8 ČASTICA V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

8.1 ÚVOD

Interakcia nabitej častice s elektromagnetickým poľom (ďalej často len EM poľom) sa vyskytuje v značnej časti praktických aplikácií kvantovej mechaniky. S jej najjednoduchším prípadom, t. j. s interakciou elektrónu s elektrostatickým poľom sme sa stretli už pri opise atómu vodíka. V nasledujúcej kapitole však už budeme potrebovať aj interakciu elektrónu so žiarením dopadajúcim na atóm a ešte neskôr budeme skúmať chovanie sa atómu vo vonkajších elektrických a magnetických poliach. Pre tieto prípady je potrebné mať aj všeobecnejší opis interakcie nabitej častice s EM poľom.

V nasledujúcom článku tejto kapitoly uvedieme veľmi zjednodušené odvodenie výrazu pre hamiltonián interakcie nabitej skalárnej častice s EM poľom a v ďalšom článku prídeme k Pauliho rovnici, ktorá opisuje interakciu nabitej častice so spinom s EM poľom.

Ďalšie články sa zaoberajú tou istou otázkou ešte raz, ale argumenty sú fyzikálne hlbšie i matematicky náročnejšie. Oboznámime sa tu so všeobecným postupom pre kvantovanie sústav opísaných v klasickom priblížení istým hamiltoniánom a všimneme si podrobnejšie kalibračnú invariantnosť EM poľa a jeho interakcie s nabitými časticami.

8.2 BEZSPINOVÁ ČASTICA V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

Začneme s prípadom bezspinovej častice v elektrostatickom poli a potom prejdeme k všeobecnejšiemu prípadu takejto častice v časovo premennom elektromagnetickom poli.

Intenzitu elektrostatického poľa $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ možno vyjadriť pomocou potenciálu

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\nabla\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

Potenciálna energia častice s nábojom q v elektrostatickom poli je

$$V(\boldsymbol{r}) = q\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

a silu pôsobiacu na časticu možno zapísať ako

$$\boldsymbol{F} = -\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

Schrödingerova rovnica pre časticu v elektrostatickom poli je

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r,t) + V(\boldsymbol{r})\psi(r,t) \tag{4}$$

Pre časticu pohybujúcu sa v časovo premennom elektromagnetickom poli s intenzitami $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t)$, $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t)$ je situácia zložitejšia. Na časticu pôsobí Lorentzova sila

$$\boldsymbol{F} = q\boldsymbol{E} + q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{5}$$

kde q je náboj a $\boldsymbol{v}$ rýchlosť častice. Pohybová rovnica častice je v klasickom prípade

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\boldsymbol{E} + q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{6}$$

V tomto všeobecnom prípade sa už nedá nájsť taká funkcia $V(\boldsymbol{r}, t)$, aby platilo

$$\boldsymbol{F} = -\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{7}$$

a preto ani nemožno prejsť ku kvantovomechanickému opisu tak jednoducho ako vyššie. To, že silu pôsobiacu na časticu v EM poli nemožno opísať pomocou (7) vidno intuitívne už z toho, že „magnetická“ časť Lorentzovej sily nekoná prácu lebo zrýchlenie, ktoré častici udeľuje, je kolmé na rýchlosť častice. Preto sila $q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}$ nemení absolútnu hodnotu rýchlosti častice ani jej kinetickú energiu. Pojem potenciálu elektrostatického poľa však možno na všeobecný prípad EM poľa rozšíriť iným spôsobom a práve toto rozšírenie budeme potrebovať.

Z teórie EM poľa je známe, že ľubovoľné pole $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t)$, $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t)$ možno charakterizovať vektorovým a skalárnym potenciálom $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$, $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$, pričom

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \nabla\varphi \\ \boldsymbol{B} &= \nabla \times \boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{8}$$

Poznamenajme hneď, že opis EM poľa pomocou potenciálov $\boldsymbol{A}$, φ nie je jednoznačný: tým istým intenzitám $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ odpovedá viacero možností výberu $\boldsymbol{A}$, φ. Skutočne, ak dvojica $\boldsymbol{A}$, φ vedie podľa (7) k istým hodnotám $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$, povedie k nim aj dvojica $\boldsymbol{A}'$, φ' daná vzťahmi

$$\begin{aligned} \varphi' &= \varphi + \frac{\partial}{\partial t} f \\ \boldsymbol{A}' &= \boldsymbol{A} - \nabla f \end{aligned} \tag{9}$$

kde $f(\boldsymbol{r}, t)$ je ľubovoľná funkcia súradníc a času. Presvedčíme sa o tom priamo.

Položme podľa (8)

$$\boldsymbol{E}' = -\frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial t} - \nabla\varphi'$$
$$\boldsymbol{B}' = \nabla\times\boldsymbol{A}'$$

Ak sem dosadíme za φ', $\boldsymbol{A}'$, z (9) po elementárnych úpravách a využití rovnice $\nabla\times\nabla f = 0$ dostaneme $\boldsymbol{E}' = \boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}' = \boldsymbol{B}$. Dvojice ($\varphi'$, $\boldsymbol{A}'$) a (φ, $\boldsymbol{A}$) sú teda ekvivalentné v tom zmysle, že im odpovedajú rovnaké intenzity $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ a teda aj rovnaká Lorentzova sila pôsobiaca na časticu v tomto poli.

Nejednoznačnosť výberu (φ, $\boldsymbol{A}$) nie je závadou, podstatné je zatiaľ iba to, že takúto dvojicu možno vždy vybrať.

Pokúsme sa teraz „uhádnuť", ako bude vyzerať SchR pre bezspinovú časticu v poli opísanom potenciálmi (φ, $\boldsymbol{A}$). Toto „uhádnutie" bude iba intuitívne a hlbšie dôvody uvedieme až v ďalších článkoch tejto kapitoly.

Budeme vychádzať z toho, že v teórii EM poľa a v špeciálnej teórii relativity sa ukazuje, že štvorica veličín

$$\left(\frac{1}{c}\varphi, A^1, A^2, A^3\right) \tag{10}$$

je štvorvektorom, pričom prvý symbol je jeho „časovou" (či nultou) zložkou. Podobným štvorvektorom je (ct, x^1, x^2, x^3) a teda aj štvorica operátorov[117]

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3} \tag{11}$$

Ak (11) násobíme faktorom i$\hbar$ vidíme, že štvorvektorom je štvorica operátorov

$$\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \mathsf{p}^1, \mathsf{p}^2, \mathsf{p}^3\right) \tag{12}$$

Pozrime sa teraz na SchR pre voľnú časticu a na SchR pre časticu v elektrostatickom poli. Prvá má tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi \tag{13a}$$

[117] Vo vzťahoch (10), (11) c označuje rýchlosť svetla. Zmena znamienka pred priestorovými deriváciami pochádza zo vzťahu medzi kovariantnými a kontravariantnými komponentmi 4-vektorov. Štvorvektory (10) a (11) sú kontravariantné. Niekedy sa za štvorvektor berie štvorica (ict, x^1, x^2, x^3) a potom zmena znamienka súvisí s tým, že pri deriváciách i prechádza do menovateľa.

druhá

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi+q\varphi\psi \tag{13b}$$

Vidno hneď, že (13b) dostaneme z (13a) zámenou

$$\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\rightarrow\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{c}q\varphi \tag{14}$$

Toto je ale zámena, ktorá obsahuje časové zložky 4-vektorov (10) a (11). Pritom pre elektrostatické pole je $\boldsymbol{A} = 0$, takže analogická zámena pre priestorové zložky by tu nič na SchR nezmenila.

Pre časticu v EM poli opísanom potenciálom – štvorvektorom (φ/c, $\boldsymbol{A}$) je potom prirodzené predpokladať, že správnu SchR dostaneme ak zámenu (14) doplníme príslušnou zmenou priestorových zložiek štvorvektorov, t. j.

$$\hat{\mathbf{p}}\rightarrow\hat{\mathbf{p}}-q\boldsymbol{A}=\frac{\hbar}{i}\nabla-q\boldsymbol{A}$$

Tento vzťah spolu s (13) môžeme zapísať ako

$$\begin{aligned} &i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{c}q\varphi \\ &i\hbar\nabla\rightarrow i\hbar\nabla-q\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{15}$$

Po takejto zámene na (13a) dostávame

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-q\boldsymbol{A}\right)^2\psi+q\varphi\psi \tag{16}$$

a to je skutočne SchR pre bezspinovú časticu v EM poli a výraz na pravej strane je príslušný hamiltonián. Urobíme úpravu:

$$\begin{aligned} &(-i\nabla\hbar-q\boldsymbol{A})^2\psi=(-i\nabla\hbar-q\boldsymbol{A})\,.\,(-i\nabla\hbar-q\boldsymbol{A})\psi= \\ &=-\hbar^2\nabla^2\psi+q^2\boldsymbol{A}^2\psi+i\hbar[\nabla.(\boldsymbol{A}\psi)+\boldsymbol{A}.\nabla\psi] \end{aligned} \tag{17}$$

V nasledujúcom sa presvedčíme o tom, že v realistických situáciách dáva člen obsahujúci $\boldsymbol{A}^2$ zanedbateľný príspevok a v ďalšom ho preto vynecháme. Rovnicu (16) upravíme s využitím (17) a identity

$$\nabla.(\boldsymbol{A}\psi)=(\nabla.\boldsymbol{A})\psi+\boldsymbol{A}.\nabla\psi$$

na tvar

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+q\varphi\psi+\frac{iq\hbar}{m}\boldsymbol{A}.\nabla\psi+\frac{iq\hbar}{2m}(\nabla.\boldsymbol{A})\psi \tag{18}$$

V teórii EM poľa sa ukazuje, že v kalibračných transformáciách (9) možno vždy vybrať funkciu f tak, aby platilo $\nabla.\boldsymbol{A} = 0$. Pri takomto výbere $\boldsymbol{A}$ sa (18) zjednoduší na

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + q\varphi\psi + \frac{\mathrm{i}q\hbar}{m}\boldsymbol{A}.\nabla\psi \tag{19}$$

a tento tvar budeme v ďalšom často potrebovať.

8.3 ČASTICA SO SPINOM 1/2 V MAGNETICKOM POLI. PAULIHO ROVNICA

Paulino rovnica opisuje nabitú časticu so spinom 1/2 a s magnetickým momentom v elektrostatickom a magnetostatickom poli. Typickým prípadom je atóm vodíka vo vonkajšom magnetickom poli. Elektrón je opísaný spinorovou vlnovou funkciou

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \tag{1}$$

a energia magnetického momentu v homogénnom poli $\boldsymbol{B}$ je vyjadrená operátorom

$$U_{\text{dip}} = -\boldsymbol{\mu}\,.\,\boldsymbol{B} = -\frac{q\hbar}{2m}\vec{\boldsymbol{\rho}}\,.\,\boldsymbol{B} = \frac{e\hbar}{2m}\vec{\boldsymbol{\rho}}\,.\,\boldsymbol{B} \tag{2}$$

kde $q = -e$ je náboj elektrónu a ostatné označenie je štandardné. Navyše musíme ešte do H zahrnúť interakciu orbitálneho pohybu elektrónu s magnetickým poľom. To za nás ale urobí rovnica (2.19), v ktorej je už tento príspevok zahrnutý.

Uvažujme špeciálny tvar tejto rovnice odpovedajúci vonkajšiemu homogénnemu magnetickému poľu, ktoré má smer osi z. V tomto prípade

$$\boldsymbol{B} = (0, 0, B) \tag{3}$$

a, ako sa možno ľahko presvedčiť, vektorový potenciál spĺňajúci podmienky

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B} &= \nabla\times\boldsymbol{A}\\ \nabla.\boldsymbol{A} &= 0\end{aligned} \tag{4}$$

možno voliť v tvare

$$A_x = -yB/2, \quad A_y = xB/2, \quad A_z = 0 \tag{5}$$

V tomto prípade výraz $\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}.\nabla$ bude mať tvar

$$\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}.\nabla = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left[xB\frac{\partial}{\partial y} - yB\frac{\partial}{\partial x}\right] = -\frac{B}{2}[\mathsf{x}\mathsf{p}_y - \mathsf{y}\mathsf{p}_x] = -\frac{B}{2}\mathsf{L}_z$$

a po dosadení do SchR (2.19) a zahrnutí príspevku (2) máme

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+q\varphi+\frac{q}{2m}B(\mathsf{L}_z+\hbar\sigma_z)\right\}\psi \tag{6}$$

V prípade všeobecného smeru magnetického poľa by sme zrejme dostali rovnicu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+q\varphi+\frac{q}{2m}\boldsymbol{B}.(\hat{\mathbf{L}}+\hbar\vec{\boldsymbol{\sigma}})\right\}\psi \tag{7}$$

Táto rovnica sa v aplikáciách často používa a tiež sa jej hovorí Pauliho rovnica. Upozorníme, že výraz v okrúhlej zátvorke vo vzťahu (7)

$$\hat{\mathbf{L}}+\hbar\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{8}$$

nie je operátor celkového momentu hybnosti, ktorý by mal tvar

$$\hat{\mathbf{L}}+\frac{1}{2}\hbar\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{9}$$

keďže operátor orbitálneho momentu hybnosti je $\hat{\mathbf{L}}$ a operátorom spinu je $\hbar\vec{\boldsymbol{\sigma}}/2$. O chýbajúcom faktore 1/2 v druhom člene výrazu (8) sme už raz hovorili (pozri diskusiu v 1.8); upozorňujeme naň opäť, pretože táto skutočnosť sa prejaví v charaktere rozštiepenia spektrálnych čiar atómu v magnetickom poli.

Ostáva nám ešte ukázať, že kvadratický člen v rovnici (2.17) možno zanedbať, t. j. že platí (pre obvyklé intenzity polí)

$$|q^2\boldsymbol{A}^2\psi| \ll |\hbar q\boldsymbol{A}.\nabla\psi|$$

Ak urobíme hrubý odhad pre absolútne hodnoty veličín, dostaneme

$$q^2A^2\psi \ll qAp$$

kde p je typická hodnota hybnosti častice v atóme (využili sme vzťah $\hbar\nabla\psi \approx \boldsymbol{p}\psi$) Máme teda podmienku

$$A \ll \frac{p}{q} \tag{10}$$

Podľa (5) dostaneme v našom prípade približný odhad $\boldsymbol{A} = a_1\boldsymbol{B}$, kde a_1 je Bohrov polomer a $\boldsymbol{B}$ je magnetická indukcia vonkajšieho poľa.

Po dosadení vzťahu $\boldsymbol{A} \approx a_1\boldsymbol{B}$ do (10) máme podmienku

$$B \ll \frac{p}{a_1 q} \approx \frac{\hbar^2}{a_1^2 q}$$

kde $p \approx \hbar/a_1$ (podľa vzťahu neurčitosti). Po dosadení číselných hodnôt dostaneme

$$B \ll 10^5\ \mathrm{T}$$

Tento vzťah je spravidla pre makroskopické polia splnený veľmi dobre.

8.4 KANONICKÝ FORMALIZMUS PRE POHYB KLASICKEJ ČASTICE V ELEKTROMAGNETICKOM POLI

V tomto a v nasledujúcich článkoch sa budeme hlbšie a systematickejšie zaoberať opisom pohybu častice v EM poli. Začneme s klasickým opisom problému, potom uvedieme všeobecnú schému kvantovania klasických sústav a napíšeme SchR pre pohyb častice v EM poli. Napokon sa budeme zaoberať s kalibračnou invariantnosťou problému.

Všeobecný opis klasickej sústavy je založený na Lagrangeových a Hamiltonových pohybových rovniciach.[118]

Ak súradnice častice označíme ako x_i a ich časové derivácie ako $\dot{x}_i$ potom Lagrangeove pohybové rovnice majú tvar

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial x_i} \tag{1}$$

kde $L = L(x_i, \dot{x}_i)$ je Lagrangeova funkcia, ktorá sa v najjednoduchších prípadoch dá písať ako rozdiel kinetickej a potenciálnej energie, ale všeobecne možnosť takéhoto rozdelenia nie je nutná.

Rovnice (1) sa tiež niekedy zapisujú ako

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{2}$$

kde $\boldsymbol{v} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dot{x}_3)$, $\boldsymbol{r} = (x_1, x_2, x_3)$. Pritom (2) je len skráteným zápisom (1).

Pre pohyb častice s nábojom q v EM poli s intenzitami $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t)$, $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t)$ platí

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\boldsymbol{E} + q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{3}$$

[118] Pozri napr. Landau, L. D. – Lifšic, J. M.: Úvod do teoretickej fyziky 1. Mechanika a elektrodynamika. Bratislava : Alfa, 1980. kap. 1.

ako sme už hovorili v predchádzajúcom článku. Intenzity $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ môžeme vyjadriť pomocou potenciálov $\boldsymbol{A}$, φ:

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{4}$$

Ukážeme teraz, že Lagrangeovu funkciu nabitej častice s nábojom q v elektromagnetickom poli možno voliť v tvare

$$L = \frac{1}{2} m\boldsymbol{v}^2 + q\boldsymbol{A}.\boldsymbol{v} - q\varphi \tag{5}$$

Dôkaz tohto tvrdenia je jednoduchý, stačí ukázať, že Lagrangeova pohybová rovnica vyplývajúca z funkcie (5) je totožná s Newtonovou rovnicou (3).

Po dosadení (5) do výrazov vystupujúcich v Lagrangeových rovniciach (2) dostávame

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}} \equiv \nabla L = q\nabla(\boldsymbol{A}.\boldsymbol{v}) - q\nabla\varphi \\
&\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A} \\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A}) = m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + q\left[\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{A}\right] = \\
&\qquad = m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + q\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + q(\boldsymbol{v}.\nabla)\boldsymbol{A}
\end{aligned} \tag{6}$$

Dosadením do (2) a postupnými úpravami prídeme k pohybovej rovnici

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + q\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + q(\boldsymbol{v}.\nabla)\boldsymbol{A} = q\nabla(\boldsymbol{A}.\boldsymbol{v}) - q\nabla\varphi$$

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\left(-\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + q(\nabla(\boldsymbol{A}.\boldsymbol{v}) - (\boldsymbol{v}.\nabla)\boldsymbol{A})$$

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\left(-\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + q\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) \tag{7}$$

keď sme použili známy vzorec

$$\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{a}\,.\,\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{c}(\boldsymbol{a}\,.\,\boldsymbol{b})$$

Za výrazy v okrúhlych zátvorkách v (7) teraz už len dosadíme intenzity $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ podľa (4) a máme skutočne pohybovú rovnicu (2). Lagrangeova funkcia (5) teda naozaj opisuje interakciu klasickej nabitej častice s vonkajším EM polom.

V priebehu výpočtu sme získali aj vzťah (6), ktorý v terminológii klasickej mechaniky určuje zovšeobecnenú hybnosť, kanonicky združenú v súradnici $\boldsymbol{r}$:

$$\boldsymbol{P} = m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A} \tag{8}$$

Pre zdôraznenie odlišnosti budeme označovať hybnosť kanonicky združenú k $\boldsymbol{r}$ veľkým písmenom a výraz

$$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$$

budeme nazývať mechanickou hybnosťou. Medzi zovšeobecnenou kanonickou a mechanickou hybnosťou častice v EM poli platí teda vzťah

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A} \tag{9}$$

Postupom známym z teoretickej mechaniky dostaneme potom už ľahko výraz pre Hamiltonovu funkciu:

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{P}) = \left(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial}{\partial\dot{\boldsymbol{r}}}L\right) - L = \left(\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{v}}L\right) - L =$$

$$= m\boldsymbol{v}^2 + q(\boldsymbol{v}\,.\,\boldsymbol{A}) - \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 - q(\boldsymbol{A}.\boldsymbol{v}) + q\varphi =$$

$$= \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 - q\varphi = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + q\varphi$$

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{P}) = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi \tag{10}$$

Podstatné je, že hamiltonovu funkciu bolo treba vyjadriť pomocou kanonicky združených veličín $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{P}$.

Hamiltonove pohybové rovnice potom sú

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{P}}, \qquad \dot{\boldsymbol{P}} = -\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{r}}$$

Čitateľ sa môže presvedčiť, že tieto rovnice sú ekvivalentné pohybovej rovnici (3).

V nasledujúcom článku si ukážeme ako treba prejsť od hamiltonovského opisu klasickej častice ku kvantovomechanickemu opisu. Aby sme ale už teraz videli, kde sa dostaneme, prezradíme, že pri kvantovaní priradíme operátor $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ nie mechanickej, ale zovšeobecnenej hybnosti a výraz (10) potom prejde na operátor vystupujúci na pravej strane (2.16).

Rovnica (9) potom bude

$$p \equiv p_{\mathrm{mech}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A} \tag{11}$$

Uvedieme teraz ešte jednoduchý kvalitatívny argument, ktorý ilustruje fyzikálny obsah vzťahu (11). Argument pochádza od Feynmana. Predstavme si časticu s nábojom q vnútri dlhého solenoidu. Nech pri $t < t_0$ solenoidom netečie prúd, elektrické i magnetické pole je nulové a potenciály φ, $\boldsymbol{A}$ volíme $\varphi = 0$, $A = 0$. V okamihu t_0 zapneme prúd tak, že za veľmi krátky čas Δt sa magnetická indukcia vnútri solenoidu ustáli na hodnote $\boldsymbol{B}$. Príslušný prechodový jav si môžeme predstaviť tak, že je opísaný „zapnutím“ potenciálu $\boldsymbol{A}$ z nulovej hodnoty na hodnotu $\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r})$ pričom platí $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r})$. Potenciál φ je stále nulový. Počas procesu „zapínania“ sa vnútri solenoidu objaví aj elektrické pole, pre ktoré podľa (2.8) platí $\boldsymbol{E} = -\mathrm{d}\boldsymbol{A}/\mathrm{d}t$. Podľa klasickej mechaniky toto elektrické pole udelí častici dodatočnú hybnosť

$$\Delta \boldsymbol{p}_{\text{mech}} = \boldsymbol{F}\Delta t = q\boldsymbol{E}\Delta t = -q\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\Delta t \approx -q\boldsymbol{A}_0 \tag{12}$$

V situáciách, kde klasický výsledok má byť dobrým priblížením ku kvantovomechanickému výsledku, očakávame, že podobný výsledok dostaneme aj pre zmenu strednej hodnoty hybnosti častice, počítanej kvantovomechanickým formalizmom pomocou operátora (11). Ukážeme si, že je to naozaj tak. Zmena strednej hodnoty (12) presne zodpovedá druhému členu vo vzťahu (11). Príspevok k zmene strednej hodnoty pochádzajúci od prvého člena je nulový, ako vyplýva z nasledujúcej úvahy. Príspevok od tohto člena by sme nemohli zanedbať, keby vlnová funkcia častice v okamihu tesne pred zapnutím poľa a po ňom bola podstatne odlišná. Ako si hneď ukážeme, ak doba zapnutia je veľmi krátka, vlnová funkcia sa zmení len veľmi málo, príspevok k strednej hodnote hybnosti daný prvým členom v (11) v situácii pred zapnutím poľa a po ňom je teda rovnaký, príspevok k zmene strednej hodnoty je zanedbateľný. Feynmanov argument naozaj názorne ukazuje fyzikálny význam druhého člena vo vzťahu (11). Ukážeme si teraz, že spomínaná zmena vlnovej funkcie počas „zapínania poľa“ je naozaj malá. Táto zmena musí byť, samozrejme opísaná Schrödingerovou rovnicou. Predpokladáme, že pole vystupuje vo vyjadrení hamiltoniánu iba cez potenciály[119] $\boldsymbol{A}$, φ, pričom pre jednoduchosť predpokladajme, v zhode s (4.10), že hamiltonián má tvar

$$\mathsf{H} = \mathsf{O}_1 + \vec{\mathsf{O}}_2 . \boldsymbol{A} + \mathsf{O}_3\boldsymbol{A}^2$$

Podľa Schrödingerovej rovnice

$$\mathrm{i}\hbar\partial\psi/\partial t = \mathsf{H}\psi$$

potom pre zmenu vlnovej funkcie dostaneme odhad

$$\|\Delta\psi\| \le \frac{1}{\hbar}\{\|\mathsf{O}_1\psi\| + \|\mathsf{O}_2\psi\|\,|\boldsymbol{A}_0| + \|\mathsf{O}_3\psi\|\,|\boldsymbol{A}_0|^2\}\Delta t$$

Vidíme teda, že zmena vlnovej funkcie je pre malé časy Δt naozaj zanedbateľná.

[119] Tento predpoklad je podstatný. Ak by sme v hamiltoniáne pripustili i člen úmerný $\boldsymbol{E} = -\partial\boldsymbol{A}/\partial t$, ďalšiu úvahu by sme nemohli použiť.

8.5 KANONICKÉ KVANTOVANIE

Nie všetky fyzikálne sústavy sa dajú charakterizovať ako súbory častíc interagujúcich navzájom pomocou síl, ku ktorým existuje potenciál v obvyklom zmysle. Príklad častice vo všeobecnom elektromagnetickom poli skúmaný v predchádzajúcom článku je ilustráciou takejto situácie. Často sa stretávame i so sústavami, ktoré (prinajmenej na klasickej úrovni) nemajú vôbec časticovú interpretáciu (polia). V teoretickej mechanike je však známy formalizmus, ktorý možno použiť i pre opis komplikovanejších fyzikálnych sústav a pre opis pohybu častíc v potenciálovom poli je ekvivalentný Newtonovmu formalizmu. Ide o Lagrangeovský resp. Hamiltonovský formalizmus, pomocou ktorého je možné opísať na klasickej úrovni všetky známe fyzikálne sústavy.

Ak chceme teda prejsť ku kvantovému opisu sústav, ktoré majú klasický analóg, bolo by dobré poznať prechod od všeobecného Hamiltonovského formalizmu ku kvantovomechanickému formalizmu. Hamiltonovský formalizmus používa pojmy kanonicky konjugovaných (združených) súradníc (q) a hybností (P), pričom Hamiltonove pohybové rovnice majú tvar

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial P}; \qquad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{1}$$

kde $H = H(P, q)$ je Hamiltonova funkcia uvažovanej sústavy Pri prechode ku kvantovomechanickému formalizmu je treba priradiť zovšeobecneným súradniciam q a zovšeobecneným hybnostiam P vhodné operátory. Podrobnú diskusiu tejto problematiky možno nájsť v Diracovej monografii [14] a prípad kanonického kvantovania sústavy s väzbami[120] v jeho lekciách [31]. My sa obmedzíme na značne zjednodušené konštatovania. Podľa Diraca zovšeobecnenie „kvantovacieho predpisu“

$$x \to \mathsf{x} = x, \qquad P \to \mathsf{P} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

ktorý už poznáme, na prípad zovšeobecnených súradníc a hybností, spočíva v zachovaní komutačného pravidla

$$[\mathsf{x}, \mathsf{P}] = \mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

Inými slovami operátory q a P, ktoré priraďujeme klasickým zovšeobecneným súradniciam a hybnostiam musia spĺňať komutačný vzťah

$$[\mathsf{q}, \mathsf{P}] = \mathrm{i}\hbar \tag{3}$$

[120] Dôležitosť tohto prípadu sa ukázala v poslednom období, keď sa v kvantovej teórii poľa vyskytol problém kvantovania kalibračných polí.

V prípade, že sústava je opísaná väčším počtom zovšeobecnených súradníc q_i, $i = 1, ..., n$ a k nim konjugovaných hybností P_i, $i = 1, ..., n$ vyžadujeme splnenie komutačných vzťahov[121]

$$[\mathsf{q}_i, \mathsf{P}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}, \quad [\mathsf{q}_i, \mathsf{q}_j] = 0, \quad [\mathsf{P}_i, \mathsf{P}_j] = 0 \tag{4}$$

kde δ_{ij} je Kroneckerov symbol.

Vzťahy (4) sa nazývajú *kanonické komutačné vzťahy* a postupu, ktorý klasickým zovšeobecneným súradniciam q a hybnostiam P priradí operátory q a P spĺňajúce vzťahy (4) sa hovorí *kanonické kvantovanie*.

Na podmienky (4) sa treba pozerať ako na postulát, ktorého platnosť sa overuje súhlasom jeho dôsledkov s experimentom. Poznamenajme, že formulácia postulátu (4) kladie dôraz na nekomutatívnosť operátorov priradených fyzikálnym veličinám v kvantovej mechanike, inými slovami vzťah (4) ukazuje na hlbokú úlohu vzťahu neurčitosti v kvantovomechanickom opise fyzikálnych sústav.

Zhrňme teda hlavnú ideu kanonického kvantovania vo forme algoritmu.

Ak máš kvantovať sústavu, ktorá má klasický analóg, potom:

1. Nájdi zovšeobecnené súradnice q a Lagrangeovu funkciu klasickej sústavy $L(q, \dot{q})$

2. Nájdi zovšeobecnené hybnosti združené ku q podľa vzťahu $P = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}}$

3. Nájdi Hamiltonovu funkciu sústavy a vyjadri ju pomocou premenných P, q podľa vzťahu

$$H(P, q) = \dot{q}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - L$$

4. Priraď kanonicky združeným veličinám P, q operátory P, q tak, aby boli splnené komutačné vzťahy (4).

Dosaď do vyjadrenia Hamiltonovej funkcie $H(P, q)$ namiesto klasických veličín P, q operátory P, q. Dostaneš operátor Hamiltonián

$$\mathsf{H}(\mathsf{P}, \mathsf{q})$$

ktorý vystupuje v Schrödingerovej (pohybovej) rovnici.

6. Operátor priradený ľubovoľnej inej veličine F, ktorá má klasický analóg nájdi tak, že napred nájdeš klasické vyjadrenie veličiny F pomocou P a q: $F(F, q)$ a potom do tohto vyjadrenia dosaď operátory.

[121] Porovnaj so vzťahmi (2.17.1).

8.6 BEZSPINOVÁ ČASTICA V ELEKTROMAGNETICKOM POLI. KVANTOVOMECHANICKÝ OPIS PRI KANONICKOM KVANTOVANÍ

V predchádzajúcom článku sme uviedli všeobecný predpis pre kanonické kvantovanie sústav, ktoré sú na klasickej úrovni opísané hamiltonovským formalizmom. Pretože takýto formalizmus sme použili pre klasický opis častice v elektromagnetickom poli v článku 8.4 bude prechod ku kvantovomechanickému formalizmu jednoduchý. Podľa článku 8.4 kanonicky združenými veličinami sú súradnica $\boldsymbol{r}$ a zovšeobecnená hybnosť

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A} \tag{1}$$

Teraz treba týmto veličinám priradiť operátory r a P tak, aby boli splnené kanonické komutačné vzťahy

$$[\mathsf{x}_i, \mathsf{P}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \tag{2}$$

$$[\mathsf{x}_i, \mathsf{x}_j] = 0, \quad [\mathsf{P}_i, \mathsf{P}_j] = 0 \tag{3}$$

Predpokladajme pritom, že opis stavu častice v okamihu $í_0$ je opäť daný vlnovou funkciou $\psi(\boldsymbol{r}, t_0)$ a jej interpretácia je tiež obvyklá, t. j. $|\psi(\boldsymbol{r}, t_0)|^2$ má význam hustoty pravdepodobnosti nájsť časticu v okolí bodu r. Potom ale strednú hodnotu r musíme počítať podlá vzťahu

$$\bar{\boldsymbol{r}}(t) = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r}, t)\, \mathrm{d}^3\mathrm{r}$$

a teda súradnici $\boldsymbol{r}$ priradíme operátor

$$\hat{\mathsf{r}} = \boldsymbol{r} \tag{4}$$

Aby boli splnené komutačné vzťahy (2) a (3), stačí, ak priradíme zovšeobecnenej hybnosti operátor

$$\hat{\mathsf{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{5}$$

Vtedy je ale mechanickej hybnosti $\boldsymbol{p}$ priradený operátor

$$\hat{\mathsf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A} \tag{6}$$

Treba však trochu opatrnosti. V skutočnosti komutačným vzťahom (2) vyhovuje aj operátor

$$\hat{\mathsf{P}}' = -\mathrm{i}\hbar\nabla + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) \tag{7}$$

kde $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ je ľubovoľná vektorová funkcia súradnice $\boldsymbol{r}$. Aby boli splnené aj komutačné vzťahy (3), musí platiť (presvedčíme sa o tom dosadením (7) do (3) po zložkách)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F_j(\boldsymbol{r}) - \frac{\partial}{\partial x_j} F_i(\boldsymbol{r}) = 0 \qquad i, j = 1, 2, 3 \tag{8}$$

Znamená to, že funkcia $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ nie je ľubovoľná, ale taká, že sa dá vyjadriť v tvare

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = \nabla\Phi(\boldsymbol{r}) \tag{9}$$

kde $\Phi(\boldsymbol{r})$ je vhodná skalárna funkcia.

Znamená to, že vo všeobecnosti možno mechanickej hybnosti priradiť operátor

$$\hat{\mathsf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A} + \nabla\Phi(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

kde $\Phi(\boldsymbol{r})$ je ľubovoľná skalárna funkcia súradnice. V článku 8.2 sme však videli, že vektorový potenciál je určený až na gradient ľubovoľnej skalárnej funkcie (vzťah (2.9)). Znamená to, že v prípade, keď volíme operátor p v tvare (10) môžeme namiesto potenciálu $\boldsymbol{A}$ používať pre vyjadrenie tej istej fyzikálnej situácie potenciál

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \frac{1}{q}\nabla\Phi \tag{11}$$

a operátor $\hat{\mathsf{p}}$ bude mať tvar

$$\hat{\mathsf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}'$$

čo je tvar (6). Vidíme teda, že napriek nejednoznačnosti voľby operátora $\hat{\mathsf{p}}$ možno vždy redefiníciou vektorového potenciálu dosiahnuť, že operátor $\hat{\mathsf{p}}$ má tvar (6). Zhrňme teda doterajšie výsledky: Pri kvantovomechanickom opise treba súradnici $\boldsymbol{r}$, mechanickej hybnosti $\boldsymbol{p}$ a zovšeobecnenej hybnosti $\boldsymbol{P}$ priradiť operátory

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \boldsymbol{r} \\ \hat{\mathsf{p}} &= -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A} \\ \hat{\mathsf{P}} &= -\mathrm{i}\hbar\nabla \end{aligned} \tag{12}$$

kde $\boldsymbol{A}$ je vektorový potenciál elektromagnetického poľa a q je náboj uvažovanej častice. Klasické vyjadrenie hamiltonovej funkcie je dané vzťahom (4.10). Kvantovomechanický hamiltonián bude mať preto tvar

$$\mathsf{H} = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi \tag{13}$$

kde φ je skalárny potenciál elektromagnetického poľa. Pohybová Schrödingerova rovnica častice v elektromagnetickom poli bude mať tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi\right]\psi \qquad (14)$$

s ktorým sme sa už vyššie stretli vo veľmi zjednodušenom „odvodení“.

8.7 KALIBRAČNÁ INVARIANTNOSŤ

Doteraz sme sa už viackrát stretli s tým, že vlnová funkcia opisujúca stav častice je určená až na konštantný fázový faktor. Znamená to, že funkcie $\psi(\boldsymbol{r})$ a $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi(\boldsymbol{r})$, kde α je reálne číslo opisujú ten istý stav. Formálne sa táto skutočnosť prejavuje ako dôsledok lineárnosti kvantovomechanických rovníc, napríklad Schrödingerovej rovnice. Skutočne, ak funkcia $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ je riešením rovnice

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi + V\psi$$

potom riešením tejto rovnice je aj funkcia

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi(\boldsymbol{r}, t) \qquad (2)$$

V prípade nabitej častice v EM poli má SchR tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 - q\varphi\right]\psi \qquad (3)$$

a, pravdaže, spolu s riešením ψ je riešením rovnice (3) aj funkcia (2).

V tomto prípade však platí oveľa silnejšie tvrdenie. Vo funkcii opisujúcej stav možno nielen zmeniť fázu o konštantný faktor ako vo vzťahu (2), ale možno dokonca zmeniť fázu v závislosti od miesta a času

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\boldsymbol{r},\, t)}$$

Sformulujme naše tvrdenie presnejšie. Ak funkcia $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ je riešením rovnice (2), potom funkcia

$$\psi'(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\boldsymbol{r},\, t)}\psi(96\boldsymbol{r}, t) \qquad (4)$$

je tiež riešením Schrödingerovej rovnice (2), v ktorej však namiesto potenciálov $\boldsymbol{A}$, φ vystupujú potenciály

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \frac{\hbar}{q}\nabla\alpha \qquad (5)$$

$$\varphi' = \varphi - \frac{\hbar}{q}\frac{\partial\alpha}{\partial t} \qquad (6)$$

O správnosti tohto tvrdenia pre ľubovoľnú funkciu $\alpha(\boldsymbol{r}, t)$ sa možno jednoducho presvedčiť dosadením (4), (5), (6) do rovnice (3).

Transformačné vzťahy (5), (6) však majú tvar (2.9), čo znamená, že dvojice φ, $\boldsymbol{A}$ a φ', $\boldsymbol{A}'$ opisujú to isté elektromagnetické pole. SchR je teda invariantná voči transformácii danej vzťahmi (4), (5), (6). Z historických dôvodov sa táto invariantnosť nazýva kalibračnou invariantnosťou a transformácia

$$\begin{aligned}\psi &\to \psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(r,\,t)}\psi \\ \boldsymbol{A} &\to \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \frac{\hbar}{q}\nabla\alpha \\ \varphi &\to \varphi' = \varphi - \frac{\hbar}{q}\frac{\partial\alpha}{\partial t}\end{aligned} \tag{7}$$

sa nazýva kalibračnou transformáciou.[122]

Prístup, pomocou ktorého sme sa oboznámili s kalibračnou invariantnosťou, môže ľahko vyvolať dojem, že ide o nepodstatnú technickú vec, skôr o zaujímavosť alebo kuriozitu. Dnes však vývoj fyziky, zdá sa, ukazuje, že požiadavka kalibračnej invariantnosti zohráva závažnú úlohu vo fyzikálnych teóriách a má – prinajmenej – veľkú heuristicku cenu. Možno, že dokonca patrí k jedným z najhlbších fyzikálnych princípov.[123]

Heuristicku cenu princípu kalibračnej invariantnosti si môžeme načrtnúť i na skúmanom prípade nabitej (nerelativistickej) častice v elektromagnetickom poli. l Vyjdime zo SchR pre voľnú časticu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \tag{8}$$

(ktorá opisuje pohyb častice bez vplyvu elektromagnetického póla). Táto rovnica je invariantná vzhľadom na transformácie typu (2) s konštantnou fázou. Pokúsme sa nájsť takú modifikáciu rovnice (8), aby nová pohybová rovnica bola invariantná vzhľadom na transformácie typu (4). Rovnica (8) invariantná nie je, vadí tu skutočnosť, že kým funkcia *y* sa transformuje homogénne

$$\psi \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(r,\,t)}\psi \tag{9}$$

[122] Príhodnejšie by bolo azda hovoriť o fázovej transformácii, resp. fázovej invariantnosti; termín kalibračná transformácia sa však vžil a používa sa, hoci vo vzťahoch (7) nejde o zmenu kalibrácie (škály), ale o zmenu fázy.

[123] Postupy, opierajúce sa o princíp kalibračnej invariantnosti, viedli v posledných rokoch k podstatnému pokroku v chápaní dynamiky silných, slabých a elektromagnetických interakcií elementárnych častíc.

jej derivácie podliehajú nehomogénnej transformácii:

$$\nabla\psi \to \nabla\psi' = \nabla(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\boldsymbol{r},\,t)}\psi) =$$
$$=(\mathrm{i}\nabla\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(\nabla\psi) \neq \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(\nabla\psi) \tag{10}$$

Pohybová rovnica by bola invariantná, keby namiesto obyčajných diferenciálnych operátorov typu ∇ v nej vystupovali nejaké zovšeobecnené diferenciálne operátory D, pre ktoré by platilo pri transformácii (9)

$$\mathsf{D}\psi \to \mathsf{D}'\psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\boldsymbol{r},\,t)}\mathsf{D}\psi$$

Detailnejšia úvaha vedie k záveru, že vhodnou voľbou je náhrada diferenciálnych operátorov podľa vzťahov typu (2.14)

$$\begin{aligned} &\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\varphi \\ &\mathrm{i}\hbar\nabla \to -\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{11}$$

Ak chceme teda splniť požiadavku kalibračnej invariantnosti, musíme zaviesť pomocné polia φ a $\boldsymbol{A}$, ktorých úlohou je kompenzovať nehomogénny člen v transformácii (10). Poľu danému potenciálmi φ, $\boldsymbol{A}$ sa preto hovorí tiež kalibračné alebo kompenzujúce pole. Namiesto rovnice (8) dostaneme teda po náhrade (11) rovnicu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi - q\varphi\psi = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2\psi \tag{12}$$

ktorá už je kalibračné invariantná vzhľadom na transformácie (7).

Princíp kalibračnej invariantnosti teda priamo diktuje, ako má vyzerať interakcia s elektromagnetickým poľom. Rovnica (12) je totožná s rovnicou (3). O interakcii, ktorú dostaneme náhradou diferenciálnych operátorov v pohybovej rovnici (neinteragujúcej častice) podľa vzťahov (11) sa niekedy hovorí ako o minimálnej interakcii.[124]

8.8 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nabitá častica je vonkajšími väzbami nútená pohybovať sa ako rovinný rotátor (pozri príkl. 10 ku 4. kapitole). Nájdite spektrum energie takejto sústavy ak sa nachádza v homogénnom magnetickom poli, ktoré má smer kolmý na rovinu rotátora.

---

[124] Názov pochádza pravdepodobne z toho, že zámena typu (11) je „minimálna" zmena, ktorú musíme urobiť v pohybovej rovnici, aby sme dostali kalibračné invariantnú pohybovú rovnicu.

2. Coulombovské elektrostatické pole možno opísať i pomocou potenciálov $\varphi = 0$, $\boldsymbol{A} = K\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}t$.

Prediskutujte formuláciu a riešenie úlohy „spektrum vodíka“. Nájdite súvis s obvyklým postupom. Návod: využite kalibračnú invariantnosť.

3. Nájdite operátor rýchlosti $\hat{\mathbf{v}} = (\mathsf{v}_1, \mathsf{v}_2, \mathsf{v}_3)$ bezspinovej častice v elektromagnetickom poli. Nájdite komutátory $[\mathsf{v}_i, \mathsf{v}_j]$.

4. Odvoďte rovnicu kontinuity pre Schrödingerovu rovnicu bezspinovej častice vo vonkajšom elektromagnetickom poli. Ukážte, že hustota prúdu sa dá vyjadriť v tvare

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{2}(\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi + (\hat{\mathbf{v}} \psi)^* \psi$$

kde $\hat{\mathbf{v}}$ je operátor rýchlosti (pozri predchádzajúci príklad).

5. Aký tvar majú Ehrenfestove vety pre prípad bezspinovej častice v magnetickom poli. Porovnajte s klasickými rovnicami (vzťahom pre Lorentzovu silu).

6. Na základe predchádzajúceho príkladu ukážte, že v prípade homogénneho magnetického poľa sa stred vlnového balíka opisujúceho časticu pohybuje po klasickej trajektórii.