

## Kapitola 3

### Sommerfeld-Wilsonova kvantová mechanika

#### Obsah:

- 3 Sommerfeld-Wilsonova kvantovací podmínka
- 3.2 Harmonický oscilátor
- 3.3 Atom vodíku - nerelativistická teorie
- 3.4 Princip korespondence

#### Literatura:

- [1] FONG „Elementary Quantum Mechanics“

Úspěchy kvantových představ při řešení poměrně široké škály problémů vedly fyziky na počátku tohoto století ke snaze formulovat obecnou kvantovací metodu. Přes výborný souhlas s experimentálními daty byly totiž teorie, s nimiž jsme se zatím seznámili, poměrně izolované ostrůvky v celkovém fyzikálním obrazu světa. Planck uměl kvantovat lineární harmonický oscilátor, Bohr pak pouze problém tělesa pohybujícího se po kružnici v poli centrální síly. Fyzikální svět je však mnohem bohatší. Rádi bychom uměli aplikovat kvantové představy i na další systémy, chybí nám však zatím ale předpis, jak to udělat.

Ačkoliv snaha o vybudování obecné kvantové teorie byla úspěšně završena až v polovině dvacátých let vznikem Schrödingerovy vlnové mechaniky, kterou budeme velmi podrobně studovat v následujících kapitolách, již brzy po první světové válce se podařilo formulovat první, alespoň do jisté míry obecnou kvantovou teorii. Její tvůrci ji rozvíjeli až do počátku třicátých let, i když již bylo jasné, že se jedná o „slepou“ větev vývoje fyzikálního pohledu na svět. Svě místo v historii vývoje kvantové fyziky však tato teorie nesporně má a bude tedy užitečné se s ní alespoň stručně seznámit.

### 3.1 Sommerfeld-Wilsonova kvantovací podmínka

Na základě zobecnění Bohrových a Planckových výsledků našli Sommerfeld a Wilson obecnou metodu, jak kvantovat stupně volnosti, jejichž zobecněná souřadnice resp. jí přidružený impuls jsou periodickými funkcemi času. Přesněji - každému (obecně mnohočásticovému) systému můžeme v rámci klasické mechaniky přiřadit nějakou soustavu zobecněných souřadnic  $q_1, \dots, q_f$  a jim kanonicky sdružených impulsů  $p_1, \dots, p_f$ , kde  $f$  je počet stupňů volnosti této soustavy. Z teoretické mechaniky víte, že vztah mezi  $p_i$  a  $q_i$  je dán prostřednictvím Lagrangeovy funkce  $L$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t). \quad (3-1)$$

Pro zobecněné souřadnice a impulsy (rychlosti) se formulují tzv. pohybové rovnice (Newtonovy, Lagrangeovy, Hamiltonovy), jejichž řešení popisují evoluci systému. Řešení klasických pohybových rovnic se zadanou počáteční podmínkou nazýváme klasickou trajekto-

říí systému. Bude-li některý z párů časových závislostí  $p_i(t)$ ,  $q_i(t)$  periodickou funkcí času (pro impuls i souřadnici je perioda stejná), budeme moci na příslušný stupeň volnosti aplikovat Sommerfeld-Wilsonovu metodu.

Seznámení se základními fakty můžeme tedy zformulovat **Sommerfeld-Wilsonovu kvantovací podmínku:**

**Ze všech klasických evolucí periodického stupně volnosti  $(p_i, q_i)$  systému jsou realizovatelné pouze ty, které splňují**

$$\oint p_i dq_i = n_i h . \quad (3-2)$$

Zde  $h$  je Planckova (neškrtnutá) konstanta a  $n_i$  celé číslo. Bližší určení jím probíhaného oboru je závislé na povaze konkrétního systému. Poněkud vágní symbol  $\oint$  označuje integraci přes celou periodu odpovídající příslušnému stupni volnosti (označme ji  $T_i$ ). Levou stranu (3-2) můžeme pak jednoduše přepsat s pomocí prostého Riemannova integrálu na tvar

$$\oint p_i dq_i = \int_{t_0}^{t_0+T_i} p_i(t) \dot{q}_i(t) dt , \quad (3-3)$$

kde  $t_0$  volíme libovolně (výsledek integrace, je-li integrand periodický s periodou  $T_i$ , na této volbě nezávisí).

Aplikace Sommerfeld-Wilsonovy kvantovací metody v praxi tedy znamená, že musíme

- 1) vyřešit klasické pohybové rovnice studovaného systému a nalézt klasické trajektorie a
- 2) z nich, s pomocí podmínky (3-2), vybrat trajektorie povolené.

Již samotný první krok je technicky velmi obtížný a pro většinu reálných systémů neřešitelný bez vydatné pomoci numerických metod. Všimněte si rovněž, že druhý krok implicitně zahrnuje výpočet zpravidla poměrně složitěho integrálu, kdy se opět často neobejdeme bez numerické matematiky. Principiálně jednoduchá kvantovací metoda, zdá se tedy, bude klást poměrně vysoké nároky na naši matematickou erudici<sup>1</sup>.

V mnoha speciálních případech bude ale možné významné zjednodušení. Za jistých okolností můžeme totiž krok (1) vypustit. To platí například pro konzervativní systémy, tj. takové, v nichž se zachovává celková energie. Ukažme si obecný postup na zjednodušeném modelu jednorozměrného systému, který je popsán jedinou zobecněnou souřadnicí  $q$  a jí odpovídajícím impulsem  $p$ . Celková energie systému (Hamiltonova funkce) je pak dána předpisem

$$E = H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) . \quad (3-4)$$

Z toho vztahu snadno získáme ( $E$  je konstanta pohybu)

<sup>1</sup> Bohužel ještě větší nároky na používané matematické prostředky budou klást přesnější teorie Schrödingera resp. Diracova.

$$p(q) = \pm \sqrt{2m(E - V(q))}, \quad (3-5)$$

kde znaménko + resp. - odpovídá jednotlivým půlperiodám periodického jednorozměrného pohybu. Snadno tedy získáváme alternativní tvar Sommerfeld-Wilsonovy kvantovací podmínky

$$2 \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} p(q) dq = nh, \quad (3-6)$$

kde za  $p(q)$  dosazujeme z (3-5) a integrujeme pouze přes půlperiodu studovaného pohybu, tedy od minimální po maximální hodnotu zobecněné souřadnice. Proto se na levé straně (3-6) objevil multiplikativní faktor 2.

Vyzbrojení obecnou kvantovací metodou, kterou jsme si právě nastínili, se můžeme pokusit o „rozkvantování“ některých konkrétních systémů. Pochopitelně nás zajímají především ty, které jsme studovali v předchozích kapitolách - lineární harmonický oscilátor a atom vodíku.

### 3.2 Lineární harmonický oscilátor

Klasická Hamiltonova funkce lineárního harmonického oscilátoru má tvar

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \quad (3-7)$$

a řešením klasických pohybových rovnic získáváme

$$\begin{aligned} q(t) &= q_0 \cos(\omega t + \phi) \\ p(t) &= -m\omega q_0 \sin(\omega t + \phi), \end{aligned} \quad (3-8)$$

kde hodnoty integračních konstant  $q_0$  a  $\phi$  získáme z konkrétní volby počátečních podmínek. Dosazením (3-8) do vztahu (3-3) máme ( $t_0$  volíme nulové)

$$\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} m q_0^2 \omega^2 \sin^2(\omega t + \phi) dt \equiv m q_0^2 \omega \pi = nh$$

a po snadné úpravě

$$\frac{1}{2} m q_0^2 \omega^2 = n \hbar \omega. \quad (3-9)$$

Uvědomíme-li si však, že levá strana (3-9) je celková energie kmitajícího lineárního harmonického oscilátoru, vidíme, že výsledek plynoucí ze Sommerfeld-Wilsonovy kvantovací podmínky je totožný s Planckovou kvantovou hypotézou.

Ukažme si ještě pro ilustraci, jak se můžeme v případě lineárního harmonického oscilátoru obejít bez detailní znalosti klasických trajektorií systému. S použitím (3-6) totiž získáváme v tomto konkrétním případě

$$2 \int_{-q_0(E)}^{q_0(E)} \sqrt{2m(E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2)} dq = nh,$$

kde jsme zdůraznili závislost klasických bodů obratu kmitavého pohybu na celkové energii oscilátoru E. Substitute

$$x = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} q$$

nám umožní integrál na levé straně snadno vyčíslit a po úpravách získáme pochopitelně opět vztah

$$E = n\hbar\omega.$$

### **3.3 Atom vodíku - nerelativistická teorie**

Z teoretické mechaniky víte, že se problém dvou těles s centrální interakcí redukuje na rovnoměrný přímočarý pohyb jejich těžiště a dvojdimenzionální pohyb fiktivního hmotného bodu (o hmotnosti rovné redukované hmotnosti systému  $\mu$ ) v poli centrální síly. Hamiltonova funkce odpovídající „vnitřnímu“ stupni volnosti je dána v polárních souřadnicích výrazem

$$H(p_r, r, p_\phi, \phi) = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\phi^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (3-10)$$

V případě coulombické interakce mezi elektronem a jádrem atomu vodíku píšeme ovšem

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (3-11)$$

Víte, že kanonický impuls  $p_\phi$  odpovídá momentu hybnosti studovaného dvojčásticového systému vůči jeho těžišti a také že je integrálem pohybu (tj. nemění se s časem).

Pro coulombickou interakci je klasický problém dvou těles analyticky řešitelný. Trajektoriemi fiktivního hmotného bodu jsou

a) elipsy (kružnice mezi ně počítaje), je-li celková energie systému v těžišťové soustavě záporná - vázané stavy, periodický pohyb,

b) paraboly a hyperboly, je-li celková těžišťová energie nulová resp. kladná - neperiodický pohyb.

V případě atomu vodíku (vázaná soustava protonu a elektronu) jsou zajímavé pouze trajektorie typu (a), které můžeme v rámci Sommerfeld-Wilsonovy teorie kvantovat. Dříve než se o to pokusíme, analyzujme jeden velmi speciální model.

### Bohrův model atomu vodíku

Připustíme-li jako klasické „vázané“ trajektorie pouze kružnice, jak to ve svých předpokladech činí Bohr, stává se celý problém jednorozměrným<sup>2</sup> a pro integrál pohybu  $p_\phi$  můžeme psát

$$p_\phi = \mu r v, \quad (3-12)$$

kde  $v$  je oběžná rychlost. Kvantovací podmínku pak zapíšeme ve tvaru

$$\int_0^{2\pi} p_\phi d\phi = n_\phi h, \quad (3-13)$$

kde explicitně vyznačujeme příslušnost kvantového čísla  $k$  úhlovému stupni volnosti. Na základě fyzikálních poměrů uvnitř atomu vodíku požadujeme, aby se  $n_\phi$  probíhalo přirozená čísla. Protože ale  $p_\phi$  je integrálem pohybu (a nezávisí tedy na  $\phi$ ), můžeme (3-13) s pomocí (3-12) přepsat na

$$2\pi m v r = n h. \quad (3-14)$$

Ve vztahu (3-14) ale okamžitě poznáváme první Bohrův postulát.

### Sommerfeldova nerelativistická teorie atomu vodíku

Vraťme se ale k našemu původnímu problému. K aplikaci Sommerfeld-Wilsonovy kvantovací podmínky na problém dvou těles vázaných coulombickou interakcí. Nebudeme činit žádných dalších speciálních předpokladů, pouze se pro jednoduchost omezíme na nerelativistický popis<sup>3</sup>.

Atom vodíku má obecně dva vnitřní stupně volnosti. Sommerfeld-Wilsonovu kvantovací podmínku musíme tedy psát ve tvaru

$$\oint p_\phi d\phi = n_\phi h, \quad n_\phi = 1, 2, \dots \quad (3-15)$$

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad n_r = 0, 1, \dots$$

<sup>2</sup> Zobecněnou souřadnicí je azimutální úhel.

<sup>3</sup> Sommerfeldovi a jeho spolupracovníkům se podařilo vytvořit i relativistický model atomu vodíku, při jehož popisu používali Hamiltonovy funkce plynoucí ze speciální teorie relativity. Na jeho základě se jim kromě jiného podařilo objasnit jemnou strukturu spektrálních čar.

První ze vztahů (3-15) se redukuje po uvážení faktu, že  $p_\phi$  je integrálem pohybu, na jednoduchou rovnost

$$L = 1 \hbar , \quad (3-16)$$

kde jsme označili, jak je to obvyklé, moment hybnosti velkým  $L$  ( $= p_\phi$ ) a jemu příslušející kvantové číslo, obvykle nazývané **vedlejším**, malým  $l$ .

Druhý vztah (3-15) pak přechází na

$$2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2\mu \left\{ E - \frac{L^2}{2\mu r^2} - V(r) \right\}} dr = n_r \hbar . \quad (3-17)$$

Symbole  $r_{\min}$  a  $r_{\max}$  jsme označili vzdálenosti jádra a elektronu v klasických bodech obratu. Pro jednoduchost neuvádíme explicitně jejich závislost na energii  $E$  a momentu hybnosti  $L$ . Po dosažení coulombické závislosti interakční energie na vzdálenosti podle (3-11) můžeme integrál na levé straně (3-17) po jistém úsilí vypočítat. Vezmeme-li navíc v úvahu platnost vztahu (3-16), přejde podmínka (3-17) na poměrně jednoduchý a nám již známý tvar

$$E_n = - \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} , \quad (3-18)$$

kde jsme zavedli tzv. **hlavní kvantové číslo**

$$n = n_r + l, \quad (3-19)$$

které probíhá hodnoty  $n = 1, 2, \dots$ .

Ve vzorci (3-18) ale poznáváme vztah, který jsme obdrželi pro povolené kvantové hodnoty energie atomu vodíku již v rámci Bohrova modelu. V tomto ohledu se obě teorie - Sommerfeldova i Bohrova - shodují. Podstatný rozdíl mezi oběma přístupy však spočívá v tom, že dané kvantové energii  $E_n$  odpovídá v Bohrově modelu jediná kruhová trajektorie, zatímco v modelu Sommerfeldově celá skupina obecně eliptických trajektorií, které se navzájem liší svým tvarem. Ten je jednoznačně dán konkrétními hodnotami obou kvantových čísel. Podrobné výpočty provedeme v rámci příkladů k této kapitole. Skupiny trajektorií odpovídajících stejné hodnotě energie (a tedy i hlavního kvantového čísla) nazýváme **(energetickými) hladinami či slupkami**.<sup>4</sup>

<sup>4</sup> Dříve než pokročíme dále, zdá se být vhodné alespoň formou poznámky diskutovat spolehlivost a přesnost výsledků plynoucích z Sommerfeld-Wilsonovy teorie. Z předcházejících úvah jasně vyplývá, že je obecnější než velmi speciální modely diskutované v prvních dvou kapitolách, které v sobě zahrnuje jako speciální případy. Pro atom vodíku dává ještě něco navíc oproti jednoduché představě Bohrově. Později se k Sommerfeld-Wilsonově kvantové teorii ještě jednou vrátíme a uvidíme, že ani ona není zcela přesná. Bohužel by to vyžadovalo nemalé úsilí, než by se nám podařilo ukázat, jak se o tom zmíníme později, že co do přesnosti (rozumějme tím souhlasu s experimentem) leží někde mezi prvotními teoriemi typu Bohrova modelu atomu vodíku či Planckovy teorie harmonického oscilátoru a nám zatím neznámou přesnou kvantovou teorií, kterou se ukáže být vlnová mechanika Schrödingerova.

### 3.4 Princip korespondence

Na závěr našeho povídání o Sommerfeld-Wilsonově teorii věnujme, jak se již v minulých kapitolách stalo tradicí, nějaký čas analýze otázky, zda tato teorie neposkytuje za jistých okolností výsledky, které se jen nepatrně liší od předpovědí klasické fyziky. Inspirováni závěry, k nimž jsme dospěli při studiu předchozích kapitol a které jsme nazývali principem korespondence, očekáváme i nyní, že v limitě vysokých hodnot kvantových čísel přejdou výsledky plynoucí ze Sommerfeld-Wilsonovy teorie na výsledky klasické. Ilustrujme si oprávněnost podobného očekávání na následujícím jednoduchém příkladu.

Uvažujme periodický pohyb systému s jedním stupněm volnosti. Může se jednat například o vibrace lineárního (obecně anharmonického) oscilátoru. Uvažovaný stupeň volnosti pak odpovídá výchylce z rovnovážné polohy. Na obrázku 3A je nakreslena závislost potenciální energie  $V$  uvažovaného systému na výchylce  $x$ . Označme ve shodě s obrázkem celkovou energii vibračního pohybu  $E$ . Jí odpovídají klasické body obrátu (maximální výchylky z rovnovážné polohy), které jsme označili na obrázku písmeny  $a$  a  $b$ . Kvantovací podmínku pro náš systém pak zapíšeme ve tvaru

$$2 \int_a^b \sqrt{2m\{E - V(x)\}} dx = nh . \quad (3-20)$$

Řešením této rovnice vzhledem k  $E$  pak můžeme teoreticky získat přípustné (kvantové) energetické hladiny systému. Přechody mezi těmito hladinami mohou pak být doprovázeny emisí či absorpcí fotonu, jehož frekvence je pro přechod z  $(n+k)$ -té hladiny na  $n$ -tou dána vztahem

$$\nu_{n+k,n} = \frac{E_{n+k} - E_n}{h} . \quad (3-21)$$

Podle klasických představ, je-li změna energie systému doprovázena emisí či absorpcí elektromagnetického záření, odpovídá frekvence tohoto záření frekvenci budících vibrací a vyšším harmonickým. Pokusme se tuto frekvenci určit. Označíme-li integrál na levé straně (3-20) zkratkou  $I(E)$ , zjistíme snadno derivací podle parametru a podle věty o derivaci inverzní funkce, že platí

$$\frac{dI(E)}{dE} = T \text{ resp. } \frac{dE(I)}{dI} = \nu , \quad (3-22)$$

kde jsme označili písmenem  $T$  periodu a  $\nu$  frekvenci vibrací studovaného systému.

Ovšem pro vysoká kvantová čísla, tedy v předpokládané klasické oblasti, je možno s dostatečnou přesností psát

$$\nu = \frac{dE}{dI} \approx \frac{E_{n+1} - E_n}{I_{n+1} - I_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{\{(n+1) - n\}h} = \nu_{n+1,n} . \quad (3-23)$$

Analogicky bychom mohli získat

$$\nu_{n+k,n} = k \nu . \quad (3-23')$$

Spojením začátku a konce řetězce vztahů (3-23) a ze vztahu (3-23') ovšem dostáváme klasické tvrzení o souvislosti mezi frekvencemi vibrační systému a jím vyzařovaného elektromagnetického záření. Vztah (3-23) je tedy dalším vyjádřením, tentokrát obecnějším než dříve, známého **principu korespondence**.



**Příklady**

**1)** Odvoďte vztah (3-9) oběma způsoby naznačenými v oddíle 3.2.

**2)** Odvoďte vztah (3-18).

**3)** Určete přípustné hodnoty malých a velkých poloos trajektorií elektronů v Sommerfeldově nerelativistickém modelu atomu vodíku.

**4)** Nalezněte v rámci Sommerfeld-Wilsonovy teorie přípustné kvantové energetické hladiny bodové částice vázané na přímku pohybující se v potenciálovém poli  $V(x)$

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x \in (-\infty, -a) \cup (a, +\infty) \\ V(x) &= -V_0 & x \in (-a, a) \end{aligned} ,$$

kde  $a$  i  $V_0$  jsou kladná čísla.

**5)** Nalezněte v rámci Sommerfeld-Wilsonovy teorie přípustné kvantové energetické hladiny bodové částice vázané na přímku pohybující se v potenciálovém poli  $V(x)$

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & x \in (-\infty, -a) \cup (a, +\infty) \\ V(x) &= kx + q & x \in (-a, 0) \\ V(x) &= k'x + q' & x \in (0, a) \end{aligned} ,$$

kde  $a$  je kladné číslo a funkce  $V(x)$  je spojitá.

**6)** Nalezněte v rámci Sommerfeld-Wilsonovy teorie přípustné kvantové energetické hladiny trojdimenzionálního harmonického oscilátoru

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2 .$$

**Obrázky****Obrázek 3A** *Jednorozměrný anharmonický oscilátor*