

The background is a dark blue gradient with a pattern of faint, light blue concentric circles and arcs. Some of these arcs are marked with degree values, such as 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200, 210, 220, 230, 240, 250, and 260. There are also small white dots scattered across the background, resembling a starry sky or a technical diagram.

POČÁTKY KVANTOVÉ MECHANIKY

MILOSLAV DUŠEK

PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

První podoba kvantové teorie se začala rodit jako reakce na vážné problémy, se kterými se setkala klasická fyzika při snaze o vysvětlení některých experimentálních fakt:

- Spektrum tepelného záření
- Fotoelektrický jev
- Čárová spektra atomů
- Měrné teplo při nízkých teplotách

Sledování historického vývoje kterékoli oblasti fyziky je nejen vzrušující, ale určitě i užitečná věc, neboť **metoda může mít pro práci fyzika někdy i větší význam než nahromaděné výsledky.**

SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

Gustav Robert Kirchhoff (1824-1887)

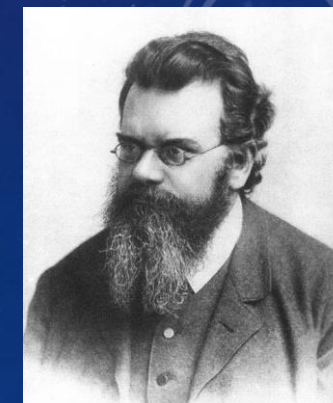
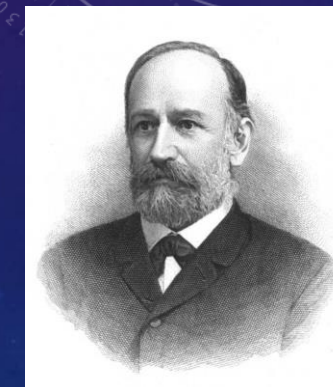
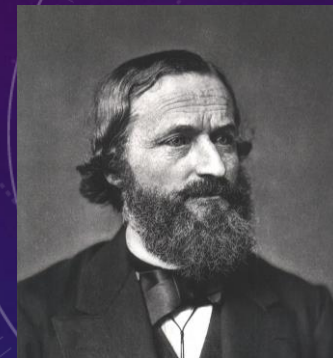
- Studium sluneční atmosféry (chemické složení, spektrum světla ze slunce).
- Studium energetické bilance pohlceného a vyzářeného světla.
- Absolutně černé těleso - absorbuje všechno dopadající záření.

Josef Stefan (1835-1893)

- Energie vyzářená z jednotkové plochy černého tělesa do jednotkového prostorového úhlu je úměrná čtvrté mocnině absolutní teploty tělesa (1879, z experimentálních dat).

Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906)

- Teoretický důkaz - cyklický děj s pohyblivým zrcadlem (1884).
(Jednodušší důkaz podal později Planck.)



SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

Wilhelm Wien (1864-1928)

- Myšlenkový pokus s adiabaticky se smršťující zrcadlovou koulí (1894).

- Hustota energie uvnitř dutiny o teplotě T :

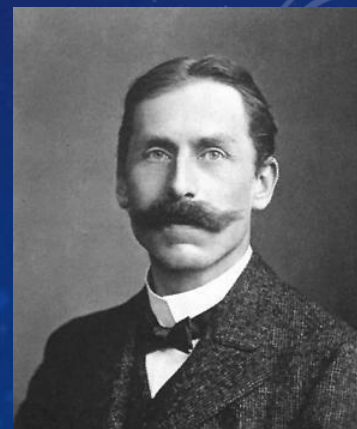
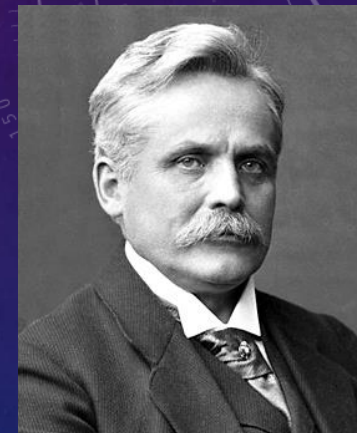
$$\mu_\nu = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

- Pokud amplitudy a frekvence záření jsou funkcemi pouze rychlosti vyzařujících molekuly a pokud se rychlosti molekul řídí Maxwellovým-Boltzmannovým rozdělením, pak (1896):

$$\mu_\nu = c_1 \nu^3 \exp\left(-c_2 \frac{\nu}{T}\right)$$

Friedrich Paschen (1865-1947)

- Experiment (1897) – dobrá shoda s Wienovým vzorcem.



SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

Otto Richard Lummer (1860-1925)

Ernst Pringsheim (1859-1917)

- Experimenty (1899) - odchylky u nízkých frekvencí záření (u dlouhých vlnových délek 10 – 20 μm).

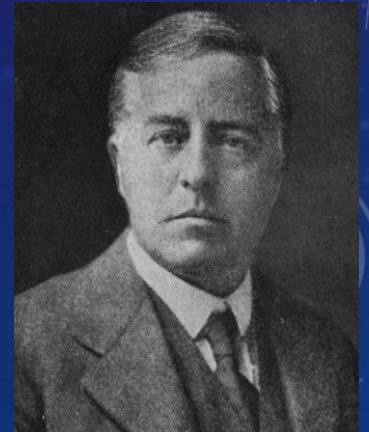
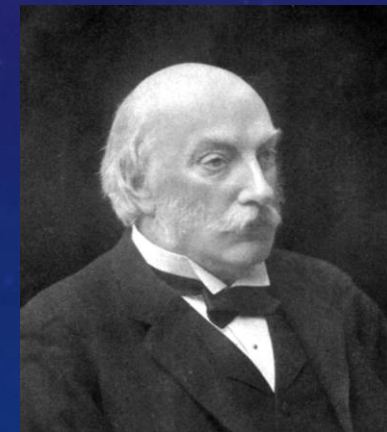
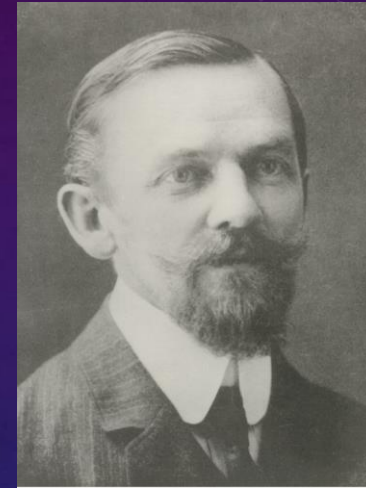
Lord Rayleigh (1842-1919)

James Hopwood Jeans (1877-1946) – malá oprava

- Aplikace ekvipartičního teorému na mody záření v krabici (1900, 1905):

$$\mu_\nu = 8\pi\nu^2 \frac{kT}{c^3}$$

- Dobře popisuje experimentálně zjištěný tvar spektra pro malé frekvence záření.

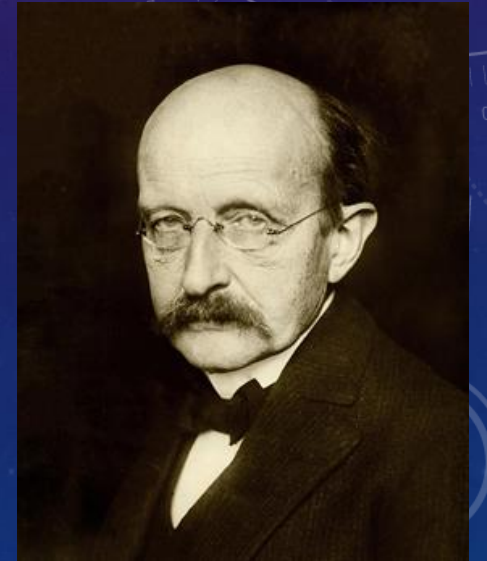


SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

- Rayleighova-Jeansova formule – s rostoucím kmitočtem se však odchylka od experimentálních dat zvětšuje.
- Spektrální hustota energie záření se s rostoucí frekvencí zvětšuje - divergence integrálu určujícího celkovou energii záření – tzv. **ultrafialová katastrofa**.

Max Planck (1858-1947)

- Snaha o sjednocení Wienova a Rayleighova-Jeansova vztahu (grant od plynáren?).
- Zdrojem záření je harmonický oscilátor o střední energii U .
V rovnováze:
$$\mu_\nu = \epsilon \nu^2 U$$
- Byl přesvědčen o síle termodynamiky.



M. Planck, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **2**, 202 (1900)

M. Planck, Annalen der Physik **1**, 69 (1900)

SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

Z termodynamiky: $\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V = \frac{1}{T}$

Ze vztahů pro μ_ν vyjádřil $1/T$

Pro Wienův zákon: $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} = \frac{c}{U}$

Pro Rayleighův-Jeansův zákon: $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} = \frac{c}{U^2}$

Planck postulovat „hybridní“ vztah: $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} = \frac{c_1}{U(U + c_2)}$

Malé U – Wienův zákon

Velké U – Rayleighův-Jeansův zákon

Integrací: $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U} = c_1 \ln \frac{U + c_2}{U}$

(zde konstanty vzhledem k U mohou být funkcemi ν)

Srovnáním se vztahem $\mu_\nu = \nu^3 F\left(\frac{\nu}{T}\right)$, který platí pro

oba případy, a s využitím $\mu_\nu = c \nu^2 U$

dostal:

$$\mu_\nu = \frac{c_1 \nu^3}{\exp(c_2 \nu / T) - 1}.$$

SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

- Ukázalo se, že uvedená formule, publikovaná Planckem v roce 1900, popisuje dobře tvar spektra záření absolutně černého tělesa, zjištěný v experimentech, pro všechny teploty a frekvence.
- **Ale jaký má tento vzorec fyzikální smysl?**
- Planck zkusil přejít od termodynamiky k Boltzmannově pravděpodobnostní koncepci.
- Postuloval entropii N oscilátorů jako: $S_N = k \ln W$
kde W je počet stavů systému při dané energii $U_N = NU$ a k je Boltzmannova konstanta.
- Kdyby se energie oscilátoru mohla měnit spojitě, byl by počet možných konfigurací, které by vedly ke stejné celkové energii, nekonečný. **Proto Planck přijal předpoklad, že energie se skládá z „elementů energie“ ε .** Celková energie všech N oscilátorů je celočíselným násobkem P těchto elementů: $U_N = P\varepsilon$
- Počet W všech možných způsobů, jak rozdělit P elementů energie mezi N oscilátorů:

$$W = \frac{(N + P - 1)!}{(N - 1)! P!}$$



SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

- S využitím Stirlingovy formule $n! \cong \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n$ lze entropii jednoho oscilátoru aproximovat výrazem:

$$S = \frac{S_N}{N} = k \left[\left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{U}{\varepsilon}\right) - \frac{U}{\varepsilon} \ln \frac{U}{\varepsilon} \right]$$

- Nyní Planck opět spočítal derivaci entropie S podle U , která se rovná $1/T$, z ní vyjádřil střední energii oscilátoru U a následně i hustotu energie elektromagnetického záření μ_ν .
- Dostal výraz, který se ztotožní s „termodynamickým“ vzorcem, pokud element energie ε závisí na frekvenci následujícím způsobem: $\varepsilon = h\nu$

$$\mu_\nu = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$$

- **Energie se předává v kvantech $h\nu$**

SPEKTRUM TEPELNÉHO ZÁŘENÍ

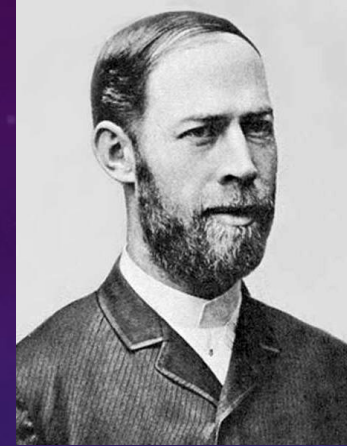
Albert Einstein nastolil otázku platnosti Maxwellovy elektrodynamiky. Planck použil představu spojitého vyzařování, ale pak ji de facto popřel. Einstein uvažoval, že maxwellovská elektrodynamika pracuje ve skutečnosti se středními hodnotami.

Einstein (na rozdíl od mnoha kolegů) uvažoval o univerzalitě kvantování (nejen výměna energie, ale kvantování energie záření a např. i kmitů atomů).

Kvantování a statistická fyzika:

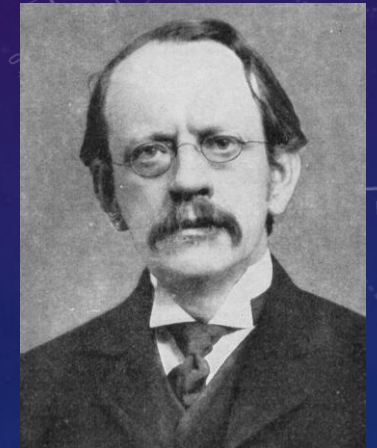
- Rayleighův-Jeansův zákon – spojité rozdělení energie harmonického oscilátoru – klasický ekvipartiční teorém. (Planckův zákon v limitě $h \rightarrow 0$).
- Planckův zákon – kvantování energie oscilátoru – Boseovo-Einsteinovo rozdělení.

FOTOELEKTRICKÝ JEV



Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894)

- Všiml si, že osvětlí-li katodu ultrafialovým světlem (např. zábleskem jiné jiskry), zvětší se délka jiskry (1887).
- Další experimenty. Pozornost se začala zaměřovat na identifikaci nositelů proudu. Zřejmě to nebyly molekuly ionizovaného plynu (jev nezávisel na tlaku).

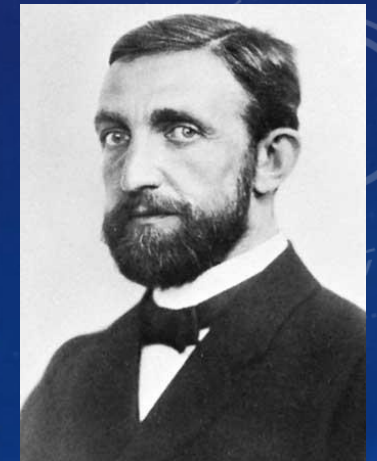


Sir Joseph John Thomson (1856-1940)

- Měření poměru náboje a hmotnosti (1897) – katodové záření (elektrony).

Philipp Eduard Anton Lenard (1862-1947)

- Další experimenty



FOTOELEKTRICKÝ JEV

Shrnutí empirických poznatků:

- Existuje dolní mezní frekvence ν_0 .
K uvolňování nosičů náboje dochází pouze, je-li frekvence dopadajícího záření větší než ν_0 .
Hodnota mezní frekvence ν_0 závisí na materiálu katody.
- Proud (počet elektronů emitovaných za jednotku času) je úměrný intenzitě dopadajícího světla, ne jeho frekvenci.
- Energie (rychlost) emitovaných elektronů je úměrná frekvenci dopadajícího světla, ne jeho intenzitě.

FOTOELEKTRICKÝ JEV

Albert Einstein (1879-1955)

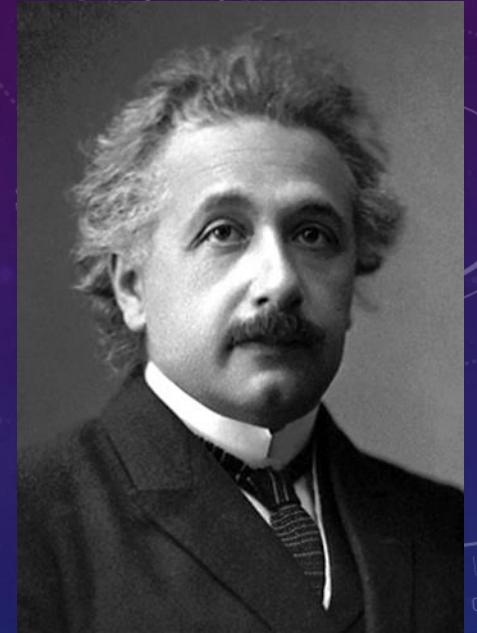
- V r. 1905 publikoval práci, v níž se zabýval rozбором případu monochromatického záření v oblasti hodnot ν/T vyhovujících Wienovu zákonu.
V ní mimo jiné navrhl kvantové vysvětlení fotoelektrického jevu.
- Einstein došel k závěru, že ačkoli má světlo i vlnové vlastnosti, je zároveň také kvantované – sestává z kvant energie $h\nu$. Tato kvanta se také předávají při interakci světla s látkou, např. při absorpci.

$$E_{\text{el}} = h\nu - E_0$$

E_0 je *výstupní práce* potřebná pro uvolnění elektronu z materiálu ($E_0 = h\nu_0$).

A. Einstein, *Annalen der Physik* **17**, 132 (1905)

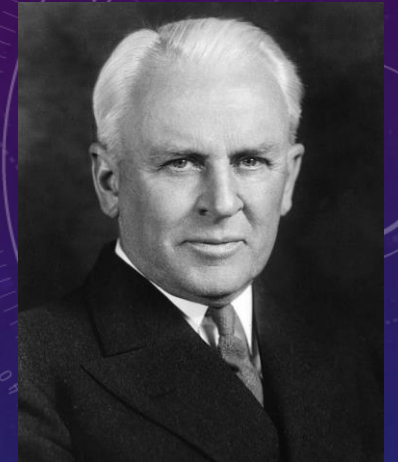
- Einstein zavedl termín *světelné kvantum*. Pojem *foton* pravděpodobně poprvé použil **Arthur Compton** (snad kolem roku 1923). K rozšíření tohoto termínu došlo až po roce 1926 (na návrh **Gilberta Newtona Lewise**).



FOTOELEKTRICKÝ JEV

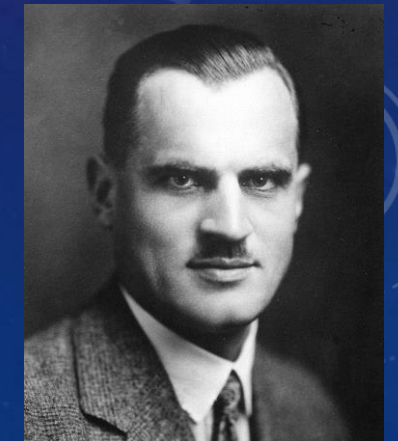
Robert Andrews Millikan (1868-1953)

- Experimentální potvrzení Einsteinovy teorie fotoefektu (1908-1916).
- Byl Einsteinovým oponentem a zpočátku mu šlo spíše o to ukázat, že se Einstein mýlí.
- Určoval kinetickou energii elektronu na základě velikosti přikládaného brzdného potenciálu. Platnost Einsteinova vztahu ověřil s vysokou přesností.
- Určil také dosti přesnou hodnotu Planckovy konstanty a potvrdil, že se shoduje s hodnotou vystupující v Planckově zákoně záření černého tělesa.



Arthur Holly Compton (1892-1962)

Představa „částic“ světla vedla k hypotéze, že světelné kvantum „nese“ také hybnost. Tato hypotéza byla experimentálně potvrzena Comptonem v roce 1922.



MĚRNÉ TEPLA PŘI NÍZKÝCH TEPLITÁCH

- Klasická teorie měrného tepla se zdála být fyzikálně jasnou a při „rozumných“ teplotách i experimentálně úspěšnou teorií.
- Vychází z ekvipartičního teorému: Každému kvadratickému členu v hamiltoniánu kmitající částice látky (o teplotě T) náleží střední energie $\frac{1}{2}kT$, kde k je Boltzmannova konstanta.
- Vnitřní energie jednoho molu látky: $E = 3RT$, kde $R = kN_A$ je univerzální plynová konstanta.
- Molární měrné teplo:

$$c_v = \frac{dE}{dT} = 3R$$

MĚRNÉ TEPLA PŘI NÍZKÝCH TEPLOTÁCH

Heinrich Friedrich Weber (1843-1912)

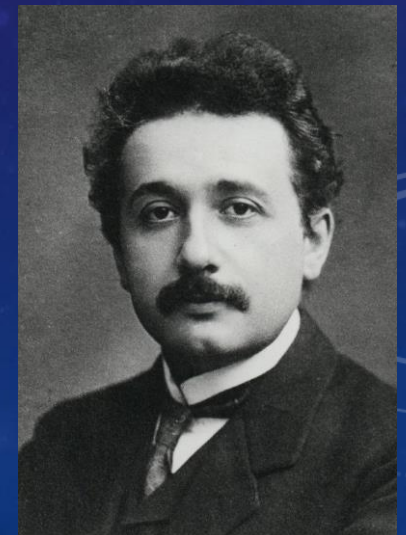
- V roce 1872 měřil měrné teplo diamantu.
- Objevil, že při teplotách kolem -50 °C docela významně klesá.

U. Behn

- V roce 1898 vyslovil domněnku, že s teplotou klesající k absolutní nule měrné teplo klesá také k nule.
- Experimenty, které následovaly, to potvrzovaly.

Albert Einstein

V roce 1907 problém měrného tepla v podstatě vyřešil.



A. Einstein, Annalen der Physik **22**, 180 (1907)

MĚRNÉ TEPLA PŘI NÍZKÝCH TEPLOTÁCH

- Aplikoval Planckovu kvantovou hypotézu na kmity částic látky.
- Pro jednoduchost se omezil na jedinou frekvenci kmitů ν .
- Vnitřní energie jednoho molu látky:

$$E = \frac{3Nh\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}$$

kde N je Avogadrovo číslo a h je Planckova konstanta.

- Odtud pro molární měrné teplo plyne vztah ($R=kN$):

$$c_v = \frac{3R \left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 \exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right]^2}$$

- Pro velké T se blíží $3R$ (klasická teorie).
- Pro malé T se blíží nule.

MĚRNÉ TEPLLO PŘI NÍZKÝCH TEPLITÁCH

- Einsteinův vzorec kvalitativně odpovídal experimentálním datům pro krystalické látky.
- Pouze u velmi nízkých teplot se objevily malé odchylky, způsobené tím, že ve skutečnosti atomy či molekuly látky kmitají na mnoha různých frekvencích (ne pouze na jedné).

Peter J. W. Debye (1884-1966)

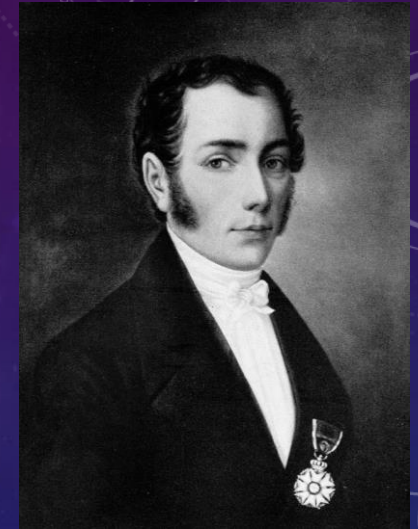
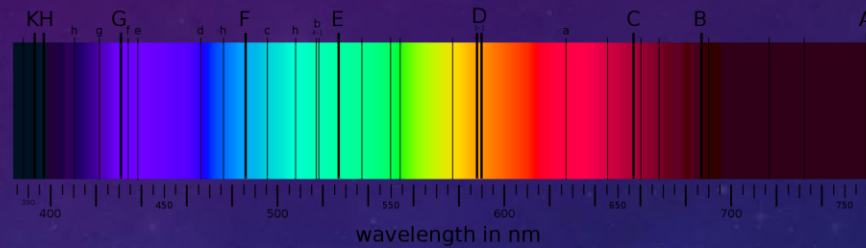
- V roce 1912 vypracoval zobecněný model, který uvažoval spojitě, avšak shora omezené spektrum frekvencí.
- Shoda s experimentem ($c_v \approx T^3$, pro $T \rightarrow 0$).



ČÁROVÁ SPEKTRA ATOMŮ

Joseph von Fraunhofer (1787-1826)

- V roce 1814 objevil absorpční čáry ve spektru slunce
- Proč je nepozoroval už Newton?



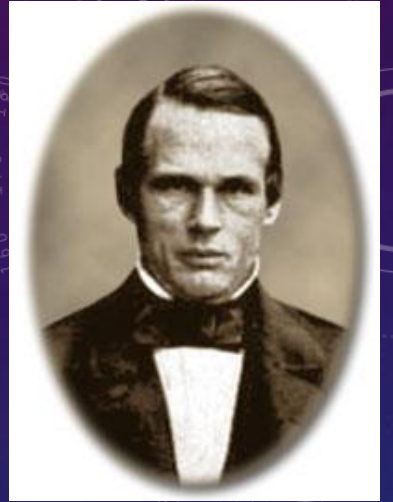
Koncem 19. století nabyli fyzikové přesvědčení, že zde musí být nějaká souvislost s kmity molekul či atomů.

- Vzájemné poměry vlnových délek určitých skupin čar vedly k domněnce, že by mohlo jít o některé vyšší harmonické odpovídající jednomu vibračnímu pohybu molekuly. Potíží bylo, že mnoho dalších „vyšších harmonických“ prostě chybělo.
- Hledání empirického vztahu.

ČÁROVÁ SPEKTRA ATOMŮ

Anders Jonas Ångström (1814-1874)

- Důkladně proměřil více než 1000 spektrálních čar ve slunečním spektru.
- Zkoumal spektrum vodíku.



Johann Jakob Balmer (1825-1898)

- Učitel na dívčí škole v Basileji.
- V roce 1885 zjistil, že vlnové délky spektrálních čar vodíku změřených Ångströmem lze vyjádřit vzorcem:

$$\lambda = c \frac{m^2}{m^2 - 2^2}, \quad \text{kde } m = 3, 4, 5, 6.$$

- Úspěch této formule spustil lavinu „kabaly“. Balmerův vzorec byl postupně zobecňován (mezi jinými např. Johannesem Rydbergem).



MODELY ATOMU

K vysvětlení čárových spekter je třeba mít fyzikální modely atomu.

Planetární modely atomu:

- Objevily se po objevu elektronu a objevu radioaktivního rozpadu.
- Kladně nabité jádro je obletováno elektrony kompenzujícími jeho náboj.
- Očekávalo se, že frekvence orbitálního pohybu elektronů budou odpovídat frekvencím emisních spektrálních čar.
- Tyto modely se potýkaly s problémem stability atomu (zrychleně se pohybující elektron vyzařuje a ztrácí energii). [Různé exotické modely se neúspěšně snažily najít dynamickou stabilitu – jako např. ‘saturnovský’ model (Nagaoka).]

MODELÝ ATOMU

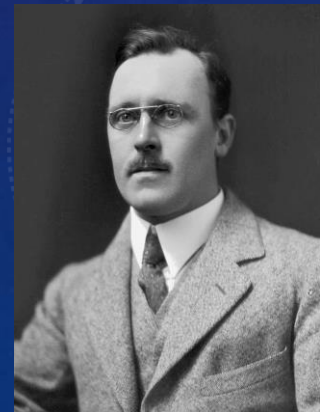
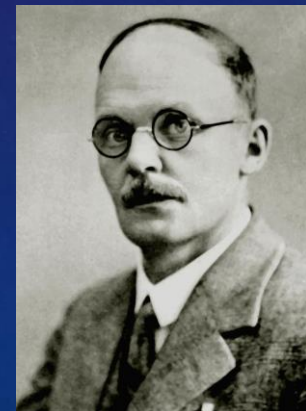
Sir Joseph John Thomson (1856-1940)

- Objevitel elektronu
- V roce 1903 navrhl model atomu sestávající z kladně nabitě koule (jakéhosi „melounu“), uvnitř které jsou, jako rozinky v pudingu, rozmístěny kmitající elektrony.
[Pokusy o kvantování oscilací elektronu.]
- Bohužel Thomsonův model nebyl schopen vysvětlit velké úhlové odklony pozorované při experimentech s rozptylem α -částic.



Hans Geiger (1882-1945), Ernest Marsden (1889-1970)

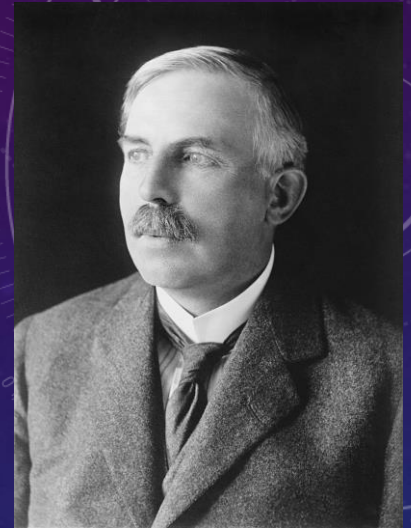
- Ostřelovali α -částicemi tenké kovové fólie (výsledky publikovali v roce 1909).
- Velké úhlové odklony (až 150° vzhledem k původnímu svazku) poukazovaly spíše na existenci velmi malého kladně nabitého jádra.



MODELY ATOMU

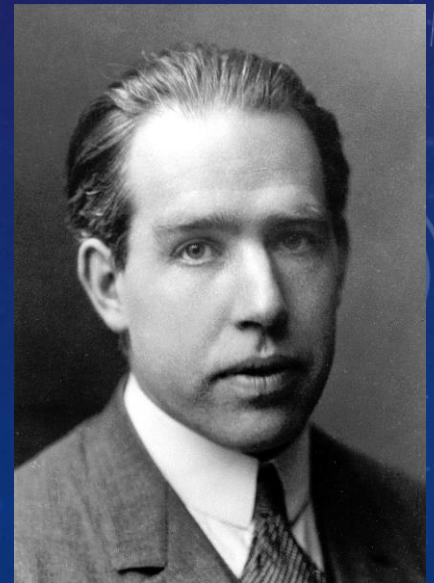
Ernest Rutherford (1871-1937)

- S ohledem na výsledky rozptylových experimentů se v roce 1911 vrátil k modelu atomu s malým kladně nabitým jádrem nějakým způsobem obklopeným elektrony.
- Podle něj je většina hmoty atomu soustředěna v jádru, které je velmi malé vzhledem k rozměrům celého atomu.



Niels Bohr (1885-1962)

- V roce 1913 vytvořil model atomu, který byl prvním krokem ke kvantovému popisu atomů v dnešním slova smyslu.
- Bohr byl výrazně ovlivněn Balmerovým vzorcem.



MODELY ATOMU

- Bohr v podstatě přijal planetární model atomu, ale prohlásil, že pouze některé orbity jsou povolené.
- Na nich elektron nezáří, může ale „přeskočit“ na jinou oběžnou dráhu za současného vyzáření (absorbování) kvanta energie.
- Omezení možných trajektorií elektronu vyplynulo jako důsledek kvantování jeho momentu hybnosti:

$$J = n \frac{h}{2\pi}$$

- Energie E elektronu v poli jádra pak závisela na n následujícím způsobem: $E \propto \frac{1}{n^2}$

Ani Bohrov model však nebyl dokonalý. Byl použitelný pouze pro jednoelektronové systémy (jako je atom vodíku) – pro více elektronové atomy selhával. Odchytky se ale našly i u atomu vodíku a neodstranily je ani pozdější korekce na konečnou hmotnost jádra a relativistickou změnu hmotnosti elektronu.

MODELY ATOMU

■ Příklad: Bohrov model atomu

Budeme pro jednoduchost předpokládat kruhové oběžné dráhy elektronů. V takovém případě má rovnováha odstředivé síly elektronu a přitažlivé coulombovské síly tvar

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2},$$

kde r je poloměr dráhy elektronu, v jeho rychlost, e značí náboj a m hmotnost elektronu, ϵ_0 je permitivita vakua.

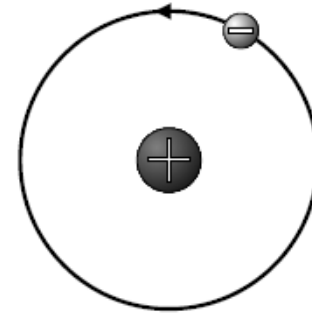
Bohrovo kvantování momentu hybnosti je dáno vztahem:

$$J = mvr = n \frac{h}{2\pi}.$$

Z uvedených dvou rovnic lze vypočítat rychlost elektronu v a poloměr dráhy r (pro pevné n). Pomocí těchto dvou veličin je pak již snadné určit celkovou energii elektronu pohybujícího se v poli jádra:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}.$$

□



MODELY ATOMU

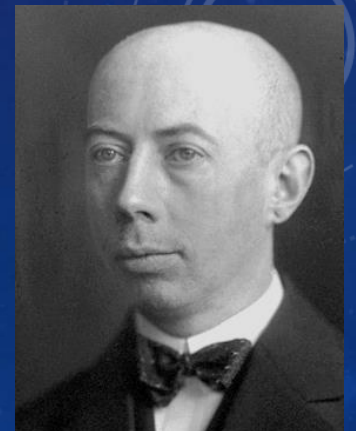
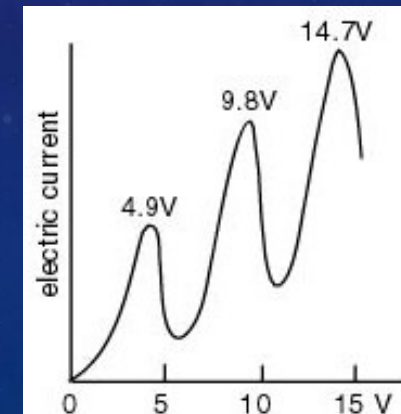
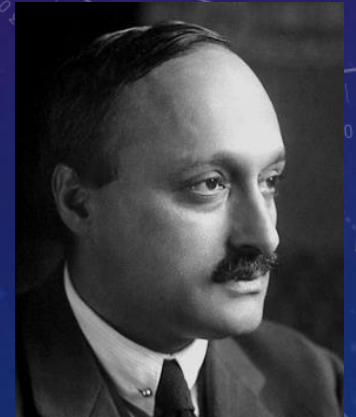
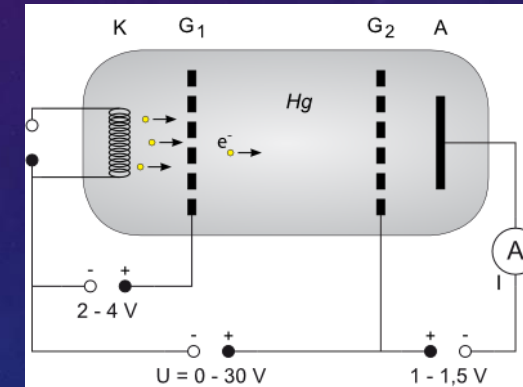
Arnold Sommerfeld (1868-1951)

- Zdokonalil Bohrovův model přidáním dalších dvou kvantovacích podmínek (pro r a ϑ).



James Franck (1882-1964) , Gustav Ludwig Hertz (1887-1975)

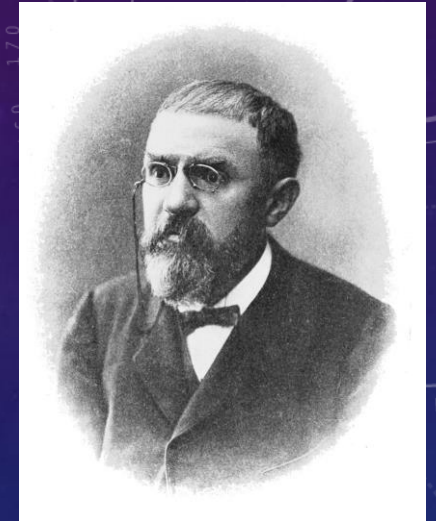
- Důležité experimentální potvrzení Bohrova modelu: Franckův-Hertzův pokus (1914)
- Při srážce s atomem rtuti může elektron ztratit pouze určité množství své kinetické energie (4,9 eV). Pomalejší elektrony se pouze odrážejí, aniž by ztratily významnou část kinetické energie.
- Letící elektrony předávají energii elektronům v atomu rtuti. Krátce po srážce se energie uvolní jako ultrafialové záření o vlnové délce 254 nm (přechod mezi dvěma nejnižšími hladinami).



STARÁ KVANTOVÁ MECHANIKA

Základním fyzikálním problémem tehdy byla otázka, jak rozšířit kvantovací podmínky i na fyzikální systémy s více než jedním stupněm volnosti.

Tento problém nastolil na prvním Solvayském kongresu v roce 1911
Jules Henri Poincaré (1854-1912)



O jeho řešení se postarali hlavně **Max Planck** a **Arnold Sommerfeld**

- Sommerfeld se zaměřil především na zdokonalení Bohrova modelu atomu.
- Ukázal, že Bohrovo kvantování momentu hybnosti lze vyjádřit ve tvaru:

$$\oint p_{\varphi} d\varphi = nh,$$

- Kde p_{φ} je zobecněná hybnost (zde moment hybnosti) odpovídající zobecněné souřadnici φ (zde azimutální úhel).

STARÁ KVANTOVÁ MECHANIKA

- Uvedený výraz Sommerfeld zobecnil pro periodické systémy s f stupni volnosti.
- Postuloval, že fázový integrál pro každou souřadnici musí být celým násobkem Planckovy konstanty h :

$$\oint p_k dq_k = n_k h, \quad k = 1, 2, \dots, f,$$

- Tehdejší představa byla víceméně taková, že výměna energie mezi systémy probíhá diskrétním způsobem, zatímco vývoj systému v „mezidobí“ se řídí hamiltonovskou dynamikou.
- Stará kvantová mechanika byla souborem hypotéz představujících směs klasické fyziky a kvantovacích podmínek.
- Vždy bylo třeba začít s klasickým řešením problému: Volbou vhodných zobecněných souřadnic a nalezením (uzavřených) trajektorií. Potom se aplikovaly kvantovací podmínky.
- Není tedy divu, že Sommerfeldovi studenti používali označení „*atomystika*“.

STARÁ KVANTOVÁ MECHANIKA

■ Příklad: Kvantování energie harmonického oscilátoru

Celková energie oscilátoru je

$$\underbrace{\frac{1}{2m} p^2}_{\text{kinet.}} + \underbrace{\frac{k}{2} x^2}_{\text{potenc.}} = \text{const} = E$$

(m je hmotnost, p hybnost, x souřadnice, k konstanta charakterizující „tuhost pružiny“ a F síla). Klasickým řešením pohybových rovnic pro různé energie E jsou elipsy ve fázovém prostoru $\{x, p\}$.

Kvantovací podmínka pro stacionární orbity zní

$$\oint p \, dx = nh$$

(h je Planckova konstanta).

Předchozí integrál odpovídá v našem případě ploše elipsy (viz obr.):

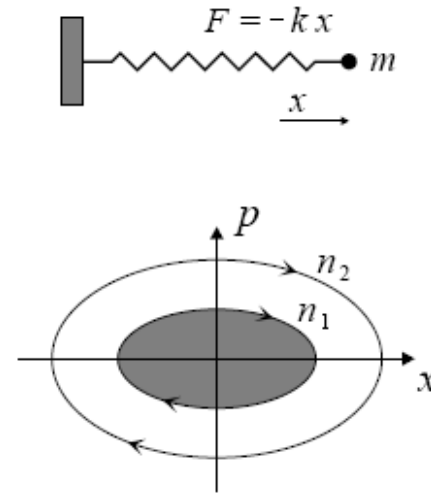
$$\pi ab = \pi \sqrt{\frac{2E_n}{k}} \sqrt{2mE_n} = nh.$$

Zde a, b značí poloosy a E_n je celková energie oscilátoru odpovídající kvantovému číslu n . Odtud dostáváme přípustné hodnoty energie oscilátoru:

$$E_n = n \underbrace{\frac{h}{2\pi}}_{\hbar} \underbrace{\sqrt{\frac{k}{m}}}_{\omega} = n\hbar\omega,$$

kde $\hbar$ je modifikovaná Planckova konstanta a ω je úhlová frekvence.

□



STARÁ KVANTOVÁ MECHANIKA

- Název „kvantová mechanika“ pochází pravděpodobně od Nielse Bohra, který jej začal používat v roce 1924. Podle některých pramenů je však jeho autorem Max Born a termín „mechanika kvant“ použil už v roce 1923 Hendrik Lorentz.

- Sommerfeld: je h kvantum akce?

$$S = \int_0^\tau L dt = \frac{h}{2\pi}$$

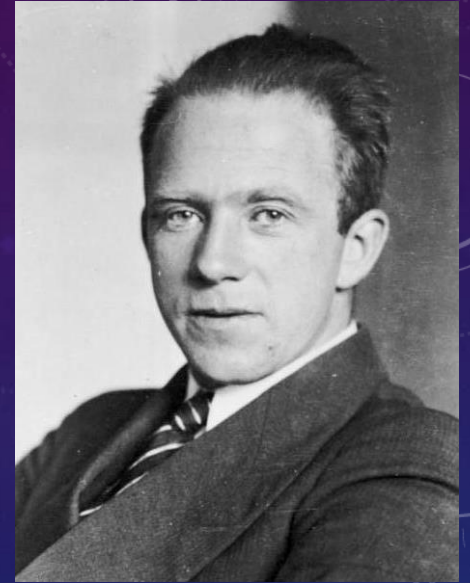
- Hypotéza byla sice během dalšího vývoje kvantové teorie opuštěna, nicméně akce se vyskytuje i v moderním formalismu Feynmannových dráhových integrálů. Každé dráze $x(t)$ odpovídá amplituda pravděpodobnosti $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\}$. Přes všechny dráhy se sčítá.

MATICOVÁ MECHANIKA

Werner Heisenberg (1901-1976)

- Vzdal se představ o klasickém pohybu elektronů v atomech. Nezdálo se, že by někdo dovedl změřit polohu a hybnost elektronu v atomu. Rozhodl se popisovat vztahy mezi měřitelnými veličinami, zejména frekvencemi a amplitudami (inspirován problémem kvantového popisu optické disperze).
- „Recepty“ staré kvantové teorie nepředstavovaly ucelenou teoretickou konstrukci. Heisenberg nicméně věřil, že by mohlo být na jejich základě, zejména na základě principu korespondence, možné „uhodnout“ matematické schéma nové mechaniky.
- Článek napsal Heisenberg v květnu 1925 na dovolené na ostrově Heligoland, kde se zotavoval ze senné rýmy.
- V klasické fyzice lze libovolnou veličinu závislou na čase vyjádřit pomocí Fourierova rozvoje:

$$\xi_n(t) = \sum_s x(n, s) \exp [2\pi i \nu(n, s) t]$$



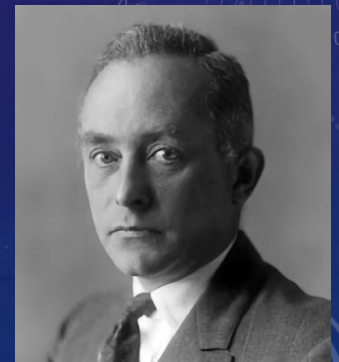
W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik 33, 879 (1925)

MATICOVÁ MECHANIKA

- Princip korespondence – kvantové a klasické frekvence a amplitudy: $\nu_{n,n-s} \leftrightarrow \nu(n, s)$
 $x_{n,n-s} \leftrightarrow x(n, s)$
- Množinu $\{x_{n,n-s} \exp[2\pi i \nu_{n,n-s} t]\}$ lze chápat jako kvantovou reprezentaci veličiny ξ_n .
- Pro součin $\xi_n \eta_n$ dostal vztah pro amplitudy: $z_{n,n-s} = \sum_r x_{n,n-r} y_{n-r,n-s}$

Max Born v později v tomto vztahu rozpoznal pravidlo pro násobení matic. Heisenberg sám maticový počet neznal. V té době nebyla znalost lineární algebry mezi fyziky běžná.

- Dosadil kvantovou reprezentaci klasických veličin do kvantovací podmínky (využil pravidlo násobení) a obě strany derivoval podle n .
- Derivaci nahradil podle Bornova pravidla diferencí: $s \frac{\partial \Phi(n)}{\partial n} = \Phi(n) - \Phi(n-s)$
- O další rozvoj maticové mechaniky se postarali mj. **Max Born** (1882-1970) a **Pascual Jordan** (1902-1980).



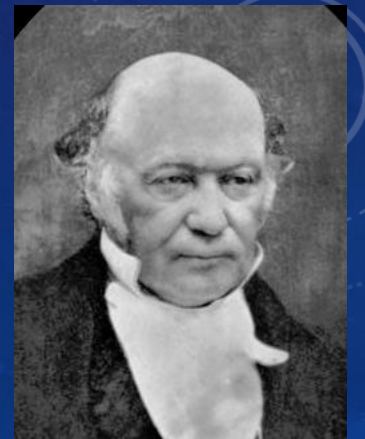
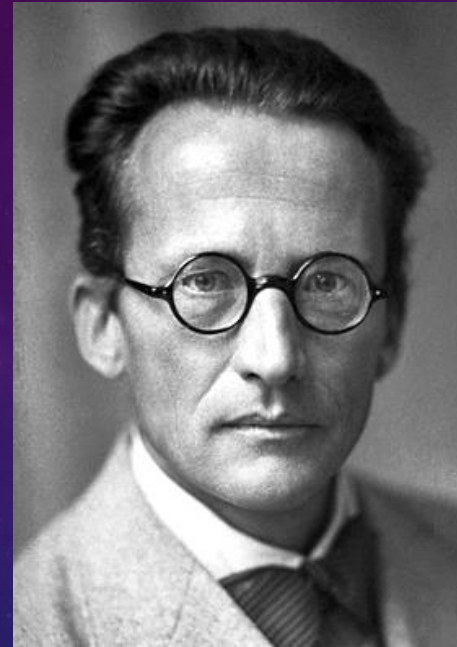
VLNOVÁ MECHANIKA

Erwin Schrödinger (1887-1961)

- Byl zastáncem myšlenky **Louise de Broglieho** (1892-1987), že fundamentální entitou určující dynamiku fyzikálních procesů jsou vlny.

Částice jsou jen pěnou na hřebenech vln.

- Inspirací mohla být také Hamiltonova snaha o jednotný popis mechaniky a optiky [**Sir William Rowan Hamilton** (1805-1865)]. Newtonova mechanika odpovídá geometrické optice, geometrická optika je aproximací vlnové optiky.
- Elektron v atomu vodíku si představil jako vlnu. Stacionární stavy by mohly být ztotožněny s vlastními funkcemi nějakého operátoru a energie by byla dána odpovídajícími vlastními hodnotami.



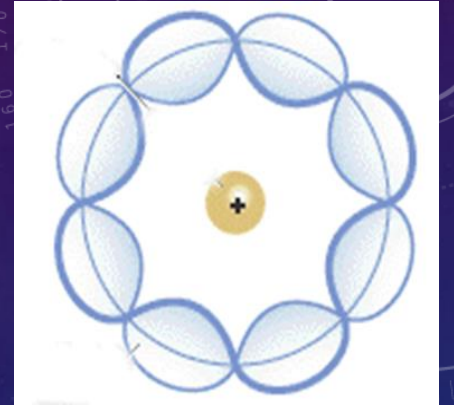
E. Schrödinger, Annalen der Physik 79, 361, 489 (1926); 80, 437 (1926); 81, 109 (1926).

VLNOVÁ MECHANIKA

- Už de Broglie využil svého vzorce svazujícího hybnost p s vlnovou délkou λ : $p = \frac{h}{\lambda}$

a ukázal, že Sommerfeldovu kvantovací podmínku lze interpretovat jako podmínku celočíselného počtu vlnových délek podél orbity elektronu v atomu:

$$\oint \frac{1}{\lambda} dq = n$$



- Schrödinger vyšel z Hamilton-Jacobiho rovnice:

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E$$

- Postuloval: $S = k \ln \psi$

kde k je konstanta a ψ reprezentuje součin jednoznačných funkcí, z nichž každá závisí pouze na jedné ze souřadnic q . (Hamilton-Jacobiho rovnici lze pak zapsat jako kvadratickou formu ψ a $\partial\psi/\partial q$.)

- Řešení hledal pomocí extremalizace funkcionálu: (variace podle ψ).

$$\int \left[H\left(q, \frac{k}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) - E \right] dq$$

VLNOVÁ MECHANIKA

- Rovnice, kterou Schrödinger získal, byla v podstatě tím, co jsme dnes zvyklí nazývat stacionární (bezčasovou) Schrödingerovou rovnicí:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

- V případě atomu vodíku zjistil, že pro hodnoty energie $E < 0$ jsou „rozumnými“ řešeními pouze určité funkce ψ odpovídající diskrétním hodnotám energie. Srovnáním svých výsledků s výsledky Bohrovými, postavenými na staré kvantové teorii, dostal hodnotu konstanty k :

$$k = \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

- Později Schrödinger zobecnil rovnici na časově závislou:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

- Použil přitom:

$$\Psi = \psi(q) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \Rightarrow E\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

VLNOVÁ MECHANIKA

- Za podstatný výsledek svého postupu považoval Schrödinger fakt, že jeho kvantovací pravidla neobsahují záhadný požadavek celočíselnosti.
- Když se ukázalo, že „kvantových skoků“ se – v souvislosti s procesem kvantového měření – tak docela zbavit nelze, Schrödinger byl zklamán.

V rozhovoru s Bohrem prý řekl:

Jestliže budeme muset jít dál s těmi prokletými kvantovými skoky, pak lituji, že jsem se do toho kdy míchal.

Bohr prý odpověděl:

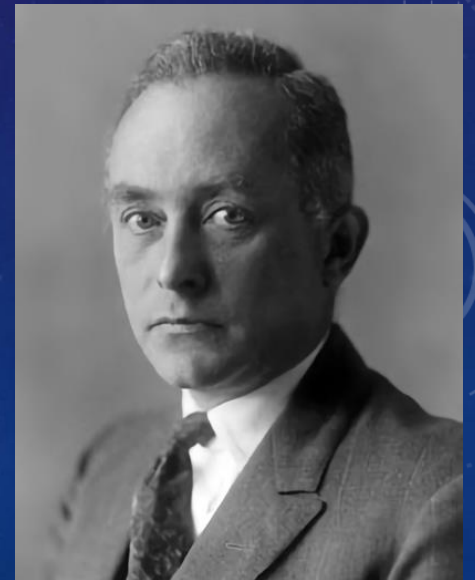
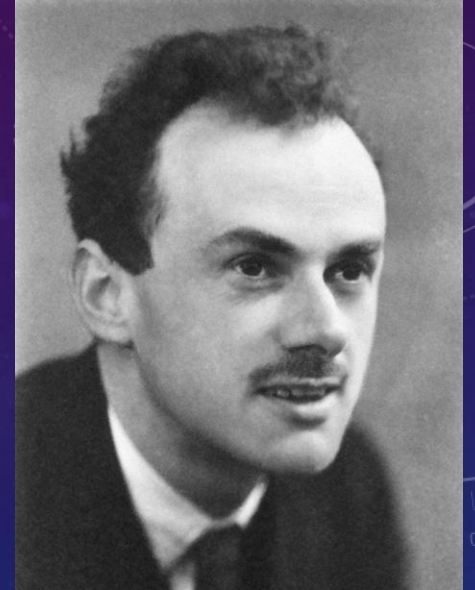
Ale my ostatní jsme vám za to velmi vděční, protože vaše práce udělala pro zdokonalení této teorie mnoho.

- Schrödinger nejdříve vyšel z relativistického vztahu mezi energií a hybností. Výsledky se ale mírně odchylovaly od pozorování (jemná struktura; důvodem bylo nezapočtení spin-orbitální interakce). Svůj přístup ale považoval za koncepčně důležitý, tak nakonec publikoval nerelativistickou verzi (soulad s Bohrovým modelem).
- Svoje výpočty prováděl na zimní dovolené v Arose (švýcarské Alpy), kam odjel s jednou ze svých milenek (ale nebyla to ani Lotte, ani Irene, ani Felicie...).



DALŠÍ VÝVOJ KVANTOVÉ MECHANIKY

- Ekvivalenci vlnové mechaniky s Heisenbergovou maticovou mechanikou dokázal nedlouho po jejich vzniku sám Schrödinger.
- V širším kontextu popsal vztah obou přístupů **Paul Adrien Maurice Dirac** (1902-1984) ve své práci o teorii reprezentací kvantové mechaniky.
- Dalším závažným mezníkem, který se udál v roce 1926, bylo zavedení *pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce* **Maxem Bornem** (1882-1970).
- A posléze vznik tzv. *kodaňské interpretace* kvantové mechaniky.





5th SOLVAY CONFERENCE 1927 (Brussels)

colourized by pastincolour.com

A. PICARD	E. HENRIOT	P. EHRENFEST	Ed. HERSEN	Th. DE DONDER	E. SCHRÖDINGER	E. VERSCHAFFELT	W. PAULI	W. HEISENBERG	R.H FOWLER	L. BRILLOUIN
P. DEBYE	M. KNUDSEN	W.L. BRAGG	H.A. KRAMERS	P.A.M. DIRAC	A.H. COMPTON	L. de BROGLIE	M. BORN	N. BOHR		
I. LANGMUIR	M. PLANCK	Mme CURIE	H.A. LORENTZ	A. EINSTEIN	P. LANGEVIN	Ch.E. GUYE	C.T.R. WILSON	O.W. RICHARDSON		

Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

KNIHY

M. Jammer: *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1967.

B. L. van der Waerden: *Sources of Quantum Mechanics*, Dover Publ., New York, 1968.

V. Hajko a kol.: *Fyzika v experimentoch*, Veda – vyd. SAV, Bratislava, 1988.

R. Zajac, J. Šebesta: *Historické pramene súčasnej fyziky 1*, Alfa, Bratislava, 1990.

R. Zajac, J. Pišút, J. Šebesta: *Historické pramene súčasnej fyziky 2*, Univerzita Komenského, Bratislava, 1997.

W. Heisenberg: *Část a celek*, Votobia, Olomouc, 1996.

W. Heisenberg: *Fyzika a filosofie*, Aurora, Praha, 2000.

W. J. Moore: *A Life of Erwin Schrödinger*, Cambridge University Press, 1994.

M. Dušek: *Koncepční otázky kvantové teorie*, UP Olomouc, 2002.