

# Úvod do matematiky pro kvantovou chemii

Do poloviny devatenáctého století se popis fyzikálních dějů dělil na dvě skupiny

- částicové vlastnosti hmoty - pohyb částic byl popisován Newtonovými rovnicemi
- vlnové vlastnosti hmoty - popsány Maxwellovými rovnicemi

Tyto dvě charakteristiky hmoty se zdály být neslučitelné. Koncem 19. století se začaly objevovat nové jevy, které se nedaly vysvětlit v rámci klasické fyziky, např. Röntgenovo záření (1895), radioaktivita (1896) a objev elektronu (1897). Tato krize klasické fyziky se začala ještě jasněji projevovat začátkem 20. století při pokusech objasnit spektrum absolutně černého tělesa. V roce 1900 došel Planck k závěru, že pozorované spektrum lze objasnit pouze za předpokladu, že absolutně černé těleso a elektromagnetické záření, s nímž je v rovnováze, si vyměňují energii v jakýchsi dávkách či kvantech, která jsou rovna  $h\nu$ . Zde  $h$  je Planckova konstanta a  $\nu$  je frekvence elektromagnetického záření.

Následovaly další objevy

- teorie fotoefectu (Einstein 1905)
- planetární model atomu
- Bohrova kvantová teorie (1913)
- maticová kvantové mechanika (Heisenberg 1925)
- vlnová kvantová mechanika (Schrödinger)
- pravděpodobnostní interpretace kvantové mechaniky (Bohr 1926)

Tyto objevy vedly k poznání, že formulace nové teorie pro popis vlastností chování mikroskopických částic se neobejde bez matematického aparátu podstatně odlišného od aparátu klasické mechaniky.

V klasické mechanice je stav jedné částice dostatečně popsán, uvedeme-li v daném okamžiku její polohu a její hybnost. Při vzniku kvantové mechaniky se ukázalo, že nelze tento způsob převzít. Překážkou se stal fakt, že polohu a hybnost mikročástice nelze měřením současně určit. Nové poznatky o nezvyklých charakteristikách mikrosvěta - kvantování fyzikálních veličin, statistická povaha některých výroků kvantové mechaniky a zejména o vlnové povaze částic vedly k novému způsobu popisu stavu částice.

## **Popis stavu částice.**

Stav částice v časovém okamžiku  $t$  je v kvantové mechanice popsán komplexní funkcí  $\psi((x, y, z), t) = \psi(\vec{r}, t)$  reálných proměnných  $x, y, z$ . Tato funkce se nazývá vlnová funkce. Množina všech možných vlnových funkcí  $\psi$  popisujících všechny stavy pevně zvoleného kvantového objektu tvoří lineární prostor. Tento prostor se nazývá stavový prostor.

## **Statistická interpretace vlnové funkce.**

Vlnová funkce  $\psi$  sice slouží k úplnému popisu stavu částice, avšak její hodnoty nemají konkrétní fyzikální význam. Interpretace vlnové funkce byla odvozena z experimentálních pozorování a má statistický charakter. Z vlnové funkce odvozená veličina

$$\rho(\vec{r}, t) = \|\psi(\vec{r}, t)\|^2$$

znamená hustotu pravděpodobnosti polohy částice, tj. hustotu pravděpodobnosti, že se částice v časovém okamžiku  $t$  nachází v místě  $\vec{r}$ .

## **Operátory.**

V kvantové mechanice fyzikální veličiny vystupují jako operátory definované na stavovém prostoru. V kvantové mechanice mají význam lineární a hermitovské operátory. Každé fyzikální veličině je přiřazen operátor. Množina vlastních čísel operátoru odpovídá množině možných hodnot dané veličiny naměřených v jednotlivých fázích experimentu. Každá vlastní funkce operátoru popisuje specifický stav částice, v němž má veličina tzv. ostrou hodnotu shodnou s hodnotou vlastního čísla.