, jsme chtěli studentům ukázat, jak si takové úlohy mohou sami vyřešit na osobním počítači.

Domníváme se, že problém symetrií a jejich využití je, paradoxně, mnohem snazší na pochopení, pokud se kvantová mechanika vykládá způsobem, který

¹Na rozdíl od klasické elektrodynamiky, kde se statická část problému označuje jako elektrostatika a magnetostatika a vykládá se nezávisle na klasické mechanice, se kvantová elektro- a magneto-statika obvykle vykládá souhrnně s kvantovou mechanikou.

zdůrazňuje její abstraktní, algebraickou, formulaci, nikoliv způsobem založeným na Schrödingerově vlnové funkci.

Algebraický přístup umožňuje elegantní řešení několika málo fyzikálně zajímavých problémů, které jsme schopni řešit přesně, jako harmonický oscilátor, moment hybnosti, skládání momentu hybnosti a vodíku podobné atomy. Tento přístup umožňuje kdykoliv zrekonstruovat řešení, včetně vlnových funkcí, bez toho, že by člověk potřeboval vědět, jaký je tvar nejrůznějších ortogonálních polynomů, atd.

Výhoda algebraického přístupu se dále stane zřejmou při řešení problémů, které nelze řešit přesně. Jedná se o výpočet maticových elementů pro variační výpočet anharmonického oscilátoru, problém zahrnutí spojitého spektra při variačním výpočtu víceelektronových atomů, úhlovou a radiální část integrace při výpočtu maticových elementů elektron-elektronové interakce, jež jsou potřeba při variačním výpočtu víceelektronových atomů atd.

Nutno zdůraznit, že problém symetrií a jejich využití není podružný. Naopak je zcela klíčový ve všech oblastech fyziky, kde se kvantová mechanika používá, a kromě samotného pochopení fyzikálního obsahu kvantové mechaniky představuje podle našeho názoru to hlavní, co by měl student z kvantové mechaniky pochopit.

2. Chtěli jsme vyložit relativistickou kvantovou elektrodynamiku způsobem, který by minimalizoval výklad jejích formálních stránek, popř. který by zdůraznil, proč je nutné z praktického hlediska té které formální stránce věnovat pozornost, který by umožnil „vidět“ za formalismus a který by přitom dotáhl až do konce, nikoliv jen „nahodil“, výpočet alespoň těch nejdůležitějších vlivů kvantové elektrodynamiky na atomová spektra.

Kvantová elektrodynamika se zvláště v moderních učebnicích jako např. [9], [14], [15]² formuluje a vykládá pro vysokoenergetické rozptylové procesy jako nejjednodušší příklad teorie založené na Lorentzově a kalibrační invarianci. Používá se přitom velmi elegantní a mocný, ale, alespoň při prvním seznámení, poměrně náročný formalismus moderní kvantové teorie pole (Dysonův-Wickův rozvoj, dráhové integrály).

To může vést k dvěma mylným závěrům. Za prvé, že „nízkoenergetičtí“ fyzikové nemusejí o relativistické kvantové elektrodynamice nic vědět. Za druhé, že běžný formalismus kvantové mechaniky je nutno od samého počátku zahodit a naučit se zcela nový formalismus kvantové teorie pole. To je ale příliš náročné a vzhledem k prvnímu bodu to ani nestojí za námahu. Navíc u procesů kvantové elektrodynamiky, které mají největší význam pro fyziku nízkých energií, jako je například spontánní emise, je možno, alespoň v prvním a pro praktické účely postačujícím přiblížení vliv relativistických efektů na pohyb elektronů zcela zanedbat. Toto přiblížení, nazývané nerelativistická kvantová elektrodynamika, je podstatně snazší na pochopení než úplná relativistická teorie.

²Všechny jsou podle našeho názoru výborné a čtenáři je vřele doporučujeme.

Toto hledisko nesdílíme. Jakmile jdeme za první přiblížení, narazíme i v rámci nerelativistické teorie na tzv. virtuální procesy, které nelze v rámci nerelativistického přiblížení úplně vyřešit. Nerelativistická kvantová elektrodynamika je tak nutně neúplná teorie. Navíc se domníváme, že kvantová teorie pole – podobně jako obecná teorie relativity – patří k základnímu vzdělání fyzika. Konečně, metody kvantové teorie pole se ukázaly být velice užitečné v kvantové teorii mnoha částic, viz např. [14], [19].

Při výkladu potřebné relativistické teorie však, na rozdíl od běžného postupu, nejprve odvodíme vliv fluktuací elektromagnetického a elektron-positronového pole (vlastní energie elektronu a polarizace vakua) na vázaný elektron běžně používaným formalismem kvantové mechaniky („old fashioned perturbation theory“) a poté ukážeme, jak lze výsledné vzorečky zjednodušit do moderní podoby („new fashioned perturbation theory“) pomocí Feynmanova výkladu pozitronů jako elektronů pohybujících se proti toku času. Takové odvození není ani nejkratší, ani nejlogičtější, umožňuje ale jasně určit, v čem tkví přechod od nerelativistické k relativistické teorii a kde je ve Feynmanových diagramech ukryta běžně užívaná časově nezávislá poruchová metoda, Coulombův zákon, atd. Učebnice [10] se z dosavadních učebnic nejvíce blíží zde zvolenému přístupu.

Z výše řečeného je zřejmé, že tento text není encyklopedické povahy, nesnažili jsme se pokrýt všechna témata, která se běžně vykládají, nýbrž snažíme se několik konkrétních problémů vyložit ve větším detailu, než je obvyklé. Věříme přitom, že myšlenky je nutno vykládat na konkrétních příkladech. Pokud student myšlenku pochopí, tak si její zobecnění na jiné problémy zvládne provést. Přístup, kdy se myšlenky vykládají tak obecně a přesně, jak je jen možné, a předpokládá se, že použití na konkrétní problémy si student zvládne provést sám, pokládáme za scestný.

Dále jsme se na jedné straně snažili maximálně snížit diskusi čistě formálních stránek problémů, na druhé straně jsme se snažili vyhnout výroky „dá se ukázat, že“. Tedy s mírou přesnosti vyjadřování běžné ve fyzikální literatuře jsme se snažili vše motivovat a logicky zdůvodnit. Míra přesnosti vyjadřování vyžadovaná čistými matematiky je autorům cizí. Domníváme se, že při vysvětlování fyzikálních úloh vede pouze k tomu, že jednoduché věci působí složitě.³

Dále neděláme to, co je až příliš běžné, tedy abychom oddělovali matematiku od fyziky. To znamená, že potřebujeme-li nějakou část matematiky, tak ji na konkrétním příkladu, ke kterém ji potřebujeme, vyložíme v nezbytné míře. Přístup, kdy autoři, pokud možno do dodatku, shrnou matematickou teorii v celé její „parádě“ a čtenáře upozorní, že to, co právě potřebují, je zvláštní případ obecné matematické teorie, takže vzniká dojem, že by se čtenář měl naučit i celou matematickou teorii, pokládáme za mírně nešťastný. Na rozdíl do jiných autorů se domníváme, že k pochopení kvantové mechaniky a jejímu praktickému ovládnutí *není* potřeba cokoli vědět o matematických teoriích Hilbertových prostorů, distribucí, Lieových grup, řešení lineárních diferenciálních rovnic Fuchsova typu, ortogonálních polynomech atd.

³Umění aproximace, tj. umění odhadnout stupeň přesnosti, s jakou musím pracovat, abych se dobral kýženého výsledku, je nedílnou součástí „umění fyziky“. Ve stejném duchu by se ale měl vést i výklad fyziky. Navíc absolutní přesnost myšlení pokládáme za přelud lidského ducha. Nepochybně se najde řada čtenářů, kteří toto hledisko nesdílí. Např. jeden student nazval přednášku založenou na této učebnici „trestem za úspěšně složenou zkoušku z funkcionální analýzy“.

Nakonec, náš přístup ke kvantové teorii je veden přesvědčením, že úkolem teorie je vysvětlovat a předpovídat experimentální fakta. Fyzika se zajímá o natolik jednoduché systémy a její metody jsou natolik přesné, že tyto fakta mají podobu, někdy dosti přesných, čísel.⁴ Jen s trochou přehánění tak můžeme říci, že úkolem teorie je vysvětlit velké množství čísel získaných ze všech proveditelných experimentů z nějakého velmi malého množství čísel.⁵ Kvantová elektrodynamika plní tuto úlohu, jak se nám snad podaří dále ukázat, více než dobře. Již na tomto místě můžeme poznamenat, že několik čísel, které potřebujeme vzít z experimentu, jako konstantu jemné struktury, Rydbergovu konstantu (co tyto názvy označují se čtenář, který o nich nic neví, dozví později), poměr hmotnosti elektronu a protonu, elektronu a mionu a případně dalších, stačí k souhlasu teorie a experimentu s poměrnou nejistotou 1 díl v 10^9 případně ještě menší.⁶

Pokud vyložené zásady výkladu čtenáři nevyhovují nebo nenajde-li zde, co hledá, ať sáhne po jiné učebnici, např. po jedné z těch zmíněných v úvodu tohoto úvodu. Učebnice [7] a [18] jsou vyložené encyklopedického charakteru.

Co se týče odkazů na literaturu, odkazujeme se na několik základních učebnic, které dobře známe a které jsou většinou všeobecně známy.⁷ Učebních textů o kvantové teorii je takové množství, že pořídit jen jejich seznam je nad naše síly. U základních partií (první tři kapitoly) pravděpodobně ani nemá smysl upozorňovat, pokud jsme se při odvozování výsledků nechali inspirovat jinde. U pokročilejších se o to občas pokusíme. Pokud neupozorníme, kde jsme se inspirovali, tak to samozřejmě nutně neznamená, že náš výklad je původní.

V textu se nachází množství úloh; jejich hlavním účelem je, aby si čtenář mohl vyzkoušet, do jaké míry pochopil to, co přečetl. Úlohy jsou podle obtížnosti značeny počtem znaků \spadesuit . Pokud je čtenář schopen vyřešit byť jedinou úlohu, je schopen i rozpoznat, jestli více znaků \spadesuit značí úlohu těžší nebo lehčí.

Kvantová teorie je dnes neodmyslitelnou součástí fyziky atomů, molekul, optiky, pevných látek, atomového jádra, elementárních částic, vývoje a závěrečného stadia „normálních“ hvězd a neutronových hvězd. Rozhodli jsme se omezit výklad na použití kvantové teorie na fyziku atomů, elektromagnetického pole a jejich vzájemného působení. Tato oblast má tu výhodu, že bez velké znalosti experimentálních dat je zřejmé, jaké přiblížení je výhodné udělat a jak k nim spočítat opravu. A u něčeho se začít musí. Navíc atomová fyzika, zejména díky pokrokům v experimentální technice, je stále jedno z nejživějších odvětví fyziky. K tomu se stačí podívat na Nobelovy ceny; za práce z atomové fyziky byly uděleny za posledních dvacet let čtyřikrát: 2012 za experimenty umožňující manipulaci jednotlivých mikroskopických objektů vykazujících kvantové vlastnosti, 2005 za přesné spektroskopické metody a měření, 2001 za Boseho-Einsteinovu kondenzaci atomů a 1997 za chlazení a uvěznění atomů. Takže co následuje, je „klasika“, nicméně klasika stále živá!

⁴V [20] je popsán experiment ve kterém byla jistá spektrální čára iontu $^{171}\text{Yb}^+$ změřena s poměrnou nejistotou $7,1 \times 10^{-17}$.

⁵Samozřejmě, čím menší je množství čísel, které do teorie vkládáme, tím lépe.

⁶Viz např. [21].

⁷Pro českého čtenáře bychom v této souvislosti měli zmínit učebnice [22]–[24].

Předpoklady

Následující je zejména pro samouky, kteří mají naše velké sympatie. Přestože o řadě pokročilých matematických teorií čtenář „nemusi mít ani páru“, je nutné aby partie matematiky, které se většinou vykládají pod názvy jako lineární algebra a matematická analýza, prakticky ovládal na slušné úrovni. Tedy, má-li četba této učebnice přinášet radost a nikoliv frustraci, musí být splněno následující.

1. Čtenář je zblhlý v diferenciálním a integrálním počtu jedné proměnné, v zacházení s komplexními čísly, vektory a maticemi.
2. Čtenář má jistou znalost diferenciálního a integrálního počtu více proměnných a vektorové analýzy. Tato znalost nemusí být nikterak hluboká; zcela postačí na úrovni, na jaké se vykládá v základních kursech fyziky, viz např. [25]. Např., v díle I., kapitola 14.5. se vykládá, co je parciální derivace, v díle II., kapitoly 2 a 3 je vyloženo diferenciální a integrální počty vektorových polí, atd.
3. Pro partie týkající se kvantové elektrodynamiky, kapitoly 6 a 7, je nutná znalost funkce komplexní proměnné v míře, v jaké se vykládá např. v [26].
4. Dále jsme předpokládali, že čtenář je alespoň zblžně obeznámen s klasickou mechanikou, elektrodynamikou a speciální teorií relativity. Znalost na úrovni učebnice [25] by opět měla být více než postačující. Jistá obeznámenost s Hamiltonovou formulací klasické mechaniky nemůže být na škodu, ačkoliv není klíčová. Klasické učebnice jsou [27], [28].

Poděkování

- Jakubovi Zahumenskému, Ladě Vybulkové a Tomáši Javůrkovi za pomoc při vytváření prvotní verze rukopisu,
- oběma recenzentům, Romanu Čuríkovi a Tomáši Mančalovi, za celou řadu upozornění, od poukázání na drobné chyby po zásadní vylepšení argumentace,
- Arnoštu Mládkovi za upozornění na řadu nepřesností,
- odbornému redaktorovi Václavu Hozmanovi za pomoc s jazykovou úpravou textu,
- prof. Janu Valentovi děkujeme za obrázek spektrální čáry sodíkového dubletu uvedený na obálce,
- našemu vzácnému učiteli, bohužel již zesnulému, prof. Lubomíru Skálovi, za jeho podporu a povzbuzení v počáteční fázi tohoto projektu.

Chyby

Seznam chyb, na které jsme nepřišli a na které ještě přijdeme, případně nás na ně upozorní laskavý čtenář, jsou uvedeny na webové adrese

<http://quantum.karlov.mff.cuni.cz/~jzamastil/>

Značení

a	skalární veličina, složky vektorů a jejich velikosti
a^*	komplexní sdružení
\mathbf{A}	třírozměrný vektor
\mathbf{A}	čtyřrozměrný vektor („čtyřvektor“)
A, A^\top, A^+	matice, její transpozice a hermitovské sdružení
$\mathbf{1}$	jednotková matice
$\text{diag}\{a_1, \dots, a_n\}$	diagonální matice zadaná vlastními čísly
\hat{A}	skalární operátor, složka vektorového operátoru
$\hat{\mathbf{A}}$	třírozměrný vektorový operátor
$\hat{\mathbf{A}}$	čtyřrozměrný vektorový operátor
$[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}$	komutátor
$\{\hat{a}, \hat{b}\} = \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$	antikomutátor
$ +\rangle$	spinový stav $ \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$
$ -\rangle$	spinový stav $ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$	diferenciální vektorový operátor
$\hat{V}_\pm = \hat{V}_1 \pm i\hat{V}_2$	často používaná kombinace složek vektorového operátoru
\Re	reálná část komplexního čísla
\Im	imaginární část komplexního čísla
$\dot{q} = \frac{dq}{dt}$	časová derivace
$d\Omega = d\varphi d\vartheta \sin \vartheta$	diferenciál prostorového úhlu

Sčítací konvence

- Skalární součin v trojrozměrném i čtyřrozměrném prostoru je značen centrovanou tečkou, tedy $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ i $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$.
- Složky třívektorů nesou latinský index (i, j, k, \dots), složky čtyřvektoru jsou rozeznatelné podle řeckých indexů (μ, ν, \dots).
- Používáme Einsteinovu sčítací konvenci, tj. pokud jsou dva indexy stejné tak se přes ně sčítá, např.

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3,$$

případně pro čtyřvektory vždy s metrikou $(+1, -1, -1, -1)$ nezávisle na poloze

indexů (horní/dolní)

$$a_\mu b_\mu = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3.$$

Složkový formalismus

Skalární součin píšeme ve složkách s využitím výše zmíněné Einsteinovy sčítací konvence

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_j B_j = \delta_{ij} A_i B_j, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_i}{\partial x_i}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i},$$

kde Kroneckerův symbol

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (i \neq j). \end{cases}$$

Vektorový součin píšeme ve složkách

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k, \quad (\nabla \times \mathbf{A})_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j},$$

kde Levi-Civitův symbol

$$\begin{aligned} \epsilon_{123} &= \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1, \\ \epsilon_{213} &= \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1 \end{aligned}$$

a

$$\epsilon_{ijk} = 0,$$

když libovolná dvojice indexů ij , jk nebo ik nabývá stejných hodnot.

Všechny identity vektorového počtu a vektorové analýzy používané v textu lze odvodit z identity

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ipq} = \delta_{jp} \delta_{kq} - \delta_{jq} \delta_{kp}.$$

o jejímž důkazu je nejlépe se přesvědčit přímým dosazením.

Jednotky, základní konstanty a experimentální data

Pokud není řečeno jinak, používáme tzv. přirozené jednotky, ve kterých $\hbar = c = \epsilon_0 = 1$. Fyzikální rozměr některých základních veličin v této soustavě je uveden v tabulce 1. Převodů mezi systémy budeme potřebovat jen maličko. V rovnici (3.11), oddíl 3.2.3, je ukázáno, jaký rozdíl frekvencí v hertzech odpovídá rozdílu energií v elektronvoltech. Zbývající převody pro účinný průřez, čas, elektrickou intenzitu a magnetickou indukci jsou souhrnně vysvětleny v oddílu 6.3.6.

Základní fyzikální konstanty, které je nutno vzít z experimentu a které budeme potřebovat jsou uvedeny v následujících oddílech:

- konstanta jemné struktury α v 3.2.3
- Rydbergova konstanta vynásobená rychlostí světla $R_\infty c$ v 3.2.3

veličina	symbol	rozměr v systému jednotek	
		SI	přirozeném
energie	E	J	eV
hmotnost	m	kg	eV
rychlost	v	m/s	1
čas	t	s	eV ⁻¹
účinný průřez	σ	m ²	eV ⁻²
elektrická intenzita	E	V/m	eV ²
magnetická indukce	B	T	eV ²

Tab. 1: Soustavy jednotek využívané v textu.

- poměr hmotností elektronu a protonu, elektronu a mionu, elektronu a deuteronu v 3.2.6
- hmotnost elektronu m_e v 6.3.6.

Kvantitativní experimentální data, se kterými budeme porovnávat teoretické předpovědi, jsou uvedena v následujících oddílech:

- přechod $2s - 1s$ ve vodíku, deuteriu a mionu v 3.2.6
- přechod $1^3s - 1^1s$ ve vodíku a mioniu v 3.3
- přechod $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ ve vodíku v 3.5.2
- přechod $2^1S - 1^1S$ v heliu v 5.4.7
- přechody $1^3s - 1^1s$, $2^3s - 1^3s$, $2^3s - 2^3p_0$, $2^3s - 2^3p_1$, $2^3s - 2^3p_2$ v pozitroniu a doba života stavu 1^1s pozitronia v 7.3.2
- gyromagnetický poměr elektronu g_e v 7.5.7
- přechod $2p_{1/2} - 2s$ ve vodíku, mioniu a mionovém vodíku v 7.6.6.

Kapitola 1

Základy kvantové mechaniky

V této kapitole si vyložíme základní principy kvantové mechaniky. Na příkladu Sternových-Gerlachových experimentů pro částici se spinem $1/2$ budeme ilustrovat, jak jsou tyto principy zabudované do matematického formalismu. Vše podstatné z kvantové mechaniky lze pochopit na výkladu a popisu těchto jednoduchých experimentů. Poté ukážeme zobecnění matematického formalismu na složitější systémy. Na příkladu harmonického oscilátoru si ukážeme vztah mezi abstraktním a konkrétním pojetím tohoto formalismu.

1.1 Základní principy

Není nic mystického na kvantové mechanice, pokud jsme ochotni přijmout následující principy. Tyto dva principy obsahují vše, co je na chování mikroskopických částic zvláštní, ať už z hlediska naší každodenní zkušenosti, či klasické fyziky. Tyto principy není možné logicky odůvodnit; tvůrci kvantové mechaniky¹ k nim dospěli za pomoci experimentálních dat. Na druhé straně, pokud tyto principy přijmeme, vše ostatní v kvantové mechanice je takřka logicky nevyhnutelné. Pokud se jednoho dne ukáže, že kvantovou mechaniku je potřeba pozměnit,² bude potřeba pozměnit následující dva principy.

1. *Jsmo schopni předpovědět pouze pravděpodobnosti procesů.*

Poprvé se s tímto faktem fyzici setkali při rozboru radioaktivních procesů a vyzařování světla atomy. Již roku 1905 Rutherford konstatuje, že počet jader $N(t)$, jež se radioaktivně rozpadly v čase t , je dán formulí $N(t) = N(t=0)e^{-\gamma t}$, kde γ je konstanta závisající na konkrétním jádru (to jest, jestli sledujeme jádra uranu, radia, atd.). Až postupem času si fyzici uvědomili, že nic lepšího než tento statistický zákon platný pro velká N nejsme schopni poskytnout. Během radioaktivního rozpadu nevíme totiž přesně, kdy se které jádro rozpadne, umíme

¹To jsou Heisenberg, Schrödinger, Dirac a Born, s klíčovými příspěvky od Plancka, Einsteina, Bohra, De Broglieho a Pauliho.

²Tuto možnost však autoři nepokládají za pravděpodobnou.

jen předpovědět pravděpodobnost rozpadu typického jádra v každém okamžiku, a tedy jen střední počet částic, které se rozpadnou za nějakou dobu.

Roku 1917 provádí Einstein analýzu záření absolutně černého tělesa a dochází k závěru, že pro spontánní emisi platí to samé, co bylo výše řečeno pro radioaktivní rozpad. Je-li atom v excitovaném stavu, po určité době, kterou jsme pro konkrétní atom schopni určit pouze statisticky, vyzáří foton a přejde do základního stavu. Je ironií osudu, že Einstein, který si zřejmě první uvědomil nutnost pravděpodobnostního popisu, se s tímto popisem nikdy nesmířil.

Přísný determinismus je tedy v mikrosvětě narušen. Stejná příčina – atom v excitovaném stavu, má rozdílné následky – atom vyzáří foton a přejde do základního stavu někdy za 2×10^{-9} s, někdy za 5×10^{-9} s atd.

Co však dělá chování mikroskopických částic tak zvláštní, je způsob jakým je nutné pravděpodobnosti počítat.

2. *Pravděpodobnost jevu P je dána kvadrátem amplitudy pravděpodobnosti A , kde A je obecně komplexní číslo, $P = |A|^2 = AA^*$. Amplitudy nezávislých procesů se násobí. Pokud jsou dva v principu nerozlišitelné způsoby, jak se systém může dostat z počátečního do koncového stavu, musíme sčítat amplitudy těchto procesů.*

Ilustrujme si tyto principy na známém dvojštěrbinovém experimentu na obr. 1.1. Pravděpodobnost toho, že částice (např. elektron) vyslaná ze zdroje Z bude zachycena v detektoru D , je dána podle právě vysloveného principu jako

$$\begin{aligned} P(Z \rightarrow D) &= |A(Z \rightarrow 1)A(1 \rightarrow D) + A(Z \rightarrow 2)A(2 \rightarrow D)|^2 = \\ &= |A(Z \rightarrow 1)A(1 \rightarrow D)|^2 + |A(Z \rightarrow 2)A(2 \rightarrow D)|^2 + \\ &\quad + 2\Re(A(Z \rightarrow 1)A(1 \rightarrow D)A^*(Z \rightarrow 2)A^*(2 \rightarrow D)). \end{aligned}$$

První člen na pravé straně rovnice udává pravděpodobnost, že částice projde první štěrbinou, druhý člen, že projde druhou štěrbinou. Tyto pravděpodobnosti jsou dány součinem pravděpodobností, že částice vyslaná ze zdroje Z dojde k jedné z štěrbin a od jedné z štěrbin k detektoru D . Pravděpodobnosti nezávislých procesů, částice dojde od zdroje k štěrbině a částice dojde od štěrbin k detektoru, se násobí. Tento výsledek je důsledkem principu, že amplitudy nezávislých procesů se násobí. Na tom nic podivného není. Co je podivné je, že celková pravděpodobnost, že částice dojde od zdroje k detektoru, *není* rovna součtu pravděpodobností, že částice projde jednou ze štěrbin. Může za to třetí, tzv. interferenční, člen. Pokud budeme vysílat jednotlivé částice,³ budeme je zaznamenávat a sledovat výsledné rozložení dopadajících částic v rovině detektoru (např. v rovině detektoru položíme fotografickou desku), dostaneme tzv. interferenční obrazec sestávající z pruhů, kde dopadne velké množství částic, které se budou střídat s pruhy, na které takřka žádné částice nedopadnou.

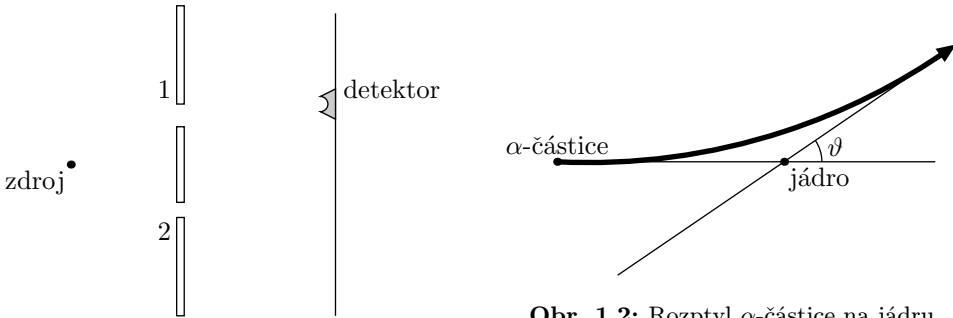
Tento interferenční obrazec je snadno pochopitelný v případě, že celý experiment provádíme s vlnami. Vlnění vyslané ze zdroje dojde k štěrbinám, které

³Je možno to zařídit tak, abychom měli jistotu, že štěrbinami prochází vždy jen jedna částice.

můžeme považovat za nové zdroje. Vlny z těchto dvou štěrbin dopadnou na rovinu detektoru obecně fázově posunuté, přičemž fázový posun závisí na místě dopadu. Na některých místech vlny dopadnou se stejnou fází, tj. „hřebeny“ a „údolí“ obou vln budou totožné, na jiných místech vlny dopadnou v protifázi, tj. tam, kde má jedna vlna „hřeben“, druhá má „údolí“. Místa, kde jsou vlny ve fázi, jsou pruhy, na které dopadne velké množství částic; místa, kde jsou v protifázi, jsou pruhy, na které částice nedopadnou.

Nutno však zdůraznit, že elektrony, protony, neutrony, atd. vždy zachytíme jako částice, tj. detekce je proces, který je přesně lokalizovaný v prostoru a čase (částice dopadne „teď a tady“).

Vlnově-částicový dualismus je tak zabudován do kvantové mechaniky prostřednictvím dvou výše zmíněných principů. Vždy počítáme amplitudy podle druhého principu, abychom byli schopni popsat vlnové chování elektronů tak, jak se projevuje např. v dvojštěrbinovém experimentu. To, že elektron zachytíme jako částici, nás ale nutí vykládat kvadráty amplitud jako pravděpodobnosti. Podotkneme, že dvojštěrbinový experiment byl poměrně nedávno skutečně proveden [29].



Obr. 1.2: Rozptyl α -částice na jádru

Obr. 1.1: Dvojštěrbinový experiment

Jiný příklad kvantové mechanické interference je možno ilustrovat na rozptylu dvou nerozlišitelných částic. Ernest Rutherford ve svém slavném experimentu, ostřeloval těžké atomy α -částicemi.⁴ Díky výrazně větší hmotnosti α -částice, než je hmotnost elektronu, je možno zanedbat vliv elektronů na pohyb α -částice. Pravděpodobnost rozptýlení α -částice do prostorového úhlu $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ za jednotku času dělenou plošnou hustotou toku nalétávajících α -částic, je dána podle prvního principu vzorcem

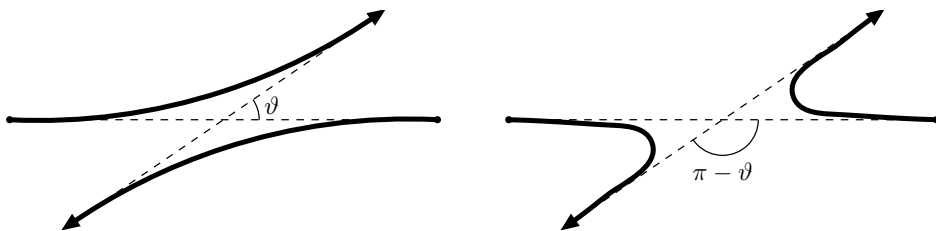
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2, \quad (1.1)$$

kde σ se nazývá účinný průřez a $f(\vartheta)$ je tzv. amplituda rozptylu. Osa z , od které se odečítá úhel ϑ , je ztotožněna se směrem, ve kterém nalétávají α -částice, viz obr. 1.2. Za předpokladu, že vzájemné působení α -částice a jádra je čistě elektrostatické, byl Rutherford schopen pro amplitudu $f(\vartheta)$ odvodit formuli, viz např. [27], která byla

⁴Tento experiment dovedl Rutherforda k modelu atomu, který v hrubých rysech pokládáme dodnes za správný.

v soulase s experimentálními daty. Z historického hlediska bylo štěstí, že Rutherford ostřeloval těžká jádra, kde elektrostatické působení nedovolí přiblížit se α -částicím blízko jádrům. Pro lehčí jádra se projeví vliv jaderné síly. Ještě větší štěstí bylo, že neostřeloval α -částicemi α -částice. Dostal by v tehdejší době (1912) nepochopitelný výsledek. Není totiž možné rozlišit proces, kdy se částice rozptýlí do úhlu ϑ , od procesu, kdy se rozptýlí do úhlu $\pi - \vartheta$ (obr. 1.3), částice jsou *principiálně nerozlišitelné*. Úhlové rozdělení rozptýlených α -částic bude v tomto případě dáno

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2. \quad (1.2)$$



Obr. 1.3: Srážka nerozlišitelných částic

1.2 Matematické schéma kvantové teorie

1.2.1 Sternovy-Gerlachovy experimenty

Sternův-Gerlachův experiment byl navržen Otto Sternem r. 1921 a poprvé ve spolupráci s Walterem Gerlachem proveden r. 1922. Sternovy-Gerlachovy experimenty se zabývají měřením vnitřního stupně volnosti elektronu – spinu. Projekce spinu elektronu do libovolného směru, „stav systému“, může nabývat pouze dvou hodnot. Matematický aparát kvantové mechaniky je možno vyložit na tomto jednoduchém systému. Jak uvidíme dále, zobecnění na složitější systémy je přímočaré.

Elektrony (v původním pokusu atomy stříbra) jsou rozpáleny v peci s malým otvorem, kterým mohou vylétávat ven. Zkolimovaný paprsek poté prochází nehomogenním magnetickým polem, vytvořeným mezi opačnými póly magnetů, z nichž jeden má ostrý hrot, obr. 1.4. Ve vnějším elektromagnetickém poli se elektron chová jako elektrický monopol a magnetický dipól. Velikost *magnetického dipólového momentu* μ je úměrná vnitřnímu mechanickému momentu hybnosti, *spinu* s ,

$$\mu = Ks.$$

Konstanta úměrnosti je rovna

$$K = g_e e / m_e,$$

kde g_e se nazývá *gyromagnetický poměr*. Pro elektron je přibližně roven 1.

Klasická energie magnetického dipólu o velikosti μ v poli o indukci $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ je

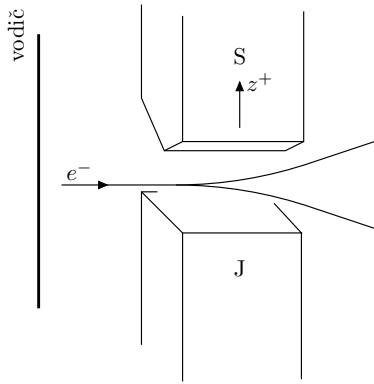
$$E = -\mu \cdot \mathbf{B} = -Ks \cdot \mathbf{B} = -Ks_z B. \quad (1.3)$$

Síla, kterou působí pole na elektrony, je dána vztahem

$$F_z = -\frac{\partial E}{\partial z} = K s_z \frac{\partial B}{\partial z}.$$

Odsud je vidět, že pro rozdělení svazku na základě magnetického momentu není podstatná velikost pole, nýbrž jeho nehomogenita.

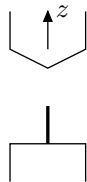
Na atomy s $s_z < 0$ bude proto působit síla směrem „dolů“ a pro $s_z > 0$ „nahoru“, tedy dojde k rozštěpení svazku atomů podle hodnot s_z . Protože atomy v peci jsou orientovány náhodně, neměla by podle klasické mechaniky ve výsledném rozdělení dopadů na detektor převažovat žádná hodnota s_z a měli bychom dostat spojité rozdělení. Místo toho ze Sternovy-Gerlachovy aparatury vycházejí dva rozlišitelné svazky atomů – realizují se jen dvě hodnoty s $s_z = \pm 1/2$. Co je zvláštního na ose z ? Nic. Projekce spinu do libovolné osy nabývá pouze dvou hodnot.



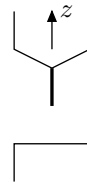
Obr. 1.4: Sternova-Gerlachova sestava

Uvažujme nyní postupné spojení trojice párů magnetů („vylepšený“ S-G), které jsou umístěny jako na obrázku 1.5. Svazek elektronů vstupuje do prvního magnetického pole a štěpí se na dva svazky podle orientace spinu jednotlivých elektronů, přičemž pravděpodobnosti, že spin s_z bude roven $1/2$ nebo $-1/2$, jsou stejné (omezujeme se na z -ovou složku spinu). Tyto dva svazky dále vstupují do druhého magnetického pole, kde je umístěno stínítko. Toto stínítko zachytává elektrony s určitou projekcí spinu do osy z . Druhá část svazku pokračuje dál do třetího magnetického pole, kde je směr jeho dráhy opět zakřiven zpátky do původního směru.

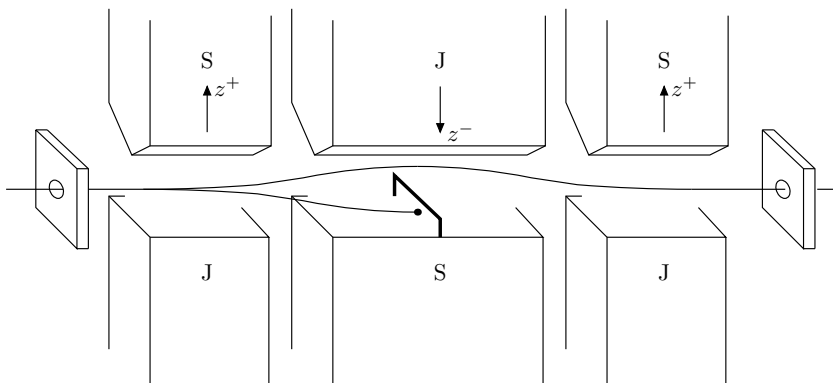
V následujícím výkladu používáme pro vylepšený Sternův-Gerlachův přístroj schematické značky na obrázcích 1.6 a 1.7.



Obr. 1.6: Filtr $s_z = +\frac{1}{2}$



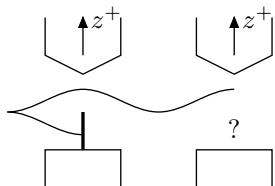
Obr. 1.7: Filtr $s_z = -\frac{1}{2}$



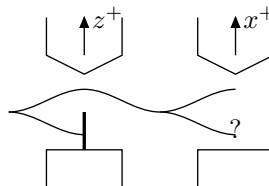
Obr. 1.5: „Vylepšený“ Sternův-Gerlachův přístroj se zábranou propouštějící jen jeden ze svazků.

Na dalších řádcích popíšeme několik typických situací, k jakým může v podobných experimentech dojít.

1. (Obr. 1.8) Všechny elektrony, které vylétávají z prvního přístroje, mají spin orientovaný „nahoru“. S jakou pravděpodobností v druhém přístroji zachytíme elektron se spinem orientovaným „dolů“? Odpověď je, že nezachytíme nic. To je pochopitelné, vždyť z prvního přístroje jsme propustili jen ty elektrony, které mají spin orientovaný „nahoru“!



Obr. 1.8

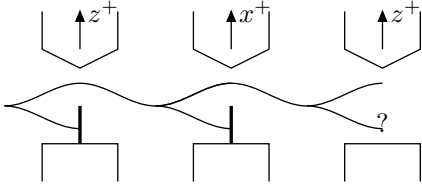


Obr. 1.9

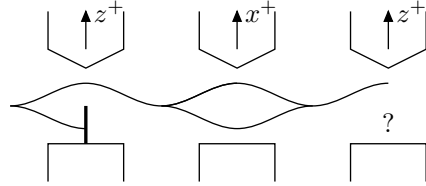
2. (Obr. 1.9) Všechny elektrony, které vylétávají z prvního přístroje, mají spin orientovaný „nahoru“. S jakou pravděpodobností v druhém přístroji, který je vůči prvnímu pootočen o pravý úhel, zachytíme elektron se spinem orientovaným „doprava“? Zachytíme polovinu elektronů, které vystupují z prvního přístroje. O konkrétním elektronu ale neumíme říct, jestli půjde „doleva“ nebo „doprava“. Tento experiment je ilustrací principu 1, jsme schopni předpovídat pouze pravděpodobnosti jednotlivých procesů.

3. (Obr. 1.10) Všechny elektrony, které vylétávají z prvního přístroje, mají spin orientovaný „nahoru“. Všechny elektrony, které vylétávají z druhého přístroje, mají spin orientovaný „doleva“. S jakou pravděpodobností ve třetím přístroji zachytíme elektron se spinem orientovaným „dolů“? Detekujeme jednu čtvrtinu elektronů vystoupivších z prvního přístroje, tj. polovinu toho, co projde druhým přístrojem. To je nepochopitelné, vždyť z prvního přístroje jsme propustili jen ty elektrony, které mají spin orientovaný „nahoru“! Zřejmě informace o tom, jestli spin elektronu „hledí doleva“ nebo „doprava“, ničí informaci o tom, jestli spin elektronu „hledí nahoru“

nebo „dolů“! Tento experiment je ilustrací principu, že pravděpodobnosti nezávislých procesů se násobí. Pravděpodobnost, že spin elektronu „hleděl nahoru“ a bude „hledět doleva“, je jedna polovina, pravděpodobnost, že spin elektronu „hleděl doleva“ a bude „hledět dolů“, je jedna polovina, takže pravděpodobnost, že spin elektronu „hleděl nahoru, potom doleva a nakonec dolů“, je jedna čtvrtina.



Obr. 1.10



Obr. 1.11

4. (Obr. 1.11) Všechny elektrony, které vylétávají z prvního přístroje, mají spin orientovaný „nahoru“. Ve druhém přístroji nyní neodstíníme elektrony, které mají spin orientovaný „doprava“. S jakou pravděpodobností ve třetím přístroji zachytíme elektron se spinem orientovaným „dolů“? Nezachytíme nic. To je nepochopitelné, vždyť pokud v druhém přístroji necháme elektronům otevřenou jednu cestu, ve třetím přístroji zachytíme čtvrtinu z původních elektronů. Pokud v druhém přístroji necháme elektronům otevřené obě cesty, nezachytíme ve třetím přístroji nic! Tento experiment je další ilustrací kvantově-mechanické interference, princip 2. Je nutno sčítat amplitudy nerozlišitelných procesů, nikoliv pravděpodobnosti. Situace je zřejmě úplně stejná jako v případě 1, jelikož druhý přístroj se svazkem elektronů nic neudělá. Neprovádíme žádné měření, a tedy neovlivňujeme stav systému.

Na těchto čtyřech experimentech nyní vyložíme matematický způsob popisu fyzikálních jevů. *Stav systému je popsán vektorem z abstraktního prostoru stavů.*⁵ Konkrétně, vstupuje-li studovaný systém do měřicího přístroje, používáme značení [*ket*-vektor]

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

a pro výstupní stav symbol [*bra*-vektor]⁶

$$\langle\psi| = (a^* \quad b^*), \quad (1.5)$$

kde a a b jsou obecně komplexní čísla jejichž význam bude jasný z dalšího. Přechod od *ket*-vektoru k *bra*-vektoru $\langle\psi| = (|\psi\rangle)^+$ se nazývá *hermitovské sdružení* a odpovídá, jak vidíme, transpozici a komplexnímu sdružení. Skalární součin vektoru $\langle\phi|$,

$$\langle\phi| = (c^* \quad d^*), \quad (1.6)$$

a vektoru $|\psi\rangle$ je roven

$$\langle\phi|\psi\rangle = c^*a + d^*b. \quad (1.7)$$

⁵Matematici tomuto prostoru říkají Hilbertův.

⁶Značení *ket*- a *bra*-vektor pocházejí, stejně jako celý způsob zápisu, od Paula Diraca. Skalární součin $\langle\phi|\psi\rangle$ je „zav-o-rka“, anglicky „bra-c-ket“, tedy $\langle\phi|$ je „bra“ a $|\psi\rangle$ je „ket“.

Snadno se lze přesvědčit, že

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* . \quad (1.8)$$

Amplituda pravděpodobnosti přechodu z jednoho stavu do druhého je dána skalárním součinem odpovídajících stavových vektorů.⁷

Ilustrujme si tyto obecné výroky na S-G experimentech. Pravděpodobnost průchodu částice konkrétní S-G sestavou je rovna druhé mocnině velikosti amplitudy. V prvním případě (obr. 1.8) z experimentů plynou vztahy

$$P(\pm z, \pm z) = |\langle \pm z | \pm z \rangle|^2 = 1, \quad P(\pm z, \mp z) = |\langle \pm z | \mp z \rangle|^2 = 0. \quad (1.9)$$

Nejjednodušší možná volba vektorů $|+z\rangle$, $|-z\rangle$, $\langle +z|$ a $\langle -z|$ vyhovující těmto rovnicím je

$$|+z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \langle +z| = (1 \ 0), \quad \langle -z| = (0 \ 1). \quad (1.10)$$

Při této volbě platí pro složky a a b obecného vektoru $|\psi\rangle$ daného rovnicí (1.4)

$$a = \langle +z | \psi \rangle, \quad b = \langle -z | \psi \rangle,$$

tedy a a b jsou amplitudy pravděpodobnosti přechodu obecného stavu $|\psi\rangle$ do stavu $|+z\rangle$ resp. $|-z\rangle$.

V druhém případě (obr. 1.9) je

$$P(+z, -x) = |\langle +z | -x \rangle|^2, \quad P(\pm z, \pm x) = P(\pm z, \mp x) = 1/2.$$

Samozřejmě též musí platit (na ose z nic zvláštního není!)

$$P(\pm x, \pm x) = |\langle \pm x | \pm x \rangle|^2 = 1, \quad P(\pm x, \mp x) = |\langle \pm x | \mp x \rangle|^2 = 0. \quad (1.11)$$

Těmto podmínkám vyhovují vektory

$$|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (1.12a)$$

$$\langle +x| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1), \quad \langle -x| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ -1). \quad (1.12b)$$

Vyzbrojení znalostí vyjádření vektorů $|\pm x\rangle$ můžeme vypočítat pravděpodobnosti průchodu pro třetí případ (obr. 1.10),⁸

$$P(+z, +x, +x, -z) = |\langle +z | +x \rangle \langle +x | -z \rangle|^2 = \left| (1 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{4},$$

⁷Z dalšího bude zřejmé, proč je nutné ztotožnit skalární součiny s amplitudami pravděpodobnosti, nikoliv s pravděpodobnostmi.

⁸Vzhledem k tomu, že platí $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$, viz (1.8), a tedy $|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | \phi \rangle|^2$, je jedno jestli pořadí událostí odpovídá zápis zleva do prava, $P = |\langle +z | +x \rangle \langle +x | -z \rangle|^2$, nebo zprava do leva, $P = |\langle -z | +x \rangle \langle +x | +z \rangle|^2$.

i pro čtvrtý případ. Zde však musíme být opatrní a podobně jako v dvojštěrbinovém experimentu počítat amplitudy jednotlivých procesů, nikoliv pravděpodobnosti,

$$\begin{aligned} P(+z, \pm x, \pm x, -z) &= |\langle +z | +x \rangle \langle +x | -z \rangle + \langle +z | -x \rangle \langle -x | -z \rangle|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} (1 \ -1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \\ &= 0. \end{aligned}$$

Vybudovaný formalismus umožňuje dát přesný význam okřídlenému výroku „měření ovlivňuje stav systému“. Pokud kromě skalárního součinu zavedeme i *dyadický součin vektorů*

$$|\psi\rangle\langle\phi| = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} (c^* \ d^*) = \begin{pmatrix} ac^* & ad^* \\ bc^* & bd^* \end{pmatrix},$$

můžeme vliv měřícího přístroje na stav systému zobrazovat působením operátoru (matice) na vektor. Například ve třetím případě (obr. 1.10) máme na začátku, po první filtraci, stav $\langle +z |$. Po průchodu druhým S-G filtrem jsou všechny částice ve stavu $\langle +z | +x \rangle \langle +x |$, což je původní stav $\langle +z |$, na nějž zapůsobil operátor

$$\hat{I}_{+x} = | +x \rangle \langle +x | = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ve třetím případě víme, že elektrony, jež prošly druhým přístrojem, mají projekci spinu do osy x plus jedna polovina. Provedli jsme měření. Tím jsme však změnili stav systému, neboť po průchodu druhým přístrojem jsou elektrony v jiném stavu, než v jakém do něj vstupovaly,

$$\langle +z | \hat{I}_{+x} = \langle +z | +x \rangle \langle +x | = (1 \ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 \ 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle +x |.$$

Oproti tomu ve čtvrté sestavě, kdy jsou ve druhém přístroji otevřeny obě cesty, se stav systému nemění, žádné měření však provedeno nebylo:

$$\begin{aligned} \langle +z | (| +x \rangle \langle +x | + | -x \rangle \langle -x |) &= (1 \ 0) \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \right] = \\ &= (1 \ 0) \mathbf{1} = (1 \ 0) = \langle +z |. \end{aligned}$$

Vidíme, že důležitá operátorová rovnost

$$| +x \rangle \langle +x | + | -x \rangle \langle -x | = \mathbf{1},$$

kterou matematikové nazývají *relace úplnosti* pro bázi $\{| +x \rangle, | -x \rangle\}$, má jasný fyzikální význam: dáme-li studovanému systému do cesty přístroj, na kterém neprovedeme měření, výsledný stav systému bude stejný, jako kdybychom systému do cesty žádný přístroj nedali. V matematickém zápise násobíme stavový vektor jednotkovou maticí.

Fyzikální význam druhé důležité relace pro báze, *relace ortonormality*, například (1.9) nebo (1.11), by měl být též jasný. Říká nám, že pokud stavíme zkoumanému systému do cesty stále ten samý typ přístroje, nedostáváme nic nového. Systém zůstává v témže stavu, viz první experiment, obr. 1.8.

Z praktického hlediska jsou relace úplnosti a ortonormality nesmírně užitečné. Umožňují totiž výpočet amplitud přechodu. Vynásobíme-li relaci úplnosti

$$|+z\rangle\langle+z| + |-z\rangle\langle-z| = \mathbf{1}$$

skalárně vektorem $|\psi\rangle$, dostaneme rozklad vektoru $|\psi\rangle$ do báze vlastních stavů projekce spinu do osy z ,

$$|\psi\rangle = \mathbf{1}|\psi\rangle = |+z\rangle\langle+z|\psi\rangle + |-z\rangle\langle-z|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle+z|\psi\rangle \\ \langle-z|\psi\rangle \end{pmatrix},$$

kde poslední rovnost plyne z rovnice (1.10). Pro skalární součin dvou vektorů pak můžeme psát

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|+z\rangle\langle+z|\psi\rangle + \langle\phi|-z\rangle\langle-z|\psi\rangle = (\langle\phi|+z\rangle \quad \langle\phi|-z\rangle) \begin{pmatrix} \langle+z|\psi\rangle \\ \langle-z|\psi\rangle \end{pmatrix}.$$

Na levé straně rovnice máme vektory $\langle\phi|$ a $|\psi\rangle$ dány abstraktně, na pravé straně rovnice konkrétně v bázi vlastních stavů projekce spinu do osy z .

Pokud se vám myšlenka takových rozkladů stále zdá podivná (neměla by), uvědomte si, že analogie posledních tří rovnic v obyčejném dvojrozměrném eukleidovském prostoru je

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \mathbf{e}_x\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y\mathbf{e}_y, \\ \mathbf{F} &= \mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_x\mathbf{e}_x + \mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_y\mathbf{e}_y = F_x\mathbf{e}_x + F_y\mathbf{e}_y, \\ \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} &= \mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_x\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{v} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_y\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{v} = F_xv_x + F_yv_y. \end{aligned}$$

Jediný rozdíl je ten, že v eukleidovském prostoru s reálnou a ortogonální bazí není třeba rozlišovat mezi ket- a bra-vektorem.

Nutno však zůraznit, že zatímco vektory, jež užíváme v klasické mechanice (polohový vektor, atd.), jsou vektory z třírozměrného eukleidovského prostoru, který je přímočarou idealizací prostoru naší zkušenosti, vektory, jež užíváme v kvantové mechanice, jsou vektory z abstraktního prostoru, jež nemá bezprostřední souvislost s třírozměrným prostorem naší zkušenosti.

Pro projekci spinu do osy y samozřejmě platí stejná pravidla jako pro projekce spinu do os z a x (žádná ze souřadnic nemůže být preferovaná vůči ostatním). To s sebou nese požadavky

$$\begin{aligned} |\langle\pm z|\pm y\rangle|^2 &= |\langle\pm z|\mp y\rangle|^2 = |\langle\pm x|\pm y\rangle|^2 = |\langle\pm x|\mp y\rangle|^2 = 1/2, \\ |\langle\pm y|\pm y\rangle|^2 &= 1, \quad |\langle\pm y|\mp y\rangle|^2 = 0. \end{aligned}$$

Pro danou volbu vektorů $|\pm z\rangle$ a $|\pm x\rangle$, (1.10) a (1.12), nelze těmto podmínkám vyhovět, pokud vektory mají pouze reálné složky. Při použití komplexních čísel však snadno ověříme, že těmto podmínkám vyhovují vektory (pozor na komplexní sdružení, když přecházíme k bra-vektorům, viz (1.5))

$$|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |-y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad (1.13a)$$

$$\langle+y| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad -i), \quad \langle-y| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad i). \quad (1.13b)$$

1.2.2 Operátory

K dalšímu potřebujeme zavést pojem operátoru⁹. Obecný operátor \hat{A} zobrazuje vektor $|\varphi\rangle$ na vektor $|\psi\rangle$,

$$\hat{A}|\varphi\rangle = |\psi\rangle.$$

Hermitovským sdružením této rovnice dostaneme

$$\langle\psi| = \langle\varphi|\hat{A}^+,$$

kde \hat{A}^+ je hermitovsky sdružený operátor k \hat{A} . Máme-li dvojrozměrný prostor (dvojstavový fyzikální systém), bude konkrétně pro $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, $|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ a $\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (a_1^* \quad a_2^*) = (b_1^* \quad b_2^*) \begin{pmatrix} A_{11}^+ & A_{12}^+ \\ A_{21}^+ & A_{22}^+ \end{pmatrix}.$$

Komplexním sdružením první rovnice a porovnáním s druhou rovnicí dostáváme

$$A_{ij}^+ = A_{ji}^*,$$

tedy hermitovsky sdruženou matici \hat{A}^+ k původní matici \hat{A} dostaneme transpozicí a komplexním sdružením.

1.2.3 Časový vývoj v kvantové teorii

Doposud jsme se zabývali tím, jak popisujeme stav, kdy systém vchází/vychází do/z měřicího přístroje. Mezi vstupem a výstupem však proběhne určitý čas. Což nás přivádí na otázku, jak se systém vyvíjí v čase.

Nechť dva fyzikální (experimentálně realizovatelné) stavy systému jsou v čase t_0 popsány stavovými vektory $\langle\varphi(t_0)|$ a $|\psi(t_0)\rangle$. V nějakém pozdějším čase t pak budou popsány stavovými vektory

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad \text{a} \quad \langle\varphi(t)| = \left(\hat{U}(t, t_0)|\varphi(t_0)\rangle\right)^+ = \langle\varphi(t_0)|\hat{U}^+(t, t_0), \quad (1.14)$$

kde $\hat{U}(t, t_0)$ se nazývá *evolučním operátorem*, nebo též *propagátorem*. Pokud je dynamika systému invariantní vůči posunutí v čase, pak pravděpodobnost toho, že systém přejde ze stavu $\langle\varphi(t_0)|$ do stavu $|\psi(t_0)\rangle$ v čase t_0 se musí rovnat pravděpodobnosti toho, že systém přejde ze stavu $\langle\varphi(t)|$ do stavu $|\psi(t)\rangle$ v čase t ,

$$|\langle\varphi(t_0)|\psi(t_0)\rangle|^2 = |\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\varphi(t_0)|\hat{U}^+(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle|^2.$$

tedy operátor \hat{U} musí být *unitární*

$$\hat{U}^+(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1},$$

⁹O tento pojem jsme již „zavádili“ v souvislosti s dyadickým součinem vektorů.

neboli

$$\hat{U}^+(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t). \quad (1.15)$$

Další požadavek, který na evoluční operátor klademe, je platnost rozkladu

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t')\hat{U}(t', t_0),$$

to znamená, že časovým vývojem z t_0 do t dostaneme stejný stav, jako kdybychom neprve šli z t_0 do t' a poté z t' do t . Konečně musí být

$$\hat{U}(t, t) = \mathbf{1}.$$

Tyto podmínky splňuje volba

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp(-i\hat{H}(t - t_0)), \quad (1.16)$$

kde dosazením rovnice (1.16) do rovnice (1.15) dostaneme

$$\hat{H} = \hat{H}^+;$$

\hat{H} je *hermitovský* (též samosdružený) operátor. Pokud je operátor hermitovský, potom pro jeho maticové elementy zřejmě platí

$$H_{ij} = H_{ji}^*.$$

Jeho matematické vlastnosti a fyzikální význam blíže určíme dále. Jeho důležitost vyplývá z tzv. *časové Schrödingerovy rovnice*

$$i\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = i\frac{d}{dt}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{H}\hat{U}(t, t_0)|\psi_0\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad (1.17)$$

kteřou jsme získali derivací rovnice (1.14) podle času. Tato rovnice udává, jak se stav systému vyvíjí v čase.

1.2.4 Stacionární stavy

Pro nalezení fyzikálního významu operátoru \hat{H} je klíčové povšimnout si případů, kdy jeho působení na vektor přejde na násobení číslem, tedy kdy

$$|\psi_n(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_n(t_0)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|\psi_n(t_0)\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)}|\psi_n(t_0)\rangle. \quad (1.18)$$

Takový stav $|\psi_n\rangle$ totiž má výlučnou vlastnost, že byl-li systém v tomto stavu v čase t_0 , bude v něm s jistotou i v čase t :

$$|\langle\psi_n(t_0)|\psi_n(t)\rangle|^2 = 1. \quad (1.19)$$

Takovéto stavy se nazývají *stacionární*. Pro operátor \hat{H} takových stavů $|\psi_n\rangle$ a čísel E_n existuje hned několik, proto k nim přidáváme index n .

Jak vyplývá ze vztahů (1.18) a (1.19), čísla E_n pak označují *vlastnost systému*, která se s časem nemění, tedy vlastnost, která se s časem zachovává. Z klasické mechaniky víme, že veličina zachovávající se v důsledku invariance dynamiky systému

vůči posunutí v čase je energie. Například pro jednorozměrný pohyb v potenciálovém poli máme

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F = -\frac{dV}{dx}.$$

Je-li dynamika invariantní vůči posunutí v čase, tedy potenciál V je na čase nezávislý, $V = V(x)$, pak vynásobením rovnice $\frac{dx}{dt}$ po úpravách dostaneme zákon zachování energie známý již ze základní školy

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V \right) = 0.$$

Čísla E_n proto vykládáme jako možné hodnoty energie systému. Dosazením rovnice (1.18) do Schrödingerovy rovnice (1.17) dostáváme

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (1.20)$$

tedy E_n jsou vlastní čísla a $|\psi_n\rangle$ vlastní vektory operátoru \hat{H} . Operátor \hat{H} se nazývá *Hamiltonův operátor*, nebo též „hamiltonián“. Rovnice (1.20) se nazývá *bezčasová Schrödingerova rovnice*.

Pojďme si na S-G experimentech objasnit, jak to celé funguje. Z toho, co bylo řečeno o výsledku experimentu na obrázku 1.8, vyplývá, že v případě, kdy magnetické pole má směr osy z , stavy $|\pm z\rangle$ jsou stacionárními stavy. Tedy jsou vlastními stavy Hamiltonova operátoru. Z rovnice (1.3), $E = -KBs_z$, je jasné, že měření energie je totéž co měření spinu. Tedy Hamiltonův operátor je až na konstantu totožný s operátorem projekce spinu do osy z . Zachovávající se vlastnost ve stavech $|\pm z\rangle$ je hodnota projekce spinu do osy z , $s_z = \pm 1/2$. Tedy vlastní čísla Hamiltonova operátoru příslušné vlastním vektorům $|\pm z\rangle$ jsou až na konstantu $(-KB)$ rovna $\pm 1/2$. Proto, vynásobíme-li relaci úplnosti

$$|+z\rangle\langle+z| + |-z\rangle\langle-z| = 1$$

operátorem $\hat{H}/(-KB)$, dostaneme, viz (1.10),

$$\begin{aligned} \hat{H}/(-KB) &= \hat{S}_z = \hat{S}_z|+z\rangle\langle+z| + \hat{S}_z|-z\rangle\langle-z| = \\ &= \frac{1}{2}|+z\rangle\langle+z| - \frac{1}{2}|-z\rangle\langle-z| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Rovnice $\hat{S}_z = \frac{1}{2}|+z\rangle\langle+z| - \frac{1}{2}|-z\rangle\langle-z|$ se nazývá *spektrální rozklad operátoru \hat{S}_z* .

Zcela podobnou úvahou pak dospějeme k tomu, že v případě, kdy má magnetické pole směr osy x (y), jsou stacionárními stavy stavy $|\pm x\rangle$ ($|\pm y\rangle$) a zachovávající se vlastnost v těchto stavech je hodnota projekce spinu do osy x (y) $\pm 1/2$. Operátor \hat{H} má v těchto případech tvar, viz (1.12), (1.13),

$$\begin{aligned} \hat{H}/(-KB) &= \hat{S}_x = \hat{S}_x|+x\rangle\langle+x| + \hat{S}_x|-x\rangle\langle-x| = \\ &= \frac{1}{2}|+x\rangle\langle+x| - \frac{1}{2}|-x\rangle\langle-x| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.22)$$

a

$$\begin{aligned} \hat{H}/(-KB) &= \hat{S}_y = \hat{S}_y|+y\rangle\langle+y| + \hat{S}_y|-y\rangle\langle-y| = \\ &= \frac{1}{2}|+y\rangle\langle+y| - \frac{1}{2}|-y\rangle\langle-y| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Spinové operátory zavedené těmito rovnicemi se zapisují ve tvaru

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}. \quad (1.24)$$

Matice $\boldsymbol{\sigma}$ se nazývají *Pauliho spinové matice* a splňují rovnici

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (1.25)$$

o jejíž platnosti je nejlépe se přesvědčit přímým dosazením. Z této rovnice okamžitě vyplývá, že operátory projekce spinu do jednotlivých os spolu navzájem nekomutují,

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{S}_k, \quad (1.26)$$

kde *komutátor* dvou libovolných operátorů je definován

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Tento příklad ilustruje obecnější pravidlo, že veličiny, které nemůžeme současně naměřit, jsou v matematickém aparátu kvantové mechaniky zobrazeny nekomutujícími operátory.

1.2.5 Vlastnosti hermitovských operátorů

Pro hermitovský operátor platí následující tvrzení, která budeme v dalším často používat.

1. *Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla.*

Ať $|n\rangle$ je vlastní vektor hermitovského operátoru \hat{H} příslušný vlastnímu číslu E_n , tedy

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (1.27)$$

Pak můžeme rovnici (1.27) hermitovsky sdružit a zjistíme, že

$$\langle n|\hat{H} = \langle n|E_n^*, \quad (1.28)$$

totiž že $\langle n|$ je také vlastním vektorem operátoru \hat{H} , příslušející tentokrát vlastnímu číslu E_n^* . Ukažme nyní, že se jedná o stejná čísla. Rovnici (1.27) vynásobme zleva bra-vektorem $\langle n|$ a rovnici (1.28) zprava ket-vektorem $|n\rangle$. Odtud

$$E_n = E_n^*, \quad (1.29)$$

tedy $E_n \in \mathbb{R}$. Operátory, které nejsou hermitovské, mohou mít vlastní čísla komplexní i reálná. Příklad nehermitovského operátoru s komplexními vlastními čísly, resp. nehermitovského operátoru s reálnými vlastními čísly je

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{resp.} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & -i\alpha \\ -i\alpha & -1 \end{pmatrix},$$

kde $\alpha \in (0, 1)$.

2. *Vlastní vektory náležející různým vlastním číslům jsou na sebe kolmé.*

Z rovnic (1.27), (1.28) a (1.29) plyne

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= E_n|n\rangle, \\ \langle m|\hat{H} &= E_m\langle m|.\end{aligned}$$

Přenasobíme-li první rovnici bra-vektorem $\langle m|$, druhou ket-vektorem $|n\rangle$ a odečteme-li je od sebe, dostaneme

$$0 = (E_n - E_m)\langle m|n\rangle.$$

Pokud $E_n \neq E_m$, musí být nutně

$$\langle m|n\rangle = 0. \quad (1.30)$$

Poznamenejme bez důkazu, že v případě, kdy nastává degenerace, tj. k jednomu vlastnímu číslu existuje více vlastních vektorů, je možno vždy zvolit vlastní vektory tak, aby byly na sebe kolmé.

3. *Báze vlastních vektorů $|n\rangle$ je v prostoru, kde hermitovský operátor \hat{H} působí, úplná.* Tedy

$$\sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}, \quad (1.31)$$

kde N je počet stupňů volnosti studovaného systému, neboli rozměr abstraktního vektorového prostoru, na kterém operátor \hat{H} působí. Toto tvrzení nebudeme obecně dokazovat, poznamenejme jen, že odhlédneme-li od matematických jemností spojených s přechodem k nekonečně-rozměrným prostorům, je toto tvrzení takřka triviální. Každá matice $N \times N$ má N vlastních vektorů, o kterých jsme v předchozím tvrzení dokázali, že jsou na sebe kolmé. Tedy musí v N -rozměrném prostoru tvořit úplnou bázi.

Přestože hamiltonián je hermitovský operátor, je, jak si ještě mnohokrát ukážeme, velice výhodné pracovat i s nehermitovskými operátory. Uvažujme např. vlastní stavy projekce spinu do osy z ,

$$\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}|\pm\rangle, \quad (1.32)$$

pro které jsme dosud používali značení $|\pm z\rangle$ a které dále budeme značit $|\pm\rangle$. Zavedeme-li tzv. posunovací operátory

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y,$$

zjistíme z rovnic (1.10), (1.22) a (1.23), že pro jejich působení na stavy $|\pm\rangle$ platí

$$\hat{S}_+|+\rangle = 0, \quad \hat{S}_+|-\rangle = |+\rangle, \quad (1.33)$$

$$\hat{S}_-|+\rangle = |-\rangle, \quad \hat{S}_-|-\rangle = 0. \quad (1.34)$$

Tedy operátor \hat{S}_+ „zdvihá“ projekci spinu do osy z a operátor \hat{S}_- ji „snižuje“. Působení nehermitovských operátorů \hat{S}_\pm na vlastní stavy \hat{S}_z je tedy jednodušší než působení hermitovských operátorů \hat{S}_x a \hat{S}_y . Díky operátorové identitě

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} = \frac{1}{2}(\hat{A}_+ \hat{B}_- + \hat{A}_- \hat{B}_+) + \hat{A}_z \hat{B}_z \quad (1.35)$$

platné pro libovolné vektorové operátory $\hat{\mathbf{A}}$ a $\hat{\mathbf{B}}$ jsme schopni se zbavit \hat{A}_x a \hat{A}_y ve prospěch \hat{A}_+ a \hat{A}_- .

1.2.6 Nejednoznačnost v určení stavu

Výše jsme ze znalosti vlastních vektorů a vlastních čísel určili tvar operátoru, viz (1.21), (1.22) a (1.23). Většinou (viz dále) však potřebujeme vyřešit opačnou úlohu: pro daný operátor najít jeho vlastní čísla a vlastní vektory. Vlastní vektory však nejsou rovnicí (1.27) určeny jednoznačně. Např. vlastní vektory a vlastní čísla operátoru \hat{S}_z jsou určeny rovnicí

$$\hat{S}_z |S_z\rangle = S_z |S_z\rangle.$$

S použitím (1.4) a (1.21) dostaneme

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 2S_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (1.36)$$

což je soustava dvou rovnic pro dvě neznámé a a b s parametrem S_z . V závislosti na hodnotě parametru S_z tato soustava buďto nemá řešení, nebo jich má nekonečně mnoho. Pro $S_z = \pm 1/2$ soustava (1.36) určuje jenom jednu z neznámých a a b . Pro $S_z = 1/2$ je $b = 0$ a pro $S_z = -1/2$ je $a = 0$. V prvním případě může být a libovolné, v druhém případě může být b libovolné. Podobně, když napíšeme rovnici pro vlastní čísla a vlastní hodnoty operátoru \hat{S}_x , dostaneme

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 2S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (1.37)$$

Pro $S_x = 1/2$ dostaneme

$$b = a \quad (1.38)$$

a pro $S_x = -1/2$ dostaneme

$$b = -a, \quad (1.39)$$

ale a zůstává zcela neurčeno. Tuto volnost lze odstranit požadavkem normalizace, tj.

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \Rightarrow |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (1.40)$$

Ani tato podmínka však neurčuje vlastní vektor jednoznačně. Přenásobíme-li a a b stejným fázovým faktorem $e^{i\varphi}$, jsou rovnice (1.36) a (1.40) nebo (1.37) a (1.40) stále splněny. Dále, pravděpodobnost přechodu z jednoho stavu do druhého je dána $|\langle \phi | \psi \rangle|^2$. Očividně zůstane nezměněna při záměně $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle e^{i\varphi_1}$, $\langle \phi | \rightarrow \langle \phi | e^{-i\varphi_2}$, přičemž obecně $\varphi_1 \neq \varphi_2$.

Dospíváme k závěru, že vybudovaný formalismus v sobě zahrnuje volnost v určení celkového fázového faktoru stavového vektoru. Relativní fázové faktory jsou určeny jednoznačně vlastním problémem, viz např. (1.38) a (1.39).

V případě, že hamiltonián je reálný (tomu však nemusí vždy být, viz (1.23)), volíme celkovou fázi tak, aby i příslušné vlastní vektory byly reálné.

Úkol 1: Obecná projekce spinu $S = 1/2$



Nechť z prvního S-G přístroje vylétávají pouze elektrony s projekcí spinu $+1/2$. S jakou pravděpodobností naměříme projekci $1/2$ u druhého přístroje, pokud tento je vzhledem k prvnímu pootočen o libovolný prostorový úhel? Rada: Zkonstruujte operátor projekce spinu do libovolného směru $\hat{S}_{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$, kde

$$\mathbf{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta).$$

Použijte přitom rovnici (1.35). Najděte vektor splňující rovnici $\hat{S}_{\mathbf{n}}|+\mathbf{n}\rangle = \frac{1}{2}|+\mathbf{n}\rangle$. Hledaná pravděpodobnost je potom $|\langle+z|+\mathbf{n}\rangle|^2$.

Tato úloha není jen na procvičení! Vektory $|\pm\mathbf{n}\rangle$ se nazývají *helicitní spinory* a hrají klíčovou roli v nejnovějším rozvoji kvantové teorie pole, viz např. [30].

1.2.7 Rabiho metoda měření magnetických momentů

Isidor Rabi dostal nápad dát k druhému magnetu ve vylepšeném S-G přístroji na obr. 1.5 cívku, kterou protéká proměnný proud. Tento proud budí proměnné magnetické pole v rovině xy kolmé ke směru stálého magnetického pole. Při určité frekvenci ω proudu se spin elektronu s velkou pravděpodobností překloupí. Potom třetí magnet místo aby dráhu elektronu „narovnal do původního směru“, tak ji u elektronu s překloupeným spinem dále odchýlí a elektron se ze svazku „ztratí“. Takže při určité frekvenci ω pozorujeme úbytek proudu elektronů vycházejících z vylepšeného S-G přístroje.

Uvedenou metodu lze použít na libovolnou částici se spinem $1/2$, která má nenulový magnetický moment. Tato metoda umožňuje pro danou částici velice přesné určení konstanty K v rovnici (1.3). Podrobnější popis metody lze nalézt např. v [25], [31]. Laskavý čtenář, který zatím pochopil vše, bude s pomocí následujícího návodu schopen k tomuto experimentu vytvořit potřebnou teorii!

1. Do Schrödingerovy rovnice (1.17) dosadíme za Hamiltonův operátor z rovnice (1.3), kde zaměníme vektor \mathbf{S} za vektorový operátor $\hat{\mathbf{S}}$:

$$i \frac{d|\psi\rangle}{dt} = -K \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} |\psi\rangle. \quad (1.41)$$

Vektor magnetické indukce má tvar

$$\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0),$$

kde zřejmě B_0 je intenzita v čase konstantního pole ve směru osy z a B_1 je intenzita proměnného pole.

2. Stavový vektor $|\psi\rangle$ si napíšeme v bázi vlastních stavů projekce spinu do osy z :

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle. \quad (1.42)$$

Po dosazení do rovnice (1.41) vynásobíme tuto rovnici zleva nejprve $\langle +|$ a potom $\langle -|$. Dostaneme soustavu dvou diferenciálních rovnic pro dvě neznámé funkce $c_{\pm}(t)$:

$$i\dot{c}_+ = H_{++}c_+ + H_{+-}c_-, \quad i\dot{c}_- = H_{-+}c_+ + H_{--}c_-, \quad (1.43)$$

kde $H_{\pm\pm}$ a $H_{\pm\mp}$ jsou maticové elementy hamiltoniánu v použité bázi,

$$\begin{aligned} H_{++} &= (-K)\langle +|\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}|+\rangle = (-KB_z)\langle +|\hat{S}_z|+\rangle = -KB_0/2, \\ H_{+-} &= (-K)\langle +|\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}|-\rangle = (-KB_-/2)\langle +|\hat{S}_+|-\rangle = -(KB_1/2)e^{-i\omega t}, \text{ atd;} \end{aligned}$$

tedy

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{++} & H_{+-} \\ H_{-+} & H_{--} \end{pmatrix} = -\frac{K}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{+i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}.$$

3. Předpokládejme, že v čase $t = 0$ byl systém ve stavu $|+\rangle$. To znamená, že rovnice (1.43) řešíme s počáteční podmínkou

$$c_+(0) = 1, \quad c_-(0) = 0. \quad (1.44)$$

Pravděpodobnost, že v libovolném pozdějším čase t najdeme systém ve stavu $|-\rangle$ je dána

$$P_{+\rightarrow-} = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |c_-(t)|^2, \quad (1.45)$$

kde jsme dosadili z (1.42) a využili (1.9).

Tím jsme celou úlohu převedli na matematickou úlohu, kterou byste měli být schopni vyřešit sami. Vše, co je potřeba udělat, je vyřešit rovnice (1.43) s počátečními podmínkami (1.44) a výsledek dosadit do (1.45).

Úkol 2: Rabiho oscilace I.



Spočítejte, jak se pravděpodobnost (1.45) mění s časem a jak závisí na parametrech K, B_0, B_1, ω .