



KVANTOVÁ MECHANIKA I.

JAN KLÍMA – BEDŘICH VELICKÝ

KAROLINUM

Kvantová mechanika I.

doc. RNDr. Jan Klíma, CSc.

prof. RNDr. Bedřich Velický, CSc.

Recenzovali:

prof. RNDr. Michal Lenc, Ph.D.

prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.

Vydala Univerzita Karlova v Praze

Nakladatelství Karolinum

Obálka Jan Šerých

Sazba studio Lacerta (www.sazba.cz)

Vydání první

© Univerzita Karlova v Praze, 2015

© Jan Klíma, Bedřich Velický, 2015

ISBN 978-80-246-2937-7

ISBN 978-80-246-2957-5 (online : pdf)



Univerzita Karlova v Praze
Nakladatelství Karolinum 2016

www.karolinum.cz
ebooks@karolinum.cz

OBSAH

Část první: Formální stavba kvantové mechaniky	13
---	-----------

I. Matematický aparát a principy kvantové mechaniky	15
1.1 Úvod	15
1.2 Reprezentace stavů a fyzikálních veličin	16
1.3 Matematické prostředky kvantové mechaniky	19
1.3.1 Hilbertův prostor. Ket vektory a bra vektory	19
1.3.2 Operátory. Vlastní vektory a vlastní čísla	21
1.4 Abstraktní Hilbertův prostor a Hilbertův prostor konkrétního systému	25
1.4.1 Systémy s klasickou analogií: kartézské souřadnice	27
1.4.2 Obecnější pohled na kanonické kvantování	31
1.4.3 Kvantování neklasických stupňů volnosti	34
1.4.4 Složené systémy; entanglement	35
1.5 Měření	39
1.5.1 Střední hodnoty	40
1.5.2 Projekční postulát	42
1.6 Teorie reprezentací	46
1.6.1 Maticová kvantová mechanika	46
1.6.2 Souřadnicová a impulsová reprezentace	48
1.7 Harmonický oscilátor	51
1.7.1 Oscilátor: systém mnoha tváří	51
1.7.2 Oscilátor v abstraktním Hilbertově prostoru	52
1.7.3 Energetická reprezentace	54
1.7.4 Oscilátor v souřadnicové a impulsové reprezentaci	55
1.8 Časová evoluce	58
1.8.1 Schrödingerova rovnice. Evoluce středních hodnot. Zákony zachování	58
1.8.2 Hamiltonián nezávislý na čase	64
1.8.3 Evoluční operátor	66
1.8.4 Schrödingerův a Heisenbergův obraz	74
1.9 Smíšené stavy a matice hustoty	79
1.9.1 Smíšené stavy izolovaného systému	79
1.9.2 Matice hustoty (stavový operátor)	81
1.9.3 Čisté a smíšené stavy	83
1.9.4 Unitární evoluce a redukce stavu měřením pro matice hustoty	84
1.9.5 Matice hustoty a formální schéma kvantové teorie	88
1.9.6 Zákony zachování, stacionární stavy	90
1.9.7 Entropie, kvantová statistika	97
1.9.8 Matice hustoty podsystemu. DekohERENCE	104
1.10 Soustavy mnoha částic	107

1.10.1 Princip totožnosti mikročástic	107
1.10.2 Reprezentace obsazovacích čísel	110
2. Relace neurčitosti	117
2.1 Robertsonův vztah	118
2.2 Heisenbergovy relace $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$	120
2.3 Relace neurčitosti pro moment hybnosti	127
2.4 Fáze kvantového oscilátoru a relace neurčitosti.	129
Část druhá: Jednoduché systémy, symetrie a spin	139
3. Volná částice	141
3.1 Stacionární a nestacionární řešení. Rozplývání klubka	141
3.2 Svazek volných částic jako vstupní stav pro experiment	154
3.3 Volná částice v neproměnném magnetickém poli	171
3.4 Aharonovův-Bohmův jev	179
4. Pohyb v centrálním poli a moment hybnosti	185
4.1 Úvod	185
4.2 Moment hybnosti v kvantové mechanice.	189
4.3 Maticová reprezentace momentu hybnosti	192
4.4 Souřadnicová reprezentace momentu hybnosti.	194
4.5 Jednoduché systémy se sférickou symetrií – radiální pohyb	196
4.6 Atom vodíku	201
4.6.1 Energetické hladiny a spektrum	201
4.6.2 Význam Keplerovy úlohy v kvantové teorii	209
4.6.3 Atom vodíku v magnetickém poli.	215
5. Symetrie	219
5.1 Zákony zachování	219
5.2 Homogenita času	222
5.3 Homogenita prostoru.	223
5.4 Izotropie prostoru	228
5.5 Grupa rotací	233
5.6 Skládání momentů hybnosti I	235
5.7 Grupa symetrie Schrödingerovy rovnice	240
6. Spin	245
6.1 Spinová hypotéza	245
6.2 Spinový formalismus	247
6.3 Spin ve vnějším poli. Spinová rezonance.	249
6.4 Rotace spinové funkce	254
6.5 Skládání momentů hybnosti II.	258

6.6	Korelace singletního dvouspinového stavu.	261
6.6.1	EPR paradox.	261
6.6.2	Bellova nerovnost.	264
7.	Diracova rovnice.	269
7.1	Úvod	270
7.2	Volná částice	272
7.3	Elektron ve vnějším poli. Pauliho rovnice	275
7.4	Korekce řádu $(v/c)^2$	278
7.5	Rovnice kontinuity a její nerelativistická limita	284
7.6	Hyperjemná interakce.	289
	Dodatek A: Atomové jednotky	295
	Dodatek B: Distribuce	298
B1	Tři zavedení δ -funkce	298
B2	Nevlastní vlastní funkce.	299
B3	Definice distribuce	301
B4	Základní vlastnosti temperovaných distribucí.	303
B5	Struktura prostoru temperovaných distribucí	305
B6	δ -funkce – shrnutí.	308
	Dodatek C: Lineární prostory kvantové mechaniky	311
C1	Vlnové funkce, stavové vektory, matice	311
C2	Unitární a Hilbertovy prostory	312
C3	Duální prostory, Diracova symbolika	317
C4	Lineární ohraničené operátory.	318
C5	Spektrální teorie operátorů v konečné dimenzi.	323
C6	Zvláštnosti nekonečné dimenze. Neohraničené operátory.	327
C7	Diskrétní a spojité spektrum.	331
C8	Možnosti přesného zavedení vlastních funkcí ve spojitém spektru	333
	Dodatek D: Operátorová algebra	339
D1	Lineární operátory na unitárních prostorech jako celek	339
D2	Funkce operátoru	340
D3	Komutující operátory	342
D4	Komutátor a antikomutátor	344
D5	Stopa operátoru	345
D6	Formule Bakerova-Cambellova-Hausdorffova.	349
	Literatura	352
	Rejstřík	353

Úvod

Kvantová teorie je historicky nejúspěšnější fyzikální teorií. Za téměř 90 let od svého vzniku dovolila popsat nebo dokonce předpovědět množství různorodých jevů o impozantní šíři: od fyziky „elementárních“ částic přes stavbu jádra až po chemické reakce a pohyb elektronů v integrovaných obvodech. Kvantová teorie také zásadním způsobem změnila fyzikální obraz světa, ze kterého fyzici – teoretici i experimentátoři – stejně jako pracovníci dalších přírodních věd musejí vycházet. Takovému významu odpovídá ve světové literatuře i rozsáhlá a stále narůstající knihovna učebnic kvantové teorie lišících se obtížností, rozsahem i pojetím. To platí i o její nejpočetnější podknihovně – učebnicích kvantové mechaniky, v nichž se nepoužívá kvantová teorie pole. Učebnice této úrovně pro mnohé studenty znamenají vrchol setkání s kvantovou teorií. K nim se řadí i tato kniha, psaná ovšem česky a doplňující určitou mezeru v české učebnicové literatuře.

Výběr učebnic kvantové mechaniky v češtině není totiž příliš rozsáhlý: pouze v knihovnách a antikvarátech můžeme nalézt starší překlady dvou učebnic, D. I. Blochinceva a A. S. Davydova¹. Dostupná, nyní již v druhém vydání, je tak především dvoudílná učebnice prof. J. Formánka², která svou náročností a celkovou koncepcí je určena hlavně teoretickým fyzikům. Konečně nedávná kniha prof. L. Skály³ je koncipována na bakalářské úrovni

1 Davydov, A. S.: *Kvantová mechanika*. Praha: SPN 1978; Blochincev, D. I.: *Základy kvantové mechaniky*. Praha: ČSAV 1956.

2 Formánek, J.: *Úvod do kvantové teorie I, II*. Praha: Academia 2004.

3 Skála L.: *Úvod do kvantové mechaniky*. Praha: Academia 2005; Praha: Nakladatelství Karolinum 2012.

studia fyziky a věnována moderně pojatému úvodu do kvantové teorie a řešení standardních základních úloh. Znalost základů kvantové fyziky v rozsahu této knihy je vhodným předpokladem ke studiu naší učebnice.

Tato kniha je primárně určena studentům magisterského studia fyziky, aplikované a technické fyziky, kteří se zaměřují na fyziku atomárních systémů a zabývají se tématy, jako je studium elektronových stavů v atomech, molekulách a pevných látkách, transportní jevy nebo interakce elektronů se zařízením. Výběr témat a rozsah jejich zpracování byl volen tak, že kniha může sloužit jako standardní učebnice pro výuku kvantové mechaniky v magisterském a zčásti i v doktorském studiu. Autoři se při psaní mohli opírat jednak o vlastní badatelskou praxi, jednak o mnohaleté zkušenosti s přednášením kvantové mechaniky na různých úrovních. Pro magisterské studium na Matematickofyzikální fakultě Univerzity Karlovy bylo určeno i naše dvoudílné skriptum Univerzity Karlovy *Kvantová teorie I, II*, dávno zcela rozebrané.¹ Na jeho praxi prověřeném půdorysu jsme stavěli, i když většina materiálu byla nově zpracována a rozšířena. Měli jsme přitom na mysli i druhé poslání knihy, jejíž středně pokročilá úroveň a styl výkladu jsou vhodné i pro „druhé čtení“ kurzu kvantové mechaniky zájemci z řad fyziků i absolventů dalších přírodovědných oborů nebo přírodovědně orientovaných oborů technických. Většina témat je proto vykládána o krok dále, než je v učebnicích kvantové mechaniky ustálené. Doplnkový materiál je často vložen do odstavců vymezených znaky **◆**. Poměrně rozsáhlý je i poznámkový aparát, jednak s věcnými dodatky, jednak s citacemi na monografie i původní práce tak, aby se k nim zájemce o daný problém mohl obrátit.

Výklady jsou vedeny explicitně, nic není odsunuto do úloh nebo cvičení. Zájemce o řešené úlohy z kvantové mechaniky se může obrátit na knihu jednoho z nás². Při psaní učebnice jsou autoři postaveni před dvě volby: mají se držet ustálených vzorů, nebo usilovat o originalitu? Naší snahou bylo sledovat „moderní pojetí“, ale neodchylovat se výrazně od standardu s cílem, aby kniha dovozovala bezproblémové navázání na odbornou literaturu. Podobné úvahy nás vedly také k tomu, abychom se důsledně drželi standardní interpretace, a to jak při výkladu postulátů kvantové mechaniky, tak i při studiu jednotlivých kvantových jevů. Do kvantové metafyziky se nepouštíme, pokud by se snad za to nemohl pokládat výklad von Neumannovy teorie měření (kap. 1, § 9.5) a teorie dekoherence (kap. 1, § 9.8), které jsou ovšem rovněž konzervativní. Také pokud jde o matematický aparát, snažili jsme se, aby použitá matematika nevybočovala příliš z ustálených zvyklostí učebnic kvantové mechaniky. Na druhé straně určité techniky funkcionální analýzy jsou běžně používány v současné fyzikální literatuře, a proto jsme pokládali za vhodné připojit v dodatcích stručný přehled temperovaných distribucí a některých pojmů funkcionální analýzy způsobem, který těsně navazuje na hlavní text a odvolává se na fyzikální motivaci.

V textu je důsledně používáno dvojích jednotek, jednak soustavy SI, jednak atomových jednotek, tedy jednotek, v nichž jsou náboj a hmotnost elektronu spojeny s (redukovanou) Planckovou konstantnou a permitivitou vakua vztahem: $e = 4\pi\epsilon_0 = \hbar = m_e = 1$. Otázce hodnot základních konstant a systému atomových jednotek je věnován první dodatek.

1 *Kvantová Mechanika I*. Univerzita Karlova 1985; 1992. *Kvantová Mechanika II*. Univerzita Karlova 1990, 1998.
2 Klíma, J., Šimurda, M.: *Sbírka problémů z kvantové teorie*. Praha: Academia 2006.

Vzhledem k širokému spektru probíraných témat je rozsah knihy značný, a proto jsme se rozhodli rozdělit ji na dva samostatné svazky. Předpokládáme, že čtenář jistý úvod do kvantové teorie již absolvoval (např. v rozsahu zmíněné učebnice prof. L. Skály). Kniha začíná poměrně rozsáhlým shrnutím formální stavby kvantové mechaniky a potřebného matematického aparátu, přičemž vykládané pojmy jsou ilustrovány řešením vybraných problémů pohybu jedné částice v časově neproměnných vnějších polích (kap. 1–3). Tato část obsahuje i ne zcela standardní partie, jako jsou výklad Aharonova-Bohmova jevu, výpočet kontrastu v kvantovém interferometru a úvod do teorie dekoherence.

Výklad pohybu v centrálním poli, symetrie a spinu (kap. 4–6) je jistým prohloubením standardních postupů – spektrum atomu vodíku je odvozeno bezreprezentačně, teorie symetrie obsahuje elementy teorie grup a jejich reprezentací a v rámci výkladu spinu je propočítána spinová rezonance a diskutován EPR paradox a Bellova nerovnost. Spin je pak zaveden znovu při výkladu Diracovy rovnice (kap. 7) a znovu ilustrován výpočtem hyperjemného rozštěpení základního stavu atomu vodíku.

Technické partie – variační princip, poruchový počet nečasový i časový (kap. 8–9) jsou ilustrovány jejich aplikací na výpočty atomových a molekulárních energetických hladin (kap. 10) a výkladem semiklasické a kvantové teorie interakce atomu se zářením (kap. 11).

Velká pozornost je věnována řešení mnohačasticového problému v kvantové mechanice (kap. 10 a 11), který hraje zásadní roli při všech výpočtech složitějších systémů. Jak „brute force method“, tak „mean field method“ jsou podrobně diskutovány. Prvá z nich výpočty hladin atomu helia a vodíkové molekuly, druhá Hartreeho-Fockovou teorii a její aplikací na systematiku atomových hladin. Celá jedna kapitola (kap. 11) je věnována výpočtům celkových energií a problému korelace metodou funkcionálu hustoty (DFT), která po prvotních úspěších při použití v rozlehlých systémech se stala i přední metodou kvantové chemie.

Naproti tomu teorie rozptylu (kap. 12), se omezuje na elastický rozptyl.¹ O to podrobněji je vykládán rozptyl na sféricky symetrickém potenciálu mající četné aplikace v teorii kondenzovaných soustav.

Interakce s elektromagnetickým zářením (kap. 13) je vykládána na dvou úrovních – jako semiklasická (absorpce a emise záření, Kubova formule) i plně kvantová (chaotické a koherentní záření, jednofotonové a dvoufotonové procesy). Kvantová teorie záření je ilustrována podrobným řešením interakce záření s dvouhladinovým atomem, v jehož rámci je (nerelativisticky) počítán i Lambův posuv.

Jak už bylo uvedeno, kniha obsahuje řadu matematických dodatků vysvětlujících základy teorie distribucí, vlastnosti prostorů kvantové mechaniky, zavedení zobecněných vlastních funkcí, operátorový počet a další základní pojmy funkcionální analýzy.

Jan Klíma, Bedřich Velický

Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova v Praze
Praha, 2008–2014

1 Teorie rozptylu v mnohem širším rozsahu je podrobně vykládána v dříve citované učebnici J. Formánka.

Poděkování:

Autoři děkují Mgr. M. Hájkovi, Ph.D., Mgr. Pavolu Habudovi z MFF UK za pomoc při kreslení obrázků a svým kolegům RNDr. Tomáši Novotnému, RNDr. R. Sýkorovi a doc. I. Turkovi, DSc., za kritické přečtení vybraných kapitol.

ČÁST PRVNÍ – FORMÁLNÍ STAVBA KVANTOVÉ MECHANIKY

Matematický aparát a principy kvantové mechaniky

I.1 ÚVOD

I když v této knize budujeme formální aparát kvantové teorie systematicky a od začátku, předpokládáme, že čtenář je již obeznámen s historií vzniku a úvodní formulací kvantové mechaniky a pojmy jako vlnová funkce, relace neurčitosti, časová a nečasová Schrödingerova rovnice jsou mu známé – přinejmenším v případě pohybu jedné částice v jedné dimenzi. Jak je v pokročilejších učebnicích kvantové mechaniky obvyklé, shrnujeme proto formalismus do několika postulátů, které ilustrujeme příklady. Na druhé straně nám nejde o axiomatiku kvantové mechaniky a postuláty jsou vysloveny tak, aby jejich znění bylo srozumitelné širokému okruhu čtenářů s minimální průpravou základů kvantové mechaniky a matematiky.

I tak je kvantová mechanika po matematické stránce obtížná a používaný aparát přesahuje běžné matematické vzdělání fyziků, přinejmenším v době, kdy je jim obsáhlejší kurs kvantové teorie běžně přednášen. Proto jsme do textu – jak je rovněž zvykem – zařadili i stručné shrnutí používaného matematického aparátu, § 3. Zařadili jsme ho za prvé dva postuláty, z nichž vyplývá, které pojmy lineární algebry a funkcionální analýzy (zejména vlastnosti Hilbertova prostoru) se dostaly do kvantověmechanického popisu přírodních zákonů. Exaktnější výklad použité matematiky (lineárních prostorů, otázek konvergence v nekonečně rozměrných prostorech, vlastností operátorů, základů teorie distribucí apod.) je pak obsahem matematických dodatků B–D.