JAROSLAV ZAMASTIL
JAKUB BENDA

KVANTOVÁ MECHANIKA A ELEKTRODYNAMIKA

KAROLINUM

Kvantová mechanika a elektrodynamika

Jaroslav Zamastil
Jakub Benda

Recenzovali:
Mgr. Roman Čurík, Ph.D.
Mgr. Tomáš Mančal, Ph.D.

Vydala Univerzita Karlova v Praze
Nakladatelství Karolinum
Obálka Jan Šerých
Sazba Jakub Benda
První dotisk prvního vydání

ISBN 978-80-246-3223-0
ISBN 978-80-246-3253-7 (online : pdf)

Univerzita Karlova
Nakladatelství Karolinum 2017

www.karolinum.cz
ebooks@karolinum.cz

Obsah

Předmluva

„We have not redefined quantum theory; we carry it to its logical conclusion. (...) We learned it second or third hand, as an established discipline whose rules and techniques we came to feel as intuitive and natural, not as a peculiar displacement of classical: we found and find it almost painful to do 19-th century physics. The great Bohr-Einstein philosophical debates which fascinate historians and the philosophers are to us a bit wrong-headed (...)“ [1]

Pár slov na vysvětlenou

V současné době, kdy existuje řada učebnic kvantové mechaniky, z nichž některé jsou výborné a dnes patří již mezi „klasiku“ (např. pro začátečníky [2], [3], mírně pokročilé [4]–[6], pokročilé [7]), a kdy se objevují další pozoruhodné výklady (např. [8]), kdy dále existuje řada učebnic kvantové elektrodynamiky, popř. kvantové teorie pole, z nichž je opět řada výborných (opět v široké stupnici od snazších, např. [9]–[13], po náročnější, např. [14]–[18]), a kdy přes internet je možno takřka jakoukoliv učebnici vyhledat, stáhnout a vytisknout, cítíme potřebu předeslat omluvu, či pár slov na vysvětlenou za to, že přicházíme s další učebnicí zabývající se výkladem kvantové mechaniky a elektrodynamiky.[1]

1. Symetrie jako parita, moment hybnosti, atd. a jejich využití pro řešení kvantově-mechanických úloh, např. Wignerův-Eckartův teorém, se většinou vykládá na tak obecné úrovni, že nezasvěcenému, pokud je vůbec pochopí, není vůbec jasné k čemu jsou dobré. Z tohoto důvodu věnujeme značnou pozornost řešení nejjednodušších fyzikálně zajímavých problémů, jež není možné vyřešit přesně, jako anharmonický oscilátor a heliový atom. Toto řešení, oproti jiným učebnicím, dotáhneme do konce, nikoliv jen „nahodíme“. V době, kdy program na diagonalizaci matic je standardní součástí knihoven pokročilých programovacích jazyků jako Maple, Matlab, Mathematica, Octave, Scilab, Maxima, jsme chtěli studentům ukázat, jak si takové úlohy mohou sami vyřešit na osobním počítači.

   Domníváme se, že problém symetrií a jejich využití je, paradoxně, mnohem snazší na pochopení, pokud se kvantová mechanika vykládá způsobem, který

[1] Na rozdíl od klasické elektrodynamiky, kde se statická část problému označuje jako elektrostatika a magnetostatika a vykládá se nezávisle na klasické mechanice, se kvantová elektro- a magneto-statika obvykle vykládá souhrnně s kvantovou mechanikou.

zdůrazňuje její abstraktní, algebraickou, formulaci, nikoliv způsobem založeným na Schrödingerově vlnové funkci.

Algebraický přístup umožňuje elegantní řešení několika málo fyzikálně zajímavých problémů, které jsme schopni řešit přesně, jako harmonický oscilátor, moment hybnosti, skládání momentu hybnosti a vodíku podobné atomy. Tento přístup umožňuje kdykoliv zrekonstruovat řešení, včetně vlnových funkcí, bez toho, že by člověk potřeboval vědět, jaký je tvar nejrůznějších ortogonálních polynomů, atd.

Výhoda algebraického přístupu se dále stane zřejmou při řešení problémů, které nelze řešit přesně. Jedná se o výpočet maticových elementů pro variační výpočet anharmonického oscilátoru, problém zahrnutí spojitého spektra při variačním výpočtu víceelektronových atomů, úhlovou a radiální část integrace při výpočtu maticových elementů elektron-elektronové interakce, jež jsou potřeba při variačním výpočtu víceelektronových atomů atd.

Nutno zdůraznit, že problém symetrií a jejich využití není podružný. Naopak je zcela klíčový ve všech oblastech fyziky, kde se kvantová mechanika používá, a kromě samotného pochopení fyzikálního obsahu kvantové mechaniky představuje podle našeho názoru to hlavní, co by měl student z kvantové mechaniky pochopit.

2. Chtěli jsme vyložit relativistickou kvantovou elektrodynamiku způsobem, který by minimalizoval výklad jejích formálních stránek, popř. který by zdůraznil, proč je nutné z praktického hlediska té které formální stránce věnovat pozornost, který by umožnil „vidět“ za formalismus a který by přitom dotáhl až do konce, nikoliv jen „nahodil“, výpočet alespoň těch nejdůležitějších vlivů kvantové elektrodynamiky na atomová spektra.

   Kvantová elektrodynamika se zvláště v moderních učebnicích jako např. [9], [14], [15][2] formuluje a vykládá pro vysokoenergetické rozptylové procesy jako nejjednodušší příklad teorie založené na Lorentzově a kalibrační invarianci. Používá se přitom velmi elegantní a mocný, ale, alespoň při prvním seznámení, poměrně náročný formalismus moderní kvantové teorie pole (Dysonův-Wickův rozvoj, dráhové integrály).

   To může vést k dvěma mylným závěrům. Za prvé, že „nízkoenergetičtí“ fyzikové nemusejí o relativistické kvantové elektrodynamice nic vědět. Za druhé, že běžný formalismus kvantové mechaniky je nutno od samého počátku zahodit a naučit se zcela nový formalismus kvantové teorie pole. To je ale příliš náročné a vzhledem k prvnímu bodu to ani nestojí za námahu. Navíc u procesů kvantové elektrodynamiky, které mají největší význam pro fyziku nízkých energií, jako je například spontánní emise, je možno, alespoň v prvním a pro praktické účely postačujícím přiblížení vliv relativistických efektů na pohyb elektronů zcela zanedbat. Toto přiblížení, nazývané nerelativistická kvantová elektrodynamika, je podstatně snazší na pochopení než úplná relativistická teorie.

[2]Všechny jsou podle našeho názoru výborné a čtenáři je vřele doporučujeme.

Toto hledisko nesdílíme. Jakmile jdeme za první přiblížení, narazíme i v rámci nerelativistické teorie na tzv. virtuální procesy, které nelze v rámci nerelativistického přiblížení úplně vyřešit. Nerelativistická kvantová elektrodynamika je tak nutně neúplná teorie. Navíc se domníváme, že kvantová teorie pole – podobně jako obecná teorie relativity – patří k základnímu vzdělání fyzika. Konečně, metody kvantové teorie pole se ukázaly být velice užitečné v kvantové teorii mnoha částic, viz např. [14], [19].

Při výkladu potřebné relativistické teorie však, na rozdíl od běžného postupu, nejprve odvodíme vliv fluktuací elektromagnetického a elektron-pozitronového pole (vlastní energie elektronu a polarizace vakua) na vázaný elektron běžně používaným formalismem kvantové mechaniky („old fashioned perturbation theory“) a poté ukážeme, jak lze výsledné vzorečky zjednodušit do moderní podoby („new fashioned perturbation theory“) pomocí Feynmanova výkladu pozitronů jako elektronů pohybujících se proti toku času. Takové odvození není ani nejkratší, ani nejlogičtější, umožňuje ale jasně určit, v čem tkví přechod od nerelativistické k relativistické teorii a kde je ve Feynmanových diagramech ukryta běžně užívaná časově nezávislá poruchová metoda, Coulombův zákon, atd. Učebnice [10] se z dosavadních učebnic nejvíce blíží zde zvolenému přístupu.

Z výše řečeného je zřejmé, že tento text není encyklopedické povahy, nesnažili jsme se pokrýt všechna témata, která se běžně vykládají, nýbrž snažíme se několik konkrétních problémů vyložit ve větším detailu, než je obvyklé. Věříme přitom, že myšlenky je nutno vykládat na konkrétních příkladech. Pokud student myšlenku pochopí, tak si její zobecnění na jiné problémy zvládne provést. Přístup, kdy se myšlenky vykládají tak obecně a přesně, jak je jen možné, a předpokládá se, že použití na konkrétní problémy si student zvládne provést sám, pokládáme za scestný.

Dále jsme se na jedné straně snažili maximálně snížit diskusi čistě formálních stránek problémů, na druhé straně jsme se snažili vyhnout výrokům „dá se ukázat, že“. Tedy s mírou přesnosti vyjadřování běžné ve fyzikální literatuře jsme se snažili vše motivovat a logicky zdůvodnit. Míra přesnosti vyjadřování vyžadovaná čistými matematiky je autorům cizí. Domníváme se, že při vysvětlování fyzikálních úloh vede pouze k tomu, že jednoduché věci působí složitě.[3]

Dále neděláme to, co je až příliš běžné, tedy abychom oddělovali matematiku od fyziky. To znamená, že potřebujeme-li nějakou část matematiky, tak ji na konkrétním příkladu, ke kterém ji potřebujeme, vyložíme v nezbytné míře. Přístup, kdy autoři, pokud možno do dodatku, shrnou matematickou teorii v celé její „parádě“ a čtenáře upozorní, že to, co právě potřebují, je zvláštní případ obecné matematické teorie, takže vzniká dojem, že by se čtenář měl naučit i celou matematickou teorii, pokládáme za mírně nešťastný. Na rozdíl do jiných autorů se domníváme, že k pochopení kvantové mechaniky a jejímu praktickému ovládnutí *není* potřeba cokoliv vědět o matematických teoriích Hilbertových prostorů, distribucí, Lieových grup, řešení lineárních diferenciálních rovnic Fuchsova typu, ortogonálních polynomech atd.

[3]Umění aproximace, tj. umění odhadnout stupeň přesnosti, s jakou musím pracovat, abych se dobral kýženého výsledku, je nedílnou součástí „umění fyziky“. Ve stejném duchu by se ale měl vést i výklad fyziky. Navíc absolutní přesnost myšlení pokládáme za přelud lidského ducha. Nepochybně se najde řada čtenářů, kteří toto hledisko nesdílí. Např. jeden student nazval přednášku založenou na této učebnici „trestem za úspěšně složenou zkoušku z funkcionální analýzy“.

Nakonec, náš přístup ke kvantové teorii je veden přesvědčením, že úkolem teorie je vysvětlovat a předpovídat experimentální fakta. Fyzika se zajímá o natolik jednoduché systémy a její metody jsou natolik přesné, že tyto fakta mají podobu, někdy dosti přesných, čísel.[4] Jen s trochou přehánění tak můžeme říci, že úkolem teorie je vysvětlit velké množství čísel získaných ze všech proveditelných experimentů z nějakého velmi malého množství čísel.[5] Kvantová elektrodynamika plní tuto úlohu, jak se nám snad podaří dále ukázat, více než dobře. Již na tomto místě můžeme poznamenat, že několik čísel, které potřebujeme vzít z experimentu, jako konstantu jemné struktury, Rydbergovu konstantu (co tyto názvy označují se čtenář, který o nich nic neví, dozví později), poměr hmotnosti elektronu a protonu, elektronu a mionu a případně dalších, stačí k souhlasu teorie a experimentu s poměrnou nejistotou 1 díl v 10^9 případně ještě menší.[6]

Pokud vyložené zásady výkladu čtenáři nevyhovují nebo nenajde-li zde, co hledá, ať sáhne po jiné učebnici, např. po jedné z těch zmíněných v úvodu tohoto úvodu. Učebnice [7] a [18] jsou vyloženě encyklopedického charakteru.

Co se týče odkazů na literaturu, odkazujeme se na několik základních učebnic, které dobře známe a které jsou většinou všeobecně známy.[7] Učebních textů o kvantové teorii je takové množství, že pořídit jen jejich seznam je nad naše síly. U základních partií (první tři kapitoly) pravděpodobně ani nemá smysl upozorňovat, pokud jsme se při odvozování výsledků nechali inspirovat jinde. U pokročilejších se o to občas pokusíme. Pokud neupozorníme, kde jsme se inspirovali, tak to samozřejmě nutně neznamená, že náš výklad je původní.

V textu se nachází množství úloh; jejich hlavním účelem je, aby si čtenář mohl vyzkoušet, do jaké míry pochopil to, co přečetl. Úlohy jsou podle obtížnosti značeny počtem znaků ✎. Pokud je čtenář schopen vyřešit byť jedinou úlohu, je schopen i rozpoznat, jestli více znaků ✎ značí úlohu těžší nebo lehčí.

Kvantová teorie je dnes neodmyslitelnou součástí fyziky atomů, molekul, optiky, pevných látek, atomového jádra, elementárních částic, vývoje a závěrečného stadia „normálních“ hvězd a neutronových hvězd. Rozhodli jsme se omezit výklad na použití kvantové teorie na fyziku atomů, elektromagnetického pole a jejich vzájemného působení. Tato oblast má tu výhodu, že bez velké znalosti experimentálních dat je zřejmé, jaké přiblížení je výhodné udělat a jak k nim spočítat opravu. A u něčeho se začít musí. Navíc atomová fyzika, zejména díky pokrokům v experimentální technice, je stále jedno z nejživějších odvětví fyziky. K tomu se stačí podívat na Nobelovy ceny; za práce z atomové fyziky byly uděleny za posledních dvacet let čtyřikrát: 2012 za experimenty umožňující manipulaci jednotlivých mikroskopických objektů vykazujících kvantové vlastnosti, 2005 za přesné spektroskopické metody a měření, 2001 za Boseho-Einsteinovu kondenzaci atomů a 1997 za chlazení a uvěznění atomů. Takže co následuje, je „klasika“, nicméně klasika stále živá!

[4] V [20] je popsán experiment ve kterém byla jistá spektrální čára iontu $^{171}\mathrm{Yb}^{+}$ změřena s poměrnou nejistotou $7{,}1 \times 10^{-17}$.

[5] Samozřejmě, čím menší je množství čísel, které do teorie vkládáme, tím lépe.

[6] Viz např. [21].

[7] Pro českého čtenáře bychom v této souvislosti měli zmínit učebnice [22]–[24].

Předpoklady

Následující je zejména pro samouky, kteří mají naše velké sympatie. Přestože o řadě pokročilých matematických teorií čtenář „nemusí mít ani páru“, je nutné aby partie matematiky, které se většinou vykládají pod názvy jako lineární algebra a matematická analýza, prakticky ovládal na slušné úrovni. Tedy, má-li četba této učebnice přinášet radost a nikoliv frustraci, musí být splněno následující.

1. Čtenář je zběhlý v diferenciálním a integrálním počtu jedné proměnné, v zacházení s komplexními čísly, vektory a maticemi.

2. Čtenář má jistou znalost diferenciálního a integrálního počtu více proměnných a vektorové analýzy. Tato znalost nemusí být nikterak hluboká; zcela postačí na úrovni, na jaké se vykládá v základních kursech fyziky, viz např. [25]. Např., v díle I., kapitola 14.5. se vykládá, co je parciální derivace, v díle II., kapitoly 2 a 3 je vyložen diferenciální a integrální počet vektorových polí, atd.

3. Pro partie týkající se kvantové elektrodynamiky, kapitoly 6 a 7, je nutná znalost funkce komplexní proměnné v míře, v jaké se vykládá např. v [26].

4. Dále jsme předpokládali, že čtenář je alespoň zběžně obeznámen s klasickou mechanikou, elektrodynamikou a speciální teorií relativity. Znalost na úrovni učebnice [25] by opět měla být více než postačující. Jistá obeznámenost s Hamiltonovou formulací klasické mechaniky nemůže být na škodu, ačkoliv není klíčová. Klasické učebnice jsou [27], [28].

Poděkování

- Jakubovi Zahumenskému, Ladě Vybulkové a Tomáši Javůrkovi za pomoc při vytváření prvotní verze rukopisu,

- oběma recenzentům, Romanu Čuríkovi a Tomáši Mančalovi, za celou řadu upozornění, od poukázání na drobné chyby po zásadní vylepšení argumentace,

- Arnoštu Mládkovi za upozornění na řadu nepřesností,

- odbornému redaktorovi Václavu Hozmanovi za pomoc s jazykovou úpravou textu,

- prof. Janu Valentovi děkujeme za obrázek spektrální čáry sodíkového dubletu uvedený na obálce,

- našemu vzácnému učiteli, bohužel již zesnulému, prof. Lubomíru Skálovi, za jeho podporu a povzbuzení v počáteční fázi tohoto projektu.

Chyby

Seznam chyb, na které jsme nepřišli a na které ještě přijdeme, případně nás na ně upozorní laskavý čtenář, jsou uvedeny na webové adrese

`http://quantum.karlov.mff.cuni.cz/~jzamastil/`

Značení

a	skalární veličina, složky vektorů a jejich velikosti
a^*	komplexní sdružení
$\mathbf{A}$	třírozměrný vektor
$\boldsymbol{A}$	čtyřrozměrný vektor („čtyřvektor“)
$\mathsf{A}, \mathsf{A}^\top, \mathsf{A}^+$	matice, její transpozice a hermitovské sdružení
$\mathbf{1}$	jednotková matice
$\mathrm{diag}\,\{a_1, ..., a_n\}$	diagonální matice zadaná vlastními čísly
$\hat{\mathsf{A}}$	skalární operátor, složka vektorového operátoru
$\hat{\mathbf{A}}$	třírozměrný vektorový operátor
$\hat{\boldsymbol{A}}$	čtyřrozměrný vektorový operátor
$[\hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{b}}] = \hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{b}} - \hat{\mathsf{b}}\hat{\mathsf{a}}$	komutátor
$\{\hat{\mathsf{a}}, \hat{\mathsf{b}}\} = \hat{\mathsf{a}}\hat{\mathsf{b}} + \hat{\mathsf{b}}\hat{\mathsf{a}}$	antikomutátor
$\lvert+\rangle$	spinový stav $\left\lvert\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle$
$\lvert-\rangle$	spinový stav $\left\lvert\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$
$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$	diferenciální vektorový operátor
$\hat{\mathsf{V}}_\pm = \hat{\mathsf{V}}_1 \pm \mathrm{i}\hat{\mathsf{V}}_2$	často používaná kombinace složek vektorového operátoru
$\Re$	reálná část komplexního čísla
$\Im$	imaginární část komplexního čísla
$\dot{q} = \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$	časová derivace
$\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}\varphi\mathrm{d}\vartheta \sin\vartheta$	diferenciál prostorového úhlu

Sčítací konvence

- Skalární součin v trojrozměrném i čtyřrozměrném prostoru je značen centrovanou tečkou, tedy $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ i $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}$.

- Složky třívektorů nesou latinský index (i, j, k, ...), složky čtyřvektoru jsou rozeznatelné podle řeckých indexů (μ, ν, ...).

- Používáme Einsteinovu sčítací konvenci, tj. pokud jsou dva indexy stejné tak se přes ně sčítá, např.

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \,,$$

případně pro čtyřvektory vždy s metrikou $(+1, -1, -1, -1)$ nezávisle na poloze indexů (horní/dolní)

$$a_\mu b_\mu = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3 \,.$$

Složkový formalismus

Skalární součin píšeme ve složkách s využitím výše zmíněné Einsteinovy sčítací konvence

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_j B_j = \delta_{ij} A_i B_j \,, \qquad \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial A_i}{\partial x_i} \,, \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} \,,$$

kde Kroneckerův symbol

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \,, \\ 0 & (i \neq j) \,. \end{cases}$$

Vektorový součin píšeme ve složkách

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k \,, \qquad (\nabla \times \mathbf{A})_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \,,$$

kde Levi-Civitův symbol

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1 \,,$$
$$\epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1$$

a

$$\epsilon_{ijk} = 0 \,,$$

když libovolná dvojice indexů ij, jk nebo ik nabývá stejných hodnot.

Všechny identity vektorového počtu a vektorové analýzy používané v textu lze odvodit z identity

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ipq} = \delta_{jp} \delta_{kq} - \delta_{jq} \delta_{kp} \,.$$

o jejímž důkazu je nejlépe se přesvědčit přímým dosazením.

Jednotky, základní konstanty a experimentální data

Pokud není řečeno jinak, používáme tzv. přirozené jednotky, ve kterých $\hbar = c = \varepsilon_0 = 1$. Fyzikální rozměr některých základních veličin v této soustavě je uveden v tabulce 1. Převodů mezi systémy budeme potřebovat jen maličko. V rovnici (3.11), oddíl 3.2.3, je ukázáno, jaký rozdíl frekvencí v hertzech odpovídá rozdílu energií v elektronvoltech. Zbývající převody pro účinný průřez, čas, elektrickou intenzitu a magnetickou indukci jsou souhrnně vysvětleny v oddílu 6.3.6.
Základní fyzikální konstanty, které je nutno vzít z experimentu a které budeme potřebovat jsou uvedeny v následujících oddílech:

- konstanta jemné struktury α v 3.2.3
- Rydbergova konstanta vynásobená rychlostí světla $R_\infty c$ v 3.2.3

		rozměr v systému jednotek	
veličina	symbol	SI	přirozeném
energie	E	J	eV
hmotnost	m	kg	eV
rychlost	v	m/s	1
čas	t	s	eV^{-1}
účinný průřez	σ	m^2	eV^{-2}
elektrická intenzita	E	V/m	eV^2
magnetická indukce	B	T	eV^2

Tab. 1: Soustavy jednotek využívané v textu.

- poměr hmotností elektronu a protonu, elektronu a mionu, elektronu a deuteronu v 3.2.6
- hmotnost elektronu m_e v 6.3.6.

Kvantitativní experimentální data, se kterými budeme porovnávat teoretické předpovědi, jsou uvedena v následujích oddílech:

- přechod $2s - 1s$ ve vodíku, deuteriu a mionu v 3.2.6
- přechod $1^3s - 1^1s$ ve vodíku a mioniu v 3.3
- přechod $2p_{3/2} - 2p_{1/2}$ ve vodíku v 3.5.2
- přechod $2\,{}^1S - 1\,{}^1S$ v heliu v 5.4.7
- přechody $1^3s - 1^1s$, $2^3s - 1^3s$, $2^3s - 2^3p_0$, $2^3s - 2^3p_1$, $2^3s - 2^3p_2$ v pozitroniu a doba života stavu 1^1s pozitronia v 7.3.2
- gyromagnetický poměr elektronu g_e v 7.5.7
- přechod $2p_{1/2} - 2s$ ve vodíku, mioniu a mionovém vodíku v 7.6.6.