15 Experimentální základy kvantové hypotézy

Částicové vlastnosti světla a vlnové vlastnosti částic. Planckova kvantová hypotéza, foton, fotoelektrický jev. De Broglieova hypotéza, relace neurčitosti.

15.1 Částicové vlastnosti světla a vlnové vlastnosti částic

V běžné praxi od sebe můžeme jednoduše rozeznat částice (chovají se podle zákonů částicové mechaniky, mají hmotnost) a vlny (za vhodných okolností můžeme pozorovat interferenci nebo difrakci). V některých experimentech však částice vykazují vlnové vlastnosti a naopak.

Pokud světlo s dostatečně vysokým kmitočtem dopadne na povrch kovu, jsou z něj emitovány elektrony (tzv. **fotoelektrický jev**). Pozoruhodné při tomto jevu je, že energetické rozdělení emitovaných elektronů nezávisí na intenzitě dopadajícího světla. Silný paprsek téže frekvence produkuje více elektronů, ale střední energie elektronu je tatáž. Na druhé straně, energie emitovaných elektronů závisí na frekvenci použitého světla. Při frekvencích nižších než nějaká kritická se žádné elektrony neemitují. Nad touto prahovou frekvencí se emitují elektrony s energií od nuly do jisté maximální energie, která s frekvencí roste lineárně (f_0 je prahová frekvence):

$$E_{kmax} = h(f - f_0) \tag{1}$$

Mezi další efekty, kde se projevují částicové vlastnosti vln, patří **Comptonův jev**. Studujeme-li rozptyl monoenergetického (rentgenového) elektromagnetického vlnění na fóliích z různých látek, zjišťujeme, že v rozptýleném svazku se kromě původní vlnové délky λ (za kterou se obyčejně vybírá některá z charakteristických vlnových délek spektra daného prvku) objevuje záření o větší vlnové délce $\lambda' > \lambda$. Posunutí vlnových délek nezávisí na původní vlnové délce ani na druhu látky. Na druhu látky závisí pouze podíl intenzit svazku rozptýleného s původní a větší vlnovou délkou. S rostoucím protonovým číslem Z hodnota tohoto podílu klesá.

Změnu vlnové délky můžeme vysvětlit, pokud relativisticky vyšetříme srážku vlny s např. elektronem, přičemž dopadající vlna předá část své energie elektronu (ϑ je úhel rozptylu):

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\vartheta), \qquad \text{kde} \quad \lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{m_e c}. \tag{2}$$

Konstanta λ_C se nazývá **Comptonova vlnová délka** elektronu ($0,024$ nm). Posunutí $\Delta\lambda$ je největší pro rozptyl dozadu, nezávisí na použitém materiálu ani vlnové délce, což je ve shodě s experimentem.

Kromě částicových vlastností světla můžeme pozorovat i interferenci a difrakci „částic“. Realizujeme-li typický interferenční experiment s dvojštěrbinou za použití svazku elektronů, dostaneme na stínítku interferenční obrazec. A to i v případě, že elektrony do dvojštěrbiny pouštíme po jednom, tedy elektron interferuje sám se sebou. Tento efekt je mnohem lépe pochopitelný, pokud si elektron představíme jako vlnu. Pokusy Davissona a Germena ukázaly, že elektrony můžou i difragovat (na krystalech s vhodně uspořádanými atomy).

15.2 Planckova kvantová hypotéza

Max Planck se snažil vysvětlit vlastnosti záření emitovaného horkými tělesy. Vzorec, který by souhlasil s experimentem, se dal odvodit pouze za předpokladu, že záření je emitováno nespojitě po malých dávkách energie zvaných kvanta nebo **fotony**. Každému fotonu přiřazujeme energii

$$E = hf = \hbar\omega \tag{3}$$

Einstein rozšířil Planckovu představu o vyzařování po kvantech na šíření po kvantech a díky tomu vysvětlil fotoelektrický jev. V rovnici popisující fotoelektrický jev tedy můžeme

interpretovat jednotlivé členy jako energii v dopadajícím kvantu, maximální možnou energii emitovaného elektronu a výstupní práci potřebnou k vytržení elektronu z ozařovaného povrchu.

Foton je částice s nulovou klidovou hmotností a ve vakuu se pohybuje vždy rychlostí c. Je mu přiřazena hybnost

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \tag{4}$$

15.3 De Broglieova hypotéza

Einsteinovo vysvětlení fotoefektu říká, že vlny se za určitých okolností projevují jako částice. Další důležitou myšlenku prosazoval Louis de Broglie - můžeme-li vlně přisoudit částicové vlastnosti, můžeme naopak částicím přisoudit vlastnosti vlnové, jako je například vlnová délka. Vlnovou délku fotonu můžeme vyjádřit pomocí jeho hybnosti, hybnost částice je $p = mv$. Zavedeme tedy vlnovou délku částice jako

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \tag{5}$$

Hmotnost m je dána relativisticky.

Zavedeme-li vlnovou délku připsanou částici, můžeme dále zavést i vlnový vektor, kruhovou frekvenci, apod.

Ve světelné vlně se v prostoru a v čase mění periodicky elektromagnetické pole, ve zvukové vlně tlak; proměnná veličina charakterizující **de Broglieho vlny** je vlnová funkce. Fyzikální význam má pouze kvadrát její absolutní hodnoty – to je hustota pravděpodobnosti experimentálního nalezení částice v daném čase na daném místě.

Tato představa vysvětlila Davissonovy-Germenovy experimenty difrakce elektronů na krystalech.

Pro vysvětlení částicových vlastností vln a vlnových vlastností částic se tedy zavádí představa **korpuskulárně vlnového dualizmu**: každá entita je zároveň částicí a zároveň vlnou, to, jak se projeví, záleží na našem měření. Zajímáme-li se o vlnové aspekty daného jevu, můžeme je demonstrovat, obdobně můžeme demonstrovat i částicové vlastnosti téhož jevu, ale nemůžeme oba aspekty demonstrovat najednou. Vlnová a kvantová teorie světla se vzájemně doplňují.

15.4 Relace neurčitosti

Skutečnost, že pohybující se těleso je nutno považovat za klubko složené z de Broglieho vln, napovídá, že existuje jistá hranice přesnosti, se kterou lze měřit jeho částicové vlastnosti. Můžeme přesněji určit buď jeho polohu, nebo jeho vlnovou délku (hybnost).

Mezi minimální neurčitostí při měření polohy a hybnosti platí vztah

$$\langle(\Delta p)^2\rangle\langle(\Delta x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \tag{6}$$

zvaný **relace neurčitosti**. Tato neurčitost je důsledkem vlnové povahy pohybujících se objektů, ne nedostatkem měřících přístrojů; ostatní přístrojové a statistické neurčitosti tento součin jen zvětšují.

V souvislosti kvantové mechaniky se relace neurčitosti dají odvodit jako vztah mezi dvěma navzájem nekomutujícími veličinami (platí pro střední kvadratické odchylky).

Podobný vztah jako mezi neurčitostí polohy a hybnosti platí i mezi neurčitostí energie a času.

Relace neurčitosti se dají použít pro různé odhady.

16 Formalizmus kvantové teorie

Vlnová funkce částic, hermitovské operátory a reprezentace měřitelných veličin. Schrödingerova rovnice.

16.1 Vlnová funkce

Veškerá informace o stavu částice je obsažena ve **vlnové funkci** $\psi(\vec{r}, t)$, vlnová funkce je obecně komplexní funkce závislá na čase a na souřadnicích, jejichž počet je roven počtu stupňů volnosti soustavy.

Vlnová funkce má být:

- jednoznačná
- konečná (většinou se požaduje kvadratická integrabilita)
- spojitá
- při konečných změnách potenciálu má mít spojité derivace.

Pokud se vlnové funkce liší pouze o násobení (komplexní) konstantou, odpovídají témuž stavu.

Vlnová funkce je pouze pomocný pojem; její fyzikální význam spočívá v tom (tzv. kodaňská nebo statistická interpretace), že její kvadrát je úměrný pravděpodobnosti nalezení částice v daném místě prostoru. Aby byl kvadrát vlnové funkce roven pravděpodobnosti, je třeba vlnovou funkci normovat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1 \tag{7}$$

Kvantová teorie je tedy teorie nelokální: pro popis experimentu je důležitá celá jeho geometrie, nedostáváme předpověď typu „Částice dopadne na místo určené polohovým vektorem $\vec{r}$.“, ale pouze pravděpodobnosti „Částice dopadne na místo určené polohovým vektorem $\vec{r}$ s pravděpodobností danou kvadrátem vlnové funkce.“

16.2 Měřitelné veličiny a hermitovské operátory

V kvantové teorii jsou veličiny charakterizovány lineárními operátory, speciálně měřitelným veličinám odpovídají **lineární hermitovské operátory**, tedy operátory $\hat{F}$ splňující podmínku

$$\int \psi^* \hat{F} \varphi \, \mathrm{d}\tau = \int \varphi \hat{F}^* \psi^* \, \mathrm{d}\tau, \tag{8}$$

kde ψ a φ jsou funkce závislé na proměnných, na něž působí operátor $\hat{F}$.

Jediné hodnoty dané fyzikální veličiny, které můžeme naměřit, jsou **vlastní čísla** operátoru této veličině přiřazeného (tzv. spektrum). Při měření přechází systém do stavu popsaného **vlastní funkcí** ψ příslušející změřené hodnotě. Podmínka na hermiticitu operátorů přiřazených měřitelným veličinám nám zaručuje reálné naměřené hodnoty (hermitovské operátory mají reálná vlastní čísla).

Pokud je systém v okamžiku měření popsán vlnovou funkcí ψ, bude výsledkem velkého množství měření kvantově mechanická střední hodnota

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau. \tag{9}$$

Není-li stav, ve kterém se systém nachází, vlastní stav, budou naměřené hodnoty různé. Vzhledem k tomu, že libovolnou funkci lze napsat jako lineární kombinaci vlastních funkcí

ψ_i (vlastní funkce hermitovského operátoru tvoří úplný ortogonální systém)

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i, \tag{10}$$

lze střední hodnotu měřeného operátoru napsat ve tvaru

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 F_i. \qquad (F_i \text{ jsou vlastní čísla}) \tag{11}$$

Koeficienty $|c_i|^2$ tedy lze interpretovat jako pravděpodobnosti naměření hodnoty F_i.

Dvěma základními operátory (v souřadnicové reprezentaci) jsou operátory polohy $\hat{r} = r$ a hybnosti $\hat{p} = -\imath\hbar\nabla$ částice. Chceme-li vyjádřit jinou veličinu, najdeme pro ni klasický výraz vyjádřený pomocí r a p a v tomto výrazu nahradíme souřadnici a impulz příslušným operátorem.

Pokud chceme změřit dvě různé veličiny $\hat{F}$ a $\hat{G}$ popisují tentýž stav systému, je nutné, aby navzájem komutovaly, tj. bylo splněno

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi \equiv (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\psi = 0 \tag{12}$$

pro každou funkci ψ (komutující operátory mají společný systém vlastních čísel). Například nelze změřit najednou souřadnici a impulz v témž směru (např. ve směru x), protože

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = \imath\hbar\delta_{ij}. \tag{13}$$

16.3 Schrödingerova rovnice

Základní rovnice kvantové mechaniky je **Schrödingerova rovnice** (SR)

$$\imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \tag{14}$$

kde $\hat{H}$ je hamiltonián systému. Pokud hamiltonián nezávisí explicitně na čase, je shodný s operátorem energie

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + \hat{U}(\vec{r}), \tag{15}$$

kde první člen zastupuje kinetickou energii a druhý člen energii potenciální.

Pokud hamiltonián nezávisí explicitně na čase, lze hledat řešení SR ve tvaru $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})U(t)$. Dosazením zjistíme, že vlnová funkce ψ musí splňovat tzv. **nečasovou SR**

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{16}$$

a časová evoluce je dána funkcí $\exp\left(\frac{1}{\imath\hbar}Et\right)$.

Po vyřešení SR dostaneme spektrum E_i a vlastní funkce ψ_i. Obecné řešení (tzv. vlnové klubko) je pak dáno jako

$$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 \psi_i \exp\left(\frac{1}{\imath\hbar}Et\right), \tag{17}$$

koeficienty c_i jsou dány počátečními podmínkami.

17 Aplikace kvantové mechaniky

Volný elektron a elektron v potenciálové jámě, tunelový jev. Harmonický oscilátor. Atom vodíku.

17.1 Volný elektron

Hamiltonián pro volný elektron obsahuje pouze kinetickou energii

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \tag{18}$$

a je tedy třeba řešit rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi. \tag{19}$$

Hledáme-li řešení ve tvaru $\psi = \mathrm{e}^{\imath kx}$, zjistíme, že

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{20}$$

Obecné řešení je pak dáno

$$\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{\imath kx}\,\mathrm{e}^{\frac{E}{\imath\hbar}t} = \exp\left[\frac{1}{\imath\hbar}(Et - px)\right] \tag{21}$$

Řešení má tvar rovinných vln. Vzhledem k tomu, že na vlnovou funkci nebyly kladeny žádné dodatečné podmínky, je spektrum spojité. Protože platí

$$|\Psi(x,t)|^2 = 1, \tag{22}$$

jsou všechna místa v prostoru stejně pravděpodobná a vlnová funkce je „zcela delokalizovaná v x-prostoru“ (což odpovídá představě rovinné vlny) a má ostrou hodnotu hybnosti $\hat{\vec{p}} = \hbar\hat{\vec{k}}$.

Vlastní funkce volné částice se nedá normovat tak, aby celkový integrál byl roven jedné. K normování této funkce se používají dva postupy:

- normování na Diracovu δ-funkci: $\int |A|^2 \exp\left(\frac{px}{\imath\hbar}\right) \mathrm{d}x = \delta(x)$
  $\Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$
- periodické okrajové podmínky: $\psi(x) = \psi(x+L) \quad \Rightarrow \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(\frac{p_n x}{\imath\hbar}\right)$,
  kde $p_n = n\frac{2\pi\hbar}{L}$, což vede k disktrétnímu spektru, ale při limitě $L \to \infty$ dostaneme původní spojité spektrum.

17.2 Elektron v potenciálové jámě

Uvažujeme-li elektron v pravoúhlé potenciálové jámě, bude mít hamiltonián tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x), \qquad \text{kde} \quad \hat{U}(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro} -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ U_0 & \text{jinde} \end{cases} \tag{23}$$

Je tedy nutné řešit rovnici

$$\begin{array}{ll} \frac{\mathrm{d}^2\psi_I}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi_I = 0 & \text{pro} \quad -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ \frac{\mathrm{d}^2\psi_{II}}{\mathrm{d}x^2} - \alpha^2\psi_{II} = 0 & \text{jinde,} \end{array} \tag{24}$$

kde bylo použito značení $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ a $\alpha^2 = \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$. Pokud počítáme energii ode dna potenciálové jámy, jsou všechny energie kladné; k je tedy reálné číslo. Vzhledem k tomu, že vyšetřujeme elektron v potenciálové jámě, jsou všechny energie menší než U_0, a i koeficient α je reálný.

Dále požadujeme, aby vlnová funkce v nekonečnu byla nulová, proto je v oblasti II brána do úvahy pouze klesající exponenciála

$$\psi_{II} = A\ \mathrm{e}^{-\alpha|x|} \tag{25}$$

a vzhledem k symetrii hamiltoniánu vzhledem k operaci inverze (tj. záměně $x \to -x$) má vlnová funkce v oblasti I tvar sinu nebo kosinu

$$\psi_I^{(+)} = B\cos kx, \quad \text{resp.} \quad \psi_I^{(-)} = C\sin kx \tag{26}$$

Dalším požadavkem na vlnovou funkci je hladkost, je tedy třeba napsat podmínky pro spojitost funkcí a jejich prvních derivací v bodě $\frac{a}{2}$. Dostaneme dvě rovnice o dvou neznámých A a B resp. A a C. Ve výsledné vlnové funkci potřebujeme jeden volný parametr, abychom ji mohli normovat - chceme tedy najít takové řešení, kdy se determinant soustavy rovná nule. Odtud dostaneme podmínku pro k (a tedy i „dovolené energie“):

$$\begin{aligned} ka &= (2n-1)\pi - 2\arcsin\tfrac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} && \text{pro kosinové funkce} \\ ka &= 2n\pi - 2\arcsin\tfrac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} && \text{pro sinové funkce} \end{aligned} \tag{27}$$

Řešením těchto transcendentních rovnic jsou k_n z intervalu $(0; \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar})$, přičemž vždy existuje alespoň jedna energetická hladina. Diskrétní energetické hladiny jsou pak dány vztahem

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \tag{28}$$

Speciálně pro případ nekonečné potenciálové jámy se transcendentní rovnice pro k_n zjednoduší a pro dovolené energie resp. vlnové funkce platí

$$E_n^{(\infty)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{29}$$

$$\psi_\infty^{(+)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi n}{a}x, \quad \text{resp.} \quad \psi_\infty^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x. \tag{30}$$

Hlavním rozdílem mezi klasickou a kvantovou mechanikou je nenulová (i když exponenciálně klesající) pravděpodobnost výskytu mimo potenciálovou jámu (tedy v oblasti I). Tedy i částice, která má nižší energii, než je vrchol potenciálové jámy, se může „protunelovat“ z jámy ven.

Studujeme-li případ potenciálového valu a částice, která má menší energii než je výška valu U_0, dostaneme analogicky jistou pravděpodobnost, že částice valem projde (tzv. **tunelový jev**). Pokud bychom spočítali koeficient propustnosti valu, dostaneme

Tunelovým jevem můžeme vysvětlit například α-rozpad, využívá se v tunelovacím mikroskopu.

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{U_0^2}{E(U_0-E)}\sinh^2(2k_i a), \qquad \text{kde} \quad k_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)}. \tag{31}$$

Tento vzorec se dá často zjednodušit (zanedbáme klesající exponenciálu v hyperbolickém sinu)

$$T = 16\frac{E(U_0-E)}{U_0^2}\,\mathrm{e}^{-4k_i a}; \tag{32}$$

pravděpodobnost průchodu tedy exponenciálně klesá se šířkou bariéry a energií $U_0 - E$.

17.3 Schrödingerova rovnice pro lineární harmonický oscilátor

Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{33}$$

Při řešení je vhodné si zavést bezrozměrné proměnné

$$\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}, \tag{34}$$

při jejichž použití budeme řešit SR ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \tag{35}$$

V nekonečnu můžeme řešení odhadnout funkcí $\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$, hledáme-li řešení ve tvaru $\psi = f(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$, dostaneme dosazením do SR diferenciální rovnici, jejímž řešením jsou Hermitovy polynomy. Vlnová funkce harmonického oscilátoru má tedy tvar

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}\, H_n(\xi)\, \mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}, \qquad H_n(\xi) = (-1)^n\, \mathrm{e}^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\, \mathrm{e}^{-\xi^2} \tag{36}$$

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2x \\ H_2 &= x^2 - \tfrac{1}{2} \end{aligned}$$

a energie nabývá hodnot

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad \text{pro} \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{37}$$

Vidíme, že oscilátor má ekvidistantní spektrum. Na rozdíl od klasické mechaniky neexistuje stav s nulovou energií, základní stav (n = 0) má energii $E = \frac{\hbar\omega}{2}$. (tzv. nulové kmity).

Zase existuje (na rozdíl od klasické mechaniky) nenulová pravděpodobnost výskytu mimo potenciál.

17.4 Anihilační a kreační operátory

Pokud nás zajímá pouze spektrum oscilátoru, nemusíme řešit diferenciální a rovnici a můžeme použít **kreační** a **anihilační operátory**.

Zavedeme-li anihilační $\hat{a}$ a kreační $\hat{a}^+$ operátory vztahy

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} - \imath\omega m\hat{x}), \quad \text{resp.} \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} + \imath\omega m\hat{x}), \tag{38}$$

můžeme napsat hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}. \tag{39}$$

Hamiltonián a výraz $\hat{a}^+\hat{a}$ spolu komutují, stačí tedy najít vlastní čísla výrazu $\hat{a}^+\hat{a}$.

K výpočtu bude ještě třeba komutační relace

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \tag{40}$$

Hledáme-li vlastní čísla, řešíme rovnici

$$\hat{a}^+\hat{a}\,|\psi\rangle = n\,|\psi\rangle. \tag{41}$$

Pokud na tuto rovnici zapůsobíme anihilačním operátorem

$$\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\,|\psi\rangle = (\hat{a}^+\hat{a} + 1)\hat{a}\,|\psi\rangle = n\hat{a}\,|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^+\hat{a}(\hat{a}\psi\rangle) = (n-1)(\hat{a}\,|\psi\rangle) \tag{42}$$

zjistíme, že vlnová funkce $\hat{a}|\psi\rangle$ je vlastní funkce příslušející vlastnímu číslu o jedno menší. Oscilátor má tedy ekvidistantní spektrum lišící se o jedničku. Podobným způsobem lze zjistit, že kreační operátor vytváří vlastní funkci příslušející vlastnímu číslu o jedna větší.

$$\hat{a}\,|\psi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\psi_{n-1}\rangle$$
$$\hat{a}^+|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle$$

Protože $\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle \hat{a}n|\hat{a}n\rangle \geq 0$, musí být i $n \geq 0$. Spektrum tedy můžeme psát ve tvaru

$$E_n \sim n + \frac{1}{2}. \tag{43}$$

Pomocí anihilačního operátoru lze najít i základní stav z rovnice:

$$\hat{a}\,|\psi_0\rangle \sim (\hat{p} - \imath\omega m\hat{x})\,|\psi_0\rangle = 0. \tag{44}$$

17.5 Atom vodíku

Chceme-li řešit atom vodíku, měli bychom napsat hamiltonián pro proton a pro elektron. Jedná se ale o problém dvou částic, který se dá rozseparovat na polohu těžiště a relativní vzdálenost částic. Vzhledem k tomu, že proton je řádově tisíckrát těžší než elektron, můžeme počítat se zafixovaným protonem, okolo kterého se pohybuje elektron (popř. elektron s redukovanou hmotností).

Hamiltonián eletronu v coulombovském poli protonu má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze'^2}{r}. \tag{45}$$

Vzhledem k radiální symetrii je vhodné řešit úlohu ve sférických souřadnicích. Pak bude mít hamiltonián tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{p}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{Ze'^2}{r}, \qquad \text{kde} \quad \hat{p}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) \tag{46}$$

Hamiltonián komutuje s $\hat{L}^2$ i s $\hat{L}_z$, vlastní funkce úhlové části tedy budou kulové funkce:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{\mathrm{lm}}(\vartheta, \varphi). \tag{47}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Y}_{00} &= \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \mathrm{Y}_{11} &= \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\,\mathrm{e}^{\imath\varphi} \\ \mathrm{Y}_{10} &= \sqrt{\tfrac{3}{4\pi}}\cos\vartheta \\ \mathrm{Y}_{1-1} &= \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\imath\varphi} \end{aligned}$$

Pro radiální část je tedy třeba řešit rovnici

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{p}_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze'^2}{r})R(r) = ER(r). \tag{48}$$

Jejím řešením jsou přidružené Laguerrovy polynomy násobené exponenciálou

$$R_{nl} = N_{nl}\,\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l \mathrm{L}_{\mathrm{n+l}}^{2\mathrm{l}+1}(\xi), \qquad \text{kde} \quad \xi = \frac{2Zr}{na_0}. \tag{49}$$

$$R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\,\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

Protože ve směru r uplatňujeme okrajovou podmínku ($\psi \to 0$ pro $r \to \infty$), dostaneme kvantování závislé na kvantovém čísle n:

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}\frac{e'^2}{a_0}, \qquad \text{kde} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me'^2} \quad n = 1, 2, \ldots. \tag{50}$$

Ke každému n přísluší stavy s kvantovými čísly $l = 0, 1, \ldots, (n-1)$ (označované písmeny s, p, d, f, g,...) a každý stav s daným l navíc může nabývat hodnot $m = -l, \ldots, l$; každý stav je tedy n^2-krát degenerovaný. Všechny ostatní atomy, ve kterých hraje roli i elektron-elektronová interakce, „náhodnou degeneraci“ (nezávislost energie na l) nemají.

Elektron v základním stavu atomu vodíku tedy obíhá okolo protonu ve vzdálenosti $a_0 \approx$ 50 pm a má energii $E_0 \approx 13,6$ eV. Tvar orbitalu je dán druhou mocninou příslušné kulové funkce. Při přechodech z excitovaných stavů do stavů nižších může vyzářit fotony o energii

$$E_f \sim \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \tag{51}$$

(tzv. **Ritzův kombinační princip**.) Známé série přechodů jsou Lymanova a Balmerova. Spektrum nad $E = 0$ je spojité.