Lehký úvod do kvantové teorie II

5 Harmonický oscilátor

Na příkladu harmonického oscilátoru, jehož klasické řešení známe z Fyziky 1, si ukážeme typické postupy při hledání vlastních hodnot operátoru energie. Naše úloha je

► $$\hat{\mathbf{H}}\,|\,n> = E_n\,|\,n>\,,\qquad \hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2. \tag{1}$$

Jde o problém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru s konkrétním průběhem potenciální energie. Hamiltonova funkce jednodimenzionálního harmonického oscilátoru je dána součtem kinetické a potenciální energie

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\ . \tag{2}$$

Hamiltonův operátor je v prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ potom dán jednoduchou relací

► $$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{3}$$

Odpovídající Schrödingerova rovnice pro vlastní funkci $\psi(x)$ z prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ má jednoduchý tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\,\psi(x)\,. \tag{4}$$

Jde o obyčejnou lineární diferenciální rovnici druhého řádu s nelineárním koeficientem u nulté derivace. Standardní tvar této rovnice (s jednotkovým koeficientem u nejvyšší derivace) je:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\,x^2\right)\psi = 0\,. \tag{5}$$

Rovnici budeme řešit ve čtyřech krocích:

1. substituce ve vnitřní (nezávislé) proměnné

V nezávislé proměnné budeme volit takovou substituci, která „zbezrozměrní“ rovnici. Přesuňme koeficienty tak, aby byly symetrické u proměnné x

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\frac{m\omega}{\hbar}\mathrm{d}x^2} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\,\psi + \frac{2E}{\hbar\omega}\psi \;= 0 \tag{6}$$

a proveďme substituci

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;x\,, \tag{7}$$

po které Schrödingerova rovnice získá bezrozměrný tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi + \lambda\psi = 0\,, \qquad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}\,. \tag{8}$$

2. substituce ve vnější (závislé) proměnné

V závislé proměnné budeme volit takovou substituci, která zohlední chování vlnové funkce pro $\xi \to \pm\infty$. Pro velká ξ můžeme zanedbat poslední člen v rovnici (8) oproti předposlednímu. Přibližně platí

$$\xi \to \pm\infty \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi \approx 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi \approx \mathrm{e}^{\pm\xi^2/2}\,.$$

(řešení stačí dosadit do původní rovnice a zanedbat členy s nižšími mocninami ξ). Kladné z nalezených řešení evidentně není z prostoru $\mathcal{L}^2$, integrál z kvadrátu přes celý prostor by byl nekonečný. Vlnová funkce se tedy pro velká ξ musí chovat jako funkce $\exp[-\xi^2]$. To nás přivádí k substituci pro závislou proměnnou

$$\psi(\xi) = \mathrm{e}^{-\xi^2/2}\,u(\xi)\,, \tag{9}$$

po jejímž provedení dostaneme rovnici

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)\,u = 0\,. \tag{10}$$

Derivace se automaticky rozumí podle nové proměnné ξ. V principu by z matematického hlediska bylo v pořádku říci „v rovnici (5) provedeme substituce (7) a (9) a výsledná rovnice je (10)“. V bodech 1 a 2 jsme si jen ukázali, jaké pohnutky nás k těmto substitucím vedou, protože postup je obdobný i u jiných průběhů potenciální energie.

3. rozvoj řešení do mocninné řady

Řešení rovnice (10) budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k\,.$$

Snadno nalezneme první a druhou derivaci

$$u'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k\, c_k\, \xi^{k-1}; \qquad u''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2}.$$

Výrazy pro u a její derivace dosadíme do rovnice (10):

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k\, c_k\, \xi^{k} + (\lambda-1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k\, \xi^{k} = 0\,.$$

Jednotlivé členy upravíme tak, aby mocniny proměnné ξ byly stejné (v prvním členu položíme $k - 2 = l$):

$$\sum_{l=-2}^{\infty} (l+1)(l+2)\, c_{l+2}\, \xi^{l} - \sum_{l=0}^{\infty} 2l\, c_l\, \xi^{l} + (\lambda-1) \sum_{l=0}^{\infty} c_l\, \xi^{l} = 0\,.$$

První dva členy prvního součtu jsou nulové, a proto můžeme spodní hranici posunout na hodnotu $l = 0$:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1)(l+2)\, c_{l+2} - (2l+1-\lambda)\, c_l\right] \xi^{l} = 0\,.$$

Má-li být polynomiální výraz identicky nulový pro každou hodnotu ξ, musí být nulové všechny koeficienty, tj. výrazy v hranaté závorce. Získáváme tak rekurentní relaci pro koeficienty c_l naší řady:

► $$c_{l+2} = \frac{(2l+1-\lambda)}{(l+1)(l+2)}\, c_l\,. \tag{11}$$

Budeme-li znát koeficienty c_0 a c_1, budeme znát celé řešení, protože z rekurentní relace můžeme spočítat

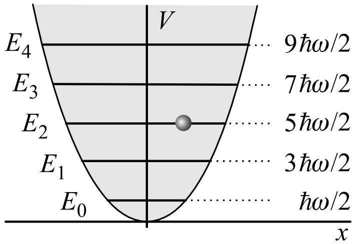
$$c_0 \quad \Rightarrow \quad c_2, c_4, c_6, \ldots$$
$$c_1 \quad \Rightarrow \quad c_3, c_5, c_7, \ldots.$$

Koeficienty c_0 a c_1 tak hrají roli dvou integračních konstant řešení diferenciální rovnice (10) druhého řádu. Sudá část řady se počítá z c_0 a lichá z c_1.

4. oříznutí řady

Nalezené řešení je ve tvaru nekonečné mocninné řady. Řeší sice původní rovnici, ale není z prostoru $\mathcal{L}^2$. Aby bylo řešení z $\mathcal{L}^2$ (integrovatelné s kvadrátem), musí být řada konečná, tedy polynomiální. Prakticky to znamená, že koeficienty řady musí být od určitého $l = n$ nulové. V rekurentní relaci (11) bude čitatel pro toto $l = n$ nulový a veškeré odvozené koeficienty c_l s $l \geq n$ nulové. Vidíme, že nebude možné takto „oříznout“ současně sudé i liché členy řady. Proto jsou možná jen sudá ($c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$) nebo jen lichá řešení ($c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$) představující sudý nebo lichý polynom stupně n. Podmínka oříznutí (nulovost čitatele) v (11) je $2n + 1 - \lambda = 0$ a plyne z ní po vyjádření λ spektrum energie harmonického oscilátoru:

► $$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega\,. \tag{12}$$



Spektrum harmonického oscilátoru.

Poznámka 1: Nezapomínejte, že energie E (vlastní hodnota operátoru $\hat{\mathbf{H}}$) je po celou dobu výpočtu schována v bezrozměrné konstantě (vlastním číslu) λ.

Poznámka 2: Sama Schrödingerova rovnice má řešení pro každou hodnotu energie. Tato řešení ale nejsou integrovatelná s kvadrátem, až výběr integrovatelných funkcí (oříznutí řady) vede k diskrétnímu spektru operátoru energie (jen pro některé vybrané hodnoty energie ubývá řešení v $\pm\infty$ dostatečně rychle, aby bylo integrovatelné s kvadrátem). Tato situace je typická pro spojité průběhy potenciální energie s minimem.

Poznámka 3: Základní hladina energie $E_0 = \hbar\omega/2$ je nenulová! Ani při nulové absolutní teplotě není harmonický oscilátor v klidu a vykonává tzv. nulové kmity (například oscilace krystalové mříže). Při absolutní nule se hmota nachází ve stavu s nejnižší možnou energií, nikoli však v klidu. To je dáno relacemi neurčitosti: nemůžeme znát současně polohu (nulovou) a hybnost (také nulovou).

Poznámka 4: Spektrum operátoru energie je ekvidistantní, rozdíl dvou libovolných sousedních energetických hladin je $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$: To je právě známý Planckův vztah z počátku 20. století. Energie jakýchkoli kmitů se nemůže měnit spojitě, ale po skocích (energetických kvantech)

$$\Delta E = \hbar\omega\,. \tag{13}$$

Poznámka 5: Zde se také nachází jedna z prvních možností experimentálního určení Planckovy konstanty měřením energetických kvant (například při fotoelektrickém jevu: vyrážení elektronů z povrchu kovu za pomoci kvant energie elektromagnetického záření – fotonů). Zatím byla Planckova konstanta jediným neurčeným parametrem základních postulátů kvantové teorie. Planckova konstanta se samozřejmě vyskytuje i v jiných vztazích.

Poznámka 6: Polynomiální řešení, která jsme našli pro funkci u, se nazývají Hermitovy polynomy a označujeme je $H_n(\xi)$. Pro dané n nejprve určíme bezrozměrné vlastní číslo λ_n

$$\lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega} = \frac{2(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega} = 2n+1$$

a z rekurentní formule (11) určíme pomocí c_0 nebo c_1 (podle toho zda jde o sudý či lichý polynom) ostatní koeficienty rozvoje. Pro $c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$ nebo $c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$ se nalezené polynomy nazývají Hermitovy. Prvních několik Hermitových polynomů vychází:

$$H_0(\xi) = 1\,, \qquad H_3(\xi) = \xi - 2/3\,\xi^3\,,$$
$$H_1(\xi) = \xi\,, \qquad H_4(\xi) = 1 - 4\xi^2 + 4/3\,\xi^4\,,$$
$$H_2(\xi) = 1 - 2\xi^2\,, \qquad H_5(\xi) = \xi - 4/3\,\xi^3 + 4/15\,\xi^5 \ldots$$

Koeficienty c_0 a c_1 jsme volili rovny jedné. Stupeň polynomu n udává současně počet nulových bodů polynomu (počet průsečíků s osou ξ).

Poznámka 7: Hermitovy polynomy se snadno počítají nenormované z rekurentní formule

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi\, H_n(\xi) - 2n\, H_{n-1}(\xi)\,.$$

Pro první polynomy vychází:

$$H_0(\xi) = 1\,, \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi\,,$$
$$H_1(\xi) = 2\xi\,, \qquad H_4(\xi) = 16\,\xi^4 - 48\,\xi^2 + 12\,,$$
$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2\,, \qquad H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \ldots$$

Normovací koeficienty vlnové funkce $H_n(\xi)\exp[-\xi^2/2]$) jsou dány vztahem

$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\; n!\, 2^n}}\,.$$

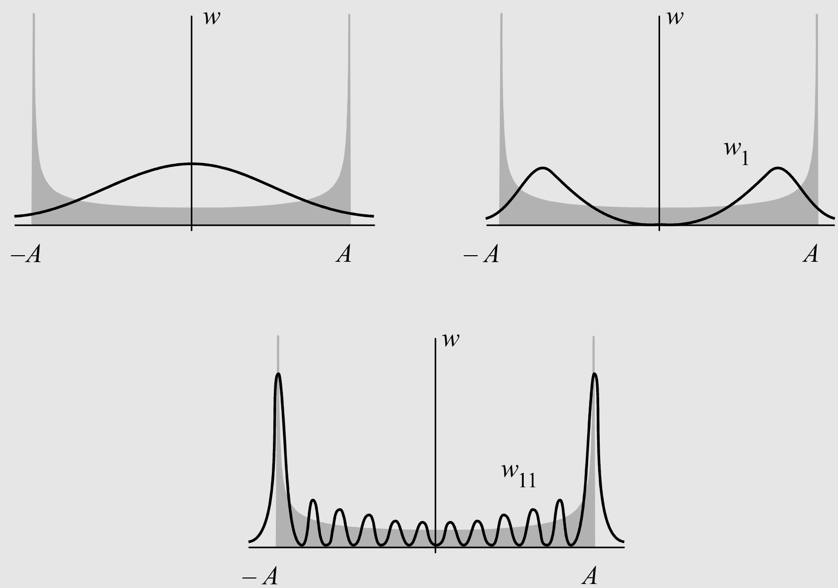
Poznámka 8: Celkové řešení spektrálního problému je

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \\ |\, n > = \psi_n(\xi) &= \alpha_n H_n(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\,; \quad n = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned} \qquad (14)$$

Vlastní funkce $\psi_n(\xi)$ tvoří přirozený úplný ortonormální systém na Hilbertově prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$, který pro $\xi \to \pm\infty$ „dosti rychle“ ubývá k nule.

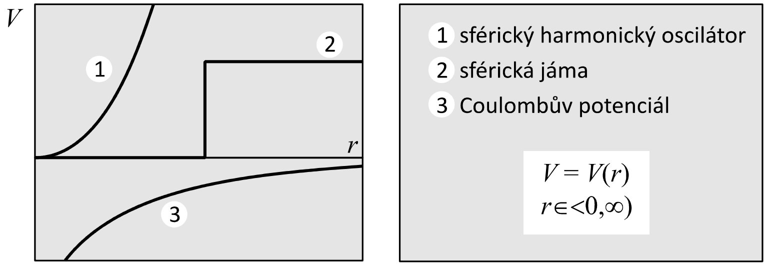
Poznámka 9: Hustota pravděpodobnosti, že částice kmitající s energií E_n (oscilátor ve stavu $|\, n >$) se nachází v poloze x (resp. bezrozměrné poloze ξ), je dána výrazem $w_n = \psi_n{}^*\psi_n$. Pro několik prvních stavů je vykreslena na obrázku. Pravděpodobnost má oscilující charakter a existuje malá nenulová pravděpodobnost výskytu oscilátoru i za klasickými body obratu. Tento obraz nastává pro systémy s nízkou teplotou a je zcela odlišný od klasického řešení. Pro velké energie (vysoká n) by se měla křivka blížit klasické pravděpodobnosti výskytu oscilátoru (1.36).

Vidíme však, že oscilace jsou sice velmi husté, ale existuje značné množství bodů, ve kterých je kvantová pravděpodobnost nulová. Nic takového však u makroskopických systémů neměříme. Proč? To je dáno rozlišovací schopností makroskopických přístrojů. Žádný přístroj nebude měřit polohu s takovou přesností, aby registroval jednotlivá minima pravděpodobnosti u vysokých energetických stavů. Přístroj ve skutečnosti určuje polohu s konečnou přesností, do které se vejde řada minim a registruje jen střední hodnotu hustoty pravděpodobnosti. A tou je právě klasická křivka, která je na obrázku znázorněna šedou oblastí.



Kvantová pravděpodobnost výskytu oscilátoru. Povšimněte si, že na okrajích je (s výjimkou základního stavu) pravděpodobnost maximální.

6 Sféricky symetrický potenciál



Některé sférické potenciály.

Sféricky symetrickým (centrálním) nazýváme potenciál, který závisí jen na vzdálenosti od určitého středového bodu. Pro popis pohybu těles v sféricky symetrickém potenciálu je velmi výhodná sférická souřadnicová soustava. Mezi nejznámější sférické potenciály patří sférický harmonický oscilátor, sférická jáma a Coulombův potenciál. Sférický oscilátor si můžete představit jako tělísko v počátku souřadnic, od kterého vedou pružiny na všechny strany. Kdykoli ho vychýlíme, bude působit vratná síla směrem do středu. Průběh potenciální energie je kvadratický. Sférická jáma přibližně odpovídá potenciálu, který pociťuje neutron zachycený v atomovém jádře. Jaderné síly (derivace potenciálu) na hranici jámy ($r = a$) jsou značné – v idealizaci (15) dokonce nekonečné – a v jiných oblastech velmi slabé. Coulombův potenciál se uplatní například ve vodíkovém atomu, kdy osamocený elektron podléhá působení jediného protonu v atomovém jádře. Nezapomínejte, že $r \in \langle 0, \infty)$. Průběhy těchto známých potenciálů jsou:

$$
\begin{aligned}
&(1) \qquad V(r) = \frac{1}{2} k r^2 , \\
&(2) \qquad V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases} , \qquad\qquad (15) \\
&(3) \qquad V(r) = \frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{\alpha}{r} .
\end{aligned}
$$

U sférického potenciálu spolu komutuje operátor energie, operátor libovolné projekce momentu hybnosti a operátor kvadrátu momentu hybnosti. Tato trojice tvoří úplnou množinu pozorovatelných u nerelativistického sféricky symetrického problému (v relativistické úloze k těmto proměnným ještě přibude spin):

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}] = 0 . \qquad (16)$$

Jednotlivé projekce mezi sebou nekomutují, ltze změřit jen jednu z nich. U soustavy nezávislých vzájemně komutujících operátorů je možné hledat společné vlastní vektory ke všem operátorům. U sféricky symetrického problému budeme tedy řešit soustavu tří rovnic pro vlastní vektory

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}}\,|\,n,l,m> &= E_n\,|\,n,l,m>\,,\\
\hat{\mathbf{L}}^2\,|\,n,l,m> &= \lambda_l\,|\,n,l,m>\,,\\
\hat{\mathbf{L}}_3\,|\,n,l,m> &= \mu_m\,|\,n,l,m>\,.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Index n čísluje energetické stavy, index l stavy kvadrátu momentu hybnosti a index m stavy projekce momentu hybnosti do libovolné osy (zvolili jsme třetí osu). Vlastní čísla jsme označili E, λ, μ. V tomto textu se budeme zejména zabývat nalezením hodnot jedné z projekcí momentu hybnosti, například do třetí osy. Operátor odpovídající třetí projekci momentu hybnosti zkonstruujeme z analogie s operátorem hybnosti:

►
$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{p}} &= -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial x};\\
\hat{\mathbf{L}}_3 &= -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial \varphi}.
\end{aligned}
\tag{18}
$$

Kartézkou souřadnici x nahrazuje azimutální úhel φ. Nalezněme nyní řešení rovnice pro vlastní čísla

$$
\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{L}}_3\,|\,\psi> = \mu_m\,|\,\psi> \quad \Rightarrow\\
&-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\varphi) = \mu_m\psi(\varphi) \quad \Rightarrow\\
&-\mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\varphi} = \mu_m\psi \quad \Rightarrow\\
&\psi(\varphi) = c\,\exp\left[\mathrm{i}\frac{\mu_m}{\hbar}\,\varphi\right].
\end{aligned}
\tag{19}
$$

Nalezené řešení musí být periodické v úhlu φ:

$$
g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi) \quad \Rightarrow \quad \mu_m = m\hbar\,; \qquad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots
$$

Odvodili kvantování projekce momentu hybnosti. Projekce momentu hybnosti může nabývat jen celistvých násobků Planckovy konstanty.

Poznámky k řešení

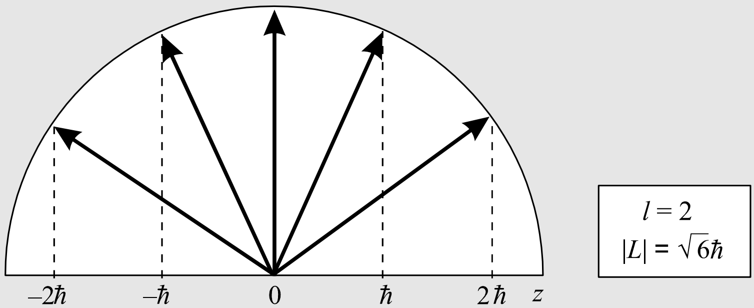
Následující poznámky jsou velmi důležité, čtěte je pozorněji než samo řešení!

Poznámka 1: Možné hodnoty projekce momentu hybnosti jsou:

$$
L_3 = m\hbar\,, \qquad m = \,-l, -l+1, \ldots, l\,. \tag{20}
$$

Číslo l čísluje velikost momentu hybnosti a nazývá se *vedlejší kvantové číslo* (hlavní kvantové číslo čísluje energii). Číslo m čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy a nazývá se *magnetické kvantové číslo*. Název souvisí s tím, že elektron v atomárním obalu má moment hybnosti úměrný magnetickému momentu, takže číslo m popisuje jak kvantování momentu hybnosti, tak magnetického momentu.

Poznámka 2: Vidíme, že stavy s konkrétním vedlejším kvantovým číslem l jsou degenerovány – existuje více vlastních vektorů $|\,l, m>$, které přísluší stejnému kvantovému číslu l. Tyto vektory se od sebe liší kvantovým číslem m a jejich počet je $2l+1$ (tzv. stupeň degenerace, který označujeme symbolem #).



Možné projekce momentu hybnosti pro l = 2.

Poznámka 3: Možné hodnoty velikosti momentu hybnosti jsou:

$$|L| = \sqrt{l(l+1)}\;\hbar\,; \qquad l = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{21}$$

Vztah pro velikost kvadrátu momentu hybnosti lze dostat jako aritmetický průměr všech možných hodnot. Například pro $l = 2$ jsou možné hodnoty projekcí L_x, L_y nebo L_z rovny $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$. Průměrná hodnota kvadrátu je proto dána vztahem

$$<L^2> = <L_x^2> + <L_y^2> + <L_z^2> = 3<L_z^2> =$$

$$= 3\,\frac{4\hbar^2 + \hbar^2 + 0 + \hbar^2 + 4\hbar^2}{5} = 6\hbar^2 \qquad \Rightarrow$$

$$|L| = \sqrt{6}\,\hbar.$$

Pro obecné číslo l bychom dostali obdobným výpočtem vztah (21).

Poznámka 4: Skutečný význam Planckovy konstanty plyne z výsledku (20). Jedná se o *elementární kvantum momentu hybnosti*. Při měření momentu hybnosti budeme vždy měřit projekci momentu do určité osy, dané měřicím zařízením. Tato projekce je vždy násobkem redukované Planckovy konstanty (Planckovy-Diracovy konstanty).

Poznámka 6: Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu atomu vodíku písmeny s, p, d, f podle tabulky:

$l = 0$	s stav	$m = 0$	$\# = 1$
$l = 1$	p stav	$m = -1, 0, 1$	$\# = 3$
$l = 2$	d stav	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	$\# = 5$
$l = 3$	f stav	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	$\# = 7$

7 Jednoduché systémy: oscilátor, vodík

Uveďme nyní výsledky výpočtů energetického spektra pro jednoduché sférické potenciály.

Sférický oscilátor

Pro potenciální energii harmonického oscilátoru vychází energetické spektrum

► $$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad\Rightarrow\quad E_{\nu l}=(2\nu+l+3/2)\,\hbar\omega=(n+3/2)\hbar\omega\,. \tag{22}$$

Nejmenší možná hodnota energie (nulové kmity) je $3/2\hbar\omega$. Radiální kvantové číslo ν čísluje pořadí radiálních stavů (polynomů v ořezu příslušné řady) a zpravidla také počet průsečíků radiálního řešení s osou x. Většinou se zavádí tzv. hlavní kvantové číslo n, které skutečně čísluje stavy energie:

$$n\equiv 2\nu+l\ ;\quad n=0,1,2,\dots\quad ,\quad l=0,1\ \dots\ n\ . \tag{23}$$

Spektrum oscilátoru je degenerované (ke každé hodnotě energie přísluší více stavů, každé n lze složit z více kombinací ν a l). Snadno určíme stupeň degenerace, uvědomíme-li si, že ke každému vedlejšímu kvantovému číslu existuje $2l+1$ hodnot magnetických čísel m:

► $$\#_n=\sum_l 2l+1=\sum_{\nu=0}^{n/2}2(n-2\nu)+1=\sum_{\nu=0}^{n/2}2n-4\nu+1=\frac{(n+1)(n+2)}{2}\,. \tag{24}$$

Řadu (24) jsme sečetli jako aritmetickou řadu. Každá energetická slupka n obsahuje $(n+1)(n+2)/2$ stavů.

Coulombický potenciál

Pro Coulombickou potenciální energii vychází energetické spektrum

► $$V(r)=\frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}=-\frac{\gamma}{r}\quad\Rightarrow \qquad E_{\nu l}=-\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2(\nu+l+1)^2}=-\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2 n^2}\,. \tag{25}$$

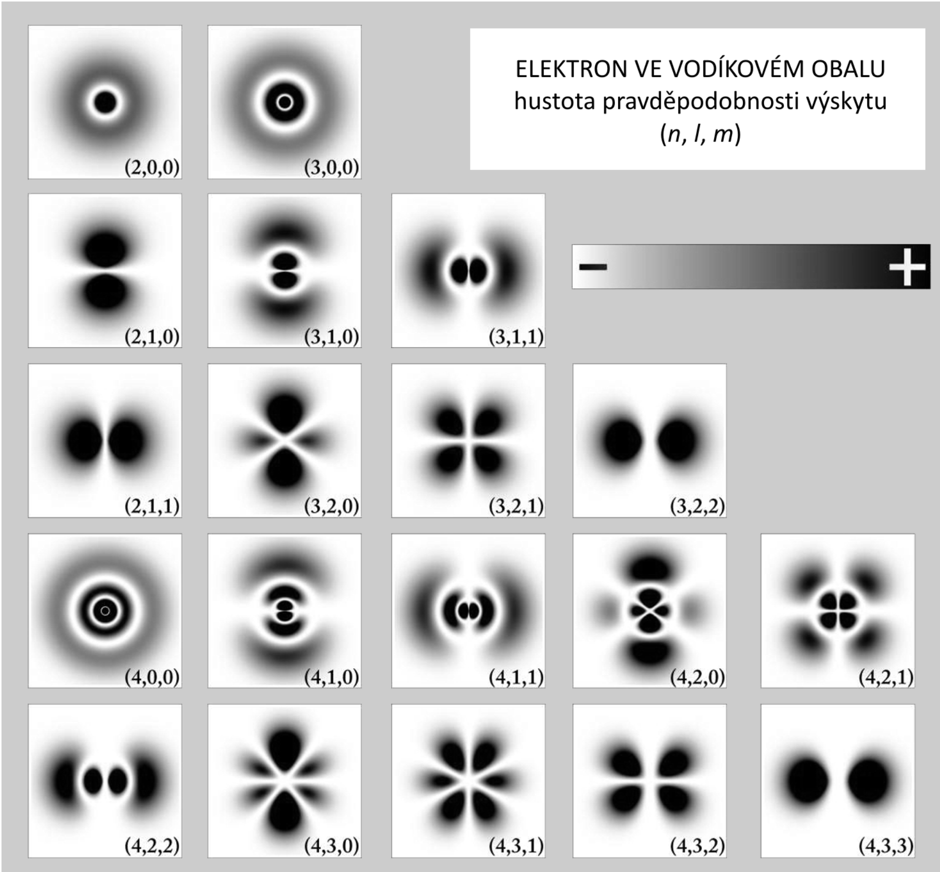
Hlavní kvantové číslo n číslující stavy energie jsme zavedli vztahem

$$n\equiv\nu+l+1\quad ;\qquad n=1,2,\dots\quad ,\quad l=0,1\ \dots\ n-1\ . \tag{26}$$

Stupeň degenerace bude

► $$\#_n=\sum_l 2l+1=\sum_{\nu=0}^{n-1}2(n-\nu-1)+1=\sum_{\nu=0}^{n-1}2n-2\nu-1=n^2\,. \tag{27}$$

Jde-li o atom vodíku, může mít každý elektron ještě dva spinové stupně volnosti $m_s = \pm 1/2$ a celkový počet stavů v jedné energetické slupce je proto $2n^2$. Tyto stavy se liší hodnotou kvantových čísel l, m, m_s.



Obr. 81: Hustota pravděpodobnosti pro vodík. Kyle Forinash, Indiana University Southeast, 2008.