

## Kapitola 4

### Vlnové vlastnosti částic

#### Obsah:

- 4.1 De Broglieho vlnová hypotéza
- 4.2 Difrakce částic - Davisson-Germerův pokus
- 4.3 Vlnová funkce
- 4.4 Bornova statistická interpretace vlnové funkce
- 4.5 Heisenbergovy relace neurčitosti
- 4.6 Bohrův model atomu vodíku a vlnová hypotéza

#### Literatura:

- [1] BEISER A. „Úvod do moderní fyziky“
- [2] HAJKO V. a kol. „Fyzika v experimentoch“
- [3] FONG „Elementary Quantum Mechanics“

V letech 1923-24 se zrodila zajímavá myšlenka, která se posléze stala základem velmi úspěšné teorie popisující mikrosvět - Schrödingerovy vlnové mechaniky. Autorem byl mladý francouzský fyzik Louis de Broglie, který právě sepisoval svou doktorskou disertaci. Inspirován Einsteinovou ideou, že elektromagnetické vlnění má za jistých okolností částicové vlastnosti, usoudil na základě víceméně filozofických argumentů o symetrii světa, že tomu musí být i naopak, tj. částice se musí občas chovat jako vlny. Přisoudil tedy fyzikálním objektům tzv. vlnově-částicovou dualitu. Každý objekt je vlnové i částicové povahy současně. Jen experimentální podmínky jsou příčinou toho, že se v konkrétních situacích více či méně projevuje pouze jeden z těchto charakteristických rysů. Tak například zkoumání optických jevů je uskutečňováno za speciálních podmínek, kdy se prostě elektromagnetické pole chová jako vlnění. Stačí však podmínky změnit (viz například fotoelektrický jev) a vlny se „stávají“ částicemi. Není ovšem smysluplné říkat, že elektromagnetické pole je souborem částic (fotonů) resp. vln. Pojmy vlna a částice si fyzikové zavedli pouze jako vhodné modely k popisu konkrétních projevů tohoto pole při jeho interakci s našimi měřicími přístroji.

Obdobná situace nastává podle de Broglieho i v případě klasických částic, například elektronů. Elektrony se v drtivé většině experimentů chovaly a chovají jako bodové částice (klasická mechanika pro ně používá název hmotný bod). Podle de Broglieho by však mělo být možné navrhnout experiment, v němž se projeví i jejich vlnová podstata. Pro učence odchované klasickou fyzikou byla podobná představa velmi absurdní. Proto by se snad de Broglieho myšlenky nedočkaly takové pozornosti fyzikální obce, kdyby nebyly vzápětí potvrzeny dostatečně průkazným experimentem. Již z kursu optiky víte, že vlnovou povahu přisuzovala klasická fyzika všemu, co vykazovalo difrakci na vhodně zvolené periodické struktuře, např. soustavě štěrbin (viz kupříkladu fundamentální role Youngova pokusu v souboji Newtonovy a Hyugensovy teorie světla). Je tedy jasné, že i nejzavilejší příznivce klasického obrazu světa musí přesvědčit difrakční experiment s elektrony. Ten provedli roku 1927 nezávisle na sobě Davisson a Germer v USA a Thomson v Anglii.

V této kapitole se budeme věnovat vlnovému popisu částic velmi podrobně. Připravíme si tak půdu pro formulování ústřední rovnice vlnové mechaniky - Schrödingerovy rovnice - v kapitole příští.

## 4.1 De Broglieho vlnová hypotéza

[1] str. 91-100

[3] str. 27-30

### De Broglieho vztahy

Albert Einstein přisoudil kvantům elektromagnetického pole ve vakuu částicové vlastnosti. Inspirován Planckem přiřadil vlnovým parametrům - frekvenci a vlnové délce - odpovídající parametry částicové - energii a hybnost - a to následujícím předpisem

$$E = \hbar\omega \quad \text{a} \quad p = \frac{h}{\lambda} . \quad (4-1)$$

První z uvedených vztahů vyplývá přímo z Planckovy kvantové hypotézy a druhý ze vztahu mezi hybností a energií nesenými elektromagnetickým polem

$$E = p c , \quad (4-2)$$

který je důsledkem Maxwellovy teorie, a disperzní relace<sup>1</sup>

$$\omega = c / (2 \pi \lambda) . \quad (4-3)$$

Písmenem  $c$  označujeme, jak je to obvyklé, rychlost světla ve vakuu.

Inspirován Einsteinovou představou vlnově-korpuskulárních fotonů a veden touto po symetrii světa usoudil francouzský fyzik de Broglie, že podobné relace budou platit i pro klasické částice. Částicovým parametrům - energii a hybnosti - přiřadil parametry vlnové podle vztahů (4-1), které však budeme nyní číst zprava doleva, tj.

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{a} \quad \lambda = \frac{h}{p} . \quad (4-1')$$

K těmto transformačním vztahům je zapotřebí dále přiřadit obdobu disperzní relace (4-3). Protože vycházel z korpuskulárních vlastností, zapsal tuto relaci de Broglie jako vztah mezi energií a hybností částice. Okouzlen speciální teorií relativity snažil se de Broglie vybudovat svou teorii jako relativisticky kovariantní. Proto jako chybějící disperzní relaci použil relativistický vzorec

$$E = c\sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} . \quad (4-4)$$

Zde  $m_0$  je tzv. klidová hmotnost částice. Všimněte si, že do energie určující úhlovou frekvenci částice započítává de Broglie nejen energii kinetickou, ale i klidovou. V nerelativistickém přiblížení ( $p \ll m_0 c$ ) to znamená, že vztah (4-4) přechází na

$$E = m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} . \quad (4-5)$$

<sup>1</sup> Proved'te podrobně všechny výpočty.

Druhý ze vztahů (4-1') můžeme alternativně přepsat s pomocí vlnového vektoru<sup>2</sup>

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} . \quad (4-1'')$$

Tento jen formálně pozměněný zápis de Broglieho relací je velmi vhodný pro relativistický popis studované částice, kdy se ukazuje, že vztahy (4-1') a (4-1'') je možno elegantně zapsat jako lineární závislost mezi čtyřvektorem energie-hybnosti a vlnovým čtyřvektorem, kde multiplikatívni konstantou je konstanta Planckova.

### *Fázová rychlost de Broglieho vln*

Podle definice pod fázovou rychlostí vlnění  $v_f$  rozumíme součin jeho vlnové délky a frekvence

$$v_f = \lambda \nu . \quad (4-6)$$

Použitím vztahů (4-1') a dále též vztahů  $\omega=2\pi\nu$ ,  $E=mc^2$  a  $p=mv$ , kde  $v$  je rychlost částice odpovídající hybnosti  $p$ , snadno pak (4-6) přepíšeme na

$$v_f = \frac{c^2}{v} . \quad (4-7)$$

Protože ale podle speciální teorie relativity je pro všechna tělesa o nenulové klidové hmotnosti  $v < c$ , musí nutně platit  $v_f > c$ . To se ale zdá být v příkrém rozporu se závěry speciální teorie relativity, z níž de Broglie vycházel. Podle ní je totiž rychlost světla ve vakuu pro materiální objekty maximální možná. Získaný rozpor je však pouze zdánlivý. Fázová rychlost  $v_f$  odpovídá totiž rychlosti šíření vlnoploch (ploch konstantní fáze) rovinných monochromatických de Broglieho vln. Jak však ukázala další bádání, tyto vlny nejsou fyzikálně realizovatelné. Ukázalo se totiž, že volnou částici nelze připravit ve stavu s přesně definovanou energií a hybností. Hmotné body, u nichž klasická mechanika předpokládá přesně definovanou energii a hybnost, jsou pouhou modelovou aproximací. V rámci vlnové mechaniky je ve skutečnosti musíme reprezentovat vlnovými balíky složenými z velkého množství monochromatických složek s velmi blízkými frekvencemi, jejichž rozdíly není prostě možno v klasickém experimentu postihnout. Situace je podobná té, s níž jste se setkali v optice při studiu "téměř monochromatických pulsů". Jistě si vzpomenete, že rychlost šíření těchto pulsů odpovídala fázové rychlosti dominantní monochromatické složky pouze v tzv. nedisperzním prostředí. V případě prostředí disperzního se tyto pulsy přemísťovaly tzv. **grupovou rychlostí**. Proto bychom se měli i v případě de Broglieho vln soustředit na jejich grupovou rychlost. To že jejich fázová rychlost porušuje speciální teorii relativity, není vůbec podstatné. Jak jsme si právě řekli, jedná se o rychlost fyzikálně nerealizovatelného objektu.

<sup>2</sup> Všimněte si, že podle de Broglieho je energii přiřazena jednoznačně frekvence a vektoru hybnosti vlnový vektor. Částici se zadanou energií a impulsem popisuje tedy de Broglie jako rovinnou monochromatickou vlnu. Všimněte si rovněž dále, že použitá disperzní relace (4-4) omezuje náš výklad pouze na částice volné, to jest takové, které jsou dostatečně vzdálené od všech ostatních těles ve vesmíru. Jejich interakci se zbytkem vesmíru můžeme tedy zanedbat.

## 4.2 Difrakce částic - Davisson-Germerův pokus

[1] str. 100-104

[2] str. 70-74

Každá fyzikální teorie zůstává pouhou hypotézou, nejsou-li její závěry v dostatečné míře podpořeny experimenty<sup>3</sup>. Proto se v tuto chvíli, dříve než se pustíme do hlubší analýzy de Broglieho myšlenek, věnujme jednomu z klíčových experimentů, v němž bylo s pomocí difrakce elektronů na krystalové mřížce prokázáno, že se klasické částice opravdu mohou za jistých okolností chovat tak, jak bychom to očekávali u vlnění.

Protože je samotný experiment velmi zdařile popsán v citované literatuře, omezíme se v následujících řádcích pouze na stručné doplňující poznámky. V nich se pokusíme osvětlit, proč nepozorujeme za běžných podmínek vlnové projevy makroskopických těles.

Z optiky víte, že vlnové vlastnosti se nejlépe prokazují v ohybových experimentech. Vzpomeňte si na fundamentální význam Youngova pokusu při rozhodování mezi Newtonovou emanační a Huygensovou undulační teorií světla. Proto provedení difrakčního experimentu s klasickými částicemi bylo jistě významnou podporou de Broglieho teorie. Víte ale, že pozorovatelnou difrakci získáme pouze tehdy, je-li vlnová délka použitého vlnění alespoň řádově srovnatelná s charakteristickým rozměrem překážky (např. s mřížkovou konstantou). Je tedy nezbytné vybrat vhodný typ částic i vhodný typ difrakční mřížky, abychom získali pozitivní výsledek plánovaného experimentu. Uveďme si pro názornost de Broglieovy vlnové délky některých těles. Shrnuje je následující tabulka:

rychlost [m/s]	hmotnost [kg]	pozn.	de Broglieho vlnová délka [m]
2	70	4	$4,7 \cdot 10^{-36}$
1	$10^{-3}$	5	$6,6 \cdot 10^{-31}$
290	$5,0 \cdot 10^{-26}$	6	$4,6 \cdot 10^{-11}$
502	$5,0 \cdot 10^{-26}$	7	$2,6 \cdot 10^{-11}$
$1,8 \cdot 10^6$	$10^{-30}$	8	$3,7 \cdot 10^{-10}$
$4,3 \cdot 10^4$	$1,7 \cdot 10^{-27}$	9	$9,0 \cdot 10^{-12}$

Všimněte si, že vlnové délky většiny uvedených objektů jsou natolik malé, že se za běžných podmínek jejich vlnové vlastnosti (ohybové efekty) vůbec neprojeví. Tento závěr ale není vůbec překvapující, neboť právě tento fakt zaručuje, že se klasické částice v běžných podmínkách chovají „čistě částicově“. Je tedy možno používat Newtonovu částicovou mechaniku. De Broglieho vlnové délky běžných klasických částic jsou totiž za běžných podmínek natolik malé, že je dostatečně přesné přiblížení "geometrické optiky".

<sup>3</sup> Zejména ze strany matematiků je fyzika pro své nerigorózní postupy a často spekulativní povahu mnohdy ostře napadána. Na rozdíl od matematiky mají však fyzikové k dispozici mocný korektor eventuálních chyb, kterých se mohou ve svých teoriích dopustit. Tímto korektorem je experiment. Proto si fyzikové experimentu velmi cení a obrací se k němu jako k poslední instanci poskytující definitivní rozhodnutí.

<sup>4</sup> běžící člověk

<sup>5</sup> prachové zrno

<sup>6</sup> molekula dusíku pohybující se střední kvadratickou rychlostí v plynu při teplotě 100 K

<sup>7</sup> molekula dusíku pohybující se střední kvadratickou rychlostí v plynu při teplotě 300 K

<sup>8</sup> elektron urychlený potenciálovým rozdílem 10 V

<sup>9</sup> proton urychlený potenciálovým rozdílem 10 V

Na druhé straně to ale není vůbec povzbuzující pro naše snažení o realizaci experimentu, v němž by se vlnové vlastnosti částic prostřednictvím difrakce projevíly. Nadějnými kandidáty by snad mohly být pouze elektrony, jejichž de Broglieho vlnová délka je v důsledku extrémně nízké hmotnosti poměrně velká. V uvedeném případě totiž tato vlnová délka odpovídá zhruba vzdálenosti atomových rovin v krystalech, s nimiž již na počátku století měli fyzikové dobré zkušenosti při studiu krátkovlnného Röntgenova záření. Nabízí se tedy možnost zopakovat experimenty studující ohyb Röntgenova záření na krystalických mřížích s elektrony. Tato idea se také stala základem experimentu Davissona a Germera, o němž si již však více přečtete v uvedené literatuře.

### 4.3 Vlnová funkce

#### Vlnová funkce

Předchozí odstavce nás jistě přesvědčily, že za jistých podmínek je vlnový popis klasických částic (např. elektronů) oprávněný. Je tedy nejvyšší čas zamyslet se nad volbou matematického aparátu, který by naše představy formalizoval. Protože máme jisté zkušenosti s elektromagnetickým vlněním, nechejme se inspirovat Maxwellovou teorií elektromagnetického pole.

Elektromagnetické pole popisujeme šesti funkcemi, z nichž každá závisí na třech prostorových a jedné časové proměnné. Jedná se o složky elektrické a magnetické intenzity. Konkrétní závislost těchto funkcí na zmíněných proměnných určují tzv. Maxwellovy rovnice. Z nich můžeme pro zadané rozložení nábojů a proudů v prostoru a zadanou okrajovou a počáteční podmínku získat časový vývoj obou intenzit v každém bodě prostoru. Proto hovoříme o Maxwellových rovnicích jako o evolučních (pohybových) rovnicích pro elektromagnetické pole.

Při popisu de Broglieho vln musíme zřejmě použít analogické prostředky. Omezíme-li se v dalším na vlnový popis jediné bodové částice, musíme jí přiřadit

- a) nějakou soustavu funkcí polohového vektoru a času  $\psi_1(\mathbf{r},t), \dots, \psi_n(\mathbf{r},t)$  a
- b) formulovat pro ni vhodné pohybové rovnice.

Diskusi druhé části tohoto problému - formulaci pohybových rovnic - ponecháme zatím stranou. Jedná se totiž o úkol natolik zajímavý a obtížný, že se vyplatí věnovat mu patřičnou pozornost, a tedy i samostatnou kapitulu. V následujících řádcích se soustředíme na bod (a).

Funkce v něm zavedené nazýváme **vlnovými funkcemi**. Připomeňme ještě jednou, že se omezujeme na vlnový popis jediné bodové částice. Proto jsou tyto funkce závislé na jediném polohovém vektoru. Zahrnutí více částic do našeho popisu znamená rozšíření seznamu nezávislých proměnných o další prostorové souřadnice. Dále se ukazuje být výhodným chápat funkce  $\psi$  jako funkce **komplexní**, tedy

$$\psi_k : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} .$$

Pochopitelně přechodem k reálným a imaginárním částem je možno vždy přejít k reálným vlnovým funkcím<sup>10</sup>. Jejich použití však celý aparát technicky komplikuje.

<sup>10</sup> Ovšem za současného zdvojnásobení jejich počtu.

Co se nezbytného počtu komponent  $\psi_k$  týče, vše závisí na úrovni popisu studovaného systému. V následujícím vystačíme s **jedinou (komplexní) vlnovou funkcí**. Proto budeme nepodstatný index vynechávat. V pokročilejších učebnicích se ukazuje, že tato volba je ekvivalentní omezení popisu na částice s nulovým spinem<sup>11</sup>. Pokud bychom spin částice explicitně uvažovali, museli bychom nutně počet komponent vlnové funkce zvětšit.

### Monochromatické vlny

Při formulaci de Broglieho hypotézy hrály dominantní roli rovinné monochromatické vlny. Jak jsme si již uvedli, nejsou sice fyzikálně realizovatelné, ale jako matematický model budou velmi užitečné. Proto stojí za to popsat je podrobněji. S pomocí vlnové funkce je můžeme zapsat ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)\}, \quad (4-8)$$

kde  $i$  je imaginární jednotka,  $A$  komplexní číslo (komplexní amplituda) a  $\mathbf{k}$  resp.  $\omega$  vlnový vektor resp. úhlová frekvence, které souvisejí s hybností a energií studované částice podle (4-1'') a (4-1'). Je tedy možno psát

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)\right\}. \quad (4-8')$$

Připomeňme ještě jednou, že rovinné monochromatické vlny odpovídají volné částici s přesně definovanou hybností, a tedy i energií. Fyzikálně není takový stav volné částice realizovatelný.

To, co není přípustné pro volné částice, je však možno za jistých okolností realizovat v případě částice nacházející se ve vnějším poli. Tehdy je totiž obvykle možno realizovat stavy částice s přesně definovanou energií<sup>12</sup>. Podle de Broglieovy teorie přiřazujeme v tomto případě studované částici monochromatickou vlnu, tentokrát však již nikoliv rovinnou. Monochromaticnost vlny se projeví v separaci závislosti vlnové funkce na prostorových proměnných a času. Obecně pak můžeme pro monochromatickou vlnu psát<sup>13</sup>

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \quad (4-9)$$

Uvědomme si, že monochromatická vlna typu (4-9) odpovídá částici s přesně definovanou a během časového vývoje zachovávající se energií. Z klasické mechaniky víte, že energie hmotného bodu je integrálem pohybu (tj. zachovává se) pouze v časově neproměnných

<sup>11</sup> Nebo také zanedbání faktu, že většina částic nějaký spin má.

<sup>12</sup> K tomuto problému se ještě mnohokrát vrátíme při studiu řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro konkrétní fyzikální systémy.

<sup>13</sup> Ve vztahu (4-8') i (4-9) bychom měli v analogii s optikou uvažovat ještě další člen, který by se od uvedených lišil pouze znaménkem u  $i\omega t$  resp.  $\frac{i}{\hbar}Et$ . V dodatku I k této kapitole však ukážeme, že tyto členy není možno v rámci nerelativistické kvantové fyziky uvažovat.

polích <sup>14</sup>. Z toho můžeme snadno usoudit, že monochromatická vlna (4-9) odpovídá speciálnímu stavu bodové částice v časově neproměnném poli vnějších sil <sup>15</sup>.

### Vlnové balíky

Vraťme se nyní ale k otázce, jak v rámci de Broglieho vlnové mechaniky reprezentovat klasické volné částice s přesně definovanou energií a hybností, když se ukázalo, že samotné rovinné monochromatické vlny nejsou k tomuto účelu vhodné. Při řešení této otázky se necháme opět inspirovat našimi znalostmi optiky.

Víme, že realizace stavu volné částice s přesně definovanou energií a impulsem je ve vlnové mechanice nemožná. Ovšem díky přítomnosti experimentálních chyb ani v mechanice klasické nemá smysl hovořit o přesně definovaných hodnotách. Ty jsou v konkrétních měřeních vždy „rozmazány“ náhodnými chybami. „Klasická víra“ nám ovšem říká, že tyto chyby můžeme vždy minimalizovat na nezbytnou úroveň volbou vhodných měřících přístrojů. Teoreticky pak při velké pečlivosti experimentátorů v ideálním experimentu zcela anulovat <sup>16</sup>. Reálné experimenty jsou však tomuto ideálu velmi vzdáleny, a tak vlnově mechanické „rozmazání“ energie a hybnosti (i dalších fyzikálních veličin) v nich zcela zaniká v náhodných experimentálních chybách. Tím se ovšem zcela přirozeně nabízí řešení otázky o reprezentaci klasické bodové částice ve vlnově-mechanickém modelu. Volnou klasickou částici s „přesně“ definovanou energií i hybností můžeme realizovat „směsí“ rovinných monochromatických vln, jejichž frekvence a vlnové vektory se navzájem liší tak málo, že tyto rozdíly nejsou postižitelné „klasickým“ experimentem. S podobnou situací jste se již setkali v optice, když jste diskutovali šíření „téměř monochromatických“ elektromagnetických pulsů v disperzním prostředí. Ve vlnové mechanice budeme tyto pulsy nazývat **vlnovými balíky**.

Pod vlnovým balíkem budeme tedy rozumět vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{R^3} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\} d^3\mathbf{k} \quad (4-10)$$

kde  $\mathbf{k}$  a  $\omega$  <sup>18</sup> jsou dány (4-1') a (4-1'') a funkce  $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$  je nenulová jen velmi blízko jisté hodnoty vlnového vektoru  $\mathbf{k}_0$  (lokalizace hybnosti částice). Dále požadujeme, aby výsledek integrace v (4-10) dával funkci  $\psi(\mathbf{r}, t)$  v každém čase silně lokalizovanou v prostoru („bodovost“ částice).

Funkci  $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$  získáme pak podle věty o Fourierově transformaci z počáteční podmínky (zadávající stav studované částice v čase  $t=0$ )

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{R^3} \psi(\mathbf{r}, t=0) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (4-11)$$

<sup>14</sup> Přítomnost vnějšího pole je nezbytná.

<sup>15</sup> V kvantové mechanice nehrají samotné síly tak významnou roli jako v mechanice klasické. Jejich dynamickou roli přejímá potenciální energie. Z ní ovšem aplikací gradientu příslušné síly snadno získáme. O potenciální energii částice ve vnějším poli budeme často zkráceně hovořit jako o vnějším potenciálu. Vlny (4-9) popisují tedy speciální stav bodové částice v poli časově neproměnného potenciálu.

<sup>16</sup> Vlnová mechanika naopak úplnou eliminací „rozmazání“ přesných hodnot nedovoluje.

<sup>17</sup> Zde jsou užitečné rovinné monochromatické vlny. Samy o sobě nefyzikální umožňují vytvoření fyzikálně velmi dobře realizovatelného stavu.

<sup>18</sup> V důsledku disperzního vztahu (4-4) resp. (4-5) je ovšem  $\omega$  funkcí  $\mathbf{k}$ .

V dalším budeme  $\psi(\mathbf{r}, t=0)$  označovat jako  $\psi_0(\mathbf{r})$ .

*Propagace volného vlnového balíku, grupová rychlost*

Předpoklad o lokalizaci hybnosti částice reprezentované vlnovým balíkem nám umožňuje omezit se v integrálu (4-10) pouze na nejbližší okolí bodu  $\mathbf{k}_0$ . Argument komplexní exponenciály můžeme proto přiblížit Taylorovým rozvojem. V dalším se omezíme na rozvoj prvního řádu :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t \approx \{\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega(\mathbf{k}_0)t\} + \{\mathbf{r} - \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0)t\} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0), \quad (4-12)$$

kde  $\nabla_{\mathbf{k}}$  označuje gradient (vektor parciálních derivací) podle složek vlnového vektoru. Po jednoduchých úpravách pak můžeme psát

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)\} \int_{R^3} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \exp\{i[\mathbf{r} - \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0)t] \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\} d^3\mathbf{k} \quad (4-13)$$

a uvědomíme-li si, že

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \int_{R^3} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} d^3\mathbf{k}, \quad (4-10')$$

kde jsme  $\psi_0$  zavedli již v (4-11), máme dále

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[-i(\omega_0 - \mathbf{k}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0))t] \psi_0(\mathbf{r} - \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0)t). \quad (4-14)$$

V přiblížení prvního řádu se tedy volný vlnový balík pohybuje tak, že se až na nepodstatný fázový faktor <sup>19</sup> „přemísťuje jeho počáteční podmínka“ rovnoměrně přímočaře rychlostí  $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0)$ . Rychlost  $\mathbf{v}_g$  se nazývá **rychlostí grupovou**. Pro její velikost platí

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left( c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} \right) = \frac{pc^2}{E} = \frac{p}{m} = v. \quad (4-15)$$

V uvedeném výrazu jsme použili relativistický vztah mezi energií a hybností částice (4-4) a známý Einsteinův vztah mezi hmotností a energií  $E = mc^2$ . Parametr  $m_0$  má význam klidové hmotnosti částice.

Ze vztahu (4-15) vidíme okamžitě, že rychlost rovnoměrného přímočarého pohybu volné klasické částice (1. Newtonův zákon) je totožná s grupovou rychlostí vlnového balíku, kterým tuto částici reprezentujeme v de Broglieově vlnové mechanice. To ovšem naznačuje, že vlnový balík i klasickou částici můžeme ztotožnit.

Ještě jednou si však musíme uvědomit, že vztah (4-14), který popisuje propagaci silně lokalizovaného vlnového balíku prostorem, byl získán v rámci přiblížení prvního řádu. Proto je také v naprostém souhlasu s předpovědí klasické mechaniky. Teprve přiblížení vyššího řádu (započtení dalších členů Taylorova rozvoje argumentu komplexní

<sup>19</sup> Proč nepodstatný, to uvidíme zanedlouho.



exponenciály v (4-10)) postihne i neklasické efekty, které pohyb volné částice v rámci vlnové mechaniky doprovázejí. O nich však blíže až v kapitole věnované aplikacím Schrödingerovy rovnice.

#### **4.4 Bornova statistická interpretace vlnové funkce**

[1] str. 156-158

[3] str. 48-52

##### **Bornovy postuláty**

Poté, co jsme si podrobně popsali de Broglieho vlny a jejich použití při popisu klasických částic, zbývá dořešit ještě jednu velmi důležitou otázku. Jaký fyzikální význam má vlnová funkce?

Inspirovat se opět necháme tím, co již známe. Teorii elektromagnetického pole. Pole elektrické resp. magnetické intenzity hrají v elektrodynamice podobnou roli jako vlnová funkce v mechanice vlnové. Na rozdíl od ní však mají přímou fyzikální interpretaci prostřednictvím silového působení na pohybující se náboje. Tak například intenzitu elektrického pole určíme tak, že změříme sílu, kterou studované pole působí v daném místě a čase na nepohybující se nabitou bodovou částici, a dělíme ji hodnotou náboje této testovací částice. S pomocí Lorentzova vztahu pro sílu, kterou působí elektromagnetické pole na pohybující se nabitou částici, pak snadno určíme i vektor magnetické intenzity. Podobnou fyzikálně průhlednou interpretaci bychom chtěli dát i výše zavedeným vlnovým funkcím popisujícím de Broglieho vlny. A současně i popsat metodu, která by je alespoň v principu umožnila měřit.

Soustředme se však nejdříve na problém, zda jsou klasické částice opravdu vlnami, jak je chápali zakladatelé vlnové mechaniky. Podstatu tohoto problému si ilustrujme na jednoduchém myšlenkovém experimentu. Z optiky víte, že se elektromagnetická vlna dopadající na rozhraní dvou prostředí se částečně láme do druhého prostředí a částečně odráží do prostředí původního. Podobné chování proto budeme očekávat i od vln de Broglieových. Tedy, necháme-li dopadat elektron na rozhraní dvou prostředí (například plochu, na které se mění silové působení na něj nespojitě - skokem), měl by se částečně odrazit zpět do prvního prostředí a částečně pronikat do prostředí druhého. Jinými slovy - dva pozorovatelé umístění před a za rozhraním by měli po jistém čase zjistit přítomnost elektronu v obou částech prostoru. Buď by se tedy elektron při průchodu rozhraním dělil, což ovšem nebylo pozorováno, nebo by v důsledku interakce s rozhraním vznikl nový elektron. To by ale kromě jiného znamenalo, že se odněkud musela „načerpat“ alespoň klidová energie nově vzniknuvšího elektronu tak, aby platil zákon zachování energie. V každém případě by však byl porušen zákon zachování elektrického náboje. A v tom je potíž. Tento zákon je totiž velmi přesně ověřen na všech úrovních fyzikálního popisu světa. Navíc přesné experimenty odhalily, že k žádnému vzniku nové částice (elektronu) při interakci s rozhraním nedochází<sup>20</sup>. Právě naopak se zjistilo, že před i po myšlené interakci

<sup>20</sup> Toto tvrzení není ale zcela přesné. Experimenty ve fyzice vysokých energií i kvantová teorie pole ukazují, že za jistých okolností může v polích s vysokými hodnotami gradientu potenciálu docházet ke vzniku nových částic. Podstatné je ale to, že k podobným procesům je zapotřebí velmi vysokých energií, které nejsou za obvyklých podmínek k dispozici. Navíc námi budovaná teorie je jednočásticová. Z hlubší analýzy by vyplynulo, že počet částic v uvažovaném systému se v jejím rámci musí zachovávat. To je ovšem v rozporu se závěry našeho myšlenkového experimentu.

elektronu s rozhraním máme stále co dělat stále jen s jedinou částicí, kterou nalezneme buď v prvním, nebo ve druhém prostředí. Nalezne-li tedy náš elektron jeden z pozorovatelů, ten, který se nachází na jedné straně rozhraní, je vyloučeno, aby jeho přítomnost zaznamenal i pozorovatel druhý, to jest pozorovatel na druhé straně rozhraní, a naopak.

Zdá se tedy, že přece jen rovnítka mezi pojmy de Broglieho vlna a částice není zcela na místě. Odstranění rozporů uvedeného myšlenkového pokusu je obsahem mnoha hypotéz a teorií<sup>21</sup>. Všeobecně přijímanou je však jediná, jejíž správnost byla a je neustále potvrzována souhlasem teoretických závěrů a výsledků experimentů. Jejím autorem je německý fyzik Max Born, který postuloval, že vlnová funkce studované částice souvisí s pravděpodobností, že tuto částici v daném čase nalezneme na určitém místě a s určitou hybností. Přesněji je možno jeho hypotézu zformulovat do dvou postulátů

### 1. Bornův postulát

#### Výraz

$$\frac{\int_{\Omega} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r}}{\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r}} \quad (4-16)$$

**udává pravděpodobnost, že částici ve stavu popsaném vlnovou funkcí  $\psi$  nalezneme v čase  $t$  v prostorové oblasti  $\Omega$ .**<sup>22</sup>

Všimněme si několika velmi významných věcí. Především první Bornův postulát implicitně předpokládá, že funkce  $\psi$  je kvadraticky integrovatelná na libovolné měřitelné podmnožině  $\mathbb{R}^3$  a speciálně pak na celém  $\mathbb{R}^3$ . Klade tedy na vlnovou funkci popisující fyzikálně realizovatelný stav bodové částice omezující podmínku, která například okamžitě vyloučí z množiny všech fyzikálně realizovatelných stavů jedné částice rovinné monochromatické vlny. Vlnová funkce (4-8) totiž kvadraticky integrovatelná na  $\mathbb{R}^3$  není.

Pouze pravděpodobnosti typu (4-16) resp. (4-19) jsou fyzikálně měřitelné. Je tedy jasné, že samotná vlnová funkce popisující de Broglieho vlny je určená pro konkrétní stav částice jednoznačně až na multiplikatívni (obecně komplexní) konstantu. Můžeme tedy vždy přejít k nové vlnové funkci

<sup>21</sup> Jednou z nich je například tzv. „pilot wave theory“ - teorie pilotních vln, která zhruba říká, že de Broglieho vlny a částice jsou dva různé objekty. Vlny se chovají zcela podle toho, jak bychom to od „řádných“ vln očekávali. Včetně „dělení“ při průchodu rozhraním. Jsou ale pouze nositeli informace o dynamice pohybu částic, s nimiž jsou nedílně spojeny. Poskytují tedy svým částicím návody, jak se chovat za daných podmínek. Tyto návody však nejsou jednoznačné. Částice si mohou zvolit mezi alternativami (např. průchod či odraz na rozhraní). Pokud si však nějakou zvolí, nemohou ji již změnit.

<sup>22</sup> Taková interpretace vlnové funkce vysvětluje paradoxní chování elektronu ve výše nastíněném myšlenkovém experimentu. Nedělí se totiž elektron, ale - velmi zhruba řečeno - pravděpodobnost jeho výskytu v prvním a druhém prostředí. Pokud ale polohu elektronu začneme měřit, realizuje se v jednom aktu měření jen jeden ze všech možných výsledků. Podobně, jako když vrháme kostku. Se stejnou pravděpodobností můžeme očekávat šest možných výsledků jednoho hodu. Realizuje se však jen jeden. A také kostka zůstane jen jedna.

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \frac{\psi(\mathbf{r}, t)}{\sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r}}}, \quad (4-17)$$

která bude splňovat

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r} = 1. \quad (4-18)$$

O funkci zavedené v (4-17) hovoříme jako o **vlnové funkci normované k jednotce**. Kvadrát její absolutní hodnoty má pak význam hustoty pravděpodobnosti nalezení částice v čase  $t$  v místě zadaném polohovým vektorem  $\mathbf{r}$ <sup>23</sup>. Mějme ovšem na paměti, že samotný stav částice je stejně dobře popsán normovanou i nenormovanou vlnovou funkcí.

Ani po normování však není vlnová funkce určena jednoznačně. V rámci Bornovy interpretace můžeme měnit její fázi (tomu odpovídá násobení imaginární jednotkou), aniž se to jakkoliv dotkne experimentálně verifikovatelných výsledků. Proto se obvykle hovoří o fázi vlnové funkce jako o nefyzikálním stupni volnosti.

## 2. Bornův postulát

**Definujme ve shodě s formulí (4-10) funkci  $\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)$**

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\psi}(\mathbf{p}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right\} d^3 \mathbf{p}.$$

**Pak výraz**

$$\frac{\int_{\Pi} |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 \mathbf{p}}{\int_{\mathbb{R}^3} |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 \mathbf{p}} \quad (4-19)$$

<sup>23</sup> Podívejme se blíže na pojem pravděpodobnosti, jak jej chápeme v experimentálních vědách.

Především vždy hovoříme o pravděpodobnosti realizace nějakého jevu, zpravidla získání jistého výsledku v přesně definovaném experimentu. Postupujeme tak, že provedeme velké množství pokusů za identických podmínek a zaznamenáváme jejich výsledky. Pak dáme do poměru počet příznivých výsledků a počet všech provedených pokusů. Příkladem může být měření polohy částice. Tu měříme detektorem, který je schopen určit její souřadnice vůči zvolené vztažné soustavě. Opakovaně připravujeme studovanou částici v přesně definovaném stavu (popsaném příslušnou vlnovou funkcí) a provádíme měření zvoleným detektorem. Nalezneme-li částici v zadané oblasti prostoru  $\Omega$ , považujeme výsledek pokusu za příznivý. Označme  $N$  počet všech příznivých výsledků pokusu a  $N_{\text{tot}}$  počet všech realizovaných pokusů. Výraz

$$\lim_{N_{\text{tot}} \rightarrow +\infty} \frac{N}{N_{\text{tot}}}$$

pak definuje pravděpodobnost nalezení částice ve zvolené části prostoru. Aby příslušná definice byla korektní, je nutno předpokládat, že příslušná limita existuje. Toto však nemusí být vždy pravda. Proto se vymezuje speciální třída pokusů, pro něž tato limita existuje. Tyto pokusy se nazývají **statisticky regulárními**. První Bornův postulát tedy implicitně předpokládá, že měření polohy částice v libovolném fyzikálně realizovatelném stavu je regulárním pokusem. Obecně pak v kvantové teorii považujeme za regulární všechna fyzikální měření.

**udává pravděpodobnost, že částice bude mít v okamžiku měření hybnost z oblasti  $\Pi$  impulsového prostoru.**

Funkce  $\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)$  se zpravidla nazývá vlnovou funkcí částice v impulsové, nebo prostě  $p$ -reprezentaci.

Bornova statistická interpretace vlnových funkcí znamená naprostý převrat v nazírání na okolní svět. Je zcela zbořena víra klasické fyziky v absolutní determinismus. Všechny naše předpovědi o fyzikálních objektech (přesněji řečeno o očekávaných výsledcích prováděných experimentů) získávají takto „pouze“ pravděpodobnostní charakter. Již nemůžeme říkat, že naměříme určitou hodnotu sledovaného parametru (např. polohy či hybnosti částice), ale že s jistou pravděpodobností můžeme naměřit jednu hodnotu, s jinou pravděpodobností druhou a tak dále. Není tedy divu, že se podobný pohled na svět neseťkal v době svého vzniku s velkým pochopením. Snad i proto byla Bornovi za jeho práce udělena Nobelova cena až s třicetiletým zpožděním.

### *Vztah mezi vlnovou a klasickou mechanikou*

Bornova interpretace vlnové funkce je však klasické mechanice hmotného bodu osudově nepříznivá i z dalšího důvodu. Klasická dynamika systému se totiž zcela řídí pohybovými rovnicemi. Těmi jsou však například v Hamiltonově formulaci obyčejné diferenciální rovnice prvního řádu pro souřadnice a hybnosti, k jejichž jednoznačnému řešení musíme znát počáteční podmínku. V případě jediné bodové částice polohu a hybnost (rychlost) v nějakém časovém okamžiku. Podle předchozího odstavce však změřit tuto počáteční podmínku je zhora nemožné<sup>24</sup>. Naštěstí však není klasická mechanika, přes deklarovanou absolutní přesnost svých předpovědí, na kvalitu počátečních podmínek příliš náročná. V opačném případě by totiž nemohla vůbec fungovat ve světě, v němž je každé měření zatíženo náhodnými experimentálními chybami. Díky tomu, že v mnoha případech malá změna počátečních podmínek znamená jen malé změny v následující evoluci systému, se náhodné chyby v určení počátečních podmínek „ztratí“ v náhodných chybách, které doprovázejí sledování a proměřování studovaného systému během jeho časového vývoje. A v těchto náhodných experimentálních chybách se v „klasickém“ světě ztrácejí i vlnově-mechanické (kvantové) fluktuace, které jsou důsledkem Bornových postulátů.

Kromě tohoto „klasického“ světa, v němž jsou kvantové fluktuace zpravidla o mnoho řádů menší než experimentální chyby, však existuje svět<sup>25</sup>, v němž je situace právě opačná. Začínají dominovat kvantové efekty a klasická fyzika přestává platit jak ve svých předpovědích tak i teoretických konstrukcích a modelech.

Popišme si tuto situaci přesněji na příkladu hmotného bodu, který v rámci vlnové mechaniky reprezentujeme více či méně lokalizovaným vlnovým balíkem.

V rámci klasického popisu je stav částice zadán polohou  $\mathbf{r}$  a hybností  $\mathbf{p}$ . Obě veličiny jsou přirozeně zatíženy experimentálními chybami. V rámci vlnového popisu není ani poloha ani impuls částice určen přesně. Obě hodnoty jsou „rozmazány“. Podobně jako

<sup>24</sup> Ani nemluvě o tom, že podle Heisenbergova principu neurčitosti, o němž se zmíníme vzápětí, není možno měřit současně hybnost a polohu částice.

<sup>25</sup> Není nutno jistě připomínat, že právě vyslovená poznámka nechce tvrdit nic definitivního o nějaké "objektivní" existenci světa klasického a neklasického. Přesněji bychom měli uvést, že se množina našich experimentálních poznatků rozpadá na dvě disjunktní části, které budeme v dalším nazývat klasickým resp. neklasickým světem.

při vyhodnocování experimentálních dat můžeme i v rámci vlnového formalismu hovořit o **střední poloze částice** resp. o její **střední kvadratické fluktuaci**. Z prvního Bornova postulátu vyplývá, že střední polohu částice ve stavu popsáném vlnovou funkcí  $\psi$  normovanou k jednotce udává vztah

$$\bar{\mathbf{r}} = \int_{\mathbf{R}^3} \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r} \quad (4-20)$$

a střední kvadratickou fluktuaci  $i$ -té komponenty polohového vektoru vztah

$$(\Delta r_i)^2 = \int_{\mathbf{R}^3} (r_i - \bar{r}_i)^2 |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r}. \quad (4-21)$$

Střední poloha (4-20) a její střední kvadratická fluktuace pak odpovídají výsledkům měření přístrojem s plně eliminovanými náhodnými experimentálními chybami.

Analogicky získáváme pro **střední hybnost** částice a **střední kvadratickou fluktuaci její  $i$ -té složky** vztahy (v nichž používáme funkci  $\hat{\psi}$  normovanou k jednotce v impulsovém prostoru)

$$\bar{\mathbf{p}} = \int_{\mathbf{R}^3} \mathbf{p} |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 \mathbf{p} \quad (4-22)$$

a

$$(\Delta p_i)^2 = \int_{\mathbf{R}^3} (p_i - \bar{p}_i)^2 |\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 \mathbf{p}. \quad (4-23)$$

Jsou-li vlnově-mechanické fluktuace (4-21) a (4-23) výrazně menší než pro daný typ experimentu charakteristické experimentální chyby, můžeme při interpretaci jeho výsledků oprávněně použít klasickou mechaniku. V opačném případě je nutno se uchýlit k mechanice vlnové.

## **4.5 Heisenbergovy relace neurčitosti**

[1] str. 104-108

[2] str. 52-54

Ať připravíme částici v libovolném stavu reprezentovaném obecným vlnovým balíkem, její poloha i hybnost budou "vždy" rozmazány v důsledku nenulovosti vlnově-mechanických fluktuací (4-21) a (4-23). Pokud bychom chtěli dosáhnout klasické přesnosti popisu bodové částice, museli bychom najít takový vlnový balík, který příslušné fluktuace zcela anuluje. Z výrazů (4-21) a (4-23) však plyne, že přesně nulových hodnot nelze nikdy dosáhnout. Navíc bylo zjištěno, že čím přesněji lokalizujeme polohu studované částice, tím horší výsledky získáme při měření hybnosti a naopak. Tento fakt se ob

vykle kvantitativně vyjadřuje ve tvaru **Heisebergových relací neurčitosti** pro polohu a hybnost<sup>26</sup>

$$\Delta p_i \Delta r_i \geq \frac{\hbar}{2}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (4-24)$$

Uvedený vztah říká, že zpřesníme-li například měření první (x-ové) složky polohového vektoru, dojde ke zhoršení výsledků měření první (x-ové) složky hybnosti. Uvědomte si však, že ze vztahu (4-24) vůbec nevyplývá, že by uvažované zpřesnění mělo ovlivnit přesnost výsledků měření zbývajících složek hybnosti (tj. složky y-ové a z-ové). Z hlubší analýzy naopak vyplývá, že k žádnému ovlivnění pro různé indexy nedochází. Přesněji pro  $i \neq j$  platí nic bližšího nežíkáající vztahy

$$\Delta p_i \Delta r_j \geq 0, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (4-25)$$

Podobně se navzájem neovlivňují ani současná měření různých složek polohového vektoru resp. hybnosti.

Vraťme se však ke vztahu (4-24) a pokusme se jej odvodit pro jednoduchý příklad částice vázané na přímku<sup>27</sup> připravené ve stavu reprezentovaném tzv. **Gaussovým minimalizujícím balíkem**

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}\right\} \exp(ik_0x). \quad (4-26)$$

Protože je nyní časová závislost vlnové funkce  $\psi$  nepodstatná, explicitně ji v (4-26) neuvádíme. Ukryta je v eventuální závislosti "konstant"  $\sigma_x$ ,  $x_0$  a  $k_0$  na čase. Obrázek 4A ukazuje, jak kvadrát modulu  $|\psi(x)|^2$  funkce (4-26) závisí na prostorové proměnné. Z něj vyplývá i fyzikální interpretace parametrů  $\sigma_x$  a  $x_0$ .

Po vyčíslení příslušných integrálů snadno ukážeme<sup>28</sup>, že

$$a) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (4-27)$$

<sup>26</sup> Kromě níže uvedené relace pro složky polohového vektoru a vektoru hybnosti částice byly odvozeny podobné nerovnosti pro další páry dynamických proměnných. Zcela přirozené je toto odvození v rámci Diracovy operátorové verze kvantové mechaniky, která však leží zcela mimo rámec tohoto skriptu. Ne vždy však zpřesnění měření jedné veličiny vede ke zhoršení výsledků pro veličinu druhou. Existují skupiny dynamických proměnných, které můžeme měřit současně neomezeně přesně, a naopak i takové, kdy je současně přesné měření vyloučeno. Bohužel se zde nemůžeme tomuto problému věnovat podrobněji. V následující diskusi se proto omezíme pouze na jeden speciální případ - vzájemný vztah hybnosti a polohy studované částice.

<sup>27</sup> Pouze z důvodu přehlednosti matematických výrazů a průzračnosti úvah se omezujeme na jednorozměrný systém. Následující popis je možno bez velkých obtíží rozšířit i na obecný případ částice v trojrozměrném prostoru.

<sup>28</sup> K důkazu níže uvedených tvrzení je nutno užít rovnost

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.$$

Viz též příklady k této kapitole.

$$b) \quad \bar{x} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx = x_0, \quad (4-28)$$

$$c) \quad \Delta x \equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 |\psi(x)|^2 dx} = \sigma_x. \quad (4-29)$$

K určení střední kvadratické fluktuační hybnosti částice je nezbytné znát tvar zadané vlnové funkce v impulsové reprezentaci  $\hat{\psi}(k)$ . Podle definičního vztahu

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(k) \exp(ikx) dk \quad (4-30)$$

a z něj podle věty o Fourierově transformaci plynoucího vztahu

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp(-ikx) dx \quad (4-31)$$

získáváme<sup>29</sup> po následném normování funkce  $\hat{\psi}$  k jedničce (normovanou funkci označme symbolem  $\tilde{\psi}$ )

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \exp\left\{-\frac{(k - k_0)^2}{4\sigma_k^2}\right\} \exp\{-i(k - k_0)x_0\}, \quad (4-32)$$

kde

$$\sigma_k = \frac{1}{2\sigma_x}. \quad (4-33)$$

Podobně jako výše snadno získáme

$$a) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 dk = 1, \quad (4-34)$$

$$b) \quad \bar{k} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} k |\tilde{\psi}(k)|^2 dk = k_0, \quad (4-35)$$

$$c) \quad \Delta k \equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} (k - \bar{k})^2 |\tilde{\psi}(k)|^2 dk} = \sigma_k. \quad (4-36)$$

<sup>29</sup> Integrál na pravé straně (4-31) dá trochu práce. Jeden způsob výpočtu je uveden v dodatku II k této kapitole.

Na základě de Broglieho relace mezi hybností a vlnovým vektorem  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  plyne okamžitě z (4-35) interpretace parametru  $k_0$ : studovaný vlnový balík se šíří v daném okamžiku střední rychlostí  $v = \frac{\hbar k_0}{m}$ , kde  $m$  je hmotnost s ním asociované částice. Vlnově-mechanická neurčitost hybnosti je pak dána výrazem  $\Delta p = \hbar \Delta k$ , což podle (4-33) dává

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} . \quad (4-37)$$

Tento vztah však nápadně připomíná Heisenbergovu relaci (4-24). Jen díky tomu, že jsme při našich výpočtech používali speciální tvar (4-26) vlnové funkce, se v (4-37) objevuje rovnost. V obecném případě bychom získali nanejvýš nerovnost (4-24).

## **4.6 Bohrov model atomu vodíku a vlnová hypotéza**

[1] str. 139-142 <sup>30</sup>

Jak je možno dospět od de Broglieho vlnové hypotézy k Bohrovu postulátu o kvantování momentu hybnosti elektronu obíhajícího po kružnici kolem těžkého jádra, o tom se můžete dočíst v citované učebnici. Při pročítání uvedených stran věnujte pozornost připojené poznámce.

---

<sup>30</sup> Rozmyslete si především, jak ze vztahu  $2\pi r_n = n\lambda$  (vztah 6.7 na str. 142 v [1]) plyne s pomocí de Broglieho relace mezi hybností a vlnovou délkou první Bohrov postulát - viz též [1], str. 151.



## **Dodatek I Vlnová rovnice a pohyb volných částic**

Všude, kde se ve fyzice vyskytuje vlnění jakéhokoliv typu (například v teorii elektromagnetického pole), můžeme příslušné pohybové rovnice převést na tzv. vlnovou rovnici. Pro jediné skalární pole ji zapisujeme obecně ve tvaru

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (4.I-1)$$

kde  $\Delta$  je Laplaceův operátor a  $v_f$  fázová rychlost studovaných vln. Je jistě rozumné předpokládat, že se podobnou rovnicí budou řídit i **de Broglieho vlny asociované s volnou částicí**. Proto se zdá být užitečné již nyní blíže prostudovat její matematické vlastnosti a způsob jejího řešení. Velmi užitečné budou výsledky tohoto dodatku v následující kapitole.

Přesně vzato vlnová rovnice (4.I-1) platí jen, je-li fázová rychlost  $v_f$  konstantou a nezávisí tedy na dalších parametrech (např. na frekvenci resp. vlnové délce či poloze). Příkladem takové závislosti může být závislost fázové rychlosti monochromatických elektromagnetických vln na jejich frekvenci, s níž jste se již setkali v kursu optiky v části věnované homogenním disperzním prostředí. Tehdy jste psali obecnou vlnu šířící se disperzní látkou ve tvaru (obecně integrální) lineární superpozice zpravidla rovinných monochromatických vln, z nichž každá se řídila samostatnou vlnovou rovnicí (4.I-1) s frekvenčně závislou fázovou rychlostí. Je jasné, že podobná situace nastává i pro de Broglieho vlny asociované s volnou částicí. Podle vztahu (4-7) platí

$$v_f = \frac{c^2}{v} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}} c. \quad (4.I-2)$$

Fázová rychlost příslušné de Broglieho vlny závisí tedy na energii studované částice a tím i na její frekvenci. Nezávisí však na poloze  $\mathbf{r}$ , což je důsledkem nepřítomnosti vnějšího silového pole.<sup>31</sup>

Přesto, že fázová rychlost de Broglieho vln je závislá na jejich frekvenci, soustředíme se nejdříve na

### **zjednodušený případ, kdy je ve vlnové rovnici (4.I-1) parametr $v_f$ konstantním.**

Naše úvahy tak budou prosty technických komplikací a navíc následné zobecnění na případ s disperzí nebude činit žádné obtíže.

Podle věty o Fourierově transformaci můžeme funkci  $\varphi$  zapsat ve tvaru

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int_{R^3} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{k}. \quad (4.I-3)$$

Dosazením do rovnice (4.I-1) získáme pak

<sup>31</sup> Všechny výsledky tohoto dodatku budou odvozeny za předpokladu nezávislosti fázové rychlosti na poloze, tedy pro speciální případ volné částice. Zobecnění na případ částice ve vnějším potenciálovém poli provedeme v následující kapitole.

$$\frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial t^2} + k^2 \tilde{\varphi} = 0, \quad (4.I-4)$$

kde jsme písmenem  $k$  označili velikost vektoru  $\mathbf{k}$  zavedeného ve vztahu (4.I-3). Tuto rovnici ale snadno vyřešíme. Můžeme pak psát

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{k}, t) = A(\mathbf{k}) \exp\{-i\omega t\} + B(\mathbf{k}) \exp\{i\omega t\}, \quad (4.I-5)$$

kde  $\omega = v_f k > 0$  a  $A$  a  $B$  jsou zatím libovolné funkce, které určíme z počáteční podmínky pro rovnici (4.I-1)

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, t=0) &= \varphi_0(\mathbf{r}) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\mathbf{r}, t=0) &= \varphi_1(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.I-6)$$

Funkce  $\varphi_0$  a  $\varphi_1$  jsou pochopitelně předem dané.

Po dosazení (4.I-5) do (4.I-3) a výsledného vztahu do (4.I-6) získáme

$$\int_{\mathbb{R}^3} \{(A(\mathbf{k}) + B(\mathbf{k})) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\} d^3 \mathbf{k} = \varphi_0(\mathbf{r}) \quad (4.I-7)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \{i\omega (B(\mathbf{k}) - A(\mathbf{k}))\} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{k} = \varphi_1(\mathbf{r}). \quad (4.I-8)$$

Příslušné vztahy pro neznámé funkce  $A$  a  $B$  získáme s pomocí inverzní Fourierovy transformace

$$A(\mathbf{k}) + B(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (4.I-7')$$

$$i\omega \{B(\mathbf{k}) - A(\mathbf{k})\} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_1(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (4.I-8')$$

Odtud pak již snadno plyne

$$A(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left( \varphi_0(\mathbf{r}) - \frac{1}{i\omega} \varphi_1(\mathbf{r}) \right) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (4.I-9)$$

$$B(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left( \varphi_0(\mathbf{r}) + \frac{1}{i\omega} \varphi_1(\mathbf{r}) \right) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (4.I-10)$$

*Příklad*

Pro ilustraci se podívejme blíže na jednu speciální počáteční podmínku, kdy  $\varphi_0$  bude obecná (dostatečně hladká) funkce a funkci  $\varphi_1$  položíme rovnu nule na celém  $\mathbb{R}^3$ . Z (4.I-8') pak snadno dostaneme

$$A(\mathbf{k}) = B(\mathbf{k}) . \quad (4.I-11)$$

Po dosazení tohoto výsledku do (4.I-7') pak ze známé funkce  $\varphi_0$  dopočteme i konkrétní tvar  $A(\mathbf{k})$ . Řešení vlnové rovnice (4.I-1) se zadanou speciální počáteční podmínkou pak můžeme zapsat ve tvaru

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \left\{ A(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) + A(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)) \right\} d^3 \mathbf{k} , \quad (4.I-12)$$

kde

$$2 \int_{\mathbb{R}^3} A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{k} = \varphi_0(\mathbf{r}) . \quad (4.I-13)$$

Nechť je funkce  $A(\mathbf{k})$  lokalizována na velmi blízkém okolí nějaké vybrané hodnoty vlnového vektoru  $\mathbf{k}_0$ . Této lokalizace můžeme vždy dosáhnout vhodnou volbou počáteční podmínky. Označme

$$\mathbf{v} = v_f \frac{\mathbf{k}_0}{k_0} . \quad (4.I-14)$$

Vektor  $\mathbf{v}$  určuje zřejmě rychlost šíření rovinné monochromatické vlny, jejíž vlnový vektor je roven právě  $\mathbf{k}_0$ . Vzhledem k předpokládané lokalizaci funkce  $A$  můžeme argumenty komplexních exponenciál v integrandu pravé strany (4.I-10) aproximovat Taylorovým rozvojem prvního řádu. Po provedení potřebných úprav získáme

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \approx \int_{\mathbb{R}^3} \left\{ A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{v}t)) + A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{v}t)) \right\} d^3 \mathbf{k} . \quad (4.I-15)$$

Uvážíme-li současně vztah (4.I-11) získáváme nakonec

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \approx \frac{1}{2} \varphi_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) + \frac{1}{2} \varphi_0(\mathbf{r} + \mathbf{v}t) . \quad (4.I-16)$$

Tedy převedeno do řeči de Broglieho vlnové mechaniky vztah (4.I-16) říká, že speciální počáteční podmínkou vytvořený vlnový balík se pohybuje (alespoň v prvním přiblížení) tak, že se okamžitě po svém vytvoření v čase  $t=0$  rozpadá na dva vlnové balíky stejného tvaru, který je zcela určen počáteční podmínkou. Tyto vlnové balíky se pohybují rychlostmi o stejných velikostech ale opačných směrů.

I v obecném případě můžeme postup z předcházejícího příkladu s malými modifikacemi zopakovat. Opět budeme předpokládat silnou lokalizaci funkce  $A(\mathbf{k})$  kolem nějakého bodu  $\mathbf{k}_0$  a podobný předpoklad učiníme i pro funkci  $B(\mathbf{k})$ . Z vyjádření vlnové funkce  $\varphi$  ve tvaru

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \{A(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) + B(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t))\} d^3 \mathbf{k} \quad (4.I-17)$$

získáme po analogických úpravách jako výše přibližné vyjádření

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \approx \int_{\mathbb{R}^3} \{A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{v}t)) + B(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{v}t))\} d^3 \mathbf{k} . \quad (4.I-18)$$

Označíme-li dále pro jednoduchost

$$F(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{k} \quad (4.I-19)$$

a

$$G(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} B(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 \mathbf{k} , \quad (4.I-20)$$

můžeme na základě (4.I-17) psát

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \approx F(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) + G(\mathbf{r} + \mathbf{v}t) . \quad (4.I-21)$$

Opět tedy získáváme dva vlnové balíky šířící se stejnou rychlostí opačnými směry. První z nich se pohybuje ve směru dominantního vlnového vektoru  $\mathbf{k}_0$  (a podle de Broglieho relací i jemu odpovídající hybnosti). Můžeme jej tedy považovat za vlnově mechanickou realizaci bodové volné částice s hybností  $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}_0$ .

Druhý vlnový balík však podobnou fyzikální interpretaci nemá. Budeme jej proto považovat v rámci vlnové mechaniky za nefyzikální a z teorie jej vhodným způsobem vyloučíme<sup>32</sup>. Toho dosáhneme tak, že vhodnou volbou počáteční podmínky anulujeme funkci  $B(\mathbf{k})$  s využitím vztahu (4.I-10). Kromě jiného to znamená, že rovinné de Broglieho vlny o úhlové frekvenci  $\omega$  a vlnovém vektoru  $\mathbf{k}$  nebude popisovat obecná formule

<sup>32</sup> Konkrétní časová evoluce vhodně připravené počáteční podmínky vlnové funkce  $\varphi$  je do značné míry determinována právě touto počáteční podmínkou. To, že za běžných podmínek v laboratoři nepozorujeme výše popsané dělení vlnového balíku, má zřejmě původ v tom, že námi připravované počáteční stavy částice podobný rozpad prostě neumožňují. Je tedy přirozené tento empirický fakt započíst do budované teorie. A to tak, že se při volbě počátečních podmínek omezíme jen na ty, které poskytují pouze "přijatelné" časové evoluce. Vzápětí ukážeme, že toto omezení můžeme zabudovat přímo do pohybové (vlnové) rovnice.

Teprve z kvantové teorie pole vyplynulo, že rozpad počátečního vlnového balíku na dva je možno experimentálně realizovat. Jedná se o tvorbu párů částice a antičástice. Námi akceptovaný "fyzikální" vlnový balík odpovídá pak studované částici (například elektronu) a zavržený "nefyzikální" vlnový balík její antičástici (zde pozitronu). Nedostatek energie lokalizované v daném místě však zakazuje podobné procesy v "klasické laboratoři". Tedy volba "vhodných" počátečních podmínek, jak byla diskutována výše, odpovídá vpodstatě experimentům při nízkých energiích.

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = A \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) + B \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)) , \quad (4.I-22)$$

ale vztah (4-8).

Snadno můžeme provést zobecnění výše nastíněného postupu i na **obecný případ de Broglieho vln přiřazených volné částici**.

kdy fázová rychlost závisí na úhlové frekvenci a vlnovou rovnicí (4.I-1) se řídí pouze jednotlivé monochromatické složky rozkladu (4.I-17). V platnosti zůstanou všechny výsledky kromě vztahu (4.I-14), který budeme muset nahradit

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}_0) . \quad (4.I-14')$$

## Dodatek II **Fourierova transformace**

### Definice:

Nechť  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  je v absolutní hodnotě integrovatelná funkce. Je tedy splněno

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(x_1, \dots, x_n)| dx_1 \dots dx_n < +\infty. \quad (4.II-1)$$

Potom funkci  $\hat{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ , která je definována předpisem

$$\hat{f}(k_1, \dots, k_n) \equiv \int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) \exp\left(i \sum_{m=1}^n x_m k_m\right) dx_1 \dots dx_n, \quad (4.II-2)$$

nazýváme **Fourierovou transformací funkce f**.

A funkci  $\check{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ , která je definována předpisem

$$\check{f}(k_1, \dots, k_n) \equiv \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) \exp\left(-i \sum_{m=1}^n x_m k_m\right) dx_1 \dots dx_n, \quad (4.II-3)$$

nazýváme **inverzní Fourierovou transformací funkce f**.

### Věta:

Integrály na pravých stranách (4.II-2) a (4.II-3) konvergují pro každou funkci splňující předpoklad (4.II-1). Výše uvedená definice je tedy korektní.

### Poznámka:

Předpis (4.II-2) přiřazuje každé v absolutní hodnotě integrovatelné funkci  $f$  nějakou jinou funkci, pro kterou jsme použili symbol  $\hat{f}$ . Označíme-li množinu všech v absolutní hodnotě integrovatelných funkcí na  $\mathbb{R}^n$  symbolem  $L_1(\mathbb{R}^n)$ , můžeme tvrdit, že zmíněný předpis definuje zobrazení  $G : L_1(\mathbb{R}^n) \rightarrow H$ , kde  $H$  je množina všech funkcí, které můžeme získat Fourierovou transformací funkce z  $L_1(\mathbb{R}^n)$ . Pak ovšem můžeme psát  $\hat{f} = G(f)$ . Funkce  $\hat{f}$  nemusí být obecně z  $L_1(\mathbb{R}^n)$ .

Zcela analogicky definuje předpis (4.II-3) zobrazení  $G_{-1} : L_1(\mathbb{R}^n) \rightarrow H_{-1}$ , s jehož pomocí můžeme psát  $\check{f} = G_{-1}(f)$ . Ani funkce  $\check{f}$  nemusí být obecně z  $L_1(\mathbb{R}^n)$ .

Všimněte si, že obě zobrazení  $G$  i  $G_{-1}$  jsou lineární.

### Věta: (o Fourierově transformaci)

Budiž  $f$  spojitá funkce z  $L_1(\mathbb{R}^n)$  taková, že její Fourierův obraz  $\hat{f}$  je rovněž z  $L_1(\mathbb{R}^n)$ . Pak platí

$$G(G_{-1}(f)) = G_{-1}(G(f)). \quad (4.II-4)$$

Poznámka:

V kvantové teorii nepracujeme zpravidla s funkcemi v absolutní hodnotě integrovatelnými na  $\mathbb{R}^3$ , tedy z  $L_1(\mathbb{R}^3)$ , ale s funkcemi, jejichž absolutní hodnota je kvadraticky integrovatelná<sup>33</sup>. Obecně však taková funkce nemusí patřit do  $L_1(\mathbb{R}^3)$ . Proto použití věty o Fourierově transformaci na kvadraticky integrovatelné funkce vyžaduje jistou obezřetnost.

My však vždy předpokládáme, že studované funkce jsou spojité. Jedná se totiž o vlnové funkce, které jsou řešenými Schrödingerovy rovnice, tedy funkce alespoň dvakrát po částech spojitě diferencovatelné. Speciálně však v případě spojitých funkcí vyplývá z kvadratické integrovatelnosti i integrovatelnost v absolutní hodnotě. Proto je automatické použití věty o Fourierově transformaci na (spojité) vlnové funkce oprávněné.

Příklad:

Nalezněte Fourierovu transformaci funkce  $f(x) = \exp(-\alpha^2 x^2)$ .

Řešení:

Snadno nahlédneme, že po vhodné substituci k vyřešení formulovaného problému stačí vyčíslit integrál.

$$I(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) \exp(ikx) dx. \quad (4.II-5)$$

Věnujme se tedy této nové úloze. Čtenář si jistě sám transformuje získané výsledky na řešení původního zadání příkladu.

K tomu účelu použijeme metodu derivace podle parametru. Můžeme totiž psát

$$\frac{dI(k)}{dk} = i \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-x^2) \exp(ikx) dx. \quad (4.II-6)$$

Dále integrací per partes upravíme integrál na pravé straně (4.II-6) na tvar

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-x^2) \exp(ikx) dx = \frac{1}{2} ik \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) \exp(ikx) dx - \left[ \exp(-x^2) \exp(ikx) \right]_{-\infty}^{+\infty} \quad (4.II-7)$$

a získáme tak rovnici pro  $I(k)$

$$\frac{dI(k)}{dk} + \frac{1}{2} k I(k) = 0. \quad (4.II-8)$$

Tuto rovnici však snadno vyřešíme, neboť se jedná o lineární obyčejnou diferenciální rovnici prvního řádu. Jejím řešením je

---

<sup>33</sup> Množina všech v absolutní hodnotě kvadraticky integrovatelných funkcí na  $\mathbb{R}^3$  se zpravidla označuje symbolem  $L_2(\mathbb{R}^3)$ .

$$I(k) = I_0 \exp\left(-\frac{k^2}{4}\right). \quad (4.II-9)$$

Neznámou integrační konstantu pak dopočteme z "počáteční" podmínky

$$I_0 = I(0) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}. \quad (4.II-10)$$



**Příklady**

**1)** Určete fázovou a grupovou rychlost de Broglieho vln v nerelativistickém přiblížení (4-5) a  $p = m_0 v$ .

**2)** Určete konstantu A tak, aby níže uvedená vlnová funkce byla normována k jedničce. Dále pro tuto vlnovou funkci určete

- i) střední hodnotu polohy a hybnosti a
- ii) střední kvadratickou fluktuaci polohy a hybnosti.

Získané výsledky srovnajte s Heisenbergovou relací neurčitosti.

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A \quad \text{pro } x \in \langle -a, a \rangle \\ \psi(x) &= 0 \quad \text{pro } x \in (-\infty, -a) \cup (a, +\infty).\end{aligned}$$

**3)** Určete konstantu A tak, aby níže uvedená vlnová funkce byla normována k jedničce. Dále pro tuto vlnovou funkci určete střední hodnotu a střední kvadratickou fluktuaci velikosti polohového vektoru a výsledek porovnejte s Bohrovým poloměrem atomu vodíku  $a_0$ <sup>34</sup>

$$\psi(x, y, z) = A \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right).$$

**4)** Určete energetické spektrum částice vázané na přímkou v potenciálovém poli

$$\begin{aligned}V(x) &= 0 \quad \text{pro } x \in \langle -a, a \rangle \\ V(x) &= +\infty \quad \text{pro } x \in (-\infty, -a) \cup (a, +\infty)\end{aligned}$$

za předpokladu, že povolené stavy odpovídají stojatým harmonickým vlnám splňujícím podmínku  $\psi(-a) = \psi(a) = 0$ . Výsledek porovnejte se Sommerfeld-Wilsonovou teorií.

**6)** Dokažte, že platí  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ . Na základě tohoto výsledku určete integrály

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2} dx \quad \text{a} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx.$$

<sup>34</sup> Uvedená vlnová funkce popisuje základní stav atomu vodíku podle Schrödingerovy teorie.

## **Obrázky**

**Obrázek 4A** *Gaussův vlnový balík*

