Moderná fyzika

Peter Markoš

FEI STU Bratislava

Obsah

1 Úvod **9**

1.1 Základné fyzikálne konštanty . . . 12
1.2 Žiarenie čierneho telesa . . . 14
1.2.1 Planckov zákon . . . 17
1.2.2 Kvantovanie elektromagnetického poľa . . . 18
1.2.3 Stefanov-Boltzmannov zákon . . . 19
1.2.4 Wienov posunovací zákon . . . 20
1.3 Fotoelektrický jav . . . 21
1.4 Generovanie RTG žiarenia . . . 23
1.5 Časticovo-vlnový dualizmus . . . 24
1.6 Difrakcia elektrónov na kryštalickej mriežke . . . 24
1.7 Atóm . . . 25
1.7.1 Rutherfordov experiment . . . 26
1.7.2 Klasická fyzika a atóm . . . 26
1.7.3 Spektrum atómu vodíka . . . 27
1.7.4 Bohrov model atómu . . . 29
1.7.5 Moment hybnosti . . . 31
1.8 Spin . . . 31
1.8.1 Magnetický moment . . . 32
1.8.2 Štatistické vlastnosti súboru kvantových častíc . . . 33
1.9 Základné elementárne častice . . . 33
1.10 Jadro atómu . . . 35
1.10.1 Jadrové sily. Mezóny . . . 35
1.10.2 Väzbová energia . . . 37
1.10.3 α-rozpad jadier. Tunelovanie α-častíc . . . 37
1.10.4 β-rozpad. Neutríno . . . 38
1.10.5 γ-žiarenie . . . 39
1.11 Typické veličiny v mikrosvete . . . 39

1.11.1 Energia . . . 40
1.11.2 Čas . . . 41
1.11.3 Vzdialenosť . . . 43
1.11.4 Rýchlosť . . . 45
1.12 Príklady . . . 46

2 Formalizmus kvantovej mechaniky 55
2.1 Vlnová funkcia . . . 55
2.1.1 Vlnová funkcia pre voľnú časticu . . . 56
2.1.2 Schrödingerova rovnica . . . 57
2.1.3 Spojitosť vlnovej funkcie . . . 57
2.1.4 Normovanosť vlnovej funkcie . . . 58
2.1.5 Princíp superpozície . . . 58
2.2 Amplitúda pravdepodobnosti . . . 58
2.2.1 Prechod kvantovej častice cez dve prekážky . . . 59
2.3 Operátory . . . 61
2.3.1 Operátory niektorých fyzikálnych veličín . . . 62
2.3.2 Vlastné hodnoty a vlastné funkcie operátorov . . . 63
2.3.3 Meranie . . . 65
2.3.4 Komutujúce a nekomutujúce operátory . . . 65
2.3.5 Princíp neurčitosti . . . 67
2.3.6 Reprezentácia operátorov maticami . . . 67
2.3.7 Hermitovské operátory . . . 69
2.4 Schrödingerova rovnica . . . 69
2.5 Viazané a rozptylové stavy . . . 70
2.6 Rovnica kontinuity . . . 71
2.7 Vlnový balík . . . 72
2.8 Princíp korešpondencie . . . 75
2.9 Príklady . . . 75

3 Nekonečne hlboká pravouhlá potenciálová jama 78
3.1 Jednorozmerná nekonečne hlboká potenciálová jama . . . 78
3.2 Dvojrozmerná nekonečne hlboká jama . . . 81
3.2.1 Metóda separácie premenných . . . 81
3.2.2 Degenerácia energetických hladín . . . 82
3.3 Trojrozmerná nekonečná potenciálová jama . . . 82
3.4 Elektrónový plyn v kove . . . 83
3.4.1 Hustota stavov . . . 83
3.4.2 Fermiho energia . . . 84
3.5 Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkcia . . . 85
3.6 Priestorové kvantovanie v mezoskopickej fyzike . . . 85
3.7 Príklady . . . 87

4 Pravouhlá potenciálová jama a bariéra **94**
4.1 Viazané stavy v konečnej potenciálovej jame . . . 95
4.1.1 Symetria . . . 98
4.1.2 Dvojrozmerná jama . . . 99
4.2 Rozptyl častice . . . 100
4.2.1 Hustota prúdu pravdepodobnosti . . . 102
4.2.2 Amplitúda prechodu a odrazu . . . 103
4.2.3 Koeficient prechodu . . . 104
4.3 Tunelovanie častice . . . 105
4.4 Potenciálový schod . . . 106
4.5 Prechodová matica . . . 108
4.6 Rezonančné tunelovanie . . . 109
4.7 Periodický potenciál . . . 111
4.7.1 Elektrón v kryštalickej mriežke kovu . . . 112
4.8 Príklady . . . 114

5 Harmonický oscilátor **117**
5.1 Kvantový oscilátor . . . 118
5.1.1 Riešenie Schrödingerovej rovnice . . . 118
5.1.2 Vlastné energie a vlastné funkcie . . . 122
5.2 Princíp korešpondencie . . . 123
5.3 Približné metódy výpočtu vlastných energií viazaných stavov . . . 125
5.4 Príklady . . . 126

6 Častica v dvojitej potenciálovej jame **128**
6.1 Častica viazaná v dvojitej potenciálovej jame . . . 129
6.1.1 Všeobecné riešenie . . . 130
6.1.2 Symetrický potenciál . . . 131
6.2 Ión molekuly vodíka H_2^+ . . . 133
6.3 Benzén . . . 134
6.4 Model tesnej väzby . . . 135
6.5 Príklady . . . 141

7 Kvantové častice so spinom **145**
7.1 Vlnová funkcia častice so spinom . . . 145
7.2 Elektrón so spinom 1/2 . . . 146
7.3 Elektrón v magnetickom poli. Pauliho matice . . . 147
7.4 Kvantové častice so spinom . . . 149
7.5 Dva fermióny . . . 150
7.5.1 Molekula vodíka H_2 . . . 151
7.6 Bozóny . . . 152
7.6.1 Stimulovaná emisia . . . 153
7.6.2 Boseho-Einsteinova kondenzácia . . . 154
7.7 Príklady . . . 154

8 Sféricky symetrický problém **156**
8.1 Schrödingerova rovnica vo sférických súradniciach . . . 157
8.1.1 Metóda separácie premenných . . . 158
8.2 Vlastné funkcie operátora $\Delta_{\theta,\phi}$ . . . 159
8.2.1 Sférické funkcie . . . 163
8.2.2 Rozptyl na sféricky symetrickom potenciáli . . . 163
8.3 Operátor momentu hybnosti . . . 164
8.4 Radiálna vlnová funkcia . . . 164
8.4.1 Riešenie radiálnej rovnice . . . 166
8.4.2 Vlastné energie a vlastné funkcie . . . 167

9 Atómy **168**
9.1 Vodík $_1$H . . . 168
9.2 Hélium $^4_2$He . . . 171
9.2.1 Ionizačná energia . . . 172
9.3 Mnohoelektrónové atómy . . . 173
9.3.1 Magnetizmus . . . 176
9.4 Spektrá atómov . . . 177
9.4.1 Výberové pravidlá . . . 177
9.4.2 RTG spektrum atómov . . . 178
9.5 Príklady . . . 178

10 Mechanické kmity atómov a molekúl **183**
10.1 Rotácie dvojatómových molekúl . . . 183
10.2 Vibrácie dvojatómových molekúl . . . 185
10.3 Kmity kryštalickej mriežky . . . 188
10.3.1 Vplyv kryštalickej štruktúry na disperzný vzťah . . . 189
10.3.2 Merné teplo kryštálov . . . 191
10.3.3 Fonóny . . . 193
10.3.4 Kmity mriežky pri nulovej teplote . . . 193
10.4 Kvantovanie elektromagnetického poľa. Vákuum . . . 194
10.5 Príklady . . . 194

11 Klasická a kvantová mechanika **198**
11.1 Planckova konštanta . . . 198
11.2 Princíp najmenšieho účinku . . . 199
11.3 Meranie v kvantovej mechanike . . . 200
11.3.1 Pravdepodobnosť namerania niektorej hodnoty . . . 201
11.3.2 Redukcia vlnovej funkcie . . . 202
11.3.3 Následné merania . . . 202
11.4 Kvantová fyzika a teplota . . . 203
11.4.1 Teplota ako energetická škála . . . 204
11.4.2 Dekoherencia: Elektrónová vodivosť v kove . . . 204
11.4.3 Typické teploty vo fyzike . . . 205

12 Dodatky **207**
A Základné operácie s maticami . . . 207
B Odvodenie rovnice kontinuity . . . 210
C Laplaceov integrál . . . 211
D Vlnový balík . . . 212
E δ-funkcia . . . 213
F δ-funkčná potenciálová jama . . . 215
F.1 Základný stav častice v jednej δ-funkčnej jame . . . 215
F.2 Dve δ-funkčné jamy . . . 216
G Inverzný priestor (k-priestor) . . . 220
G.1 Odvodenie vzťahu (1.15) . . . 222
G.2 Hustota elektrónových stavov (rovnica 3.34) . . . 222
H Prechodová matica pre pravouhlú potenciálovú bariéru . . . 223
I Prechod častice cez zložitejšie sústavy . . . 225
I.1 Približný výpočet pravdepodobnosti tunelovania. WKB priblíženie . . . 226
J WKB metóda výpočtu viazaných stavov . . . 227
K Spin dvoch fermiónov . . . 230
L Sférický harmonický oscilátor . . . 232

Literatúra **235**

Zoznam tabuliek

1.1 Základné fyzikálne konštanty a ich hodnoty v sústave SI 14
1.2 Konštanty charakterizujúce atóm vodíka 30
1.3 Typické frekvencie, vlnové dĺžky elektromagnetického žiarenia 34
1.4 Základné fyzikálne parametre elektrónu, protónu, neutrónu a fotónu 35
1.5 Typické energie v mikrosvete 40
1.6 Typické časy niektorých procesov v mikrosvete 42
1.7 Typické rozmery objektov v mikrosvete 44
1.8 Niektoré typické rýchlosti. Uvedená rýchlosť svetla je presná hodnota, z ktorej je v sústave SI odvodená dĺžková miera 1 meter. 46
1.9 Zastúpenie izotopov železa $^{A}_{26}$Fe v prírode 53

3.1 Mriežkové konštanty a experimentálne hodnoty Fermiho energie 91

8.1 Analytický tvar funkcií $\Phi_\ell^m(\theta)$ pre pre $\ell = 0$, 1 a 2. 163

9.1 Elektrónové hladiny v atóme 173
9.2 Periodická tabuľka prvkov 175
9.3 Vlnová dĺžka a energia RTG žiarenia podľa Moseleyovho zákona 182

10.1 Typické frekvencie rotačných módov dvojatómových molekúl 185
10.2 Typické frekvencie vibračných módov dvojatómových molekúl 187
10.3 Mriežkové konštanty a Debyeova teplota 197

11.1 Typické teploty 206

K.1 Stredné hodnoty spinových operátorov dvoch elektrónov 231
L.1 Desať najnižších stavov trojrozmerného harmonického oscilátora 233

KAPITOLA 1

Úvod

Moderná fyzika nadväzuje na klasickú fyziku, ktorá sa rozvíjala do konca 19. storočia. Klasickou fyzikou máme na mysli Newtonovu mechaniku, Maxwellovu elektrodynamiku a optiku, Boltzmannovu štatistickú fyziku a termodynamiku. Ich spoločným menovateľom bola klasická predstava sveta zloženého z telies, ktorých rozmery, hmotnosť, energia, rýchlosť a iné fyzikálne charakteristiky sa dali odmerať s dostatočnou presnosťou. Pretože v experimentoch málokedy mala úlohu detailná štruktúra látky, mohli byť opísané a vysvetlené na základe predstavy spojitého rozloženia hmoty v priestore. Atómy ako najmenšie čiastočky hmoty zamestnávali myseľ fyzikov a filozofov síce už dávno, ale ich štruktúra zostávala nepoznaná. Klasická fyzika dosiahla vrchol v Maxwellovej elektrodynamike, ktorá úspešne opísala elektromagnetické pole.

Koncom 19. storočia sa zdalo, že fyzika dosiahla svoj cieľ – kompletný opis sveta okolo nás. Zostávalo už len meraním upresniť niektoré fyzikálne konštanty. V priebehu niekoľkých rokov sa však táto optimistická predstava zrútila. Nové experimenty (niektoré z nich neskôr opíšeme) priniesli výsledky zjavne nezapadajúce do vtedajších fyzikálnych predstáv. Ich vysvetlenie viedlo k formulácii dvoch kľúčových fyzikálnych teórií 20. storočia – teórie relativity a kvantovej mechaniky.

V tomto texte sa sústredíme na vysvetlenie základných pojmov a metód kvantovej mechaniky. Naším cieľom bude vysvetliť, čím sa kvantová mechanika líši od klasickej fyziky. Hoci viaceré predpoklady a závery kvantovej mechaniky odporujú našej každodennej skúsenosti a intuícii, uvidíme, že kvantová teória je vnútorne konzistentná a schopná vysvetliť prakticky všetky javy mikrosveta, s ktorými sa dnes v modernej fyzike a technike stretávame. Oproti tomu sú mnohé fyzikálne problémy - napríklad štruktúra a stabilita atómu – v rámci klasickej fyziky nevysvetliteľné.

Klasická fyzika sa v 19. storočí zaoberala zväčša štúdiom fyzikálnych objektov mnohonásobne väčších, ako je rozmer atómu. Pri opise procesov prebiehajúcich v mikrosvete však často zlyhala. To nemusí prekvapiť, pretože zákony klasickej fyziky boli určené pre opis fyzikálnych vlastností štruktúr, s akými sa človek každodenne stretáva. Nič nezaručuje ich platnosť pre opis napríklad atómov, ktoré majú rozmer približne 10^{-10} metra (typická vzdialenosť atómov

v kryštalickej mriežke) alebo pre vysvetlenie procesov, v ktorých si objekty vymieňajú energie porovnateľné s jedným elektrónvoltom:

$$1\ \mathrm{eV} = 1{,}602 \times 10^{-19}\ \mathrm{J} \tag{1.1}$$

ktoré sú typické napríklad pre elektrónové procesy v atóme a v tuhých látkach.

Pre kvantitatívne určenie toho, čo je malé a čo veľké, potrebujeme nejakú typickú veličinu, s ktorou budeme náš systém porovnávať. Takou sa ukázala byť Planckova konštanta

$$h = 6{,}626 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js} \tag{1.2}$$

Planckova konštanta má rozmer účinku (fyzikálnej veličiny definovanej v teoretickej mechanike), ale aj momentu hybnosti $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Do fyziky vstúpila spolu s predstavou kvantovania elektromagnetického poľa ako konštanta úmernosti medzi frekvenciou ν a energiou E najmenšieho kvanta elektromagnetického žiarenia – fotónu: $E = h\nu$ v Planckovej teórii žiarenia.

Experimenty ukázali, že elektromagnetické vlny, opísané v klasickej elektrodynamike Maxwellovými rovnicami, sa za určitých okolností prejavujú ako častice – fotóny. Naopak, častice – napríklad elektrón – môžu mať vlnové vlastnosti. Úlohou kvantovej fyziky je vysvetliť tento časticovo-vlnový dualizmus. Naším prvým cieľom preto bude opísať vlnové vlastnosti kvantových častíc. To vyžaduje opustiť klasickú fyziku, rezignovať na Newtonov pohybový zákon a predstavu častíc pohybujúcich sa po konkrétnej dráhe. Namiesto toho zadefinujeme vlnovú funkciu, ktorá bude obsahovať informáciu o stave častice a postulovať Schrödingerovu rovnicu, ktorá určuje časový a priestorový vývoj vlnovej funkcie. Na výpočet fyzikálnych veličín – polohy, hybnosti, energie, momentu hybnosti zavedieme zodpovedajúce operátory, pôsobiace na vlnovú funkciu. Vlastnosti operátorov nás privedú k princípu neurčitosti. Na rozdiel od klasickej fyziky, v kvantovej teórii nemožno určiť zároveň hodnoty všetkých fyzikálnych veličín, popisujúcich časticu. Napríklad nemožno súčasne určiť polohu a rýchlosť kvantovej častice.

Pre popis vlastností mikrosveta je dôležité pochopiť viazané stavy častice, teda správanie sa častice uväznenej v malej časti priestoru. Najznámejší príklad je elektrón viazaný Coulombovou silou v blízkosti protónu (atóm vodíka). Kvantová mechanika vie vysvetliť, prečo viazaná častica môže obsadiť len niektoré energetické hladiny s presne určenými hodnotami energie, a dokáže sformulovať pravidlá prechodov medzi jednotlivými hladinami. Bez kvantovej mechaniky nemožno porozumieť štruktúre atómov a ich vlastnostiam.

Druhý najčastejšie študovaný viazaný systém je harmonický oscilátor. Kvantovanie energie častice viazanej v harmonickej potenciálovej jame vysvetľuje okrem iného vibračné spektrá molekúl a mechanické kmity kryštalickej mriežky.

Kvantový charakter častíc im dáva nové vlastnosti. Kvantová častica je schopná prenikať (tunelovať) cez potenciálové bariéry, ktoré sú pre klasickú časticu neprekonateľné. Tunelovanie je schopnosť kvantovej častice prekonať potenciálovú bariéru vyššiu, ako je energia častice. Najznámejší fyzikálny proces, ktorý je bez kvantového tunelovania nemožný, je α-rozpad rádioaktívnych jadier. Tunelovanie je dôležité aj pre vysvetlenie chemických väzieb, stability molekúl a kryštalickej mriežky.

Pohyb kvantovej častice sa líši od pohybu klasickej častice. Vlnový charakter kvantových častíc podstatne ovplyvňuje pohyb v periodických prostrediach (napríklad pohyb elektrónu v kryštalickej mriežke kovu) a je zodpovedný za tvorbu zakázaných energetických pásov v kovoch a v polovodičoch. Kvantový charakter elektrónu rozhodujúcim spôsobom ovplyvňuje transportné vlastnosti (napríklad elektrickú vodivosť) materiálov pri nízkych teplotách.

Dôležitý jav, neznámy v klasickej fyzike, je rozlíšiteľnosť častíc. Dva elektróny sú, samozrejme, rovnaké a rovnaké sú aj dva fotóny s tou istou frekvenciou. Súbor mnohých elektrónov sa však správa úplne inak ako súbor mnohých fotónov. Kvantová mechanika rozlišuje dva typy častíc – fermióny a bozóny, líšiace sa svojím vnútorným momentom hybnosti (spinom). Pre elektrónovú štruktúru atómov je podstatné, že elektróny sú fermióny. Žiadne dva elektróny sa nesmú nachádzať v tom istom kvantovom stave.[1] Fungovanie laseru je zasa založené na tom, že fotóny (elementárne častice elektromagnetického žiarenia) sú bozóny, a ako také všetky preferujú obsadzovanie toho istého kvantového stavu.

Kvantová teória opísala podstatu vzájomnej interakcie častíc. Okrem elektromagnetickej interakcie, sprostredkovanej výmenou fotónov, vysvetlila podstatu príťažlivej interakcie medzi nukleónmi (silnej interakcie), ktorá prekonáva odpudivú elektrostatickú interakciu protónov v atómovom jadre a udržuje jadro stabilným. Kvantová teória vysvetlila aj pôvod slabej interakcie, zodpovednej za β-rozpad jadier.

Napriek tomu, že kvantovú fyziku spájame s mikrosvetom, je dôležitá pre porozumenie fyzikálnych procesov aj na úrovni makrosveta. V slnečnej sústave niet väčšieho telesa ako Slnko. Kvantitatívne vysvetlenie frekvenčného spektra žiarenia, ktoré k nám zo Slnka prichádza, však nie je možné bez kvantovej fyziky. Rovnako bez kvantovej mechaniky neopíšeme štruktúru materiálov okolo nás. To je pochopiteľné, pretože vlastnosti makroskopických telies sú ovplyvnené vlastnosťami a štruktúrou atómov, z ktorých sú zložené. Makroskopické prejavy kvantových systémov pozorujeme pri nízkych teplotách, keď vzájomné interakcie medzi kvantovými časticami spôsobia vznik nových fáz. Jedným z mnohých príkladov je prechod väčšiny kovov, ochladených pod určitú kritickú teplotu, do supravodivého stavu.

Formalizmus kvantovej mechaniky je abstraktný a často odporuje našej každodennej skúsenosti. Cieľom tohto textu je v ucelenej forme vysvetliť základné princípy kvantovej mechaniky tak, aby študenti po ich zvládnutí porozumeli fyzikálnym vlastnostiam mikrosveta a mohli pokračovať v štúdiu ďalších častí fyziky: tuhých látok, štatistickej fyziky a jadrovej fyziky. Nekládli sme si za cieľ vybudovať formálne presný matematický formalizmus kvantovej mechaniky – ten čitateľ nájde v osvedčených učebniciach kvantovej mechaniky pre špecializované štúdium fyziky. Viaceré z nich sú dostupné v knižniciach a kníhkupectvách. Spomeňme aspoň dve učebnice kvantovej mechaniky z Univerzity Komenského v Bratislave [1, 2], zbierku príkladov [3] a učebnicu z Prahy [4]. Vynikajúca je kniha R. Feynmana [5] a 4. diel Kurzu fyziky z Berkeley (ten je u nás dostupný len v anglickom origináli [6] alebo v ruskom preklade). Viaceré klasické učebnice kvantovej mechaniky vyžadujú zodpovedajúcu matematickú prípravu. Niektoré boli v minulosti preložené do slovenčiny [7–9], iné sú dostupné v angličtine [10, 11]. Matematicky menej náročná je klasická kniha A. Beisera Moderná fyzika [12], učebnica modernej fyziky [13] a 5. diel učebnice fyziky od autorov Hallidaya, Resnicka a Walkera [14].

Napriek snahe o jednoduchosť obsahuje text niektoré matematicky náročnejšie časti: analytické riešenie Schrödingerovej rovnice pre harmonický oscilátor, výpočet vlastných energií a vlastných funkcií atómu vodíka, alebo všeobecné riešenie rovníc pre dvojstavový systém. Ich cieľom je oboznámiť čitateľa so štandardnými matematickými postupmi, s ktorými sa môže stretnúť aj v ďalšom štúdiu. Tieto časti je možné pri prvom čítaní preskočiť, pokiaľ čitateľ uverí

[1] Kvantový stav definuje hodnoty fyzikálnych veličín častice: energiu, hybnosť, moment hybnosti, orientáciu spinu a podobne. Skutočnosť, že dva elektróny sa nemôžu nachádzať v tom istom kvantovom stave teda znamená, že sa líšia v hodnote aspoň jednej z veličín, popisujúcich stav.

odvodeným vzťahom. Ani starostlivé preštudovanie tohto textu nedá čitateľovi kompletnú predstavu o modernej fyzike. K tomu je potrebné pokračovať štúdiom štatistickej fyziky, fyziky tuhých látok a na vyššom stupni teóriou relativity, jadrovou fyzikou a kvantovou elektrodynamikou.

Ku každej kapitole sú pripojené príklady, väčšinou aj s ich riešeniami, ktoré dopĺňajú hlavný text kapitoly. Niektoré príklady objasňujú zložitejšie matematické postupy, ktoré sme v hlavnom texte vynechali.

Všetky vzorce a fyzikálne veličiny sme sa snažili vyjadriť v sústave jednotiek SI. Niekedy je však vhodnejšie prispôsobiť jednotky, v ktorých vyjadrujeme hodnoty veličín, parametrom uvažovaného systému. Napríklad energie v atómovej a molekulovej fyzike je vhodnejšie vyjadriť v elektrónvoltoch, pretože všetky zaujímavé energie sú porovnateľné s jedným elektrónvoltom. Takto vyjadrené hodnoty sa medzi sebou oveľa lepšie porovnávajú, čím uľahčujú porozumenie základných princípov študovaného systému.

1.1 Základné fyzikálne konštanty

Tabuľka 1.1 uvádza základné fyzikálne konštanty, s ktorými sa v mikrosvete stretneme. Prvou je elektrický náboj elektrónu, $-e$

$$-e = -1{,}602 \times 10^{-19}\ \mathrm{C} \tag{1.3}$$

ktorý reprezentuje elementárne kvantum elektrického náboja.[2]

Elektromagnetické vlastnosti vákua charakterizuje permitivita vákua ϵ_0 a permeabilita vákua μ_0. Z nich je odvodená impedancia vákua Z_0, charakterizujúca pomer amplitúd elektrickej intenzity E_0 a magnetickej intenzity H_0 rovinnej elektromagnetickej vlny (obrázok 1.1):

$$Z_0 = \frac{E_0}{H_0} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \tag{1.4}$$

Impedancia má fyzikálny rozmer elektrického odporu a jej hodnota je $Z_0 \approx 376{,}730\ \Omega$.

Permitivita vákua vstupuje do Coulombovho zákona, ktorý definuje silu, akou náboj q_1 pôsobí na náboj q_2 vo vzdialenosti $\vec{r}$:

$$\vec{F} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\vec{r}}{r^3} \tag{1.5}$$

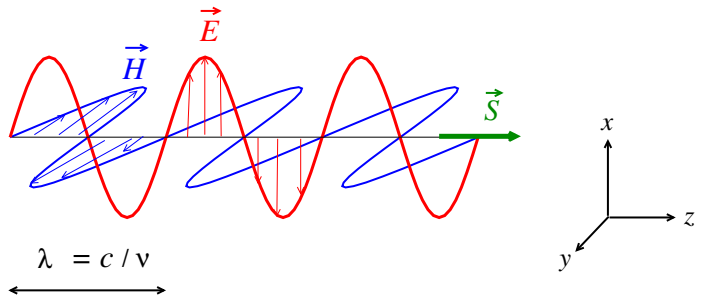
Tri ďalšie základné konštanty sprostredkujú vzťah medzi energiou a inými fyzikálnymi veličinami. Z teórie relativity poznáme Einsteinov vzťah medzi energiou a hmotnosťou telesa

$$E = mc^2 \tag{1.6}$$

sprostredkovaný rýchlosťou šírenia elektromagnetických vĺn (napríklad svetla) vo vákuu

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} \approx 2{,}998 \times 10^8\ \mathrm{m/s} \tag{1.7}$$

[2] V jednotkách SI je 1 C = As. Ak vodičom tečie prúd jeden ampér (1 A), potom prierezom vodiča prejde každú sekundu (1 s) náboj 1 Coulomb (1 C), teda $6{,}24 \times 10^{18}$ elektrónov.



Obr. 1.1. Štruktúra rovinnej elektromagnetickej vlny šíriacej sa v smere osi z. Vektory $\vec{E}$ a $\vec{H}$ sú na seba kolmé (na obrázku je $\vec{E} = (E_x,0,0)$ a $\vec{H} = (0,H_y,0)$). Poyntingov vektor $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ udáva množstvo energie, ktoré prejde za 1 sekundu plochou 1 m^2 kolmou na smer šírenia vlny. Pomer amplitúd intenzít elektrického a magnetického poľa vo vákuu je Z_0 (rovnica 1.4). Rýchlosť c šírenia vlny vo vákuu je daná rovnicou (1.7).

V štatistickej fyzike je dôležitý vzťah medzi strednou hodnotou energie častice pripadajúcou na jeden stupeň voľnosti a absolútnou teplotou T (ekvipartičný zákon)

$$E_{\mathrm{EZ}} = \frac{1}{2} k_B T \tag{1.8}$$

Konštanta k_B je Boltzmannova konštanta,

$$k_B = 1{,}381 \times 10^{-23}\ \mathrm{J/K} \tag{1.9}$$

Tretí základný vzťah definuje priamu úmernosť medzi energiou fotónu a jeho frekvenciou ν

$$E = h\nu \tag{1.10}$$

s Planckovou konštantou

$$h = 6{,}626 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js} \tag{1.11}$$

V tabuľke 1.1 uvádzame aj Avogadrovu konštantu N_A, ktorú budeme pri štúdiu mikrosveta často potrebovať, a bezrozmernú konštantu jemnej štruktúry α,

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \tag{1.12}$$

Pre úplnosť uvádzame v tabuľke aj gravitačnú konštantu κ, hoci ju v ďalšom texte nebudeme potrebovať. Gravitačné pôsobenie medzi časticami je totiž v mikrosvete o mnoho rádov slabšie, ako elektromagnetické (pozri príklad 1.1).

Je potrebné zdôrazniť, že hodnoty fyzikálnych konštánt sú získané experimentálnymi meraniami. Výnimkou je permeabilita vákua a rýchlosť svetla, ktorých hodnoty sú definované. Nemožno ich nijakým spôsobom odvodiť. Hodnoty uvedené v tabuľke 1.1 sú zaokrúhlené na tri platné desatinné miesta. Presnejšie hodnoty spolu s odhadom ich chyby možno nájsť v literatúre.

Tab. 1.1. Základné fyzikálne konštanty a ich hodnoty v sústave SI. Impedancia vákua a rýchlosť svetla vo vákuu sú vyjadrené pomocou permitivity a permeability vákua, ktoré poznáme z Maxwellových rovníc. Boltzmannova konštanta je známa zo štatistickej fyziky, podobne ako Avogadrova konštanta N_A, ktorá definuje počet častíc nachádzajúcich sa v jednom mole látky: N_A je počet atómov nachádzajúcich sa v 12 gramoch uhlíka $^{12}_{6}$C (ktorý obsahuje vo svojom atómovom jadre 6 protónov a 6 neutrónov). Novou konštantou, neznámou na konci 19. storočia, je len Planckova konštanta, ktorá vstupuje do všetkých kvantových vzťahov. Bezrozmerná konštanta jemnej štruktúry α je často používaná v jadrovej a subjadrovej fyzike. V poslednom riadku uvádzame pre úplnosť gravitačnú konštantu κ.

Náboj elektrónu	$-e = -1{,}602 \times 10^{-19}$	C = As
Hmotnosť elektrónu	$m = 9{,}109 \times 10^{-31}$	kg
Permitivita vákua	$\epsilon_0 = 8{,}854 \times 10^{-12}$	$C^2/(Nm^2)$
Permeabilita vákua	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$	N/A^2 = kgm/C^2
Impedancia vákua	$Z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} = c\mu_0 \approx 376{,}730$	Ω = Js/C^2
Rýchlosť svetla vo vákuu	$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 299\,792\,457$	m/s
Boltzmannova konštanta	$k_B = 1{,}381 \times 10^{-23}$	J/K
Avogadrova konštanta	$N_A = 6{,}022 \times 10^{23}$	mol^{-1}
Planckova konštanta	$h = 6{,}626 \times 10^{-34}$	Js
	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}0546 \times 10^{-34}$	Js
Konštanta jemnej štruktúry	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137{,}035}$	bezrozmerná
Gravitačná konštanta	$\kappa = 6{,}673 \times 10^{-11}$	Nm^2/kg^2

1.2 Žiarenie čierneho telesa

Jedným zo spôsobov, akým sa telesá zbavujú energie, je vyžarovanie elektromagnetických vĺn (žiarenia). Spektrálne rozloženie vyžarovanej energie predstavovalo koncom 19. storočia jeden z najdôležitejších otvorených problémov klasickej fyziky. Hoci žiarenie pozorujeme na každom makroskopicky veľkom telese (napríklad žiarenie Slnka), jeho kvantitatívny popis si vyžiadal

zásadnú zmenu našej predstavy o elektromagnetickom poli. V tejto časti načrtneme najprv klasický prístup k tomuto problému, ukážeme paradox, ku ktorému klasická fyzika vedie, a opíšeme jeho riešenie, navrhnuté Planckom.

Ak elektromagnetické žiarenie dopadá na teleso, časť žiarenia sa odrazí a časť sa v telese absorbuje (zanedbajme pre jednoduchosť energiu E_{t}, ktorú by odnieslo žiarenie cez teleso prechádzajúce). Zo zákona zachovania energie potom dostaneme

$$E_{\mathrm{dop}} = E_{\mathrm{odr}} + E_{\mathrm{abs}} \tag{1.13}$$

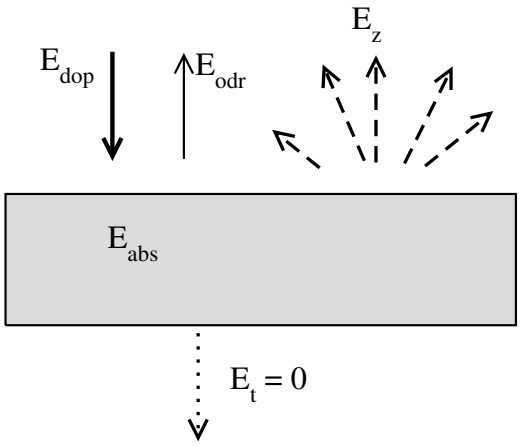
Absorbovaním žiarenia sa teleso zohrieva, až kým nedosiahne termodynamickú rovnováhu so svojím okolím, keď sa jeho teplota viac nemení. Vtedy sa musí rovnaké množstvo energie, aké teleso absorbuje z dopadajúceho žiarenia, vyžiariť do okolia

$$E_{\mathrm{abs}} = E_{\mathrm{z}} \tag{1.14}$$

Je treba si uvedomiť, že aj keď sa obe energie v rovnici (1.14) rovnajú, môžu zodpovedať žiareniu s rôznymi vlnovými dĺžkami. Spektrálne rozloženie vyžiarenej energie E_{z} totiž závisí od teploty telesa. Nezodpovedá preto spektrálnemu zloženiu dopadajúceho žiarenia. Napríklad Zem prijíma energiu zo slnečného žiarenia s maximom v oblasti viditeľného svetla, avšak vyžaruje energiu prevažne v oblasti infračerveného svetla. Tento rozdiel je daný tým, že povrchová teplota Slnka je podstatne vyššia (6000 K), ako teplota povrchu Zeme (300 K).

Pre experimentálne štúdium spektrálneho rozloženia vyžiarenej energie je dôležité eliminovať žiarenie, ktoré sa od telesa odráža. Ideálne by preto bolo študovať teleso, ktoré by všetko dopadajúce žiarenie absorbovalo (teda $E_{\mathrm{odr}} = 0$). Takéto teleso sa vo fyzike nazýva absolútne čierne teleso.

Predstavme si duté teleso tvaru kocky so stranou ℓ. Jeho steny sú pre elektromagnetické žiarenie absolútne nepriepustné. Ak do jednej steny urobíme malý otvor, potom žiarenie, ktoré na otvor dopadá zvonka, preniká dovnútra. Vo vnútri dutiny absolvuje množstvo odrazov, takže má minimálnu šancu trafiť späť do otvoru a z dutiny uniknúť. Zostane preto zachytené vo vnútri kocky. Malý otvor na stene teda predstavuje ideálne absolútne čierne teleso s nulovou odrazivosťou. Energia, ktorá z otvoru vychádza, predstavuje preto len vyžarovanú energiu.



Obr. 1.2. Energetická bilancia elektromagnetického žiarenia dopadajúceho na makroskopické teleso. Časť dopadajúceho žiarenia E_{dop} sa odrazí (E_{odr}), časť sa absorbuje (E_{abs}) v objeme telesa. Absorpciou sa teleso zohrieva, preto sa zbavuje prebytočnej energie vyžarovaním (E_{z}). Energiu E_{t} žiarenia prechádzajúceho telesom zanedbávame.

Pretože vyžiarená energia je úmerná energii v telese obsiahnutej, nájdeme najprv energiu poľa uväznenú vo vnútri kocky. Ak sú jej steny nepriepustné, potom musí byť intenzita poľa na jej stenách nulová. Pole preto pozostáva zo sústavy stojatých vĺn s frekvenciami ν, ktoré závisia od rozmeru telesa (obrázok 1.3). Počet rôznych stojatých vĺn – módov – $n(\nu)\mathrm{d}\nu$ s frekvenciami v intervale medzi ν a $\nu + \mathrm{d}\nu$ v trojrozmernej dutine je úmerný objemu dutiny $V = \ell^3$. Je výhodnejšie pracovať s priestorovou hustotou $\rho(\nu)$. V dodatku G odvodíme pre funkciu $\rho(\nu)$ rovnicu (G.12)

$$\rho(\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2\mathrm{d}\nu \tag{1.15}$$

Ak je teplota vo vnútri telesa T, môžeme na základe klasickej termodynamiky predpokladať, že každý mód žiarenia nesie strednú energiu

$$\langle E_\nu \rangle = 2E_{\mathrm{EZ}} = k_B T \tag{1.16}$$

Každý mód má totiž dva stupne voľnosti, pretože má elektrickú aj magnetickú zložku energie. Dostaneme tak hustotu energie elektromagnetického poľa v dutine

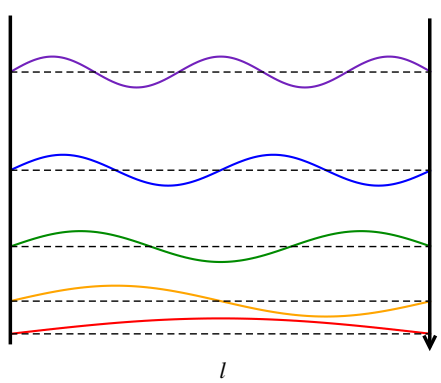
$$u(\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi k_B T}{c^3}\nu^2\mathrm{d}\nu \tag{1.17}$$

Získaný vzťah je známy ako Rayleighov-Jeansov zákon. Tento zákon očividne nemôže byť správny v oblasti vysokých frekvencií. Nie je totiž možné, aby hustota energie poľa v dutine neobmedzene rástla s frekvenciou. Celková energia poľa v jednotke objemu je totiž

$$U = \int_0^\infty u(\nu)\mathrm{d}\nu \tag{1.18}$$

a musí byť vždy konečná. Integrál (1.18) preto musí konvergovať, čo je možné len vtedy, keď hustota energie $u(\nu)$ klesá s rastúcou frekvenciou dostatočne rýchlo do nuly.

Rovnica (1.17) bola odvodená zo základných postulátov klasickej fyziky. Ak tieto postuláty vedú k nefyzikálnemu výsledku, potom vzniká podozrenie, že niektorý z nich nie je pre popis daného problému vhodný. Planck ukázal, že nesprávny je predpoklad, že každý mód nesie tú istú energiu $k_B T$, a navrhol nový vzťah pre strednú energiu jednotlivých módov žiarenia.



Obr. 1.3. Niekoľko stojatých vĺn v *jednorozmernej* dutine s nepriepustnými stenami. Pretože sú steny nepriepustné, musí byť pole na okrajoch dutiny nulové. Táto podmienka určuje vlnové dĺžky stojatých vĺn, ktoré v dutine môžu byť: $\lambda_n = \frac{2\ell}{n}$, kde n je ľubovoľné celé číslo. Vlnový vektor $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ má potom hodnoty $k_n = \frac{\pi}{\ell}n$. V trojrozmernej dutine môžu existovať stojaté vlny vo všetkých troch smeroch. Vznikajú stojaté vlny - módy - s vlnovým vektorom $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ a s frekvenciou $\nu = \frac{ck}{2\pi}$.

1.2.1 Planckov zákon

Základom Planckovho odvodenia je hypotéza, podľa ktorej každý mód elektromagnetického poľa s frekvenciou ν môže pozostávať z elementárnych kvánt – fotónov. Každý fotón má energiu $E_0(\nu)$, závislú od jeho frekvencie. Okrem toho, v dutine sa môže nachádzať viac fotónov s tou istou frekvenciou ν. Ak by ich bolo n, potom by každý mód nemal energiu k_BT, ako predpokladala klasická fyzika, ale energiu $E_\nu = nE_0(\nu)$.

Nájdeme najprv, ako počet vĺn n závisí od teploty v dutine. Zo štatistickej fyziky vieme, že pravdepodobnosť, že nejaký systém má pri teplote T energiu E, je úmerná Boltzmannovmu faktoru

$$P(E) \propto e^{-\frac{E}{k_BT}} \tag{1.19}$$

Pravdepodobnosť toho, že sa v dutine vyskytuje práve n fotónov s frekvenciou ν, je potom

$$P(nE_0) = \frac{e^{-\frac{nE_0}{k_BT}}}{\sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{mE_0}{k_BT}}} \tag{1.20}$$

Suma v menovateli zaručuje, že $\sum_{n=0}^{\infty} P(nE_0) = 1$, pretože v dutine sa určite nejaký počet fotónov s energiou E_0 vyskytuje. Strednú energiu každého módu potom nájdeme ustrednením cez všetky možné počty fotónov

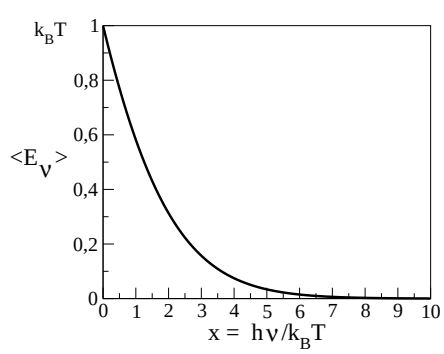
$$\langle E_\nu \rangle = \sum_n nE_0 P(nE_0) = \frac{\sum_n nE_0 \exp\left[-\frac{nE_0}{k_BT}\right]}{\sum_n \exp\left[-\frac{nE_0}{k_BT}\right]} \tag{1.21}$$

Výraz na pravej strane môžeme upraviť (príklad 1.2) do jednoduchšieho tvaru

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{E_0(\nu)}{e^{\frac{E_0(\nu)}{k_BT}} - 1} \tag{1.22}$$

Zostáva určiť, ako E_0 závisí od frekvencie. Na základe analýzy experimentálnych dát Planck navrhol jednoduchý vzťah

$$E_0(\nu) = h\nu \tag{1.23}$$



Obr. 1.4. Stredná energia $\langle E_\nu \rangle$ pripadajúca na jeden frekvenčný mód žiarenia absolútne čierneho telesa (rovnica 1.24). Stredná energia sa rovná energii $E_{\mathrm{EZ}} = k_BT$ len v limite $h\nu \ll k_BT$. Pre vyššie frekvencie je podstatne menšia.

v ktorom prvýkrát v dejinách fyziky vystúpila Planckova konštanta h. Po dosadení energie (1.23) do výrazu (1.22) dostaneme strednú energiu jedného módu s frekvenciou ν

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \tag{1.24}$$

Na rozdiel od klasického vzťahu (1.16) je stredná energia jedného módu, vyjadrená Planckovým vzťahom (1.24), funkciou frekvencie ν a pre veľké frekvencie exponenciálne klesá do nuly (obrázok 1.4).

Hustota energie elektromagnetického žiarenia v dutine potom nebude daná vzťahom (1.17), ale vzťahom

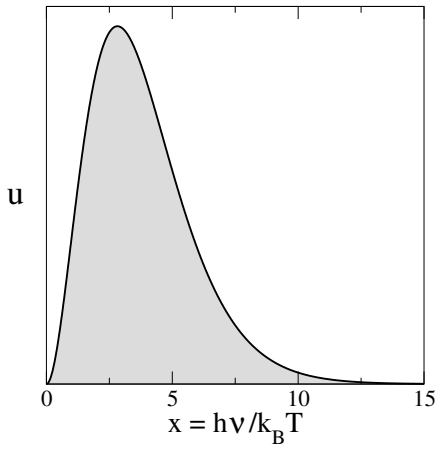
$$u(\nu)\mathrm{d}\nu = \langle E(\nu) \rangle \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}\mathrm{d}\nu \tag{1.25}$$

známym ako Planckov zákon (obrázok 1.5).

1.2.2 Kvantovanie elektromagnetického poľa

Je treba povedať, že Planck svoj zákon neodvodil. Ukázal len, že ním navrhovaná energia jednotlivého kvanta elektromagnetického poľa vedie k spektrálnemu rozdeleniu vyžiarenej energie, ktoré veľmi dobre súhlasí s experimentom. Taký súhlas nemôže byť náhodný. Preto je potrebné vzťah (1.23) brať vážne. To predovšetkým vyžaduje prijať do fyzikálnej teórie pojem kvanta elektromagnetického žiarenia – fotónu, ktorý klasická fyzika nepozná. Okrem toho musíme do fyzikálnej teórie prijať aj novú, dovtedy neznámu konštantu h.

Dôležitým dôsledkom Planckovho zákona je teda zmena našej predstavy o elektromagnetickom poli vo vnútri dutiny. V klasickej fyzike toto pole pozostávalo zo stojatých vĺn. Každej frekvencii poľa bolo možné priradiť jednu vlnu. V Planckovej teórii každá stojatá vlna s frekvenciou ν (mód žiarenia) pozostáva z konečného počtu malých kvánt. Každé kvantum nesie energiu



Obr. 1.5. Planckov zákon opisuje spektrálne rozdelenie energie vyžiarenej čiernym telesom. Na horizontálnej osi je $x = h\nu/k_B T$, na vertikálnej osi je hustota energie $u(\nu)$. Na rozdiel od Rayleighovho-Jeansovho rozdelenia (rovnica 1.17) Planckovo rozdelenie energie klesá exponenciálne do nuly pre veľké frekvencie. Pravdepodobnosť, že teleso vyžaruje elektromagnetické vlny vysokých frekvencií, je preto veľmi malá.

$E(\nu) = h\nu$. Stredný počet kvánt $\langle n \rangle$ s danou energiou závisí od teploty. Túto závislosť nájdeme, ak strednú energiu jedného módu elektromagnetického poľa s frekvenciou ν z rovnice (1.24) prepíšeme do tvaru

$$\langle E_\nu \rangle = h\nu \langle n(h\nu) \rangle \tag{1.26}$$

a funkciu $\langle n(E) \rangle$

$$\langle n(E) \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} \tag{1.27}$$

interpretujeme ako stredný počet kvánt energie E.

Nesúhlas experimentálnych dát s predpoveďou Rayleighovho-Jeansovho zákona teda viedol k zásadnej zmene fyzikálnych predstáv o elektromagnetickom poli: pole sa v dutine správa ako štatistický súbor elementárnych častíc – fotónov – s energiou $h\nu$. Stredný počet fotónov s energiou E závisí od teploty podľa vzťahu (1.27).

Planckova teória vysvetľuje aj ďalšie experimentálne pozorované vlastnosti žiarenia čierneho telesa. V ďalších dvoch častiach vysvetlíme Stefan-Boltzmannov zákon a Wienov posunovací zákon.

1.2.3 Stefanov-Boltzmannov zákon

Z rozdelenia (1.25) nájdeme hustotu energie elektromagnetického žiarenia (energiu obsiahnutú v jednotke objemu)

$$U = \int_0^\infty u(\nu) \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi (k_B T)^4}{c^3 h^3} \int_0^\infty \frac{x^3 \mathrm{d}x}{e^x - 1} = \frac{8\pi^5}{15} \frac{(k_B T)^4}{c^3 h^3} \tag{1.28}$$

V integráli sme použili substitúciu

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \tag{1.29}$$

a využili znalosť tabuľkového integrálu (pozri napríklad [19])

$$\int_0^\infty \frac{x^3 \mathrm{d}x}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \tag{1.30}$$

Hustota energie teda rastie so štvrtou mocninou teploty,

$$U = aT^4, \qquad \text{kde} \qquad a = \frac{8\pi^5}{15} \frac{k_B^4}{c^3 h^3} = 7{,}566 \times 10^{-16}\ \mathrm{JK^{-4}m^{-3}} \tag{1.31}$$

Energia, ktorú čierne teleso vyžiari za čas Δt cez plochu S svojho povrchu musí byť úmerná hustote energie U, ploche S a času Δt. Keby sa všetky fotóny pohybovali kolmo na povrch, bola by vyžiarená energia rovná súčinu $U \times Sc\Delta t$. Jednotlivé fotóny však dopadajú na plochu ohraničujúcu teleso pod rôznymi uhlami, preto je celková vyžiarená energia menšia. Presným výpočtom by sme dostali $U \times Sc\Delta t/4$. Po dosadení za energiu U zo vzťahu (1.31) dostaneme Stefanov-Boltzmannov zákon: energia E, vyžiarená z jednotkového povrchu absolútne čierneho telesa za jednotku času je priamo úmerná štvrtej mocnine absolútnej teploty

$$E = \frac{c}{4} U = \frac{ac}{4} T^4 = \sigma T^4 \tag{1.32}$$

kde konštanta

$$\sigma = \frac{ac}{4} = \frac{2\pi^5}{15}\frac{k_B^4}{c^2h^3} = 5{,}670 \times 10^{-8}\ \text{J/sm}^2 \tag{1.33}$$

je Stefanova-Boltzmannova konštanta.

Stefanov-Boltzmannov zákon môžeme overiť jednoduchým meraním [31]. Odvodiť hodnotu konštanty σ v rovnici (1.33) z teórie však bez znalostí kvantovej mechaniky nedokážeme. To vidieť už zo skutočnosti, že vo vyjadrení σ vystupuje Planckova konštanta.

1.2.4 Wienov posunovací zákon

Zo známej hustoty energie $u(\nu)$, danej rovnicou (1.25) vyjadrime hustotu $w(\lambda)\mathrm{d}\lambda$, ktorá udáva množstvo energie žiarenia s vlnovými dĺžkami z intervalu medzi λ a $\lambda + \mathrm{d}\lambda$. Zo vzťahu

$$u(\nu)\mathrm{d}\nu = w(\lambda)\mathrm{d}\lambda \tag{1.34}$$

a vzťahu medzi frekvenciou a vlnovou dĺžkou, $\lambda = c/\nu$, dostaneme tvar funkcie $w(\lambda)$

$$w(\lambda)\mathrm{d}\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{\mathrm{d}\lambda}{\exp\frac{hc}{k_BT\lambda} - 1} \tag{1.35}$$

Hľadajme vlnovú dĺžku $\lambda_{\max}$, pre ktorú dosahuje hustota (1.35) maximálnu hodnotu. Pre $\lambda = \lambda_{\max}$ musí platiť

$$\left.\frac{\partial w(\lambda)}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=\lambda_{\max}} = 0 \tag{1.36}$$

Po dosadení za $w(\lambda)$ z rovnice (1.35) a derivovaní dostaneme transcendentnú rovnicu,

$$\frac{1}{5}\frac{hc}{k_BT\lambda} = 1 - \exp\left[-\frac{hc}{k_BT\lambda}\right] \tag{1.37}$$

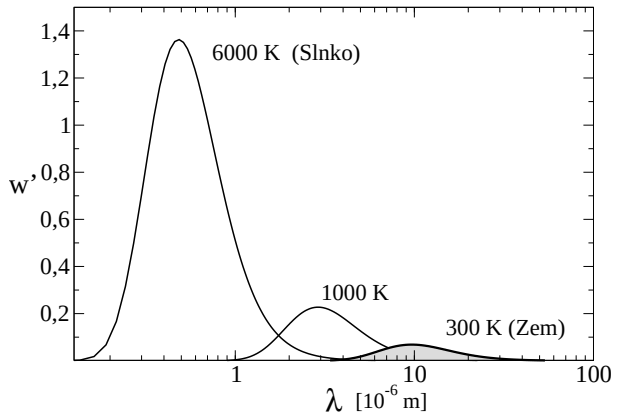
ktorej riešením je

$$\lambda_{\max}T = \frac{1}{4{,}965}\frac{hc}{k_B} = 0{,}002898\ \text{Km} \tag{1.38}$$

Odvodili sme Wienov posunovací zákon, podľa ktorého sa spektrum vyžarovanej energie s rastúcou teplotou posúva do oblasti nižších vlnových dĺžok (vyšších frekvencií).

Na obrázku 1.6 je zobrazená normovaná hustota energie $u'(\lambda) = u(\lambda)/aT^4$ ako funkcia vlnovej dĺžky (meranej v mikrometroch) pre tri rôzne teploty T. Teplota $T = 6000$ K zodpovedá teplote Slnka a teplota $T = 300$ K teplote Zeme. Obrázok ukazuje, že spektrálne rozdelenie žiarenia Slnka má maximum pre $\lambda_{\max} \approx 0{,}483 \times 10^{-6}$ m = 483 nm, čo zodpovedá žltému svetlu. Spektrálne rozdelenie vyžarovania Zeme je posunuté do oblasti väčších vlnových dĺžok, s maximom pre $\lambda_{\max} = 9{,}7 \times 10^{-6}$ m (infračervená časť spektra).[3]

[3] Pre úplnosť je potrebné povedať, že zdrojom energie žiarenia Zeme nie je len dopadajúca energia zo Slnka, ale aj energia uvoľňovaná vo vnútri Zeme.



Obr. 1.6. Normovaná hustota energie $w'(\lambda) = w(\lambda)/aT^4$, ako funkcia vlnovej dĺžky pre tri rôzne teploty čierneho telesa. Hustota $w(\lambda)$ je daná vzťahom (1.35). Teplota $T = 6000$ K zodpovedá Slnku, teplota 300 K zodpovedá Zemi. Z obrázku vidíme, že Zem prijíma zo Slnka žiarenie iných vlnových dĺžok než aké sama vyžaruje. Všimnite si, že horizontálna os má logaritmickú škálu.

1.3 Fotoelektrický jav

Uvažujme elektrický obvod s vákuovou diódou, zapojenou na zdroj napätia V. Experimentálne bolo pozorované, že ak na kladnú elektródu (anódu) dopadá viditeľné svetlo, obvodom prechádza prúd (obrázok 1.7). Prúd klesá s rastúcim napätím, preto jeho nosičmi musia byť častice so záporným nábojom, ktoré sú napätím brzdené.

Prirodzené vysvetlenie pôvodu tohto prúdu je v tom, že dopadajúce svetlo odovzdá elektrónom, viazaným v kove anódy, energiu dostatočnú k tomu, aby sa uvoľnili z povrchu anódy a potom proti smeru potenciálu dosiahli zápornú elektródu. Kvantitatívna analýza fotoelektrického javu z hľadiska klasickej fyziky však naráža na problémy.

Predovšetkým sa ukázalo, že elektrický prúd, ktorý prechádza obvodom, závisí od frekvencie dopadajúceho svetla. Ak je frekvencia svetla nižšia ako je hraničná frekvencia:

$$\nu < \nu_{\min} \tag{1.39}$$

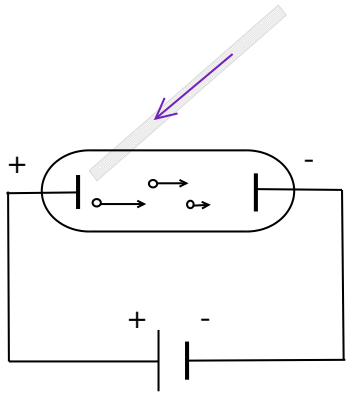
žiadny prúd obvodom neprechádza a to nezávisle od toho, aká je intenzita svetla. Tento výsledok je prekvapujúci, pretože v klasickej fyzike je energia prenášaná elektromagnetickým žiarením priamo úmerná intenzite tohto žiarenia.[4]

Z pohľadu klasickej fyziky tiež nie je jasné, ako dokáže jeden elektrón absorbovať dostatočné množstvo energie potrebnej k tomu, aby sa uvoľnil z anódy. Na uvoľnenie elektrónu z povrchu kovu je totiž potrebná energia (výstupná práca)

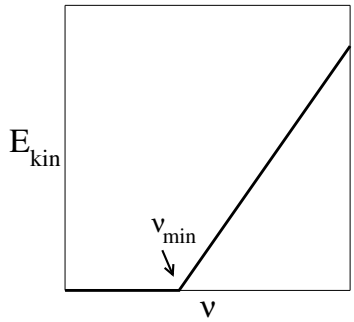
$$A \sim 2 \text{ eV} \tag{1.40}$$

Elektrón preto musí od dopadajúceho žiarenia dostať energiu väčšiu ako A. Pri experimente dopadala na povrch kovu každú sekundu svetelná energia $E = 10^{-6}$ J/m^2. Ak uvážime, že hustota voľných elektrónov v kove je $n \sim 10^{26}$ m^{-3}, a typická vzdialenosť medzi atómami je

[4]Energia, ktorú žiarenie prenesie jednotkovou plochou za jednotku času, je daná absolútnou hodnotou Poyntingovho vektora $S = |\vec{E} \times \vec{H}|$.



Obr. 1.7. Fotoelektrický jav. Svetlo dopadá na kladnú elektródu diódy a uvoľňuje z nej elektróny, ktoré sa pohybujú proti potenciálu k zápornej elektróde.



Obr. 1.8. Fotoleketrický jav. Kinetická energia elektrónov, uvoľňovaných z povrchu elektródy, je priamo úmerná frekvencii dopadajúceho elektromagnetického žiarenia (rovnica 1.41), ak frekvencia ν prekročí limitnú hodnotu $\nu_{\min}$ danú rovnicou (1.42). Ak je frekvencia dopadajúceho žiarenia menšia ako $\nu_{\min}$, žiadne elektróny sa z kovu neuvoľnia.

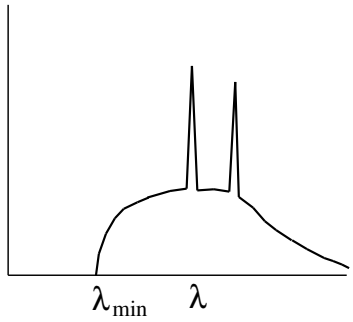
$a = 10^{-10}$ m, potom sa v povrchovej vrstve veľkosti 1 m^2 atómov nachádza približne $N = 10^{16}$ voľných elektrónov. Ak by sa energia dopadajúceho svetla rozdelila rovnomerne medzi všetky elektróny, dostal by každý z nich v priebehu jednej sekundy len energiu $\sim 10^{-22}$ J $\sim 10^{-3}$ eV, teda podstatne menej, ako potrebuje na to, aby sa uvoľnil z kovu. Z toho vyplýva, že elektróny nedostávajú energiu rovnomerne, ale väčšinu z dopadajúcej energie absorbuje jediný elektrón. Takýto proces však klasická fyzika nevie opísať.

Einstein v r. 1905 ukázal, že experimentálne dáta môžeme vysvetliť, ak predpokladáme, že svetlo dopadajúce na povrch kovu pozostáva z malých elementárnych kvánt – fotónov. Elektrón viazaný v kove potom môže sám pohltiť dopadajúci fotón a získať tak celú jeho energiu. Energia fotónov sa v súlade s Planckovou hypotézou rovná $E = h\nu$. Pretože frekvencia viditeľného svetla leží v intervale $\nu \sim 400 - 700$ THz, energia jedného fotónu svetla bude v rozsahu $1{,}5 - 3$ eV. Je teda dostatočne veľká na to, aby sa elektrón po pohltení fotónu mohol uvoľniť.

Einsteinovu hypotézu podporilo aj experimentálne pozorovanie, že kinetická energia uvoľnených elektrónov je priamo úmerná frekvencii (obrázok 1.8)

$$E_{\text{kin}} = \begin{cases} 0 & \nu < \nu_{\min} \\ h\nu - A & \nu > \nu_{\min} \end{cases} \tag{1.41}$$

kde $\nu_{\min}$ je minimálna frekvencia, akú musí mať dopadajúce žiarenie, aby prúd obvodom pre-



Obr. 1.9. Spektrum RTG žiarenia pozostáva zo spojitého pozadia a izolovaných maxím. Pôvod ostrých maxím spočíva v prechodoch elektrónov v atómovom obale, ktorým sa budeme venovať v časti 9.4.2 pri štúdiu spektier atómov. Pre potvrdenie časticovej podstaty RTG žiarenia je dôležité, že spektrum RTG žiarenia je ohraničené minimálnou vlnovou dĺžkou $\lambda_{\min}$.

chádzal. Táto minimálna frekvencia môže byť odvodená z predstavy, že elektrón získava energiu absorpciou jediného fotónu: elektrický prúd tečie obvodom, až keď frekvencia dopadajúceho žiarenia dosiahne minimálnu hodnotu $\nu_{\min}$

$$\nu_{\min} = \frac{A}{h} \tag{1.42}$$

Fotoelektrický jav potvrdil, že elektromagnetické žiarenie má časticové vlastnosti a môžeme ho si ho predstaviť ako sústavu identických častíc – fotónov. Elektrón získava od elektromagnetického žiarenia energiu absorbovaním jedného fotónu. Absorpcia a emisia fotónov je základným mechanizmom interakcie elektromagnetického žiarenia s hmotou. Prechody medzi kvantovými stavmi častice sú spravidla sprevádzané emisiou alebo absorpciou kvanta žiarenia – fotónu, ktorý odnáša (prináša) potrebnú energiu.

1.4 Generovanie RTG žiarenia

Opačným (inverzným) fotoelektrickým javom je generovanie röntgenového (RTG) žiarenia. V tomto experimente elektróny, urýchlené potenciálom zdroja na energiu $E \sim 50$ keV (50 000 eV), dopadajú na katódu. Pri dopade na povrch kovu sa elektróny zabrzdia. Ich kinetická energia sa vyžiari ako elektromagnetické žiarenie – RTG lúče. Experimentálne pozorované RTG žiarenie môže mať rôzne vlnové dĺžky (obrázok 1.9). Pre jeho spektrum je typická minimálna vlnová dĺžka $\lambda_{\min}$, pod ktorou sa žiadne žiarenie nepozoruje.

Príčinu, prečo sa v spektre RTG žiarenia nepozorujú vlnové dĺžky kratšie ako je $\lambda_{\max}$, porozumieme, ak si RTG žiarenie predstavíme ako fotóny. Ak sa energia E dopadajúceho elektrónu vyžiari ako jediný fotón, potom jeho frekvencia je

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{50\ \text{keV}}{h} = 1{,}2 \times 10^{19}\ \text{Hz} \tag{1.43}$$

a vlnová dĺžka

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 2{,}5 \times 10^{-11}\ \text{m} \tag{1.44}$$

Pretože fotón nemôže získať vyššiu energiu, ako je energia dopadajúceho elektrónu a energia dopadajúcich elektrónov je zhora ohraničená, nikdy nemôžeme pozorovať odchádzajúce žiarenie s nižšou vlnovou dĺžkou, ako

$$\lambda_{\min} = \frac{ch}{E} \tag{1.45}$$

Široké spektrum RTG žiarenia je vytvorené procesmi, v ktorých dopadajúci elektrón stratí časť svojej energie iným spôsobom (napríklad ju odovzdá kryštalickej mriežke).

Hoci RTG žiarenie vzniká ako prúd fotónov, experimentálne môžeme dokázať jeho vlnové vlastnosti: polarizáciu a difrakciu.

1.5 Časticovo-vlnový dualizmus

Predchádzajúca analýza experimentov – žiarenia absolútne čierneho telesa a fotoelektrického javu nás priviedla k predstave elektromagnetického žiarenia ako súboru identických (pre danú frekvenciu) elementárnych kvánt – fotónov. Energia fotónu je $E = h\nu$. Fotón sa šíri rýchlosťou svetla c, má preto nulovú pokojovú hmotnosť. Hybnosť fotónu je daná vzťahom

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.46}$$

(pozri aj príklad 1.24).

Časticové vlastnosti elektromagnetického žiarenia potvrdili aj ďalšie experimenty (napríklad Comptonov jav [1, 12]). Je dôležité si uvedomiť, ako predstava fotónov korešponduje s Maxwellovou teóriou elektromagnetického žiarenia. Pripomeňme, že vo fotoelektrickom jave prinášalo dopadajúce svetlo energiu rádovo 10^{-6} J/(m^{2}s). Energia jedného fotónu $E = h\nu$ je asi 1 eV = 10^{-19} J. Preto na 1 m^2 povrchu kovu dopadalo v experimente každú sekundu približne $N = 10^{13}$ fotónov. Elektromagnetické žiarenie teda pozostáva z takého veľkého množstva fotónov, že ich individuálne vlastnosti sú v bežných experimentoch (napríklad v optike) nepozorovateľné. Prejavia sa len v interakcii elektromagnetického poľa s látkou. Elektromagnetické pole, ktoré bolo v klasickej fyzike považované za vlnenie, má teda aj časticové vlastnosti. Naopak, ďalšie experimenty ukázali, že častice (napríklad elektrón) majú na úrovni mikrosveta vlnové vlastnosti.

1.6 Difrakcia elektrónov na kryštalickej mriežke

Vlnové vlastnosti elektrónov pozorovali prvýkrát Davisson a Germer. Pri bombardovaní niklového terčíka elektrónmi pozorovali, že odraz elektrónov od povrchu niklu závisí od štruktúry niklu. Ak je vzorka niklu amorfná, odrážajú sa elektróny približne rovnomerne do všetkých smerov (obrázok 1.10). Ak je však vzorka kryštalická, pozoruje sa odraz elektrónov do jedného význačného smeru. Tento smer závisí od energie elektrónov.

Experiment môžeme vysvetliť, ak predpokladáme, že elektrón má vlnové vlastnosti a môžeme mu pripísať vlnovú dĺžku. V súlade so vzťahom (1.46) priraďme elektrónu vlnovú dĺžku

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \tag{1.47}$$

Vlnová dĺžka elektrónu λ_e teda závisí od jeho hmotnosti m_e a od rýchlosti. Ak má elektrón vlnové vlastnosti, potom pri dopade elektrónov na kryštalickú štruktúru nastáva ich difrakcia podobne ako nastáva difrakcia elektromagnetických vĺn na difrakčnej mriežke. Difrakčné maximum pozorujeme pre vlny, ktoré dopadajú na základnú rovinu kryštalickej štruktúry pod uhlom θ, ktorý spĺňa vzťah

$$n\lambda_e = 2a \sin\theta \tag{1.48}$$

λ_e je vlnová dĺžka elektrónu a a je mriežková konštanta. Ak je elektrón pred dopadom na terčík urýchlený na energiu 50 eV, má hybnosť $p = \sqrt{2E/m}$ a jeho vlnová dĺžka bude

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = h\sqrt{\frac{m}{2E}} \approx 1{,}7 \times 10^{-10}\ \mathrm{m} \tag{1.49}$$

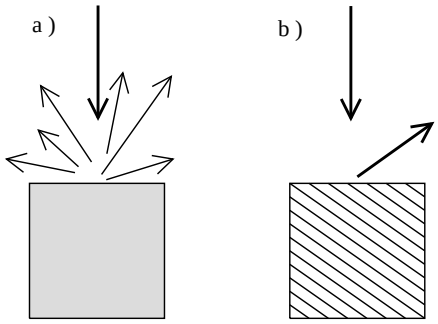
čo je hodnota porovnateľná s mriežkovou konštantou kryštalického niklu.

Pretože $\lambda = h/p$, je vlnová dĺžka elektrónu funkciou jeho energie $E = p^2/(2m)$. Preto sa uhol, pod ktorým sa elektróny od kryštalickej mriežky niklu odrážajú, musí meniť v závislosti od energie elektrónov. Táto závislosť sa skutočne pozoruje.

Prijať predstavu, že elektrón má vlnové vlastnosti, je ešte ťažšie, ako pripísať elektromagnetickému poľu časticový charakter. Základnou úlohou kvantovej mechaniky je poskytnúť fyzikálnu interpretáciu dualizmu medzi vlnami a časticami.

1.7 Atóm

Atóm ako najmenšia čiastočka hmoty figuroval v predstavách ľudí dávno predtým, ako sa jeho štruktúrou začali zaoberať. V klasickej fyzike nebol samotný atóm dôležitý. Je totiž taký malý (typický rozmer atómu je 10^{-10} metra), že jeho veľkosť len zriedkavo ovplyvnila výsledky klasických experimentov. Napríklad v mechanike, teórii pružnosti, v akustike vystačíme s predstavou homogénneho telesa so spojito rozloženou hmotou. Viditeľné svetlo má vlnovú dĺžku medzi 400 a 700 nm, čo je 1000-krát viac, ako typická vzdialenosť medzi dvomi susednými atómami v látke. Preto je bežný materiál pre svetlo homogénny. Ani optika sa preto nemusela atómovou štruktúrou zaoberať. Atómová štruktúra materiálu sa prejaví až pri rozptyle RTG svetla alebo,



Obr. 1.10. Experiment Davissona a Germera. Rozptyl elektrónov na niklovom terčíku. a) Elektróny dopadajú na amorfnú vzorku. Po dopade sa rozptyľujú do všetkých smerov. b) Elektróny dopadajú na kryštalickú vzorku. Elektróny sa rozptyľujú prevažne do jedného smeru, v súhlase s rovnicou difrakcie (1.48). Experiment ukázal, že elektrónu môžeme priradiť vlnovú dĺžku podľa vzťahu (1.47).

ako sme videli v časti 1.6, pri rozptyle elektrónov na kryštalickej mriežke. V oboch prípadoch je dôvodom porovnateľná vlnová dĺžka s medziatómovou vzdialenosťou.

1.7.1 Rutherfordov experiment

Rozhodujúci krok pre pochopenie štruktúry hmoty a atómu priniesol experiment Rutherforda, ktorý bombardoval ťažkými časticami α veľmi tenkú zlatú fóliu. Častice α sú jadrá hélia a pozostávajú z dvoch protónov a dvoch neutrónov. Pretože sú nabité, môžeme ich urýchliť elektrickým poľom. V experimente mali α-častice dostatočne vysokú energiu na to, aby všetky cez homogénnu tenkú zlatú fóliu bez problémov prenikli. Prekvapujúco sa ale niektoré z nich od fólie odrazili späť.

Spätný odraz sa dá vysvetliť len tak, že α-častice sa vo vnútri zlatej fólie rozptyľovali na objektoch podstatne masívnejších, ako sú ony. Existencia takýchto masívnych objektov sa ale v homogénnej zlatej fólii pôvodne nepredpokladala.

Z analýzy experimentu vyplynulo, že hmota je vo vnútri zlatej fólie rozmiestnená nehomogénne. Jej väčšina je sústredená do veľmi malých objektov, ktoré Rutherford identifikoval ako jadrá atómov zlata. Pretože kladne nabité α-častice boli jadrami coulombicky odpudzované, musia mať jadrá kladný elektrický náboj. Atóm sa teda podobná planetárnej slnečnej sústave, s ťažkým jadrom uprostred, okolo ktorého obiehajú ľahké elektróny.

Z experimentu získaný polomer jadra, $R = 10^{-15}$ m, je 100 000-krát menší ako samotný atóm. Ak uvážime, že prakticky všetka hmota je sústredená v jadre, dôjdeme k záveru, že všetky látky okolo nás sú *de facto* prázdne. Jadrá zaberajú len 10^{-15}-tu časť objemu látky. Porovnajme atóm so slnečnou sústavou: polomer Slnka je $R_s = 6{,}96 \times 10^5$ km. Ak by prvá planéta obiehala vo vzdialenosti stotisíckrát väčšej, ako je polomer Slnka, bola by od Slnka vzdialená asi 70 miliárd kilometrov. Ak uvážime, že Zem obieha vo vzdialenosti 150 miliónov kilometrov, je slnečná sústava v porovnaní s atómom pomerne hustou štruktúrou.

1.7.2 Klasická fyzika a atóm

Rutherfordov experiment naznačuje, že atómy pozostávajú z kladne nabitého jadra a záporne nabitých elektrónov, ktoré okolo jadra obiehajú. Elektróny sú k jadru priťahované Coulombovou príťažlivou silou. Aby sme sa nemuseli zaoberať aj vzájomnou interakciou elektrónov, uvažujme najjednoduchší atóm vodíka, ktorý pozostáva z jediného protónu s kladným nábojom $+e$, okolo ktorého obieha jeden elektrón.

Energia elektrónu je súčtom potenciálnej a kinetickej energie:

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} + \frac{1}{2}m_e v^2 \tag{1.50}$$

Dostredivá sila je daná Coulombovou silou,

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \tag{1.51}$$

Z rovnice (1.51) nájdeme rýchlosť v elektrónu ako funkciu polomeru dráhy r a ju dosadíme do vzťahu (1.50). Dostaneme energiu ako funkciu vzdialenosti elektrónu od jadra:

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{1.52}$$

Energia elektrónu v atóme je záporná, pretože elektrón je viazaný k jadru atómu a nemôže sa voľne pohybovať priestorom. Na to, aby sa elektrón z atómu uvoľnil, je potrebná práve energia $|E|$, ktorú musí dostať z okolia – napríklad absorpciou fotónu.

Popísaný klasický model atómu vyzerá jednoducho, naráža však na viaceré neprekonateľné problémy. Nevie napríklad vysvetliť, prečo sú všetky atómy vodíka rovnako veľké. Podľa vzťahu (1.52) totiž elektrón môže obiehať okolo jadra po dráhe s ľubovoľným polomerom, pričom jeho energia bude závisieť od polomeru tejto dráhy. K tomuto záveru prídeme aj z pohybovej rovnice elektrónu

$$m_e \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial t^2} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^3}\vec{r} \tag{1.53}$$

ktorá je formálne podobná na pohybovú rovnicu planéty obiehajúcej okolo Slnka. Táto rovnica ale nepredpisuje žiadny polomer dráhy elektrónu.

Klasický model atómu vodíka je nerealistický aj preto, lebo vedie k predstave dvojrozmerného atómu. Ak elektrón obieha okolo jadra podobne ako planéty okolo Slnka, potom sa nachádza len v jednej rovine. Predstava atómov, ktoré by mali diskový tvar je zjavne nerealistická.

Iným problémom klasického modelu je skutočnosť, že elektrón obiehajúci okolo jadra musí, v súlade s klasickou elektrodynamikou, vyžarovať energiu. Stratou energie by však padol na jadro. Klasická fyzika nevie odpovedať na otázku, prečo sa tak nedeje. Atómy prežívajú, hoci klasická elektrodynamika im predpovedá dobu života kratšiu ako 10^{-16} sekundy.

1.7.3 Spektrum atómu vodíka

Pre porozumenie štruktúry atómu zohrali rozhodujúcu úlohu experimentálne merania spektra atómu vodíka. V experimente boli atómy vodíka excitované (napríklad vzájomnými zrážkami). Excitovaný atóm sa zbavil získanej energie vyžiarením elektromagnetického žiarenia. Frekvenčná analýza tohto žiarenia ukázala, že atóm vodíka vyžaruje len elektromagnetické vlny presne definovaných vlnových dĺžok (obrázok 1.11). Prekvapujúce bolo, že všetky vlnové dĺžky λ, ktoré sa v spektre atómu vodíka objavili, môžeme vyjadriť jednoduchým univerzálnym vzťahom

$$\frac{1}{\lambda} = R\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right] \qquad m > n \tag{1.54}$$

kde n a m sú celé čísla. Jediný parameter, ktorý vo vyjadrení (1.54) vystupuje a ktorý obsahuje informáciu o atóme vodíka, je konštanta

$$R = 1{,}097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \tag{1.55}$$

nazvaná Rydbergova konštanta. Podľa vzťahu (1.54) môžeme vlnové dĺžky v spektre atómu vodíka usporiadať do sérií, pomenovaných podľa ich objaviteľov: Lymanova ($n = 1$), Balmerova ($n = 2$), Paschenova ($n = 3$), Brackettova ($n = 4$)a Pfundova ($n = 5$).

Jednoduchosť vzťahu (1.54) naznačuje, že je dôsledkom nejakého univerzálneho fyzikálneho princípu. Pre jeho nájdenie predpokladajme, že prechod atómu z vyššieho energetického stavu na nižší je sprevádzaný vyžiarením jediného fotónu. Energia vyžiareného fotónu

$$E_\lambda = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \tag{1.56}$$

potom zodpovedá rozdielu medzi dvoma energetickými hladinami atómu vodíka:

$$\Delta E = E_m - E_n \tag{1.57}$$

Elektrón vyžiari fotón, ak prejde z vyššej energetickej hladiny E_m na nižšiu hladinu E_n. Porovnaním rovníc (1.56) a (1.54) môžeme usúdiť, že elektrón, ktorý v atóme absorbuje alebo emituje fotóny s vlnovými dĺžkami danými rovnicou (1.54), zmení svoju energiu o hodnotu

$$\Delta E = E_\lambda = Rhc\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right] = E_m - E_n \tag{1.58}$$

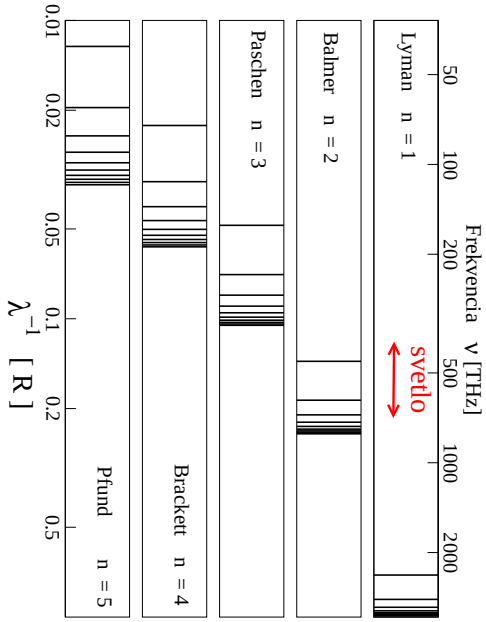
Porovnaním pravých strán oboch rovníc dostaneme, že možné energie elektrónu v atóme vodíka sú dané vzťahom

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2} \tag{1.59}$$

kde n je celé číslo (v ďalšom texte ho budeme nazývať kvantové číslo).

Experimentálne údaje nás teda priviedli k hypotéze, že elektrón v atóme vodíka môže mať len presne definované energie E_n, dané vzťahom (1.59). Všetky energie vieme vyjadriť pomocou jedinej hodnoty energie, Rhc, nazývanej 1 Rydberg (Ry). Hodnotu Rydbergovej konštanty R (zatiaľ) nevieme odvodiť z teórie, vstúpila do fyziky len na základe experimentálnych meraní. Po dosadení hodnoty troch konštánt dostaneme najnižšiu energiu elektrónu v atóme vodíka (energiu základného stavu s kvantovým číslom $n = 1$)

$$E_1 = -\,1\ \text{Ry} = -\,Rhc = -\,13{,}6\ \text{eV} \tag{1.60}$$



Obr. 1.11. Spektrum atómu vodíka pozostáva z izolovaných spektrálnych čiar s vlnovými dĺžkami danými rovnicou (1.54). Podľa hodnoty celého čísla n sú čiary zoradené do piatich sérií. Horná škála udáva frekvencie fotónov s príslušnou vlnovou dĺžkou. Všimnite si logaritmickú škálu na horizontálnej osi. Oblasť viditeľného svetla je vyznačená v hornom obrázku.

Predstava energetických hladín a možných prechodov elektrónov medzi nimi je naznačená na obrázku 1.12. Takáto predstava nie je v súhlase s klasickým modelom atómu (pozri časť 1.7.2), ktorý predpovedal spojité energetické spektrum atómu. Pôvod diskrétnych energetických hladín sa pokúsil vysvetliť Niels Bohr. Jeho modelom sa budeme zaoberať v nasledujúcej časti.

1.7.4 Bohrov model atómu

Aby vysvetlil kvantovanie energetických hladín v atóme vodíka, vyslovil Niels Bohr hypotézu, že elektrón v atóme vodíka má vlnový charakter. Môžeme mu preto, podobne ako pri analýze difrakcie na kryštalickej mriežke v časti 1.6, priradiť vlnovú dĺžku

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \tag{1.61}$$

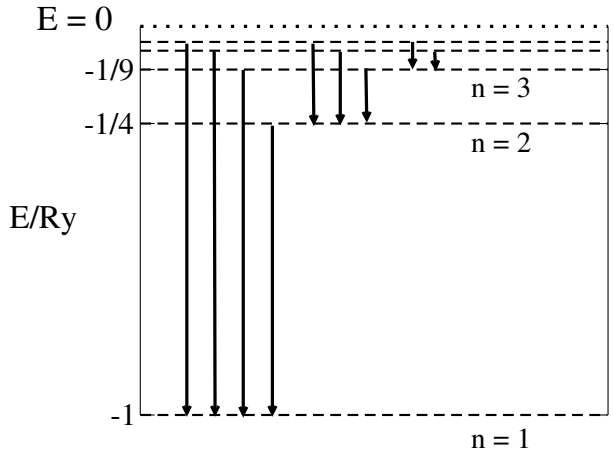
($p = m_e v$ je hybnosť elektrónu). Bohr ďalej predpokladal, že elektrón sa môže okolo jadra pohybovať len po takých dráhach, ktorých obvod je celočíselným násobkom jeho vlnovej dĺžky. Musí teda platiť

$$n\lambda_e = 2\pi r \tag{1.62}$$

Rovnica (1.62) definuje vzťah medzi rýchlosťou v elektrónu a polomerom jeho dráhy r. Spolu so vzťahom medzi odstredivou a Coulombovou silu (rovnica 1.51)

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \tag{1.63}$$

tak dostávame dve rovnice pre rýchlosť v elektrónu a polomer r jeho dráhy. Dve rovnice pre dve neznáme majú jednoznačné riešenie. Preto sú v atóme povolené len niektoré dráhy a k nim sú priradené presne určené hodnoty energie elektrónu. Celé číslo n v rovnici (1.62) teda určuje polomer dráhy r aj rýchlosť v, a teda aj energiu elektrónu.



Obr. 1.12. Povolené energetické hladiny elektrónu v atóme vodíka, definované vzťahom (1.59). 1 Ry = 13,6 eV je definovaný vzťahom (1.60). Hladiny sú vyznačené horizontálnymi prerušovanými čiarami. Šípky ukazujú možné prechody elektrónu z jednej hladiny na druhú. Každý prechod je sprevádzaný excitáciou fotónu s vlnovou dĺžkou danou rovnicou (1.54).

Tab. 1.2. Konštanty charakterizujúce atóm vodíka. Rydbergova konštanta R charakterizuje vlnové dĺžky v spektre (rovnica 1.54). Bohrov polomer a_0 predstavuje typickú dĺžkovú škálu v atóme vodíka, v molekulách a v kryštalickej mriežke. Energia základného stavu (najnižšia možná energia) atómu vodíka je $E_1 = -1$ Ry. V treťom riadku si všimnime vyjadrenie 1 Ry pomocou Bohrovho polomeru.

Rydbergova konštanta	$R = \dfrac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 c h^3}$	= $1{,}097 \times 10^7$ m^{-1}
Bohrov polomer	$a_0 = \dfrac{8\pi\epsilon_0}{e^2}\dfrac{\hbar^2}{2m_e} = \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\hbar}{m_e c}$	= $0{,}529 \times 10^{-10}$ m
Rydberg	1 Ry = $Rhc = \dfrac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = \dfrac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = \dfrac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$	=13,6 eV

Vyjadrime z rovnice (1.62) rýchlosť elektrónu $v = nh/(2\pi r m_e)$ a dosaďme ju do rovnice (1.63). Nájdeme tak povolené hodnoty polomeru dráhy

$$r_n = 2\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{2m_e}\, n^2 = a_0 n^2 \tag{1.64}$$

kde sme zaviedli Bohrov polomer,

$$a_0 = \frac{8\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{2m_e} = 0{,}53 \times 10^{-10}\ \text{m} \tag{1.65}$$

Povolené hodnoty energie získame, ak dosadíme r_n do výrazu pre energiu elektrónu (1.52)

$$E_n = -\frac{2m_e}{\hbar^2}\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \frac{1}{4n^2} \quad = \quad \frac{E_1}{n^2} \tag{1.66}$$

Energia základného stavu je

$$E_1 = -\frac{1}{4}\frac{2m_e}{\hbar^2}\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \tag{1.67}$$

po dosadení hodnôt základných konštánt z tabuľky 1.1 a hmotnosti elektrónu $m_e = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg (pozri tabuľku 1.4) nájdeme z rovnice (1.67) energiu základného stavu atómu vodíka $E_1 = -13{,}6$ eV, ktorá súhlasí s energiou (1.60), odvodenou len na základe experimentálnych pozorovaní. Môžeme preto vyjadriť Rydbergovu konštantu R pomocou základných konštánt

$$R = -\frac{E_1}{hc} \tag{1.68}$$

Podobne nájdeme, že všetky vyššie energie, dané rovnicou (1.66), sú identické s energiami (1.59). Úspechom Bohrovej hypotézy teda bolo nielen to, že dokázal vysvetliť pôvod spektra vodíka, ale získal aj presnú hodnotu Rydbergovej konštanty.

Bohrov model však nevyriešil otázku stability atómu z hľadiska klasickej elektrodynamiky. Postuloval len, že ak sa elektrón pohybuje po dráhach, ktoré spĺňajú vzťah (1.62), tak bude atóm stabilný. Neskôr uvidíme, že hoci Bohrov model dáva správne hodnoty energií elektrónu, nestačí na objasnenie priestorového rozdelenia elektrónov okolo jadra. Nemohol vysvetliť ani tvar atómu, ani počty elektrónov, ktoré môžu obsadzovať jednotlivé hladiny. Prvý nedostatok Bohrovho modelu ukážeme už v nasledujúcej časti.

1.7.5 Moment hybnosti

Uvažujme elektrón pohybujúci sa po n-tej kruhovej dráhe v Bohrovom modeli atómu a vypočítajme veľkosť jeho momentu hybnosti:

$$L = |\vec{r} \times \vec{p}| = rp = r\frac{h}{\lambda_e} = \hbar n \tag{1.69}$$

(využili sme vzťahy (1.61), (1.62) a skutočnosť, že vektor hybnosti $\vec{p}$ je kolmý na polohový vektor $\vec{r}$ meraný od stredu atómu). V Bohrovom modeli atómu je teda kvantovaná nielen energia elektrónu, ale aj jeho moment hybnosti.

Musíme ale zdôrazniť, že vzťah (1.69) nie je správny. Riešením Schrödingerovej rovnice v kapitole 8 dostaneme správne pravidlá pre kvantovanie momentu hybnosti. Celkový moment hybnosti kvantovej častice môže nadobúdať len diskrétne hodnoty

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}, \quad \ell = 0,1,\ldots,n \tag{1.70}$$

a jeho priemet do ľubovoľnej osi (napríklad do osi z) môže nadobúdať len hodnoty

$$L_z = m\hbar, \quad |m| = 0,1,\ldots,\ell \tag{1.71}$$

Nesprávne kvantovanie (1.69) sme odvodili z predpokladu, že elektrón sa pohybuje v atóme vodíka po kruhovej dráhe. Rozdiel medzi odvodenými hodnotami (1.69) a správnymi hodnotami (1.70) ukazuje, že predpoklad, že elektrón sa v atóme pohybuje po kruhovej dráhe, nemôže byť správny. Bohrov model teda presne popisuje energetické spektrum atómu vodíka, ale nedokáže opísať detaily jeho štruktúry.

1.8 Spin

Experimenty ukázali, že každá kvantová častica (napríklad elektrón, protón, α-častica) má svoj vlastný moment hybnosti – spin $\vec{S}$. Veľkosť spinu je opäť kvantovaná,

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \tag{1.72}$$

analogicky momentu hybnosti (rovnica 1.70). Rovnako priemet spinu do ľubovoľnej osi (napríklad do osi z) môže nadobúdať len kvantované hodnoty

$$S_z = \hbar s_z, \quad s_z = -s, -s+1, \ldots 0, \ldots, s-1, s \tag{1.73}$$

Kvantové číslo s môže nadobúdať alebo celočíselné alebo poločíselné hodnoty. V závislosti od hodnoty kvantového čísla s sa všetky častice mikrosveta delia do dvoch skupín:

$$s = \begin{cases} 0,1,2,\ldots & \text{bozóny} \\ \frac{1}{2},\frac{3}{2},\ldots & \text{fermióny} \end{cases} \tag{1.74}$$

Bozóny majú teda celočíselné hodnoty s. Budeme hovoriť, že majú celočíselný spin. Bozónmi sú aj častice s nulovým spinom ($s = 0$), napríklad α-častica. Aj fotón je bozón, pretože má spin s kvantovým číslom $s = 1$. Dôležitou vlastnosťou fotónu je to, že jeho spin má len dva možné priemety do niektorej osi: kvantové číslo s_z môže nadobúdať len hodnoty ± 1 (nemôže mať hodnotu nula). Fotón s nenulovým momentom hybnosti môžeme asociovať s kruhovo polarizovanou rovinnou vlnou, a dva smery spinu s dvoma orientáciami kruhovej polarizácie.

Medzi fermióny (častice s poločíselným spinom) patrí elektrón, protón, neutrón. Všetky tri tieto častice majú spinové kvantové číslo $s = 1/2$.

Spin kvantových častíc nemá analógiu v žiadnej klasickej fyzikálnej veličine. To vidíme už z toho, že jeho hodnota je úmerná Planckovej konštante. Ak by sme si kvantovú časticu predstavili ako malé tuhé teleso, rotujúce okolo svojej osi, potom by sme spin mohli asociovať s momentom hybnosti súvisiacim s takouto rotáciou.Táto predstava však nie je dostatočne zdôvodniteľná: kvantové častice nie sú tuhé rotujúce gule, ale majú svoju vlastnú štruktúru. Nevysvetlí nám ani, prečo je hodnota spinu kvantovaná.

1.8.1 Magnetický moment

Z klasickej fyziky poznáme súvis medzi momentom hybnosti a magnetickým momentom: Častica s nábojom q obiehajúca rýchlosťou v po kruhovej dráhe s polomerom r vytvára prúd $I = q/T$, kde $T = 2\pi r/v$ je perióda obehu častice. Magnetický moment spojený s prúdovou slučkou je $\mu = IS = \pi r^2 I$. Po dosadení dostaneme

$$\mu = \frac{qvr}{2} = \frac{q}{2m}L \tag{1.75}$$

kde $L = mvr$ je moment hybnosti. Vo vektorom zápise

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L} \tag{1.76}$$

Analogicky majú kvantové častice s nenulovým spinom aj vlastný magnetický moment. Vzťah medzi spinom a magnetickým momentom

$$\vec{\mu}_s = g\frac{q}{2m}\vec{S} \tag{1.77}$$

však nie je univerzálny, pretože v ňom vystupuje aj konštanta g – gyromagnetický pomer – ktorej hodnota závisí od typu častice.

Pozoruhodné je, že častica môže mať vlastný magnetický moment aj keď je sama nenabitá. Magnetické momenty troch základných elementárnych častíc – elektrónu, protónu a neutrónu – sú uvedené v tabuľke 1.4.

1.8.2 Štatistické vlastnosti súboru kvantových častíc

Spin častíc ovplyvňuje ich štatistické vlastnosti. V časti 1.2.2 sme ukázali, že každý mód elektromagnetického poľa môžeme reprezentovať štatistickým súborom fotónov, z ktorých každý má energiu $E_\nu = h\nu$. Stredný počet fotónov s energiou E je

$$\langle n(E)\rangle = \frac{1}{e^{E/k_BT} - 1} \tag{1.78}$$

(rovnica 1.27). Pre malé hodnoty energie, $E \ll k_BT$ stredný počet bozónov s energiou E rastie do nekonečna. To je v súlade s tendenciou bozónov obsadzovať v štatistickom súbore ten istý kvantový stav.

Iná situácia nastáva v štatistickom súbore mnohých fermiónov (napríklad elektrónov). Dva fermióny sa môžu nachádzať v stave s tou istou energiou len vtedy, ak sa líšia hodnotou nejakej inej veličiny, napríklad hybnosti, spinu, alebo momentu hybnosti. Tento zákon je známy ako Pauliho vylučovací princíp.

V súlade s Pauliho vylučovacím princípom sa v mnohoelektrónových atómoch nemôžu všetky elektróny nachádzať v základnom stave $n = 1$. V tomto stave môžu byť len dva elektróny, ktoré síce majú rovnakú energiu, ale líšia sa orientáciou svojho spinu (preto nie sú v tom istom stave). Ďalšie elektróny musia obsadzovať vyššie energetické hladiny s $n = 2{,}3, \ldots$. Elektrónová štruktúra atómov a ich chemické vlastnosti preto veľmi úzko súvisia s tým, že elektróny sú fermióny.

1.9 Základné elementárne častice

V predchádzajúcich častiach sme sa stretli s fotónom, elektrónom a protónom.
Fotón reprezentuje elementárne kvantum elektromagnetickej energie. Vo vákuu sa pohybuje rýchlosťou svetla c. Sprostredkuje elektromagnetickú interakciu medzi nabitými časticami. Má nulovú pokojovú hmotnosť. Napriek nulovej pokojovej hmotnosti prenáša energiu $h\nu$, hybnosť $h\nu/c$ a moment hybnosti (spin) $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ s hodnotou $s = 1$. Ako častica s celočíselným spinom reprezentuje bozóny. Energia fotónu, $E = h\nu$, je priamo úmerná frekvencii. V tabuľke 1.3 sú uvedené typické energie fotónov pre elektromagnetické žiarenie rôznych vlnových dĺžok.
Elektrón je najznámejšia elementárna častica. Má záporný elementárny nábojom $-e$. Pokojová hmotnosť elektrónu je $m_e = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg, pokojová energia $E = m_ec^2$ má hodnotu $E = 0{,}51$ MeV. Elektrón má poločíselný spin $s = 1/2$. Spolu s momentom hybnosti má aj vlastný magnetický moment,

$$\vec{\mu} = -g\frac{e}{2m_e}\vec{S} \tag{1.79}$$

Gyromagnetický pomer elektrónu sa približne rovná dvom,

$$g \approx 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \ldots\right) \tag{1.80}$$

kde α je konštanta jemnej štruktúry (pozri tabuľku 1.1).

Základnými stavebnými kameňmi atómového jadra sú protón a neutrón (spolu ich nazývame nukleónmi). Ich hmotnosti sú takmer rovnaké, takmer 2000-krát väčšie ako je hmotnosť

elektrónu. Hmotnosť neutrónu je však o niečo väčšia, ako hmotnosť protónu (pozri tabuľku 1.4 a príklad 1.21). Protón nesie kladný elektrický náboj $+e$, neutrón je elektricky neutrálny. Ich spin je rovnakej veľkosti ako spin elektrónu (spinové kvantové číslo $s = 1/2$). Obe častice, aj elektricky neutrálny neutrón, majú aj magnetický moment.

Základné vlastnosti elektrónu, protónu a neutrónu sú uvedené v tabuľke 1.4.

Pri opise základných experimentov – spektra atómu vodíka, fotoelektrického javu a generovania RTG žiarenia – sme videli, že fotón môže v interakcii s elektrónmi zaniknúť (absorpcia fotónu). Vtedy elektrón získa jeho energiu, hybnosť, aj moment hybnosti. Naopak, pri emisii fotónu elektrón energiu, hybnosť aj moment hybnosti odovzdáva fotónu. Absorpcia a emisia fotónu je jedným z mnohých prípadov premeny elementárnych častíc v procesoch interakcie. Vo všeobecnosti dnes poznáme asi 200 elementárnych častíc. Väčšinou majú veľmi krátku dobu života, počas ktorej sa rozpadnú na iné častice. Ani voľný neutrón nie je stabilný, má dobu života necelých 15 minút. Zánik (anihiláciu) elementárnych častíc pozorujeme aj pri interakcii elektrónu s jeho antičasticou - pozitrónom. Pozitrón je elementárna častica, ktorá sa od elektrónu líši len znamienkom elementárneho náboja. Vzájomnou interakciou elektrónu s pozitrónom vznikajú zväčša dva fotóny:

$$e^- + e^+ \rightarrow 2\gamma \tag{1.81}$$

V dnešnej teórii elementárnych častíc, opísanej tzv. štandardným modelom, figuruje len malý počet elementárnych častíc, rozdelených na leptóny (napríklad elektrón alebo neutríno), kvarky a bozóny (medzi ne patrí aj fotón). Podľa štandardného modelu sa protón, neutrón a mnohé iné častice skladajú z kvarkov. Teória štandardného modelu presahuje rámec tohto textu a nebudeme sa jej ďalej venovať.

Tab. 1.3. Typické frekvencie, vlnové dĺžky elektromagnetického žiarenia a zodpovedajúce energie fotónov (v elektrónvoltoch) $E = h\nu = 4{,}13 \times 10^{-15}\nu$. Energii fotónu môžeme priradiť teplotu T podľa vzťahu $T = (h/k_B)\nu = 4{,}801 \times 10^{-11}\nu$.

Frekvencia ν [s^{-1}]		Vlnová dĺžka $\lambda = c/\nu$ [m]	Energia $E = h\nu$ [eV]
$10^{23} - 10^{20}$	γ žiarenie	$10^{-15} - 10^{-12}$	$10^{8} - 10^{5}$
$10^{19} - 10^{16}$	RTG	$10^{-11} - 10^{-8}$	$10^{4} - 10^{2}$
$10^{16} - 10^{15}$	ultrafialové	$10^{-8} - 10^{-7}$	$10^{2} - 1$
$(7 - 4) \times 10^{14}$	viditeľné svetlo	$(4 - 7) \times 10^{-7}$	$1{,}6 - 2{,}9$
$10^{14} - 10^{12}$	infračervené	$10^{-6} - 10^{-4}$	$1 - 10^{-2}$
$10^{11} - 10^{9}$	mikrovlny	$10^{-3} - 10^{-1}$	$10^{-3} - 10^{-5}$
$10^{9} - 10^{5}$	TV, rozhlas	$10^{-1} - 10^{3}$	$10^{-5} - 10^{-9}$

Tab. 1.4. Základné fyzikálne parametre elektrónu, protónu, neutrónu a fotónu. Hmotnostná jednotka u je definovaná ako (1/12) hmotnosti jadra uhlíka ${}^{12}_{6}$C: $u = 1{,}6605 \times 10^{-27}$ kg.

	Elektrón	Protón	Neutrón	Fotón
Pokojová hmotnosť m/u	m_e $9{,}1 \times 10^{-31}$ kg	m_p $1{,}6726 \times 10^{-27}$ kg 1,007276	m_n $1{,}6749 \times 10^{-27}$ kg 1,008665	0 0
Náboj	$-e$ $-1{,}602 \times 10^{-19}$ C	$+e$	0	0
s Spin Priemet spinu do zvolenej osi	$1/2$ $s_e = \hbar\sqrt{3/4}$ $\pm\frac{\hbar}{2}$	$1/2$ $s_p = s_e$ $\pm\frac{\hbar}{2}$	$1/2$ $s_n = s_e$ $\pm\frac{\hbar}{2}$	1 $\hbar\sqrt{2}$ $\pm\hbar$
g Magnetický moment	2,002319 $-9{,}2847 \times 10^{-24}$ J/T	5,585694 $1{,}41 \times 10^{-26}$ J/T	-3,826084 $-9{,}6623 \times 10^{-27}$ J/T	
Štatistika	fermión	fermión	fermión	bozón

1.10 Jadro atómu

Jadro atómu sa skladá z protónov a neutrónov. Počet protónov (atómové číslo) Z určuje typ atómu. Hmotnostné číslo A udáva počet protónov a neutrónov. Príslušný atóm potom označujeme

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X} \tag{1.82} $$

V ľahkých jadrách je počet protónov a neutrónov približne rovnaký: $A \approx 2Z$. Príkladom je hélium ${}^{4}_{2}$He alebo kyslík ${}^{16}_{8}$O. S rastúcim počtom protónov rastie počet neutrónov rýchlejšie, $A \approx 3Z$ (napríklad urán ${}^{238}_{92}$U). Atómy s rovnakým atómovým číslom Z, ale rôznym hmotnostným číslom A, sú izotopy. Príkladom izotopov sú dva izotopy vodíka: deutérium ${}^{2}_{1}$H, trícium ${}^{3}_{1}$H. Známy je aj izotop uhlíka ${}^{14}_{6}$C, ktorý sa líši od „bežného” uhlíka ${}^{12}_{6}$C dvoma dodatočnými neutrónmi v jadre.

1.10.1 Jadrové sily. Mezóny

Pretože protóny nesú kladný náboj, musia byť v jadre viazané vzájomnou príťažlivou interakciou, ktorá je silnejšia ako odpudivá elektrostatická interakcia. Túto interakciu efektívne opíšeme ako

výmenu elementárnych častíc – mezónov – medzi časticami v jadre. V jadre neustále prebiehajú procesy, v ktorých sa neutrón mení na kladný protón a záporný π^- mezón

$$n \to p + \pi^- \tag{1.83}$$

a protón sa mení na neutrálny neutrón a kladný π^+ mezón:

$$p \to n + \pi^+ \tag{1.84}$$

Mezóny z jadra neunikajú, ale sú zachytené ďalšími nukleónmi,

$$p + \pi^- \to n, \qquad n + \pi^+ \to p \tag{1.85}$$

takže počet protónov a neutrónov v jadre sa zachováva. Podobne prebieha výmena neutrálnych π^0 mezónov medzi dvoma protónmi ($p \to p + \pi^0$) alebo dvoma neutrónmi.[5]

Interakcia medzi nukleónmi, sprostredkovaná výmenou mezónov, má konečný dosah:

$$V(r) \sim \frac{e^{-r/r_0}}{r} \tag{1.86}$$

(Yukawov potenciál). Klesá teda exponenciálne so vzdialenosťou medzi interagujúcimi časticami. Typická vzdialenosť, na ktorej interakcia pôsobí,

$$r_0 = \frac{\hbar}{cm_\pi} \tag{1.87}$$

je nepriamo úmerná hmotnosti častíc, ktoré interakciu sprostredkujú.[6] Ak dosadíme do rovnice (1.87) hmotnosť mezónu, $m_\pi \approx 273\ m_e$, dostaneme

$$r_0 \sim 1{,}41 \times 10^{-15}\ \mathrm{m} \tag{1.88}$$

Výmena π-mezónov teda vedie ku krátkodosahovej interakcii, pôsobiacej len na vzdialenostiach porovnateľných s rozmerom atómového jadra.

Premeny nukleónov z neutrónu na protón (1.83) a z protónu na neutrón (1.84) na prvý pohľad odporujú zákonu zachovania energie. Pretože hmotnosti protónu a neutrónu sú približne rovnaké, vznikom mezónu sa narušila energetická bilancia jadra o energiu $\Delta E = m_\pi c^2 \sim 140$ MeV. V kvantovom svete sú však povolené aj procesy, v ktorých sa energia nezachováva, pokiaľ je doba tohto procesu dostatočne krátka:

$$\Delta E \Delta t \leq \hbar \tag{1.89}$$

Táto podmienka je v premenách neutrónu a protónu v jadre splnená. Mezón totiž musí byť spätne absorbovaný ďalším nukleónom skôr, ako by vyletel z jadra. Preto môžeme jeho dobu života v jadre odhadnúť vzťahom

$$\Delta t \sim 2R/c \sim 6{,}6 \times 10^{-24}\ \mathrm{s} \tag{1.90}$$

Dosadením za ΔE a Δt dostaneme $\Delta E \Delta t \sim 1{,}48 \times 10^{-34}$ Js, čo je v súlade so vzťahom (1.89).

[5] $\pi^\pm$ mezóny sú elementárne častice s pokojovou hmotnosťou približne 273-krát väčšou ako hmotnosť elektrónu: $m_{\pi^\pm} \approx 273 m_e$, π^0 mezóny majú pokojovú hmotnosť o niečo menšiu, $m_{\pi^0} \approx 263\ m_e$. Voľné $\pi^\pm$ mezóny majú dobu života $\tau = 2{,}6 \times 10^{-8}$ s, π^0 mezón len $8{,}4 \times 10^{-17}$ s.

[6] Ak by sme do rovnice (1.87) dosadili nulovú hmotnosť fotónu, dostali by sme Coulombov zákon. Ďalekodosahovosť Coulombickej interakcie teda súvisí s nulovou hmotnosťou fotónov, ktoré ju sprostredkujú.

1.10.2 Väzbová energia

Pre stabilitu atómového jadra je podstatné, že jeho pokojová hmotnosť M_{J} je menšia ako súčet pokojových hmotností všetkých protónov a neutrónov, z ktorých sa skladá. Na to, aby sme jadro obsahujúceho Z protónov a $A - Z$ neutrónov rozbili na jednotlivé nukleóny, je teda potrebná väzbová energia

$$\Delta E = [Zm_p + (A - Z)m_n - M_{\mathrm{J}}]\, c^2 = \Delta M c^2 \tag{1.91}$$

Napríklad hmotnosť jadra deutéria D = ${}^{2}_{1}$H, $M_{\mathrm{D}} = 3{,}3446 \times 10^{-27}$ kg je menšia ako súčet hmotnosti protónu a neutrónu o hodnotu ΔM,

$$\Delta M = M_{\mathrm{D}} - m_p - m_n = -3{,}983 \times 10^{-30}\ \mathrm{kg} \tag{1.92}$$

Rozdiel hmotností je pomerne veľký: všimnite si, že $|\Delta M|$ je asi štyrikrát väčšia ako hmotnosť elektrónu m_e. Väzbová energia deutéria je

$$\Delta E = -\Delta M c^2 = 2{,}23\ \mathrm{MeV} \tag{1.93}$$

Vo všeobecnosti závisí väzbová energia jadra od počtu nukleónov v jadre. Najmenšia je pre deutérium (2,23 MeV) najväčšia – až 1640 MeV – pre bizmut ${}^{209}_{83}$Bi. Z malých jadier je najstabilnejšie hélium ${}^{4}_{2}$He, ktorého väzbová energia je 28,32 MeV (príklad 1.22).

Zaujímavejšou veličinou je väzbová energia prepočítaná na počet nukleónov A v jadre, ktorá dosahuje maximálnu hodnotu $E_v \approx 8{,}79$ MeV pre jadrá železa ${}^{56}_{26}$Fe, ${}^{58}_{26}$Fe a jadrá niklu ${}^{60}_{28}$Ni a ${}^{62}_{28}$Ni. Veľké jadrá majú väzbovú energiu menšiu, preto sú nestabilné, a rozpadom prechádzajú na stabilnejšie. Naopak, malé jadrá môžu syntézou vytvoriť stabilnejšie veľké jadro.

Nenulové hodnoty ΔM sú dôležité pre stabilitu atómových jadier. Na druhej strane, ΔM je podstatne menšia ako hmotnosť samotného jadra, $\Delta M \ll M$. V atómovej a molekulovej fyzike alebo v chémii preto môžeme odhadnúť hmotnosť atómov ako súčet hmotností protónov a neutrónov v jadre, a hodnotu ΔM zanedbať, podobne ako zanedbávame hmotnosti elektrónov, obiehajúcich okolo jadra.

1.10.3 α-rozpad jadier. Tunelovanie α-častíc

Jedným z dôkazov vlnového charakteru častíc je α-rozpad veľkých jadier, v ktorom ťažké nestabilné jadrá uvoľňujú α-časticu. Príkladom je rozpad uránu na thórium:

$${}^{238}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\mathrm{Th} + \alpha \tag{1.94}$$

Častica α pozostáva z dvoch protónov a dvoch neutrónov (ide teda o jadro atómu hélia ${}^{4}_{2}$He). Rozpad jadier si môžeme predstaviť tak, že častica α je viazaná vo vnútri jadra, môže ho však opustiť, ak prekoná potenciál príťažlivých síl. Schematicky je jej situácia načrtnutá na obrázku 1.13.

Z hľadiska klasickej fyziky je jadro stabilné, pretože α-častica nemá dosť energie, aby prekonala potenciálovú bariéru. Jedinou možnosťou úniku α-častíc z jadra by mohli byť náhodné procesy, v ktorých by α-častica získa od jadra dostatočnú energiu na to, aby potenciálovú bariéru preskočila. Aj keby to bolo možné, takýto proces odporuje experimentálnym dátam. Ak by totiž

častice prekonávali bariéru vďaka náhodným prírastkom energie z jadra, unikali by z jadra α-častice s rôznymi energiami. Energie pozorovaných α-častíc sú však takmer totožné [4].

Vysvetlenie α-rozpadu je založené na tom, že kvantové častice sú schopné prekonávať aj také energetické bariéry, ktoré sú pre klasické častice neprekonateľné. Proces prechodu cez takéto bariéry sa nazýva tunelovanie. Vysvetlením tunelovania sa budeme podrobne zaoberať neskôr v časti 4.3. Uvidíme, že tunelovanie nevedie len k rozpadu jadier, ale je podstatné pre stabilitu mnohých kvantových štruktúr, od jednoduchých dvojatómových molekúl až po kryštalickú mriežku.

Pravdepodobnosť tunelovania častice cez potenciálnu bariéru môžeme presne nájsť len v niektorých špeciálnych prípadoch. Vo všeobecnosti však môžeme povedať, že pravdepodobnosť tunelovania klesá exponenciálne so šírkou bariéry aj s rozdielom medzi výškou bariéry a energiou častice. Preto má α-častica s energiou E_3 (obrázok 1.13) podstatne vyššiu pravdepodobnosť úniku, ako častica s energiou E_1. S pravdepodobnosťou prechodu cez bariéru prirodzene súvisí polčas rozpadu jadier. V závislosti od tvaru väzobného potenciálu sa pozorovaný polčas rozpadu mení od zlomkov sekúnd (10^{-6}) až po stovky miliárd rokov [4] (pozri tabuľku 1.6).

1.10.4 β-rozpad. Neutríno

Jedným z procesov rozpadu jadier je β-rozpad, pri ktorom narastie počet protónov v jadre o jeden, a z jadra unikne elektrón. Príkladom je rozpad izotopu uhlíka

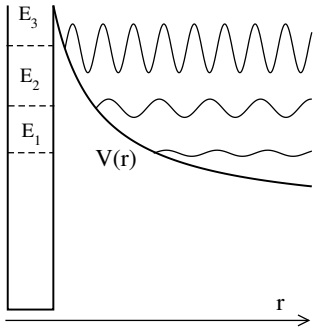
$$^{14}_{6}\mathrm{C} \rightarrow ^{14}_{7}\mathrm{N} + e + \overline{\nu} \tag{1.95}$$

pri ktorom z jadra uniká elektrón. Pretože elektrón samotný sa v jadre nemôže nachádzať, musí byť produktom premeny neutrónu na protón:

$$n \rightarrow p + e + \overline{\nu} \tag{1.96}$$

Tretia častica na pravej strane reakcií (1.95) a (1.96) je antineutríno. Podobne možno pozorovať premenu

$$^{12}_{7}\mathrm{N} \rightarrow ^{12}_{6}\mathrm{C} + e^{+} + \nu \tag{1.97}$$



Obr. 1.13. Schéma tunelovania α-častíc z jadra. α-častica je viazaná v jadre potenciálom $V(r)$. V jadre je potenciál príťažlivý, mimo jadra je α-častica odpudzovaná elektrostatickým potenciálom, pretože má, rovnako ako jadro, kladný náboj. Energia α-častice v jadre je menšia ako výška potenciálovej bariéry medzi jadrom a jeho okolím. Napriek tomu častica môže z jadra uniknúť – pretuneluje cez bariéru. Za bariérou sa šíri ako voľná častica. Pravdepodobnosť tunelovania závisí od energie častice v potenciálovej jame a od šírky bariéry.

spôsobenú premenou protónu v jadre dusíka na neutrón, pozitrón a neutríno ν:

$$p \rightarrow n + e^{+} + \nu \tag{1.98}$$

Pretože protón je ľahší ako neutrón, prebieha premena (1.98) iba vo vnútri jadier. Naopak, premena (1.96) je zodpovedná za to, že voľný neutrón je nestabilný.

Rozpad β viedol k objavu nových elementárnych častíc: neutrína ν a antineutrína $\overline{\nu}$. Obe majú nenulovú, ale veľmi malú pokojovú hmotnosť a s ostatnými časticami interagujú tak slabo, že ich je len veľmi ťažké detegovať. Preto pôvodne neboli v β-rozpade pozorované. Ich účasť v β-rozpade bola teoreticky „odvodená". Vyplývala z potreby zachovať v reakciách (1.96) a (1.98) energiu, hybnosť a celkový moment hybnosti.

Zaujímavým procesom je záchyt elektrónu z elektrónového obalu jadrom atómu, napríklad

$$^{7}_{4}\mathrm{Be} + e \rightarrow ^{7}_{3}\mathrm{Li} + \nu \tag{1.99}$$

ktorý je sprevádzaný premenou

$$p + e \rightarrow n + \nu \tag{1.100}$$

Pretože v každej reakcii sa musí zachovať energia, musia mať jadrá vznikajúce β-rozpadom vyššiu väzbovú energiu, ako prvotné jadrá. Rozdiel medzi väzbovou energiou pôvodného a výsledného jadra sa spotrebuje na pokojovú hmotu odchádzajúceho elektrónu alebo pozitrónu (0,51 MeV) a zvyšok energie sa rozdelí medzi odchádzajúce častice. Pretože časť energie odnášajú aj neutrína (alebo antineutrína), nemajú odchádzajúce elektróny (alebo pozitróny) presne definovanú kinetickú energiu (ako ju mali α-častice v predchádzajúcej časti 1.10.3). Typická kinetická energia elektrónov a pozitrónov vznikajúcich v procesoch β-rozpadu je asi $0{,}2$ MeV (pozri aj príklad 1.26).

1.10.5 γ-žiarenie

Jadrá atómov majú podobne ako atómy diskrétne energetické spektrum. Ak sa jadro nachádza vo vyššom energetickom stave, snaží sa dostať do základného stavu s nižšou energiou. Pri tomto prechode vyžiari fotón. Pretože rozdiely medzi energetickými hladinami v jadrách sú rádovo MeV, má tieto hodnoty aj energia odchádzajúcich fotónov. Fotóny s takouto vysokou energiou označujeme ako γ-žiarenie (pozri tabuľku 1.3).

V predchádzajúcej časti sme videli, že α-rozpadom sa jadro zbaví α-častice. V mnohých prípadoch sa výsledné jadro nachádza v excitovanom stave a až následným vyžiarením fotónu – γ-kvanta – sa dostáva do základného stavu. Žiarenie γ teda môže byť sprievodným javom α-rozpadu.

1.11 Typické veličiny v mikrosvete

Na záver tejto kapitoly uvedieme hodnoty energie, času, vzdialeností a rýchlosti, s ktorými sa v mikrosvete stretneme.

Tab. 1.5. Typické energie v mikrosvete vyjadrené v elektrónvoltoch.

$1{,}602 \times 10^{-19}$ J	1 eV
$E_{\mathrm{EZ}} = \frac{1}{2}k_B T$ pre $T = 300$ K	0,0129 eV
Energia fotónu vo viditeľnom svetle	1,67 - 2,9 eV
Energia elektrónu v základnom stave atómu vodíka	- 1 Ry = -13,6 eV
Väzbová energia molekuly kyslíka O_2	5,1 eV
Energia elektrónu v základnom stave atómu železa $_{26}$Fe	- 26^2 Ry = -9,19 keV
Energia RTG lúčov	$\sim 1 - 10$ keV
Pokojová energia elektrónu $m_e c^2$	$m_e c^2 = 0{,}511$ MeV
Rozdiel pokojových energii neutrónu a protónu	$(m_n - m_p)c^2 \sim 1{,}3$ MeV
Väzbová energia deutéria	2,23 MeV
Pokojová hmotnosť protónu $m_p c^2$	938,4 MeV
Väzbová energia jadra bizmutu	1640 MeV

1.11.1 Energia

Typickou energiou v kvantovej fyzike je jeden elektrónvolt. Ako vyplýva z názvu, ide o energiu, ktorú získa elektrón (resp. iná častica s nábojom e), ak sa urýchli potenciálom jeden volt. Hoci energia 1 eV je z makroskopického hľadiska veľmi malá, na škále elektrónov ide o pomerne veľkú energiu. Napríklad voľný elektrón s energiou $E = 1$ eV sa pohybuje rýchlosťou

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 593 \text{ km/s} \tag{1.101}$$

Zo vzťahu pre energiu fotónu, $E = h\nu$, dostaneme, že fotónu s energiou $E = 1$ eV zodpovedá frekvencia $\nu = 241$ THz. Pretože viditeľné svetlo leží vo frekvenčnom intervale $400 - 700$ THz, zodpovedajú mu fotóny s energiami $1{,}6 - 2{,}9$ eV. Z obrázku 1.11 vidíme, že podobné energie zodpovedajú vlnovým dĺžkam v Balmerovej sérii v spektre vodíka.

Ak chceme atómu odtrhnúť jeden elektrón, musíme mu dodať energiu, ktorou je tento elektrón viazaný k jadru. Táto energia - ionizačná energia - závisí od typu atómu. Pre vodík je $13{,}6$ eV, pre niektoré alkalické kovy (lítium, sodík, draslík) len niekoľko elektrónvoltov. Porovnateľné energie sú potrebné na roztrhnutie väzby medzi atómami dvojatómových molekúl. Napríklad disociačná energia molekuly H_2 je 4,72 eV a molekuly O_2 je 5,1 eV [12]. Energie $E \sim 1$ eV sú typické aj pre elektróny pohybujúce sa v kryštalickej mriežke kovov (Fermiho energie).

Porovnajme energiu 1 eV s energiou

$$E_{\mathrm{EZ}} = \frac{1}{2}k_B T \tag{1.102}$$

ktorá predstavuje strednú energiu molekuly plynu, pripadajúcu na jeden stupeň voľnosti pri teplote T. Pre *izbovú teplotu* $T = 300$ K dostaneme hodnotu $E_{\mathrm{EZ}} = 2{,}07 \times 10^{-21}$ J $= 0{,}0129$ eV.

Pretože molekuly sa môžu pohybovať v troch nezávislých smeroch, je typická kinetická energia molekúl pri izbovej teplote

$$E_k = 3E_{\mathrm{EZ}} \sim 0{,}0388\ \mathrm{eV} \qquad T = 300\ \mathrm{K} \tag{1.103}$$

a je teda podstatne menšia ako energia potrebná na ionizáciu atómov. Preto typická kinetická energia molekuly pri izbovej teplote nestačí na to, aby sa atómy alebo molekuly pri vzájomnej zrážke mohli ionizovať.[7] Neskôr v kapitole 10 uvidíme, že energia porovnateľná s energiou E_{EZ} charakterizuje aj rotáciu molekúl okolo osí symetrie. Napríklad molekula H_2 môže rotovať okolo dvoch osí, kolmých na spojnicu dvoch atómov vodíka. Preto má vodíková molekula 5 stupňov voľnosti.[8]

Rozdiely medzi hlbokými elektrónovými hladinami vo veľkých atómoch môžu dosiahnuť až niekoľko keV (1 keV = 10^3 eV). Prechody elektrónov medzi takýmito hladinami sú sprevádzané generáciou RTG žiarenia.

Ešte vyššie energie sú typické pre atómové jadrá. Energie, potrebné na excitáciu jadier sú rádovo MeV (10^6 eV). Preto môžeme vo všetkých procesoch, prebiehajúcich pri izbových teplotách v plynoch a tuhých látkach, považovať jadrá za absolútne stabilné.

1.11.2 Čas

V mikrosvete neexistuje žiadna typická časová škála. Ten istý fyzikálny jav, napríklad α-rozpad jadier, môže mať charakteristický čas miliardy rokov, ale aj zlomkov sekúnd, v závislosti od typu jadra, v ktorom prebieha. Podobne sa o mnoho rádov líšia frekvencie fotónov (tabuľka 1.3).

Typické časy súvisia s tromi rôznymi procesmi:

(1) Čas, ktorý svetlo potrebuje na prekonanie danej vzdialenosti. Napríklad doba, za ktorú svetlo príde zo Slnka na Zem, je asi 500 sekúnd. Čas, potrebný na prekonanie vzdialenosti porovnateľnej s priemerom atómového jadra je 10^{-24} sekundy (rovnica 1.90).

(2) Vlastné frekvencie kvantového systému. Mnohé kvantové systémy sú stabilné. Ako uvidíme neskôr, ich časový vývoj je daný exponenciálnym faktorom

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{1.104}$$

kde E je vlastná energia systému, napríklad vlastné energie elektrónu v atóme vodíka, dané rovnicou (1.66), alebo vlastné energie fotónov, $E = h\nu$. Takýto systém môžeme charakterizovať jeho vlastnou frekvenciou $\omega = E/\hbar$, respektíve časovou periódou $T = 2\pi/\omega = h/E$.

(3) Doba života (polčas rozpadu). Iným typom časového vývoja je rozpad metastabilného stavu. Ak sa kvantový systém nenachádza v stave s najnižšou energiou, bude sa snažiť znížiť svoju energiu. Príkladom je rádioaktívny rozpad jadier, ktorým sme sa zaoberali v častiach 1.10.4 a 1.10.3. Pre rádioaktívny rozpad je typický exponenciálny pokles počtu jadier,

$$N(t) = N(t_0)e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \tag{1.105}$$

[7] Toto tvrdenie nemôže platí absolútne, pretože energia atómov a molekúl v plyne fluktuuje. Preto v jednotlivých zrážkach môže energia odovzdaná atómu niekoľkonásobne presiahnuť energiu E_{EZ}. Pravdepodobnosť takýchto procesov je ale pri izbovej teplote veľmi malá.

[8] Šiesty stupeň voľnosti reprezentuje kmity atómov vodíka v molekule. Tieto kmity ale vyžadujú takú veľkú energiu, že v molekule H_2 pri izbovej teplote nevznikajú.

Tab. 1.6. Typické časy niektorých procesov v mikrosvete.

Polčas rozpadu: α-rozpad	${}^{238}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\mathrm{Th} + \alpha$	$4{,}5 \times 10^9$ rokov
	${}^{228}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{224}_{90}\mathrm{Th} + \alpha$	557 s
	${}^{227}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{223}_{90}\mathrm{Th} + \alpha$	66 s
	${}^{226}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{222}_{90}\mathrm{Th} + \alpha$	0,350 s
Polčas rozpadu: β-rozpad	${}^{234}_{91}\mathrm{Pa} \rightarrow {}^{234}_{92}\mathrm{U} + e + \overline{\nu}$	1,2 minúty
	${}^{14}_{6}\mathrm{C} \rightarrow {}^{14}_{7}\mathrm{N} + e + \overline{\nu}$	5370 rokov
	${}^{131}_{53}\mathrm{I} \rightarrow {}^{131}_{54}\mathrm{Xe} + e + \overline{\nu}$	8 dní
	$n \rightarrow p + e + \overline{\nu}$	611 s
Doba života $\pi^{\pm}$ mezónov		$2{,}6 \times 10^{-8}$ s
Typická doba návratu excitovaného elektrónu do základného stavu		10^{-7} s
Doba preletu svetla zo Slnka na Zem		500 s
Doba preletu svetla na vzdialenosť priemeru jadra		$6{,}6 \times 10^{-24}$ s

s polčasom rozpadu

$$t_{1/2} = \tau \ln 2 \tag{1.106}$$

Ako vidíme z tabuľky 1.6, polčas rozpadu atómových jadier závisí od štruktúry samotného jadra. V závislosti od počtu neutrónov v jadre uránu sa polčas rozpadu príslušného izotopu mení od zlomkov sekundy až po miliardy rokov. Najstabilnejším jadrom je ${}^{209}_{83}\mathrm{Bi}$, ktorého polčas α-rozpadu je $1{,}9 \times 10^{19}$ rokov. Je teda 10^9-krát dlhší ako doba existencie Vesmíru.

K procesom rozpadu patrí aj rozpad voľného neutrónu. Jeho doba života je len 881,5 s, polčas rozpadu 611 s. Naopak, voľný protón je stabilný, jeho minimálna doba života sa odhaduje na 2×10^{29} rokov.

V časti 1.7.2 sme opísali spektrum atómu vodíka. Ukázali sme, že atóm vodíka môžeme excitovať do niektorého z vyšších energetických stavov. Návrat atómu do základného stavu je spojený s vyžiarením fotónu s vlnovou dĺžkou danou rovnicou (1.54). Aj atóm s elektrónom na vyššej energetickej hladine je v metastabilnom stave, jeho návrat do základného stavu trvá istý čas, typicky $\tau \sim 10^{-7}$ s.

S konečnou dobou života metastabilných stavov súvisí rozšírenie spektrálnych čiar. Napríklad spektrálne čiary atómu vodíka nie sú presne „čiarové". Môžeme ich reprezentovať Lorentzovou funkciou

$$P_L(\nu) = \frac{\delta\nu/\pi}{(\nu - \nu_0)^2 + (\delta\nu)^2} \tag{1.107}$$

(pozri pravý obrázok E.1 v dodatku E). Čiara má konečnú šírku $\delta\nu$, ktorá súvisí s dobou života excitovaného stavu vzťahom

$$\delta\nu \sim \frac{1}{\tau} \tag{1.108}$$

Pretože typické frekvencie prechodov medzi rôznymi stavmi v atóme vodíka sú rádovo desiatky až desaťtisíc THz (obrázok 1.11), je rozšírenie čiar veľmi malé,

$$\frac{\delta\nu}{\nu} \ll 1 \tag{1.109}$$

a vnímame ho, akoby pozostávalo z izolovaných spektrálnych čiar.

Rádiouhlíkové datovanie

Rozpad nestabilného izotopu uhlíka ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ umožňuje určiť vek odumretých organických materiálov. V atmosfére je okrem stabilných izotopov uhlíka ${}^{12}_{6}\mathrm{C}$ a ${}^{13}_{6}\mathrm{C}$ prítomné aj malé množstvo nestabilného izotopu ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$, ktorý sa fotosyntézou prenáša to rastlín. Pokiaľ rastlina rastie, je koncentrácia ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ v jej tele rovnaká ako v atmosfére. Po odumretí rastliny sa zastaví prísun uhlíka z atmosféry a koncentrácia ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ bude klesať podľa vzťahu (1.105). Pretože polčas rozpadu uhlíka ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ poznáme (pozri tabuľku 1.6), môžeme z poklesu jeho koncentrácie odhadnúť čas, kedy rastlina odumrela.

Metóda predpokladá, že koncentrácia ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$ v atmosfére nezávisí od času. Úbytok nestabilného izotopu ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$, spôsobený rozpadom (1.95), sa kompenzuje jeho prírastkom v hornej vrstve atmosféry, kde neutróny generované kozmickým žiarením interagujú s dusíkom v reakcii

$$n + {}^{14}_{7}\mathrm{N} \rightarrow {}^{14}_{6}\mathrm{C} + p \tag{1.110}$$

1.11.3 Vzdialenosť

V tabuľke 1.7 uvádzame typické rozmery fyzikálnych objektov v mikrosvete. Najmenším objektom mikrosveta je atómové jadro, ktoré je asi 100 000-krát menšie, ako atóm. Polomer závisí od počtu nukleónov,

$$R \sim R_0 A^{1/3}, \quad R_0 \sim 1{,}3 \times 10^{-15}\ \mathrm{m} \tag{1.111}$$

Hodnota R_0 je porovnateľná s dosahom Yukawovho potenciálu r_0 (pozri rovnicu 1.87). Pre najväčšie jadrá ako urán ${}^{238}\mathrm{U}$ dostaneme $R \approx 8 \times 10^{-15}$ m.

Vlnová dĺžka fotónov, ktoré vzniknú anihiláciu elektrónu a pozitrónu je (pozri príklad 1.20)

$$\lambda = \frac{h}{m_e c} \sim 2{,}427 \times 10^{-12}\ \mathrm{m} \tag{1.112}$$

Tab. 1.7. Typické rozmery objektov v mikrosvete.

$r_0 = \dfrac{\hbar}{m_\pi c}$	1.4×10^{-15} m
Jadro atómu	$\sim 10^{-15} - 10^{-14}$ m
Polomer atómu vodíka	$a_0 = 0{,}53 \times 10^{-10}$ m
Molekula H_2	$0{,}74 \times 10^{-10}$ m
Mriežková konštanta kryštálov	$2 - 3 \times 10^{-10}$ m
Priemer molekuly fulerénu C_{60}	1,1 nm
Vzdialenosť molekúl plynu pri izbovej teplote	3,3 nm
Kvantová bodka	$1 - 10$ nm
Hrúbka bunečnej membrány	$5 - 7$ nm
Priemer kovovej nanočastíc	$3 - 200$ nm
Mezoskopické štruktúry	$1 - 100$ nm
Vírus	100 nm
Vlnová dĺžka viditeľného svetla	$400 - 700$ nm
Bielkovina	$400 - 500$ nm
Bakteriálna bunka	$1 - 10$ μm = 10^{-6} m

Rozmer atómu charakterizujeme Bohrovým polomerom, $a_0 = 0{,}53 \times 10^{-10}$ m. Väčšími objektmi sú molekuly. Typická vzdialenosť atómov v dvojatómových molekulách je od 0,74 (molekula H_2) po 2,8 (KCl) Angstrőmu (10^{-10} m) (pozri aj tabuľku 10.1). Rozmer väčších molekúl môžeme odhadnúť, ak predpokladáme, že vzdialenosť medzi susednými atómami je približne $2 - 6$ - násobok Bohrovho polomeru a_0. Túto vzdialenosť môžeme brať ako typickú vzdialenosť medzi atómami v kryštalickej mriežke tuhých látok (pozri aj príklad 1.15 a tabuľku 3.1).

Najmenšími objektmi v nanofyzike sú pravdepodobne molekuly fulerénu C_{60}, v ktorej sú atómy uhlíka usporiadané na povrchu gule a vytvárajú pravidelné šesť a päťuholníky. Typická vzdialenosť medzi atómami uhlíka je 0,14 nm, priemer celej molekuly je asi 1,1 nm. O niečo väčšie sú kovové nanočastice zlata alebo striebra, ktorých polomer rastie od $r \sim 2$ nm až po stovky nanometrov. Pre mikroskopické a mezoskopické štruktúry v mikroelektronike sú typické rozmery od jedného po stovky nanometrov.

Laboratórne možno pripraviť tenké vrstvy „hrúbky" niekoľkých nanometrov, teda porovnateľných alebo menších, ako je hrúbka bunečnej membrány (5 – 7 nm). Molekuly bielkovín vytvárajú jednorozmerné reťazce dĺžky až 400 – 500 nm, priemer trojrozmerných guľových proteínov je asi 10 nm. Bunky majú rozmer okolo 1 μm (10^{-6} m), najmenšie mnohobunečné organizmy majú asi 40 μm.

1.11.4 Rýchlosť

Vzhľadom na malú hmotnosť elementárnych častíc sa častice môžu pohybovať veľmi veľkými rýchlosťami. Ako bolo ukázané v časti 1.11.1, energiou 1 eV urýchlime elektrón na rýchlosť až 593 km/s. V urýchľovačoch sa rýchlosť urýchlených častíc približuje rýchlosti svetla. Ak sú rýchlosti častíc porovnateľné s rýchlosťou svetla, musíme pri popise fyzikálnych dejov uvážiť aj relativistické efekty. Hmotnosť častíc rastie s rýchlosťou podľa vzťahu

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tag{1.113}$$

kde m_0 je pokojová hmotnosť častice. Celkovú energiu častice

$$E = mc^2 \tag{1.114}$$

(rovnica 1.6) môžeme vyjadriť aj v tvare

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \tag{1.115}$$

kde p je hybnosť častice. Z rovníc (1.113) a (1.115) vyjadríme hybnosť v tvare

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tag{1.116}$$

Kinetická energia častice je potom

$$E_{\mathrm{kin}} = E - m_0 c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} - m_0 c^2 \tag{1.117}$$

Pri dostatočne malých rýchlostiach, pre ktoré platí nerovnosť

$$v^2 \ll c^2 \tag{1.118}$$

dostaneme z rovnice (1.117) „klasický" vzťah pre kinetickú energiu

$$E_{\mathrm{kin}} = \frac{p^2}{2m_0} \approx \frac{p^2}{2m} \tag{1.119}$$

(pozri príklad 1.24), a relativistické efekty môžeme zanedbať.

Pomerne veľké rýchlosti (vzhľadom na rýchlosť svetla) dosahujú aj elektróny v bežných podmienkach. V príklade 1.11 nájdeme, že v Bohrovom modeli atómu je rýchlosť elektrónu na najnižšej energetickej hladine $v = \alpha c \approx c/137$. Voľné elektróny v kove sa pohybujú rýchlosťami približne $c/200$, teda niekoľko tisíc kilometrov za sekundu (pozri príklad 3.21). Stredná hodnota rýchlosti sa, samozrejme, rovná nule, pretože elektróny sa pohybujú všetkými možnými smermi. Ak kov vedie jednosmerný elektrický prúd, pohybujú sa elektróny strednou rýchlosťou rádovo zlomky centimetrov za sekundu.

Typická rýchlosť molekúl vo vzduchu pri izbovej teplote je približne 1000 m/s (pozri príklady 1.12 a 1.13). Je teda porovnateľná s rýchlosťou zvuku vo vzduchu (300 m/s).

Rýchlosť svetla v hmotnom prostredí je menšia, ako rýchlosť vo vákuu. Výraznú redukciu rýchlosti šírenia elektromagnetických vĺn – až na rýchlosti $\sim$ 10 km/s $\approx 10^{-4}c$ – môžeme dosiahnuť v priestorovo periodických štruktúrach (fotonických kryštáloch).

Niektoré typické rýchlosti sú uvedené v tabuľke 1.8.

Tab. 1.8. Niektoré typické rýchlosti. Uvedená rýchlosť svetla je presná hodnota, z ktorej je v sústave SI odvodená dĺžková miera 1 meter.

Svetlo vo vákuu	$c = 299\,792\,457$ m/s
α-častice uvoľnené z jadra	$1{,}4 \times 10^7$ m/s $\sim c/20$
Elektróny v kove	1 400 km/s $\approx c/200$
Zem okolo Slnka	30 km/s $= 10^{-4}\ c$
Molekuly plynu	1000 m/s
Zvuk v kove	2000 m/s
Zvuk v plyne	300 m/s

1.12 Príklady

1.1. Porovnajte gravitačnú a Coulombovu silu pôsobiacu medzi protónom a elektrónom v atóme vodíka.
Riešenie: Gravitačná sila je

$$F_G = \kappa \frac{m_e m_p}{a_0^2} = 3{,}61 \times 10^{-47}\ \mathrm{N} \tag{1.120}$$

kde $a_0 = 0{,}53 \times 10^{-10}$ m je Bohrov polomer (pozri tabuľku 1.2) a m_e, m_p sú hmotnosti elektrónu a protónu (tabuľka 1.4). Coulombova sila medzi protónom a elektrónom je (v absolútnej hodnote)

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0^2} = 8{,}2 \times 10^{-8}\ \mathrm{N} \tag{1.121}$$

Je teda

$$\frac{F_G}{F} = 4{,}4 \times 10^{-40} \tag{1.122}$$

Gravitačná sila je teda v porovnaní s Coulombovou silou taká slabá, že ju môžeme zanedbať.

1.2. Odvoďte strednú energiu $\langle E_\nu \rangle$ danú rovnicou (1.22).
Riešenie: Vyjdeme z rovnice (1.21). Pomocou substitúcie

$$x = \frac{E_0}{k_B T} \tag{1.123}$$

vyjadríme strednú energiu v tvare

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{\sum_{n=0} n E_0(\nu) \exp -\frac{nE_0}{k_B T}}{\sum_{n=0} \exp -\frac{nE_0(\nu)}{k_B T}} = E_0(\nu) \frac{\sum_{n=0} n e^{-nx}}{\sum_{n=0} e^{-nx}} \tag{1.124}$$

V menovateli máme súčet nekonečného geometrického radu, ktorý sa rovná

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}}, \tag{1.125}$$

Nekonečný rad v čitateli je deriváciou geometrického radu v menovateli:

$$\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-nx} = \frac{\partial}{\partial x}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{1-e^{-x}} = \frac{e^{-x}}{(1-e^{-x})^2} \tag{1.126}$$

Takže z rovnice (1.124) dostaneme

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{E_0(\nu)}{e^{\frac{E_0(\nu)}{k_B T}} - 1} \tag{1.127}$$

1.3. Ukážte, že stredná hodnota energie (1.24) jedného módu elektromagnetického žiarenia má v limite $h\nu \ll k_B T$ hodnotu

$$\langle E_\nu \rangle = k_B T \tag{1.128}$$

v súlade s ekvipartičným zákonom. Rayleighov-Jeansov zákon je teda správny len pre frekvencie žiarenia, pre ktoré je energia fotónu, $h\nu$, oveľa menšia ako energia $k_B T$.
Riešenie: Stredná energia jedného módu je daná rovnicou (1.24).

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \tag{1.129}$$

V limite $x = h\nu/k_B T \ll 1$ rozvinieme exponenciálnu funkciu v menovateli

$$e^x - 1 = \left[1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots\right] - 1 \approx x \tag{1.130}$$

a po dosadení do rovnice (1.129) dostaneme pre strednú energiu vyjadrenie (1.128).

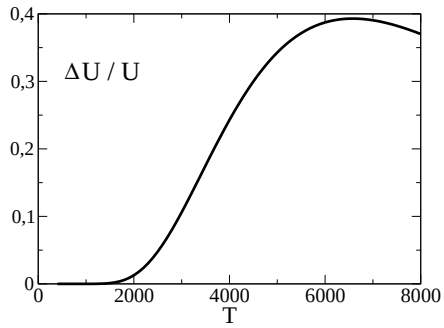
1.4. Stredná teplota povrchu Zeme je $T = 280$ K. Pre akú vlnovú dĺžku má frekvenčné spektrum Zeme maximum? Porovnajte túto hodnotu s vlnovou dĺžkou, na akej má maximum žiarenie Slnka.
Riešenie: Z Wienovho posunovacieho zákona dostaneme pre Zem $\lambda^Z_{\max} = 10{,}35$ μm a pre Slnko $\lambda^S_{\max} = 483$ nm. Maximum vyžiarenej energie Slnka preto pripadá na viditeľné (žlté) svetlo, Zem vyžaruje prevažne v infračervenej oblasti.

1.5. Aká časť vyžiarenej energie pripadá na viditeľné svetlo, ak čierne teleso má teplotu T?
Riešenie: Viditeľné svetlo má frekvenčný rozsah medzi $\nu_1 = 400$ THz a $\nu_2 = 700$ THz. Z rovnice (1.28) dostaneme

$$\frac{\Delta U}{U} = \frac{15}{\pi^4}\int_{a_1/T}^{a_2/T} \frac{x^3 \mathrm{d}x}{e^x - 1} \tag{1.131}$$

kde $a_1 = h\nu_1/k_B = 19200$ K a $a_2 = h\nu_2/k_B = 13600$ K. Integrál vieme nájsť len numericky (obrázok 1.14). Napríklad pre Slnko je $T = 6000$ K, preto

$$\frac{\Delta U}{U} = \frac{15}{\pi^4}\int_{2{,}27}^{3{,}2} \frac{x^3 \mathrm{d}x}{e^x - 1} \approx 0{,}40 \tag{1.132}$$



Obr. 1.14. Podiel energie vyžiarenej absolútne čiernym telesom do oblasti viditeľného svetla (príklad 1.5). Všimnite si, že podiel má maximálnu hodnotu pre teplotu $T \approx 6000$ K, ktorá zodpovedá teplote povrchu Slnka. Pre žiarovku, ktorej wolframové vlákno má teplotu približne 2000 K, je $\Delta U/U \approx 0{,}02$. Energetická účinnosť žiarovky je preto len 2 %-ná.

1.6. Na čokoládu dopadá slnečné žiarenie s výkonom $P = 600$ W/m^2. Na akú teplotu sa čokoláda zohreje? Čokoládu považujeme za absolútne čierne teleso.
Riešenie: V rovnováhe čokoláda vyžiari všetku energiu, ktorú absorbuje. Zo Stefanovho-Boltzmannovho zákona dostaneme $P = \sigma T^4$, takže

$$T = \left(\frac{P}{\sigma}\right)^{1/4} = 320{,}7 \text{ K} \tag{1.133}$$

1.7. V mikrovlnnej piecke sa používa elektromagnetické žiarenie s frekvenciou $\nu = 2{,}45$ GHz $= 2{,}45 \times 10^9$ Hz. Akú energiu má jeden fotón? Koľko fotónov musí pohltiť jeden liter vody, aby sa zohrial o $\Delta T = 1$ K? (Tepelná kapacita vody je $C = 4186$ J/kg K.)
Riešenie: Energia fotónu je $E = h\nu = 1{,}62 \times 10^{-24}$ J $= 1{,}01 \times 10^{-5}$ eV. Na zohriatie 1 litra vody o 1 K potrebujeme 4186 J, teda vo vode sa musí absorbovať $N = 2{,}58 \times 10^{27}$ fotónov.

1.8. R. 1965 A. A. Penzias a R. Wilson objavili reliktné žiarenie, ktoré zodpovedá žiareniu absolútne čierneho telesa s teplotou $T = 2{,}7$ K. Aká vlnová dĺžka zodpovedá reliktnému žiareniu? [$\lambda = hc/k_BT = 5{,}3 \times 10^{-3}$ m]

1.9. Polomer atómového jadra s hmotnostným číslom A môžeme odhadnúť zo vzťahu

$$R \sim 1{,}3 \times 10^{-15}\, A^{1/3} \text{ m} \tag{1.134}$$

Nájdite typickú hustotu atómového jadra.
Riešenie: Hmotnosť jadra s A nukleónmi je $M_\mathrm{J} \approx Am_p$, objem jadra je $V_\mathrm{J} = \frac{4}{3}\pi R^3$, takže hustota jadra je

$$\rho = \frac{M_\mathrm{J}}{V_\mathrm{J}} \approx 1{,}82 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3 \tag{1.135}$$

Ako sa dalo predpokladať, hustota jadra nezávisí od atómového čísla A. Je zaujímavé porovnať hustotou jadra s hustotou bežných materiálov. Napríklad hustota vody je 10^3 kg/m^3, teda rádovo 10^{-14}-krát menšia.

1.10. Nájdite vlnové dĺžky Lymanovej ($n = 1$), Balmerovej ($n = 2$), Paschenovej ($n = 3$) Brackettovej ($n = 4$) a Pfundovej ($n = 5$) série. Ktoré z nich patria do viditeľného svetla? [Pozri obrázok 1.11].

1.11. Odhadnite rýchlosť, akou by sa elektrón pohyboval po dráhe s Bohrovým polomerom a_0 okolo jadra vodíka.
Riešenie: Z rovnováhy príťažlivej elektrostatickej sily a odstredivej sily,

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{a_0^2} = \frac{mv^2}{a_0} \tag{1.136}$$

dostaneme pod dosadení za Bohrov polomer a_0 z rovnice (1.65) rýchlosť elektrónu

$$v = \alpha c \tag{1.137}$$

kde $\alpha \approx 1/137$ je konštanta jemnej štruktúry (pozri tabuľku 1.1).

1.12. Nájdite typickú rýchlosť molekúl vodíka H_2 pri izbovej teplote.
Riešenie: Stredná hodnota kinetickej energie molekuly sa rovná

$$\frac{1}{2}M\langle v^2\rangle = \frac{3}{2}k_BT \tag{1.138}$$

(M je hmotnosť molekuly), takže typická rýchlosť molekuly je

$$v_t = \sqrt{\langle v^2\rangle} = \sqrt{\frac{3k_BT}{M}} \tag{1.139}$$

Po dosadení $M = 2m_p$ dostaneme

$$v_t = 2726 \text{ m/s} \tag{1.140}$$

1.13. Nájdite typickú rýchlosť molekúl kyslíka O_2 pri izbovej teplote.
Riešenie: Využijeme výsledok predchádzajúceho príkladu 1.12. Molekula kyslíka sa od molekuly vodíka líši svojou hmotnosťou. Pretože jadro kyslíka obsahuje 8 protónov a 8 neutrónov, je

$$M_{\mathrm{O}_2} = 16 \times M_{\mathrm{H}_2} \tag{1.141}$$

preto

$$v_t(\mathrm{O}_2) = \frac{1}{4}v_t(\mathrm{H}_2) = 681 \text{ m/s} \tag{1.142}$$

1.14. Odhadnite typickú vzdialenosť ℓ molekúl plynu pri izbovej teplote.
Riešenie: Vyjdeme z definície jedného mólu plynu, ktorý obsahuje N_A molekúl a pri teplote 273,15 K a normálnom tlaku zaberá objem $V = 22{,}4$ litra. Typická vzdialenosť ℓ medzi dvoma molekulami je preto daná vzťahom

$$N_A\ell^3 = V \tag{1.143}$$

a teda $\ell \sim 3{,}3$ nm.

1.15. Odhadnite mriežkovú konštantu železa, ak poznáte priemernú hmotnosť jadra železa $M_{\mathrm{Fe}} = 55{,}85\ u$ (priklad 1.28) a hustotu železa $\rho = 7{,}3 \times 10^3$ kg/m^3.
Riešenie: Hmotnosť atómu železa je daná hmotnosťou jeho jadra (hmotnosť elektrónov môžeme zanedbať), teda $M = 55{,}85\ u = 9{,}27 \times 10^{-26}$ kg. ($u = 1{,}6606 \times 10^{-27}$ kg, pozri tabuľku 1.4). V objeme $V = 1$ m^3 sa preto nachádza

$$N = \frac{7{,}3 \times 10^3}{9{,}27 \times 10^{-26}} = 7{,}87 \times 10^{28} \tag{1.144}$$

atómov železa. Ak je vzdialenosť medzi nimi a, potom musí platiť

$$Na^3 = 1\ \mathrm{m}^3 \tag{1.145}$$

a teda

$$a = 0{,}23 \times 10^{-9}\ \mathrm{m} \tag{1.146}$$

je teda len 14-krát menšia, ako priemerná vzdialenosť molekúl vzduchu, nájdená v príklade 1.14.

1.16. Disociačná energia, potrebná na roztrhnutie molekuly vodíka, je $E_d = 4{,}72$ eV. Pri akej teplote môžeme očakávať, že sa molekuly následkom vzájomných zrážok rozpadnú?
Riešenie: Pri teplote T nesie každá molekula energiu

$$E = \frac{5}{2} k_B T \tag{1.147}$$

na disociáciu jednej molekuly je preto k dispozícii energia $2E$. Z rovnosti $2E = E_d$ dostaneme

$$T = \frac{1}{5} \frac{E_d}{k_B} = 1{,}1 \times 10^4\ \mathrm{K} \tag{1.148}$$

1.17. Chemickou reakciou

$$\mathrm{C} + \mathrm{O}_2 \rightarrow \mathrm{CO}_2 \tag{1.149}$$

sa uvoľní energia $\Delta E = 2$ eV. Odhadnite, koľko energie získame spálením jednej tony uhlia [2].
Riešenie: Hmotnosť jedného atómu uhlíka je $M = 12\ u = 19{,}92 \times 10^{-27}$ kg. Ak predpokladáme, že uhlie je zložené len z uhlíka, potom v jednej tone uhlia máme $N = 5 \times 10^{25}$ atómov. Uvoľnená energia je preto

$$U = N\Delta E \approx 10^{29}\ \mathrm{eV} = 16\ \mathrm{MJ} \tag{1.150}$$

1.18. Skupenské teplo premeny vody na paru je $C = 2257$ kJ/kg. Aká energia pripadá na jednu molekulu vody?
Riešenie: Hmotnosť jednej molekuly vody je približne $M \approx 18 m_p = 3{,}00 \times 10^{-26}$ kg. V jednom kilograme vody sa preto nachádza $N = 3{,}3 \times 10^{25}$ molekúl vody. Na každú molekulu teda pripadne energia $E_1 = 0{,}68 \times 10^{-19}$ J $\approx 0{,}43$ eV.

1.19. Merné teplo vody je $C = 4186$ J/kg. Odhadnite energiu, potrebnú na zohriatie jedného litra vody z 20 na 100 stupňov Celsia.
Riešenie: Energia je

$$E = C\Delta T = 3{,}3 \times 10^5 \text{ J} \tag{1.151}$$

Všimnite si, že táto energia je väčšia, ako práca W potrebná na naloženie $M = 20\ 000$ kg piesku na korbu nákladného auta (teda do výšky približne 1,5 metra):

$$W = Mgh = 2 \times 10^4 \times 9{,}806 \times 1{,}5 = 2{,}9 \times 10^5 \text{ J} \tag{1.152}$$

1.20. Anihiláciou elektrónu a pozitrónu vzniknú dva fotóny. Nájdite ich frekvenciu a vlnovú dĺžku.
Riešenie: Zo zákona zachovania energie vyplýva, že dva fotóny musia mať energiu rovnajúcu sa energii pôvodných častíc. Ak zanedbáme kinetickú energiu elektrónu a pozitrónu pred zrážkou, dostaneme z porovnania energií, $2h\nu = 2m_ec^2$,

$$\nu = \frac{m_ec^2}{h} = 1{,}236 \times 10^{20} \text{ Hz} \tag{1.153}$$

Fotóny majú vlnovú dĺžku

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h}{m_ec} = 2{,}427 \times 10^{-12} \text{ m} \tag{1.154}$$

1.21. Vypočítajte pokojovú energiu protónu a neutrónu.
Riešenie: Kľudová energia častice je daná jej pokojovou hmotnosťou,

$$E = m_0c^2 \tag{1.155}$$

Po dosadení hmotnosti protónu m_p a neutrónu m_n z tabuľky 1.4 dostaneme pre protón

$$E_p = m_pc^2 = 938{,}34 \text{ MeV} \tag{1.156}$$

a pokojovú hmotnosť neutrónu

$$E_n = m_nc^2 = 939{,}64 \text{ MeV} \tag{1.157}$$

Rozdiel týchto energií

$$\Delta\, E = E_n - E_p = 1{,}26 \text{ MeV} \tag{1.158}$$

je väčší, ako je pokojová energia elektrónu, $E_e = m_ec^2 = 0{,}51$ MeV.

1.22. Pokojová energia jadra hélia $^4_2$He je

$$E_{\text{He}} = 3727{,}7 \text{ MeV} \tag{1.159}$$

Využite výsledky príkladu 1.21 a nájdite väzobnú energiu jadra hélia. [28,32 MeV].

1.23. Nájdite väzbovú energiu jadra uhlíka ${}^{12}_{6}\mathrm{C}$.
Riešenie: Pokojová hmotnosť jadra uhlíka je z definície rovná $M_\mathrm{C} = 12u$, zatiaľ čo hmotnosti šiestich protónov a neutrónov v jadre sú (pozri tabuľku 1.4)

$$6m_p + 6m_n = (6 \times 1{,}007265 + 6 \times 1{,}008665)\ u = 12{,}09558\ u \tag{1.160}$$

Väzbová energia je teda

$$E_\mathrm{C} = 0{,}09558\ uc^2 = 1{,}4285 \times 10^{-11}\ \mathrm{J} = 87{,}5\ \mathrm{MeV} \tag{1.161}$$

1.24. Nájdite podmienku, kedy môžeme kinetickú energiu častice vyjadriť „klasickým" vzťahom

$$E_\mathrm{kin} = \frac{p^2}{2m} \tag{1.162}$$

Riešenie: Energia častice je

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} \tag{1.163}$$

(rovnica 1.115). Ak platí nerovnosť

$$m_0c^2 \gg pc \tag{1.164}$$

potom môžeme energiu (1.163) rozvinúť do Taylorovho radu

$$E = m_0c^2\sqrt{1 + \frac{p^2c^2}{m_0^2c^4}} \approx m_0c^2\left[1 + \frac{1}{2}\frac{p^2c^2}{m_0^2c^4}\right] = m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} \tag{1.165}$$

Podmienka (1.164) nemôže byť nikdy splnená pre fotóny, pretože tie majú pokojovú hmotnosť $m_0 = 0$. Rovnica (1.163) preto pre fotóny dá lineárny vzťah medzi energiou a hybnosťou,

$$E = pc \tag{1.166}$$

ktorý je ekvivalentný s rovnicou (1.46).

1.25. Častice α majú kinetickú energiu $E_\mathrm{kin} = 4{,}2$ MeV. Akou rýchlosťou sa pohybujú? Môžeme pri tejto rýchlosti zanedbať relativistické efekty?
Riešenie: Podľa príkladu 1.22 je pokojová energia α-častice $m_\alpha c^2 = m_\mathrm{He}c^2 = 3727$ MeV, čo je podstatne viac, ako jej kinetická energia $E_\mathrm{kin} = 4{,}2$ MeV. Preto môžeme rýchlosť nájsť z nerelativistického vzťahu

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m_\alpha}} \tag{1.167}$$

a dostaneme

$$v = 1{,}37 \times 10^7\ \mathrm{m/s} \approx \frac{c}{22} \tag{1.168}$$

Presvedčíme sa, že pri tejto rýchlosti naozaj môžeme relativistické efekty zanedbať, pretože

$$\left[1 - \frac{v^2}{c^2}\right]^{-1/2} \approx 1 + \frac{v^2}{2c^2} \approx 1{,}001 \tag{1.169}$$

Zanedbaním relativistických efektov sa teda dopúšťame relatívnej chyby jedno promile.

1.26. Voľný neutrón sa β-rozpadom rozpadá na protón, elektrón a antineutríno. Nájdite maximálnu kinetickú energiu odchádzajúceho elektrónu a jeho maximálnu rýchlosť.
Riešenie: V príklade 1.21 sme našli rozdiel medzi pokojovými energiami neutrónu a protónu (rovnica 1.158). Maximálna energia elektrónu je teda

$$E_{\max} = [m_n - m_p]c^2 = 1{,}26 \text{ MeV} \tag{1.170}$$

Táto energia sa v procese β-rozpadu spotrebuje na pokojovú energiu elektrónu $m_e c^2$ a kinetickú energiu elektrónu a antineutrína. Preto je maximálna hodnota kinetickej energie elektrónu

$$E_{\text{kin}} = E - m_e c^2 = [1{,}26 - 0{,}51] \text{ MeV} = 0{,}75 \text{ MeV} \tag{1.171}$$

Rýchlosť elektrónu dostaneme z vyjadrenia celkovej energie,

$$E_{\max} = mc^2 = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v_{\max}^2}{c^2}}} \tag{1.172}$$

z ktorého dostaneme

$$\frac{v_{\max}^2}{c^2} = 1 - \frac{m_e^2 c^4}{E_{\max}^2} = 0{,}836 \tag{1.173}$$

a teda $v_{\max} \approx 0{,}914c$.

1.27. Akú vlnovú dĺžku má elektrón z predchádzajúceho príkladu 1.26?
Riešenie: Vlnová dĺžka je $\lambda = h/p$. Hybnosť elektrónu nájdeme zo vzťahu

$$p = mv_{\max} = \frac{m_0 v_{\max}}{\sqrt{1 - \frac{v_{\max}^2}{c^2}}} = \frac{E_{\max} v_{\max}}{c^2} = 0{,}914 \frac{E_{\max}}{c} \tag{1.174}$$

Po dosadení

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{0{,}914 E_{\max}} = 1{,}08 \times 10^{-12} \text{ m} \tag{1.175}$$

1.28. V tabuľke 1.9 sú uvedené atómové hmotnosti štyroch izotopov železa a ich percentuálne zastúpenie v prírode. Nájdite priemernú hodnotu atómovej hmotnosti. [55,85 u]

Tab. 1.9. Zastúpenie izotopov železa $^{A}_{26}$Fe v prírode. M je hmotnosť daného izotopu v jednotkách u. Tabuľka zároveň demonštruje typickú formu, v akej sú udávané experimentálne výsledky. Čísla v zátvorke udávajú nepresnosť posledných čísel.

A	M $[u]$	Zastúpenie v prírode
54	53,9396105(7)	0,05845(35)
56	55,9349375(7)	0,91754(36)
57	56,9353940(7)	0,02119(10)
58	57,9332756(8)	0,00282(4)

1.29. Najstabilnejším atómovým jadrom je $^{209}_{83}$Bi s polčasom rozpadu $t_{1/2} = 1{,}9 \times 10^{19}$ rokov. Predpokladajme, že máme k dispozícii 1 kg tohto izotopu bizmutu. Koľko atómov z tohto množstva sa rozpadne za jeden rok?
Riešenie: Počet atómov klesne za jeden rok na hodnotu

$$N(t) = N(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau} \tag{1.176}$$

kde $t - t_0 = 3{,}17 \times 10^7$ s je jeden rok, a $\tau = t_{1/2}/\ln 2 = 8{,}69 \times 10^{19}$ s. Počet atómov, ktoré sa rozpadnú, je preto

$$\Delta N = N(t_0) - N(t) = N(t_0)\left[1 - e^{(t-t_0)/\tau}\right] \approx N(t_0)\frac{t - t_0}{\tau} \tag{1.177}$$

Pôvodný počet atómov odhadneme zo známej hmotnosti atómu bizmutu:

$$N(t_0) \approx \frac{M}{209 m_p} \approx 2{,}86 \times 10^{24} \tag{1.178}$$

Po dosadení do rovnice (1.177) dostaneme

$$\Delta N \approx 1{,}45 \times 10^5 \tag{1.179}$$

1.30. Koncentrácia izotopu uhlíka $^{14}_{6}$C v kuse dreva, nájdeného vedľa ohniska pravekého lovca bola 6-krát nižšia, ako v atmosfére. Aké staré je drevo? Polčas rozpadu $t_{1/2}$ uhlíka $^{14}_{6}$C nájdete v tabuľke 1.6. [$t = t_{1/2}\frac{\ln 6}{\ln 2} \approx 14\,000$ rokov]

KAPITOLA 2

Formalizmus kvantovej mechaniky

Na to, aby sme kvantitatívne opísali správanie kvantových systémov, potrebujeme vypracovať vhodný pojmový aparát. V tejto kapitole najprv zadefinujeme vlnovú funkciu kvantovej častice a vysvetlíme jej fyzikálny význam. Ukážeme principiálny rozdiel medzi kvantovou a klasickou fyzikou: v kvantovej fyzike namiesto pravdepodobnosti jednotlivých procesov musíme počítať amplitúdy pravdepodobnosti, ktoré budeme definovať v časti 2.2. V druhej časti tejto kapitoly priradíme fyzikálnym veličinám operátory a ukážeme, ako budeme počítať stredné hodnoty fyzikálnych veličín. Z vlastností operátorov vyplynie, že na rozdiel od klasickej mechaniky, v kvantovej fyzike nemožno získať presné hodnoty všetkých fyzikálnych veličín, o ktoré sa zaujímame. Nemôžeme napríklad súčasne merať presné hodnoty polohy a hybnosti častice. Toto obmedzenie je známe ako Heisenbergov princíp neurčitosti. V časti 2.4 zadefinujeme Schrödingerovu rovnicu, ktorá opisuje časový vývoj vlnovej funkcie a nahrádza pohybovú rovnicu z klasickej fyziky. So Schrödingerovou rovnicou súvisí aj hustota prúdu pravdepodobnosti. Túto veličinu budeme potrebovať pri výpočte pravdepodobnosti prechodu kvantovej častice cez potenciálové bariéry. Budeme sa zaoberať aj najjednoduchším vlnovým balíkom a jeho základnými vlastnosťami.

Vzhľadom na rozdiely medzi formalizmom kvantovej a klasickej fyziky, je dôležité nájsť medzi nimi súvis. V poslednej časti tejto kapitoly sformulujeme princíp korešpondencie. Podrobnejšie sa vzťahom medzi oboma fyzikálnymi teóriami budeme zaoberať v poslednej, 11. kapitole.

2.1 Vlnová funkcia

Experimentálne pozorovaná difrakcia elektrónov a úspech Bohrovho modelu atómu ukazujú, že elektrónu môžeme priradiť vlnovú dĺžku

$$\lambda_e = \frac{h}{m_e v} \tag{2.1}$$

Predpokladáme teda, že elektrón má vlnové vlastnosti. Našou úlohou je porozumieť, nakoľko je táto interpretácia fyzikálne opodstatnená a pokúsiť sa dať ju do súvisu s klasickou predstavou elektrónu ako častice.

Je treba povedať, že interpretácia vlnového charakteru elektrónu (a iných častíc) je ťažká. V priebehu 20. storočia vznikali viaceré jeho interpretácie, a ani dnes nie sú názory fyzikov jednotné. V tomto texte sa obmedzíme na tzv. kodanskú interpretáciu, založenú na myšlienkach M. Borna, N. Bohra a W. Heisenberga. Viaceré iné interpretácie kvantovej mechaniky sú uvedené v učebnici [1].

Podľa kodanskej interpretácie nemožno pohyb kvantových častíc opisovať Newtonovou klasickou mechanikou. Namiesto klasických parametrov – dráha, rýchlosť – je celá informácia o časovom vývoji častice obsiahnutá v jej vlnovej funkcii $\Psi(\vec{r},t)$.

Vlnová funkcia je spojitou funkciou polohy a času. Vo všeobecnosti sú jej hodnoty komplexné čísla.[1] Preto nie je sama osebe v experimente merateľná. Potrebujeme ju ale na výpočet experimentálne merateľných veličín. Napríklad pravdepodobnosť, s akou sa kvantová častica v čase t nachádza v malom objeme $\mathrm{d}V$ okolo bodu $\vec{r}$, je úmerná druhej mocnine absolútnej hodnoty vlnovej funkcie

$$P(\vec{r},t)\mathrm{d}V = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}V = |\Psi(\vec{r},t)|^2\mathrm{d}V \tag{2.2}$$

Veličina $P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$ sa nazýva hustota pravdepodobnosti. Jej jednotkou v trojrozmernom priestore je m^{-3}. Preto vlnová funkcia $\Psi(\vec{r},t)$ nie je bezrozmernou veličinou, ale má jednotku $\mathrm{m}^{-3/2}$ v trojrozmernom priestore a $\mathrm{m}^{-1/2}$ v jednorozmernom priestore.

Na rozdiel od pohybu klasickej častice, ktorý môžeme kompletne opísať funkciou $\vec{r}(t)$ udávajúcou polohu častice v čase, o pohybe kvantovej častice nemôžeme povedať nič určitejšie, len to, s akou pravdepodobnosťou sa v danej oblasti priestoru nachádza.

Priradiť častici vlnovú funkciu ale neznamená, že častica je v priestore spojite rozložená (tak ako elektromagnetické pole, opísané spojite sa meniacou intenzitou elektrického a magnetického poľa). Vlnová funkcia nám len umožňuje nájsť pravdepodobnosť výskytu častice v danom čase a v danom bode priestoru.

Ak kvantovú časticu opisujeme vlnovou funkciou $\Psi(\vec{r},t)$, hovoríme, že častica sa nachádza v stave Ψ.

2.1.1 Vlnová funkcia pre voľnú časticu

Ako príklad vlnovej funkcie uvedieme vlnovú funkciu pre voľnú časticu. Zo vzťahu (2.1) vyjadrime hybnosť častice

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \tag{2.3}$$

kde $k = 2\pi/\lambda$ je absolútna hodnota vlnového vektora. Máme preto

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \tag{2.4}$$

[1] Aby nevznikli nedorozumenia v používaných symboloch, uvedieme, že každé komplexné číslo c môžeme vyjadriť ako $c = a + ib$, kde a a b sú reálna a imaginárna časť komplexného čísla, a i je imaginárna jednotka: $i^2 = -1$. Komplexne združené číslo je $c^* = a - ib$. Alternatívny zápis komplexného čísla je $c = |c|e^{i\phi}$, kde $|c| = \sqrt{a^2 + b^2}$ je absolútna hodnota komplexného čísla a ϕ je jeho fáza ($\mathrm{tg}\,\phi = a/b$). Pre absolútnu hodnotu komplexného čísla platí aj vzťah $|c| = \sqrt{c^*c} = \sqrt{(a - ib)(a + ib)}$.

V analógii s rovinnou elektromagnetickou vlnou zvoľme vlnovú funkciu voľne sa pohybujúcej kvantovej častice v tvare

$$\Psi(\vec{r},t) = Ce^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = Ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} \tag{2.5}$$

kde C je normovacia konštanta, E je energia častice,

$$E = \frac{p^2}{2m} \tag{2.6}$$

a $\omega = E/\hbar$. Všimnime si, že hustota pravdepodobnosti nájsť časticu v niektorom mieste

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = |C|^2 \tag{2.7}$$

nezávisí od polohy. Voľná častica je teda homogénne rozpriestranená v celom priestore – je „všade". Neskôr uvidíme, že táto neurčitosť jej polohy je cenou za to, že presne poznáme jej hybnosť $\vec{p}$.

2.1.2 Schrödingerova rovnica

Opis kvantových systémov vyžaduje znalosť vlnovej funkcie. Potrebujeme preto predpis, ako vlnovú funkciu nájsť. Tento predpis nám dáva Schrödingerova rovnica. Napríklad pre voľnú časticu má Schrödingerova rovnica tvar

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\Psi(\vec{r},t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(\vec{r},t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(\vec{r},t)}{\partial z^2}\right] \tag{2.8}$$

ako sa ľahko presvedčíme, ak do rovnice (2.8) dosadíme vlnovú funkciu (2.5).

Vo všeobecnejšom prípade sa kvantová častica pohybuje v oblasti s potenciálnou energiou $V(\vec{r})$. Vlnová funkcia častice potom musí spĺňať Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) \tag{2.9}$$

Schrödingerovu rovnicu nemôžeme odvodiť, akceptujeme ju ako postulát, podobne ako akceptujeme Newtonove pohybové zákony v klasickej mechanike.

Na jednoznačné určenie vlnovej funkcie nám samotná Schrödingerova rovnica nestačí. Potrebujeme poznať aj počiatočné podmienky (tvar vlnovej funkcie v počiatočnom čase) aj okrajové podmienky – teda ako vyzerá vlnová funkcia na hranici oblasti, v ktorej sa častica môže nachádzať.

2.1.3 Spojitosť vlnovej funkcie

Vlnová funkcia musí byť spojitá v priestore aj v čase. Rovnako musia byť spojitou funkciou aj prvé priestorové derivácie

$$\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial x}, \qquad \frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial y}, \qquad \frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial z} \tag{2.10}$$

Požiadavku spojitosti prvej derivácie vlnovej funkcie môžeme odvodiť priamo zo Schrödingerovej rovnice[2] [1].

2.1.4 Normovanosť vlnovej funkcie

Zo známej vlnovej funkcie $\Psi(\vec{r},t)$ nájdeme pomocou vzťahu (2.2) pravdepodobnosť, že kvantová častica sa v čase t nachádza v okolí $\mathrm{d}V$ bodu $\vec{r}$. Pretože častica v každom čase určite niekde existuje, musí sa celková pravdepodobnosť, že sa niekde nachádza, rovnať jednej. Preto musí v každom čase platiť podmienka normovanosti

$$\int_V \mathrm{d}V\ |\Psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \tag{2.11}$$

kde integrujeme cez celý objem V, v ktorom sa častica môže nachádzať.

Element objemu je $\mathrm{d}V\ = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ v trojrozmerných kartézskych súradniciach, a

$$\mathrm{d}V\ = r^2\mathrm{d}r\sin\theta\ \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \tag{2.12}$$

vo sférických súradniciach (kapitola 8).

Podmienka normovanosti vlnovej funkcie kladie na samotnú vlnovú funkciu niektoré dôležité obmedzenia. Ak $\mathrm{d}V$ je celý priestor, potom integrál (2.11) konverguje len vtedy, keď vlnová funkcia dostatočne rýchlo klesá do nuly pre veľké hodnoty r. Napríklad vo sférických súradniciach musí $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ pre veľké hodnoty r klesať do nuly rýchlejšie ako r^{-3}. Pri štúdiu konkrétnych fyzikálnych modelov uvidíme, že podmienka normovanosti vlnovej funkcie vedie k výberu len niekoľkých diskrétnych hodnôt energie viazanej častice. Tieto stavy voláme viazané stavy.

2.1.5 Princíp superpozície

Dôležitou vlastnosťou Schrödingerovej rovnice je jej lineárnosť. Ľahko sa presvedčíme, že ak sú dve funkcie $\Psi_1(\vec{r},t)$ a $\Psi_2(\vec{r},t)$ riešením Schrödingerovej rovnice, tak jej riešením je aj ich lineárna kombinácia

$$\Psi(\vec{r},t) = c_1\Psi_1(\vec{r},t) + c_2\Psi_2(\vec{r},t) \tag{2.13}$$

Princíp superpozície je dôležitý pre porozumenie mnohým základným javom v kvantovej mechanike. „Klasickým" príkladom je difrakcia elektrónu na dvojštrbine, ktorá je podrobne opísaná vo Feynmanovej učebnici [5].

2.2 Amplitúda pravdepodobnosti

V rovnici (2.2) sme definovali pravdepodobnosť, že častica sa nachádza v objeme $\mathrm{d}V$ okolo bodu $\vec{r}$, ako $P(\vec{r},t)\mathrm{d}V = |\Psi(\vec{r},t)|^2\mathrm{d}V$. Pravdepodobnosť je reálne číslo, menšie ako 1. Pre jej výpočet

[2] Dôležitou výnimkou z požiadavky spojitosti prvej derivácie je prípad, keď sa potenciálna energia $V(x)$ mení v niektorom bode skokom o nekonečne veľkú hodnotu. Hoci sa taký prípad v reálnom fyzikálnom svete nemôže vyskytnúť, uvidíme, že je výhodné sa ním niekedy zaoberať.

musíme poznať vlnovú funkciu, ktorej hodnoty sú vo všeobecnosti komplexné. Vzhľadom na súvis vlnovej funkcie a pravdepodobnosti budeme vlnovú funkciu $\Psi(\vec{r},t)$ nazývať aj amplitúdou hustoty pravdepodobnosti výskytu častice v mieste $\vec{r}$ a v čase t.

S amplitúdou pravdepodobnosti sa v kvantovej mechanike budeme stretávať aj v iných súvislostiach. Predpokladajme, že chceme počítať pravdepodobnosť nejakého procesu, ktorý v kvantovom svete prebehne. V kvantovej mechanike nebudeme počítať priamo pravdepodobnosť, ale musíme najprv nájsť amplitúdu pravdepodobnosti p, ktorá je, tak ako vlnová funkcia, vo všeobecnosti komplexná. Zo známej amplitúdy pravdepodobnosti nájdeme samotnú pravdepodobnosť P ako druhú mocninu absolútnej hodnoty p,

$$P = |p|^2 \tag{2.14}$$

Vzťah (2.14) medzi amplitúdou pravdepodobnosti a pravdepodobnosťou je kľúčovým vzťahom pre pochopenie rozdielov medzi klasickou a kvantovou mechanikou. Ukážeme si jeho význam na nasledujúcom príklade.

2.2.1 Prechod kvantovej častice cez dve prekážky

Uvažujme voľnú časticu, ktorej položíme do cesty prekážku. Fyzikálna realizácia prekážky nie je dôležitá, podstatné je, že častica môže s pravdepodobnosťou T prekážku prekonať a s pravdepodobnosťou R sa od prekážky odrazí. Pretože žiaden iný proces nemôže nastať, musí platiť

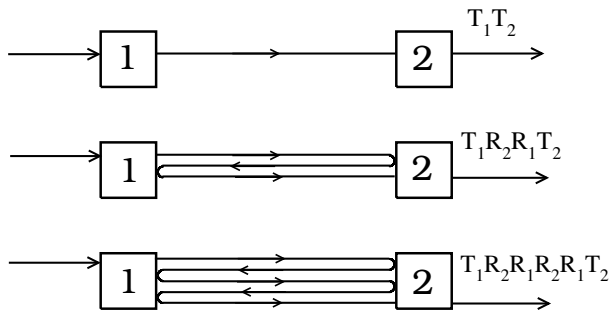
$$T + R = 1 \tag{2.15}$$

V klasickej fyzike nám pravdepodobnosti T a R poskytujú kompletnú informáciu o tom, čo sa s klasickou časticou na prekážke môže stať: alebo sa odrazí, alebo prejde. V kvantovej mechanike však nájdeme najprv amplitúdy pravdepodobnosti prechodu a odrazu častice od prekážky t a r. Pravdepodobnosť prechodu cez prekážku je v kvantovej mechanike daná ako $T = |t^2|$ a pravdepodobnosť odrazu je $R = |r|^2$. Amplitúdy pravdepodobnosti sú vo všeobecnosti komplexné čísla, ktoré môžeme písať v tvare

$$t = \sqrt{T}e^{i\phi_t}, \qquad r = \sqrt{R}e^{i\phi_r} \tag{2.16}$$

Už tieto výrazy naznačujú. že kvantová mechanika je vo svojich prejavoch bohatšia ako klasická mechanika. Prechod cez bariéru je totiž určený štyrmi parametrami – okrem pravdepodobností T a R ešte aj dvoma fázami ϕ_t a ϕ_r. Tento rozdiel sa neprejaví pri analýze prechodu častice cez jednu bariéru, je ale podstatný pre výpočet pravdepodobnosti prechodu častice cez dve susediace bariéry.

Položme teraz časticí do cesty dve prekážky a hľadajme, s akou pravdepodobnosťou ich prekoná. Nájdime najprv pravdepodobnosť pre klasickú časticu, T^{K}. Pravdepodobnosť prechodu cez dve prekážky je súčtom pravdepodobností všetkých procesov, ktoré vedú k prekonaniu oboch prekážok. Takých procesov je nekonečne veľa: v najjednoduchšom prípade častica prejde cez obe prekážky (s pravdepodobnosťou T_1T_2). Častica však môže bariéry prekonať aj tak, že prejde cez prvú prekážku, od druhej sa ale odrazí späť. Následne sa odrazí aj od prvej a až potom prejde cez druhú. Pravdepodobnosť takéhoto procesu je $T_1R_2R_1T_2$. Existuje nekonečne veľa ďalších



Obr. 2.1. Tri najjednoduchšie procesy, akými klasická častica prekoná dve bariéry.

spôsobov prekonania dvoch bariér. Tri najjednoduchšie sú ukázané na obrázku 2.1. Celkovú pravdepodobnosť prechodu nájdeme ako súčet pravdepodobností všetkých prechodov:

$$T_{12}^{\mathrm{K}} = T_1T_2 + T_1R_2R_1T_2 + T_1R_2R_1R_2R_1T_2 + \cdots = \frac{T_1T_2}{1 - R_1R_2} \tag{2.17}$$

Analyzujme teraz ten istý problém z pohľadu kvantovej mechaniky. Pretože časticu opisujeme vlnovou funkciou, nájdeme pravdepodobnosť prechodu T^{Q} až potom, keď nájdeme amplitúdu pravdepodobnosti prechodu častice:

$$T_{12}^{\mathrm{Q}} = |t_{12}|^2 \tag{2.18}$$

Amplitúda t_{12} je súčtom amplitúd pravdepodobnosti pre všetky možné prechody cez dve bariéry

$$t_{12} = t_1t_2 + t_1r_2r_1t_2 + t_1r_2r_1r_2r_1t_2 + \cdots = \frac{t_1t_2}{1 - r_1r_2} \tag{2.19}$$

(porovnajte túto rovnicu s rovnicou 2.17). Pravdepodobnosť prechodu je preto

$$\begin{aligned} T_{12}^{\mathrm{Q}} &= |t_{12}|^2 = \frac{T_1T_2}{|1 - r_1r_2|^2} = \frac{T_1T_2}{1 + R_1R_2 - r_1r_2 - r_1^*r_2^*} \\ &= \frac{T_1T_2}{1 + R_1R_2 - 2\sqrt{R_1R_2}\cos\phi} \end{aligned} \tag{2.20}$$

Fáza $\phi = \phi_{r_1} + \phi_{r_2}$ je určená fázami jednotlivých amplitúd odrazu.[3]

Porovnajme teraz dve pravdepodobnosti (2.17) a (2.20). Zatiaľ čo klasická pravdepodobnosť prechodu T^{K} závisí len od pravdepodobností prechodu, resp. odrazu od jednotlivých prekážok, kvantová pravdepodobnosť je funkciou aj fázy ϕ. Táto závislosť od fázy prináša v kvantovej mechanike nové javy. Z rovnice (2.17) napríklad vidíme, že klasická pravdepodobnosť T^K je vždy menšia ako 1 (rovnosť $T^K = 1$ nastane len v triviálnom prípade, keď $T_1 = T_2 = 1$, teda keď na prekážkach nenastáva žiadny odraz). Kvantová pravdepodobnosť T^{Q}, daná rovnicou

[3]Presný opis rozptylu na dvoch prekážkach musí zahrnúť aj zmenu fázy vlnovej funkcie na dráhe medzi dvoma prekážkami. Pretože medzi prekážkami sa častica pohybuje voľne, zmení sa jej vlnová funkcia počas pohybu medzi prekážkami o fázový faktor $\exp i\phi_0 = \exp[ip\Delta x/\hbar]$, kde p je hybnosť častice a Δx je vzdialenosť medzi dvoma prekážkami. Túto zmenu fázy môžeme zahrnúť do amplitúdy prechodu t_1 a do amplitúd odrazu r_1 a r_2: $t_1 \to t_1e^{i\phi_0}$, $r_1 \to r_1e^{i\phi_0}$ a $r_2 \to r_2e^{i\phi_0}$.

(2.20) sa však môže, v závislosti od fázového rozdielu ϕ, rovnať jednej, a to aj vtedy, keď obe pravdepodobnosti $T_1 < 1$ a $T_2 < 1$. Môže sa dokonca rovnať jednej aj vtedy, keď sú obe pravdepodobnosti prechodu extrémne malé (príklady 2.3 a 2.4). Kvantová častica teda dokáže s pravdepodobnosťou 1 prekonať dve prekážky aj vtedy, keď sa cez jednu z nich dostane len s veľmi malou pravdepodobnosťou.

Podrobnejšie sa prechodom kvantovej častice cez bariéry budeme zaoberať v kapitole 4. Na tomto mieste len opätovne zdôrazníme, že prekvapujúce kvantové výsledky sú dané tým, že pravdepodobnosť daného procesu nepočítame ako súčet pravdepodobností jednotlivých procesov, ale ako druhú mocninu absolútnej hodnoty zo súčtu amplitúd pravdepodobnosti. Pri výpočte amplitúdy pravdepodobnosti je princíp superpozície podstatný.

Uvedené výsledky nie sú až také prekvapivé, ak si spomenieme na interferenciu elektromagnetickej vlny (svetla) na tenkej vrstve. Aj v tomto prípade intenzita prejdenej vlny závisí nielen od vlastností rozhraní, ale predovšetkým od šírky vrstvy – teda od fázy, ktorú vlna získa prechodom cez vrstvu. Matematický aparát analýzy oboch javov je formálne rovnaký. V oboch prípadoch je dôležitou veličinou, ktorá určuje pravdepodobnosti prechodu, fáza – v elektrodynamike išlo o fázu elektromagnetickej vlny, v kvantovej mechanike o fázu vlnovej funkcie. Keďže v klasickej mechanike fázu nepoznáme, neprekvapuje, že niektoré javy, závislé od fázy, klasická mechanika nepozná.

2.3 Operátory

V predchádzajúcej časti sme zistili, že správanie kvantovej častice musíme opísať vlnovou funkciou $\Psi(\vec{r},t)$. Kvadrát absolútnej hodnoty vlnovej funkcie,

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) \tag{2.21}$$

udáva hustotu pravdepodobnosti toho, že sa častica v čase t nachádza v bode $\vec{r}$. Vlnová funkcia v sebe obsahuje kompletnú informáciu o stave častice. Preto z nej môžeme nájsť strednú hodnotu ľubovoľnej fyzikálnej veličiny. Postup je však zložitejší, ako v klasickej fyzike.

Predovšetkým, každej fyzikálnej veličine priradíme operátor. Operátor reprezentuje matematickú operáciu, ktorá pôsobením na funkciu $f(\vec{r},t)$ z nej vytvára inú funkciu $g(\vec{r},t)$:

$$\mathbf{A}f(\vec{r},t) = g(\vec{r},t) \tag{2.22}$$

Operátory budeme označovať tučnými písmenami **A**, **B**. Ak je vlnová funkcia častice $\Psi(\vec{r},t)$, potom definujeme strednú hodnotu veličiny, reprezentovanej operátorom **A** v stave $\Psi(\vec{r},t)$ vzťahom

$$\langle A(t)\rangle = \frac{\int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)\mathbf{A}\Psi(\vec{r},t)}{\int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)} \tag{2.23}$$

V ďalšom texte budeme predpokladať, že funkcia $\Psi(\vec{r},t)$ normovaná. Potom sa integrál v menovateli rovná jednej. Ako uvidíme neskôr, s operátormi sa v matematike bežne stretávame.

2.3.1 Operátory niektorých fyzikálnych veličín

Definujme teraz operátory pre niektoré základné fyzikálne veličiny.

Operátor polohy

Pravdepodobnosť nájdenia častice v bode $\vec{r}$ je $|\Psi(\vec{r},t)|^2$. Preto strednú polohu častice nájdeme zo vzťahu

$$\langle x(t)\rangle = \int \mathrm{d}V |\Psi(\vec{r},t)|^2\, x \tag{2.24}$$

ktorý môžeme prepísať do tvaru

$$\langle x(t)\rangle = \int \mathrm{d}V \Psi^*(\vec{r},t)\; x\; \Psi(\vec{r},t) \tag{2.25}$$

Porovnaním s definičným vzťahom pre strednú hodnotu operátora (rovnica 2.23) vidíme, že operátor polohy môžeme definovať

$$\mathbf{x} = x, \qquad \vec{\mathbf{r}} = \vec{r} \tag{2.26}$$

Podobne nájdeme strednú hodnotu ľubovoľnej funkcie $f(\vec{r})$, ktorá závisí len od polohy

$$\langle f(\vec{r})\rangle = \int \mathrm{d}V \Psi^*(\vec{r},t) f(\vec{r}) \Psi(\vec{r},t) \tag{2.27}$$

Operátor hybnosti $\vec{\mathbf{p}}$

Pre výpočet strednej hodnoty hybnosti začneme s voľnou časticou pohybujúcou sa v smere osi x. Vlnová funkcia voľnej častice má tvar

$$\Psi(x,t) = C e^{\frac{i}{\hbar}px} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2.28}$$

Voľná častica má presne definovanú hybnosť p, preto $\langle p\rangle = p$. Výpočtom sa presvedčíme, že platí

$$p = \frac{\int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)}{\int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)} \tag{2.29}$$

Pre všeobecnejší tvar vlnovej funkcie $\Psi(\vec{r},t)$ predpokladajme, že tiež platí[4]

$$\langle p\rangle = \int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) \tag{2.30}$$

Porovnaním so vzťahom (2.25) môžeme x-ovej zložke operátora hybnosti priradiť operátor

$$\mathbf{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{2.31}$$

[4] V ďalšom texte predpokladáme, že vlnová funkcia je už normovaná, takže integrál v menovateli výrazu (2.29) sa rovná jednej, a nemusíme ho explicitne uvádzať. Všimnime si ale, že vlnová funkcia voľnej častice v tvare (2.28) nie je normovaná: integrál $\int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t)\Psi(x,t = |C|^2 \int \mathrm{d}x$ je úmerný dĺžke intervalu L, cez ktorý integrujeme. Vidíme však, že v rovnici (2.29) vystupuje táto dĺžka v čitateli aj v menovateli, takže konečný výsledok neovplyvní.

Analogické vzťahy platia aj pre ostatné dve zložky momentu hybnosti. Pre výpočet druhej mocniny hybnosti p_x^2 musíme operátor $\mathbf{p}_x$ aplikovať dvakrát:

$$\langle p_x^2 \rangle = \int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) \right\} = \int \mathrm{d}x \Psi^*(x,t)(-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) \tag{2.32}$$

Operátor $\mathbf{p}_x^2$ má teda tvar

$$\mathbf{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{2.33}$$

Explicitný tvar všetkých ďalších operátorov, ktoré budeme potrebovať, nájdeme tak, že v klasických vzťahoch nahradíme polohu $\vec{r}$ a hybnosť $\vec{p}$ ich operátormi.

Kinetická energia je v klasickej mechanike daná výrazom $E_k = p^2/(2m)$, preto operátor kinetickej energie bude v jednorozmernom prípade

$$\mathbf{E}_k = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{2.34}$$

a v trojrozmernom prípade

$$\mathbf{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \tag{2.35}$$

Potenciálna energia je vo všetkých zaujímavých fyzikálnych aplikáciách funkciou len polohy, preto sa jej operátor rovná

$$\mathbf{E}_p = E_p = V(\vec{\mathbf{r}}) \tag{2.36}$$

Hamiltonov operátor (operátor energie) je súčtom operátorov kinetickej a potenciálnej energie:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + V(\vec{\mathbf{r}}) \tag{2.37}$$

Moment hybnosti je v klasickej fyzike definovaný vzťahom $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, jeho operátor teda bude mať tvar

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}} \tag{2.38}$$

2.3.2 Vlastné hodnoty a vlastné funkcie operátorov

Pre každý operátor $\mathbf{A}$ môžeme nájsť také funkcie $\Phi_n^A(\vec{r})$, pre ktoré platí

$$\mathbf{A} \Phi_n^A(\vec{r}) = A_n \Phi_n^A(\vec{r}) \tag{2.39}$$

Pôsobením operátora $\mathbf{A}$ na jeho vlastnú funkciu Φ_n^A sa táto funkcia nezmení, len sa vynásobí číslom A_n.

Hodnoty A_n sú vlastné hodnoty operátora $\mathbf{A}$. Súbor vlastných hodnôt nazývame spektrum operátora. Spektrum môže byť spojité alebo diskrétne. Index n môže teda nadobúdať celočíselné

hodnoty (vtedy vlastné hodnoty A_n patria do diskrétneho spektra operátora **A**), alebo je spojitý (ak je spektrum operátora spojité). Napríklad spektrum energie voľnej častice je spojité, pretože častica môže mať ľubovoľnú energiu $E = p^2/(2m) > 0$. Naopak, spektrum atómu vodíka je diskrétne – energia elektrónu môže nadobúdať len niektoré presne určené hodnoty E_n. Tieto energie sú vlastnými hodnotami Hamiltonovho operátora pre atóm vodíka.

Vlastné hodnoty operátorov hrajú v kvantovej mechanike dôležitú úlohu. Ak experimentálne meriame nejakú veličinu A, výsledkom merania môže byť len niektorá z vlastných hodnôt zodpovedajúceho operátora **A**.

Funkcia $\Phi_n^A(\vec{r})$ spĺňajúca rovnicu (2.39) je vlastnou funkciou operátora **A** prislúchajúcou vlastnej hodnote A_n. Dôležitou vlastnosťou vlastných funkcií je ich ortogonálnosť. Pre každé dve vlastné funkcie Φ_n^A a Φ_m^A platí

$$\int \mathrm{d}V\ \Phi_m^{A\,*}(\vec{r})\Phi_n^A(\vec{r}) = \delta_{nm} \tag{2.40}$$

Systém sa nachádza v n-tom vlastnom stave operátora **A**, ak sa jeho vlnová funkcia rovná vlastnej funkcii tohto operátora $\Phi(\vec{r}) \equiv \Phi_n^A(\vec{r})$.

Pretože kvantový systém vždy musí byť v nejakom stave, tvoria vlastné stavy úplný systém funkcií. To znamená, že každú vlnovú funkciu môžeme vyjadriť ako superpozíciu vlastných funkcií,

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \Phi_n^A(\vec{r}) \tag{2.41}$$

V rovnici (2.41) sumujeme cez diskrétny index, ak sú vlastné stavy viazané (a ich energie diskrétne), alebo cez spojitý index, ak ide o voľné stavy (spektrum energií je spojité). Koeficienty rozvoja c_n sú amplitúdy pravdepodobnosti, že sa systém nachádza v stave Φ_n^A. Môžeme ich nájsť, ak obe strany rovnice (2.41) vynásobíme komplexne združenou vlastnou funkciou $\Phi_m^{A\,*}(\vec{r})$ a preintegrujeme cez celý objem. Dostaneme

$$\int \mathrm{d}V \Phi_m^{A\,*}(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \int \mathrm{d}V\ \Phi_m^{A\,*}(\vec{r})\Phi_n^A(\vec{r}) = \sum_n c_n \delta_{nm} = c_m \tag{2.42}$$

kde sme využili ortogonálnosť vlastných funkcií (rovnica 2.40). Samozrejme musí platiť

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{2.43}$$

pretože systém sa určite nachádza v niektorom zo svojich vlastných stavov.

Pomocou vlastných funkcií môžeme strednú hodnotu operátora **A** v stave vyjadriť v tvare

$$\langle A \rangle = \sum_n |c_n|^2 A_n \tag{2.44}$$

Potom $|c_n|^2$ je pravdepodobnosť, že častica sa nachádza v stave Φ_n^A. Stredná hodnota veličiny A sa potom rovná ustredneniu cez všetky možné hodnoty A_n, pričom každá z nich sa uváži s váhou rovnajúcou sa pravdepodobnosti $p_n = |c_n|^2$, že sa takýto stav môže vyskytnúť.

2.3.3 Meranie

Ako bolo povedané vyššie, meraním veličiny A môžeme dostať len niektorú z vlastných hodnôt A_n. Ak sa systém nachádza vo vlastnom stave Φ_n^A, potom je výsledkom merania veličiny A vlastná hodnota A_n. Ak sa však systém nachádza v stave (2.41), výsledkom merania veličiny A môže byť ktorákoľvek vlastná hodnota A_n. Pravdepodobnosť, že ju nameriame, sa rovná $|c_n|^2$.

Táto nejednoznačnosť výsledku merania môže mať nečakané dôsledky. Predstavme si napríklad, že sa nám podarilo vytvoriť dva systémy, ktoré sú opísané tou istou vlnovou funkciou v tvare (2.41). Z hľadiska kvantovej fyziky sú preto identické. Ak však budeme v oboch merať hodnotu A, môže sa nám stať, že meraním veličiny A v jednom a druhom systéme dostaneme rôzne výsledky. Výsledok merania veličiny A v jednom alebo druhom systéme totiž nie je jednoznačný: vieme len povedať, že s pravdepodobnosťou $|c_n|^2$ nameriame hodnotu A_n.

Rozdiel medzi klasickou a kvantovou fyzikou je ešte dramatickejší: ukazuje sa, že oba kvantové systémy sa meraním zmenia. Ak sme v prvom z nich namerali, povedzme, hodnotu A_5, bude sa prvý systém po meraní nachádzať v stave Φ_5^A. Podobne, ak bola výsledkom merania v druhom systéme hodnota A_{17}, bude sa druhý systém po meraní nachádzať v stave Φ_{17}^A. Proces merania preto mení stav kvantového systému. Dnes nevieme presne opísať, ako k tejto zmene dochádza. Meraním v kvantovej mechanike sa budeme podrobnejšie zaoberať neskôr v kapitole 11.

2.3.4 Komutujúce a nekomutujúce operátory

Ak máme dva operátory **A** a **B**, potom ich súčin je tiež operátor:

$$\mathbf{AB}f(\vec{r},t) = \mathbf{A}\left[\mathbf{B}f(\vec{r},t)\right] \tag{2.45}$$

Jeho pôsobenie na funkciu $f(\vec{r},t)$ nájdeme tak, že najprv operátor **B** pôsobí na funkciu f a potom operátor **A** pôsobí na funkciu $\mathbf{B}f$.

Ak chceme počítať strednú hodnotu veličiny, ktorej zodpovedá súčin dvoch (alebo viacerých) operátorov, musíme dbať na ich poradie. Napríklad strednú hodnotu $\langle xp_x\rangle$ nájdeme z výrazu

$$\langle xp_x\rangle = \int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i}\int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\vec{r},t) \tag{2.46}$$

zatiaľ čo pre strednú hodnotu súčinu $\langle p_x x\rangle$ dostaneme

$$\begin{aligned}\langle p_x x\rangle &= \int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big[x\Psi(\vec{r},t)\Big] \\ &= \frac{\hbar}{i}\int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\vec{r},t) + \frac{\hbar}{i}\int \mathrm{d}V\ \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\end{aligned} \tag{2.47}$$

Matematicky je rozdiel medzi oboma výrazmi zrozumiteľný: operátor hybnosti

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{2.48}$$

pôsobí na celú funkciu stojacu napravo od neho. Preto

$$\mathbf{p}_x\mathbf{x}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[x\Psi(x)\right] = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) + \Psi(x)\right] \tag{2.49}$$

ale

$$\mathbf{x}\mathbf{p}_x\Psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\right] \tag{2.50}$$

Rozdiel oboch výrazov je preto nenulový,

$$\left[\mathbf{p}_x\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{p}_x\right]\Psi = \frac{\hbar}{i}\Psi \tag{2.51}$$

V operátorovom formalizme píšeme

$$\mathbf{p}_x\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{p}_x = \frac{\hbar}{i} \tag{2.52}$$

Výraz na ľavej strane je *komutátor*: $[\mathbf{p}_x,\mathbf{x}] = \mathbf{p}_x\mathbf{x} - \mathbf{x}\mathbf{p}_x$. Komutátor môžeme definovať pre ľubovoľné dva operátory:

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \tag{2.53}$$

Komutátor $[\mathbf{A},\mathbf{B}]$ je tiež operátor. Vo všeobecnosti nájdeme jeho tvar tak, ako v predchádzajúcom prípade: Zvoľme si ľubovoľnú funkciu Φ a nájdime funkcie $\Phi_1 = \mathbf{AB}\Phi$ a $\Phi_2 = \mathbf{BA}\Phi$, takže

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}]\Phi = \Phi_1 - \Phi_2. \tag{2.54}$$

Budeme hovoriť, že dva operátory **A** a **B** komutujú, ak sa ich komutátor rovná nule:

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] = 0 \tag{2.55}$$

Z definície operátora momentu hybnosti (2.38) dostaneme komutačné vzťahy pre operátory jednotlivých zložiek:

$$[\mathbf{L}_x,\mathbf{L}_y] = i\hbar\mathbf{L}_z \quad [\mathbf{L}_y,\mathbf{L}_z] = i\hbar\mathbf{L}_x \quad [\mathbf{L}_z,\mathbf{L}_x] = i\hbar\mathbf{L}_y \tag{2.56}$$

Vidíme teda, že operátory zložiek momentu hybnosti navzájom nekomutujú. Celkový operátor momentu hybnosti,

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2 \tag{2.57}$$

ale komutuje s ľubovoľnou zložkou:

$$[\mathbf{L}^2,\mathbf{L}_x] = [\mathbf{L}^2,\mathbf{L}_y] = [\mathbf{L}^2,\mathbf{L}_z] = 0 \tag{2.58}$$

2.3.5 Princíp neurčitosti

Skutočnosť, že niektoré operátory nekomutujú, má v kvantovej mechanike dôležitý dôsledok. Ak je totiž komutátor dvoch operátorov nenulový, potom nie sme schopní príslušné dve veličiny merať súčasne. To znamená, že nie sme schopní súčasne odmerať presnú hodnotu oboch veličín.

Najznámejším dôsledkom nekomutujúcich operátorov sú operátory polohy a hybnosti. Dá sa ukázať, že súčin neurčitosti polohy častice,

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \tag{2.59}$$

a neurčitosti hybnosti,

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \tag{2.60}$$

spĺňa vzťah

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar \tag{2.61}$$

ktorý je matematickým vyjadrením Heisenbergovho princípu neurčitosti. Podobne komutačné vzťahy (2.56) znamenajú, že v žiadnom fyzikálnom systéme nie sme schopní súčasne odmerať všetky tri komponenty vektora momenty hybnosti. Zaujímavá je aj skutočnosť, že ani operátory kinetickej a potenciálnej energie vo všeobecnosti nekomutujú. V takom prípade nemôžeme súčasne merať kinetickú aj potenciálnu energiu. Správnejšie je rozprávať len o celkovej energii.

2.3.6 Reprezentácia operátorov maticami

V tejto časti naznačíme analógiu medzi operátormi a maticami, ktoré poznáte z lineárnej algebry.

Uvažujme jednoduchý systém, v ktorom je možných len N rôznych stavov. Ak poznáme všetky vlastné funkcie $\Phi_n^A(\vec{r})$ operátora $\mathbf{A}$, potom operátor $\mathbf{A}$ môžeme vyjadriť ako maticu A rozmeru $N \times N$, ktorej maticové elementy vypočítame ako integrál

$$A_{nm} = \int \mathrm{d}V \; \Phi_n^{A^*}(\vec{r}) \mathbf{A} \Phi_m^A(\vec{r}) \tag{2.62}$$

Z ortogonality vlastných funkcií vyplýva, že matica A je diagonálna

$$A_{nm} = \delta_{nm} A_n \tag{2.63}$$

Ľubovoľnú funkciu $\Psi(\vec{r})$ môžeme reprezentovať vektorom $\vec{v}$, ktorého zložky sú

$$v_n = \int \mathrm{d}V \; \Phi_n^{A^*}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \tag{2.64}$$

Podobne vyjadríme iný operátor, $\mathbf{B}$:

$$\mathbf{B} \to B_{nm}, \qquad B_{nm} = \int \mathrm{d}V \; \Phi_n^{A^*}(\vec{r}) \mathbf{B} \Phi_m^A(\vec{r}) \tag{2.65}$$

Ak sú funkcie $\Phi_n^A(\vec{r})$ zároveň aj vlastnými funkciami operátora $\mathbf{B}$, potom je samozrejme matica B_{nm} diagonálna, rovnako ako matica A_{nm}. Vo všeobecnosti však operátor $\mathbf{B}$ má iné vlastné funkcie $\Phi_n^B(\vec{r})$. Vtedy matica B_{nm}, definovaná vzťahom (2.65) diagonálna nie je.

Podobne môžeme skonštruovať maticu C_{nm}, zodpovedajúcu operátoru **C**:

$$C_{nm} = \int \mathrm{d}V \; \Phi_n^{A*}(\vec{r})\mathbf{C}\Phi_m^A(\vec{r}) \tag{2.66}$$

Z lineárnej algebry vieme, že násobenie matíc nie je komutatívne. Vo všeobecnosti

$$BC \neq CB \tag{2.67}$$

Ak matice B a C nekomutujú, potom ani operátory **B** a **C** nekomutujú.

Reprezentácie

Zopakujme konštrukciu z predchádzajúcej časti, ale za základné funkcie si nevyberme vlastné funkcie operátora **A**, ale vlastné funkcie operátora **B**. Dostaneme nové matice,

$$\tilde{A}_{nm} = \int \mathrm{d}V \; \Phi_n^{B*}(\vec{r})\mathbf{A}\Phi_m^B(\vec{r}) \tag{2.68}$$

Podobne zostrojíme matice $\tilde{B}$ a $\tilde{C}$. Pretože sme matice konštruovali z vlastných funkcií operátora **B**, je matica $\tilde{B}$ určite diagonálna.

Z lineárnej algebry vieme, že súvis medzi maticami A a $\tilde{A}$ je vyjadrený podobnostnou transformáciou

$$A = U^{-1}\tilde{A}U \tag{2.69}$$

sprostredkovanou maticou U veľkosti $N \times N$.

Dve rôzne matice, A a $\tilde{A}$ zodpovedajú rôznym reprezentáciám operátora. V kvantovej mechanike nie je podstatné, v ktorej reprezentácii pracujeme. Všetky vzťahy medzi operátormi musia byť vo všetkých reprezentáciách rovnaké. Napríklad ak platí

$$A = BC \tag{2.70}$$

tak určite platí aj

$$\tilde{A} = \tilde{B}\tilde{C} \tag{2.71}$$

Rovnako ak dva operátory **A** a **B** nekomutujú, tak určite nekomutujú ani matice A a B, ani matice $\tilde{A}$ a $\tilde{B}$.

Teória reprezentácií je trochu abstraktná. My sa stretneme s reprezentáciou Hamiltonovho operátora, predovšetkým v jednoduchých prípadoch dvojstavových modelov a pri opise kvantovej častice so spinom.

2.3.7 Hermitovské operátory

Všetky fyzikálne veličiny, ktoré nás zaujímajú, nadobúdajú reálne hodnoty. Preto im zodpovedajúce operátory musia mať všetky vlastné hodnoty reálne. Ako vidieť z tvaru operátora hybnosti, $\mathbf{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, reálnosť vlastných hodnôt neznamená, že aj samotný operátor musí byť reálny.

Definujme ešte hermitovské združenie matice (operátora): hermitovsky združený operátor (označujeme ho $\mathbf{A}^\dagger$) k operátoru $\mathbf{A}$ je operátor, pre ktorého prvky platí

$$(A^\dagger)_{nm} = A^*_{mn} \tag{2.72}$$

Vo fyzike majú dôležitú úlohu hermitovské operátory, ktoré sú identické so svojím hermitovsky združeným operátorom

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \tag{2.73}$$

Všetky operátory, ktoré reprezentujú fyzikálne veličiny, musia byť hermitovské. Vlastné hodnoty hermitovských operátorov sú, samozrejme, reálne. Ak hermitovský operátor $\mathbf{A}$ reprezentujeme maticou A, potom pre prvky matice A musí platiť

$$A_{mn} = A^*_{nm} \tag{2.74}$$

Nediagonálne prvky sú teda vzájomne komplexne združené, zatiaľ čo diagonálne prvky A_{nn} musia byť reálne.

2.4 Schrödingerova rovnica

V časti 2.1 sme ukázali, že kvantová častica je kompletne opísaná svojou vlnovou funkciou. Časový vývoj vlnovej funkcie je determinovaný Schrödingerovou rovnicou

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \mathbf{H}\Psi(\vec{r},t) \tag{2.75}$$

kde $\mathbf{H}$ je Hamiltonián definovaný vzťahom (2.37). Hamiltonián obsahuje informáciu o prostredí, v ktorom sa častica pohybuje.

Podobne ako Newtonove zákony v klasickej mechanike, ani Schrödingerovu rovnicu nemôžeme odvodiť. V literatúre nájdeme viacero argumentov, prečo má Schrödingerova rovnica práve takýto tvar.

Predpokladajme, že častica je v niektorom vlastnom stave Hamiltoniánu s vlastnou energiou E_n. Vlastnej energii prislúcha od času nezávislá vlastná funkcia $\Phi_n(\vec{r})$, ktorá spĺňa rovnicu

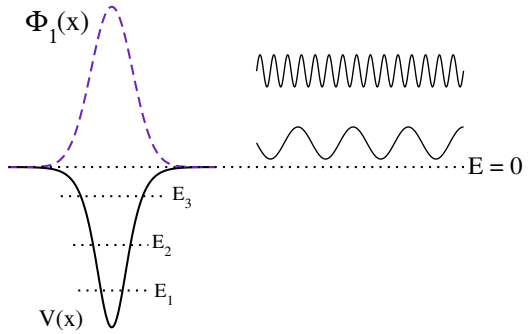
$$\mathbf{H}\Phi_n(\vec{r}) = E_n\Phi_n(\vec{r}) \tag{2.76}$$

Časovo závislú Schrödingerovu rovnicu (2.75) potom spĺňa funkcia

$$\Psi_n(\vec{r},t) = \Phi_n(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{2.77}$$

ako sa môžeme presvedčiť priamym dosadením. Časová závislosť vlnovej funkcie v tvare (2.77), kde čas vystupuje len v exponenciálnom člene

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2.78}$$



Obr. 2.2. Viazané (vľavo) a rozptylové (vpravo) stavy kvantovej častice. Vlnová funkcia viazaného stavu exponenciálne klesá s rastúcou vzdialenosťou od minima potenciálu $V(x)$. Na obrázku je ukázaná vlnová funkcia $\Phi_1(x)$ zodpovedajúca stavu s energiou E_1. Energie viazaných stavov sú záporné a vyjadrujú energiu, potrebnú na uvoľnenie častice z potenciálovej jamy. Energetické spektrum viazanej častice je diskrétne – pozostáva z izolovaných energetických hladín. Voľné stavy majú spojité spektrum energií – voľná častica sa môže pohybovať s ľubovoľnou energiou. Voľnú časticu môžeme opísať rovinnou vlnou (časť 2.1.1), alebo vlnovým balíkom, ktorý opíšeme v časti 2.7.

je výlučnou vlastnosťou vlastných stavov Hamiltoniánu. Ak sa kvantová častica nachádza v superpozícii viacerých vlastných stavov Hamiltonovho operátora, vtedy je jej vlnová funkcia daná vzťahom

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \Phi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{2.79}$$

kde E_n je vlastná energia n-tého energetického stavu. Stredná hodnota energie takéhoto stavu bude

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int \mathrm{d}V \Psi^*(\vec{r},t)\mathbf{H}\Psi(\vec{r},t) \\ &= \textstyle\sum_n \sum_m c_n^* c_m \int \mathrm{d}V \Phi_n^*(\vec{r})\Phi_m(\vec{r}) e^{+\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \\ &= \textstyle\sum_n |c_n|^2 E_n \end{aligned} \tag{2.80}$$

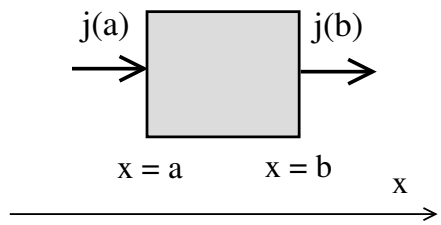
Pri výpočte sme využili ortogonálnosť vlastných stavov energie (rovnica 2.40).

2.5 Viazané a rozptylové stavy

Rovnica (2.76) sa nazýva bezčasová Schrödingerova rovnica. Jej riešením dostaneme všetky možné energie, aké častica môže nadobudnúť v systéme definovanom Hamiltoniánom **H**. Ako uvidíme neskôr, tieto energie môžu vytvárať diskrétne alebo spojité spektrum.

Energie prislúchajúce diskrétnemu spektru zodpovedajú viazaným stavom. Diskrétne energie má napríklad elektrón viazaný k jadru atómu vodíka. Ako vyplýva z názvu, častica vo viazanom stave sa môže pohybovať len v konečnej oblasti priestoru (v potenciálovej jame a v jej bezprostrednom okolí). Viazaným stavom sa budeme podrobne venovať v kapitolách 3, 4 a 5.

Energie v spojitom spektre zodpovedajú rozptylovým (voľným) stavom. Takéto spektrum majú voľné častice. V kvantovej mechanike je zaujímavý rozptyl takýchto častíc na prekážkach. Jednoduché rozptylové úlohy budú riešené v časti 4.2.



Obr. 2.3. Schématické vyjadrenie rovnice kontinuity (2.82). Oblasť (a,b) je vyznačená šrafovaným štvorcom. Pravdepodobnosť, že sa častica nachádza v danej oblasti, sa môže meniť len vtedy, ak častice majú možnosť do oblasti prichádzať alebo z oblasti odchádzať. Túto možnosť vyjadrujú hustoty prúdu pravdepodobnosti $j(a)$ a $j(b)$. Ak pravdepodobnosť nájsť časticu v danej oblasti nezávisí od času, potom musí byť $j(a) = j(b)$, pretože pravdepodobnosť, že častica do danej oblasti vstúpi, sa musí rovnať pravdepodobnosti, že z nej vystúpi.

2.6 Rovnica kontinuity

Zo Schrödingerovej rovnice môžeme odvodiť rovnicu kontinuity. Podobne ako v hydromechanike alebo v elektromagnetizme rovnica kontinuity hovorí, že zmena hustoty častíc v nejakej oblasti priestoru musí byť kompenzovaná prúdom častíc prichádzajúcich alebo odchádzajúcich z tejto oblasti.

Pravdepodobnosť nájsť časticu v oblasti $a \leq x \leq b$ je daná integrálom

$$\int_a^b \mathrm{d}x |\Psi(x,t)|^2 \tag{2.81}$$

Ak sa táto pravdepodobnosť v čase mení, musí to znamenať, že nejaké častice do danej oblasti prichádzajú alebo z nej odchádzajú (obrázok 2.3). Túto zmenu vyjadruje vzťah

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \Psi^* \Psi \mathrm{d}x = j(a) - j(b). \tag{2.82}$$

kde $j(b)$ a $j(a)$ je hustota prúdu pravdepodobnosti cez hranice oblasti (teda v bodoch b a a).

Hustotu prúdu pravdepodobnosti $j(x)$ odvodíme v dodatku B v tvare

$$j(x) = \frac{\hbar i}{2m} \left[\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \tag{2.83}$$

Zmenšovaním intervalu $b - a \to 0$ prepíšeme integrálnu rovnicu (2.82) do diferenciálneho tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2 = -\frac{\partial}{\partial x} j(x) \tag{2.84}$$

V trojrozmernom prípade má rovnica kontinuity tvar

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2 = -\mathrm{div} \vec{j}(x) \tag{2.85}$$

a vektor hustoty prúdu pravdepodobnosti má tvar

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar i}{2m} \Big[\Psi(\vec{r}) \mathbf{grad} \Psi^*(\vec{r}) - \Psi^*(\vec{r}) \mathbf{grad} \Psi(\vec{r}) \Big] \tag{2.86}$$

Ak sa hustota častíc v danej oblasti nemení, potom

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b |\Psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = 0. \tag{2.87}$$

a rovnica (2.82) sa zjednoduší do tvaru

$$j(a) = j(b) \tag{2.88}$$

ktorý definuje zákon zachovania počtu častíc v oblasti $a < x < b$.

2.7 Vlnový balík

V časti 2.1.1 sme definovali vlnovú funkciu voľnej častice,

$$\Psi(x,t) = Ce^{ikx-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2.89}$$

kde $k = p/\hbar$ a energia

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.90}$$

Ukázali sme, že častica s takouto vlnovou funkciou má presne určenú hodnotu hybnosti p, ale pravdepodobnosť, že ju nájdeme v nejakom bode x, je rovnaká pre všetky hodnoty x. Takýto stav nie je realistický. Nemožno predpokladať, že by sa častica nachádzala všade v priestore s rovnakou pravdepodobnosťou. Vlnová funkcia zodpovedajúca častici musí byť priestorovo ohraničená.

Priestorovo ohraničenú vlnovú funkciu skonštruujeme najjednoduchšie ako superpozíciu rovinných vĺn s rôznymi hodnotami vlnového vektora k:

$$\Psi(x,t) = C\int \mathrm{d}k\; P(k)e^{ik(x-x_0)-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{2.91}$$

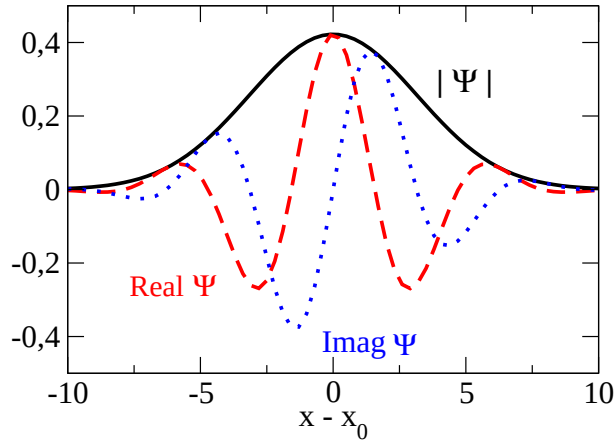
Funkcia $P(k)$ definuje váhu, s akou je rovinná vlna s vlnovým číslom k vo vlnovom balíku zastúpená. Zvoľme napríklad $P(k)$ v tvare Gaussovho rozdelenia

$$P(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}}e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}} \tag{2.92}$$

so strednou hodnotou k_0 a šírkou rozdelenia σ_k. Konštantu C v rovnici (2.91) volíme tak, aby funkcia $\Psi(x,t)$ bola normovaná. Priamym integrovaním[5] nájdeme $|C| = (\sigma_k^2/\pi)^{1/4}$.

Nájdime najprv tvar vlnovej funkcie (2.91) v čase $t = 0$. Po dosadení do integrálu (2.91) a integrovaní dostaneme vlnovú funkciu v tvare

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{\sigma_k^2}{\pi}}\; e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}}\; e^{ik_0(x-x_0)} \tag{2.93}$$



Obr. 2.4. Vlnový balík (2.93) v čase $t = 0$ s parametrami $k_0 = 1$, $\sigma_k = 0{,}1$. Zobrazená je absolútna hodnota vlnovej funkcie aj jej reálna (prerušovaná čiara) a imaginárna (bodkovaná čiara) časť.

Z rovnice (2.93) vidíme, že vlnová funkcia má tvar Gaussovho rozdelenia v priestore (obrázok 2.4). To neprekvapuje, lebo $\Psi(x,0)$ je Fourierovou transformáciou funkcie $P(k)$. Šírka Gaussovho rozdelenia (2.93) je

$$\sigma_x = \frac{1}{\sigma_k} \tag{2.94}$$

v súlade s našou skúsenosťou s Fourierovou transformáciou.

Pre ľubovoľný čas $t > 0$ nájdeme v dodatku D vlnovú funkciu v tvare

$$\Psi(x,t) \propto e^{i\left[k_0(x-x_0)-\frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right]} \exp - \left\{ \frac{[x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m}t]^2}{2\sigma_x^2} \right\} \tag{2.95}$$

kde

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{\sigma_k^2} + i\frac{\hbar t}{m} \tag{2.96}$$

Fázová a grupová rýchlosť

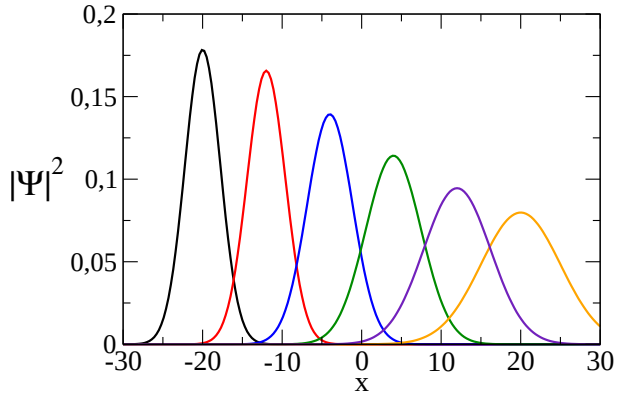
Podobne ako v optike musíme pri opise časového vývoja vlnového balíka rozlišovať medzi fázovou a grupovou rýchlosťou. Fázová rýchlosť udáva zmenu fázy vlnovej funkcie (rýchlosť oscilácií funkcie $\Psi(x,t)$). Je definovaná vzťahom

$$v_\mathrm{f} = \frac{E}{\hbar k}\bigg|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m} \tag{2.97}$$

Porovnaním so vzťahom (2.95) vidíme, že fáza vlnovej funkcie má tvar

$$\phi = k_0 \left[x - x_0 - v_\mathrm{f} t \right] \tag{2.98}$$

[5]Podrobnosti výpočtov z tejto časti sú uvedené v dodatku D.



Obr. 2.5. Pohyb vlnového balíka v priestore. V čase $t = 0$ sa maximum vlnového balíka nachádzalo v bode $x_0 = -20$. S narastajúcim časom sa maximum pohybuje doprava rýchlosťou v_g (rovnica 2.99) a zároveň šírka vlnového balíka narastá v súlade so vzťahom (2.101). Zobrazená je druhá mocnina absolútnej hodnoty vlnovej funkcie. Samotná vlnová funkcia v priestore osciluje podobne ako na obrázku 2.4.

Grupová rýchlosť určuje rýchlosť pohybu maxima vlnového balíka a je definovaná vzťahom

$$v_\mathrm{g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(k)}{\partial k}\bigg|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \tag{2.99}$$

Poloha maxima vlnovej funkcie (2.95) je v čase t daná vzťahom

$$x = x_0 + v_\mathrm{g} t \tag{2.100}$$

a pohybuje sa v priestore grupovou rýchlosťou v_g. Všimnime si, že fázová a grupová rýchlosť majú odlišné hodnoty: $v_\mathrm{f} \neq v_\mathrm{g}$. To je dôsledok toho, že vzťah medzi energiou E a vlnovým vektorom k nie je lineárny.

Rozplývanie vlnového balíka

Šírka vlnového balíka

$$|\sigma_x| = \left[\frac{1}{\sigma_k^4} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right]^{1/4} \tag{2.101}$$

rastie s časom – balík sa rozplýva v priestore (obrázok 2.5). Príčina, prečo sa vlnový balík rozplýva, je daná nelineárnym vzťahom medzi energiou a vlnovým vektorom (rovnica 2.90). Jednotlivé zložky vlnového balíka sa totiž pohybujú rôznymi rýchlosťami.

Samozrejme, môžeme zostrojiť rôzne vlnové balíky. Stačí zvoliť inú funkciu $P(k)$ (príklad 2.11). Konštrukcia vlnového balíka ako superpozície rovinných vĺn s váhou $P(k)$ je výhodná z dvoch dôvodov: umožňuje nám študovať pohyb častice, lokalizovanej v danom čase t v konečnej oblasti priestoru. To rovinná vlna neumožnila, pretože predpokladala rozmiestnenie častice všade. Na druhej strane, výhodou rovinnej vlny je to, že pre ňu vieme nájsť pomerne jednoduché riešenie rozptylových úloh (budeme sa im venovať v kapitole 4). Vďaka princípu superpozície teda môžeme vlnovú funkciu v čase $t = 0$ rozložiť na jednotlivé rovinné vlny, nájsť ich správanie v rôznych časoch, a z týchto riešení si spätne poskladať výslednú vlnovú funkciu v ľubovoľnom čase t. Preto sa v ďalších kapitolách budeme venovať predovšetkým analýze chovania rovinných vĺn.

2.8 Princíp korešpondencie

Kvantová fyzika sa svojím formalizmom aj výsledkami líši od klasickej. To ale neznamená, že klasická fyzika nie je správna. Má len svoje hranice platnosti, za ktorými jej predpovede prestávajú platiť. Obe teórie však spolu úzko súvisia. Tento súvis sme naznačili už pri definícii operátorov: vzťahy medzi operátormi, ktoré reprezentujú dané fyzikálne veličiny, sú také isté, ako vzťahy medzi týmito veličinami v klasickej fyzike. Tento princíp nám umožnil zostrojiť operátory energie a momentu hybnosti.

Kvantová fyzika je predurčená opísať fyzikálne štruktúry, na ktoré klasická fyzika nemá prispôsobený pojmový aparát. Môže sa ale stať, že pre niektoré hodnoty parametrov môžeme vlastnosti študovaného systému nájsť použitím klasickej aj kvantovej fyziky. Vtedy obe teórie musia, samozrejme, dať tie isté výsledky. Tento záver je podstatou princípu korešpondencie. Vzťahom klasickej a kvantovej mechaniky sa budeme podrobnejšie zaoberať v kapitole 11.

2.9 Príklady

2.1. Kvantová častica je opísaná vlnovou funkciou

$$\Psi(x) = Ce^{-x^2/2\xi^2} \tag{2.102}$$

Nájdite normovaciu konštantu C
Riešenie: Z podmienky normovania vlnovej funkcie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x|\Psi(x)|^2 = 1 \tag{2.103}$$

dostaneme podmienku pre konštantu C:

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x e^{-x^2/\xi^2} = |C|^2\sqrt{\pi\xi^2} = 1 \tag{2.104}$$

Pri výpočte integrálu sme využili známy Laplaceov integrál (rovnica C.5). Z posledného vzťahu dostaneme pre reálne hodnoty C vyjadrenie

$$C = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\xi}} \tag{2.105}$$

2.2. Kvantová častica sa môže pohybovať na úsečke $0 \leq x \leq \ell$ a je opísaná vlnovou funkciou

$$\Psi(x,t) = C\sin\left[\frac{\pi}{\ell}xn\right]e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{2.106}$$

a) Nájdite energiu E_n.
b) Nájdite konštantu C.
c) Nájdite pravdepodobnosť, s akou sa častica nachádza v intervale $0 \leq x \leq \ell/2$.
Riešenie: a) Po dosadení do časovej Schrödingerovej rovnice (2.75) dostaneme

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2}\pi^2 n^2 \tag{2.107}$$

b) Konštantu C nájdeme z podmienky normovanosti vlnovej funkcie,

$$\int_0^\ell \mathrm{d}x|\Psi(x)|^2 = |C|^2 \int_0^\ell \mathrm{d}x \sin^2 \frac{\pi n x}{\ell} = |C|^2 \frac{\ell}{2} = 1 \tag{2.108}$$

a teda $C = \sqrt{2/\ell}$.
c) Pravdepodobnosť nájdenia častice na intervale $0 \leq x \leq L/2$ môžeme nájsť integrovaním

$$P = \int_0^{L/2} \mathrm{d}x\, |\Psi(x)|^2 = \frac{1}{2} \tag{2.109}$$

ale aj priamo, ak si uvedomíme, že vlnová funkcia je symetrická vzhľadom na zrkadlenie okolo stredu intervalu. Preto sa častica vyskytuje s rovnakou pravdepodobnosťou v ľavej aj v pravej polovici intervalu.

2.3. Nájdite podmienku, kedy sa pravdepodobnosť prechodu kvantovej častice cez dve prekážky rovná jednej.
Riešenie: Dosaďme do výrazu (2.20) $T_1 = 1 - R_1$ a $T_2 = 1 - R_2$. Z rovnice $T_{12} = 1$ dostaneme

$$\cos\phi = \frac{R_1 + R_2}{2\sqrt{R_1 R_2}} \tag{2.110}$$

Pre tieto hodnoty fázy prekoná kvantová častica obe prekážky s pravdepodobnosťou jedna.

2.4. Uvažujme dve bariéry s pravdepodobnosťami prechodu $T_1 = T_2 = 0{,}001$. Nájdite klasickú pravdepodobnosť prechodu cez dve bariéry. [$T_{12} = 0{,}0005$]

2.5. Nájdite fázu ϕ pre ktorú sa kvantová pravdepodobnosť prechodu cez dve bariéry z predchádzajúceho príkladu 2.4 rovná jednej. [$\cos\phi = 0{,}999$]

2.6. Všimnite si, že komutácia operátorov nie je asociatívna: z rovníc $[\mathbf{A},\mathbf{B}] = 0$ a $[\mathbf{B},\mathbf{C}] = 0$, vo všeobecnosti nevyplýva, že platí $[\mathbf{A},\mathbf{C}] = 0$. Uveďte príklad takej trojice operátorov.
Riešenie: Najjednoduchším príkladom je operátor $\mathbf{B}$, ktorý každú funkciu násobí konštantou,

$$\mathbf{B} f(x) = b f(x) \tag{2.111}$$

Takýto operátor očividne komutuje s ľubovoľným operátorom. Prvé dva komutačné vzťahy sú teda splnené automaticky, ale to samozrejme nezaručuje platnosť tretieho. Fyzikálnym príkladom je operátor celkového momentu hybnosti $\mathbf{L}$, ktorý komutuje so všetkými troma operátormi $\mathbf{L}_x$, $\mathbf{L}_y$ aj $\mathbf{L}_z$. Tieto tri operátory však vzájomne nekomutujú. (pozri rovnicu 2.56)

2.7. Voľná častica má vlnovú funkciu $\Psi(x) = Ae^{i\frac{px}{\hbar}}$. Nájdite zodpovedajúci prúd hustoty pravdepodobnosti [$j = (p/m)|A|^2$].

2.8. Vlnová funkcia má tvar

$$\Psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \tag{2.112}$$

Nájdite prúd hustoty pravdepodobnosti.
Riešenie: Po dosadení do definičného vzťahu (2.83) dostaneme

$$j = \frac{p}{m}\left[|A|^2 - |B|^2\right] \tag{2.113}$$

Prúd je preto úmerný rýchlosti častíc ($v = p/m$) a rozdielu $|A|^2 - |B|^2$, ktorý definuje rozdiel medzi hustotou častíc pohybujúcich sa v kladnom a v zápornom smere osi x.

2.9. Vlnová funkcia klesá exponenciálne, $\Psi(x) = Ae^{-\kappa x}$. Nájdite prúd hustoty pravdepodobnosti.
Riešenie: Po dosadení do definičného vzťahu (4.38) dostaneme

$$j \equiv 0 \tag{2.114}$$

Exponenciálne klesajúca vlna neprenáša prúd.

2.10. Vlnová funkcia je v oblasti $a \leq x \leq b$ superpozíciou dvoch exponenciálnych funkcií,

$$\Psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{+\kappa x} \tag{2.115}$$

Nájdite prúd hustoty pravdepodobnosti.
Riešenie: Po dosadení do vzťahu (4.38) a výpočte derivácií dostaneme nenulový prúd

$$j = \frac{\hbar\kappa}{m} \times i(G^*F - F^*G) \tag{2.116}$$

Lineárna kombinácia dvoch exponenciálnych funkcií preto dáva nenulový prúd hustoty pravdepodobnosti. Tento výsledok je dôležitý pre pochopenie procesu tunelovania častice cez vysokú potenciálnu bariéru (časť 4.3).

2.11. Nájdite tvar vlnového balíka, ak spektrum k je dané vzťahom

$$p_1(k) = \frac{1}{2}\left[\delta(k - k_0) + \delta(k + k_0)\right] \tag{2.117}$$

alebo

$$p_2(k) = \frac{1}{2k_0}\begin{cases} 1 & |k| < k_0 \\ 0 & |k| > k_0 \end{cases} \tag{2.118}$$

alebo

$$p_3(k) = \frac{1}{k_0^2}\begin{cases} k + k_0 & -k_0 \leq k \ \leq 0 \\ k_0 - k & 0 \leq k \ \leq k_0 \end{cases} \tag{2.119}$$

Ktorý z týchto balíkov je v x priestore najužší? Aká bude x-ová závislosť vlnovej funkcie, ak

$$p_3(k) = \frac{1}{k_0^{n+1}}\begin{cases} (k + k_0)^n & -k_0 \leq k \ \leq 0 \\ (k_0 - k)^n & 0 \leq k \ \leq k_0 \end{cases} \tag{2.120}$$

a n je celé číslo?
Riešenie: Integrovanie dá

$$\Psi_1(x) = \cos(k_0 x) \tag{2.121}$$

$$\Psi_2(x) = \frac{\sin k_0 x}{k_0 x} \tag{2.122}$$

a nakoniec

$$\Psi_3(x) = 2\frac{\sin^2(k_0 x/2)}{(k_0 x)^2}. \tag{2.123}$$

KAPITOLA 3

Nekonečne hlboká pravouhlá potenciálová jama

Najjednoduchším viazaným stavom je kvantová častica viazaná v nekonečne hlbokej potenciálovej jame. Preskúmame najprv jednorozmernú jamu a nájdeme všetky viazané stavy. Určenie viazaného stavu znamená nájsť jeho energiu a vlnovú funkciu. Po analýze jednorozmerného prípadu preštudujeme dvojrozmernú jamu. Ukážeme, že metódou separácie premenných môžeme problém transformovať na problém dvoch jednorozmerných jám – jednu v smere x a druhú v smere y. Rovnako nájdeme všetky viazané stavy trojrozmernej potenciálovej jamy.

Hoci nekonečne hlboká jama vyzerá na prvý pohľad ako abstraktný pojem, má priame aplikácie vo fyzike. Napríklad vodivostné elektróny v kove sú viazané na objem kovu. Výstupná práca – energia, potrebná na uvoľnenie elektrónu z povrchu kovu – je príliš veľká na to, aby elektrón bez vplyvu vonkajších síl bol schopný opustiť kov. Elektrón v kove preto môžeme, v najjednoduchšom prípade, študovať ako kvantovú časticu viazanú v nekonečne hlbokej trojrozmernej potenciálovej jame. Na konci tejto časti ukážeme, ako z takejto jednoduchej predstavy môžeme odvodiť dôležité závery pre elektrónové vlastnosti kovov.

3.1 Jednorozmerná nekonečne hlboká potenciálová jama

Uvažujme kvantovú časticu uväznenú v nekonečne hlbokej potenciálovej jame: Potenciálna energia častice je nekonečne veľká v oblastiach $x < 0$ a $x > \ell$, a je nulová v oblasti $0 \leq x \leq \ell$.

V oblasti s nekonečným potenciálom sa častica nikdy nachádzať nemôže, preto je tu jej vlnová funkcia nulová. V oblasti $0 \leq x \leq \ell$ je potenciálna energia nulová a vlnová funkcia spĺňa bezčasovú Schrödingerovu rovnicu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x)}{\partial x^2} = E\Phi(x) \tag{3.1}$$

Vlnová funkcia musí byť spojitá všade v priestore, preto na hranici jamy musí platiť

$$\Phi(x = 0) = 0 \tag{3.2}$$

a

$$\Phi(x = \ell) = 0 \tag{3.3}$$

Podmienku pre spojitosť prvej derivácie vlnovej funkcie nemôžeme použiť, pretože potenciál na hranici jamy má nekonečne veľkú nespojitosť.

Všeobecné riešenie rovnice (3.1) bude mať tvar

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{3.4}$$

kde A a B sú ľubovoľné konštanty. Po dosadení do rovnice (3.1) dostaneme vzťah medzi vlnovým vektorom k a energiou častice,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{3.5}$$

Konštanty A a B určíme z okrajových podmienok (3.2) a (3.3). Z prvej okrajovej podmienky (3.2) dostaneme $A + B = 0$, a teda $A = -B$. Dosadením do (3.4) vyjadríme vlnovú funkciu v tvare

$$\Psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = 2iA\sin kx \tag{3.6}$$

Z druhej okrajovej podmienky (3.3) získame $\Psi(x = \ell) = 2iA\sin k\ell = 0$. Tejto podmienke vyhovujú len hodnoty vlnového vektora

$$k_n = \frac{\pi n}{\ell}, \qquad n = 1,2,3,\ldots \tag{3.7}$$

Ak tieto hodnoty dosadíme do rovnice (3.1), dostaneme zodpovedajúce hodnoty energie

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}n^2 = E_1 n^2, \qquad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2} \tag{3.8}$$

Energie (3.8) sú jediné možné energie, ktoré kvantová častica v nekonečnej jame môže nadobúdať.

Konštantu A určíme z normovacej podmienky

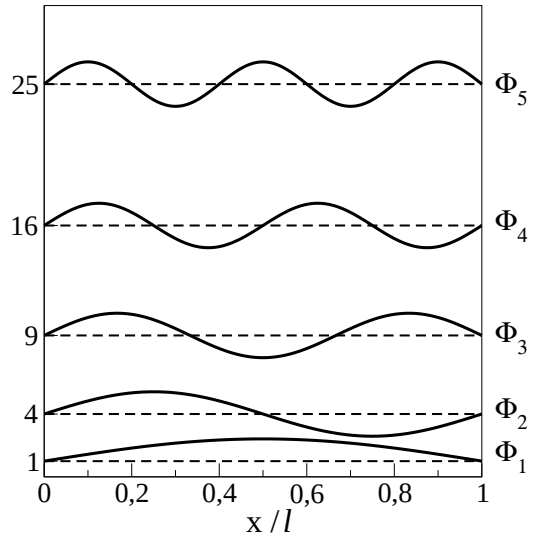
$$\int_0^\ell |\Phi_n(x)|^2 dx = 1 \tag{3.9}$$

z ktorej plynie $A = -i/\sqrt{2\ell}$. Vlnová funkcia n-tého vlastného stavu $\Phi_n(x)$ má preto tvar

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}}\,\sin\frac{n\pi x}{\ell} \tag{3.10}$$

(pozri aj príklad 2.2). Vlnová funkcia $\Phi_n(x)$ je formálne totožná s výchylkou struny dĺžky ℓ, uchytenej na oboch koncoch. To neprekvapuje, ak si uvedomíme, že rovnica (3.1) je formálne totožná s vlnovou rovnicou pre akustickú vlnu šíriacu sa pozdĺž jednorozmernej struny.

Z nášho riešenia plynie, že kvantová častica má v potenciálovej jame vždy nenulovú energiu. Uvidíme neskôr, že tento výsledok je typický pre všetky potenciálové jamy. Na rozdiel od klasickej častice, ktorá môže ležať na dne jamy, kvantová častica nikdy nemôže mať nulovú



Obr. 3.1. Vlastné vlnové funkcie zodpovedajúce prvým piatim stavom v nekonečnej pravouhlej potenciálovej jame ako funkcia polohy x/ℓ. Prerušované horizontálne čiary označujú vlastné energie vydelené energiou E_1.

energiu. Tento záver môžeme odvodiť aj z princípu neurčitosti. Častica v jame sa určite nachádza medzi bodmi $x = 0$ a $x = \ell$. Najväčšia možná neurčitosť jej polohy je preto

$$\Delta x = \ell/2 \tag{3.11}$$

Neurčitosť jej hybnosti musí byť $\Delta p \geq \hbar/\Delta x = 2\hbar/\ell$. Samotná hybnosť musí byť porovnateľná s neurčitosťou hybnosti, preto minimálnu energiu kvantovej častice v jame môžeme odhadnúť vzťahom

$$E_{\min} \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4}{\ell^2} \tag{3.12}$$

ktorý súhlasí (až na konštantu úmernosti) s energiou E_1. Kvantová častica teda musí mať v potenciálovej jame nenulovú hybnosť a nenulovú kinetickú energiu.

Dôležité je uvedomiť si typické hodnoty viazaných energií a ich závislosť od šírky potenciálovej jamy. Napríklad pre elektrón s hmotnosťou $m = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg sa energia základného stavu v jame šírky ℓ rovná (v Jouloch)

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\frac{1}{\ell^2} = \frac{6{,}03 \times 10^{-38}}{\ell^2}\ \mathrm{J} \tag{3.13}$$

Rozdiely medzi dvomi najbližšími vlastnými energiami sú

$$\Delta_n = E_{n+1} - E_n = (2n+1)E_1 \tag{3.14}$$

Pre jamy šírky $\ell = 1$ m alebo 1 mm nemôžeme takúto energiu E_1 ani rozdiely Δ_n experimentálne pozorovať (príklad 3.1). Preto v klasickom svete kvantovanie energie nepozorujeme. Typickou dĺžkovou škálou kvantového sveta však nie je jeden meter, ale jeden Angstrőm

$$1\ \mathrm{A} = 10^{-10}\ \mathrm{m} \tag{3.15}$$

V takejto úzkej jame by elektrón mal energiu základného stavu

$$E_1 = 6{,}03 \times 10^{-18}\ \mathrm{J} = 37{,}6\ \mathrm{eV} \qquad (\ell = 1\ \mathrm{A}) \tag{3.16}$$

ktorá je dostatočne veľká na to, aby mohla byť experimentálne pozorovateľná (pripomeňme, že energie fotónov v oblasti viditeľného svetla sú $2 - 3$ eV).

3.2 Dvojrozmerná nekonečne hlboká jama

Podobne ako v jednorozmernej nekonečnej jame, v dvojrozmernej nekonečnej potenciálovej jame je kvantová častica viazaná na oblasť

$$0 \leq x \leq \ell, \qquad 0 \leq y \leq \ell \tag{3.17}$$

Vlnová funkcia $\Psi(x,y)$ je preto nenulová len v tejto oblasti, a musí byť nulová na hranici. Bezčasová Schrödingerova rovnica má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x,y)}{\partial y^2} = E\Phi(x,y) \tag{3.18}$$

3.2.1 Metóda separácie premenných

Riešenie rovnice (3.18) nájdeme metódou separácie premenných. Vlnovú funkciu napíšeme v tvare súčinu

$$\Phi(x,y) = X(x)Y(y) \tag{3.19}$$

dvoch funkcií, z ktorých $X(x)$ je funkciou len premennej x, a funkcia $Y(y)$ je funkciou len premennej y. Dosadením do rovnice (3.18) a vydelením oboch strán rovnice funkciou $X(x)Y(y)$ dostaneme

$$-\frac{1}{X(x)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = E + \frac{1}{Y(y)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial x^2} \tag{3.20}$$

Ľavá strana rovnice je funkciou len x, zatiaľ čo pravá strana je funkciou len y. Aby rovnosť (3.20) platila pre ľubovoľné hodnoty premenných x a y, musia sa obe strany rovnať konštante, nezávislej na x a y. Musí teda platiť

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = E_{n_x}X(x) \tag{3.21}$$

a zároveň

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial x^2} = (E - E_{n_x})Y(y) \tag{3.22}$$

Rovnice (3.21) a (3.22) sú formálne identické s rovnicou (3.1). Môžeme preto priamo napísať ich riešenia:

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}}\sin\frac{n_x\pi x}{\ell} \qquad Y(y) = \sqrt{\frac{2}{\ell}}\sin\frac{n_y\pi y}{\ell} \tag{3.23}$$

kde kvantové čísla n_x a n_y nadobúdajú hodnoty 1,2 ... Energie E_{n_x} a E_{n_y} sú dané vzťahmi

$$E_{n_x} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}n_x^2 \qquad E_{n_y} = E - E_{n_x} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}n_y^2 \tag{3.24}$$

Riešením rovnice (3.18) sú teda funkcie

$$\Phi_{n_x,n_y} = \frac{2}{\ell}\sin\frac{n_x\pi x}{\ell}\sin\frac{n_y\pi y}{\ell} \tag{3.25}$$

s vlastnými energiami

$$E_{n_x,n_y} = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}(n_x^2 + n_y^2) \tag{3.26}$$

Každý stav je charakterizovaný dvojicou kvantových čísel $n = (n_x,n_y)$.

3.2.2 Degenerácia energetických hladín

Všimnime si, že rôznym dvojiciam kvantových čísel zodpovedá tá istá hodnota energie. Napríklad stavy $n = (n_x,n_y) = (1,2)$ a $(2,1)$ majú tú istú energiu $E_{1,2} = E_{2,1} = 5\pi^2\hbar^2/(2m\ell^2)$. Napriek tomu, že majú rovnakú energiu, ich vlnové funkcie sú na seba ortogonálne, čo vidieť z ich vyjadrenia (3.25) a z príkladu 3.10.

Energetické hladiny, ktoré prislúchajú viacerým stavom, sa nazývajú degenerované. Degenerácia energetických hladín je vždy dôsledkom symetrie systému. Naša dvojrozmerná potenciálová jama je napríklad symetrická vzhľadom na otočenie o uhol $\pi/2$ okolo osi z. Skutočne, táto transformácia len zmení označenie osí x a y. Je preto jasné, že stavy s kvantovými číslami $(n_x,n_y) = (n_1,n_2)$ a $(n_x,n_y) = (n_2,n_1)$ musia mať rovnakú energiu. Degenerácia sa stratí, ak symetriu jamy narušíme – napríklad ak budeme uvažovať potenciálovú jamu rozmerov $\ell_x \neq \ell_y$.

Okrem degenerácie spôsobenej symetriou problému sa niekedy vyskytuje aj náhodná degenerácia (pozri príklad 3.14).

3.3 Trojrozmerná nekonečná potenciálová jama

Schrödingerovu rovnicu pre trojrozmernú potenciálovú jamu vyriešime metódou separácie premenných analogicky ako dvojrozmernú. Uvedieme preto len výsledok pre vlastné energie

$$E_n = E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right] \tag{3.27}$$

Zložky vlnového vektora $\vec{k} = (k_x, k_y a k_z)$ sú kvantované – môžu nadobúdať len diskrétne hodnoty,

$$k_x = \frac{\pi}{\ell}n_x, \qquad k_y = \frac{\pi}{\ell}n_y, \qquad k_z = \frac{\pi}{\ell}n_z, \tag{3.28}$$

a sú vždy kladné.

3.4 Elektrónový plyn v kove

Trojrozmerná nekonečná potenciálová jama predstavuje dobrý model pre vysvetlenie základných vlastností voľných elektrónov pohybujúcich sa v kove. Najjednoduchšia predstava o kove je založená na tom, že atómy kovu sú usporiadané do pravidelnej kryštalickej mriežky (uvažujme kubickú mriežku s mriežkovou konštantou a). Každý atóm uvoľní do objemu kovu jeden elektrón. V uzloch kryštalickej mriežky sa teda nachádzajú kladné ióny. Záporne nabité elektróny sa voľne pohybujú v objeme kovu. Kladný náboj iónov odtieni elektrické pole medzi elektrónmi, preto môžeme predpokladať, že hoci sú elektróny záporne nabité, medzi sebou neinteragujú. Elektróny sa tak môžu voľne pohybovať vo vnútri kovu. Nemôžu ho ale opustiť, pretože sú v kove udržiavané príťažlivou elektrostatickou väzbou s iónmi. Dospeli sme tak k predstave elektrónového plynu. Ak máme kovovú vzorku kovu v tvare kocky s hranou ℓ, potom sa v ňom pohybuje $N = (\ell/a)^3$ elektrónov.

Pre voľné elektróny platí disperzný vzťah medzi energiou a vlnovým vektorom

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.29}$$

Pre ďalšie štúdium elektrónových vlastností kovu je podstatné, že elektróny sú fermióny. Preto každý energetický stav n_x,n_y,n_y s energiou $E_{n_x n_y n_z}$ môže byť obsadený len dvoma elektrónmi s opačnou orientáciou spinu. Energetické hladiny v trojrozmernej jame sa preto budú postupne obsadzovať od najnižšej hladiny. Najvyššia možná energia, ktorú elektróny obsadia, sa volá Fermiho energia. V rámci nášho modelu odvodíme vzťah pre Fermiho energiu a pre hustotu stavov elektrónov.

3.4.1 Hustota stavov

Definujme hustotu stavov $\rho(E)$ ako počet dovolených stavov s energiami ležiacimi v intervale medzi energiami E a $E + \mathrm{d}E$ (pre nekonečne malú hodnotu $\mathrm{d}E \to 0$). Pretože počet takýchto stavov musí byť úmerný objemu, budeme uvažovať len počet stavov pripadajúci na jednotku objemu.

Pre výpočet hustoty stavov je potrebné nájsť hustotu stavov v k-priestore (pozri dodatok G). Hustotu elektrónových stavov v kove $\rho(E)$ môžeme nájsť, ak využijeme disperzný vzťah (3.29) a vzťah medzi hustotou stavov v k-priestore

$$\rho(k) = \frac{k^2}{2\pi^2} \tag{3.30}$$

známou z rovnice (G.7), a hustotou stavov energie:

$$\rho(E)\mathrm{d}E = 2\rho(k)\mathrm{d}k \tag{3.31}$$

Pravú stranu sme násobili dvoma, pretože uvažujeme elektróny, ktoré sa okrem energie môžu líšiť aj dvoma orientáciami svojho spinu (rovnica G.13). Dostaneme

$$\rho(E)\mathrm{d}E = 2\rho(k)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\,\mathrm{d}E \tag{3.32}$$

Z disperzného vzťahu (3.29) nájdeme

$$\frac{\partial k}{\partial E} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{E}} \tag{3.33}$$

Dosadením za $\rho(k) = k^2/(2\pi^2)$ (rovnica 3.30). dostaneme hustotu stavov

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E} \tag{3.34}$$

3.4.2 Fermiho energia

Pretože elektróny sú fermióny, obsadzujú voľné energetické hladiny od najnižšej hladiny. Ak je v kove N vodivostných elektrónov, zaplnia postupne všetky najnižšie možné energie. Najvyššiu energia, ktorá bude elektrónmi obsadená, je Fermiho energia E_F. Energia E_F má kľúčovú úlohu pri štúdiu elektrónového transportu. Jej hodnotu môžeme nájsť, ak poznáme hustotu stavov $\rho(E)$.

Uvažujme kov tvaru kocky so stranou ℓ. Počet elektrónov, ktoré sa v kocke s objemom ℓ^3 voľne pohybujú, sa rovná

$$N = \left(\frac{\ell}{a}\right)^3 \tag{3.35}$$

kde a je mriežková konštanta. Definujme aj počet elektrónov, ktorý pripadá na jednotku objemu

$$n = \frac{N}{\ell^3} = \frac{1}{a^3} \tag{3.36}$$

Celkový počet povolených stavov elektrónov v jednotke objemu $n = N(E_F)/\ell^3$ môžeme nájsť aj zo známej hustoty elektrónových stavov (3.34). Ak elektróny obsadili všetky energetické hladiny od nuly až po Fermiho energiu, potom sa počet elektrónov v jednotke objemu rovná integrálu

$$\int_0^{E_F} \rho(E)\mathrm{d}E = n \tag{3.37}$$

Dosaďme za hustotu stavov $\rho(E)$ z rovnice (3.34) a po integrovaní dostaneme rovnicu

$$\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = n \tag{3.38}$$

z ktorej nájdeme

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\right)^{2/3} n^{2/3} \tag{3.39}$$

Ak dosadíme $n = a^{-1/3}$, dostaneme po úprave

$$E_F = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{3.40}$$

Fermiho energia sa teda, až na číselný faktor $(3/\pi)^{2/3} = 0{,}9697$, rovná energii základného stavu častice viazanej v nekonečnej jednorozmernej potenciálovej jame šírky a (mriežková konštanta kovu). To, samozrejme, neznamená, že Fermiho energia má niečo spoločné s jednorozmernou potenciálovou jamou. Poukazuje len na to, že vo vyjadrení základných veličín sa v kvantovej mechanike často vyskytujú výrazy typu $\hbar^2/(2m)$. Typická hodnota Fermiho energie pre kovy je $E_F = 2 - 10$ eV [22] (pozri tabuľku 3.1).

3.5 Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkcia

Hustota stavov, podľa svojej definície, udáva počet kvantových stavov systému, $\rho(E)\mathrm{d}E$ ktoré majú energiu v úzkom energetickom intervale medzi energiami E a $E + \mathrm{d}E$. Hustota stavov je daná len vlastnosťami kvantového systému.

Pri konečnej teplote elektróny môžu získať vyššiu energiu z tepelných fluktuácií, čo samozrejme ovplyvňuje energetické rozdelenie elektrónov. Túto skutočnosť zohľadňuje Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkciu $f_F(E)$, ktorá definuje stredný počet častíc, schopných pri teplote T obsadiť jeden konkrétny stav s danou energiou E. Fermi-Diracova rozdeľovacia funkcia má tvar

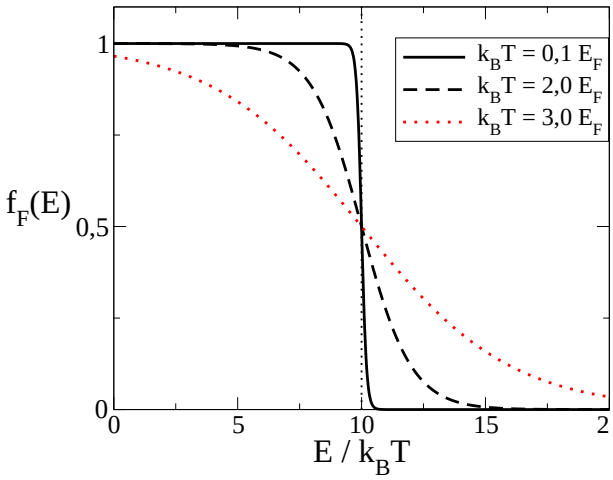
$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \tag{3.41}$$

Jej závislosť od energie je ukázaná na obrázku 3.2 pre tri rôzne teploty T. Pri konečnej teplote je potom stredný počet elektrónov s energiou v intervale E a $E + \delta E$, daný súčinom

$$n(E)\mathrm{d}E = f_F(E)\rho(E)\mathrm{d}E \tag{3.42}$$

3.6 Priestorové kvantovanie v mezoskopickej fyzike

Kvantovanie energetických hladín opísané v tejto kapitole v našom makroskopickom svete nevnímame. Elektrónov je tak veľa, že susedné obsadené hladiny ležia veľmi blízko pri sebe. Ak však budeme rozmery vzorky zmenšovať až na niekoľko nanometrov, kvantovanie energetických hladín sa prejaví a podstatným spôsobom ovplyvní elektrónové vlastnosti takejto štruktúry. Vzorky, ktoré majú jeden alebo viac rozmerov rádovo len niekoľko nanometrov, už nemôžeme



Obr. 3.2. Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkcia pre elektróny (rovnica 3.41) pre tri rôzne teploty. V limite $T \to 0$ dostaneme $f_F(E) = 1$ ak $E \leq E_F$, a $f_E \equiv 0$ pre energie $E > E_F$. Vtedy sú obsadené všetky stavy pod Fermiho energiou. Pre teploty $T > 0$ sa prechod medzi obsadenými a neobsadenými stavmi rozmaže. Typická šírka prechodu je $\Delta E \sim k_B T$. Pretože Fermiho energie v kovoch majú hodnotu niekoľko elektrónvoltov, je $\Delta E \ll E_F$.

považovať za makroskopické. Nie sú však ani mikroskopické, pretože sú zložené z veľkého počtu atómov. Označujú sa preto ako mezoskopické.

Základnou črtou mezoskopických systémov je priestorové kvantovanie energetických hladín elektrónov. Nebudeme na tomto mieste podrobne analyzovať mezoskopické systémy. Obmedzíme sa len na ich základné vlastnosti.

Kvantová bodka

Kvantové bodky sú malé trojrozmerné štruktúry (typický rozmer v jednom smere je od 1 do 10 nanometrov). Vďaka malým priestorovým rozmerom kvantových kociek sú energie elektrónov v kvantovej bodke diskrétne. Pretože sa obyčajne vyrábajú z polovodičov, je počet voľných elektrónov menší ako počet atómov, z ktorých je bodka zložená. Vhodnou voľbou rozmerov kvantovej bodky možno modifikovať energetické hladiny elektrónov dané vzťahom (3.27).

Vlastnosti najmenších kvantových bodiek nedokážeme opísať bez uváženia vzájomnej interakcie medzi elektrónmi. V priestore bodky si totiž ťažko môžeme predstaviť homogénne kladné pozadie, vytvorené kladnými iónmi, ako sme to urobili v prípade makroskopického kryštálu.

Pohyb elektrónu v kvázi-jednorozmernom vodiči

Uvažujme dlhý tenký drôt dĺžky ℓ_z a konečného štvorcového prierezu $\ell_x \times \ell_y$. Dĺžka drôtu je oveľa väčšia ako jeho šírka v smere x a y (ℓ_x,$\ell_y \ll \ell_z$). Nájdime možné energie elektrónu v takomto drôte.

Pokiaľ je šírka drôtu dostatočne malá, bude pohyb elektrónu v oboch priečnych smeroch x a y kvantovaný. V smere osi z je energia E_z spojitá (drôt je dostatočne dlhý na to, aby sme rozdiely medzi kvantovanými hladinami v smere osi z mohli zanedbať). Takéto drôty sa označujú za kvázi-jednorozmerné.

Energiu elektrónu v kvázi-jednorozmernom vodiči vyjadríme v tvare

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell_x^2}\, n_x^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell_y^2}\, n_y^2 + \frac{p_z^2}{2m} \tag{3.43}$$

Energia závisí od dvoch kvantových čísel n_x a n_y a od hybnosti elektrónu v smere osi z. Pretože drôt je nekonečne dlhý, nadobúda hybnosť p_z spojité hodnoty.[1]

Aby sa elektrón mohol pohybovať pozdĺž drôtu, musí byť energia E_z pohybu pozdĺž drôtu kladná, teda

$$E_z = \frac{p_z^2}{2m} > 0 \tag{3.44}$$

Porovnaním s rovnicou (3.43) dostaneme podmienku pre kvantové čísla n_x a n_y

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell_x^2}\, n_x^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell_y^2}\, n_y^2 \;<\; E \tag{3.45}$$

[1] Geometria kvázi-jednorozmerných drôtov pripomína geometriu optických vlákien. V optických vláknach sa elektromagnetické žiarenie s frekvenciou ν šíri pozdĺž vlákna. Počet povolených módov je daný pomerom vlnovej dĺžky k priemeru vlákna. Na rozdiel od mezoskopických štruktúr, optické vlákna majú kruhový prierez. Pre určenie vlastných módov preto musíme riešiť vlnovú funkciu v cylindrických súradniciach a pole v priereze vlákna vyjadriť pomocou Besselových funkcií.

Pre danú energiu elektrónu E je táto podmienka splnená len pre niekoľko najnižších kvantových čísel n_x a n_y. Pre kvázi-jednorozmerné drôty je preto typické, že elektrón s energiou E sa môže nachádzať len v niekoľkých od seba odlíšiteľných stavoch. Tieto stavy sú určené kvantovými číslami n_x a n_y. V dvoch stavoch a rôznymi hodnotami n_x a n_y má elektrón tú istú celkovú energiu E, ale vo všeobecnosti rôznu energiu E_z, a preto sa pozdĺž drôtu pohybuje rôznou rýchlosťou.

Najzaujímavejšie vlastnosti kvázi-jednorozmerných drôtov súvisia s ich elektrickou vodivosťou. Experimenty ukázali, že merná elektrónová vodivosť v mezoskopických drôtoch je kvantovaná v jednotkách

$$2\frac{e^2}{h} = \frac{e^2}{\pi\hbar} = 7{,}746 \times 10^{-5}\ \frac{\mathrm{C}^2}{\mathrm{Js}} \tag{3.46}$$

Drôt dĺžky L bude mať mernú vodivosť rovnú

$$\sigma = \frac{e^2}{\pi\hbar} \times \mathcal{N} \tag{3.47}$$

kde $\mathcal{N}$ je počet povolených dvojíc (n_x,n_y). V reálnej mezoskopickej vzorke prispievajú k vodivosti elektróny s Fermiho energiou $E = E_F$. Pre danú mezoskopickú vzorku možno Fermiho energiu meniť, a tým meniť aj počet povolených módov $\mathcal{N}$ v drôte. Experimentálne tak možno pozorovať skokovú zmenu elektrickej vodivosti [24–26].

3.7 Príklady

3.1. Nájdite energiu základného stavu elektrónu v nekonečnej potenciálovej jame šírky a) $\ell = 1$ m, b) $\ell = 1$ mm, c) $\ell = 1$ μm [návod: pozri rovnicu (3.13)].
Riešenie: Z rovnice (3.2) dostaneme energie základného stavu a) 6×10^{-38} J, b) 6×10^{-32} J, c) 6×10^{-26} J.

3.2. Aké kvantové energie by mala guľôčka hmotnosti $m = 10^{-3}$ g, uväznená v nekonečnej potenciálovej jame šírky $\ell = 1\mu$m?
Riešenie: Pre $n = 1$ dostaneme $E_1 = 5{,}487 \times 10^{-50}$ J. Vyššie vlastné energie sú $E_n = E_1 n^2$. Porovnaním energie E_1 s výsledkom príkladu 3.1 c) vidíme, že energia základného stavu klesá, keď hmotnosť častice rastie.

3.3. Aká musí byť šírka jednorozmernej nekonečnej potenciálovej jamy, aby elektrón, ktorý je v nej uväznený, mal základný stav $E_1 = 1$ eV?
Riešenie: Šírku jamy vyjadríme z energie elektrónu (rovnica 3.8)

$$\ell = \sqrt{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mE}} \tag{3.48}$$

Pre $E = 1$ eV dostaneme $\ell = 0{,}613 \times 10^{-9}$ m

3.4. Aká musí byť šírka trojrozmernej nekonečnej potenciálovej jamy, aby elektrón, ktorý je v nej uväznený, mal základný stav $E_1 = 1$ eV? [$\ell = 1{,}062$ nm]

3.5. Nakreslite hustotu pravdepodobnosti častice viazanej v jednorozmernej nekonečnej potenciálovej jame šírky ℓ, ak je častica v stave: a) E_1 b) E_4. [Pozri obrázok 3.3]

3.6. Nájdite strednú hodnotu polohy a hybnosti kvantovej častice v nekonečnej potenciálovej jame.
Riešenie: Stredná hodnota polohy v n-tom stave je daná

$$\langle x\rangle = \int_0^\ell \mathrm{d}x\ \Phi_n^*(x)x\Phi_n(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{\ell}\int_0^\ell \mathrm{d}x\ x\sin^2\frac{n\pi x}{\ell} = \frac{\ell}{2} \tag{3.49}$$

Tento výsledok sme mohli napísať aj bez výpočtu, pretože častica sa s rovnakou pravdepodobnosťou vyskytuje v pravej aj ľavej časti jamy. Stredná hodnota hybnosti v n-tom stave je daná

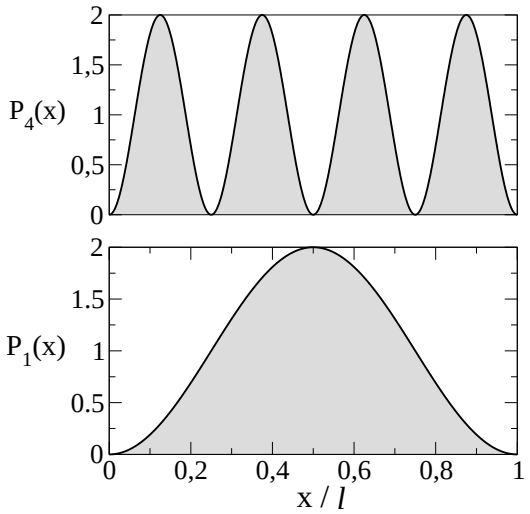
$$\langle p\rangle = \int_0^\ell \mathrm{d}x\Phi_n^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Phi_n(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{\ell}\frac{n\pi\hbar}{i\ell}\int_0^\ell \mathrm{d}x\sin\frac{n\pi x}{\ell}\cos\frac{n\pi x}{\ell} = 0 \tag{3.50}$$

čo tiež súhlasí s našou intuíciou. Vlnová funkcia (3.10) je totiž superpozíciou dvoch vĺn pohybujúcich sa v opačných smeroch.

3.7. Vypočítajte strednú hodnotu $(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$ v n-tom stave $\left[\frac{\ell^2}{12}\left(1-\frac{6}{\pi^2 n^2}\right)\right]$.

3.8. Vypočítajte strednú hodnotu $(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$ v n-tom stave $[n^2\pi^2\hbar^2/\ell^2]$.

3.9. Do nekonečne hlbokej potenciálovej jamy vsunieme v bode $x = \ell/3$ nepriepustnú nekonečne tenkú bariéru. Ktoré vlastné stavy túto operáciu prežijú?
Riešenie: Nepriepustná bariéra znamená, že vlnová funkcia v bode $x = \ell/3$ musí byť nulová. Prežijú preto len stavy, ktoré mali vlnovú funkciu $\Psi_n(x = \ell/3) = 0$, teda stavy s $n = 3{,}6{,}9,\ldots$. Nepriepustná bariéra v podstate rozdelila pôvodnú potenciálovú jamu na dve, jednu šírky $\ell_1 = \ell/3$ a druhú šírky $\ell_2 = 2\ell/3$.



Obr. 3.3. Pravdepodobnostné rozdelenie kvantovej častice v nekonečne hlbokej potencálovej jame. Dolný obrázok ukazuje pravdepodobnostné rozdelenie častice v základnom stave, $P_1(x) = |\Phi_1(x)|^2 = \frac{2}{\ell}\sin^2\frac{\pi x}{\ell}$, na hornom obrázku je funkcia $P_4(x) = |\Phi_1(x)|^2 = \frac{2}{\ell}\sin^2\frac{4\pi x}{\ell}$, ktorá opisuje pravdepodobnostné rozdelenie v štvrtom stave s energiou E_4.

3.10. Ukážte, že vlnové funkcie, zodpovedajúce dvom rôznym vlastným energiám sú ortogonálne, teda že platí

$$\int_0^\ell \mathrm{d}x\, \Phi_n^*(x)\Phi_m(x) = 0 \qquad n \neq m \tag{3.51}$$

3.11. Kvantová častica sa v čase $t = 0$ nachádza v stave s vlnovou funkciou

$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_1(x) + \Phi_3(x)\right] \tag{3.52}$$

kde funkcie $\Phi_1(x)$ aj $\Phi_3(x)$ sú vlastné funkcie prislúchajúce energiám E_1 a E_3.
a) Presvedčte sa, že vlnová funkcia je normovaná.
b) Napíšte časovú závislosť vlnovej funkcie v ľubovoľnom čase.
c) Nájdite pravdepodobnosť nájdenia častice v prostriedku jamy v čase t.
Riešenie: b) Časová závislosť každého vlastného stavu je

$$\Psi_n(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{3.53}$$

(pozri vzťah (2.77). Preto sa naša vlnová funkcia vyvíja v čase podľa vzťahu

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \Phi_3(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t}\right] \tag{3.54}$$

c) Pravdepodobnosť nájdenia častice v nejakom bode x v čase t sa rovná

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\left[\Phi_1(x)^2 + \Phi_3(x)^2 + 2\Phi_1(x)\Phi_3(x)\cos\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right] \tag{3.55}$$

Pretože $\Phi_1(\ell/2) = \Phi_3(\ell/2) = \sqrt{2/\ell}$ dostaneme po dosadení $x = \ell/2$ do rovnice (3.10)

$$P\left(x = \frac{\ell}{2},t\right) = \frac{2}{\ell}\left[1 + \cos\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right] = \frac{4}{\ell}\sin^2\frac{E_3 - E_1}{2\hbar}t \tag{3.56}$$

Všimnite si, že pravdepodobnosť je periodickou funkciou času s periódou

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_3 - E_1} \tag{3.57}$$

Takáto periodická závislosť je typická pre kvantové stavy, ktoré sú superpozíciou dvoch a viacerých základných stavov s rôznymi energiami. Perióda je nepriamo úmerná rozdielu vlastných energií.

3.12. V zadaní z predchádzajúceho príkladu nájdite, v akom čase je pravdepodobnosť nájsť časticu v strede jamy nulová. [$t = \frac{T}{2}n$, kde $n = 1,2,\ldots$]

3.13. Ukážte, že energetické hladiny častice uväznenej v nekonečnej dvojrozmernej potenciálovej jame s rozmermi $\ell_x \neq \ell_y$ sú

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2}\right] \tag{3.58}$$

3.14. Okrem degenerácie, spôsobenej symetriou fyzikálneho systému, sa môže vyskytnúť aj tzv. náhodná degenerácia energetických hladín. Nájdite rozmery ℓ_x a ℓ_y dvojrozmernej nekonečnej potenciálovej jamy, v ktorej platí

$$E_{2,2} = E_{1,3} \tag{3.59}$$

Riešenie: Zo zadania vyplýva, že musí platiť

$$E(2,2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\frac{4}{\ell_x^2} + \frac{4}{\ell_y^2}\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\ell_x^2} + \frac{9}{\ell_y^2}\right] = E(1,3) \tag{3.60}$$

a teda

$$\frac{\ell_y}{\ell_x} = \sqrt{\frac{5}{3}} \tag{3.61}$$

3.15. Presvedčte sa, napríklad zo vzťahu (3.34) že fyzikálna jednotka hustoty stavov $\rho(E)$ je $\mathrm{J}^{-1}\mathrm{m}^{-3}$.

3.16. Číselné hodnoty Fermiho energie (3.40) získame pomocou vzťahu (3.16) v tvare

$$E_F = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3} \times \frac{1}{a^2} = \frac{36{,}47}{a^2}\ [\mathrm{eV}] = \frac{58{,}42}{a^2} \times 10^{-19}\ [\mathrm{J}] \tag{3.62}$$

kde a je mriežková konštanta v Angstrőmoch. Fermiho energia je teda (v rámci nášho modelu) univerzálna veličina, ktorá závisí len od vzdialenosti atómov kovu v kryštalickej mriežke. V tabuľke 3.1 sú uvedené experimentálne zistené mriežkové konštanty a Fermiho energie niektorých kovov. Presvedčte sa výpočtom, nakoľko presný je odhad Fermiho energie daný rovnicou (3.40).

3.17. Z údajov pre mriežkovú konštantu (tabuľka 3.1) vypočítajte počet voľných elektrónov v objeme 1 cm^3 kovu.
Riešenie: Počet voľných elektrónov v objeme V sa rovná $N = V/a^3$. Pre $V = 1\ \mathrm{cm}^3$ dostaneme hodnoty uvedené v pravom stĺpci tabuľky 3.1.

3.18. Majme trojrozmernú kocku s dĺžkou hrany ℓ. Aká je vzdialenosť dvoch susedných hladín na Fermiho energii?
Riešenie: Podľa definície hustoty stavov sa v kocke so stranou ℓ v energetickom intervale medzi energiami E_F a $E_F + \mathrm{d}E$ nachádza

$$N = \ell^3\rho(E_F) \tag{3.63}$$

povolených stavov. Preto je typický rozdiel medzi dvomi hladinami

$$\Delta E = \frac{\delta E}{N(E_F)} = \frac{1}{\ell^3\rho(E_F)} \tag{3.64}$$

Vzdialenosť susedných hladín preto klesá nepriamo úmerne s objemom vzorky $V = \ell^3$. Musí to tak byť, pretože najvyššia energia elektrónov, E_F, nezávisí od objemu, ale počet elektrónov s energiami medzi $E = 0$ a $E = E_F$ je priamo úmerný objemu.

Tab. 3.1. Mriežkové konštanty (v Angstrőmoch) a experimentálne hodnoty Fermiho energie (v eV – viac hodnôt nájdete v učebnici [21]. Rozdiel medzi experimentálnymi hodnotami Fermiho energie a hodnotami z rovnice (3.62) je daný okrem iného tým, že disperzný vzťah elektrónov v reálnom kove sa líši od vzťahu (3.29), ktorý platí pre elektróny pohybujúce sa vo voľnom priestore. V poslednom stĺpci je počet voľných elektrónov v 1 cm^3 kovu (príklad 3.17).

Kov	a [10^{-10} m]	E_F [eV]	N [10^{22}]
Al	1,77	11,63	18,0
Cu	2,28	7,00	8,4
Au	2,57	5,51	5,9
Na	3,35	3,23	2,6

3.19. V teórii tuhých látok sa často používa hustota stavov na Fermiho energii. Zo vzťahov (3.34) a (3.40) odvoďte

$$\rho(E_F) = \frac{1}{2\pi^2}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\frac{2m}{\hbar^2 a} \tag{3.65}$$

3.20. Porovnajte Fermiho energiu zlata so strednou hodnotou kinetickej energie $E_{\mathrm{EZ}} = (3/2)k_B T$ pri izbovej teplote.
Riešenie: Fermiho energia zlata (tabuľka 3.1) je $E_F = 5{,}51$ eV. Na druhej strane, pri izbovej teplote $T = 300$ K je stredná hodnota kinetickej energie len $E_{\mathrm{EZ}} = 0{,}0388$ eV (rovnica 1.103), teda o dva rády nižšia. Príčina takého veľkého rozdielu spočíva v tom, že ekvipartičný zákon bol odvodený pre klasické častice, zatiaľ čo elektróny sú fermióny. Nemožnosť obsadzovať tú istú energetickú hladinu núti elektróny obsadiť stále vyššie a vyššie energetické hladiny. Preto musí byť Fermiho energia podstatne vyššia, ako typická energia klasických častíc pri izbovej teplote.

3.21. Nájdite rýchlosť elektrónov zlata na Fermiho energii.
Riešenie: Z Fermiho energie E_F nájdeme hodnotu vlnového vektora k_F. Hybnosť elektrónu je $\hbar k_F$, a rýchlosť

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \tag{3.66}$$

Pre zlato je $E_F = 5{,}51$ eV. Výpočtom nájdeme

$$v_F = 1{,}4 \times 10^6 \ \text{m/s} \approx \frac{c}{200} \tag{3.67}$$

Rýchlosť elektrónov na Fermiho hladine je podstatne vyššia, ako predpokladá ekvipartičný zákon:

$$v_{\mathrm{EZ}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} \approx 1{,}17 \times 10^5 \ \mathrm{m/s}. \tag{3.68}$$

(pozri aj predchádzajúci príklad 3.20).

3.22. Nájdite Fermiho energiu pre trojrozmernú potenciálovú jamu s rozmerom $\ell = 1$ nm, v ktorej sa nachádza $N = 20$ elektrónov.
Riešenie: Elektróny budú obsadzovať postupne hladiny s energiami

$$\begin{array}{ll} E_{111} & \text{1 stav} \\ E_{112} = E_{121} = E_{211} & \text{3 stavy} \\ E_{122} = E_{221} = E_{212} & \text{3 stavy} \\ E_{113} = E_{131} = E_{311} & \text{3 stavy} \end{array} \tag{3.69}$$

V každom stave môžu byť dva elektróny, líšiace sa orientáciou spinu. Preto je Fermiho energia

$$E_F = E_{113} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2} \times [1 + 1 + 3^2] = 4{,}140 \text{ eV} \tag{3.70}$$

3.23. V jame z predchádzajúceho príkladu 3.22 jeden elektrón z Fermiho hladiny pohltil fotón a prešiel na najbližšiu voľnú hladinu. Aká je frekvencia pohlteného fotónu?
Riešenie: Najbližšia voľná hladina je

$$E_{222} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2} \times [2^2 + 2^2 + 2^2] = 4{,}517 \text{ eV} \tag{3.71}$$

Rozdiel energií je $\Delta E = E_{222} - E_{113} = 0{,}377$ eV $= 6{,}04 \times 10^{-20}$ J. Frekvencia fotónu je preto

$$\nu = \frac{E_{222} - E_{113}}{h} = 91 \text{ THz} \tag{3.72}$$

3.24. V kvantovej bodke tvaru kocky s hranou $\ell = 10$ nm sa nachádza $N = 10^4$ elektrónov. Nájdite Fermiho energiu.
Riešenie: Stredná vzdialenosť medzi dvoma elektrónmi je

$$a = \left[\ell^3 N\right]^{1/3} = 0{,}464 \text{ nm} \tag{3.73}$$

Z rovnice (3.62) potom dostaneme

$$E_F = 1{,}415 \text{ eV} \tag{3.74}$$

3.25. Aký odpor zodpovedá kvantu elektrickej vodivosti $\sigma = e^2/\pi\hbar$? [$R = \pi\hbar/e^2 = 12{,}9$ kΩ]

3.26. Aký široký musí byť kvantový drôt, aby elektrón s energiou $E = 0{,}5$ eV mal povolenú len jednu hodnotu hybnosti v smere pozdĺž drôtu?
Riešenie: Energia elektrónu je

$$E = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \times (n_x^2 + n_y^2) + E_z \tag{3.75}$$

s kladnou energiou $E_z > 0$. Pretože zo zadania je povolená len jedna hodnota E_z, musí byť stav $n_x = n_y = 1$. Stavy s vyššími kvantovými číslami nie sú povolené, preto musí platiť

$$\frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \times (1 + 1) < E < \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \times (1 + 2^2) \tag{3.76}$$

a teda

$$2\frac{\hbar^2}{2mE} < \ell^2 < 5\frac{\hbar^2}{2mE} \tag{3.77}$$

Odtiaľ výpočtom dostaneme ($\pi^2\hbar^2/2m = 0{,}37645 \times 10^{-18}$ eV/m^2)

$$1{,}23 \text{ nm} < \ell < 1{,}94 \text{ nm} \tag{3.78}$$

3.27. V koľkých stavoch sa v kvantovom drôte šírky $\ell = 1{,}5$ nm môže nachádzať elektrón s energiou $E = 3$ eV?

Riešenie: Pre dovolené stavy musí platiť

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}\left[n_x^2 + n_y^2\right] < E \tag{3.79}$$

Pre $\ell = 1{,}5$ nm dostaneme

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2} = 0{,}167 \text{ eV} \tag{3.80}$$

takže musí byť

$$n_x^2 + n_y^2 < \frac{2mE}{\hbar^2} = 17{,}96 < 18 \tag{3.81}$$

Tejto podmienke zodpovedajú dvojice kvantových čísel

(1,1),	(1,2),	(1,3),
(2,1),	(2,2),	(2,3),
(3,1),	(3,2),	
(1,4),	(4,1).	

Elektrón s energiou 3 eV preto môže mať 10 rôznych kombinácií kvantových čísel n_x a n_y. V každej z nich môže mať dve orientácie spinu a dve orientácie pohybu v smere osi z. Preto sa preto môže nachádzať v 40 rôznych stavoch.

KAPITOLA 4

Konečná pravouhlá potenciálová jama a bariéra

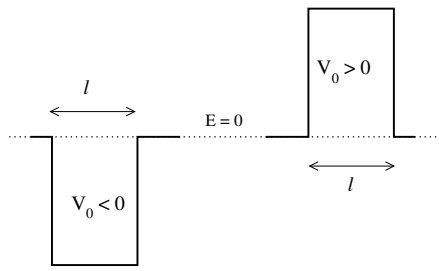
Konečná pravouhlá potenciálová jama a bariéra predstavujú učebnicové príklady, na ktorých môžeme ukázať základné vlastnosti kvantovej častice. Potenciálna energia má nenulovú hodnotu V_0 (zápornú alebo kladnú) len v určitej oblasti priestoru, všade inde sa rovná nule (obrázok 4.1).

Pre záporné hodnoty $V_0 < 0$ hovoríme o potenciálovej jame. Z kapitoly 3 vieme, že v nekonečne hlbokej potenciálovej jame kvantová častica obsadí presne definované energetické stavy. Podobne aj v prípade konečnej potenciálovej jamy existujú viazané stavy so zápornou energiou $E < 0$.[1] Ich počet je však konečný, závislý od hĺbky a šírky potenciálovej jamy. Na rozdiel od voľných stavov je energetické spektrum viazaných stavov diskrétne. Existujú len niektoré hodnoty energie, pre ktoré môže viazaný stav vzniknúť. Sú to tie, pre ktoré vlnová funkcia klesá exponenciálne so vzdialenosťou od potenciálovej jamy.

Častica môže mať aj kladnú energiu $E > 0$, a pohybovať sa v kladnom alebo zápornom smere osi x. Takéto stavy voláme rozptylové. Poznáme ich aj z klasickej fyziky. Líšia sa od klasických stavov tým, ako sa rozptyľujú na poruchách (typickou poruchou je práve uvažovaná potenciálová jama). Zatiaľ čo klasická častica by ponad takúto jamu preletela (určite by sa od nej neodrazila), kvantová častica má nenulovú pravdepodobnosť, že sa odrazí aj od potenciálovej jamy.

Pre kladné hodnoty $V_0 > 0$ hovoríme o potenciálovej bariére. Pre túto úlohu budeme študovať pravdepodobnosť (koeficient prechodu) častice cez bariéru. Rozlíšime dva prípady: Ak dopadajúca častica má energiu väčšiu, ako je výška potenciálovej bariéry, $E > V_0$ potom existujú vybrané hodnoty energie, pre ktoré je bariéra dokonale priezračná, teda pravdepodobnosť prechodu častice bariérou je $T = 1$. Dôležitý je aj prípad, keď je energia dopadajúcej častice menšia, ako výška bariéry. Ukážeme, že kvantová častica môže aj v tomto prípade prekonať potenciálovú bariéru. Tento prechod (tunelovanie) je dôležitý pre stabilitu kvantových systémov.

[1] Aby sme sa vyhli nedorozumeniam, všimnime si, že v prípade nekonečnej potenciálovej jamy v kapitole 3 sme predpokladali nulovú energiu na dne jamu. Nemali sme inú možnosť, pretože potenciálová bariéra bola nekonečne vysoká. V prípade konečnej potenciálovej jamy však vždy položíme hladinu nulovej energie tam, kde sa potenciálna energia rovná nule (pozri obrázok 4.1). Takáto voľba nulovej energie umožňuje odlíšiť viazané stavy ($E < 0$) od rozptylových ($E > 0$).



Obr. 4.1. Pravouhlá potenciálová jama. Vľavo potenciálová jama ($V_0 < 0$), vpravo potenciálová bariéra ($V_0 > 0$). Ak je častica viazaná v jame, potom má zápornú energiu. Ak sa pohybuje voľne, má energiu kladnú.

V klasickej mechanike tunelovanie nemá analógiu, môžeme ho ale nájsť v teórii šírenia a rozptylu klasických (napríklad elektromagnetických) vĺn.

V ďalších častiach tejto kapitoly zadefinujeme prechodovú maticu a odvodíme jej základné vlastnosti. Prechodová matica nám umožní nájsť koeficient prechodu cez zložitejšie sústavy. Príkladom je prechod častice cez dve identické bariéry.

Kombináciou pravouhlých potenciálových bariér môžeme skonštruovať jednoduché ľahko riešiteľné fyzikálne modely, ktoré nám umožnia vysvetliť fyzikálne vlastnosti kvantových systémov. V závere tejto kapitoly v časti 4.7 odvodíme základné vlastnosti kvantovej častice pohybujúcej sa v periodickom potenciáli a vysvetlíme pôvod zakázaných energetických pásov.

4.1 Viazané stavy v konečnej potenciálovej jame

Uvažujme konečnú potenciálovú jamu na obrázku 4.2. Hĺbka jamy je $|V_0|$, šírka jamy $\ell = 2a$. Kvantová častica môže mať energiu alebo zápornú (vtedy je viazaná v jame), alebo kladnú. Zaoberajme sa najprv prípadom, keď je častica v jame viazaná, teda jej energia je záporná:

$$E < 0 \tag{4.1}$$

Rozdeľme celý priestor na tri oblasti, I, II a III ako na obrázku 4.2 a napíšme Schrödingerovu rovnicu pre každú oblasť osobitne: V oblasti I ($x < -a$) má Schrödingerova rovnica tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi_{\mathrm{I}}(x)}{\partial x^2} = E\Phi_{\mathrm{I}}(x) \tag{4.2}$$

Pretože energia E je záporná, všeobecné riešenie pozostáva z kombinácie dvoch exponenciálnych funkcií

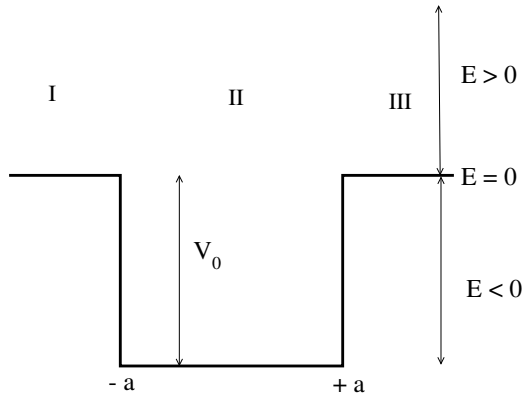
$$\Phi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|} \tag{4.3}$$

Aby bola vlnová funkcia normovaná, musí byť $B = 0$, pretože funkcia $e^{-\kappa x}$ exponenciálne rastie keď $x \to -\infty$. Preto

$$\Phi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+\kappa x} \tag{4.4}$$

Podobnou úvahou dostaneme v oblasti III vlnovú funkciu

$$\Phi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{-\kappa x} \tag{4.5}$$



Obr. 4.2. Konečná potenciálová jama. Hĺbka jamy je $|V_0|$, ($V_0 < 0$) šírka jamy $\ell = 2a$. Častica viazaná v jame má zápornú energiu. Stavy s kladnou energiou zodpovedajú voľne sa pohybujúcej častici.

s tou istou hodnotou κ ako v oblasti I.

V oblasti II ($-a \leq x \leq +a$) má Schrödingerova rovnica tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Phi_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x^2} + V_0 \Phi_{\mathrm{II}}(x) = E\Phi_{\mathrm{II}}(x) \tag{4.6}$$

a jej riešením je vlnová funkcia

$$\Phi_{\mathrm{II}}(x) = Fe^{+ikx} + Ge^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \tag{4.7}$$

Pretože rozdiel $E - V_0$ je kladný, je vlnová funkcia vo vnútri jamy superpozíciou dvoch rovinných vĺn pohybujúcich sa v kladnom, resp. zápornom smere. Mimo jamy vlnová funkcia exponenciálne klesá so vzdialenosťou. Na rozdiel od nekonečnej potenciálovej jamy má vlnová funkcia nenulové hodnoty aj mimo konečnej jamy. To znamená, že častica sa nemusí nachádzať len v jame samotnej, ale môže sa s nenulovou pravdepodobnosťou nachádzať aj v jej bezprostrednom okolí.

V rovniciach (4.4 – 4.7) vystupujú štyri neznáme konštanty A, C, F a G. Vzťahy medzi nimi určíme z podmienky spojitosti vlnovej funkcie a jej derivácie v bodoch $x = -a$ a $x = +a$. Dostaneme štyri rovnice:
V bode $x = -a$

$$\begin{aligned} Ae^{-\kappa a} &= Fe^{-ika} + Ge^{+ika} \\ +\kappa Ae^{-\kappa a} &= ik(Fe^{-ika} - Ge^{+ika}) \end{aligned} \tag{4.8}$$

V bode $x = +a$

$$\begin{aligned} Ce^{-\kappa a} &= Fe^{+ika} + Ge^{-ika} \\ -\kappa Ce^{+\kappa a} &= ik(Fe^{+ika} - Ge^{-ika}) \end{aligned} \tag{4.9}$$

Dostali sme systém štyroch homogénnych lineárnych rovníc pre štyri neznáme konštanty. Z lineárnej algebry vieme, že takýto systém má nenulové riešenie len vtedy, keď sa jeho determinant rovná nule. Podmienka nulovosti determinantu nám dá vlastné energie systému. Na druhej strane, ak je determinant nulový, potom sú štyri rovnice lineárne závislé. Umožňujú nám preto vypočítať

len tri koeficienty ako funkcie štvrtého. Posledný neznámy koeficient získame z podmienky normovanosti vlnovej funkcie,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ |\Phi(x)|^2 = 1 \tag{4.10}$$

Aby sme sa vyhli počítaniu zložitého determinantu matice 4×4, eliminujme zo systému rovníc najprv konštanty A a C. Z rovníc (4.8) a (4.9) dostaneme dve rovnice pre neznáme F a G

$$\begin{array}{rcrcl} F(\kappa - ik)e^{-ika} & + & G(\kappa + ik)e^{+ika} & = & 0 \\ F(\kappa + ik)e^{+ika} & + & G(\kappa - ik)e^{-ika} & = & 0 \end{array} \tag{4.11}$$

Determinant tohto systému rovníc, det $= (\kappa - ik)^2 e^{-i2ka} - (\kappa + ik)^2 e^{i2ka}$, sa rovná nule, ak platí

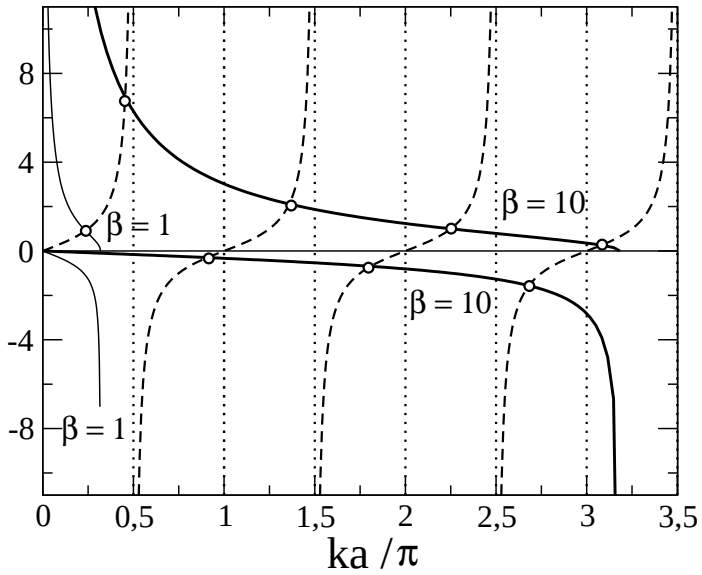
$$(\kappa - ik)e^{-ika} = \mp(\kappa + ik)e^{+ika} \tag{4.12}$$

Z tejto rovnice po úpravách dostaneme dve rovnice

$$\frac{\kappa}{k} = \begin{cases} +\mathrm{tg}\ ka \\ -\mathrm{cotg}\ ka \end{cases} \tag{4.13}$$

zodpovedajúce dvom znamienkam na pravej strane rovnice (4.12). Rovnice (4.13) budeme riešiť graficky. Ešte predtým však zavedieme bezrozmerný parameter

$$\beta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}|V_0| \tag{4.14}$$



Obr. 4.3. Grafické riešenie rovníc (4.16) a (4.17). Prerušovaná čiara je funkcia $\mathrm{tg}\ ka$, plné čiary zodpovedajú pravým stranám rovníc (4.16) a (4.17). Z obrázku vidíme, že rovnica (4.16) má vždy aspoň jedno riešenie v intervale $0 < ka/\pi < 0.5$. Počet riešení rastie s hodnotou parametra β (rovnica 4.14). Nový, n-tý stav vznikne, keď parameter β prekročí hodnotu $(n-1)\pi/2$. Hlbšia jama má preto viac riešení, ako plytšia. Rovnako širšia jama má viac riešení, ako užšia.

a pomocou vzťahov (4.3) pre κ a (4.7) pre k odvodíme identitu

$$(ka)^2 + (\kappa a)^2 = \beta^2 \tag{4.15}$$

ktorá nám umožní eliminovať z rovníc (4.13) neznámu κ. Rovnice (4.13) potom prepíšeme do tvaru

$$\mathrm{tg}\, ka = \frac{1}{ka}\sqrt{\beta^2 - (ka)^2} \tag{4.16}$$

a

$$\mathrm{tg}\, ka = -\frac{ka}{\sqrt{\beta^2 - (ka)^2}} \tag{4.17}$$

pre jedinú neznámu ka. Ak poznáme riešenie ka, potom zodpovedajúcu energiu častice dostaneme zo vzťahu (4.7), ktorý upravíme na tvar

$$E = |V_0| \left[-1 + \frac{(ka)^2}{\beta^2} \right] \tag{4.18}$$

Parameter β je jediným parametrom, ktorý vstupuje do rovníc (4.16) a (4.17). Riešenie týchto rovníc je preto univerzálne – dve jamy s tou istou hodnotou parametra β musia mať tie isté energetické hladiny. Hoci jamu definujeme dvoma parametrami – jej hĺbkou V_0 a šírkou $2a$ – spektrum viazanej častice je úplne určené jediným parametrom β.

Grafické riešenie rovníc je zobrazené na obrázku 4.3. Vidíme, že rovnica (4.16) má riešenie pre ľubovoľne malú hodnotu β. Jednorozmerná potenciálová jama má preto vždy aspoň jeden viazaný stav (toto neplatí pre potenciálové jamy vo vyšších dimenziách). Z obrázku 4.3 tiež vidíme, že počet riešení rovníc (4.16) a 4.17) je konečný a závisí od hodnoty parametra β. To vidíme aj z rovnice (4.18). Pretože energie viazaných stavov sú záporné, musí byť

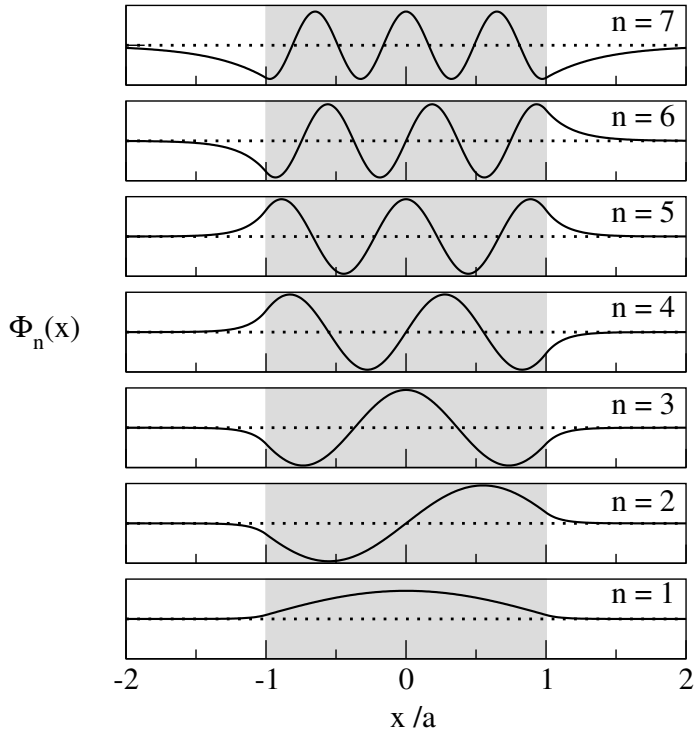
$$(ka)^2 < \beta^2 \tag{4.19}$$

Na obrázku 4.4 sú ukázané všetky viazané stavy kvantovej častice v pravouhlej potenciálovej jame s hodnotou $\beta = 10$. Ako vidíme z obrázku 4.3, pre pre $\beta = 10$ má takáto jama 7 vlastných stavov. Vidíme tiež, že v súlade s našim predpokladom, sa častica nezdržuje len vo vnútri jamy, ale s nenulovou pravdepodobnosťou ju môžeme nájsť aj v priestore mimo jamy, kam by sa klasická častica nikdy nedostala. Pravdepodobnosť, že častica navštívi oblasti mimo jamy, rastie s energiou častice. To je ľahko pochopiteľné z vyjadrenia parametra κ, ktorý klesá, keď energia $E \to 0^-$. Aj z fyzikálneho pohľadu očakávame, že čím vyššiu energiu častica má, tým sa cíti voľnejšia a častejšie navštevuje oblasť mimo jamy. Pre energiu $E = 0$ sa z jamy uvoľní.

4.1.1 Symetria

Všimnime si, že dve znamienka na pravej strane rovnice (4.12) zodpovedajú prípadom, kedy $F = G$ a $F = -G$. Riešenia rovnice (4.16) preto zodpovedajú párnym stavom (vlnová funkcia je párnou funkciou,

$$\Phi(x) = \Phi(-x) \tag{4.20}$$



Obr. 4.4. Vlnová funkcia pre sedem viazaných stavov jednorozmernej pravouhlej potenciálovej jamy s parametrom $\beta = 10$. Zvýraznená oblasť zodpovedá potenciálovej jame.

a riešenia rovnice (4.17) budú zodpovedať nepárnym riešeniam[2]

$$\Phi(x) = -\Phi(-x) \tag{4.21}$$

Takáto symetria súvisí s tým, že potenciálna energia $V(x)$ je symetrická vzhľadom na zrkadlenie okolo svojho stredu:

$$V(-x) = V(x) \tag{4.22}$$

Preto aj riešenie Schrödingerovej rovnice (priestorové rozdelenie častice v potenciáli) musí byť symetrické. Pretože všetky merateľné veličiny vyjadrujeme pomocou súčinu $\Phi(x)$ a $\Phi^*(x)$, môže byť vlnová funkcia alebo párna, alebo nepárna. Základný stav s najnižšou energiou je symetrický.

4.1.2 Dvojrozmerná jama

Dvojrozmernú potenciálovú jamu môžeme riešiť metódou separácie premenných (pozri časť 3.2). Energiu základného stavu dostaneme v tvare

$$E_1 = |V_0|\left[-1 + \frac{(k_1 a)^2}{\beta^2} + \frac{(k_1 a)^2}{\beta^2}\right] = |V_0|\left[-1 + 2\frac{(k_1 a)^2}{\beta^2}\right] = 2E_{1x} + |V_0| \tag{4.23}$$

[2]Z rovníc (4.8) a (4.9) vidíme, že že ak $F = G$ tak $A = C$, takže vlnová funkcia je naozaj párnou funkciou pre všetky hodnoty x. Podobne, ak $F = -G$, dostaneme $A = -C$ a vlnová funkcia je nepárna.

kde $k_1 a$ je riešením rovnice (4.16) a E_{1x} je energia základného stavu jednorozmernej jamy hĺbky V_0. Z rovnice (4.23) vidíme, že dvojrozmerná potenciálová jama nemusí mať vždy viazaný stav, pretože podmienka

$$E_1 < 0 \tag{4.24}$$

nie je splnená, ak $E_{1x} > -|V_0|/2$. Dvojrozmerné a samozrejme ani trojrozmerné potenciálové jamy preto nemusia mať viazaný stav, pretože častica v takejto jame sa musí pohybovať vo všetkých smeroch a na každý smer potrebuje minimálnu energiu E_{1x}.

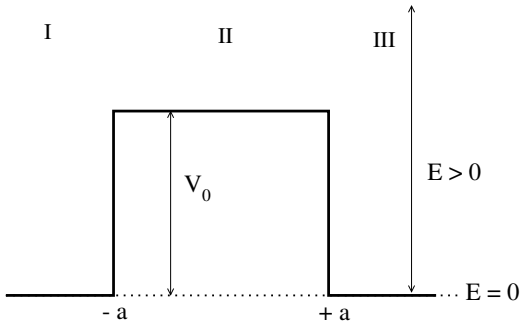
4.2 Rozptyl častice na pravouhlej potenciálovej bariére

Vyšetrime teraz prípad voľnej častice s kladnou energiou $E > 0$. Budeme uvažovať pravouhlú potenciálovú bariéru. Potenciálna energia V_0 v oblasti II môže byť kladná alebo záporná. Častica sa môže pohybovať oboma smermi, zľava doprava aj sprava doľava. Naľavo aj napravo od bariéry sa môže pohybovať voľne. Pri dopade na bariéru sa alebo odrazí, alebo prejde na druhú stranu. Našou úlohou bude nájsť vlnovú funkciu v oblastiach I, II a III a vypočítať koeficient prechodu a odrazu častice na bariére.

V klasickej fyzike je táto úloha jednoduchá: ak má častica energiu $E > V_0$, celkom určite cez bariéru prenikne. Naopak, pre energiu $E < V_0$ sa určite od bariéry odrazí. V kvantovej mechanike je situácia zložitejšia. Pre energie $E > V_0$ je podmienka úplného prechodu splnená len pre niektoré špecifické energie častice. Okrem týchto výnimočných prípadov vždy existuje nenulová pravdepodobnosť, že sa častica odrazí. To platí dokonca aj v prípade, keď častica narazí na potenciálovú jamu ($V_0 < 0$). Naopak, kvantová častica s energiou $E > 0$ môže preniknúť aj cez potenciálovú bariéru vyššiu, ako je energia častice ($V_0 > E$). Taká bariéra je pre klasickú časticu neprekonateľná.

Vyriešime najprv prípad, keď energie častice je väčšia, ako výška potenciálnej bariéry (obrázok 4.5).

$$E > V_0 > 0 \tag{4.25}$$



Obr. 4.5. Pravouhlá potenciálová bariéra. Prichádzajúca častica má vždy kladnú energiu $E > 0$. Energia však môže byť väčšia alebo menšia ako výška potenciálovej bariéry.

Podobne ako pri výpočte viazaných stavov budeme hľadať vlnovú funkciu v jednotlivých oblastiach v tvare

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_{\mathrm{I}}(x) &= \Phi_{\mathrm{I}}^{+}(x) + \Phi_{\mathrm{I}}^{-}(x) &= Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < -a \\ \Phi_{\mathrm{II}}(x) &= & Fe^{+ik'x} + Ge^{-ik'x} & -a < x < +a \\ \Phi_{\mathrm{III}}(x) &= \Phi_{\mathrm{III}}^{+}(x) + \Phi_{\mathrm{III}}^{-}(x) &= Ce^{+ikx} + De^{-ikx} & +a < x \end{cases} \tag{4.26}$$

kde

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, \qquad k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \tag{4.27}$$

Medzi hodnotami k a k' platí vzťah

$$(ka)^2 - (k'a)^2 = \beta^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0 \tag{4.28}$$

V rovnici (4.26) sme vlnovú funkciu naľavo a napravo od bariéry napísali ako súčet dvoch rovinných vĺn. Vlny Φ^+ zodpovedajú pohybu častice doprava, vlny Φ^- pohybu doľava.

Vlnová funkcia (4.26) obsahuje spolu 6 neznámych koeficientov. Našou úlohou však nie je určiť všetky koeficienty, ale nájsť vzťah medzi vlnovou rovnicou na rôznych stranách bariéry. Ak využijeme štyri rovnice vyplývajúce zo spojitosti vlnovej funkcie a jej derivácie v bodoch $\pm a$, dostaneme lineárny vzťah medzi koeficientami funkcií Φ_{I} a Φ_{III} naľavo a napravo od bariéry

$$\begin{pmatrix} \Phi_{\mathrm{III}}^{+}(a) \\ \Phi_{\mathrm{III}}^{-}(a) \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} \Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a) \\ \Phi_{\mathrm{I}}^{-}(-a) \end{pmatrix} \tag{4.29}$$

Matica T je **matica prechodu** alebo prechodová matica

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \tag{4.30}$$

Po dosadení za jednotlivé funkcie vyjadríme koeficienty C, D pomocou koeficientov A a B

$$\begin{pmatrix} Ce^{+ika} \\ De^{-ika} \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} Ae^{-ika} \\ Be^{+ika} \end{pmatrix} \tag{4.31}$$

resp.

$$\begin{aligned} Ce^{ika} &= T_{11}Ae^{-ika} + T_{12}Be^{ika} \\ De^{-ika} &= T_{21}Ae^{-ika} + T_{22}Be^{ika} \end{aligned} \tag{4.32}$$

Priamym výpočtom (pozri dodatok H) odvodíme explicitný výraz pre prvky matice prechodu

$$\begin{aligned} T_{11} &= \cos 2k'a + \frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k} + \frac{k}{k'}\right)\sin 2k'a \\ T_{12} &= \frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'}\right)\sin 2k'a \\ T_{21} &= T_{12}^{*} \\ T_{22} &= T_{11}^{*} \end{aligned} \tag{4.33}$$

a nájdeme, že determinant matice prechodu sa rovná jednej[3]

$$\det \mathbf{T} = T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1 \tag{4.34}$$

Matica prechodu nám umožňuje vyjadriť vlnovú funkciu na pravej strane bariéry, ak poznáme vlnovú funkciu na ľavej strane. Z jej prvkov môžeme nájsť hľadané koeficienty prechodu a odrazu

Rozptyl častice na potenciálovej jame

Ľahko sa presvedčíme, že výpočet amplitúd prechodu a odrazu, odvodený pre rozptyl častice na potenciálovej bariére, môžeme použiť v prípade, keď častica s kladnou energiou narazí na potenciálovú jamu. Rozdiel je len v tom, že v prípade potenciálovej jamy platia nerovnosti

$$E > 0 > V_0 \tag{4.35}$$

a namiesto rovnice (4.28) dostaneme

$$\beta^2 = (k'a)^2 - (ka)^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}|V_0| \tag{4.36}$$

pretože $k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} > k$.

Prípad $V_0 = 0$

Ak sa potenciálna energia v priestore medzi bodmi $-a$ a a rovná nule, potom $k = k'$ a prechodová matica má jednoduchý tvar

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{ik\ell} & 0 \\ 0 & e^{-ik\ell} \end{pmatrix}, \qquad \ell = 2a \tag{4.37}$$

Matica (4.37) opisuje zmenu vlnovej funkcie rovinnej vlny pohybujúcej sa voľným priestorom na vzdialenosť ℓ.

4.2.1 Hustota prúdu pravdepodobnosti

Skôr ako nájdeme koeficient prechodu a odrazu, vrátime sa k rovnici kontinuity diskutovanej v kapitole 2.6 a k prúdu hustoty pravdepodobnosti

$$j(x) = \frac{\hbar i}{2m}\left[\Phi(x)\frac{\partial\Phi^*(x)}{\partial x} - \Phi^*(x)\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x}\right] \tag{4.38}$$

Ak dosadíme za $\Phi(x)$ vlnovú funkciu $\Phi_{\mathrm{I}}(x)$ z rovnice (4.26), dostaneme (príklad 2.8)

$$j_{\mathrm{I}}(x) = \frac{\hbar k}{m}\left[|A|^2 - |B|^2\right] \tag{4.39}$$

[3]Toto tvrdenie nemusí vo všeobecnosti platiť. V našom prípade sa determinant rovná jednej, pretože potenciálna energia na oboch stranách bariéry má rovnakú (nulovú) hodnotu. Neskôr budeme riešiť problémy, kde táto podmienka nie je splnená.

$j_{\mathrm{I}}(x)$ je teda úmerná rýchlosti $v = \hbar k/m$, akou sa častica pohybuje a rozdielu pravdepodobností, že sa pohybuje doprava, resp. doľava. Môžeme ho preto vyjadriť ako rozdiel dvoch prúdov

$$j_{\mathrm{I}} = j_{\mathrm{I}}^{+} - j_{\mathrm{I}}^{-} \tag{4.40}$$

postupujúcich v opačných smeroch. Podobne vyjadríme prúd hustoty pravdepodobnosti v ostatných dvoch oblastiach. Dá sa ukázať, že platí

$$j_{\mathrm{I}} = j_{\mathrm{II}} = j_{\mathrm{III}} \tag{4.41}$$

Matematický dôkaz vyžaduje výpočet všetkých koeficientov A-G. Fyzikálne rovnosť (4.41) vyjadruje zákon zachovania častíc: prúd častíc, prichádzajúci zľava, sa musí byť rovnať prúdu ktorý, odchádza doprava. Inak by sa v niektorom mieste systému častice museli hromadiť, alebo tam samovoľne vznikať, prípadne zanikať.

4.2.2 Amplitúda prechodu a odrazu

Uvažujme teraz prípad, keď častica prichádza len zľava. Vtedy je vlnová funkcia napravo od bariéry $\Phi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{ikx}$. Pretože sprava neprichádza žiadna častica, musí pre koeficient D platiť

$$D \equiv 0 \tag{4.42}$$

Amplitúda vlnovej funkcie prichádzajúcej častice je A. Jediná možnosť, ako sa v tomto prípade môže častica pohybovať doľava je, že sa prichádzajúca častica odrazí. Amplitúda vlnovej funkcie odrazenej častice je B a koeficient C definuje amplitúdu vlnovej funkcie, ktorá prešla cez bariéru.

Definujme amplitúdy prechodu t a amplitúdy odrazu r vzťahmi

$$t = \frac{\Phi_{\mathrm{III}}^{+}(a)}{\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a)}, \qquad r = \frac{\Phi_{\mathrm{I}}^{-}(-a)}{\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a)} \tag{4.43}$$

Z maticovej rovnice (4.29) dostaneme dve rovnice pre vlnové funkcie naľavo a napravo od bariéry

$$\begin{aligned} \Phi_{\mathrm{III}}^{+}(+a) &= T_{11}\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a) + T_{12}\Phi_{\mathrm{I}}^{-}(-a) \\ 0 &= T_{21}\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a) + T_{22}\Phi_{\mathrm{I}}^{-}(-a) \end{aligned} \tag{4.44}$$

z ktorého získame amplitúdy prechodu a odrazu vyjadrené pomocou prvkov prechodovej matice

$$\frac{\Phi_{\mathrm{I}}^{-}(-a)}{\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a)} = r = -\frac{T_{21}}{T_{22}} \tag{4.45}$$

$$\frac{\Phi_{\mathrm{III}}^{+}(+a)}{\Phi_{\mathrm{I}}^{+}(-a)} = t = \frac{1}{T_{22}} \tag{4.46}$$

4.2.3 Koeficient prechodu

Koeficient prechodu, teda pravdepodobnosť, že častica cez bariéru prejde, je definovaný vzťahom

$$T = \frac{j_{\mathrm{III}}^{+}}{j_{\mathrm{I}}^{+}} \tag{4.47}$$

Koeficient prechodu teda vyjadruje tú časť prúdu, ktorý prešiel na druhú stranu bariéry. Podobne koeficient odrazu je definovaný vzťahom

$$R = \frac{j_{\mathrm{I}}^{-}}{j_{\mathrm{I}}^{+}} \tag{4.48}$$

a udáva pravdepodobnosť, že častica sa od bariéry odrazí. Pretože častica nemá inú možnosť, len sa od bariéry odraziť, alebo cez ňu prejsť, musí platiť

$$T + R = 1 \tag{4.49}$$

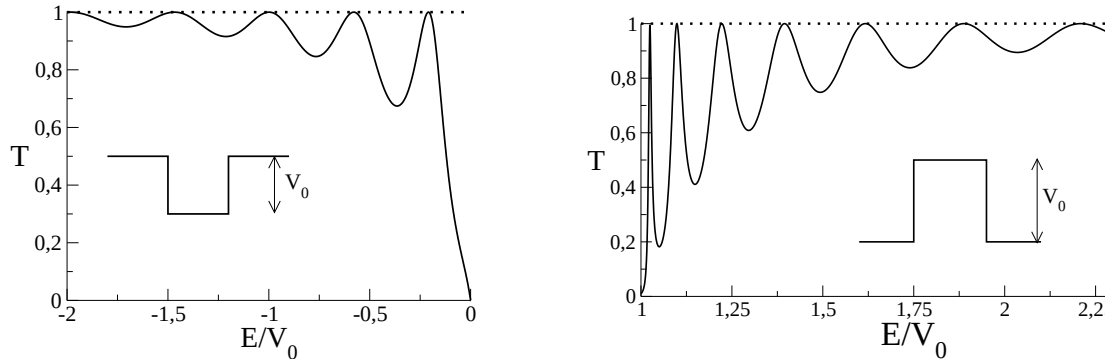
o čom sa môžeme presvedčiť priamym výpočtom.

Porovnaním definičných vzťahov (4.45) a (4.48) dostaneme

$$R = |r|^2 \tag{4.50}$$

Podobný vzťah pre koeficient prechodu, $T = |t|^2$, platí len vtedy, keď prostredie na oboch stranách bariéry má tie isté vlastnosti. Napríklad pri výpočte prechodu častice cez potenciálový schod uvidíme, že koeficient prechodu $T = 0$ hoci amplitúda prechodu je rôzna od nuly, $t \neq 0$. V takých prípadoch musíme koeficient prechodu počítať z jeho definičného vzťahu (4.47). V našom prípade symetrickej bariéry však dostaneme po dosadení za prúdy j_{III} a $j_{\mathrm{I}}^{+}(x)$ jednoduché vyjadrenie koeficientu prechodu

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 \sin^2 2k'a} \tag{4.51}$$



Obr. 4.6. Koeficient prechodu častice dopadajúcej na pravouhlú bariéru s parametrom $\beta = 10$. Vľavo: prechod cez potenciálnu jamu. Energia je kladná, ale potenciálna energia je záporná ($V_0 < 0$). Vpravo: prechod cez potenciálovú bariéru ($E > V_0 > 0$). V oboch prípadoch pozorujeme, že pre vybrané hodnoty energie je bariéra priezračná: pravdepodobnosť, že častica prejde na druhú stranu, je rovná jednej ($T = 1$). Všimnime si, že koeficient prechodu cez potenciálovú jamu je vo všeobecnosti menší ako jedna. Kvantová častica sa teda vo všeobecnosti od potenciálovej bariéry odrazí.

Na obrázku 4.6 je znázornený koeficient prechodu T ako funkcia energie (normovanej k hodnote V_0). Je vidieť, že pre niektoré hodnoty energie je bariéra priezračná ($T = 1$). Častica ňou prenikne s pravdepodobnosťou, rovnajúcou sa jednej. Tieto hodnoty energie nájdeme z rovnice (4.51). Vidíme, že úplný prechod ($T = 1$) nastáva vtedy, menovateľ vo výraze na pravej strane sa rovná jednej, teda keď $\sin 2k'a = 0$. Posledná rovnosť platí, ak

$$2k'a = \pi \times n \tag{4.52}$$

kde n je celé číslo. Ak namiesto vlnového čísla k' dosadíme vlnovú dĺžku elektrónu v oblasti nenulovej potenciálnej energie, $\lambda' = 2\pi/k'$, dostaneme podmienku úplného prechodu cez bariéru v tvare

$$n\frac{\lambda'}{2} = 2a = \ell \tag{4.53}$$

Rovnica (4.53) je známa aj zo štúdia interferencie svetla na tenkej vrstve. Podobne ako v optike, aj v kvantovej mechanike je fyzikálny význam úplného prechodu v tom, že vlnová funkcia v oblasti s nenulovou potenciálnou energiou pozostáva z nekonečného množstva zložiek, prislúchajúcich mnohonásobným odrazom kvantovej častice od hraníc bariéry (pozri obrázok 2.1). Ak platí podmienka (4.53), fázový rozdiel vĺn postupujúcich doprava sa rovná celočíselnému násobku 2π. Všetky vlny postupujúce doprava sa preto interferenciou zosilnia a koeficient prechodu je maximálny.

4.3 Tunelovanie častice cez potenciálovú bariéru

V predchádzajúcej časti sme neuvažovali prípad, keď je energia častice menšia, ako výška potenciálovej bariéry

$$0 < E < V_0 \tag{4.54}$$

Podľa zákonov klasickej fyziky sa častica s takouto energiu určite od bariéry odrazí. Kvantová fyzika však častici umožní s nejakou pravdepodobnosťou takúto bariéru prekonať. Našou úlohou je nájsť pravdepodobnosť, s akou sa častica dostane na druhú stranu bariéry.

Výpočet pravdepodobnosti prechodu je taký istý, ako v prípade $E > V_0$. Jediný rozdiel je v tom, že energia E častice je menšia, ako výška bariéry. Preto bude hodnota k' v rovnici (4.27) imaginárna. Vlnovú funkciu $\Phi_{\mathrm{II}}(x)$ preto dostaneme v tvare exponenciálne rastúcej, resp. klesajúcej funkcie

$$\Phi_{\mathrm{II}}(x) = Fe^{+\kappa x} + Ge^{-\kappa x} \tag{4.55}$$

kde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \tag{4.56}$$

Pre koeficient prechodu dostaneme (stačí dosadiť $k = i\kappa$ do rovnice (4.51)

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k}\right)^2 \sinh^2 2\kappa a} \tag{4.57}$$

V prípade tunelovania častice je jej koeficient prechodu vždy menší ako 1. Podstatné ale je, že je nenulový, a pre niektoré typy bariér môže byť dosť veľký. Koeficient prechodu závisí, okrem hodnoty parametra β (pozri rovnicu 4.14) aj od energie častice. Príkladom tunelovania je vlnová funkcia častice prechádzajúca na obrázku 4.7 cez bariéru s hodnotou parametra $\beta = 2$.

Ak je bariéra veľmi vysoká alebo veľmi široká, parameter κa bude veľký. V tomto prípade môžeme aproximovať $\sinh 2\kappa a \approx e^{+2\kappa a}$ a zanedbať jednotku v menovateli výrazu (4.57). Dostaneme približný vzťah pre pravdepodobnosť tunelovania

$$T \approx 4 \left[\frac{4\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right]^2 e^{-2\kappa \ell} \tag{4.58}$$

Pravdepodobnosť tunelovania teda exponenciálne klesá so šírkou bariéry $\ell = 2a$.

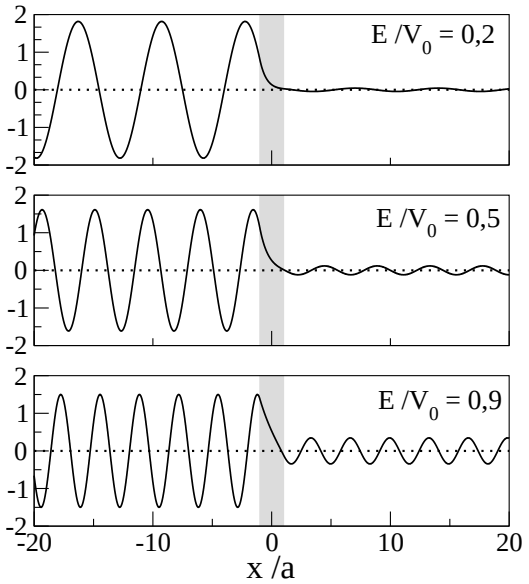
Na záver ešte pripomenieme, že predstava tunelovania je konzistentná s definíciou hustoty prúdu pravdepodobnosti častice v jednotlivých oblastiach. V oblasti I a III je výpočet jednoduchý, pretože častica sa v týchto oblastiach voľne pohybuje. V oblasti II využijeme výsledok príkladu 2.10. Podrobný výpočet opäť ukáže, že $j_{\mathrm{I}} = j_{\mathrm{II}} = j_{\mathrm{III}}$, v súlade so zákonom zachovania častíc.

4.4 Potenciálový schod

Uvažujme teraz potenciálový schod (obrázok 4.8) umiestnený v bode $x = 0$. Nájdeme pravdepodobnosť, že kvantová častica s energiou $E > V_0$ sa od tohto schodu odrazí.

V oblasti I sa potenciálna energia rovná nule, preto vlnová funkcia má tvar

$$\Phi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \tag{4.59}$$



Obr. 4.7. Reálna časť vlnovej funkcie Re $\Phi(x)$ častice, ktorá tuneluje cez potenciálovú bariéru s parametrom $\beta = 2$. Amplitúda prejdenej vlny je priamo úmerná amplitúde transmisie t a rastie, keď energia častice rastie. Poloha bariéry, $-a \leq x \leq +a$ je vyznačená šedou farbou.

V oblasti II má potenciálna energia hodnotu V_0, a vlnová funkcia má tvar

$$\Phi_{\mathrm{II}} = Ce^{ik'x}, \qquad k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \tag{4.60}$$

Rovnice spojitosti vlnovej funkcie a jej prvej derivácie v bode $x = 0$ nám dajú vzťahy medzi koeficientmi A, B a C

$$A + B = C \qquad ik(A - B) = ik'C \tag{4.61}$$

Je teda

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} \qquad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \tag{4.62}$$

Pre hustoty prúdu pravdepodobnosti naľavo od rozhrania dostaneme

$$j_{\mathrm{I}}^{+} = \frac{\hbar k}{2m}|A|^2, \qquad j_{\mathrm{I}}^{-} = \frac{\hbar k}{2m}|B|^2, \tag{4.63}$$

a pre hustotu prúdu za rozhraním schodu nájdeme

$$j_{\mathrm{II}} = \frac{\hbar k'}{2m}|C|^2 \tag{4.64}$$

Je preto koeficient odrazu

$$R = \frac{j_{\mathrm{I}}^{-}}{j_{\mathrm{I}}^{+}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{k - k'}{k + k'}\right|^2 \tag{4.65}$$

a koeficient prechodu

$$T = \frac{j_{\mathrm{II}}^{+}}{j_{\mathrm{I}}^{+}} = \frac{k'}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{2kk'}{(k + k')^2} \tag{4.66}$$

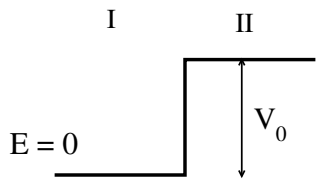
Všimnime si, že koeficient prechodu sa nerovná $|t|^2 = |C|^2/|A|^2$. Dôvodom je rozdielna rýchlosť pohybu častice pred a za potenciálovým schodom ($k \neq k'$). Samozrejme platí

$$T + R = 1 \tag{4.67}$$

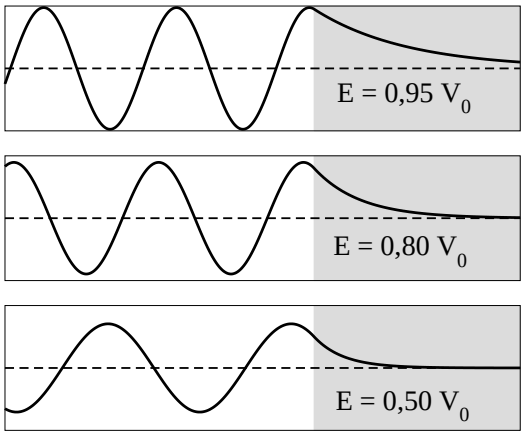
pretože častica sa buď odrazí, alebo cez schod prejde. Zaujímavé je tiež, že oba koeficienty, T aj R, sú symetrickou funkciou k a k'. To znamená, že pravdepodobnosť odrazu od potenciálového schodu je taká istá aj v prípade, keď častica prichádza z oblasti s vyššou potenciálnou energiou. Kvantová častica sa teda odrazí aj od miesta, kde potenciálna energia klesá.

Nájdeme teraz koeficient odrazu kvantovej častice od potenciálového schodu na obrázku 4.8 v prípade, že schod je vyšší ako energia častice. Pretože $V_0 > E$, kvantová častica sa nemôže v oblasti II pohybovať. Jej vlnová funkcia klesá exponenciálne so vzdialenosťou od rozhrania. Hodnota vlnovej funkcie v priestore za schodom je ale rôzna od nuly:

$$\Phi_{\mathrm{II}} = Ce^{-\kappa x} \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \tag{4.68}$$



Obr. 4.8. Potenciálový schod.



Obr. 4.9. Reálna časť vlnovej funkcie pre časticu dopadajúcu na potenciálový schod. Energia častice je (zhora nadol) $E = 0{,}95V_0$, $0{,}8V_0$ a $0{,}5V_0$. Hoci častica preniká do konečnej oblasti za hranicou potenciálového schodu, musí sa s pravdepodobnosťou rovnou jednej od schodu odraziť. Všimnite si, ako sa mení vlnová dĺžka v závislosti od energie častice.

Koeficient odrazu nájdeme zo vzťahu (4.65) ak položíme $k' = i\kappa$:

$$R = \left|\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right|^2 = 1 \tag{4.69}$$

Častica sa teda určite odrazí. Koeficient prechodu je preto $T = 0$. To vidíme aj z toho, že prúd $j_{\mathrm{II}} = 0$ (príklad 2.9). Amplitúda prechodu t je ale nenulová,

$$t = \frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik - \kappa} e^{-\kappa x} \tag{4.70}$$

Amplitúda prechodu t teda nedefinuje koeficient prechodu, len vlnovú funkciu na druhej strane rozhrania.

Na obrázku 4.9 je ukázaná vlnová funkcia častice dopadajúcej na potenciálový schod. Častica má energiu nižšiu, ako je schod. Vidíme, že dosah vlnovej funkcie do oblasti schodu je vyšší pre väčšie energie častice.

4.5 Prechodová matica

Vo všetkých úlohách o rozptyle kvantovej častice sme predpokladali, že vlnová funkcia $\Phi(x) = \Phi^+(x) + \Phi^-(\mathrm{x})$ pozostáva z dvoch zložiek: z funkcie $\Phi^+(x)$, ktorá zodpovedá častici pohybujúcej sa zľava doprava (v kladnom smere osi x) a z funkcie $\Phi^-(x)$, ktorá zodpovedá častici pohybujúcej

sa sprava doľava. Zmenu vlnovej funkcie pri prechode z miesta a do miesta b potom môžeme opísať pomocou prechodovej matice (pozri napríklad rovnicu 4.29 pre pravouhlú potenciálovú bariéru alebo rovnicu 4.98 pre potenciálový schod)

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(b) \\ \Phi^-(b) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{ba} \begin{pmatrix} \Phi^+(a) \\ \Phi^-(a) \end{pmatrix} \tag{4.71}$$

Dôležitou vlastnosťou prechodovej matice je to, že súčin dvoch prechodových matíc je opäť prechodová matica. Naozaj, vlnovú funkciu v bode $c > b > a$, môžeme vyjadriť v tvare

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(c) \\ \Phi^-(c) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{cb} \begin{pmatrix} \Phi^+(b) \\ \Phi^-(b) \end{pmatrix} \tag{4.72}$$

a s využitím vzťahu (4.71) dostaneme

$$\begin{pmatrix} \Phi^+(c) \\ \Phi^-(c) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{cb}\mathbf{T}_{ba} \begin{pmatrix} \Phi^+(a) \\ \Phi^-(a) \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{ca} \begin{pmatrix} \Phi^+(a) \\ \Phi^-(a) \end{pmatrix} \tag{4.73}$$

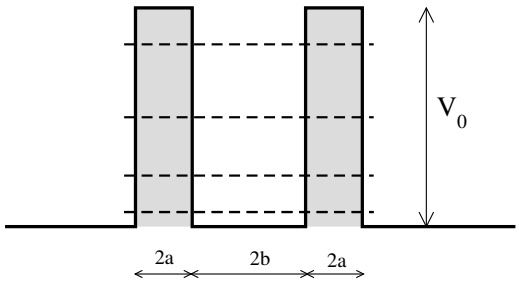
takže platí

$$\mathbf{T}_{ca} = \mathbf{T}_{cb}\mathbf{T}_{ba} \tag{4.74}$$

Výhodou formalizmu prechodovej matice je to, že umožňuje analýzu prechodu častice cez zložitejšie potenciálové bariéry. Viaceré aplikácie metódy prechodovej matice na riešenie kvantových problémov možno nájsť napríklad v knihe [23].

4.6 Dvojitá potenciálová bariéra. Rezonančné tunelovanie

Ako príklad využitia metódy matice prechodu uvažujme prechod kvantovej častice cez dve potenciálové bariéry zobrazené na obrázku 4.10. Z predchádzajúceho textu vieme, že pokiaľ je energia častice menšia ako výška bariéry, môže častica cez jednu bariéru pretunelovať. Koeficient prechodu T v je takomto prípade daný vzťahom (4.57) a exponenciálne klesá so šírkou bariéry. Ak sú však bariéry dve, môže sa stať, že koeficient prechodu sa aj v prípade $E < V_0$ rovná jednej. Tento, na prvý pohľad paradoxný výsledok ukazuje, nakoľko sa kvantová mechanika líši od klasickej mechaniky.



Obr. 4.10. Dve potenciálové bariéry. Energia častice prichádzajúcej zľava je menšia ako výška bariér V_0. Napriek tomu existujú rezonančné energie, pre ktoré sa koeficient prechodu častice cez celý systém rovná jednej.

Pre výpočet koeficientu prechodu potrebujeme vyjadriť vlnovú funkciu na pravej strane bariéry (R) pomocou vlnovej funkcie na ľavej strane (L):

$$\begin{pmatrix} \Psi_{\mathrm{R}}^{+} \\ \Psi_{\mathrm{R}}^{-} \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \Psi_{\mathrm{L}}^{+} \\ \Psi_{\mathrm{L}}^{-} \end{pmatrix} \tag{4.75}$$

kde matica prechodu cez celú sústavu bariéra – voľný priestor – bariéra je daná súčinom troch matíc prechodu

$$\mathcal{T} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} e^{+ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \mathbf{T} \tag{4.76}$$

T je matica prechodu pre jednu bariéru. Zo vzťahov (4.50) vidíme, že odraz od celého systému je nulový, ak je nulová amplitúda odrazu, daná rovnicou (4.46), teda ak platí

$$r = -\frac{\mathcal{T}_{21}}{\mathcal{T}_{22}} = 0 \tag{4.77}$$

Vzťah (4.77) je splnený, ak $\mathcal{T}_{21} = 0$. Po vynásobení matíc v rovnici (4.76) dostaneme

$$\mathcal{T}_{21} = T_{21} \left[e^{ikb} T_{11} + e^{-ikb} T_{22} \right] \tag{4.78}$$

a po dosadení za T_{11} a T_{22} z rovníc (4.33)

$$T_{11} = \cosh 2\kappa a + \frac{i}{2} \left[\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right] \sinh 2\kappa a, \quad T_{22} = T_{11}^{*} \tag{4.79}$$

môžeme podmienku nulového odrazu (4.77) prepísať do tvaru

$$\operatorname{cotg} 2kb = \frac{1}{2} \left[\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right] \operatorname{tgh} 2\kappa a \tag{4.80}$$

z ktorej nájdeme rezonančnú energiu. Rovnicu (4.80) vyriešime numericky rovnakou metódou, akou sme našli energie častice viazanej v potenciálovej jame. Nebudeme teraz hľadať jej riešenie, len sa sa presvedčíme, že naozaj existujú energie častice, pre ktoré je rovnica (4.80) splnená. Ak totiž uvažujeme limitu $a \to \infty$, ktorá zodpovedá prípadu dvoch nekonečne širokých bariér, dostaneme[4] z rovnice (4.80)

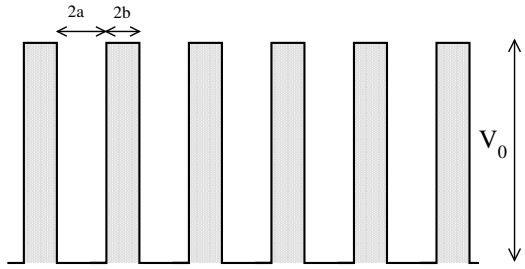
$$\operatorname{cotg} 2kb = \frac{1}{2} \left[\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right] \tag{4.81}$$

ktorá je ekvivalentná rovniciam pre vlastné energie viazaných stavov pre konečnú potenciálovú jamu šírky $2b$, ktorá riešenie určite má.

Fabryho-Perotov rezonátor

Schopnosť kvantovej častice pretunelovať s pravdepodobnosťou, ktorá sa rovná jednej, cez dvojicu bariér, nie je taká prekvapujúca. Má totiž analógiu vo Fabryho -Perotovom rezonátore, známom z optiky [28].

[4] Využijeme limitu $\lim_{x\to\infty} \operatorname{tgh} x = 1$.



Obr. 4.11. Nekonečný jednorozmerný periodický systém vytvorený periodickým opakovaním pravouhlých bariér. [10]. Energia elektrónu pohybujúceho sa v periodickom prostredí je $E > V_0$. Štruktúra je periodická s priestorovou periódou $\ell = 2a + 2b$.

4.7 Periodický potenciál

Uvažujme teraz systém zložený z nekonečného množstva periodicky umiestnených pravouhlých bariér (obrázok 4.11). Zaujíma nás, za akých podmienok sa kvantová častica môže takýmto systémom pohybovať. Priestorová perióda štruktúry je

$$\ell = 2a + 2b \tag{4.82}$$

Ak má častica energiu E, potom je jej vlnový vektor v priestore medzi bariérami $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ a v oblasti s potenciálnou energiou V_0 je $k' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$. Vlnové funkcie v dvoch bodoch vzdialených o jednu periódu ℓ spolu súvisia vzťahom

$$\Phi(x + \ell) = \mathcal{T}\Phi(x) \tag{4.83}$$

kde prechodová matica $\mathcal{T}$ má tvar

$$\mathcal{T} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} e^{2ikb} & 0 \\ 0 & e^{-2ikb} \end{pmatrix} \tag{4.84}$$

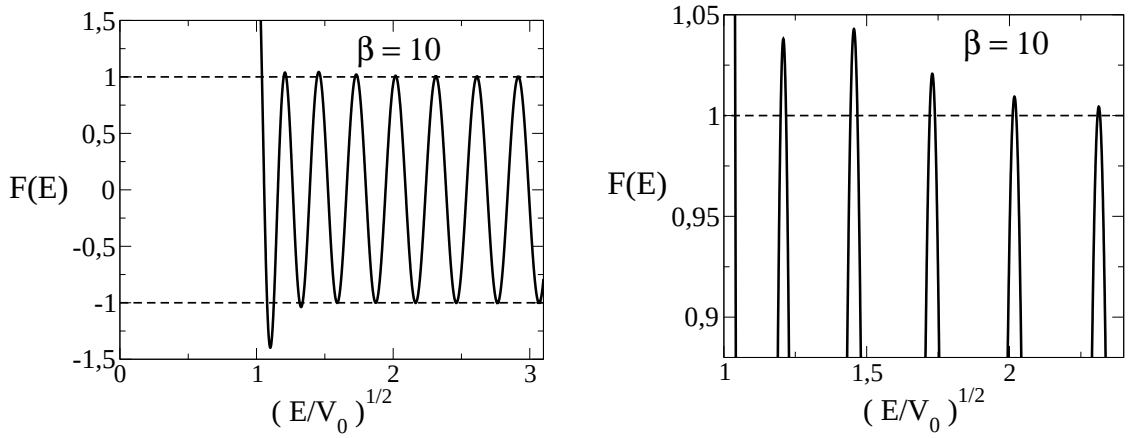
a matica $\mathbf{T}$ je prechodová matica pre pravouhlú bariéru šírky $2a$ s potenciálnou energiou V_0. Po prechode cez N periód dostaneme

$$\Phi(x + N\ell) = \mathcal{T}^N\Phi(x) \tag{4.85}$$

Ak sa má častica v takomto systéme voľne pohybovať, potom matica $\mathcal{T}$ nemôže mať vlastné hodnoty väčšie alebo menšie ako 1. Z rovnice (4.7) by sme totiž v tom prípade dostali, že vlnová funkcia by exponenciálne rástla, resp. klesala s počtom periód N, preto by vlnová funkcia $\Phi(x + N\ell)$ nemohla zodpovedať fyzikálne realizovateľnému stavu (nebola by napríklad normovateľná). Musí preto platiť $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. Pretože determinant prechodovej matice $\mathcal{T}$ sa rovná jednej,[5] spĺňajú zároveň jej vlastné hodnoty vzťah $\lambda_1\lambda_2 = 1$ Preto ich môžeme vyjadriť v tvare

$$\lambda_1 = e^{+iq\ell}, \qquad \lambda_2 = e^{-iq\ell} \tag{4.86}$$

[5]Pretože obe matice na pravej strane rovnice (4.84) majú determinant rovný jednej.



Obr. 4.12. Ľavý obrázok ukazuje funkciu $F(E)$, definovanú rovnicou (4.88) ako funkciu $\sqrt{E/V_0}$. Energie, pre ktoré je pravá strana rovnice (4.88) menšia ako 1 (v absolútnej hodnote), tvoria povolené energetické pásy, ktoré sú od seba oddelené zakázanými pásmi. Pravý obrázok ukazuje detail ľavého obrázku. Častica s energiou v zakázanom páse sa cez periodický systém nemôže pohybovať.

kde q je vlnový vektor, ktorý zatiaľ nepoznáme. Z lineárnej algebry ale vieme, že súčet vlastných hodnôt ľubovoľnej matice sa rovná stope matice (teda súčtu jej diagonálnych prvkov):

$$\mathrm{Tr}\,\mathcal{T} = \mathcal{T}_{11} + \mathcal{T}_{22} = e^{+iq\ell} + e^{-iq\ell} = 2\cos q\ell = 2F(E) \tag{4.87}$$

kde funkcia

$$F(E) = \cos 2k'a \cos 2kb - \frac{1}{2}\left[\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}\right] \sin 2k'a \sin 2kb \tag{4.88}$$

je funkciou len energie častice. Z rovnosti (4.87) vidíme, že v periodickom potenciáli sú povolené len stavy s takou energiou, ktorá spĺňa vzťah

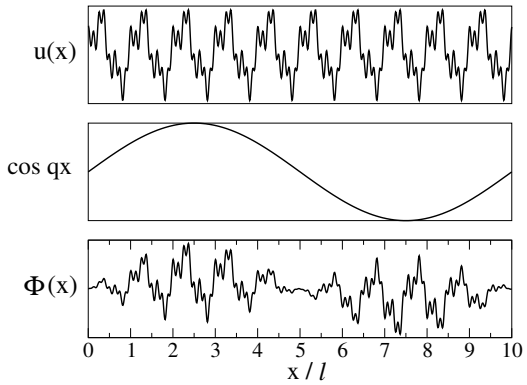
$$|F(E)| \leq 1 \tag{4.89}$$

pretože len pre také energie má q reálne hodnoty. Podmienka (4.89) nám umožňuje získať všetky hodnoty energie, pre ktoré sa častica môže pohybovať v priestorovo nekonečnom periodickom prostredí.

Na obrázku 4.12 je ukázaná funkcia $F(E)$ ako funkcia energie E. Vidíme, že naozaj existujú intervaly energie, pre ktoré je $|F(E)| > 1$. Pre tieto energie neexistuje reálna hodnota vlnového vektora q, ktorá by spĺňala rovnicu (4.87). Častica s takouto energiou sa preto periodickou štruktúrou nemôže pohybovať. Existujú však aj oblasti energie, v ktorých je $|F(E)| < 1$. Pre tieto energie sa častica pohybuje v štruktúre s vlnovým vektorom $q = q(E)$. Rovnica (4.87) vtedy definuje vzťah medzi energiou a vlnovým vektorom.

4.7.1 Elektrón v kryštalickej mriežke kovu

Opísaný model je najjednoduchším modelom pre opis pohybu kvantových častíc v periodickom potenciáli. V reálnych fyzikálnych štruktúrach je, samozrejme, potenciál zložitejší, jeho detailná štruktúra však nie je dôležitá. Podstatná je periodičnosť potenciálu v priestore, $V(x) = V(x+\ell)$.



Obr. 4.13. Blochova funkcia: na hornom obrázku je funkcia $u(x)$, periodická s periódou ℓ. Stredný obrázok ukazuje reálnu časť funkcie e^{iqx} pre konkrétnu hodnotu $q = 2\pi/(10\ell)$, dolný obrázok je Blochova funkcia $\Phi(x) = u(x)\cos qx$.

Fyzikálna podstata vzniku zakázaných pásov teda súvisí s vlnovou povahou kvantovej častice. Na rozhraniach medzi jednotlivými oblasťami dochádza k odrazu častice, preto výsledná vlnová funkcia v každom bode pozostáva z (nekonečného) množstva príspevkov, súvisiacich s odrazmi na rôznych rozhraniach. Pre zakázané energie sa tieto príspevky navzájom vyrušia a pohyb častice naprieč vzorkou je nemožný.

Najvyšší plne obsadený energetický pás sa v teórii tuhých látok volá valenčný pás. Nad ním leží vodivostný pás. Obsadenosť vodivostného pásu rozhoduje o elektrónových vlastnostiach kryštálu. V izolantoch je vodivostný pás prázdny, v kovoch je spravidla obsadený do polovice. Fermiho energia potom udáva vzdialenosť od dna vodivostného pásu po najvyššiu obsadenú hladinu. Valenčný a vodivostný pás sú od seba oddelené zakázaným pásom.

Náš jednoduchý model zároveň vysvetľuje, prečo sa elektróny v kryštalickej mriežke kovu vôbec môžu pohybovať. Ak si predstavíme kov pozostávajúci z periodicky rozmiestnených kladných iónov, medzi ktorými sa pohybujú elektróny, potom z pohľadu klasického fyzika vôbec nie je jasné, ako sa môže elektrón v takomto prostredí voľne pohybovať bez toho, aby sa ustavične neodrážal od jednotlivých iónov, ktoré mu stoja v ceste. Vďaka svojej vlnovej povahe je však elektrón schopný sa periodickej štruktúre „prispôsobiť". Cena, ktorú musí zaplatiť, je komplikovaný disperzný vzťah medzi vlnovým vektorom q a energiou E,

$$\cos q\ell = F(E) \tag{4.90}$$

V časti 10.3 uvidíme, že podobným spôsobom sa periodickému prostrediu prispôsobuje aj disperzný vzťah mechanických vĺn šíriacich sa kryštalickou mriežkou.

Blochova funkcia

Vlnová funkcia elektrónu v periodickom potenciáli sa podstatne líši od vlnovej funkcie rovinnej vlny. Ak prechodovú maticu $\mathcal{T}$ diagonalizujeme, prepíšeme rovnicu (4.83) do tvaru

$$\Phi^+(x+\ell) = e^{+iq\ell}\Phi^+(x) \tag{4.91}$$

pre časticu pohybujúcu sa zľava doprava a

$$\Phi^-(x+\ell) = e^{-iq\ell}\Phi^-(x) \tag{4.92}$$

pre časticu pohybujúcu sa sprava doľava.

Funkcie $\Phi^+(x)$ a $\Phi^-(x)$ sú vlastné funkcie prechodovej matice. Ľahko sa presvedčíme, že podmienku (4.91) spĺňa každá funkcia $\Phi(x)$ v tvare

$$\Phi(x) = u(x)e^{iqx} \tag{4.93}$$

kde $u(x)$ je periodická funkcia s periódou ℓ:

$$u(x+\ell) = u(x) \tag{4.94}$$

Tvar funkcie $u(x)$ závisí od konkrétnej realizácie potenciálu.

Funkcia $\Phi^+(x)$ daná rovnicou (4.93) je tzv. Blochova funkcia. Podľa Blochovej teorémy je vlnová funkcia elektrónu v periodickom potenciáli vždy súčinom periodickej funkcie $u(x)$ a exponenciálnej funkcie e^{iqx}. Príkladom Blochovej funkcie je funkcia ukázaná na obrázku 4.13.

Fotonické kryštály

Analógiou kvantových periodických systémov sú fotonické kryštály [23, 27, 28], ktoré pozostávajú z periodicky sa opakujúcich oblastí s rôznym indexom lomu. V závislosti od parametrov štruktúry sa vo fotonických kryštáloch pozorujú zakázané pásy frekvencií, pre ktoré je štruktúra nepriehľadná, a pásy povolených frekvencií, pre ktoré sa elektromagnetické žiarenie periodickou štruktúrou môže šíriť. Podobne ako v prípade kvantových častíc je ale vlnový vektor vlny rôzny od vlnového vektora tej istej vlny vo vákuu.

4.8 Príklady

4.1. Uvažujme voľnú časticu pohybujúcu sa pozdĺž osi x. Ak v bode x_1 má jej vlnová funkcia tvar $\Psi(x_1) = Ae^{ikx_1} + Be^{-ikx_1}$, aký tvar bude mať v bode x_2?
Riešenie: Riešenie je samozrejme $\Psi(x_2) = Ae^{ikx_2} + Be^{-ikx_2}$. Tento výsledok môžeme dostať aj z formalizmu prechodovej matice, ak vlnovú funkciu môžeme vyjadríme v tvare

$$\Phi(x_2) = \begin{pmatrix} \Phi^+(x_2) \\ \Psi^-(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik(x_2-x_1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(x_2-x_2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^+(x_1) \\ \Phi^-(x_1) \end{pmatrix} \tag{4.95}$$

4.2. Nájdite matice prechodu pre potenciálové schody na obrázku 4.8. Uvažujte prípad $E > V_0$
Riešenie: Vo všeobecnosti môžeme predpokladať, že vlnová funkcia napravo od schodu má tvar

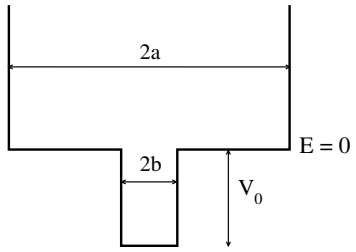
$$\Psi_{\mathrm{II}} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \tag{4.96}$$

Ak sa potenciálový schod nachádza v mieste $x = 0$, potom z rovníc spojitosti odvodíme

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{4.97}$$

kde

$$T_{11} = T_{22} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k}{k'}\right), \qquad T_{12} = T_{21} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k}{k'}\right) \tag{4.98}$$



Obr. 4.14. Nekonečná potenciálová jama s konečnou potenciálovou jamou hĺbky V_0.

4.3. Nájdite energiu základného stavu sústavy na obrázku 4.14. Nájdite podmienku, kedy je energia základného stavu záporná.

4.4. Nájdite energiu základného stavu častice uväznenej v nesymetrickej pravouhlej potenciálovej jame zobrazenej na obrázku 4.15. Ukážte, že pre dostatočne plytké jamy neexistuje žiadny viazaný stav. Nájdite výšku bariéry, pre ktorú vznikne presne jeden stav.
Riešenie: Úlohu môžeme riešiť štandardným spôsobom: rozdelíme priestor na tri oblasti. Vlnovú funkciu v bariére a napravo vyjadríme tak ako pri riešení konečnej potenciálovej jamy. Podmienka na ľavej strane bariéry bude

$$\Phi(x = 0) = 0 \tag{4.99}$$

pretože naľavo od potenciálovej jamy je vlnová funkcia nulová (v oblasti s nekonečne vysokou potenciálnou energiou) sa častica nemôže nachádzať).
Riešenie ale môžeme nájsť aj priamo zo známych viazaných stavov konečnej potenciálovej jamy šírky $\ell = 2a$ (obrázky 4.2 a 4.4). Potenciálovú jamu na obrázku 4.15 dostaneme tak, že konečnú potenciálovú jamu prehradíme v prostriedku nekonečne vysokou bariérou. Túto operáciu prežijú len tie stavy, pre ktoré je vlnová funkcia v strede jamy nulová (pozri aj príklad 3.9). Preto bude základným stavom funkcia $\Phi_2(x)$ na obrázku 4.4, a vyššie stavy sú Φ_{2n}. Z grafického riešenia rovnice pre vlastné energie konečnej potenciálovej jamy (obrázok 4.4) ale vieme, že počet viazaných stavov závisí od parametra β. Z rovnice (4.17) a z obrázku 4.4 vidíme, že konečná potenciálová jama má aspoň dve riešenia vtedy, keď

$$\frac{\pi}{2} < \beta = \sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}} \tag{4.100}$$

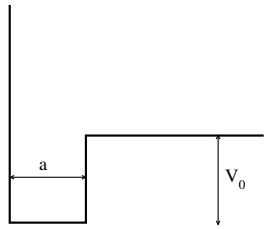
a menej ako štyri riešenia, ak

$$\beta < \frac{3\pi}{2} \tag{4.101}$$

Pre tieto parametre má preto jama 4.15 práve jedno riešenie. Pre hodnoty $\beta < \pi/2$ nemôže v jame vzniknúť viazaný stav.

4.5. Na obrázku 4.6 vidíme, že závislosť koeficientu prechodu častice cez pravouhlú bariéru osciluje ako funkcia energie častice. Nájdite energie, pre ktoré koeficient prechodu nadobúda lokálne minimá.

4.6. Elektrón s hmotnosťou m sa nachádza v priestore medzi dvoma bariérami (obrázok 4.10). Výška bariér je $V_0 = 1$ eV. Aká je vzdialenosť dvoch bariér, ak $\beta = \sqrt{2mV_0b^2/\hbar^2} = 10$? [$b = 1{,}22 \times 10^{-8}$ m, vzdialenosť bariér je $2b$.]



Obr. 4.15. Asymetrická pravouhlá potenciálová jama. Potenciálová stena vľavo je nekonečne vysoká, vpravo má konečnú výšku V_0.

4.7. Nájdite koeficient prechodu častice cez pravouhlú bariéru, keď energia častice je presne rovná výške potenciálovej bariéry, $E = V_0$.
Riešenie: V oblasti bariéry má Schrödingerova rovnica tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x^2} = 0 \tag{4.102}$$

Jej riešením je lineárna funkcia

$$\Phi_{\mathrm{II}}(x) = F + Gx \tag{4.103}$$

Ďalší postup je rovnaký, ako pre prípad všeobecnej výšky bariéry: z podmienok spojitosti vlnovej funkcie a jej prvej derivácie na hraniciach bariéry eliminujeme koeficienty F a G prechodovú maticu.

KAPITOLA 5

Harmonický oscilátor

Harmonický oscilátor je modelom pre všetky harmonické kmity v prírode. Najjednoduchším klasickým oscilátorom je malé závažie zaveseného na pružine. Pohybová rovnica klasického harmonického oscilátora má tvar

$$m\frac{\partial^2 x(t)}{\partial t^2} = -kx(t) \tag{5.1}$$

Pri malej výchylke x od rovnovážnej polohy $x = 0$ pôsobí na teleso vratná sila $F = -kx$, ktorá je priamo úmerná výchylke. Po vychýlení z rovnovážnej polohy $x = 0$ častica kmitá s frekvenciou

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{5.2}$$

Kmity oscilátora sú harmonické,

$$x(t) = a\sin(\omega t + \phi) \tag{5.3}$$

a amplitúdou (maximálnou výchylkou) a. Oscilátor reprezentuje pohyb malej častice hmotnosti m v kvadratickej potenciálovej jame

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{5.4}$$

Celkovú energiu oscilátora môžeme vyjadriť pomocou amplitúdy a v tvare

$$E = \frac{1}{2}ka^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 \tag{5.5}$$

Harmonický oscilátor patrí medzi niekoľko málo presne riešiteľných problémov tak v klasickej i v kvantovej mechanike.[1] Riešením harmonického oscilátora preto môžeme nájsť typické vlastnosti viazaných kvantových stavov.

[1] Ďalšia je pravouhlá potenciálová jama, Coulombický potenciál v atóme vodíka a niekoľko špeciálnych potenciálov. Mnohé presne riešiteľné problémy aj s riešeniami nájde čitateľ v zbierke príkladov [15].

Typickými harmonickými kmitmi vo fyzike sú kmity molekúl, kde jadrá jednotlivých atómov kmitajú okolo svojich rovnovážnych polôh (pozri časť 10.2). Kvantovanie kmitov atómov v kryštalickej mriežke nás privedie ku kvantovaným zvukovým vlnám – fonónom, ktorým sa budeme venovať v časti 10.3.3. Aj módy elektromagnetického poľa, ktorým sme sa venovali pri výpočte žiarenia čierneho telesa, môžeme reprezentovať ako excitácie kvantového harmonického oscilátora. Znalosť viazaných stavov harmonického oscilátora je dôležitá aj pre kvalitatívne porozumenie vlastností kvantových častíc viazaných v ľubovoľnom potenciáli, pretože väčšinu potenciálov $V(x)$ možno v okolí ich minima aproximovať kvadratickým potenciálom.

V tejto kapitole ukážeme základné vlastnosti kvantového oscilátora. Presnému riešeniu Schrödingerovej rovnice pre harmonický oscilátor je venovaná časť 5.1.1, ktorú možno pri prvom čítaní vynechať. Táto časť však môže byť dôležitá v ďalšom štúdiu kvantovej mechaniky a fyziky tuhých látok, pretože v nej zavedieme dva nehermitovské operátory: anihilačný operátor $\mathbf{a}$ a kreačný operátor $\mathbf{a}^\dagger$, ktoré sa s výhodou uplatnia napríklad pri kvantovaní mechanických vibrácií kryštálu alebo elektromagnetického poľa. V ďalších častiach tejto kapitoly porovnáme správanie klasického a kvantového oscilátora a ukážeme približnú metódu výpočtu vlastných energií častice v potenciálovej jame, ktorú môžeme aproximovať harmonickým potenciálom.

5.1 Kvantový oscilátor

Bezčasová Schrödingerova rovnica pre harmonický oscilátor má tvar

$$\mathbf{H}\Phi_n(x) = E_n\Phi_n(x) \tag{5.6}$$

s Hamiltoniánom

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{5.7}$$

Skôr, ako v nasledujúcej časti nájdeme presné riešenie Schrödingerovej rovnice, odhadnime na základe už známych poznatkov kvalitatívne vlastnosti častice viazanej v harmonickej potenciálovej jame. Potenciálna energia $V(x) = m\omega^2x^2/2$ núti kvantovú časticu pohybovať sa len v ohraničenej časti priestoru. Preto očakávame, že jej vlastné energie budú diskrétne, podobne ako vlastné energie častice v nekonečnej potenciálovej jame. Okrem toho, všetky energie musia byť väčšie, ako je minimum potenciálnej energie $V_{\min} = 0$. Pretože potenciálová jama je symetrická, $V(x) = V(-x)$, musia vlnové funkcie vlastných stavov byť symetrické, alebo antisymetrické: pre niektoré vlastné stavy bude platiť $\Phi_n(x) = +\Phi_n(-x)$, pre iné bude $\Phi_m(x) = -\Phi_m(-x)$.

5.1.1 Riešenie Schrödingerovej rovnice

Je výhodné vyjadriť Schrödingerovu rovnicu v bezrozmerných premenných. Preto zaveďme typickú dĺžku ξ, ktorá bude charakterizovať šírku potenciálovej jamy a vyjadrime bezčasovú Schrödingerovu rovnicu v bezrozmernej premennej $y = x/\xi$.

$$\frac{\hbar^2}{2m\xi^2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m^2\omega^2\xi^4}{\hbar^2}y^2\right]u_n(y) = E_n u_n(y) \tag{5.8}$$

Ak zvolíme

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{5.9}$$

potom rovnica (5.8) nadobudne jednoduchý tvar

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2\right] u_n(y) = \epsilon_n u_n \tag{5.10}$$

kde funkcia $u_n(y) = \Phi_n(x/\xi)$ a bezrozmerná energia ϵ_n súvisí s energiou E_n vzťahom

$$\epsilon_n = \frac{E_n}{\hbar\omega} \tag{5.11}$$

Všimnime si, že v rovnici (5.10) nevystupuje žiaden fyzikálny parameter: y aj ϵ_n sú bezrozmerné čísla. Už teraz preto vieme povedať, že vlastné energie harmonického oscilátora budú priamo úmerné súčinu frekvencie a Planckovej konštanty: $E \propto \hbar\omega$ (pozri rovnicu 5.11).

Zoraďme vlastné energie tak, aby

$$0 < \epsilon_0 < \epsilon_1 < \dots \tag{5.12}$$

a definujme dvojicu operátorov $\mathbf{a}$ a $\mathbf{a}^\dagger$ vzťahmi

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[y + \frac{\partial}{\partial y}\right], \tag{5.13}$$

$$\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[y - \frac{\partial}{\partial y}\right] \tag{5.14}$$

Z komutačného vzťahu

$$\left[\frac{\partial}{\partial y},\ y\right] = 1 \tag{5.15}$$

odvodíme operátorové rovnosti

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} = \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 - 1\right], \qquad \mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 + 1\right] \tag{5.16}$$

Takže rovnicu (5.10) môžeme prepísať alebo do tvaru

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}\ u_n = \left[\epsilon_n - \frac{1}{2}\right] u_n \tag{5.17}$$

alebo do tvaru

$$\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger\ u_n = \left[\epsilon_n + \frac{1}{2}\right] u_n \tag{5.18}$$

Vlastné energie ϵ_n a vlastné funkcie u_n harmonického oscilátora teda môžeme nájsť, ak poznáme vlastné energie a vlastné funkcie operátorov $\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger$ a $\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}$ [8]. Vyjdeme z rovnice (5.17), na ktorú budeme pôsobiť sprava operátorom $\mathbf{a}$:

$$\mathbf{a}\left[\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}\, u_n\right] = \mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger\left[\mathbf{a}\, u_n\right] = \left[\epsilon_n - \frac{1}{2}\right]\left[\mathbf{a}\, u_n\right] = \left\{\left[\epsilon_n - 1\right] + \frac{1}{2}\right\}\left[\mathbf{a}\, u_n\right] \tag{5.19}$$

Takže platí

$$\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger\left[\mathbf{a}\, u_n\right] = \left\{\left[\epsilon_n - 1\right] + \frac{1}{2}\right\}\left[\mathbf{a}\, u_n\right] \tag{5.20}$$

Porovnaním s rovnicou (5.18) vidíme, že funkcia $\mathbf{a}u_n$ je vlastnou funkciou operátora $\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger$ s energiou $\epsilon_n - 1$. Preto musí byť priamo úmerná funkcii u_{n-1}

$$\mathbf{a}\, u_n = c_n u_{n-1} \tag{5.21}$$

a zároveň musí pre vlastné energie platiť vzťah

$$\epsilon_n - 1 = \epsilon_{n-1} \tag{5.22}$$

Operátor $\mathbf{a}$ teda transformuje vlastnú vlnovú funkciu u_n na vlastnú funkciu, ktorá zodpovedá najbližšej nižšej energii. Konštantu c_n určíme neskôr.

Pôsobením operátora $\mathbf{a}$ na funkciu základného stavu u_0 prídeme k rovnici

$$\mathbf{a}u_0(y) = 0 \tag{5.23}$$

pretože žiadny nižší stav už existovať nemôže. Ak dosadíme explicitný tvar operátora $\mathbf{a} = y + \partial/\partial y$, dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial u_0}{\partial y} + y u_0 = 0 \tag{5.24}$$

ktorá má riešenie

$$u_0(y) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} \tag{5.25}$$

Funkcia $u_0(y)$ je normovaná, teda platí

$$\int \mathrm{d}y |u_0(y)|^2 = 1 \tag{5.26}$$

Pre $n = 0$ je ľavá strana rovnice (5.17) nulová. Aby sa aj pravá strana rovnala nule, musí platiť $\epsilon_0 - 1/2 = 0$. Dostali sme teda energiu základného stavu

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2} \tag{5.27}$$

Vyššie vlastné energie získame z iteračného vzťahu (5.22) $\epsilon_n = \epsilon_{n-1} + 1$. Vlastné energie sú teda

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2} \tag{5.28}$$

Pôsobme teraz na rovnicu (5.18) zľava operátorom $\mathbf{a}^\dagger$, dostaneme

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}(\mathbf{a}^\dagger u_n) = \left[\epsilon_n + \frac{1}{2}\right](\mathbf{a}^\dagger u_n) = \left[(\epsilon_n + 1) - \frac{1}{2}\right](\mathbf{a}^\dagger u_n) \tag{5.29}$$

Je teda[2]

$$\mathbf{a}^\dagger u_n = c^*_{n+1} u_{n+1} \tag{5.31}$$

Táto rovnica nám umožňuje vygenerovať všetky vlastné funkcie. Pretože $\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\partial}{\partial y} - y\right]$, dostaneme jednoduchú iteračnú schému

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2}c^*_{n+1}}\left[y u_n - \frac{\partial u_n}{\partial y}\right] \tag{5.32}$$

Z rovníc (5.21) a (5.31) dostaneme

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} u_n = \mathbf{a}^\dagger c_n u_{n-1} = c^*_n c_n u_n \tag{5.33}$$

Z rovnice (5.17) ale máme

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}\, u_n = \left[\epsilon_n - \frac{1}{2}\right] u_n = n u_n \tag{5.34}$$

Z posledných dvoch rovníc dostaneme $c^*_n c_n = n$. Zvoľme c_n reálne, potom je

$$c_n = \sqrt{n} \tag{5.35}$$

Z iteračného vzťahu (5.32) potom odvodíme explicitný tvar funkcií $u_n(y)$

$$u_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\, e^{-y^2/2} H_n(y) \tag{5.36}$$

kde $H_n(y)$ je Hermitov polynóm stupňa n. Niekoľko prvých Hermitových polynómov môžeme priamo nájsť z iteračnej schémy (5.32):

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 & H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 & H_3(y) &= 8y^3 - 12y \end{aligned} \tag{5.37}$$

Matematické vlastnosti Hermitových polynómov nájdeme v knihách [1, 18, 20]. Pre nás sú dôležité dve vlastnosti Hermitových polynómov:
(1) Hermitove polynómy sú navzájom ortogonálne s váhovou funkciou e^{-y^2} a platí

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y e^{-y^2} H_n(y) H_m(y) = 2^n n! \sqrt{\pi}\delta_{nm} \tag{5.38}$$

[2]Konštanta c_n v rovnici (5.21) je tá istá, ako v rovnici (5.31), pretože $\mathbf{a}^\dagger$ je operátor hermitovsky združený k operátoru $\mathbf{a}$. Musí preto platiť

$$\int \mathrm{d}y u^*_n(y)\mathbf{a}^\dagger u_{n-1} = \left[\int \mathrm{d}y u^*_{n-1}\mathbf{a} u_n\right]^* \tag{5.30}$$

pozri rovnicu (2.72).

(2) Hermitove polynómy tvoria úplný systém funkcií. To znamená, že ľubovoľnú funkciu $f(y)$ môžeme vyjadriť ako nekonečnú sumu

$$f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-y^2/2} H_n(y) \tag{5.39}$$

Táto úplnosť zaručuje, že sme našli všetky vlastné stavy harmonického oscilátora (pozri aj časť 2.3.2).

5.1.2 Vlastné energie a vlastné funkcie

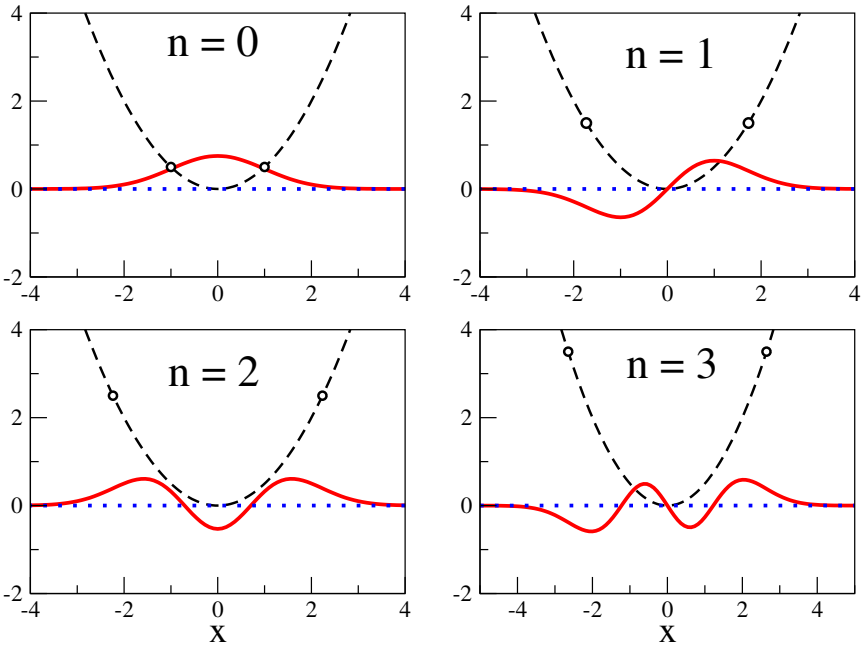
Vlastné energie harmonického oscilátora sú dané rovnicami (5.11) a (5.28):

$$E_n = \hbar\omega \left[n + \frac{1}{2} \right] \tag{5.40}$$

kde $n = 0,1,\ldots$ sú celé čísla. Energia základného stavu, tak ako vo všetkých viazaných kvantových systémoch, je teda nenulová,

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{5.41}$$

To znamená, že kvantová častica uväznená v potenciálovej jame nemôže mať nulovú energiu, a to ani pri nulovej termodynamickej teplote.



Obr. 5.1. Prvé štyri vlastné funkcie harmonického oscilátora $\Phi_n(x)$ dané rovnicou (5.42) pre $\xi = 1$. Prerušovaná čiara ukazuje potenciál $V(x) = x^2/2$. Krúžky ukazujú body návratu, $a = \pm\sqrt{2n+1}$, ktoré sú rovné amplitúde klasického oscilátora s energiou E_n (pozri aj rovnicu 5.46). Všimnite si, že vlnová funkcia základného stavu nemá žiadny nulový bod. Vlnová funkcia n-tého stavu má vždy presne n nulových bodov.

Po preškálovaní späť k premennej x dostaneme vlastné funkcie harmonického oscilátora v tvare

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \xi \pi^{1/4}}} e^{-x^2/2\xi^2} H_n(x/\xi) \tag{5.42}$$

kde ξ je typická dĺžková škála,

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{5.43}$$

Na obrázku 5.1 sú ukázané prvé štyri vlastné funkcie harmonického oscilátora $\Phi_n(x)$. Vidíme, že s rastúcou energiou šírka vlnovej funkcie rastie – častica sa dostane ďalej od minima potenciálu. Tak ako v prípade pravouhlej jamy, sú vlastné funkcie buď párnymi alebo nepárnymi funkciami premennej x. Táto symetria opäť súvisí so symetriou potenciálnej energie (5.4): $V(-x) = V(+x)$. Všimnime si aj, že n-tá vlnová funkcia má práve $n-1$ nulových bodov. Funkcia základného stavu je symetrická a nemá žiadne nulové body.

5.2 Princíp korešpondencie

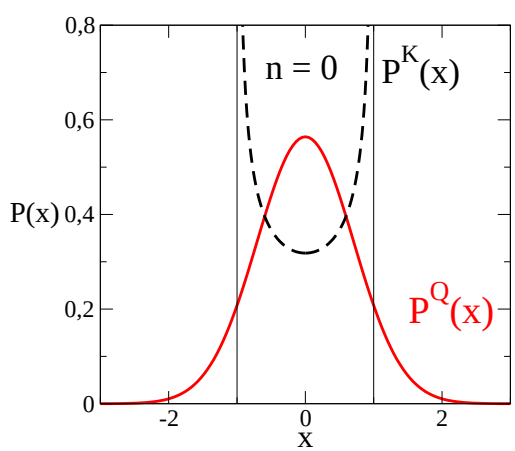
Porovnajme teraz výsledky klasickej a kvantovej mechaniky.

V klasickom harmonickom oscilátore teleso osciluje medzi dvoma najväčšími výchylkami, $x = \pm a$. Amplitúda výchylky závisí od energie $E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$ podľa rovnice (5.5)

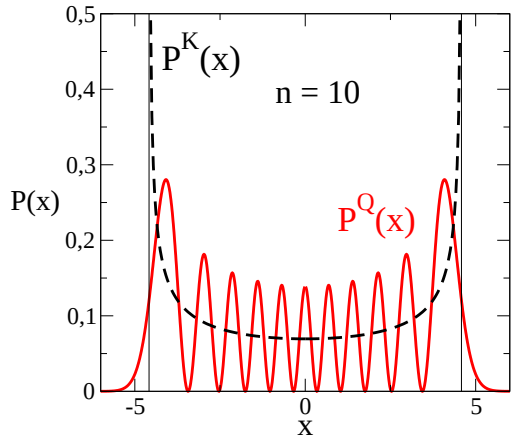
$$a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \tag{5.44}$$

V príklade 5.1 nájdeme hustotu pravdepodobnosti $P^{\mathrm{K}}(x)$, s akou sa klasická častica nachádza v nejakom bode x, v tvare

$$P^{\mathrm{K}}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} \tag{5.45}$$



Obr. 5.2. Pravdepodobnostné rozdelenie pre klasickú a kvantovú časticu s energiou $E_0 = \hbar\omega/2$ v harmonickom potenciáli ($\xi = 1$). Plná čiara je $P^{\mathrm{Q}}(x) = \pi^{-1/2} e^{-x^2}$, prerušovaná čiara je $P^{\mathrm{K}} = \pi^{-1}/\sqrt{1-x^2}$. Amplitúda klasického oscilátora je $a = 1$. Výsledky klasickej a kvantovej teórie sa podstatne líšia.



Obr. 5.3. Pravdepodobnostné rozdelenie pre klasickú a kvantovú časticu s energiou $E_{10} = (10+\frac{1}{2})\hbar\omega$ ($\xi = 1$). Plná čiara je $P^{\mathrm{Q}}(x) = |\Phi_{10}(x)|^2$, prerušovaná čiara je klasické rozdelenie $P^{\mathrm{K}} = \pi^{-1}/\sqrt{1-x^2}$. Amplitúda klasického oscilátora, $a = \sqrt{21}$, je daná rovnicou (5.46). Pre výpočet kvantovej pravdepodobnosti sme do vzťahu (5.42) pre vlnovú funkciu stavu Φ_{10} dosadili Hermitov polynóm $H_{10}(x) = 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240$.

Klasická častica sa teda najčastejšie vyskytuje v okolí najväčšej výchylky. To je pochopiteľné, pretože rýchlosť častice je tam najmenšia.

Aby sme tento výsledok porovnali s naším výsledkom pre kvantovú časticu v n-tom kvantovom stave, musíme najprv nájsť súvis medzi amplitúdou a a parametrom ξ. V n-tom kvantovom stave je energia kvantového oscilátora $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Porovnaním tejto energie s energiou klasického oscilátora, $\frac{1}{2}m\omega^2a^2$ (rovnica 5.5) dostaneme amplitúdu klasického oscilátora

$$a = \xi\sqrt{2n+1} \tag{5.46}$$

Pre jednoduchosť položme v ďalších výpočtoch $\xi = 1$. Pravdepodobnostné rozdelenie kvantovej častice je dané druhou mocninou vlnovej funkcie,

$$P^{\mathrm{Q}}(x) = |\Phi_n(x)|^2 \tag{5.47}$$

Na obrázku 5.2 sú zobrazené pravdepodobnostné rozdelenia $P^Q(x)$ a $P^K(x)$ pre kvantovú a klasickú časticu s energiou $E_0 = \hbar\omega/2$, ktorá zodpovedá základnému stavu kvantovej častice. Vidíme, že výsledky oboch teórií sú diametrálne odlišné. Klasická častica, ako bolo povedané vyššie, sa zdržiava najčastejšie v okolí amplitúdy, zatiaľ čo kvantovú časticu nájdeme najčastejšie v prostriedku potenciálovej jamy.

Obrázok 5.3 ukazuje obe hustoty pravdepodobnosti pre $n = 10$-ty kvantový stav. Energia kvantového oscilátora je

$$E_{10} = \hbar\omega\left(10 + \frac{1}{2}\right) \tag{5.48}$$

Vidíme, že pravdepodobnostné rozdelenie kvantovej častice sa oveľa viac podobá na klasické rozdelenie.

Oba výsledky súhlasia s našimi očakávaniami. V základnom stave harmonického oscilátora je jeho energia $\hbar\omega/2$ vždy porovnateľná s Planckovou konštantou. Preto základný stav nikdy

nemôžeme opísať klasickou fyzikou a neprekvapuje, že výsledky klasickej fyziky sú odlišné od kvantovej. Klasická fyzika nie je schopná opísať oscilátor s takou malou amplitúdou, $a = \xi = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Pre vysoké kvantové stavy, $n \gg 1$, je energia oscilátora $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ veľká a výsledky kvantovej a klasickej mechaniky musia byť rovnaké. Už pre $n = 10$ sú si výsledky oboch teórií podobné. Môžeme očakávať, že v limite $n \to \infty$ budú rovnaké.

5.3 Približné metódy výpočtu vlastných energií viazaných stavov

Uvažujme teraz fyzikálny problém so všeobecným tvarom potenciálnej energie $V(x)$, o ktorej vieme len to, že má v nejakom bode (napríklad x_0) minimum. Zaujímajme sa o základný stav kvantovej častice v takejto potenciálovej jame. Z vlastnosti kvantových systémov vieme, že častica sa bude pohybovať v blízkosti minima potenciálu. Rozvinieme potenciálnu energiu $V(x)$ do Taylorovho radu,

$$V(x) = V(x_0) + \left.\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2}\right|_{x=x_0} (x - x_0)^2 \dots \tag{5.49}$$

Prvý člen rozvoja je nula, pretože $V(x)$ má v bode x_0 minimum

$$\left.\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right|_{x=x_0} = 0 \tag{5.50}$$

Ak zanedbáme vyššie členy rozvoja, dostaneme potenciálnu energiu harmonického oscilátora.

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x - x_0)^2 \tag{5.51}$$

kde

$$\omega^2 = \frac{1}{m}\left.\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2}\right|_{x=x_0} \tag{5.52}$$

je frekvencia harmonických kmitov, ktorá nám priamo umožní odhadnúť energiu základného stavu,

$$E_0 \approx \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{5.53}$$

Takéto priblíženie je tým presnejšie, čím viac sa $V(x)$ podobá na kvadratickú funkciu. V mnohých prípadoch ho môžeme použiť aj na výpočet vyšších excitovaných stavov.

5.4 Príklady

5.1. Nájdite miesto, kde sa klasická častica kmitajúca v potenciáli (5.4) vyskytuje najčastejšie.
Riešenie: Aj bez výpočtu nájdeme, že klasická častica trávi najdlhší čas v okolí najväčšej výchylky, kde je jej rýchlosť najmenšia. Matematicky odhadneme čas, aký častica trávi v okolí nejakého bodu x z úvahy, že ak dráhu medzi x a $x + \mathrm{d}x$ prejde častica rýchlosťou v, potom sa v intervale dĺžky $\mathrm{d}x$ zdržuje dobu $\mathrm{d}t$

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}x}{|v|} \tag{5.54}$$

Pretože $v = \partial x/\partial t$, z rovnice (5.3) $x(t) = a\sin(\omega t + \phi)$ dostaneme $|v| = \omega\sqrt{a^2 - x^2}$, takže

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}x}{\omega\sqrt{a^2 - x^2}} \tag{5.55}$$

Pravdepodobnosť nájdenia klasickej častice v mieste x je preto

$$P^K(x) = 2\frac{\mathrm{d}t}{T} = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} \tag{5.56}$$

(T je perióda, $T = 2\pi/\omega$ a faktor 2 súvisí s tým, že cez každý bod x prejde častica v priebehu jednej periódy dvakrát).

5.2. Ukážte, že anihilačný a kreačný operátor môžeme vyjadriť v tvare

$$\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\mathbf{x} + i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\mathbf{p}, \quad \mathbf{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\mathbf{x} - i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\mathbf{p}, \tag{5.57}$$

kde **x** a **p** sú operátory polohy a hybnosti.

5.3. Nájdite strednú hodnotu $\langle x\rangle$ v n-tom stave kvantového harmonického oscilátora. [$\langle x\rangle = 0$]

5.4. Kvantová častica sa v čase $t = 0$ nachádza v stave opísanom vlnovou funkciou

$$\Phi(x) = c_0\Phi_0(x) + c_1\Phi_1(x) \tag{5.58}$$

kde funkcie $\Phi_0(x)$ a $\Phi_1(x)$ sú vlastné funkcie harmonického oscilátora, dané vzťahom (5.42).
a) Ukážte, že $\Phi(x)$ je normovaná, ak platí $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$.
b) Nájdite strednú hodnotu polohy častice $\langle x\rangle$.
c) Nájdite strednú hodnotu hybnosti $\langle p\rangle$.
Riešenie: Stredná poloha je daná integrálom

$$\langle x\rangle = \int \mathrm{d}x\Phi^*(x)x\Phi(x) \tag{5.59}$$

Po dosadení za vlnovú funkciu z rovnice (5.58) a po integrovaní (integrály sú vypočítané v dodatku C) dostaneme

$$\langle x\rangle = \frac{c_0^*c_1 + c_0c_1^*}{\sqrt{2}}\,\xi \tag{5.60}$$

Podobne nájdeme

$$\langle p\rangle = \frac{c_0^*c_1 - c_0c_1^*}{\sqrt{2}}\frac{i\hbar}{\xi} \tag{5.61}$$

5.5. Nájdite časovú závislosť strednej hodnoty polohy a hybnosti častice v stave (5.58).
Riešenie: Časová vlnová funkcia je

$$\Psi(x,t) = c_0\Phi_0(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + c_1\Phi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} \tag{5.62}$$

Po dosadení do vzťahu

$$\langle x(t)\rangle = \int \mathrm{d}x\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t) \tag{5.63}$$

dostaneme

$$\langle x(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[c_0^* c_1 e^{i\omega t} + c_0 c_1^* e^{-i\omega t}\right]\ \xi = \xi\sqrt{2}|c_0 c_1|\cos(\omega t + \phi_1 - \phi_0) \tag{5.64}$$

kde sme dosadili $c_0 = |c_0|e^{i\phi_0}$ a $c_1 = |c_0|e^{i\phi_1}$. Podobne nájdeme

$$\langle p(t)\rangle = \frac{c_0^* c_1 e^{i\omega t} - c_0 c_1^* e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}\frac{i\hbar}{\xi} = -\frac{\hbar}{\xi}\sqrt{2}|c_0 c_1|\sin(\omega t + \phi_1 - \phi_0) \tag{5.65}$$

5.6. Ukážte, že v stave (5.58) platí

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle p(t)\rangle = -m\omega^2\langle x(t)\rangle \tag{5.66}$$

a

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle x(t)\rangle = \frac{\langle p(t)\rangle}{m} \tag{5.67}$$

Stredné hodnoty $\langle x(t)\rangle$ a $\langle p(t)\rangle$ teda spĺňajú klasické pohybové rovnice harmonického oscilátora.

KAPITOLA 6

Častica v dvojitej potenciálovej jame

V predchádzajúcich kapitolách sme sa zaoberali vlastnosťami kvantovej častice v potenciálovej jame. Našli sme všetky vlastné energie a k nim prislúchajúce vlnové funkcie. V symetrickej potenciálovej jame bola vlnová funkcia alebo symetrickou, alebo antisymetrickou funkciou polohy. Vo všetkých uvažovaných problémoch sa ukázalo, že v základnom stave – stave s najnižšou energiou – je vlnová funkcia symetrickou funkciou polohy.

V tejto kapitole sa budeme zaujímať o kvantovú časticu viazanú na dvojicu potenciálových jám. Ukážeme, že ak je častica viazaná v jednej z jám, môže, vďaka svojej schopnosti tunelovať cez potenciálové bariéry, preniknúť aj do susednej jamy. Táto schopnosť zdieľať súčasne obe jamy je dokonca energeticky výhodná: energia základného stavu kvantovej častice v systéme dvoch potenciálových jám je nižšia, ako v jednej izolovanej jame. Pokles energie základného stavu je dôležitý pre stabilitu mnohých kvantových systémov.

V nasledujúcej časti odvodíme približné rovnice pre časový vývoj viazaných kvantových stavov. Ukážeme, ako možnosť tunelovať z jednej potenciálovej jamy do druhej ovplyvňuje energetické spektrum viazanej častice, aj jej správanie v čase. Odvodené teoretické výsledky nám umožnia kvalitatívne vysvetliť stabilitu niektorých základných fyzikálnych systémov: iónu molekuly vodíka H_2^+ s jedným elektrónom a molekuly benzénu.

Problém kvantovej častice viazanej v dvoch potenciálových jamách môžeme vyriešiť presne v špeciálnom prípade, keď potenciálové jamy reprezentujeme δ-funkčným potenciálom. Toto riešenie je uvedené v dodatku F.2.

Dvojstavový model odvodený v časti 6.1 môžeme zovšeobecniť na ľubovoľný počet potenciálových jám. Dostaneme tak model tesnej väzby, ktorý sa v teórii tuhých látok používa na opis pohybu elektrónu v kryštalickej mriežke.

6.1 Častica viazaná v dvojitej potenciálovej jame

Uvažujme najprv časticu viazanú v jednoduchej potenciálovej jame $V(\vec{r})$. Tvar potenciálu nie je dôležitý, podstatné je, aby nadobúdal minimálnu zápornú hodnotu napríklad v bode $\vec{r} = \vec{a}$. Predpokladajme, že vo veľkej vzdialenosti od minima $\lim_{|\vec{r}-\vec{a}|\to\infty} V(\vec{r}) = 0$.[1] Základný stav kvantovej častice viazanej v takomto potenciáli bude mať energiu $E_0 < 0$ a vlnovú funkciu $\Phi(\vec{r})$, ktorá pre veľké vzdialenosti $|\vec{r} - \vec{a}|$ od minima potenciálovej jamy klesá dostatočne rýchlo do nuly (aby vlnová funkcia bola normovaná).

Pridajme teraz do systému druhú potenciálovú jamu. Pre jednoduchosť nech má taký istý tvar (táto podmienka nie je dôležitá). Dve potenciálové jamy umiestnime v bodoch $\vec{r} = \vec{a}$ a $\vec{r} = -\vec{a}$. Hamiltonov operátor pre kvantovú časticu v takomto systéme má tvar

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r} - \vec{a}) + V(\vec{r} + \vec{a}) \tag{6.1}$$

Predpokladajme, že častica je viazaná v niektorej potenciálovej jame. Ak je vzdialenosť oboch jám veľmi veľká, bude pravdepodobnosť, že častica pretuneluje z jednej jamy do druhej, nekonečne malá. Systém preto má dvakrát degenerovaný základný stav E_0 s vlastnými vlnovými funkciami $\Phi_1 = \Phi(\vec{r} - \vec{a})$ a $\Phi_2 = \Phi(\vec{r} + \vec{a})$, ktorým zodpovedajú stavy častice v jednej alebo v druhej potenciálovej jame.

Čo sa stane, keď k sebe potenciálové jamy priblížime? Intuícia hovorí, že častica, ktorá sa nachádzala v niektorej potenciálovej jame, dokáže pretunelovať do druhej. Z predchádzajúcej časti F.2 vieme, že energia základného stavu sa zníži a jeho vlnová funkcia bude symetricky rozložená v okolí oboch potenciálových jám. Energiu ani vlnovú funkciu však vo všeobecnom prípade nevieme presne vypočítať. Dokážeme ale nájsť **približné riešenie**, za predpokladu, že vzdialenosť dvoch potenciálových jám je dostatočne veľká na to, aby prekryv vlnových funkcií

$$\int \mathrm{d}V\ \Phi_1^*(\vec{r})\Phi_2(\vec{r}) = \int \mathrm{d}V\ \Phi^*(\vec{r} - \vec{a})\Phi(\vec{r} + \vec{a}) \approx 0 \tag{6.2}$$

bol taký malý, že ho môžeme zanedbať. V takom prípade môžeme vlnovú funkciu opisujúcu dvojstavový potenciál vyjadriť ako superpozíciu funkcií $\Phi_1(\vec{r})$ a $\Phi_2(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{r},t) = c_1(t)\Phi_1(\vec{r}) + c_2(t)\Phi_2(\vec{r}) \tag{6.3}$$

Funkcie $c_1(t)$ a $c_2(t)$ majú fyzikálny význam amplitúd pravdepodobnosti toho, že kvantová častica sa nachádza v okolí daného potenciálového minima. Súčet týchto pravdepodobností musí byť rovný jednej (príklad 6.1), preto

$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1 \tag{6.4}$$

Amplitúdy $c_1(t)$, $c_2(t)$ budú závisieť od času, pretože častica dokáže pretunelovať z jednej jamy do druhej.

Dosaďme funkciu (6.3) do časovej Schrödingerovej rovnice. Dostaneme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\Phi_1(\vec{r})\frac{\partial c_1(t)}{\partial t} + i\hbar\Phi_2(\vec{r})\frac{\partial c_2(t)}{\partial t} = c_1(t)\mathbf{H}\Phi_1(\vec{r}) + c_2(t)\mathbf{H}\Phi_2(\vec{r}) \tag{6.5}$$

[1] Táto podmienka len stanovuje nulovú energiu. (Kvantové stavy s kladnou energiou budú voľné (rozptylové), zatiaľ čo stavy so zápornou energiou budú viazané.

Vynásobme rovnicu (6.5) zľava funkciou $\Phi_1^*(\vec{r})$ a integrujme cez celý objem. Na ľavej strane rovnice zanedbáme, v súlade s našim predpokladom (6.2), člen $\int \mathrm{d}V\ \Phi_1^*(\vec{r})\Phi_2(\vec{r})$ a dostaneme jednoduchú rovnicu pre funkcie $c_1(t)$ a $c_2(t)$

$$i\hbar\frac{\partial c_1(t)}{\partial t} = H_{11}c_1(t) + H_{12}c_2(t) \tag{6.6}$$

v ktorej sme definovali maticu

$$H_{ij} = \int \mathrm{d}V\ \Phi_i^*(\vec{r})\mathbf{H}\Phi_j(\vec{r}), \quad i,j = 1,2 \tag{6.7}$$

Podobne, ak vynásobíme rovnicu (6.5) zľava funkciou $\Phi_2(\vec{r})$ a preintegrujeme, dostaneme druhú rovnicu

$$i\hbar\frac{\partial c_2(t)}{\partial t} = H_{21}c_1(t) + H_{22}c_2(t) \tag{6.8}$$

Pôvodnú Schrödingerovu rovnicu pre vlnovú funkciu $\Psi(\vec{r},t)$ sme takto nahradili jednoduchou sústavou dvoch lineárnych diferenciálnych rovníc pre funkcie $c_1(t)$ a $c_2(t)$. Tieto rovnice nie sú presné, pretože sme pri ich odvodení zanedbali integrál (6.2). Dávajú nám však dostatočne presný opis správania sa systému. Z ich riešenia nájdeme približné energetické spektrum aj amplitúdy pravdepodobnosti, s akými sa častica nachádza v okolí jedného alebo druhého potenciálového minima. Nezískame však podrobnú informáciu o priestorovom rozložení častice.

6.1.1 Všeobecné riešenie

Na začiatku tejto kapitoly sme uvažovali symetrický problém dvoch rovnakých potenciálových jám. Skôr, ako ho budeme podrobne študovať, nájdeme všeobecné riešenie systému rovníc (6.6) a (6.8). Napíšme ich v maticovom tvare

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = H\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{6.9}$$

Nájdeme najprv vlastné hodnoty E_1 a E_2 matice

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \tag{6.10}$$

Metóda výpočtu je opísaná v dodatku A. Pretože matica H zodpovedá Hamiltoniánu, musí byť hermitovská. Platí preto

$$H_{12}^* = H_{21} \tag{6.11}$$

takže súčin $H_{12}H_{21} = A^2$ je reálne číslo. Z podmienky $\det(H - E) = 0$ nájdeme vlastné hodnoty matice H

$$E_{1,2} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \mp \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}} \tag{6.12}$$

ktoré zodpovedajú vlastným energiám.[2] K vlastným energiám prislúchajú vlastné vektory $c^{(1)}$ a $c^{(2)}$. Nájdeme ich riešením sústavy lineárnych rovníc

$$H \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} = E_1 \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} \qquad \text{a} \qquad H \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix} = E_2 \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix} \tag{6.13}$$

Explicitný tvar týchto rovníc napríklad pre vektor $c_1^{(1)}$ je

$$\begin{array}{lclcl} [\, H_{11} - E_1 \,]c_1^{(1)} & + & H_{12}c_2^{(1)} & = & 0 \\ H_{21}c_1^{(1)} & + & [\, H_{22} - E_1 \,]c_2^{(1)} & = & 0 \end{array} \tag{6.14}$$

Tieto dve rovnice nie sú nezávislé, pretože E_1 je vlastná hodnota matice H, a teda determinant sústavy rovníc (6.14) je nulový. Rovnice nám preto dávajú len jednu podmienku pre dve neznáme $c_1^{(1)}$ a $c_2^{(1)}$. Druhú podmienku zvolíme tak, aby vlastné vektory boli normované:

$$|c_1^{(1)}|^2 + |c_2^{(1)}|^2 = 1 \tag{6.15}$$

Explicitný tvar vlastných vektorov je odvodený v príklade 6.4.

Všeobecné riešenie sústavy rovníc (6.6) a (6.8) je superpozíciou vlastných stavov

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \alpha c^{(1)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \beta c^{(2)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \tag{6.16}$$

kde konštanty α a β definujú počiatočný stav systému.

6.1.2 Symetrický potenciál

Ak je potenciál symetrický, potom má Hamiltonova matica jednoduchý tvar

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \tag{6.17}$$

Diagonálne členy sú $H_{11} = H_{22} = E_0$. Pre jednoduchosť ešte predpokladajme, že nediagonálne členy sú reálne, teda platí $H_{12} = H_{21}$ a definujme integrál prekryvu alebo prekryvový integrál.

$$A = -\int \mathrm{d}V \; \Phi_1^*(\vec{r})\mathbf{H}\Phi_2(\vec{r}) \tag{6.18}$$

(pozri definíciu 6.7). Znamienka sme zvolili tak, aby A bol kladný[3]

$$A > 0 \tag{6.20}$$

[2]Znamienko pred odmocninou sme zvolili tak, aby $E_1 < E_2$, teda aby energia E_1 zodpovedala základnému stavu systému so symetrickou vlnovou funkciou.

[3]Hodnota integrálu

$$\int \mathrm{d}V \; \Phi_1^*(\vec{r})\mathbf{H}\Phi_2(\vec{r}) = \int \mathrm{d}V \; \Phi_1^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}-\vec{a}) + V(\vec{r}+\vec{a}) \right] \Phi_2(\vec{r}) \tag{6.19}$$

je daná predovšetkým členom úmerným potenciálu $V(\vec{r})$, ktorý je záporný (pozri napr. obrázok 6.2, ktorý ukazuje potenciál $V(\vec{r})$ v okolí dvoch protónov). Preto predpokladáme, že celý integrál je záporný a $A > 0$.

Vlastné hodnoty matice H sú potom

$$E_1 = E_0 - A \qquad E_2 = E_0 + A \tag{6.21}$$

Pôvodná energia E_0 sa teda rozštiepi na dve hladiny. Pretože A je kladné, je $E_1 < E_2$ a teda E_1 je energiou základného stavu. Vzdialenosť hladín je $E_2 - E_1 = 2A$.

Vlastné vektory symetrickej matice H majú jednoduchý tvar

$$c^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad c^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{6.22}$$

Faktor $1/\sqrt{2}$ zabezpečuje normovanosť oboch vektorov, takže $||c^{(1)}|| = ||c^{(2)}|| = 1$. Vlastný vektor $c^{(1)}$ zodpovedá symetrickému stavu s energiou E_1, vektor $c^{(2)}$ antisymetrickému stavu s energiou E_2.

Z rovnice (6.16) nájdeme všeobecný tvar funkcií $c_1(t)$ a $c_2(t)$

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \beta e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}] \\ c_2(t) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - \beta e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}] \end{aligned} \tag{6.23}$$

Zo získaného riešenia vieme kompletne opísať dynamiku systému. Predpokladajme napríklad, že v čase $t = 0$ sa častica nachádza len v ľavej jame, takže

$$c_1(t = 0) = 1, \qquad c_2(t = 0) = 0. \tag{6.24}$$

Potom z rovníc (6.23) pre $t = 0$ dostaneme $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$, a riešenie v ľubovoľnom čase t má tvar

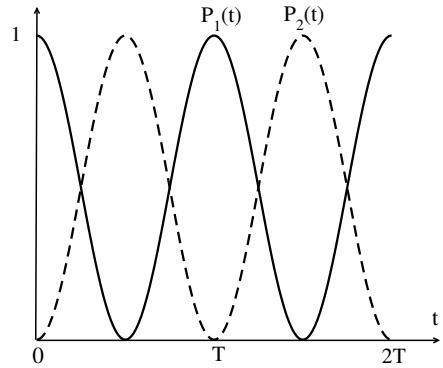
$$c_1(t) = \frac{1}{2}[e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}] = e^{-\frac{i}{2\hbar}(E_1+E_2)t} \cos \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t \tag{6.25}$$

Podobne

$$c_2(t) = \frac{1}{2}[e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}] = -ie^{-\frac{i}{2\hbar}(E_1+E_2)t} \sin \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t \tag{6.26}$$

Pravdepodobnosť, že kvantovú časticu nájdeme v jednej potenciálovej jame, sa periodicky mení s časom:

$$P_1(t) = |c_1(t)|^2 = \cos^2 \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t, \qquad P_2(t) = |c_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t \tag{6.27}$$



Obr. 6.1. Časový vývoj pravdepodobností $P_1(t)$ a $P_2(t)$ (rovnice 6.27). V čase $t = 0$ sa častica nachádzala v jame 1, preto $P_1(t = 0) = 1$ a $P_2(t = 0) = 0$. S narastajúcim časom pravdepodobnosť P_2 rastie. V čase $t = T/2$ sa častica určite nachádza v jame 2. V ďalšom vývoji sa vracia do jamy 1. Celý proces sa opakuje s periódou T danou rovnicou (6.28).

Časový vývoj oboch pravdepodobností vidíme na obrázku 6.1. Samozrejme platí $P_1(t) + P_2(t) = 1$, pretože častica sa musí nachádzať v okolí niektorej jamy. Častica periodicky prechádza z jednej jamy do druhej. Časová perióda tohto procesu je

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{\pi\hbar}{A} \tag{6.28}$$

V limite $A \to 0$, dostávame dve izolované potenciálové jamy. Vtedy $E_1 = E_2 = E_0$ a čas T diverguje do nekonečna, čo je fyzikálne zrozumiteľné: Ak častica nemôže tunelovať z potenciálovej jamy, v ktorej sa nachádza, tak v nej zostane navždy uväznená.

Poznámka: Pri odvodení rovníc (6.6) a (6.8) sme zanedbali aj možnosť, že v každej z potenciálových jám môže byť viac viazaných stavov. Uvažovali sme len najnižšie stavy. Toto priblíženie môžeme urobiť len vtedy, keď je pravdepodobnosť, že častica prejde na vyššiu energetickú hladinu zanedbateľne malá, čo je splnené, ak rozdiely medzi základným stavom a vyššími energetickými hladinami v jednotlivej potencálovej jame sú podstatne väčšie ako prekryvový integrál A.

6.2 Ión molekuly vodíka H_2^+

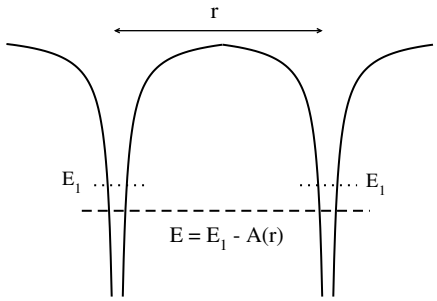
Príkladom dvojstavového systému je ión molekuly vodíka s jediným elektrónom. Predstavme si dva protóny umiestnené vo vzdialenosti r. Dva kladne nabité protóny sa elektrostatický odpudzujú. Ich priblížením preto narastá vzájomná potenciálna energia

$$E_{\mathrm{J}}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{6.29}$$

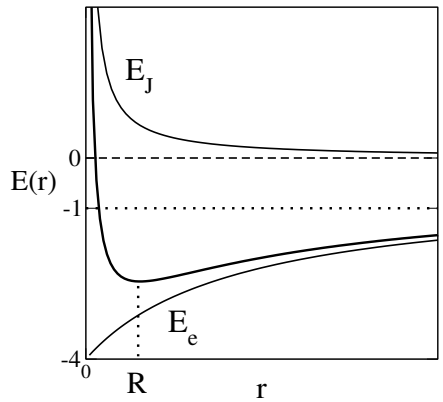
Bez elektrónu by preto neexistoval stabilný základný stav – protóny by sa odpudzovaním rozišli do nekonečna.

Elektrón viazaný v blízkosti jedného protónu má väzbovú energiu $E_1 < 0$. Ak je druhý protón veľmi ďaleko, potom sa E_1 rovná energii základného stavu atómu vodíka, $E_1 = -1$ Ry (pozri časť 1.7.4). Ak sa však v okolí vyskytuje aj druhý protón, potom existuje nenulová pravdepodobnosť, že elektrón pretuneluje do blízkosti druhého protónu (obrázok 6.2). Z hľadiska elektrónu preto vznikol dvojstavový systém. Dôležité je, že elektrón v symetrickom stave v okolí oboch protónov má, vďaka tunelovaniu z jednej jamy do druhej, energiu nižšiu ako E_1,

$$E_{\mathrm{e}} = E_1 - A(r) \tag{6.30}$$



Obr. 6.2. Potenciálna energia elektrónu v blízkosti dvoch protónov. Bodkovaná čiara je energia základného stavu elektrónu v atóme vodíka E_1. Prerušovaná čiara ukazuje energiu základného stavu elektrónu v symetrickom stave okolo oboch protónov. Energia je nižšia vďaka tomu, že elektrón môže tunelovať cez potenciálovú bariéru medzi oboma protónmi.



Obr. 6.3. Energia molekuly H_2^+ (v Rydbergoch). Ukázaná je kladná elektrostatická energia E_J, daná rovnicou (6.29) a záporná energia E_e elektrónu v symetrickom stave, definovaná rovnicou (6.30). V limite $r \to \infty$ konverguje energia E_e k energii základného stavu atómu vodíka $E_1 = -1$ Ry (bodovaná horizontálna čiara). Pre $r \to 0$ je $E_e = -4$ Ry a zodpovedá základnému stavu elektrónu viazanému k jadru s nábojom $2e$. Hrubá čiara je celková energia sústavy, daná súčtom $E(r) = E_J + E_e$. Energia $E(r)$ ako funkcia vzdialenosti dvoch protónov má minimum, zodpovedajúce stabilnému stavu molekuly H_2^+.

Pretože pravdepodobnosť tunelovania rýchlo narastá, keď vzdialenosť medzi protónmi klesá, bude energia E_e tým nižšia, čím sú protóny bližšie k sebe. Keby sa dva protóny mohli priblížiť na nulovú vzdialenosť, vznikol by atóm s dvoma protónmi v jadre a energia základného stavu elektrónu by bola $4E_1 = -4$ Ry.

Celková energia systému dvoch protónov a jedného elektrónu je potom súčtom dvoch energií, z ktorých jedna s rastúcou vzdialenosťou protónov klesá a druhá rastie:

$$E(r) = E_J + E_e \tag{6.31}$$

Dá sa preto očakávať, že existuje taká vzdialenosť

$$r = R \tag{6.32}$$

pre ktorú má energia svoje minimum. Systém, ktorý sa nachádza v stave s minimálnou energiou, je stabilný. Z dvoch protónov vo vzájomnej vzdialenosti R tak vznikne molekula H_2^+. Schopnosť elektrónu prechádzať od jedného protónu k druhému preto umožňuje vznik stabilných molekúl. Opätovne zdôrazníme, že tento prechod je možný len preto, lebo elektrón vďaka svojím kvantovým vlastnostiam dokáže pretunelovať z jednej potenciálovej jamy do susednej.

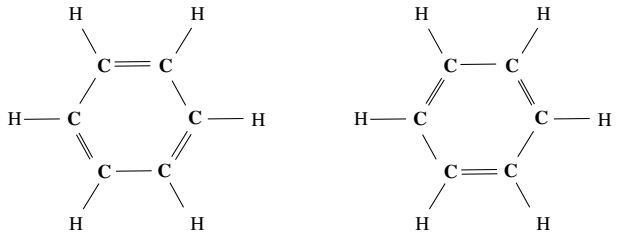
Presný výpočet energie molekuly by vyžadoval riešenie Schrödingerovej rovnice pre dva protóny a jeden elektrón. Tento problém môžeme riešiť v eliptických súradniciach [12]. Dostali by sme energiu základného stavu elektrónu zodpovedajúcu symetrickému stavu,

$$E_S = -16{,}3 \text{ eV} \tag{6.33}$$

čo je o energiu $E_v = 2{,}7$ eV menej, ako je energia základného stavu atómu vodíka ($E_1 = -13{,}6$ eV). Preto je molekula H_2^+ stabilná. Energiu E_v musíme dodať, aby sme molekulu H_2^+ roztrhli na atóm vodíka a protón.

6.3 Benzén

Benzén je organická molekula zložená zo šiestich atómov uhlíka a šiestich atómov vodíka. Uhlíkové atómy sú usporiadané v rovine do pravidelného šesťuholníka. Každý uhlík má väzbu na jeden vodík



Obr. 6.4. Molekula benzénu C_6H_6. Čiary predstavujú počty elektrónov, ktorými každý uhlík prispieva k väzbe medzi susednými atómami. Jednoduchá čiara znamená, že medzi uhlíkmi sa nachádza len jeden elektrón, dvojitá čiara znamená prítomnosť dvoch elektrónov. Ľavý a pravý obrázok reprezentujú dva možné stavy benzénu. Oba stavy majú tú istú energiu. Vďaka prechodom medzi jednotlivými stavmi je ale základný stav benzénu (stav s najnižšou energiou) symetrickou superpozíciou oboch ukázaných stavov. Prechody elektrónov znižujú energiu základného stavu, a tým zvyšujú stabilitu benzénovej molekuly.

(obrázok 6.4) a prispieva do tvorby chemických väzieb štyrmi elektrónmi. Pretože má ale len troch najbližších susedov, vznikajú medzi dvoma uhlíkmi jednoduché a dvojité väzby. Molekula benzénu preto môže vyzerať tak, ako je ukázané na ľavom alebo na pravom obrázku 6.4.

Obe navrhnuté štruktúry však majú jeden vážny nedostatok: intuitívne očakávame, že dvojitá väzba by mala byť kratšia ako jednoduchá, pretože záporný náboj dvoch elektrónov pritiahne susediace uhlíky bližšie k sebe. Molekula benzénu by preto nemala mať pravidelnú šesťuholníkovú štruktúru, ale striedali by sa v nej kratšie a dlhšie väzby. To však odporuje experimentálnym údajom, podľa ktorých má molekula benzénu pravidelný šesťuholníkový tvar.

Tento paradox možno vysvetliť na základe nášho dvojstavového modelu. Dva obrázky 6.4 predstavujú dva kvantové stavy s tou istou energiou E_0. Keby elektróny nemohli prechádzať z jednej väzby na druhú, predstavovali by aj základný stav. Existuje však nenulová pravdepodobnosť, že elektróny prejdú z jednej väzby na druhú. Preto základným stavom nie je ani jeden z nakreslených stavov, ale ich symetrická superpozícia, ktorá má, v súlade s rovnicou (6.21) energiu

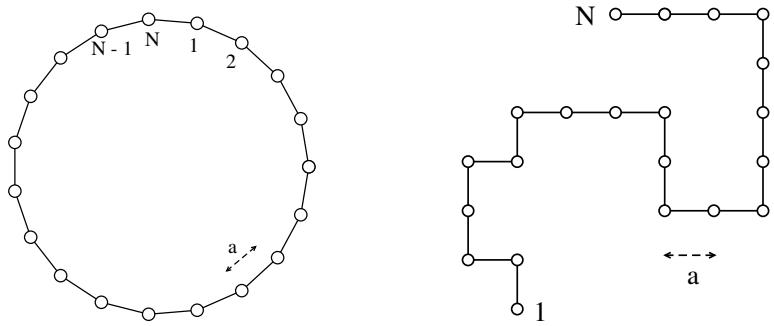
$$E_0 - A \tag{6.34}$$

teda nižšiu, ako je energia oboch ukázaných stavov. Energia A je daná prekryvom vlnových funkcií v jednotlivých stavoch.

Prípadov molekúl s dvoma symetrickými konfiguráciami je v organickej chémii veľa. Možnosť zaujať základný stav, ktorý je ich superpozíciou, zvyšuje stabilitu organických molekúl. Podrobný opis molekuly amoniaku ako dvojstavového systému a jeho aplikácia v maseri nájde čitateľ vo Feynmanovej knihe [5].

6.4 Model tesnej väzby

Dvojstavový Hamiltonián definovaný Hamiltonovou maticou (6.17) môžeme zovšeobecniť na opis pohybu elektrónu v systéme s N atómami (obrázok 6.5). Predpokladajme, že všetky atómy sú rovnaké. Keby boli vzájomne izolované, mal by elektrón na každom atóme energiu základného stavu E_0 a jeho vlnová funkcia by bola $\Phi_n(\vec{r}-\vec{r}_n)$ lokalizovaná okolo stredu $\vec{r}_n$ n-tého atómu. Ak je však vzájomná vzdialenosť atómov dostatočne malá, môže elektrón pretunelovať z jednej potenciálovej jamy do susednej, a z tej do ďalšej. Môže sa teda pohybovať pozdĺž retiazky. Fyzikálnou realizáciou takéhoto systému je napríklad molekula benzénu ($N = 6$). Model vtedy opisuje pohyb jediného elektrónu v kruhu benzénového jadra. Otvorená retiazka atómov na pravom obrázku 6.5 zodpovedá polymérom – dlhým organickým molekulám. Model jednorozmernej retiazky je ale užitočný aj pre opis pohybu elektrónu v kryštalickej mriežke. Ľahko ho môžeme zovšeobecniť na realistickejší trojrozmerný kryštál.



Obr. 6.5. Jednorozmerný systém zložený z N atómov. Všetky atómy sú identické. Vzdialenosť susedných atómov je a. Vľavo: periodický systém, v ktorom sú všetky atómy rovnocenné, vpravo: otvorený systém s dvoma krajnými atómami (1 a N), ktoré majú len jedného suseda. Elektrón smie prechádzať z jedného atómu len na susedný atóm. Keby boli atómy izolované, mal by elektrón na každom z nich energiu základného stavu E_0, vďaka možným prechodom elektrónu medzi susednými atómami sa energia E_0 rozštiepi na N energií.

Elektrón v systéme N atómov je opísaný Hamiltonovým operátorom $\mathbf{H}$. Jeho presný tvar zatiaľ nešpecifikujeme, len predpokladáme, že potenciál pozostáva z N potenciálových jám lokalizovaných v miestach atómov. Podobne ako pri riešení častice v dvojitej potenciálovej jame hľadajme vlnovú funkciu elektrónu v tvare

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\Phi_n(\vec{r}) \tag{6.35}$$

kde $\Phi_n(\vec{r})$ je vlnová funkcia elektrónu na n-tom atóme (obrázok 6.6). Vynásobme Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \mathbf{H}\,\Psi(\vec{r},t) \tag{6.36}$$

zľava funkciou $\Phi_n^*(\vec{r})$ a integrujme cez celý priestor. Predpokladajme, podobne ako pri riešení častice v dvojitej potenciálovej jame, že funkcie Φ_n sú tak dobre lokalizované okolo jednotlivých atómov, že platí

$$\int \mathrm{d}V\ \Phi_n^*(\vec{r})\Phi_m(\vec{r}) = \delta_{nm} \tag{6.37}$$

Môžeme teda zanedbať prekryv vlnových funkcii lokalizovaných na rôznych atómoch (obrázok 6.6). Definujme energiu

$$E_0 = \int \mathrm{d}V\ \Phi_n^*(\vec{r})\mathbf{H}\,\Phi_n(\vec{r}) \tag{6.38}$$

a prekryvový integrál

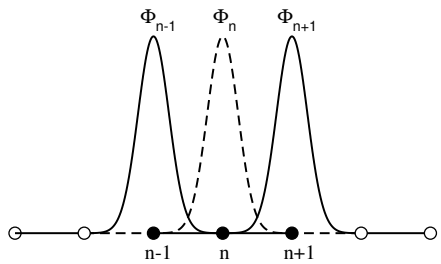
$$A = -\int \mathrm{d}V\ \Phi_n^*(\vec{r})\mathbf{H}\,\Phi_{n+1}(\vec{r}), \qquad A^* = -\int \mathrm{d}V\ \Phi_n^*(\vec{r})\mathbf{H}\,\Phi_{n-1}(\vec{r}) \tag{6.39}$$

o ktorom predpokladajme, že je reálny a kladný,

$$A = A^* > 0 \tag{6.40}$$

Všetky ostatné členy

$$\int \mathrm{d}V\Phi_n^*(\vec{r})\mathbf{H}\,\Phi_m(\vec{r}) \qquad m \neq n \pm 1 \tag{6.41}$$



Obr. 6.6. Vlnové funkcie elektrónu na troch susedných atómoch. $\Phi_n(\vec{r}) = \Phi(\vec{r} - \vec{r}_n)$.

na pravej strane zanedbáme. Tieto členy zodpovedajú prechodom elektrónu z n tej potenciálovej jamy do vzdialenejšej m-tej jamy. Pretože predpokladáme, že funkcia $\Phi_n(\vec{r})$ klesá dostatočne rýchlo so vzdialenosťou od n-tého atómu, bude integrál (6.41) malý. Po týchto priblíženiach dostaneme N rovníc pre N neznámych funkcií $c_n(t)$,

$$i\hbar\frac{\partial c_n}{\partial t} = E_0 c_n - A\left[c_{n-1} + c_{n+1}\right] \tag{6.42}$$

Časový vývoj systému je teda určený Hamiltonovou maticou veľkosti $N \times N$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A & 0 & \dots & 0 & -A \\ -A & E_0 & -A & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & -A & E_0 & -A \\ -A & 0 & & \dots & -A & E_0 \end{pmatrix} \tag{6.43}$$

Dostali sme model tesnej väzby, ktorý sa často používa v teórii tuhých látok.

Okrajové podmienky.

Nenulové hodnoty nediagonálnych členov $H_{1N} = -A$ a $H_{N1} = -A$ súvisia s tým, že sme retiazku uzavreli – náš systém nemá okrajové body. Elektrón môže preskočiť z posledného, N-tého atómu na prvý. Keby sme sa zaujímali o otvorenú retiazku atómov (pravý obrázok 6.5), museli by sme položiť $H_{1N} = H_{N1} = 0$.[4] Ak sa zaujímame o makroskopický systém, potom je počet atómov N taký veľký, že okrajové podmienky (definované nediagonálnymi členmi H_{1N} a H_{N1}) nehrajú podstatnú rolu.

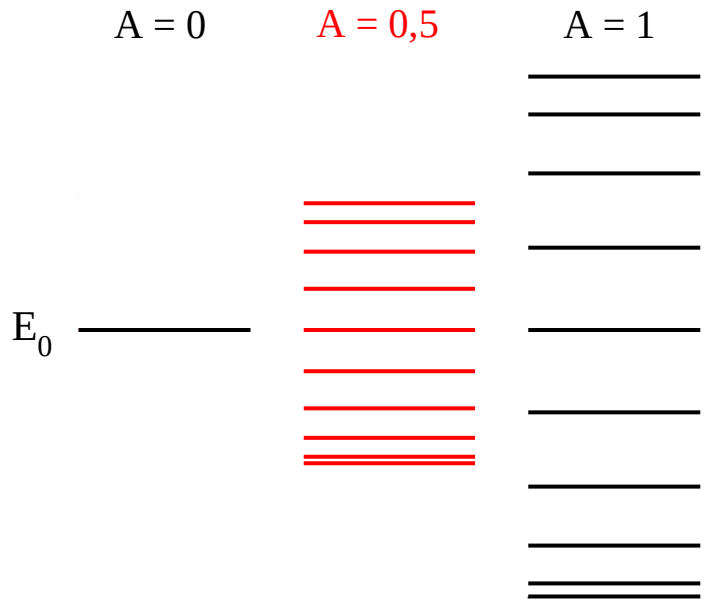
Podobne ako v dvojstavovom modeli aj teraz sme riešenie Schrödingerovej rovnice zredukovali na problém výpočtu časového vývoja N funkcií $c_n(t)$, z ktorých získame informáciu o pohybe elektrónu v systéme. Funkcia $|c_n(t)|^2$ nám udáva pravdepodobnosť, že elektrón sa nachádza v čase t na atóme n. Funkcie $c_n(t)$ sú normované,

$$\sum_{n=1}^{N} |c_n(t)|^2 = 1 \tag{6.44}$$

pretože elektrón sa určite na niektorom z N atómov nachádza. Hľadajme riešenie rovnice (6.42) v tvare

$$c_n = Ce^{-iEt/\hbar}e^{iqan} \tag{6.45}$$

[4] V literatúre sa oba modely odlišujú definíciou okrajových podmienok. Podmienka $H_{1N} = H_{N1} = -A$ zodpovedá periodickým okrajovým podmienkam, podmienka $H_{1N} = H_{N1} = 0$ zodpovedá Dirichletovým okrajovým podmienkam. Dirichletovým okrajovým podmienkam sa budeme venovať v časti 10.3.



Obr. 6.7. Energetické spektrum jednorozmerného systému s $N = 20$ atómami (obrázok 6.5) pre tri rôzne hodnoty prekryvového integrálu A. Pre $A = 0$ spektrum pozostáva len z energie E_0, ktorú má elektrón nezávisle od toho, na ktorom atóme sa nachádza. Pre nenulovú hodnotu A sa spektrum rozštiepi na N hladín podľa vzťahu (6.51). Niektoré z hladín sú degenerované (to znamená, že dvom rôznym indexom n v rovnici (6.51) zodpovedá tá istá energia).

Po dosadení dostaneme

$$Ee^{iqan}e^{-iEt/\hbar} = E_0e^{iqan}e^{-iEt/\hbar} - A[e^{iqan(n-1)} + e^{iqa(n+1)}]e^{-iEt/\hbar} \tag{6.46}$$

a po vydelení spoločným faktorom $e^{iqan}e^{-iEt/\hbar}$ dostaneme disperzný vzťah pre energiu elektrónu

$$E = E_0 - 2A\cos qa \tag{6.47}$$

medzi vlnovým vektorom q a energiou E. Povolené hodnoty vlnového vektora dostaneme z okrajových podmienok. My sa obmedzíme na prípad periodických okrajových podmienok. Vtedy

$$c_{N+1} = c_1 \tag{6.48}$$

Dosadením do rovnice (6.45) dostaneme, že vlnový vektor a musí spĺňať rovnicu

$$e^{iqaN} = 1 \tag{6.49}$$

Preto vlnový vektor q môže nadobúdať len vybrané povolené hodnoty

$$q_n = \frac{2\pi}{Na}n, \qquad n = -\frac{N}{2}, \ldots \frac{N}{2} - 1 \tag{6.50}$$

Súčin qa nadobúda hodnoty v intervale $-\pi \leq qa < +\pi$. Funkcie (6.45) aj energia (6.47) sú periodické funkcie premennej qa. Model má N vlastných energií, elektrónu, ktoré vyjadríme v tvare

$$E_n = E_0 - 2A\cos\frac{2\pi n}{Na}, \qquad n = -\frac{N}{2}, \ldots \frac{N}{2} - 1 \tag{6.51}$$

Všimnime si, že niektoré energie sú degenerované.

Na obrázku 6.7 je ukázané energetické spektrum jednorozmernej retiazky s $N = 20$ atómami. Pre nenulové hodnoty A sa energetické spektrum rozštiepi a najnižšia možná energia klesá s rastúcou hodnotou A. Ak by v retiazke bol prítomný len jediný elektrón, potom by jeho základný stav zodpovedal najnižšej možnej energii.

Efektívna hmotnosť elektrónu

Ak uvažujeme reálny kryštál s N atómami, potom je ich počet taký veľký, že ho v našom modeli môžeme považovať za nekonečný: pretože vzdialenosť atómov v kryštalickej mriežke je približne 10^{-10} m, je počet atómov v kryštáli veľkosti 1 mm približne $N \sim 10^7$. V limite $N \to \infty$ sa energetické spektrum elektrónu stane spojitým, a má tvar ukázaný na obrázku 6.8. Všetky povolené energie vytvoria energetický pás. Vznik pásu je, tak ako v periodickom modeli, ktorý sme študovali v časti 4.7, spôsobený priestorovou periodicitou systému.

Energia (6.51) nadobúda najmenšiu hodnotu pre $qa = 0$. V okolí tejto hodnoty sa disperzný vzťah $E = E(q)$ podobá na parabolu (prerušovaná čiara na obrázku 6.8). Rozviňme preto $E(q) = \cos qa$ do Taylorovho radu ($\cos x = 1 - x^2/2 + \dots$) a dostaneme

$$E(q) \approx E_0 - 2A + Aa^2q^2 \tag{6.52}$$

Ak budeme energiu odpočítavať od hodnoty $E_0 - 2A$ (to vždy môžeme urobiť), potom $E(q) = Aa^2q^2$. Porovnaním s energiou voľnej častice, $E = \hbar^2q^2/2m$ vidíme, že elektrónu môžeme pripísať efektívnu hmotnosť

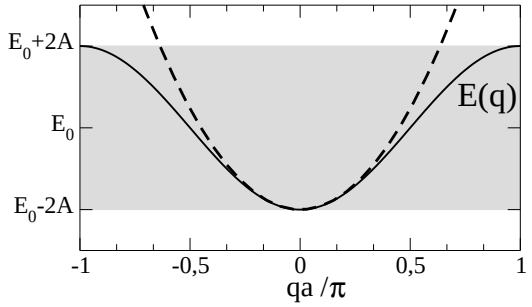
$$m_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{2Aa^2} \tag{6.53}$$

V tejto limite sa teda elektrón správa ako voľná častica, ktorej hmotnosť je však určená prekryvovým integrálom A a mriežkovou konštantou a. Efektívna hmotnosť elektrónu je teda daná schopnosťou elektrónu prechádzať od daného atómu k susednému.

Limita $qa \ll 1$ znamená, že vlnová dĺžka elektrónu, $\lambda = 2\pi/q$, je podstatne väčšia, ako vzdialenosť susedných atómov:

$$\lambda \gg a \tag{6.54}$$

Elektrón preto vníma periodickú štruktúru ako homogénne prostredie a pohybuje sa v nej ako voľná častica. Periodicita mriežky však aj v tomto prípade ovplyvní vzťah medzi energiou elektrónu a jeho hybnosťou, čo vyjadruje definícia efektívnej hmotnosti elektrónu, daná rovnicou (6.53). Pre menšie vlnové dĺžky nehomogenita priestoru silnejšie ovplyvní pohyb elektrónu, čo sa prejaví odchýlkami disperzného vzťahu od parabolického zákona (6.52). Podrobnejšie sa šíreniu vĺn v takejto štruktúre budeme venovať v časti 10.3.1.



Obr. 6.8. Disperzný vzťah pre energiu elektrónu v systéme s N atómami (rovnica (6.51) v limite nekonečného počtu atómov ($N \to \infty$). Energetické hladiny vytvoria spojitý energetický pás s hranicami $E_0 \pm 2A$. V blízkosti dolného okraja pásu môžeme disperzný vzťah aproximovať kvadratickou závislosťou (6.52) (prerušovaná čiara).

Trojrozmerný model tesnej väzby

Model tesnej väzby ľahko zovšeobecníme na trojrozmerný kryštál. Uvažujme pre jednoduchosť kubickú mriežku, a predpokladajme, že elektrón prechádza z daného atómu len k najbližšiemu susedovi v smere x, y alebo z. Ak je prekryvový integrál rovnaký vo všetkých smeroch, potom disperzný vzťah pre energiu elektrónu v rámci modelu tesnej väzby vyjadríme v tvare

$$E(\vec{q}) = E_0 - 2A\left[\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a\right], \qquad \vec{q} = (q_x, q_y, q_z) \tag{6.55}$$

Šírka energetického pásu je $12\ A$.

V závislosti na hodnotách prekryvových integrálov, ktoré určujú schopnosť elektrónu prechádzať od jedného atómu na druhý, sa efektívna hmotnosť elektrónu v trojrozmernom kryštáli môže v jednotlivých smeroch od seba líšiť. Vo všeobecnom prípade môže byť aj tenzorom.

Fermiho energia

V trojrozmernej mriežke je počet atómov $\mathcal{N} = N^3$. Počet povolených stavov v mriežke s $\mathcal{N}$ atómami je $2\mathcal{N}$, pretože každý stav s danou hodnotou q môže byť obsadený dvoma elektrónmi s opačnou orientáciou spinu.

Predpokladajme, že každý z $\mathcal{N}$ atómov uvoľní do kryštalickej mriežky práve jeden elektrón. Potom sa mriežkou pohybuje $\mathcal{N}$ elektrónov. Pretože elektróny sú fermióny, zaplnia postupne všetky najnižšie energetické hladiny, od $E_0 - 6A$ až po E_0. Ak meriame energiu od dna pásu, dostaneme, že najvyššia obsadená energia je $6A$. Túto energiu sme v časti 3.4.2 nazvali Fermiho energiou. V prvom priblížení teda pre kubickú mriežku platí jednoduchý vzťah medzi prekryvovým integrálom a Fermiho energiou:

$$E_F \approx 6A \tag{6.56}$$

Pretože prekryvový integrál súvisí s preskokom elektrónu z jedného atómu na susedný, bude jeho hodnota $A \sim 1$ eV. Zo vzťahu (6.56) preto dostaneme, že Fermiho energia má hodnoty približne niekoľko elektrónvoltov, čo je v dobrom kvalitatívnom súlade s našimi výsledkami z kapitoly 3.

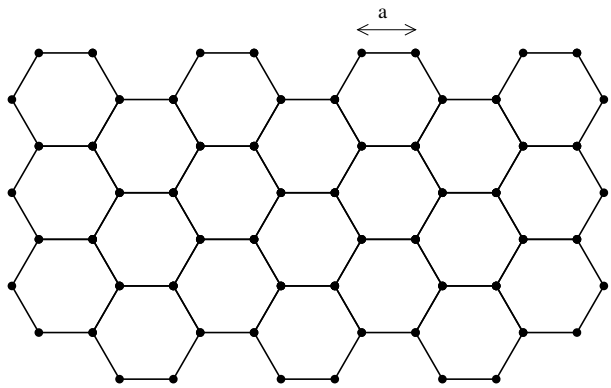
Grafén

V rámci modelu tesnej väzby môžeme opísať energetické spektrum grafénu, čo je dvojrozmerná hexagonálna štruktúra zložená z atómov uhlíka (obrázok 6.9). Grafén predstavuje ideálny dvojrozmerný systém, tvorený len jedinou atómovou vrstvou. Výpočet vlastných energií elektrónu je zložitejší ako pre dvojrozmernú štvorcovú mriežku. Dá sa ale ukázať, že pás povolených energií elektrónu siaha od hodnoty $-3A$ po hodnotu $+3A$, má teda šírku $6A$. Grafén je zaujímavý už tým, že ide o prvú monoatomárnu dvojrozmernú štruktúru, ktorú sa podarilo experimentálne pripraviť. Má však aj viaceré unikátne fyzikálne vlastnosti. Napríklad je zaujímavé, že vďaka šesťuholníkovej štruktúre mriežky má elektrón v prostriedku povoleného pásu energií lineárny disperzný vzťah: energia elektrónu závisí lineárne od vlnového vektora,

$$E \propto k \tag{6.57}$$

tak, ako energia fotónu.[5]

[5] Pripomeňme, že vo všetkých ostatných štruktúrach je závislosť kinetickej energie častice od vlnového vektora kvadratická: $E = \hbar^2 k^2/(2m)$.



Obr. 6.9. Grafén je vytvorený jednoatómovou vrstvou uhlíka, predstavuje teda ideálny dvojrozmerný systém. Vzdialenosť najbližších atómov uhlíka je $a = 0{,}246$ nm. Pohyb elektrónu v graféne môžeme modelovať metódou tesnej väzby s prekryvovým integrálom $A \approx 2{,}8$ eV.

6.5 Príklady

6.1. Odvoďte vzťah (6.4).
Riešenie: Vlnová funkcia (6.3) musí byť normovaná, preto musí platiť

$$\int \mathrm{d}V\ |\Psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \tag{6.58}$$

Dosadíme vlnovú funkciu z rovnice (6.3):

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}V\ |\Psi(\vec{r},t)|^2 &= |c_1(t)|^2 \int \mathrm{d}V\ |\Phi_1(\vec{r})|^2 + |c_2(t)|^2 \int \mathrm{d}V\ |\Phi_2(\vec{r})|^2 \\ &\quad + c_1 c_2^* \int \mathrm{d}V \Phi_1(\vec{r}) \Phi_2^*(\vec{r}) + c_1^* c_2 \int \mathrm{d}V \Phi_1^*(\vec{r}) \Phi_2(\vec{r}) \\ &= |c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1 \end{aligned} \tag{6.59}$$

kde sme využili normovanosť vlnových funkcií

$$\int \mathrm{d}V\ |\Phi_1(\vec{r})|^2 = \int \mathrm{d}V\ |\Phi_2(\vec{r})|^2 = 1 \tag{6.60}$$

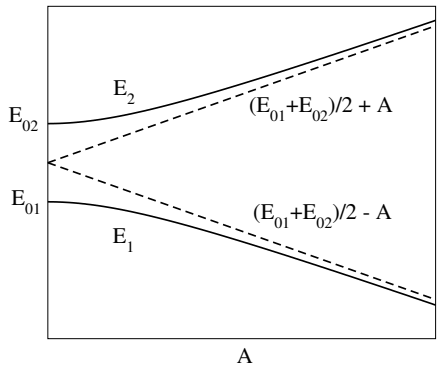
a predpoklad, že prekryv vlnových funkcií $\Phi_1(\vec{r})$ a $\Phi(\vec{r})$ je zanedbateľne malý (rovnica 6.2).

6.2. Uvažujme nesymetrický potenciál definovaný maticou H

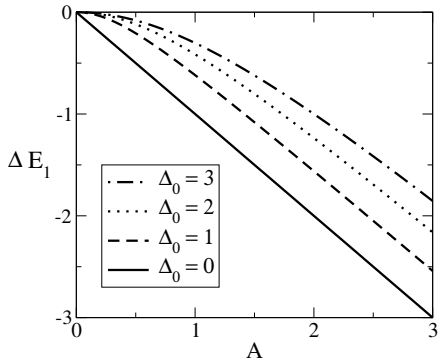
$$H = \begin{pmatrix} E_{01} & -A \\ -A & E_{02} \end{pmatrix} \tag{6.61}$$

kde $E_{01} < E_{02} < 0$ sú energie základného stavu častice v izolovaných jamách 1 a 2. Nakreslite energie základného stavu ako funkcie prekryvového integrálu A.
Riešenie: Hamiltonova matica (6.61) opisuje nesymetrický systém s dvoma rôznymi potenciálovými jamami. Energia základného stavu v izolovaných jamách je E_{01} a E_{02}. Nediagonálny člen A definuje možnosť častice prechádzať z jednej jamy do druhej. Vlastné energie celého systému sú potom dané rovnicou (6.12)

$$E_{1,2} = \frac{E_{01} + E_{02}}{2} \mp \sqrt{\frac{(E_{01} - E_{02})^2}{4} + A^2} \tag{6.62}$$



Obr. 6.10. Vlastné energie nesymetrického potenciálu definovaného Hamiltonovou maticou (6.61).



Obr. 6.11. Pokles energie základného stavu ΔE_1, daný rovnicou (6.64), pre štyri rôzne hodnoty rozdielu $\Delta_0 = E_{02} - E_{01}$ základných energií častice v nesymetrickej dvojjame. Vidíme, že zmena energie základného stavu je najväčšia vtedy, keď je jama symetrická.

Ich závislosť od parametra A je znázornená na obrázku 6.10. Pre $A = 0$ dostaneme energie izolovaných potenciálových jám: $E_1 = E_{01}$ a $E_2 = E_{02}$. S rastúcou hodnotou A sa energie od seba vzďaľujú a energia základného stavu klesá. Pre veľmi veľké hodnoty A je

$$E_1 \approx \frac{E_{01} + E_{02}}{2} - A, \qquad E_2 \approx \frac{E_{01} + E_{02}}{2} + A \tag{6.63}$$

6.3. Porovnajte, ako sa zníži energia základného stavu častice v symetrickej dvojjame a v nesymetrickej dvojjame.

Riešenie: Vo všeobecnosti môžeme pokles ΔE_1 energie základného stavu vyjadriť zo vzťahu

$$\Delta E_1 = E_1 - E_{01} = \frac{E_{02} - E_{01}}{2} - \sqrt{\frac{(E_{02} - E_{01})^2}{4} + A^2} \tag{6.64}$$

Vidíme, že ΔE_1 je funkciou len integrálu prekryvu A a rozdielu energií $\Delta_0 = E_{02} - E_{01}$. Na obrázku 6.11 vidíme, že energia základného stavu je najnižšia, keď je $\Delta_0 = 0$, teda keď je dvojjama symetrická. To je dôvod, prečo sú v prírode bohatšie zastúpené dvojatómové molekuly zložené z rovnakých atómov (H_2, O_2, N_2) ako molekuly zložené z dvoch rôznych atómov, napríklad HLi [5].

6.4. V modeli z príkladu 6.2 nájdite časový vývoj stavu, ktorý sa v čase $t = 0$ nachádzal (a) v hlbšej jame s energiou základného stavu E_{01} (b) v plytšej jame.

Riešenie: Vlastné energie $E_{1,2}$ sú dané rovnicou (6.62). Pomocou nich vyjadríme vlastné vektory $c^{(1)}$ a $c^{(2)}$ z riešenia rovníc (6.14) a (6.15) v tvare

$$c^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{A^2 + (E_{01} - E_1)^2}} \begin{pmatrix} A \\ E_{01} - E_1 \end{pmatrix} \tag{6.65}$$

a

$$c^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{A^2 + (E_{02} - E_2)^2}} \begin{pmatrix} E_{02} - E_2 \\ A \end{pmatrix} \tag{6.66}$$

Pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v prvej jame je

$$P_1(t) = |c_1(t)|^2 \tag{6.67}$$

kde

$$c_1 = \alpha c_1^{(1)} + \beta c_1^{(2)} \tag{6.68}$$

(rovnica 6.23). Koeficienty α a β nájdeme z počiatočných podmienok.
(a) V čase $t = 0$ je $c_1(t = 0) = 1$ a $c_2(t = 0) = 0$. Z rovnice (6.23) dostaneme pre koeficienty α a β dve rovnice

$$\begin{aligned} \alpha c_1^{(1)} + \beta c_1^{(2)} &= 1 \\ \alpha c_2^{(1)} + \beta c_2^{(2)} &= 0 \end{aligned} \tag{6.69}$$

Vyriešme túto sústavu a dosaďme do rovnice (6.68). Dostaneme

$$\alpha = \frac{c_2^{(2)}}{c_1^{(1)} c_2^{(2)} - c_2^{(1)} c_1^{(2)}}, \qquad \beta = -\frac{c_2^{(1)}}{c_1^{(1)} c_2^{(2)} - c_2^{(1)} c_1^{(2)}} \tag{6.70}$$

a časovú závislosť $c_1(t)$:

$$c_1(t) = \frac{c_1^{(1)} c_2^{(2)}}{c_1^{(1)} c_2^{(2)} - c_2^{(1)} c_1^{(2)}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} - \frac{c_2^{(1)} c_1^{(2)}}{c_1^{(1)} c_2^{(2)} - c_2^{(1)} c_1^{(2)}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \tag{6.71}$$

Prípad (b) vyriešime analogicky. Časová závislosť pravdepodobností $P_1(t) = |c_1(t)|^2$ a $P_2(t) = |c_2(t)|^2$ je ukázaná na obrázku 6.12.

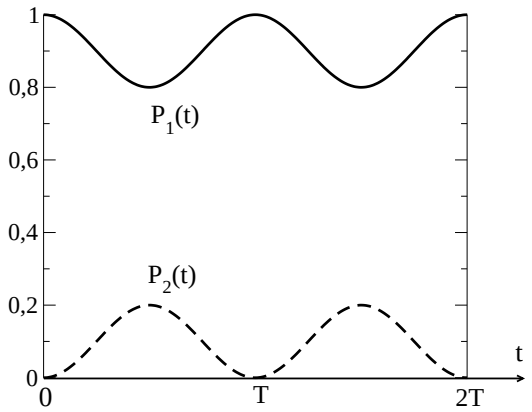
6.5. Nájdite všetky vlastné energie elektrónu v uzavretej retiazke $N = 6$ atómov.
Riešenie: Pre $N = 6$ dostaneme z rovnice (6.51) vlastné energie

$$E_n = E_0 - 2A \cos \frac{2\pi}{6} n \tag{6.72}$$

kde $n = -3, -2, \ldots, , +2$. Vlastné energie teda sú

$$\begin{array}{ll} n = -3 & E_0 + 2A \\ n = -2 & E_0 + A \\ n = -1 & E_0 - A \\ n = 0 & E_0 - 2A \\ n = 1 & E_0 - A \\ n = 2 & E_0 + A \end{array} \tag{6.73}$$

Energie s kvantovými číslami $|m|$ a $-|m|$ sú degenerované, pretoźe funkcia $\cos$ v rovnici (6.51) je párna.



Obr. 6.12. Pravdepodobnosť $P_1(t)$ z príkladu 6.4 pre $E_{01} = -5A$, $E_{02} = -A$. V čase $t = 0$ sa častica nachádzala v jame 1. Pravdepodobnosť sa mení s časom periodicky s periódou $T = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$. Na rozdiel od symetrickej dvojjamy však osciluje medzi jednotkou a nenulovou hodnotou. Tomu zodpovedajú nižšie maximálne hodnoty $P_2(t)$.

KAPITOLA 7

Kvantové častice so spinom

V predchádzajúcich kapitolách sme analyzovali vlnovú funkciu kvantovej častice $\Psi(\vec{r},t)$ ako funkciu polohy $\vec{r}$ a času t. Väčšina kvantových častíc má ale aj spin $\vec{S}$, teda vlastný moment hybnosti. V tejto kapitole ukážeme, ako spin ovplyvňuje správanie kvantových častíc. Najprv zadefinujeme vlnovú funkciu jednej častice so spinom. V časti 7.3 nájdeme vlastné funkcie častice so spinom 1/2 v magnetickom poli a zadefinujeme Pauliho matice. Ukážeme, že problém je ekvivalentný dvojstavovému problému, ktorým sme sa zaoberali v kapitole 6.

Spin rozhodujúcim spôsobom ovplyvňuje vlastnosti mnohočasticových systémov. V časti 7.5 sa preto budeme podrobne zaoberať možnými kvantovými stavmi dvoch elektrónov. Ukážeme, ako symetria vlnovej funkcie ovplyvňuje štruktúru viacelektrónových sústav. Podobne v časti 7.6 nájdeme typické vlastnosti sústavy mnohých bozónov.

7.1 Vlnová funkcia častice so spinom

Aby sme zohľadnili závislosť stavu častice od spinu, musíme vlnovú funkciu zovšeobecniť. V mnohých fyzikálnych problémoch môžeme predpokladať, že orientácia spinu častice nezávisí od jej polohy. Potom môžeme vlnovú funkciu vyjadriť v tvare súčinu

$$\Psi(\vec{r,t})\chi^{\mathrm{s}} \tag{7.1}$$

kde funkcia χ^s charakterizuje spinový stav častice.

Spin častice sme popísali už v časti 1.8. Vieme, že kvantová častica má celkovú hodnotu spinu $S = \hbar\sqrt{s(s+1)}$, a priemet spinu do niektorej osi, napríklad z, môže nadobúdať len hodnoty

$$S_z = \hbar s_z, \qquad s_z = -s, -s+1, \ldots, s-1, s \tag{7.2}$$

Preto si spinovú časť vlnovej funkcie môžeme definovať ako vektor dĺžky $2s+1$:

$$\chi^{\mathrm{s}} = \begin{pmatrix} \chi^s_s \\ \chi^s_{s-1} \\ \vdots \\ \chi^s_{-(s-1)} \\ \chi^s_{-s} \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

kde $\xi^s_{m_s}$ je amplitúda pravdepodobnosti nájdenia kvantovej častice v stave s priemetom spinu do osi z rovným m_s. Pretože priemet spinu má určite niektorú z možných hodnôt, musí platiť

$$\sum_{s_z=-s}^{+s} |\chi^s_{s_z}|^2 = 1 \tag{7.4}$$

Pokiaľ sa častica nepohybuje v prostredí, v ktorom môže meniť orientáciu svojho spinu, môžeme spinovú časť vlnovej funkcie zanedbať (ako sme to aj doteraz robili a často urobíme v ďalších kapitolách). Spinovú časť vlnovej funkcie však musíme uvažovať vždy vtedy, keď máme v systéme viac častíc. Naopak, ak sa budeme zaujímať len o spinovú premennú, nebudeme riešiť priestorovú časť vlnovej funkcie.

7.2 Elektrón so spinom 1/2

Elektrón má spinové kvantové číslo

$$s = \frac{1}{2} \tag{7.5}$$

preto má, vzhľadom na spin, len dva možné stavy: priemet S_z spinu do osi z je alebo kladný, alebo záporný:

$$S_z = \pm\frac{\hbar}{2} \tag{7.6}$$

Spinová vlnová funkcia je preto daná len vektorom dĺžky 2:

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \tag{7.7}$$

a nazýva sa spinor.[1] Definujme ešte vektor

$$\xi^\dagger = (\chi_1^*, \chi_2^*) \tag{7.8}$$

Strednú hodnotu ľubovoľného spinového operátora v stave χ potom nájdeme zo vzťahu

$$\langle O \rangle = \chi^\dagger \mathbf{O} \chi \tag{7.9}$$

[1] V označení spinorov budeme pre zjednodušenie výrazov vynechávať horný index $s = 1/2$ a dve zložky vektora budeme označovať indexami 1 a 2 namiesto +1/2 a -1/2.

7.3 Elektrón v magnetickom poli. Pauliho matice

So spinom elektrónu súvisí aj vlastný magnetický moment $\vec{\mu}$ (pozri časť 1.9). Pretože magnetický moment je úmerný spinu, má jeho priemet do smeru poľa len dve povolené hodnoty. Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že gyromagnetický pomer elektrónu g sa rovná dvom (pozri tabuľku 1.4). Potom vyjadríme magnetický moment elektrónu

$$\mu_z = -\frac{e}{m_e} S_z = -\frac{e\hbar}{m_e} s_z, \qquad s_z = \pm\frac{1}{2} \tag{7.10}$$

V magnetickom poli $\vec{B}$ energia elektrónu závisí od orientácie spinu magnetického momentu $\vec{\mu}$ [17]

$$E_{1,2} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \pm\frac{e\hbar}{m_e} B s_z = \pm\frac{e\hbar}{2m_e} B = \pm\mu_B B \tag{7.11}$$

Veličina

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9{,}274 \times 10^{-24}\ \text{J/T} \tag{7.12}$$

sa nazýva Bohrov magnetón. Pre opis správania spinu elektrónu v magnetickom poli budeme uvažovať len jeho spinovú vlnovú funkciu, pre ktorú môžeme napísať Schrödingerovu rovnicu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = H\chi \tag{7.13}$$

Hamiltonova matica H je matica s rozmerom 2×2. Odvodíme ju najprv v prípade, keď magnetické pole má smer osi z:

$$\vec{B} = (0{,}0{,}B_z) \tag{7.14}$$

Vtedy je Hamiltonián H diagonálny,

$$H = \mu_B \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \tag{7.15}$$

a vlastnými stavmi systému sú dva stavy,

$$\chi_z^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_z^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7.16}$$

ktoré zodpovedajú vlastným energiám E_1 a E_2.[2]

Orientujme teraz magnetické pole v ľubovoľnom smere, $\vec{B} = (B_x{,}B_y{,}B_z)$. Hamiltonián bude mať všeobecný tvar (6.10)

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \tag{7.17}$$

[2]Pripomeňme, že spin elektrónu má opačnú orientáciu, ako jeho magnetický moment. Stav χ_z^+ opisuje elektrón, ktorého spin je orientovaný súhlasne s magnetickým poľom. Preto je jeho magnetický moment orientovaný proti smeru magnetického poľa a energia $E_1 = \mu_B B_z$ je kladná. Stav χ_z^- má spin orientovaný proti smeru magnetického poľa, preto je jeho magnetický moment orientovaný súhlasne s poľom a energia $E_2 = -\mu_B B_z$ je záporná.

a nediagonálne prvky budú rôzne od nuly. Zmenia sa, samozrejme, aj vlastné stavy Hamiltoniánu. Vlastné hodnoty Hamiltoniánu však musia zostať tie isté, pretože energia elektrónu nemôže závisieť od toho, ako si my nastavíme orientáciu súradnicových osí.

Odvoďme explicitný tvar Hamiltonovej matice. Diagonálne členy budú úmerné priemetu magnetického poľa do osi z, $H_{11} = B_z$ a $H_{22} = -B_z$. Nediagonálne prvky získame z výrazu pre vlastné energie (6.12)

$$E_{1,2} = \pm\mu_B\sqrt{B_z^2 + H_{12}H_{21}} = \pm\mu_B\sqrt{B_z^2 + B_x^2 + B_y^2} \tag{7.18}$$

[5]. Porovnaním posledných dvoch vzťahov dostaneme

$$H_{12}H_{21} = B_x^2 + B_y^2 \tag{7.19}$$

Pretože musí platiť aj $H_{21} = H_{12}^*$, dostaneme[3]

$$H_{12} = B_x - iB_y \tag{7.21}$$

Časovo závislá Schrödingerova rovnica má teda tvar

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{e\hbar}{2m}\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \tag{7.22}$$

Definujme teraz Pauliho matice

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.23}$$

Pomocou Pauliho matíc môžeme definovať operátory spinu

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \qquad \mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \tag{7.24}$$

a operátory magnetického momentu μ

$$\mu_x = -\frac{e\hbar}{2m}\sigma_x, \qquad \mu_y = -\frac{e\hbar}{2m}\sigma_y, \qquad \mu_z = -\frac{e\hbar}{2m}\sigma_z \tag{7.25}$$

pomocou ktorých vyjadríme Hamiltonián

$$\mathbf{H} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \tag{7.26}$$

Riešenie Schrödingerovej rovnice pre spin 1/2 je teda formálne totožné s riešením dvojstavového modelu. Niekoľkými špeciálnymi prípadmi sa zaoberajú príklady v tejto kapitole.

[3] V rovnici (7.21) sme mohli voliť tak kladné, ako aj záporné znamienko. Znamienko sme zvolili tak, aby Pauliho matice, definované rovnicami (7.23) spĺňali komutačné vzťahy (pozri príklad 7.1)

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \qquad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \qquad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \tag{7.20}$$

zaužívané v literatúre.

7.4 Kvantové častice so spinom

Ak máme v sústave dve častice, musí ich vlnová funkcia obsahovať informáciu o polohe a spine každej z nich. Okrem toho, pretože častice sú identické, musí byť pravdepodobnosť nájdenia dvoch častíc v ľubovoľnom stave symetrická vzhľadom na zámenu častíc. Ak je $P(a,b)$ pravdepodobnosť, že prvá častica sa nachádza v stave a a druhá častica sa nachádza v stave b, potom musí platiť vzťah symetrie

$$P(a,b) = P(b,a) \tag{7.27}$$

kde $P(b,a)$ je pravdepodobnosť, že prvá častica je v stave b a druhá častica je v stave a.

V klasickej fyzike rovnica (7.27) vyjadruje známu skúsenosť s nerozlíšiteľnými časticami. Kvantový svet však opisujeme vlnovou funkciou. Pravdepodobnosti $P(a,b)$ a $P(b,a)$ sú druhou mocninou absolútnej hodnoty vlnových funkcií $\Psi(a,b)$ a $\Psi(b,a)$. Vlnová funkcia dvoch častíc sa preto po zámene častíc zmeniť môže. Podmienku symetrie systému vzhľadom na zámenu častíc môžeme vyjadriť vzťahom

$$\Psi(b,a) = e^{i\phi}\Psi(a,b) \tag{7.28}$$

a analogicky

$$\Psi(a,b) = e^{i\phi}\Psi(b,a) \tag{7.29}$$

Ak častice vymeníme dvakrát po sebe, musíme dostať pôvodný stav. Z rovníc (7.28) a (7.29) vyplýva, že

$$\Psi(a,b) = e^{i\phi}\Psi(b,a) = e^{i2\phi}\Psi(a,b) \tag{7.30}$$

čo je splnené len vtedy, ak platí $\phi = 0$ (a teda $e^{i\phi} = 1$) alebo $\phi = \pi$ ($e^{i\phi} = -1$). Preto podmienka symetrie systému vzhľadom na zámenu častíc teda môže byť splnená dvoma spôsobmi:

- Ak sú častice bozóny, tak vlnová funkcia po výmene častíc zostane tá istá,

  $$\Psi(a,b) = \Psi(b,a) \tag{7.31}$$

  Kvantový stav dvoch bozónov je teda symetrický vzhľadom na ich zámenu.

- Ak častice sú fermióny, tak vlnová funkcia po zámene častíc zmení znamienko:

  $$\Psi(a,b) = -\Psi(b,a) \tag{7.32}$$

  teda kvantový systém je antisymetrický vzhľadom na zámenu dvoch fermiónov.

Ak máme v systéme N častíc, potom ich kvantový stav musí byť symetrický, resp. antisymetrický vzhľadom na zámenu ľubovoľných dvoch častíc. Vlnová funkcia stavu s N bozónmi sa nezmení, ak zameníme ľubovoľné dve častice. Naopak, ak v stave s N fermiónmi vymeníme dve častice, vlnová funkcia stavu musí zmeniť znamienko.

Štatistickým súborom bozónov sme sa zaoberali keď sme riešili žiarenie absolútne čierneho telesa v kapitole 1. Príkladom súboru fermiónov boli elektróny v kove, ktorými sme sa zaoberali v kapitole 3.

7.5 Dva fermióny

Nájdime explicitný tvar vlnovej funkcie dvoch fermiónov. Vlnová funkcia dvoch fermiónov musí byť antisymetrická,

$$\Psi(a,b) = -\Psi(b,a) \tag{7.33}$$

Pre dva fermióny v tom istom stave a preto platí $\Psi(a,a) = -\Psi(a,a)$, a teda

$$\Psi(a,a) \equiv 0 \tag{7.34}$$

Dva fermióny sa teda nemôžu nachádzať v tom istom kvantovom stave a. Tento princíp je známy ako Pauliho vylučovací princíp.

Hľadajme teraz možný tvar vlnovej funkcie dvoch fermiónov. Každá častica má svoje spinové a priestorové súradnice. Ak spin nezávisí od polohy, môžeme vlnovú funkciu napísať v tvare súčinu priestorovej a spinovej vlnovej funkcie.

$$\Psi(1,2) = \Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi(1,2) \tag{7.35}$$

Pretože Ψ musí byť antisymetrická vzhľadom na zámenu dvoch fermiónov, môžu nastať dva prípady:

$\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$	$\chi(1,2)$
symetrická	antisymetrická
antisymetrická	symetrická

Symetria spinovej vlnovej funkcie teda jednoznačne determinuje symetriu priestorovej vlnovej funkcie.

Zaoberajme sa najprv spinovou vlnovou funkciou, ktorú označíme

$$\chi(1,2)^s_{s_z} \tag{7.36}$$

Horný index označuje hodnotu celkového spinu sústavy dvoch častíc, $S = \hbar\sqrt{s(s+1)}$, a dolný index hodnotu priemetu tohto spinu do osi z: $S_z = \hbar s_z$. Dva elektróny môžu mať spiny orientované súhlasne alebo nesúhlasne. Ak sú spiny orientované súhlasne, môže spinová vlnová funkcia mať tvar

$$\chi(1,2)^1_1 = \chi^+_z(1)\chi^+_z(2) \tag{7.37}$$

ak sú oba spiny orientované v kladnom smere osi z, alebo

$$\chi(1,2)^1_{-1} = \chi^-_z(1)\chi^-_z(2) \tag{7.38}$$

ak sú orientované v zápornom smere. Obe spinové funkcie sú evidentne symetrické vzhľadom na zámenu častíc. Z dvoch jednočasticových spinových funkcií môžeme zostrojiť aj tretiu symetrickú dvojčasticovú funkciu,

$$\chi(1,2)^1_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi^+_z(1)\chi^-_z(2) + \chi^-_z(1)\chi^+_z(2)\right] \tag{7.39}$$

Priamym výpočtom sa môžeme presvedčíť (pozri dodatok K), že vo všetkých troch stavoch je naozaj $S = 1$ a priemet spinu do osi z sa postupne rovná $S_z = \hbar, \ -\hbar$ a 0.

Antisymetrickú spinovú vlnovú funkciu skonštruujeme ako antisymetrickú lineárnu kombináciu jednočasticových spinových funkcií:

$$\chi(1,2)_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_z^+(1)\chi_z^-(2) - \chi_z^-(1)\chi_z^+(2)\right] \tag{7.40}$$

Antisymetrickú funkciu teda dostaneme len vtedy, ak dve zúčastnené častice majú opačné spiny.

Definujeme teraz operátor spinu sústavy dvoch fermiónov,

$$\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{S}}_1 + \vec{\mathbf{S}}_2 \tag{7.41}$$

V dodatku K odvodíme, že operátor

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\vec{\mathbf{S}}_1\vec{\mathbf{S}}_2 \tag{7.42}$$

môže mať vlastné hodnoty

$$\hbar\sqrt{s(s+1)} \tag{7.43}$$

s kvantovými číslami $s = 1$ alebo $s = 0$. Stav s hodnotou $s = 1$ môže mať priemet spinu do osi z, ktorý sa rovná

$$S_z = -\hbar, 0, +\hbar \tag{7.44}$$

teda je charakterizovaný kvantovým číslom $s_z = -1, \ 0, \ +1$. Stav s vlastnou hodnotou $s = 0$ má samozrejme nulový priemet spinu do ľubovoľnej osi.

Vlnové funkcie (7.37 - 7.40) sú vlastnými funkciami celkového spinu sústavy. Dva elektróny teda môžu vytvoriť alebo symetrický triplet so spinom 1 v stavoch (7.37), (7.38) a (7.39), alebo antisymetrický singlet v stave(7.40) s celkovým spinom nula.

Vráťme sa teraz k celkovej vlnovej funkcii dvoch elektrónov. Pretože $\Psi(1,2)$ musí byť antisymetrická, bude priestorová vlnová funkcia $\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ symetrická len vtedy, keď dva elektróny majú opačné spiny. Ak je celkový spin elektrónov nenulový, priestorová vlnová funkcia musí byť antisymetrická.

7.5.1 Molekula vodíka H_2

V časti 6.2 sme ukázali, že ión molekuly vodíka H_2^+ je stabilný, pretože jeden elektrón dokáže „obiehať" okolo oboch protónov, čím zníži energiu základného stavu celej sústavy. Využijeme teraz výsledky predchádzajúcej časti 7.5 a odhadnime, ako sa v molekule vodíka správajú dva elektróny.

Väzba medzi dvoma atómami vodíka môže vzniknúť len tak, že oba elektróny prechádzajú od jedného protónu k druhému. Pre väzbu je najefektívnejšie, keď sa elektróny vyskytujú v priestore medzi jadrami, pretože svojím záporným elektrickým nábojom môžu viazať protóny k sebe. Preto je výhodné, aby ich priestorová vlnová funkcia bola symetrická. Antisymetrická funkcia totiž musí byť v strede symetrie (teda medzi oboma protónmi) nulová. Ak je ale priestorová vlnová funkcia symetrická, potom spinová funkcia musí byť antisymetrická. Musí to teda byť

funkcia $\chi(1,2)_0^0$ daná vzťahom (7.40). Z požiadaviek symetrie preto dostávame, že základný stav molekuly vodíka je taký, v ktorom elektróny majú opačne orientované spiny.

Pretože sa väzby medzi dvoma protónmi zúčastňujú dva elektróny, očakávame, že je molekula vodíka stabilnejšia ako molekula iónu H_2^+. Experimenty potvrdzujú, že to je naozaj tak: disociačná energia (energia potrebná na roztrhnutie molekuly na dva atómy vodíka) je $4{,}72$ eV, čo je takmer dvojnásobok disociačnej energie iónu molekuly vodíka (2,65 eV, pozri časť 6.2).

Symetria vlnovej funkcie má jeden dôležitý dôsledok: Ak by sme chceli otočiť spin jedného z elektrónov, musíme zmeniť stav oboch elektrónov: priestorová vlnová funkcia $\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ sa musí zmeniť na antisymetrickú. Tým sa ale musí zmeniť celá štruktúra molekuly, ktorá prejde do vyššieho energetického stavu. To je možné len vtedy, ak molekule dodáme zvonku energiu. Zmena orientácie jedného spinu si teda vyžiada dodatočnú energiu. Táto energia nemá klasickú analógiu: je daná len vnútornou symetriou kvantového systému, ktorý požaduje antisymetričnosť vlnovej funkcie fermiónov.

7.6 Bozóny

Bozóny majú celočíselný spin, teda spinové kvantové číslo má hodnotu

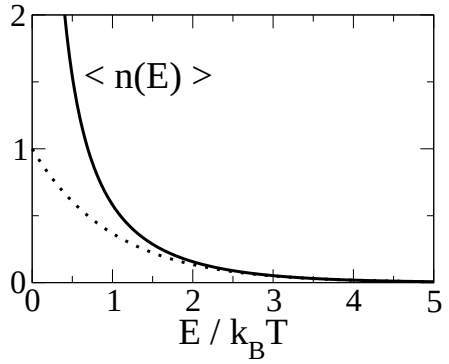
$$s = 0, 1, \ldots \tag{7.45}$$

Bozónmi sú teda aj častice, ktoré spin nemajú. Na rozdiel od fermiónov je vlnová funkcia bozónov symetrická vzhľadom na zámenu dvoch bozónov.

Pretože dva bozóny s rovnakým spinom (napríklad $s = 1$) majú snahu zaujať ten istý kvantový stav, stačí nám uvažovať symetrické spinové stavy

$$\xi(1,2)_{+2}^2 = \xi^+(1)\xi^+(2) \qquad \xi(1,2)_{-2}^2 = \xi^-(1)\xi^-(2) \tag{7.46}$$

v ktorých majú oba bozóny tú istú orientáciu spinu. Samozrejme, mohli by sme skonštruovať aj vlnové funkcie pre ostatné stavy, nebudeme ich ale v ďalšom texte potrebovať.



Obr. 7.1. Stredný počet bozónov v stave s energiou E pri teplote T, daný rovnicou (7.47). Prerušovaná čiara je Boltzmannov faktor e^{-E/k_BT}. Vidíme, že počet bozónov s veľmi malou energiou môže byť veľmi veľký, (oveľa väčší, ako počet klasických častíc), čo vysvetľuje snahu bozónov zaujať stav s tou istou energiou.

So štatistickým súborom veľkého počtu bozónov sme sa stretli už v úvodnej kapitole pri štúdiu žiarenia čierneho telesa, kde sme našli, že stredný počet bozónov s energiou E môžeme vyjadriť funkciou (obrázok 7.1)

$$\langle n(E)\rangle = \frac{1}{\exp\frac{E}{k_BT} - 1} \tag{7.47}$$

ktorá určuje stredný počet bozónov v stave s energiou E pri teplote T. Pre malé energie, $E \ll k_BT$, môže byť stredný počet bozónov veľmi veľký.

7.6.1 Stimulovaná emisia

Uvažujme systém pozostávajúci z veľkého počtu atómov a fotónov s frekvenciou ν. Každý z atómov môže absorbovať fotón a prejsť tak zo základného stavu s energiou E_0 do excitovaného stavu s energiou $E_0 + h\nu$. Z excitovaného stavu sa môže vrátiť naspäť do základného stavu emitovaním fotónu. Označme stredný počet atómov v základnom stave N_z a v excitovanom stave N_e. V termodynamickej rovnováhe je počet oboch procesov – absorpcie aj emisie – za jednotku času rovnaký.

$$P_a = P_e \tag{7.48}$$

Pravdepodobnosť oboch procesov bude prirodzene úmerná počtu atómov v danom stave. Preto definujme pravdepodobnosti že jeden atóm v základnom stave bude absorbovať (p_a) alebo emitovať (p_e) fotón, vzťahmi

$$p_a = \frac{P_a}{N_z}, \qquad p_e = \frac{P_e}{N_e} \tag{7.49}$$

Pretože energia atómu v excitovanom stave je o hodnotu $h\nu$ vyššia ako v základnom, musí pre stredné počty atómov v jednotlivých stavoch platiť Boltzmannov vzťah

$$\frac{N_e}{N_z} = e^{-\frac{h\nu}{k_BT}} \tag{7.50}$$

Kombináciou rovníc (7.48), (7.49) a (7.50) dostaneme vzťah medzi pravdepodobnosťou, že atóm emituje alebo absorbuje fotón

$$p_e = \frac{N_z}{N_e}p_a = e^{\frac{h\nu}{k_BT}}p_a \tag{7.51}$$

Čím viac fotónov v systéme máme, tým je väčšia pravdepodobnosť, že niektorý z nich bude absorbovaný. Preto môžeme predpokladať, že pravdepodobnosť p_a, že atóm bude absorbovať fotón zo svojho okolia, je úmerná strednému počtu fotónov v systéme

$$p_a \propto \langle n\rangle = \frac{1}{\exp\frac{h\nu}{k_BT} - 1} \tag{7.52}$$

Z rovnice (7.51) potom dostaneme pre pravdepodobnosť emisie fotónu p_e vzťah

$$p_e \propto \langle n\rangle + 1 \tag{7.53}$$

Pravdepodobnosť emisie fotónu je teda tým väčšia, čím viac fotónov sa v systéme už nachádza. Emisia fotónu excitovaným atómom je teda stimulovaná prítomnosťou iných fotónov v okolí atómu. Toto je nečakaný výsledok, ktorý klasický svet nepozná. Je prekvapujúce, že pravdepodobnosť, že niektorý atóm vyžiari fotón, môže závisieť od toho, koľko presne takých istých fotónov sa v okolí atómu už nachádza. Stimulovaná emisia je dôsledkom toho, že fotóny sú bozóny.

Stimulovaná emisia je dôležitá pre fungovanie lasera. Zdrojom laserového žiarenia sú atómy v excitovanom stave. Pravdepodobnosť, že sa niektoré atómy vrátia do základného stavu je úmerná počtu fotónov v komore lasera, a teda pravdepodobnosti, že iné atómy už do základného stavu prešli.

Dôležité je si uvedomiť, že všetky fotóny v laseri sú v tom istom kvantovom stave. Sú preto identické. Vytvárajú tak koherentné elektromagnetické žiarenie tej istej frekvencie. Tým sa líšia od žiarenia čierneho telesa (napríklad slnečného žiarenia), v ktorom sa fotóny s tou istou frekvenciou od seba líšia svojou fázou alebo polarizáciou.

7.6.2 Boseho-Einsteinova kondenzácia

Pri veľmi nízkych teplotách prechádza štatistický systém bozónov fázovým prechodom: pod kritickou teplotou všetky bozóny obsadia základný stav. Tento jav – Bose-Einsteinova kondenzácia – bol teoreticky predpovedaný na začiatku 20. storočia a prvýkrát experimentálne pozorovaný v roku 1995 v rubídiovom plyne pri veľmi nízkych teplotách (170 nK $= 1{,}7 \times 10^{-7}$ K). Čiastočná Boseho-Einsteinova kondenzácia nastáva aj v kvapalnom héliu ${}^4_2$He pri teplote $2{,}17$ K, a zodpovedá za prechod časti hélia do supratekutého stavu.

7.7 Príklady

7.1. Dokážte výpočtom, že Pauliho matice spĺňajú komutačné vzťahy

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \qquad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \qquad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \tag{7.54}$$

Platnosť komutačných vzťahov vyplýva z toho, že Pauliho matice sú úmerné spinovým operátorom, ktoré musia spĺňať komutačné vzťahy pre moment hybnosti dané vzťahmi (2.56).

7.2. Dokážte, že pre Pauliho matice platia vzťahu

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \tag{7.55}$$

7.3. Spin sa nachádza v stave $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$. Nájdite stredné hodnoty operátora $\mathbf{S}^2$

Riešenie: Vyjadríme najprv operátor $\mathbf{S}^2$:

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_x^2 + \mathbf{S}_y^2 + \mathbf{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left[\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2\right] = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7.56}$$

(pozri príklad 7.2). Operátor $\mathbf{S}^2$ je teda priamo úmerný jednotkovej matici. Jeho stredná hodnota v ľubovoľnom stave χ bude

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4}(\chi_1^*, \chi_2^*)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}[\,|\chi_1|^2 + |\chi_2|^2\,] = \frac{3\hbar^2}{4} \tag{7.57}$$

7.4. Spin sa nachádza v stave $\chi_z^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Nájdite stredné hodnoty operátorov $\langle \mu_x \rangle$, $\langle \mu_y \rangle$ a $\langle \mu_z \rangle$.

7.5. Nájdite vlastné stavy spinu v magnetickom poli $\vec{B} = (B_x,0,0)$.
Riešenie: Rovnica (7.22) má jednoduchý tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{e\hbar B_x}{2m} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \tag{7.58}$$

Vlastné energie sú $E_{1,2}$, dané vzťahom (7.11), a vlastné vektory nájdeme postupom vysvetleným v časti 6.1.1. Kladnému priemetu spinu do osi x zodpovedá vlastný stav

$$\chi_x^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7.59}$$

s energiou $E_1 = -e\hbar B_x/2m$ a zápornému priemetu zodpovedá vlastný stav

$$\chi_x^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{7.60}$$

s energiou $E_2 = +e\hbar B_x/2m$.

7.6. Nájdite stredné hodnoty $\langle \mu_x \rangle$ $\langle \mu_y \rangle$ $\langle \mu_z \rangle$ v stavoch (7.59) a (7.60).
[$\langle \mu_x \rangle = \pm e\hbar B_x/2m, \quad \langle \mu_y \rangle = \langle \mu_z \rangle = 0$]

7.7. Nájdite vlastné stavy spinu v magnetickom poli $\vec{B} = (0,B_y,0)$.
Riešenie: Rovnica (7.22) má tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{e\hbar B_y}{2m} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{7.61}$$

Vlastné energie sú $E_{1,2}$, dané vzťahom (7.11). Kladnému priemetu spinu do osi y zodpovedá vlastný stav

$$\chi_y^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \tag{7.62}$$

s energiou $E_1 = -e\hbar B_y/2m$ a zápornému priemetu zodpovedá vlastný stav

$$\chi_y^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \tag{7.63}$$

s energiou $E_2 = +e\hbar B_y/2m$.

KAPITOLA 8

Sféricky symetrický problém

Doteraz sme riešili Schrödingerovu rovnicu v kartézskych súradniciach (x,y,z). Napríklad v kapitole 3 sme našli viazané stavy kvantovej častice v pravouhlej potenciálovej jame. Častica sa pohybovala v oblasti priestoru, ktorá mala tvar kocky s konečnou hranou ℓ.

Mnohé zaujímavé fyzikálne deje ale prebiehajú vo sféricky symetrickom potenciáli, keď je potenciál $V(r)$ funkciou iba vzdialenosti od stredu. Príkladom sféricky symetrického potenciálu je Coulombický potenciál

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r} \tag{8.1}$$

v okolí náboja Q. Sférickú symetriu má problém elektrónu v atóme vodíka, rozptylu nabitých častíc na sférických terčoch, alebo trojrozmerný harmonický oscilátor. Pre riešenie sféricky symetrických problémov je výhodné vyšetrovať časovo nezávislú Schrödingerovu rovnicu vo sférických súradniciach.

V tejto kapitole najprv zadefinujeme sférické súradnice. Potom vyriešime Schrödingerovu rovnicu. Metódou separácie premenných ju rozdelíme na rovnicu vo uhlových súradniciach (obrázok 8.1) a na rovnicu v radiálnej súradnici r. Vyriešením uhlovej rovnice získame vlastné hodnoty a vlastné funkcie operátora momentu hybnosti $\mathbf{L}$. Toto riešenie je dôležité pre opis nielen rozptylu kvantových častíc, ale aj klasických elektromagnetických vĺn na sférických prímesiach. Riešenie radiálnej vlnovej rovnice s Coulombickým potenciálom nám dá vlastné stavy atómu vodíka.

Hoci je matematický aparát používaný v tejto kapitole pomerne ťažký, je natoľko dôležitý a často využívaný v teoretickej fyzike aj v inžinierskej praxi, že sme celé odvodenie zahrnuli do textu. Možno však matematické odvodenie vynechať a uveriť výsledným vzťahom, na ktoré sa v nasledujúcich kapitolách budeme odvolávať.

8.1 Schrödingerova rovnica vo sférických súradniciach

Pri štúdiu sféricky symetrických problémov je výhodné používať sférické súradnice r, θ a ϕ. (obrázok 8.1)

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{8.2}$$

Pre konštantnú hodnotu r merajú uhly θ a ϕ polohu na povrchu gule s polomerom r. Uhol θ meria odklon od osi z ($0 \leq \theta \leq \pi$) a uhol ϕ meria odchýlku od roviny xz ($0 \leq \phi \leq 2\pi$). V zemepise je polomer r konštanta daná polomerom Zeme a uhly θ a ϕ merajú zemepisnú šírku, resp. dĺžku.

Objemový element $\mathrm{d}V = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ sa vo sférických súradniciach transformuje na

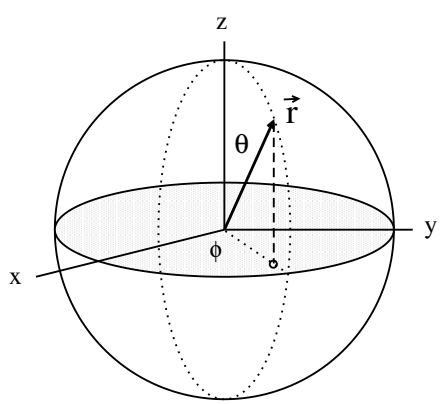
$$\mathrm{d}V = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \phi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \phi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \phi} \end{vmatrix} \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \tag{8.3}$$

Laplaceov operátor vo sférických súradniciach má tvar

$$\Delta\Psi = \Delta_r\Psi + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}\Psi \tag{8.4}$$

Operátor Δ_r predstavuje radiálnu časť Laplaceovho operátora. Jeho tvar je

$$\Delta_r\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi) \tag{8.5}$$



Obr. 8.1. Sférické súradnice (8.2). Polohový vektor $\vec{r}$ môže byť vyjadrený pomocou absolútnej hodnoty vektora $r = |\vec{r}|$ a pomocou uhlových súradníc: uhla θ medzi osou z a vektorom $\vec{r}$ a uhla ϕ medzi osou x a priemetom vektora $\vec{r}$ do roviny xy.

Uhlová časť Laplaceovho operátora $\Delta_{\theta,\phi}$ má tvar

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\phi^2} \tag{8.6}$$

Vyjadrime vo sférických súradniciach aj zložky operátora momentu hybnosti:

$$\mathbf{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\phi}{\operatorname{tg}\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{8.7}$$

$$\mathbf{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left[+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\operatorname{tg}\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \tag{8.8}$$

$$\mathbf{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{8.9}$$

Dôležité je pre nás vyjadrenie operátora $\mathbf{L}^2$

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\phi} \tag{8.10}$$

ktorý sa rovná, až na násobok $-\hbar^2$, uhlovej časti Laplaceovho operátora.

8.1.1 Metóda separácie premenných

Pre sféricky symetrický potenciál $V(r)$ je výhodné riešiť Schrödingerovu rovnicu vo sférických súradniciach. Ak vyjadríme Laplaceov operátor vo sférických súradniciach, potom bude mať Schrödingerova rovnica tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}\right]\Psi(r,\theta,\phi) + V(r)\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi) \tag{8.11}$$

Vlastné funkcie a vlastné hodnoty nájdeme metódou separácie premenných. Budeme postupovať tak ako v časti 3.2. Vlnovú funkciu budeme hľadať v tvare

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{8.12}$$

Po dosadení do rovnice (8.11) nájdeme, že funkcia $Y(\theta,\phi)$ musí spĺňať rovnicu

$$\Delta_{\theta,\phi}Y(\theta,\phi) = \Lambda Y(\theta,\phi) \tag{8.13}$$

Z rovnice (8.10) vidíme, že funkcia $Y(\theta,\phi)$ je aj vlastnou funkciou operátora $\mathbf{L}^2$. Ak teda poznáme vlastné hodnoty Λ, poznáme aj vlastné hodnoty operátora momentu hybnosti, ktoré sú $-\hbar^2\Lambda$. Radiálna funkcia $R(r)$ spĺňa rovnicu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r R(r) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda}{r^2}R(r) + V(r)R(r) = ER(r) \tag{8.14}$$

v ktorej, okrem kinetického člena a potenciálnej energie $v(r)$ vystupuje aj člen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda}{r^2} \tag{8.15}$$

Jeho fyzikálny význam nájdeme, ak si uvedomíme, že $-\hbar^2\Lambda$ je vlastnou hodnotou momentu hybnosti $\mathbf{L}^2$. Preto tento člen môžeme vyjadriť v tvare

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda}{r^2} = \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} \tag{8.16}$$

a interpretovať ho ako dodatočnú potenciálnu energiu, súvisiacu s rotáciami, ktorú poznáme aj z klasickej mechaniky.[1]

8.2 Vlastné funkcie operátora $\Delta_{\theta,\phi}$

Vlastné funkcie operátora $\Delta_{\theta,\phi}$ budeme opäť hľadať metódou separácie premenných. Funkciu $Y(\theta,\phi)$ vyjadríme ako súčin dvoch funkcií,

$$Y(\theta,\phi) = \Phi(\theta)\Xi(\phi) \tag{8.18}$$

Po dosadení do rovnice (8.13) ukážeme, že funkcia $\Xi(\phi)$ spĺňa jednoduchú diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial^2\Xi(\phi)}{\partial\phi^2} = -m^2\Xi(\phi) \tag{8.19}$$

ktorá má riešenie

$$\Xi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \qquad m = 0, \pm 1, \ldots \tag{8.20}$$

Voľba konštanty m^2 (m je celé číslo) v rovnici (8.19) je daná tým, že vlnová funkcia $\Psi(r,\theta,\phi)$, a teda aj $\Xi(\phi)$ musí byť periodickou funkciou premennej ϕ s periódou 2π

$$\Xi(\phi + 2\pi) = \Xi(\phi) \tag{8.21}$$

Konštantu úmernosti, $1/\sqrt{2\pi}$ sme zvolili tak, aby funkcia $\Xi(\phi)$ bola normovaná, teda aby platilo

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\, |\Xi(\phi)|^2 = 1 \tag{8.22}$$

Pre funkciu $\Phi(\theta)$ nájdeme rovnice (8.13) diferenciálnu rovnicu

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Phi(\theta) = \Lambda\Phi(\theta) \tag{8.23}$$

Vyriešme túto rovnicu najprv pre špeciálny prípad $m = 0$.

[1] Uvažujme teleso s hmotnosťou m obiehajúce rýchlosťou v_0 okolo stredu kruhovej dráhy s polomerom r_0. V systéme sa zachováva moment hybnosti $L = mv_0r_0$. Preto ak teleso prenesieme do vzdialenosti $r < r_0$, musí jeho rýchlosť narásť na $v = v_0r_0/r$. Má preto väčšiu kinetickú energiu. Priblížením telesa preto vykonáme prácu

$$\frac{1}{2}(mv^2 - mv_0^2) = \frac{mv_0^2}{2}\left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 - 1\right] = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{L^2}{2mr_0^2} \tag{8.17}$$

Môžeme preto veličinu $\dfrac{L^2}{2mr^2}$ interpretovať ako dodatočnú potenciálnu energiu.

Prípad $m = 0$

Riešme diferenciálnu rovnicu (8.23) najprv v špeciálnom prípade $m = 0$. Vtedy má rovnica jednoduchší tvar

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\Phi(\theta) = \Lambda\Phi(\theta) \tag{8.24}$$

Po substitúcii

$$y = \cos\theta, \qquad \frac{\partial}{\partial y} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{8.25}$$

z rovnice (8.24) dostaneme diferenciálnu rovnicu pre funkciu $P(y) = \Phi(\theta)$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left[(1-y^2)\frac{\partial}{\partial y}\right]P(y) = \Lambda P(y) \tag{8.26}$$

Hľadajme jej riešenie v tvare nekonečného radu v mocninách premennej y

$$P(y) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell y^\ell, \tag{8.27}$$

Po dosadení do rovnice (8.26) a následných úpravách dostaneme rovnicu

$$\frac{\partial}{\partial y}(1-y^2)\sum_{\ell=0}\ell a_\ell y^{\ell-1} = \sum_{\ell=2}\ell(\ell-1)a_\ell y^{\ell-2} - \sum_{\ell=0}\ell(\ell+1)a_\ell y^\ell = \Lambda\sum_{\ell} a_\ell y^\ell \tag{8.28}$$

Ak v prvej sume urobíme substitúciu $\ell \to \ell + 2$, môžeme rovnicu upraviť na jednoduchší tvar

$$\sum_{\ell=0}\Big[(\ell+1)(\ell+2)a_{\ell+2} - [\Lambda + \ell(\ell+1)]a_\ell\Big]y^\ell = 0 \tag{8.29}$$

Aby táto rovnica platila pre ľubovoľnú hodnotu y, musí byť nulový koeficient pri každej mocnine y. Preto musí platiť

$$a_{\ell+2} = \frac{\Lambda + \ell(\ell+1)}{(\ell+1)(\ell+2)}a_\ell \tag{8.30}$$

Dostali sme teda rekurzívny vzťah pre koeficienty a_ℓ. Pretože v limite veľkého ℓ je pomer $a_{\ell+2}/a_\ell \to 1$, nebude rad (8.27) konvergovať, a preto také riešenie nemôže zodpovedať normovateľnej vlnovej funkcii. Preto fyzikálnym riešením rovnice (8.26) je len taký rad (8.27) ktorý obsahuje len konečný počet prvkov, teda je polynómom konečného stupňa. Taký prípad nastane vtedy, ak je niektorý z koeficientov a_ℓ nulový. Z rekurzívneho vzťahu (8.30) totiž plynie, že ak je niektorý z koeficientov nulový, potom sú nulové aj všetky vyššie koeficienty. Fyzikálne akceptovateľné riešenie preto dostávame len vtedy, ak sa pre niektoré ℓ čitateľ v zlomku na pravej strane rovnice (8.30) rovná nule, teda ak platí

$$\Lambda = -\ell(\ell+1) \tag{8.31}$$

Rovnica (8.31) nám dáva vlastné hodnoty Λ prislúchajúce rovnici (8.24). Ak platí vzťah (8.31), potom riešením rovnice (8.26) sú polynómy stupňa ℓ, známe v matematickej fyzike ako Legendreove polynómy $P_\ell(y)$ stupňa ℓ. Z rovnice (8.29) pre ich koeficienty plynie, že polynómy sú alebo párne (pre ℓ párne), alebo nepárne (ak je ℓ nepárne).

$$P_\ell(-y) = (-1)^\ell P(y) \tag{8.32}$$

Explicitný tvar prvých šiestich polynómov je

$$\begin{aligned} P_0(y) &= 1 & P_1(y) &= y \\ P_2(y) &= (3y^2-1)/2 & P_3(y) &= (5y^3-3y)/2 \\ P_4(y) &= (35y^4-30y^2+3)/8 & P_5(y) &= (63y^5-70y^3+15y)/8 \end{aligned} \tag{8.33}$$

Legendreove polynómy sú definované na intervale $-1 \le y \le 1$.

Prípad $m \neq 0$

Pre nenulové hodnoty $m \neq 0$ musíme riešiť diferenciálnu rovnicu (8.23) ktorú napíšeme v tvare

$$\frac{\partial}{\partial y}\left[(1-y^2)\frac{\partial}{\partial y} - \frac{m^2}{1-y^2}\right] Q(y) = \Lambda Q(y) \tag{8.34}$$

kde opäť $y = \cos\theta$. Riešenie môžeme nájsť tak [10], že rovnicu (8.26) pre $m = 0$ budeme m-krát derivovať podľa y. Po úpravách sa ukáže, že výsledná rovnica má tvar rovnice (8.34) s funkciou $Q(y)$

$$Q(y) = P_\ell^m(y) = (1-y^2)^{m/2}\frac{\partial^m}{\partial y^m}P_\ell(y) \tag{8.35}$$

Z tvaru funkcie $Q(y)$ vyplýva, že takéto riešenie rovnice (8.23) existuje, len ak pre kvantové čísla m a ℓ platí vzťah

$$m \le \ell \tag{8.36}$$

Funkcia $P_\ell^m(y)$ sa nazýva pridružená Legendreova funkcia (všimnime si, že pre nepárne hodnoty m nie je P_ℓ^m polynómom). Funkcia

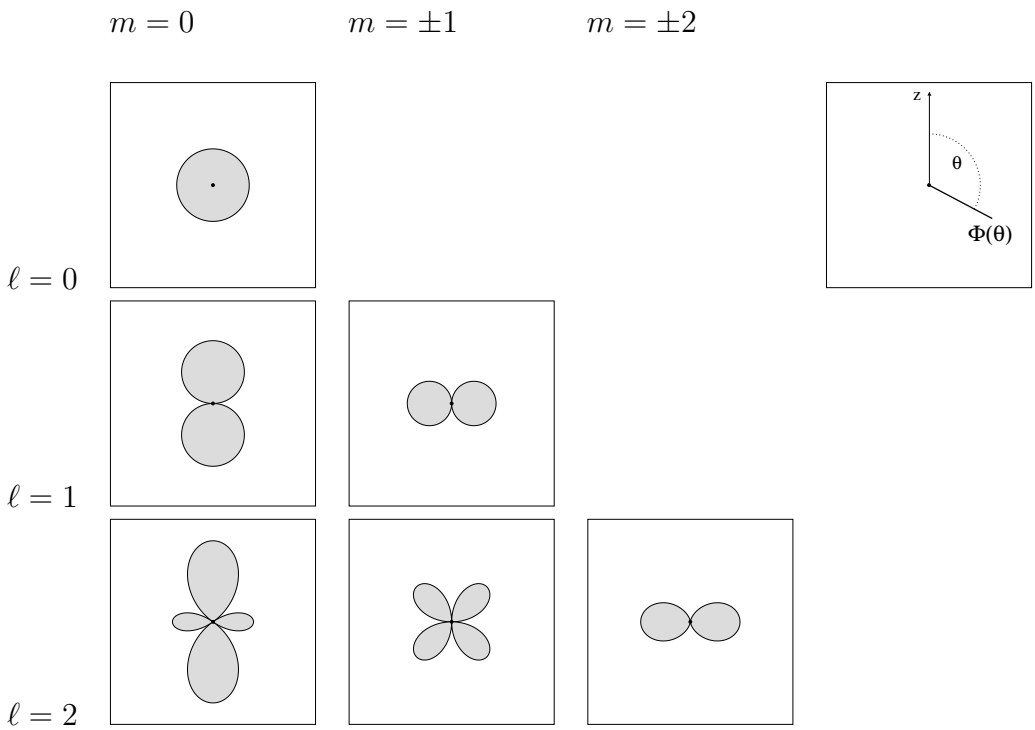
$$\Phi_\ell^m(\theta) = P_\ell^m(\cos\theta) \tag{8.37}$$

je potom riešením rovnice (8.23) s vlastnou hodnotou $-\ell(\ell+1)$.

Funkciu Q_ℓ^m sme zostrojili len pre kladné hodnoty m. Vzhľadom na to, že m vstupuje do rovnice (8.34) len v druhej mocnine, je zrejmé, že táto funkcia je riešením rovnice (8.34) aj pre záporné hodnoty m, pokiaľ $|m| \le \ell$. Pre danú hodnotu kvantového čísla ℓ teda nájdeme $2\ell+1$ rôznych funkcií $P_\ell^m(y)$, zodpovedajúce kvantovému číslu

$$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, 0, \ldots \ell-1, \ell \tag{8.38}$$

a platí $P_\ell^{-|m|}(y) = P_\ell^{|m|}$.



Obr. 8.2. Vlnové funkcie $\Phi_\ell^m(\theta)$ dané vzťahom (8.40) pre $\ell = 0$, 1 a 2. Analytický tvar funkcií je uvedený v tabuľke 8.1. Zvislá os na obrázkoch je os z. Smer osi z zodpovedá uhlu $\theta = 0$ (obrázok 8.1). Hodnota funkcie $\Phi_\ell^m(\theta)$ pre každý uhol je daná vzdialenosťou krivky na obrázku od stredu súradníc.

Vlastnosti pridružených Legendreových funkcií môžeme nájsť v špecializovaných prácach [20] aj v učebniciach kvantovej mechaniky [10] alebo matematickej fyziky [18]. Pre nás je dôležitá ich ortogonalita:

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}y P_\ell^m(y) P_{\ell'}^m(y) = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!} \times \delta_{\ell\ell'} \tag{8.39}$$

z ktorej nájdeme normalizačnú konštantu funkcie $\Phi(\theta)$. Po dosadení dostaneme

$$\Phi_\ell^m(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^m(\cos\theta) \tag{8.40}$$

Funkcie $\Phi_\ell^m(\theta)$ pre $\ell \leq 2$ sú znázornené na obrázku 8.2. Pre $\ell = 0$ existuje jediný stav s $m = 0$. Z tvaru vlnovej funkcie Ξ_m (rovnica 8.20) vidíme, že tento stav je sféricky symetrický – nezávisí od uhlov θ a ϕ. Pre $\ell = 1$ sú možné dve rôzne funkcie v závislosti od smeru vektora momentu hybnosti. Stav s $m = 0$ má nenulový priemet momentu hybnosti do roviny xy, stav s $m = \pm 1$ do osi z. S rastúcou hodnotou ℓ sa uhlová závislosť vlnovej funkcie stáva zložitejšiou, ako vidieť už pre $\ell = 2$.

Tab. 8.1. Analytický tvar funkcií $\Phi_\ell^m(\theta)$ pre pre $\ell = 0$, 1 a 2.

$\ell = 0$	$\Phi_0^0(\theta) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$		
$\ell = 1$	$\Phi_1^0(\theta) = \dfrac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\Phi_1^{\pm1}(\theta) = \mp\dfrac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	
$\ell = 2$	$\Phi_2^0(\theta) = \dfrac{\sqrt{5}}{8}\left[3\cos^2\theta - 1\right]$	$\Phi_2^{\pm1}(\theta) = \mp\dfrac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta$	$\Phi_2^{\pm2}(\theta) = \dfrac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$

8.2.1 Sférické funkcie

Vráťme sa teraz k pôvodnej rovnici (8.13). Vlastné hodnoty sférickej časti Laplaceovho operátora sú

$$\Lambda = -\ell(\ell+1) \tag{8.41}$$

a vlastné funkcie sú sférické funkcie, definované pre $m > 0$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = \Phi_\ell^m(\theta)\Xi_m(\phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{8.42}$$

a pre záporné hodnoty $m < 0$ [10]

$$Y_\ell^{-|m|}(\theta,\phi) = (-1)^{|m|}\left[Y_\ell^{|m|}(\theta,\phi)\right]^* \tag{8.43}$$

8.2.2 Rozptyl na sféricky symetrickom potenciáli

Funkcie $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ tvoria úplný systém funkcií. To znamená, že každú funkciu uhlov θ a ϕ môžeme rozvinúť do nekonečného radu vo funkciách Y podobne ako rozvíjame funkcie do Fourierových radov (čo sú nekonečné sumy funkcií $\sin nkx$). Preto sú sférické funkcie užitočné pri výpočte rozptylu častíc na sféricky symetrických potenciáloch (jadrách atómov).

Rozptyl na sféricky symetrickom potenciáli je dôležitý aj v klasickej elektrodynamike, napríklad pri opise rozptylu elektromagnetických vĺn na sférických terčoch (teória Mie [30]). Pretože vlnové dĺžky svetla siahajú od zlomkov Angströmov až po tisíce kilometrov, môže byť sférickým terčom prakticky čokoľvek – od malých kovových nanočastíc s rozmerom niekoľkých nanometrov až po objekty veľkosti zemegule (rozptyl dlhovlnných vĺn prichádzajúcich z Vesmíru).

8.3 Operátor momentu hybnosti

Z tvaru operátorov $\mathbf{L}$ a $\mathbf{L}_z$ (rovnice 8.10 a 8.9) vidíme, že funkcia $Y(\theta,\phi)$ je aj vlastnou funkciou týchto operátorov. Platí teda

$$\mathbf{L}^2 Y(\theta,\phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y(\theta,\phi) \tag{8.44}$$

a

$$\mathbf{L}_z Y(\theta,\phi) = \hbar m Y(\theta,\phi) \tag{8.45}$$

Moment hybnosti kvantovej častice je preto kvantovaný. Jeho vlastné hodnoty sú

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{8.46}$$

Kvantovaný je aj priemet vektora momentu hybnosti do osi z

$$L_z = \hbar m \tag{8.47}$$

Z definície pridružených Legendreových polynómov vieme, že

$$|m| \leq \ell \tag{8.48}$$

Priemet spinu do osi z je vždy menší, ako dĺžka vektora L:

$$L_z < L \tag{8.49}$$

Táto nerovnosť je v súlade s komutačnými vzťahmi pre zložky momentu hybnosti: ak by totiž platila rovnosť, $L_z = L$, potom by zložky L_x a L_y museli byť nulové, a teda by boli presne určené všetky tri komponenty momentu hybnosti, čo nie je možné.

Uvedené výsledky dokazujú správnosť vzťahov (1.70) a (1.71), ktoré sme v časti 1.7.5 uviedli bez dôkazu.

8.4 Radiálna vlnová funkcia

Rovnicu pre radiálnu vlnovú funkciu (8.14) prepíšeme do tvaru

$$\Delta_r R(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\Big[E - V(r)\Big] R(r) = 0 \tag{8.50}$$

Radiálnu vlnovú funkciu môžeme riešiť pre ľubovoľnú potenciálnu energiu $V(r)$ a pre energie $E > 0$ (rozptylové stavy) a $E < 0$ (viazané stavy). My sa obmedzíme na Coulombický potenciál v okolí kladne nabitého jadra so Z protónmi. Vtedy má potenciálna energia elektrónu tvar

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \tag{8.51}$$

Vyšetríme najprv dva limitné prípady:

(1) V limite $r \to \infty$ (ďaleko od stredu symetrie) bude potenciálna energia $V(r)$ malá, preto ju v rovnici (8.50) zanedbáme, rovnako ako člen $[\ell(\ell+1)/r^2]R$. Dostaneme rovnicu

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR) + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0 \tag{8.52}$$

Po vynásobení premennou r dostaneme vlnovú rovnicu pre funkciu $rR(r)$:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR) + \frac{2mE}{\hbar^2}(rR) = 0 \tag{8.53}$$

Ak je energia kladná, $E > 0$, potom je riešením tejto rovnice funkcia

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{8.54}$$

Funkcia $R(r)$ zodpovedá vlne, šíriacej sa zo zdroja umiestneného v počiatku. Jej amplitúda musí klesať so vzdialenosťou od zdroja, $\sim 1/r$, pretože plocha konštantnej amplitúdy narastá $\sim r^2$. Druhé riešenie, $rR(r) \sim e^{-ikr}$, nemá fyzikálne opodstatnenie, pretože by zodpovedalo vlne vchádzajúcej z okolia do zdroja [30].

Analogicky nájdeme vlnovú funkciu pre viazané stavy so zápornou energiu $E < 0$

$$R(r) \sim \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \tag{8.55}$$

Viazaný stav so zápornou energiou teda klesá exponenciálne s rastúcou vzdialenosťou od stredu, v súlade s naším očakávaním.

(2) V blízkosti stredu symetrie, teda v limite $r \to 0$, zanedbáme potenciálnu energiu $V(r) \sim r^{-1}$ aj energiu E, pretože sú oveľa menšie, ako člen $\ell(\ell+1)/r^2$, ktorý s blízkosťou k bodu $r = 0$ rastie úmerne r^{-2}. Dostaneme rovnicu

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R = 0 \tag{8.56}$$

Hľadajme jej riešenie v tvare $R = r^\alpha$. Po dosadení do rovnice (8.56) dostaneme

$$\alpha(\alpha+1) = \ell(\ell+1) \tag{8.57}$$

a teda $\alpha = \ell$ alebo $\alpha = -\ell - 1$. Druhé riešenie nie je fyzikálne, pretože vlnová funkcia nemôže v nule divergovať. Preto je limitný tvar funkcie $R \sim r^\ell$.[2]

[2]Tento postup nie je použiteľný pre prípad $\ell = 0$. Vtedy nemôžeme v rovnici (8.50) zanedbať žiadny člen. Dá sa však ukázať, že asymptotické vyjadrenie $R \sim r^0$ je správne aj v tomto prípade [10].

8.4.1 Riešenie radiálnej rovnice

Presné riešenie, pre viazané stavy $E < 0$, ktoré spĺňa asymptotické vzťahy v oboch limitách, budeme hľadať v tvare [10]

$$R(r) = \rho^{\ell} e^{-\rho} w(\rho), \qquad \text{kde } \rho = \kappa r \tag{8.58}$$

a parameter κ je definovaný v rovnici (8.55). Po dosadení funkcie $R(r)$ do rovnice (8.50) dostaneme po jednoduchých, ale prácnych matematických úpravách rovnicu pre funkciu $w(\rho)$

$$\frac{\partial^2 w(\rho)}{\partial \rho^2} + 2\left[\frac{\ell+1}{\rho} - 1\right]\frac{\partial w(\rho)}{\partial \rho} + \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2\kappa}{|E|} - 2(\ell+1)\right]\frac{w(\rho)}{\rho} = 0 \tag{8.59}$$

Tak ako pri analýze operátora $\Delta_{\theta,\phi}$ môžeme hľadať riešenie rovnice (8.59) v tvare nekonečného mocninného radu,

$$w(\rho) = \sum_{n}^{\infty} a_k \rho^k \tag{8.60}$$

a po dosadení funkcie $w(\rho)$ z rovnice (8.60) do rovnice (8.59) nájdeme rekurzívny vzťah pre koeficienty tohto radu a_n:

$$a_{k+1}(k+1)\left[k + 2(\ell+1)\right] + a_k\left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2\kappa}{|E|} - 2(k+\ell+1)\right] = 0 \tag{8.61}$$

Fyzikálne možné riešenia rovnice (8.59) sú len tie, pre ktoré sa nekonečný rad zredukuje na polynóm $w(\rho)$ konečného rádu. Z rovnice (8.61) nájdeme, že táto podmienka je splnená len vtedy, ak platí

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2\kappa}{|E|} = 2(k+\ell+1) \tag{8.62}$$

Ak dosadíme za $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ z rovnice (8.55), dostaneme

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2|E|}}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} = 2n \tag{8.63}$$

kde $n = k + \ell + 1 = 1,2,\ldots$ je celé číslo. Z tejto rovnice nájdeme vlastné energie

$$E_n(Z) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2\frac{1}{4n^2} \tag{8.64}$$

Riešením rovnice (8.59) je potom polynóm stupňa n,

$$w(x) = \mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(x) \tag{8.65}$$

známy v matematickej fyzike ako pridružený Laguerrov polynóm. Môžeme ho nájsť z definičného vzťahu [1, 20]

$$\mathcal{L}_n^k(x) = \frac{\partial^k}{\partial x^k}\left[e^x\frac{\partial^n}{\partial x^n}(e^{-x}x^n)\right], \quad k \le n \tag{8.66}$$

Všimnime si, že stupeň polynómu $\mathcal{L}_n^k(x)$ je $n-k$. Vlastná energia E_n je síce jednoznačne určená kvantovým číslom n (rovnica 8.64), ale tej istej energii zodpovedá viac vlnových funkcií, ktoré sa líšia kvantovým číslom ℓ, udávajúcim moment hybnosti elektrónu. Z rovnice (8.66) vidíme, že medzi kvantovými číslami n a ℓ platí vzťah

$$n \geq \ell + 1 \tag{8.67}$$

ktorý dostaneme aj z porovnania pravých strán rovníc (8.62) a (8.63).

8.4.2 Vlastné energie a vlastné funkcie

Z podmienky (8.63) dostaneme energie viazaných stavov elektrónu v atóme

$$E_n(Z) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \frac{1}{4n^2} = \frac{Z^2}{n^2}E_1(Z=1) \tag{8.68}$$

kde

$$E_1(Z=1) = -\frac{1}{4}\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \tag{8.69}$$

je energia základného stavu atómu vodíka. Všimnime si, že pre $Z = 1$ sú energie (8.68) totožné s energiami získanými v rámci Bohrovho modelu atómu vodíka (rovnica 1.66), odvodené z Bohrových kvantovacích podmienok.

Keď poznáme vlastné energie, môžeme vyjadriť aj zodpovedajúci parameter κ, definovaný vzťahom (8.55)

$$\frac{1}{\kappa} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E_n|}} = 2n\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2} = \frac{n}{Z}\,a_0 \tag{8.70}$$

kde a_0 je Bohrov polomer (pozri tabuľku 1.2). Radiálna vlnová funkcia elektrónu v atóme má teda tvar

$$R_{n\ell}(r) = C(\kappa r)^\ell \mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\kappa r)\, e^{-\kappa r} \tag{8.71}$$

Normovaciu konštantu C nájdeme z podmienky

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2 |R_{n\ell}(r)|^2 = 1 \tag{8.72}$$

Polynóm $\mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\kappa r)$ je polynómom stupňa $n-\ell-1$.

KAPITOLA 9

Atómy

V predchádzajúcej kapitole 8 sme vyriešili Schrödingerovu rovnicu pre jediný elektrón viazaný v blízkosti jadra sféricky symetrickým Coulombickým potenciálom. Našli sme explicitný tvar vlnovej funkcie a odvodili vlastné energie viazaných stavov. V tejto kapitole využijeme získané výsledky na objasnenie štruktúry atómov. Najprv sa budeme zaoberať možnými stavmi elektrónu v atóme vodíka. Ukážeme priestorové rozdelenie elektrónu v okolí jadra a vysvetlíme niektoré otvorené otázky, ktoré Bohrov model nevedel vyriešiť (pozri časť 1.7.4).

Pre presné štúdium zložitejších atómov je potrebné model, riešený v predchádzajúcej kapitole, doplniť o vzájomnú coulombickú interakciu medzi elektrónmi v obale atómu. Tento problém je však riešiteľný len približnými metódami alebo numericky. Preto sa obmedzíme len na jeho kvalitatívnu analýzu. Na príklade atómu hélia ukážeme, že už interakcia dvoch elektrónov obiehajúcich okolo jadra hélia podstatne mení energetické spektrum atómu. Napriek ťažkostiam so vzájomnou interakciou elektrónov nám energetické spektrum atómu, získané v kapitole 8, umožní kvalitatívne porozumieť vlastnostiam zložitejších atómov a zoradiť ich do periodickej sústavy prvkov. V poslednej časti tejto kapitoly sa budeme zaoberať spektrami viacelektrónových atómov.

9.1 Vodík $_1$H

V predchádzajúcej časti sme matematicky vyriešili problém elektrónu viazaného coulombickým potenciálom k jadru s nábojom Ze. Energia elektrónu je daná vzťahom (8.68). Pre $Z = 1$ (teda pre atóm vodíka) je tento vzťah totožný s energiou získanou v rámci Bohrovho modelu (rovnica 1.66). Na rozdiel od Bohrovho modelu sme však odvodili, že vlastný stav elektrónu je určený troma kvantovými číslami: hlavným kvantovým číslom n, ktoré určuje energiu, orbitálnym, ℓ, ktoré určuje hodnotu momentu hybnosti a magnetickým kvantovým číslom m, definujúcim priemet momentu hybnosti do osi z. Okrem toho má elektrón spinové kvantové číslo $s_z = \pm 1/2$, ktoré charakterizuje orientáciu spinu elektrónu v smere osi z.

Z riešenia sférickej Schrödingerovej rovnice v kapitole 8 vieme, že pre kvantové čísla platia obmedzenia

$$\ell = 0,1,\ldots,n-1 \tag{9.1}$$

a

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \pm \ell \tag{9.2}$$

Rozdiel medzi Bohrovým riešením a riešením Schrödingerovej rovnice si uvedomíme, ak sa podrobne pozrieme na priestorové rozloženie elektrónu v okolí jadra. Uvažujme napríklad stav $n = 1$. V tomto stave musí byť $\ell = 0$ a teda aj $m = 0$. Vlnová funkcia elektrónu má jednoduchý tvar

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\phi) \tag{9.3}$$

kde

$$Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{9.4}$$

je konštanta a

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}\, e^{-r/a_0} \tag{9.5}$$

(pozri vzťah (8.20), tabuľku 8.2 a vzťah (8.71)).

Už tieto výsledky sú prekvapujúce: elektrón v základnom stave má nulový moment hybnosti, lebo $\ell = 0$. Jeho vlnová funkcia je sféricky symetrická, závisí len od vzdialenosti od jadra. Takéto rozdelenie nemožno dať do súvisu s predstavou elektrónu obiehajúceho po akejkoľvek dráhe okolo jadra.

Nájdime teraz pravdepodobnostné rozdelenie $P_1(r)$ výskytu elektrónu vo vzdialenosti r od jadra. Pravdepodobnosti výskytu elektrónu vo vrstve medzi r a $r + \mathrm{d}r$ je daná vzťahom

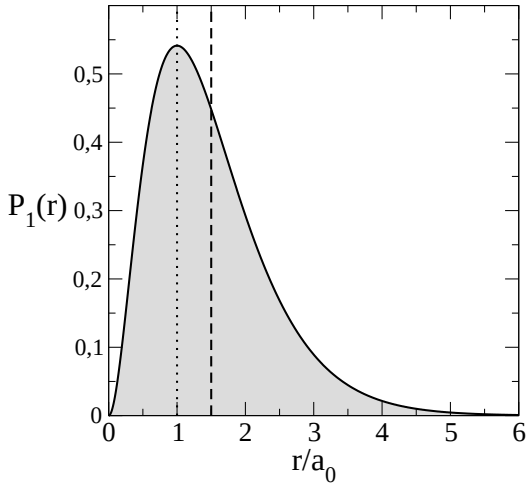
$$P_1(r)\mathrm{d}r = R_{10}^2(r)r^2\mathrm{d}r = \frac{4}{a_0^3}r^2e^{-2r/a_0}\mathrm{d}r \tag{9.6}$$

Závislosť hustoty pravdepodobnosti $P_1(r)$ od vzdialenosti r je ukázaná na obrázku 9.1. Z obrázku vidíme, že rozdelenie výskytu elektrónu je pomerne široké. Najpravdepodobnejšiu vzdialenosť elektrónu od jadra $\overline{r}$ nájdeme z podmienky

$$\frac{\partial}{\partial r}P_1(r)\Big|_{r=\overline{r}} = 0 \tag{9.7}$$

Riešením tejto rovnice dostaneme $\overline{r} = a_0$ čo súhlasí s predpoveďou Bohrovho modelu atómu. Stredná hodnota vzdialenosti elektrónu od jadra ale nie je a_0, ale $\langle r\rangle = 3a_0/2$ (pozri príklad 9.1).

Z obrázku 9.1 vidíme, že elektrón sa môže s určitou pravdepodobnosťou nachádzať aj na polovičnej vzdialenosti a_0 a čo je ešte dôležitejšie, aj vo vzdialenosti podstatne väčšej, ako je a_0. Napríklad pravdepodobnosť, že elektrón nájdeme vo vzdialenosti väčšej ako $5a_0$ je 0,0026 (pozri príklad 9.2).



Obr. 9.1. Pravdepodobnostné rozdelenie elektrónu $P_1(r)$ v základnom stave atómu vodíka ($n = 1$). Elektrón sa s najväčšou pravdepodobnosťou vyskytuje vo vzdialenosti $\overline{r} = a_0$ od jadra. Stredná vzdialenosť od jadra je $\langle r \rangle = 3a_0/2$ (príklad 9.1). Najpravdepodobnejšia a stredná vzdialenosť sú vyznačené bodkovanou, resp. prerušovanou čiarou.

Pravdepodobnostné rozdelenie vyšších excitovaných stavov je ešte zložitejšie. Napríklad v stave $n = 3$, $\ell = 0$ má pravdepodobnostné rozdelenie tvar

$$P_{3,0}(r)\mathrm{d}r = \frac{4}{3^9}\frac{r^2}{a_0^2}\left[27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right]^2 e^{-\frac{2r}{3a_0}}\frac{\mathrm{d}r}{a_0} \tag{9.8}$$

Analytický tvar vlnových funkcií $R_{n\ell}(r)$ je uvedený napríklad v knihe [12].

Pravdepodobnostné rozdelenia pre druhú a tretiu energetickú hladinu sú ukázané na obrázku 9.2. Vidíme, že rozdelenie je široké a pre $\ell < n - 1$ má viac ako jedno maximum. Dá sa ukázať, že v stavoch s najväčším možným momentom hybnosti, $\ell = n - 1$ je najpravdepodobnejšia vzdialenosť elektrónu od jadra

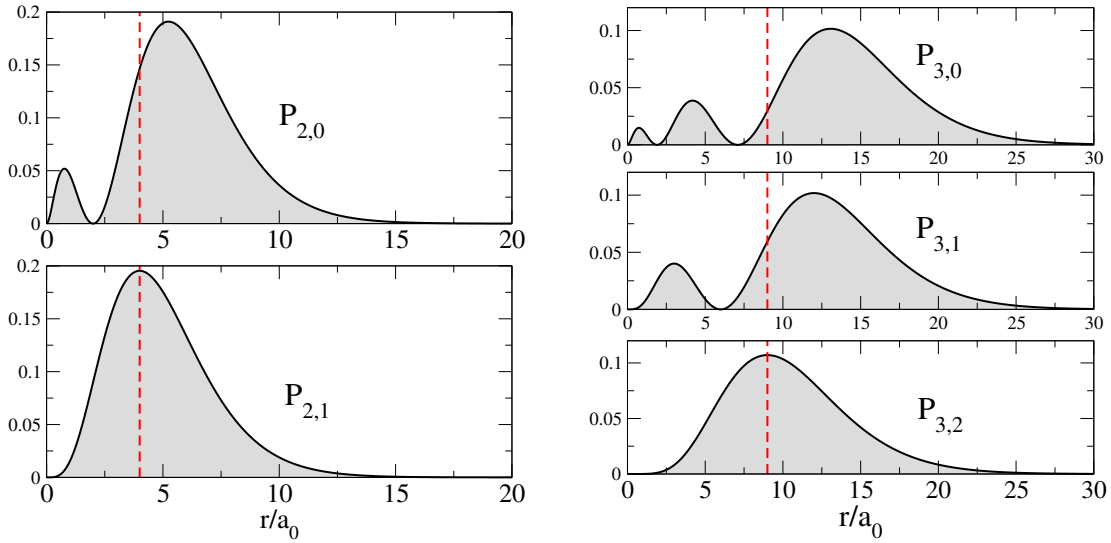
$$\overline{r}_n = n^2 a_0 \quad \text{len ak platí} \quad \ell = n - 1 \tag{9.9}$$

zhodná s polomerom n-tej Bohrovej dráhy (rovnica 1.64). Pre menšie hodnoty kvantového čísla ℓ však takúto korešpondenciu s Bohrovým modelom nenájdeme.

Všimnime si rôznorodosť vlnových funkcií prináležiacich tomu istému kvantovému číslu n. Radiálna vlnová funkcia závisí nielen od n, ale aj do kvantového čísla ℓ. Moment hybnosti, $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ teda ovplyvňuje nielen uhlové rozdelenie prostredníctvom funkcií $Y_\ell^m(\theta,\phi)$, ale aj radiálne rozdelenie. Napriek odlišnému priestorovému rozdeleniu majú všetky stavy s tým istým kvantovým číslom n tú istú energiu.

Obsadenosť energetických hladín

Pretože elektróny sú fermióny, nemôžu sa žiadne dva z nich nachádzať v tom istom kvantovom stave. To je dôvod, prečo v mnohoelektrónových atómoch elektróny obsadzujú postupne vyššie energetické hladiny. Pre pochopenie vlastností atómov potrebujeme vedieť, koľko elektrónov môže ktorú hladinu obsadiť.



Obr. 9.2. Vľavo je pravdepodobnostné rozdelenie elektrónu $P_{2\ell}$ v stave $n = 2$ a $\ell = 0$ (horný obrázok) a $\ell = 1$ (dolný obrázok). Vpravo je pravdepodobnostné rozdelenie elektrónu $P_{3\ell}$ v stave $n = 3$ a $\ell = 0$, 1 a 2 (zhora nadol). Všimnite si, že pre $\ell < n - 1$ má pravdepodobnostné rozdelenie viacero maxím a miním. Pre $\ell = n - 1$ je najpravdepodobnejšia vzdialenosť elektrónu od jadra $\overline{r}_n = n^2 a_0$.

Elektrón na n-tej hladine môže mať n rôznych hodnôt momentu hybnosti, pretože $\ell = 0,1,\ldots,n-1$. Dva elektróny s tým istým kvantovým číslom ℓ sa ešte môžu líšiť kvantovým číslom m. Takých možností je $2\ell + 1$. Na hladine n je preto

$$2 \times [1 + 3 + 5 + \cdots + (2(n-1)+1)] = 2n^2 \tag{9.10}$$

povolených stavov (faktor 2 pochádza z dvoch orientácií spinu: dva elektróny s tými istými kvantovými číslami n, ℓ a m sa ešte môžu líšiť orientáciou svojho spinu).

9.2 Hélium $^4_2$He

Hélium je po vodíku druhý najjednoduchší atóm. Atóm hélia má v atómovom jadre dva protóny a dva neutróny. Okolo jadra obiehajú dva elektróny. Pre výpočet energetického spektra atómu hélia potrebujeme nájsť vlastný stav sústavy troch vzájomne interagujúcich častíc: jadra a dvoch elektrónov, čo je analyticky nemožné. Obmedzíme sa preto len na kvalitatívnu diskusiu.

Ión hélia

V ióne hélia He^+ obieha okolo jadra len jediný elektrón. Jeho energetické spektrum a príslušné vlastné vlnové funkcie sme našli pri štúdiu atómu vodíka. Energia základného stavu iónu je daná vzťahom (8.68) pre $n = 1$

$$E_1(\mathrm{He}^+) = -4E_1 = -54{,}4\ \mathrm{eV} \tag{9.11}$$

a vlnová funkcia

$$R_{10}(r) = \sqrt{\frac{16}{a_0^3}}\, e^{-2r/a_0} \tag{9.12}$$

klesá exponenciálne so vzdialenosťou od jadra. Jediný elektrón v ióne hélia je preto k jadru viazaný energiou 54,4 eV. Vyššie energetické hladiny nájdeme z rovnice (8.68) pre $Z = 2$.

Atóm hélia

Riešenie atómu hélia s dvoma elektrónmi naráža na ten problém, že dva elektróny obiehajúce okolo jadra hélia medzi sebou interagujú elektrickou odpudivou interakciou. Pretože vzdialenosť medzi elektrónmi je porovnateľná so vzdialenosťou každého jednotlivého elektrónu od jadra, dá sa očakávať, že vzájomná interakcia medzi elektrónmi výrazne ovplyvní energiu základného stavu.

Schrödingerova rovnica pre dva elektróny v atóme hélia má tvar

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta_1 + \Delta_2\right] - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right\}\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{9.13}$$

kde $\vec{r}_1$ a $\vec{r}_2$ je polohový vektor prvého a druhého elektrónu, a $\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ je vlnová funkcia (bez spinovej časti, ktorú nemusíme uvažovať, pretože Hamiltonián v rovnici (9.13) neobsahuje členy pôsobiace na spin).

Nájsť analyticky základný stav atómu hélia nedokážeme. Pomerne presnú hodnotu základného stavu však môžeme získať približnými metódami, napríklad poruchovým počtom alebo variačnou metódou [1]. Uspokojíme sa s uvedením výsledku: základným stavom je stav, v ktorom oba elektróny majú opačne orientované spiny. Ak je spinová vlnová funkcia antisymetrická, potom je vlnová funkcia $\Phi(r_1,r_2)$ symetrická vzhľadom na zámenu elektrónov, $\Phi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Phi_1(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$ (pozri časť 7.5). Energia základného stavu má hodnotu

$$E_1 = -79 \text{ eV} \tag{9.14}$$

pričom si je treba uvedomiť, že táto energia pripadá na dva elektróny.

9.2.1 Ionizačná energia

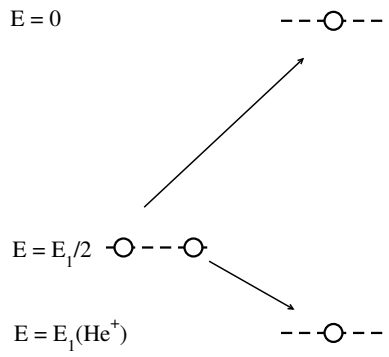
Ionizačná energia E_i je energia potrebná na vytrhnutie jedného elektrónu z atómu. Ak atóm hélia absorbuje energiu E_{ion}, uvoľní sa jeden elektrón (jeho energia bude nulová), a druhý zostane viazaný v ióne hélia energiou $E_1(\text{He}^+)$, danou rovnicou (9.2). Schematicky je tento proces zobrazený na obrázku 9.3. Ionizačnú energiu teda získame z rovnice

$$E_{\text{ion}}(\text{He}) + E_1(\text{He}) = E_1(\text{He}^+) \tag{9.15}$$

z ktorej nájdeme

$$E_{\text{ion}}(\text{He}) = E_1(\text{He}^+) - E_1(\text{He}) = -54{,}4 \text{ eV} + 79 \text{ eV} = +24{,}6 \text{ eV} \tag{9.16}$$

čo je pomerne veľká energia. Preto je atóm hélia za normálnych podmienok mimoriadne stabilný.



Obr. 9.3. Ionizácia atómu hélia. Vľavo: dva elektróny v základnom stave, vpravo: jeden elektrón klesol do základného stavu iónu hélia, druhý sa uvoľnil. Ionizácia vyžaduje energiu E_i danú rovnicou (9.16).

9.3 Mnohoelektrónové atómy. Periodická tabuľka prvkov

Zložitejšie atómy obsahujú v jadre Z protónov a porovnateľný počet neutrónov. Atóm charakterizujeme jeho názvom, chemickou značkou X, atómovým číslom Z a hmotnostným číslom A.

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X} \tag{9.17} $$

Atómy toho istého prvku s rôznym A sú izotopy. Majú, samozrejme, ten istý počet protónov, ale líšia sa počtom neutrónov v jadre. Pretože počet elektrónov a elektrónová štruktúra je daná nábojom jadra, a teda číslom Z, nie je hmotnostné číslo A z hľadiska elektrónovej štruktúry dôležité. Izotopy toho istého prvku majú rovnaké chemické vlastnosti, ich energetické spektrum sa líši len v kvantitatívnych detailoch.

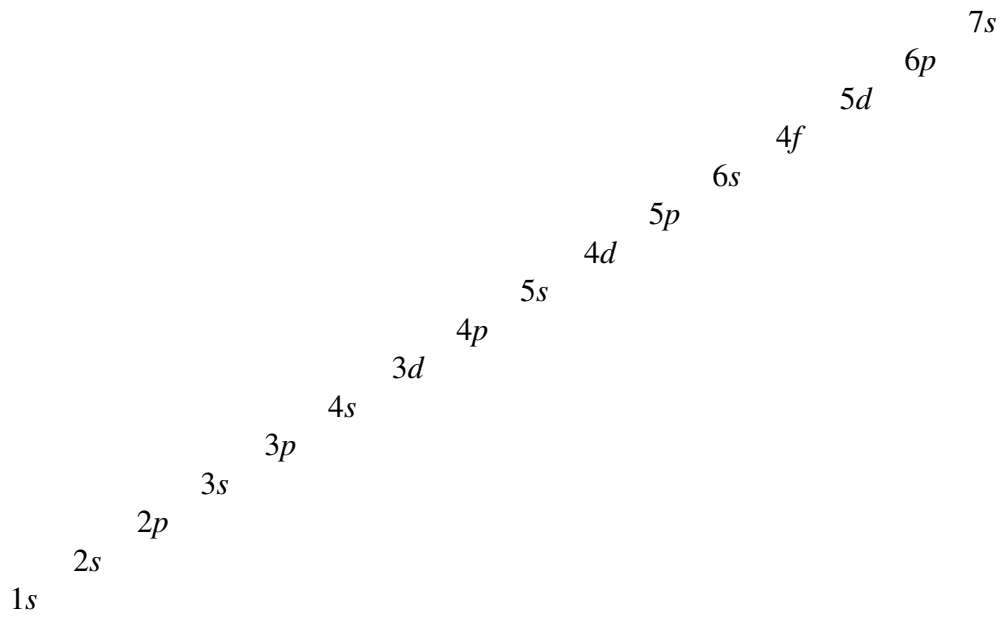
Pre klasifikáciu energetických hladín sa zaužívalo označenie s, p, d, f zodpovedajúce stavom s kvantovým číslom $\ell = 0,1,2,3$. Tabuľka 9.1 uvádza obsadenosť jednotlivých hladín, ktorá je daná počtom možných priemetov spinu.

Ako už bolo spomenuté pri opise atómu hélia, štúdium mnohoelektrónových atómov sťažuje skutočnosť, že elektróny ako nabité častice interagujú aj medzi sebou. Presný výpočet energetických hladín nie je možný, ale kvalitatívne môžeme vlastnosti atómov pochopiť už na základe našich súčasných poznatkov.

Pretože elektróny sú fermióny, obsadzujú v atómoch postupne energetické hladiny. Elektróny na nižších hladinách však tienia elektrický náboj jadra, preto sú elektróny na vyšších energetických hladinách viazané slabšie, ako predpokladá jednoelektrónový model. Energia príslušného

Tab. 9.1. Elektrónové hladiny s rôznym momentom hybnosti $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ a ich obsadenosť (počet elektrónov, ktoré sa na danej hladine môžu nachádzať).

Stav	s	p	d	f
ℓ	0	1	2	3
Počet možných stavov $= 2(2\ell+1)$	2	6	10	14



Obr. 9.4. Poradie, v akom sa obsadzujú energetické hladiny pri narastajúcom počte elektrónov v atóme.

stavu bude preto vyššia ako energia E_n daná rovnicou (8.68).

Druhým dôsledkom interakcie medzi elektrónmi je to, že energia stavov s daným kvantovým číslom n závisí aj od kvantového čísla ℓ. Dá sa to vysvetliť tým, že elektrón s nenulovým momentom hybnosti má vlnovú funkciu pretiahnutejšiu v niektorom smere (pozri obrázok 8.2), preto sa zdržiava častejšie vo väčších vzdialenostiach od jadra ako elektrón s nulovým momentom hybnosti. Elektrón v stave s vyšším ℓ vyššiu energiu ako v stave s nižším ℓ. Rozdiel týchto energií je taký veľký, že v atóme je energeticky výhodnejšie prednostne zaplniť elektrónmi symetrickejšie stavy *s* a *p* s vyššou hodnotou kvantového čísla n, ako priestorovo nesymetrické stavy *d* a *f* s nižším kvantovým číslom n.

Energetické hladiny sa v atómoch obsadzujú v poradí podľa obrázku 9.4. Obsadenosť jednotlivých podhladín a poradie, v akom sa obsadzujú, umožňujú vysvetliť chemické vlastnosti prvkov a štruktúru periodickej sústavy prvkov (tabuľka 9.2).

Prvky v periodickej tabuľke sú zoradené do ôsmich stĺpcov podľa toho, koľko elektrónov majú na najvyšších hladinách *s* a *p*. Umiestnenie v riadkoch určuje kvantové číslo n. V prvom riadku tabuľky sú len vodík a hélium, pretože najnižšia energetická hladina $n = 1$ má len *s* stavy s $\ell = 0$. V druhom riadku je lítium $_3$Li prvým prvkom, ktorý obsadzuje elektrónmi hladinu $n = 2$. Prvky od bóru $_5$B po neón $_{10}$Ne obsadzujú postupne osem stavov *p*. Podobne je to v treťom riadku.

V štvrtom riadku sa po obsadení hladiny 4s začne obsadzovať hladina 3*d* (prvky $_{21}$Sc až $_{30}$Zn). Takýchto prvkov je desať. Podobne v piatom riadku sa obsadí najprv hladina 4*d* s desiatimi prvkami, až potom sa napĺňa hladina 5*p*.

V šiestom riadku sa pred skupinu prvkov obsadzujúcich hladinu 5*d* vsunú najprv lantanoidy, čo sú prvky, ktoré obsadzujú hladiny 4*f*. Podobne v siedmom riadku sa aktinoidmi prednostne obsadí hladina 5*f* pred hladinou 6*d*.

Prvky ležiace v jednotlivých stĺpcoch majú podobné chemické vlastnosti. Ukážeme len

Tab. 9.2. Periodická tabuľka prvkov. Prvky v prvých dvoch stĺpcoch obsadzujú stavy *s*, prvky v posledných šiestich obsadzujú stavy *p* (výnimkou je len hélium v prvom riadku, ktoré má len dva elektróny v stave s). Medzi skupinami II a III ležia prvky, ktoré po obsadení *s* stavov postupne obsadzujú stavy *d*. Tieto pravidlá majú výnimky. Napríklad meď, striebro a zlato obsadia všetkých desať $3d$ stavov a na najvyššej hladine s majú len jeden elektrón. Za lantánom $_{57}$La nasleduje 14 prvkov (lantanoidy), ktoré postupne obsadzujú stavy $4f$ a za aktíniom $_{89}$Ac nasledujú prvky (aktinoidy), ktoré obsadzujú stavy $5f$ [12].

	I	II				III	IV	V	VI	VII	VIII
1	$_{1}$H										$_{2}$He
2	$_{3}$Li	$_{3}$Be				$_{5}$B	$_{6}$C	$_{7}$N	$_{8}$O	$_{9}$F	$_{10}$Ne
3	$_{11}$Na	$_{12}$Mg				$_{13}$Al	$_{14}$Si	$_{15}$P	$_{16}$S	$_{17}$Cl	$_{18}$Ar
4	$_{19}$K	$_{20}$Ca	$_{21}$Sc		22−30	$_{31}$Ga	$_{32}$Ge	$_{33}$As	$_{34}$Se	$_{35}$Br	$_{36}$Kr
5	$_{37}$Rb	$_{38}$Sr	$_{39}$Y		40−48	$_{49}$In	$_{50}$Sn	$_{51}$Sb	$_{52}$Te	$_{53}$I	$_{54}$Xe
6	$_{55}$Cs	$_{56}$Ba	$_{57}$La	58−71	72−80	$_{81}$Tl	$_{82}$Pb	$_{83}$Bi	$_{84}$Po	$_{85}$At	$_{86}$Rn
7	$_{87}$Fr	$_{88}$Ra	$_{89}$Ac	90−103							

Prvky obsadzujúce *d* stavy

3d	$_{21}$Sc	$_{22}$Ti	$_{23}$V	$_{24}$Cr	$_{25}$Mn	$_{26}$Fe	$_{27}$Co	$_{28}$Ni	$_{29}$Cu	$_{30}$Zn
4d	$_{39}$Y	$_{40}$Zr	$_{41}$Nb	$_{42}$Mo	$_{43}$Te	$_{44}$Ru	$_{45}$Rh	$_{46}$Pd	$_{47}$Ag	$_{48}$Cd
5d	$_{57}$La	$_{72}$Hf	$_{73}$Ta	$_{74}$W	$_{75}$Re	$_{76}$Os	$_{77}$Ir	$_{78}$Pt	$_{79}$Au	$_{80}$Hg

Lantanoidy: 14 prvkov za lantánom obsadzujú stavy $4f$

$_{58}$Ce	$_{59}$Pr	$_{60}$Nd	$_{61}$Pm	$_{62}$Sm	$_{63}$Eu	$_{64}$Gd	$_{65}$Tb	$_{66}$Dy	$_{67}$Ho	$_{68}$Er	$_{69}$Tm	$_{70}$Yb	$_{71}$Lu

Aktinoidy: prvky za aktíniom obsadzujú stavy $5f$

$_{90}$Th	$_{91}$Pa	$_{92}$U	$_{93}$Np	$_{94}$Pu	$_{95}$Am	$_{96}$Cm	$_{97}$Bk	$_{98}$Cf	$_{99}$Es	$_{100}$Fm	$_{101}$Md	$_{102}$No	$_{103}$Lw

niektoré z nich, ostatné nájdeme v učebniciach chémie alebo kvantovej fyziky.

Inertné plyny

Prvky v poslednom stĺpci sú inertné plyny. Všetky ich hladiny sú úplne obsadené. Vďaka tomu sa navonok javia ako vysoko symetrické a nevytvárajú okolo seba žiadny elektrostatický potenciál. Elektróny sú veľmi silne viazané k atómom. Ionizačné energie sú také vysoké, že tieto prvky len veľmi ťažko vstupujú do chemických reakcií. V prírode sa vyskytujú ako čisté prvky. Pri atmosferickom tlaku a izbovej teplote sú všetky plynmi. Vo fyzike sa najčastejšie stretneme s héliom, ktoré sa používa ako médium vo fyzike nízkych teplôt.

Alkalické kovy

Elektrónová štruktúra prvkov v prvom stĺpci sa od štruktúry inertných plynov líši len jediným dodatočným elektrónom na vyššej hladine s. Tento elektrón je k atómu viazaný tak slabo (ionizačné energie sú len niekoľko elektrónvoltov), že atómy ich ľahko strácajú. Atómy s jedným s elektrónom preto aktívne vstupujú do chemických reakcií. Už z názvu – alkalické kovy – plynie, že ide o kovy. V prírode sa nikdy nevyskytujú v čistom stave, len v chemických zlúčeninách.

Halogény

Atómové číslo o jednotku menšie ako inertné plyny majú halogény, ktorým chýba na najvyššej hladine jeden elektrón. Tieto atómy radi jeden elektrón priberú, čím si skompletizujú svoje hladiny. Tvoria zlúčeniny s alkalickými kovmi a s vodíkom. Typický príklad takejto zlúčeniny je kuchynská soľ:

$$_{11}\mathrm{Na} + {}_{17}\mathrm{Cl} \rightarrow \mathrm{NaCl}$$

Sodík odovzdal svoj prebytočný elektrón chlóru, čím si oba atómy skompletizovali svoje energetické hladiny. Zostali však elektricky nabité a sú k sebe priťahované elektrostatickou silou. Vytvoria iónovú väzbu.

Lantanoidy (vzácne zeminy)

Prvky, ktoré obsadia hladinu 6s, začínajú zapĺňať hladinu 4f. Nazývajú sa lantanoidy. Pretože 4f elektróny neovplyvňujú chemické reakcie, sú si všetky tieto prvky chemicky veľmi podobné.

Aktinoidy (vzácne zeminy)

Po zaplnení hladiny 7s sa začínajú plniť hladiny 5*f*. Prvky, ktoré sa líšia len počtom elektrónov na tejto hladine, sú aktinoidy. Podobne ako lantanoidy majú všetky podobné chemické vlastnosti.

Uhlík $_6$C

Uhlík je základnou zložkou organických zlúčenín. Má obsadené hladiny $1s$, $2s$ a ďalšie dva elektróny na hladine $2p$. Hladiny $2s$ a $2p$ hybridizujú, vďaka čomu uhlík môže do chemických reakcií zapojiť všetky štyri elektróny na hladine $n = 2$ a môže v zlúčeninách vytvárať štyri väzby so susednými atómami (pozri napríklad molekulu benzénu na obrázku 6.4).

9.3.1 Magnetizmus

Pri obsadzovaní elektrónových hladín sa na danú hladinu môžu dostať vždy dva elektróny, ktoré majú opačnú orientáciu spinu. Intuitívne preto očakávame, že v mnohoelektrónových atómoch bude celkový spin elektrónov nulový (ak je počet elektrónov párny). Toto pravidlo má ale výnimky. V atóme železa $_{26}$Fe sú obsadené hladiny $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $4s$. Na hladine $3d$ sa nachádza posledných 6 elektrónov. Energeticky najvýhodnejšia sa ukázala byť konfigurácia, keď

päť z týchto elektrónov má tú istú orientáciu spinu, a líšia sa kvantovým číslom m. Pretože so spinom je spojený aj magnetický moment, správa sa atóm železa ako malý magnetický dipól.

Magnetický moment atómov železa je zodpovedný za makroskopické magnetické prejavy železa – feromagnetizmus. V kryštalickej mriežke železa susedné magnetické momenty navzájom interagujú. Pri vysokých teplotách je táto interakcia slabšia ako typická energia k_BT, preto je orientácia magnetických momentov viac-menej náhodná. S poklesom teploty však vzájomná interakcia medzi magnetickými momentami núti susedné atómy zorientovať svoje magnetické momenty rovnakým smerom. S klesajúcou teplotou preto v železe vznikajú oblasti rovnako orientovaných magnetických momentov. Keď teplota klesne pod kritickú (Curieho) teplotu, vytvoria súhlasne orientované magnetické momenty jednotlivých atómov magnet. Opätovným zahriatím vzorky nad kritickú teplotu sa orientácia magnetických momentov naruší a železo sa vráti do nemagnetického stavu. Prechod do feromagnetického stavu je fázovým prechodom druhého druhu. Interakciou jednotlivých magnetických momentov sa zaoberá štatistická fyzika. Pre nás je dôležité len poznanie, že magnetické vlastnosti železa sú dané elektrónovou štruktúrou jeho atómov. Podobné magnetické vlastnosti majú aj susedné prvky – kobalt $_{27}$Co a nikel $_{28}$Ni.

9.4 Spektrá atómov

Interakciou atómov s okolím môžu elektróny prechádzať na vyššie energetické hladiny. Takto excitované atómy sa zbavujú energie vyžiarením jedného fotónu spätným prechodom elektrónu na pôvodnú energetickú hladinu.[1] Z pozorovania odchádzajúcich fotónov môžeme analyzovať energetickú štruktúru atómového spektra. Najjednoduchším spektrom je spektrum atómu vodíka, ktorým sme sa zaoberali v časti 1.7.3.

Najhlbšia energetická hladina v atóme vodíka je $E_1 = -13{,}6$ eV. Preto sa celé spektrum vodíka nachádza vo frekvenčnej oblasti s energiou menšou, ako 13,6 eV. V zložitejších atómoch sú najvyššie energetické hladiny tiež rádovo elektrónvolty, a preto patria do optickej časti spektra. Hlbšie hladiny však zasahujú až do oblasti keV, pretože sú úmerné druhej mocnine počtu protónov v jadre Z.

$$E_n(Z) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \frac{1}{4n^2} = \frac{Z^2}{n^2}E_1(Z=1) \tag{9.18}$$

Aj keď pre vyššie hladiny nie je tento vzťah presný (pozri diskusiu vyššie), pre najnižšiu hladinu $n = 1$ ho môžeme použiť, pretože najnižší elektrón nie je inými elektrónmi odtienený od jadra. S rastúcim Z preto najhlbšia energetická hladina rýchlo rastie.

9.4.1 Výberové pravidlá

V prípade viacelektrónových atómov má elektrón obmedzené možnosti vyžiariť fotón, pretože mnohé z nižších energetických hladín sú obsadené inými elektrónmi. Okrem toho sú prechody medzi hladinami obmedzené aj výberovými pravidlami. Najdôležitejšie z výberových pravidiel

[1] Pre úplnosť dodajme, že elektrón sa môže vrátiť na pôvodnú hladinu aj postupnými prechodmi cez viacero viazaných stavov. V takom procese bude každý prechod z vyššej hladiny na nižšiu sprevádzaný vyžiarením jedného fotónu.

súvisí s tým, že absorbovaný alebo emitovaný fotón má spin so spinovým vlastným číslom $s = 1$. Pretože celkový moment hybnosti v sústave atóm + fotón sa musí zachovať, musí elektrón v procese absorpcie alebo emisie fotónu zmeniť svoj moment hybnosti. Nemôže preto pri emisii fotónu prejsť na hladinu s tým istým kvantovým číslom ℓ. Podrobnejšia analýza [1] ukáže, že vyžiarenie alebo absorpcia jedného fotónu je spojená s takou zmenou kvantového stavu elektrónu, že jeho kvantové čísla ℓ a m sa musia zmeniť o hodnoty [1]

$$\Delta\ell = \pm 1 \quad \text{a} \quad \Delta m = 0, \pm 1 \tag{9.19}$$

9.4.2 RTG spektrum atómov

V časti 1.4 sme opísali generovanie RTG žiarenia elektrónmi dopadajúcimi na elektródu. Dopadajúci elektrón môže pri zrážke s atómom vytrhnúť z jeho elektrónového obalu elektrón. Následne niektorý elektrón z vyšších energetických hladín prejde na uvoľnenú hladinu a vyžiari rozdiel energie vo forme fotónu. Takéto prechody vidíme na obrázku 1.12. Pre prechody z hladiny $n = 2$ na hladinu $n = 1$ získal Moseley experimentálne vzťah medzi frekvenciou vyžarovaných fotónov a atómovým číslom

$$\nu = \frac{3}{4} cR(Z-1)^2 \tag{9.20}$$

(R je Rydbergova konštanta $R = me^4/(8\epsilon_0^2 ch^3) = 1{,}097 \times 10^7$ m^{-1}, pozri tabuľku 1.2). Moseleyov vzťah umožnil experimentálne určiť atómové čísla prvkov z ich RTG spektier (v roku 1913). Prechody určené vzťahom (9.20) vytvárajú v RTG spektre výrazné ostré maximá, ukázané na obrázku 1.9.

Moseleyov vzťah (9.20) odvodíme priamo z tvaru energetického spektra atómov. Ak z neho vyjadríme vlnovú dĺžku,

$$\frac{1}{\lambda} = (Z-1)^2 R \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right] \tag{9.21}$$

a porovnáme ho s rovnicou (1.54), vidíme, že emitované fotóny súvisia s prechodom elektrónov z hladiny $n = 2$ na hladinu $n = 1$. Jediný rozdiel medzi atómom vodíka a atómom s nábojom Ze je vo faktore $(Z-1)^2$. Ten pochádza z toho, že pred prechodom sa na hladine $n = 1$ už nachádza jeden elektrón, ktorý efektívne tieni náboj jadra, Ze, svojím nábojom $-e$. Prechádzajúci elektrón teda vidí náboj jadra $(Z-1)e$.[2]

9.5 Príklady

9.1. Nájdite strednú hodnotu vzdialenosti od jadra vodíka pre elektrón v základnom stave.
Riešenie: Musíme vypočítať integrál

$$\int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r [R_1(r)]^2 r = \frac{3}{2} a_0 \tag{9.22}$$

Stredná hodnota vzdialenosti sa teda nerovná najpravdepodobnejšej hodnote a_0.

[2] Pre veľké hodnoty Z môžeme tienenie zanedbať, $Z - 1 \approx Z$ [6].

9.2. Vypočítajte pravdepodobnosť, s akou sa elektrón v základnom stave vodíka nachádza vo vzdialenosti väčšej ako ka_0 ($k = 1$, $k = 2$, $k = 5$) od stredu atómu.
Riešenie: Pravdepodobnosť je daná vzťahom

$$\Pi_k = \int_{ka_0}^{\infty} r^2 \mathrm{d}r P(r) = \frac{4}{a_0^3} \int_{ka_0}^{\infty} r^2 \mathrm{d}r e^{-2r/a_0} \tag{9.23}$$

Po substitúcii $u = 2r/a_0$ a integrovaní per partes dostaneme

$$\Pi_k = e^{-2k} \left[2k^2 + 2k + 1\right] \tag{9.24}$$

Funkcia Π_k je zobrazená na obrázku 9.5. Napríklad $\Pi_1 = 0{,}6766$, $\Pi_2 = 0{,}238$, $\Pi_5 = 0{,}00277$. Elektrón sa teda so 68-percentnou pravdepodobnosťou nachádza vo vzdialenosti $r > a_0$ od jadra.

9.3. S akou pravdepodobnosťou sa elektrón v základnom stave vodíka nachádza vo vzdialenosti od jadra menšej ako $a_0/3$? [$1 - \Pi_{1/3} = 0{,}03$]

9.4. Akú energiu by mal základný stav atómu hélia, keby dva elektróny v atóme vzájomne neinteragovali?
Riešenie: Keby sme zanedbali vzájomnú interakciu elektrónov v atóme hélia, vynechali by sme v rovnici (9.13) interakčný člen

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{9.25}$$

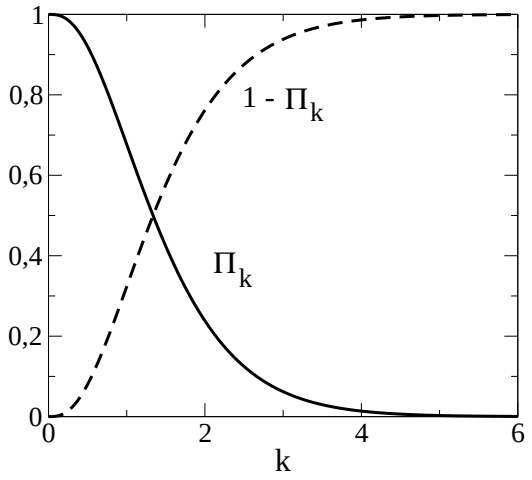
Ľahko sa presvedčíme, že vlnová funkcia by bola súčinom dvoch jednočasticových vlnových funkcií,

$$\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Phi_1(\vec{r}_1)\Phi_2(\vec{r}_2) \tag{9.26}$$

pre dva elektróny pohybujúce sa okolo jadra s atómom $+2e$. Základným stavom by bol stav s $n_1 = n_2 = 1$ s energiou

$$E_1' = -8 \text{ Ry} = -108{,}8 \text{ eV} \tag{9.27}$$

Porovnaním s energiou základného stavu atómu hélia (rovnica 9.14) $E_1 = -79$ eV vidíme, že interakcia elektrónov naozaj významne ovplyvňuje energiu základného stavu atómu hélia.



Obr. 9.5. Pravdepodobnosť Π_k výskytu elektrónu v základnom stave vodíka vo vzdialenosti väčšej ako ka_0 (rovnica 9.24). Prerušovaná čiara je funkcia $1 - \Pi_k$, ktorá udáva pravdepodobnosť, že elektrón sa nachádza vo vzdialenosti menšej ako ka_0.

9.5. Predpokladajme, že dva elektróny v atóme hélia neinteragujú. Aká je orientácia ich spinov v základnom stave? Akú energiu by sme museli dodať atómu hélia, aby jeden z elektrónov mohol zmeniť orientáciu svojho spinu?
Riešenie: V základnom stave musia mať elektróny opačne orientované spiny. To vidíme z toho, že priestorová vlnová funkcia, daná rovnicou (9.26), je súčinom jednočasticových vlnových funkcií a je preto určite symetrická vzhľadom na zámenu oboch elektrónov. Spinová vlnová funkcia preto musí byť antisymetrická, z čoho vyplýva, že elektróny musia mať opačné spiny.
Ak by sme jednému elektrónu zmenili orientáciu spinu, mali by oba elektróny rovnako orientované spiny a preto by spinová funkcia bola symetrická. Najjednoduchšia antisymetrická priestorová funkcia je

$$\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_{n=1}(\vec{r}_1)\Phi_{n=2}(\vec{r}_2) - \Phi_{n=2}(\vec{r}_1)\Phi_{n=1}(\vec{r}_2)\right] \tag{9.28}$$

Energia atómu v tomto stave je

$$E_2' = E_1 + E_2 = -68\ \text{eV} \tag{9.29}$$

Na otočenie jedného spinu je preto potrebná energia

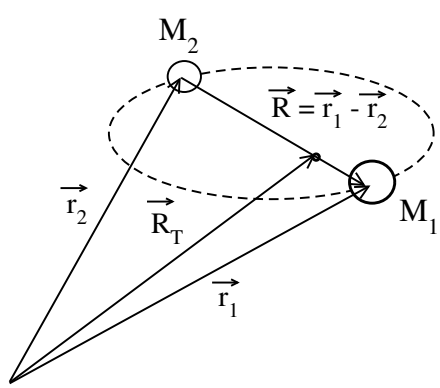
$$E_2' - E_1' = 3\ \text{Ry} = +40{,}8\ \text{eV} \tag{9.30}$$

9.6. Aké atómové čísla by mali inertné plyny, keby elektrón nemal spin?

9.7. Prečo nie je povolený prechod elektrónu zo stavu 2s do stavu 1s?

9.8. Pri výpočte energií viazaných stavov v atóme vodíka sme predpokladali, že jadro sa nehýbe a elektrón obieha okolo neho. Táto predstava nie je presná, pretože nepohyblivé musí byť ťažisko sústavy elektrón + protón, nie protón. Obe častice – protón aj elektrón – preto obiehajú okolo svojho ťažiska. Nájdite chybu v hodnote energie základného stavu spôsobenú týmto zanedbaním.
Riešenie: Pri uvážení pohybu jadra musíme riešiť Schrödingerovu rovnicu

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2M_2}\Delta_{r_2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right\}\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{9.31}$$



Obr. 9.6. Dve telesá obiehajúce okolo spoločného ťažiska. Vektor $\vec{R}_T$ je polohový vektor ťažiska.

kde indexy 1 a 2 sa vzťahujú na elektrón a protón. Po substitúcii (obrázok 9.6)

$$\vec{R}_T = \frac{M_1\vec{r}_1 + M_2\vec{r}_2}{M_1 + M_2}, \qquad \vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \tag{9.32}$$

dostaneme rovnicu len v premennej $\vec{R}$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}}\Delta_R - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{R}\right\}\Phi(\vec{R}) = E\Phi(\vec{R}) \tag{9.33}$$

kde

$$\mathcal{M} = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \tag{9.34}$$

je redukovaná hmotnosť. Rovnica (9.33) je Schrödingerova rovnica pre časticu s hmotnosťou $\mathcal{M}$ a nábojom $-e$ obiehajúcu v poli náboja e. Vlastné energie sú preto dané vzťahom (8.68), kde namiesto hmotnosti m dosadíme efektívnu hmotnosť $\mathcal{M}$:

$$E_n = -\frac{2\mathcal{M}}{\hbar^2}\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 \frac{1}{4n^2} \tag{9.35}$$

Pretože $M_2 = 1836 m_e$, je

$$\mathcal{M} = \frac{1836}{1837}\, m_e = 0{,}99945\, m_e \tag{9.36}$$

Energetické hladiny sa preto posunú len nepatrne.

9.9. Nájdite rozdiel medzi energiou základného stavu vodíka, deutéria $^2_1$H a trícia $^3_1$H. [Návod: uvážte, že v deutériu elektrón obieha okolo jadra s hmotnosťou $2m_p$ a v tríciu okolo jadra s hmotnosťou $3m_p$].

9.10. Pozitrón e^+ zachytí elektrón a spolu vytvoria viazaný stav – pozitrónium. Ako vyzerá energetické spektrum tejto sústavy?
Riešenie: Pretože hmotnosti elektrónu a pozitrónu sú rovnaké, je efektívna hmotnosť $\mathcal{M} = m_e/2$. Vlastné energie preto budú mať polovičnú hodnotu a energia základného stavu bude

$$E_1^{\mathrm{ep}} = -6{,}8 \text{ eV} \tag{9.37}$$

9.11. Nájdite energetické spektrum mezoatómu, v ktorom okolo protónu neobieha elektrón, ale π^- mezón s hmotnosťou m_π $273\times$ väčšou ako hmotnosť elektrónu.
Riešenie: Vlastné energie budú opäť dané vzťahom (9.35), ale s redukovanou hmotnosťou

$$\mathcal{M} = \frac{m_p m_\pi}{m_p + m_\pi} = \frac{1863 \times 273}{1836 + 273} m_e = 237{,}66\, m_e \tag{9.38}$$

Energia základného stavu teda bude

$$E_1 = 3{,}23 \text{ keV} \tag{9.39}$$

Tab. 9.3. Vlnová dĺžka a energia RTG žiarenia pochádzajúceho z prechodov medzi stavmi $n = 2$ a $n = 1$ v hliníku, železe a medi.

Prvok	Z	λ [10^{-10} m]	E [keV]
Al	13	8,44	1,47
Fe	26	1,94	6,38
Cu	29	1,44	8,00

9.12. Odhadnite vlnové dĺžky a energiu RTG žiarenia excitovaného prechodom elektrónu zo stavu $n = 2$ do stavu $n = 1$ v: a) železe $_{26}$Fe, b) medi $_{29}$Cu, c) hliníku $_{13}$Al.
Riešenie: Z Moseleyovho vzťahu (9.21) dostaneme

$$\lambda = \frac{4}{3(Z-1)^2}\frac{1}{R} = \frac{1{,}215 \times 10^{-7}}{(Z-1)^2}\ [m] \tag{9.40}$$

a energia

$$E = \frac{3}{4}\frac{cR}{h}(Z-1)^2 = 10{,}21\ (Z-1)^2\ \text{eV} \tag{9.41}$$

Výsledky sú ukázané v tabuľke 9.3.

KAPITOLA 10

Mechanické kmity atómov a molekúl

V kapitole 6 sme videli, že dva atómy môžu vytvoriť spoločný viazaný stav – molekulu. Na príklade molekuly H_2^+ sme ukázali, ako energia molekuly závisí od vzájomnej vzdialenosti r jadier dvoch atómov (obrázok 6.2). Našli sme takú vzdialenosť R, pre ktorú má celková energia minimum.

Opis molekúl je však zložitejší, pretože nielen elektrón, ale aj samotné jadrá molekúl sa môžu pohybovať. V prípade dvojatómovej molekuly môže ísť alebo o vibračný pohyb, pri ktorom sa polohy dvoch jadier harmonicky menia pozdĺž spoločnej spojnice, alebo o rotačný pohyb, pri ktorom jadrá obiehajú okolo svojho stredu.

V tejto kapitole stručne opíšeme rotačné a vibračné spektrá molekúl. Zo znalosti kvantovania vlastných hodnôt momentu hybnosti nájdeme vlastné frekvencie rotačného spektra. Podobne, kvantované energie harmonického oscilátora určujú vibračné spektrum molekúl.

V ďalšej časti sa budeme zaoberať kmitmi kryštalickej mriežky. Experimentálne merania merného tepla kryštálov ukázali, že klasická predstava o mechanických kmitoch mriežky musí byť zovšeobecnená podobne, ako sme v časti 1.2 zovšeobecnili klasickú predstavu o elektromagnetickom žiarení v dutine. Ukážeme podobnosť medzi vibračnými módmi mriežky a frekvenčnými módmi elektromagnetického žiarenia v dutine. Na jej základe zadefinujeme kvázičastice – fonóny – ktoré v kryštalickej mriežke prenášajú energiu vibrácií. Naopak, podobnosť medzi vibračnými a elektromagnetickými módmi nás privedie k predstave o vákuu ako stave elektromagnetického poľa s najnižšou možnou – ale nenulovou – energiou.

10.1 Rotácie dvojatómových molekúl

Uvažujme molekulu zloženú z dvoch atómov s hmotnosťami M_1 a M_2. Pri rotácii dvojatómovej molekuly sa oba atómy pohybujú okolo spoločného ťažiska (obrázok 9.6). Kinetická energia

rotácie molekuly je daná momentom hybnosti L a momentom zotrvačnosti I,

$$E_{\mathrm{rot}} = \frac{L^2}{2I} \tag{10.1}$$

Moment zotrvačnosti dvojatómovej sústavy nájdeme zo vzťahu[1]

$$I = \mathcal{M}R^2 \tag{10.3}$$

kde $\mathcal{M} = M_1M_2/(M_1 + M_2)$ je redukovaná hmotnosť (pozri príklad 9.8 a rovnicu 9.34) a R je vzájomná vzdialenosť atómov.

V kvantovej mechanike musí byť moment hybnosti molekuly kvantovaný,

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \tag{10.4}$$

preto je aj kinetická energia rotácií kvantovaná a môže nadobúdať len hodnoty

$$E_{\mathrm{rot}\ell} = \frac{\hbar^2}{2I}\ell(\ell+1) \tag{10.5}$$

Vyjadrime rovnovážnu vzdialenosť molekúl v násobkoch Bohrovho polomeru a_0,

$$R = \xi a_0 \tag{10.6}$$

a redukovanú hmotnosť vyjadrime pomocou hmotnosti m_p protónu a atómových čísel A_1 a A_2 atómov, ktoré tvoria molekulu: $M_1 = A_1m_p$, $M_2 = A_2m_p$:

$$\mathcal{M} \approx \frac{A_1A_2}{A_1 + A_2}m_p \tag{10.7}$$

Potom môžeme energiu vibrácií vyjadriť jednoduchým vzťahom

$$E_{\mathrm{rot}\ell} \approx \frac{\hbar^2}{2m_pa_0^2} \times \frac{1}{\xi^2}\frac{A_1 + A_2}{A_1A_2}\ell(\ell+1) = E_0\ell(\ell+1) \tag{10.8}$$

Po dosadení za základné fyzikálne konštanty dostaneme typickú energiu E_0 pre danú molekulu,

$$E_0 \approx 7{,}4 \times 10^{-3}\frac{1}{\xi^2}\frac{A_1 + A_2}{A_1A_2}\ [\mathrm{eV}] \tag{10.9}$$

Typické hodnoty energie E_0 pre štyri molekuly sú uvedené v tabuľke 10.1. Ak uvážime, že $\xi = R/a_0 > 1$, nájdeme, že typická kinetická energia rotácie molekuly je podstatne menšia ako energia $E_{\mathrm{EZ}} = k_BT/2 = 0{,}0129$ eV (tabuľka 1.5). Preto sa pri izbových teplotách rotačné stavy takmer vždy excitujú.

[1] Moment zotrvačnosti vzhľadom na ťažisko (10.3) nájdeme z definície (pozri obrázok 9.6) $I = M_1|\vec{r}_1 - \vec{R}_T|^2 + M_2|\vec{r}_2 - \vec{R}_T|^2$, kde $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{R}$ a $\vec{R}_T = [M_1\vec{r}_1 + M_2\vec{r}_2]/(M_1 + M_2) = 0$ (rovnica ťažiska). Dostaneme

$$\vec{r}_1 - \vec{R}_T = \frac{M_2}{M_1 + M_2}\vec{R}, \quad \vec{r}_2 - \vec{R}_T = \frac{M_1}{M_1 + M_2}\vec{R} \tag{10.2}$$

a po dosadení $I = \frac{M_1M_2}{M_1+M_2}R^2$.

Tab. 10.1. Typická vzdialenosť dvoch atómov v molekule (v násobkoch Bohrovho polomeru a_0) [6], energia E_0, jej zodpovedajúca frekvencia a pomer E_0 k energii $E_{\mathrm{EZ}} = k_B T/2 = 0{,}0129$ eV pri teplote 300 K pre niektoré dvojatómové molekuly.

molekula	ξ	E_0 [eV]	$\nu = E_0/\hbar$ [THz]	E_0/E_{EZ}
^{16}O^{1}H	1,83	$2{,}3 \times 10^{-3}$	0,566	0,178
^{38}K^{70}Br	5,547	$9{,}76 \times 10^{-6}$	0,00235	0,00052
^{12}C^{16}O	2,13	$2{,}37 \times 10^{-4}$	0,057	0,0184
^{14}N^{16}O	2,17	$2{,}10 \times 10^{-4}$	0,0511	0,0163

Podobne ako v atómoch môžeme nájsť frekvenčné rotačné spektrum molekuly zodpovedajúce prechodom medzi jednotlivými vibračnými hladinami. Rozdiel dvoch energetických hladín je

$$\Delta E_{\ell_1 \ell_2} = \frac{1}{\hbar}\left[E_{\mathrm{rot}\ell_1} - E_{\mathrm{rot}\ell_2}\right] \tag{10.10}$$

Frekvencia vyžiareného alebo absorbovaného fotónu je

$$\nu = \frac{1}{\hbar}\left[E_{\mathrm{rot}\ell_1} - E_{\mathrm{rot}\ell_2}\right] = \frac{E_0}{\hbar}(\ell_1 + \ell_2 + 1)(\ell_1 - \ell_2) \tag{10.11}$$

Typické frekvencie rotačného spektra zodpovedajú rozdielom rotačných energií a spadajú do infračervenej oblasti pre molekuly z ľahkých atómov a do oblasti GHz pre ťažšie atómy. Z rovnice (10.5) vidíme, že frekvencie sú nepriamo úmerné hmotnosti atómov:

$$\nu \sim \frac{1}{M} \tag{10.12}$$

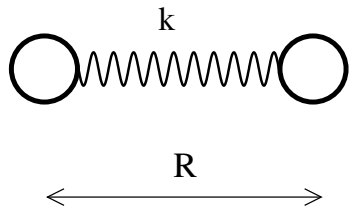
10.2 Vibrácie dvojatómových molekúl

Pri výpočte elektrónovej štruktúry molekúl obyčajne zanedbávame vzájomný pohyb atómových jadier. Tento predpoklad je ospravedlnený veľkou hmotnosťou jadier v porovnaní s hmotnosťou elektrónov. V tejto časti odhadneme energiu vibrácií dvojatómovej molekuly. Ako sme videli v časti 6.2, celková energia $E(r)$ molekuly je súčtom elektrostatickej energie dvoch jadier E_{J} a energie elektrónov E_e:

$$E(r) = E_{\mathrm{J}}(r) + E_e(r) \tag{10.13}$$

a závisí od vzájomnej vzdialenosti r atómových jadier. V rovnovážnej polohe je vzdialenosť dvoch jadier R a celková energia nadobúda minimálnu hodnotu

$$E_{\min} = E(R) \tag{10.14}$$



Obr. 10.1. Schematický náčrt kmitajúcej dvojatómovej molekuly.

Ak sa vzdialenosť jadier zmení, energia molekuly narastie (pozri obrázok 6.3) a na jadrá bude pôsobiť sila, ktorá ich bude vracať späť do rovnovážnej polohy.

Predpokladajme teraz, že sa vzdialenosť jadier zmenila o malú hodnotu δr. Rozviňme energiu $E(r)$ do Taylorovho radu okolo rovnovážnej polohy

$$E(R+\delta r) = E_{\min} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E(r)}{\partial r^2}\Big|_{r=R}(\delta r)^2 + \dots \tag{10.15}$$

a zanedbajme všetky členy úmerné vyšším mocninám δr. V tomto priblížení sa teda jadrá pohybujú v harmonickom potenciáli. Porovnaním s potenciálom harmonického oscilátora nájdeme

$$\frac{1}{2}\mathcal{M}\omega^2 = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E(r)}{\partial r^2}\Bigg|_{r=R} \tag{10.16}$$

kde $\mathcal{M}$ je redukovaná hmotnosť kmitajúcich atómov.

Odhadnime, ako sa zmenou polohy jadier zmení potenciálna energia jadier a energia elektrónov. Potenciálna energia je elektrostatická energia odpudzovania dvoch jadier, preto klesá s prvou mocninou vzdialenosti,

$$E_{\mathrm{J}} \sim \frac{1}{R} \tag{10.17}$$

Energiu elektrónov odhadneme ako energiu častice viazanej v nekonečnej jame šírky R,

$$E_e \approx \frac{\hbar^2}{2mR^2} \tag{10.18}$$

Pretože rovnovážna vzdialenosť R je malá, môžeme očakávať, že zmenou polohy jadier sa zmení predovšetkým energia elektrónov,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial r^2} \approx \frac{\partial^2 E_e}{\partial r^2} \tag{10.19}$$

Z rovnice (10.18) odhadneme

$$\frac{\partial^2 E_e}{\partial r^2}\Big|_{r=R} \approx \frac{E_e}{R^2} \tag{10.20}$$

Je teda

$$\frac{\partial^2 E(r)}{\partial^2 r}\Big|_{r=R} \approx \frac{E_e}{R^2} \tag{10.21}$$

Tab. 10.2. Typické frekvencie vibračných módov dvojatómových molekúl [6] a pomer energie $h\nu$ k energii E_{EZ} pri izbovej teplote [6].

Molekula	ν THz	$h\nu/E_{\mathrm{EZ}}$
O_2	43,74	14,07
N_2	70,74	22,75
NO	57,08	18,36
CO	65,06	20,93

Z rovnice (10.16) vyjadríme frekvenciu kmitov molekuly

$$\omega \sim \sqrt{\frac{E_e}{R^2\mathcal{M}}} \tag{10.22}$$

a po dosadení $R^2 = \hbar^2/(2mE_e)$ z rovnice (10.18) dostaneme približné vyjadrenie frekvencie kmitov jadier v tvare

$$\omega = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\mathcal{M}}}E_e \tag{10.23}$$

Energia vibrácií, $\sim \hbar\omega$, je teda $\sqrt{m/\mathcal{M}}$-krát menšia, ako energia elektrónov v molekule. Preto budú aj frekvencie vo vibračnom spektre $\sqrt{m/\mathcal{M}}$-krát menšie, ako frekvencie v elektrónovom spektre. Ak odhadneme typickú energiu $E_e \sim 1$ eV a pomer $\sqrt{m/\mathcal{M}} \sim 1/40$ dostaneme, že vibračné kmity molekuly majú energiu podstatne vyššiu ako je energia $E_{\mathrm{EZ}} \sim 0{,}0129$ eV pri teplote $T = 300$ K.

V našich úvahách sme jednotlivé energie len približne odhadli, preto sa náš výsledok môže od skutočných hodnôt niekoľkonásobne líšiť. Ako však ukazujú dáta v tabuľke 10.2, náš odhad je kvalitatívne správny. Vibračné módy v molekulách nemôžu byť pri izbovej teplote excitované, pretože potrebujú na svoju excitáciu energiu $h\nu$. Z tretieho stĺpca tabuľky 10.2 vidíme, že k tomu, aby sa vibračné módy excitovali vzájomnými zrážkami molekúl, by teplota T musela byť 14 až 20-krát vyššia ako izbová teplota, teda $T \sim 4800 - 6000$ K. Pri takých vysokých teplotách však už molekuly nie sú stabilné, ale disociujú na jednotlivé atómy. Excitácie vibračných módov sú, samozrejme, možné aj pri nižších teplotách, pretože energia E_{EZ} je stredná energia jednotlivých molekúl. Energie individuálnych molekúl fluktuujú okolo strednej energie a niektoré molekuly môžu mať kinetickú energiu podstatne vyššiu ako E_{EZ}.

Vibrácie viacatómových molekúl. Skleníkový efekt

V časti 1.2 sme sa zaoberali žiarením čierneho telesa. Na obrázku 1.6 je ukázané, že Zem vyžaruje prevažne v oblasti vlnových dĺžok $\lambda \sim 5 - 30$ μm. Pre udržanie tepelnej rovnováhy na Zemi je dôležité, aby dostatočná časť vyžiarenej energie mala možnosť uniknúť do Vesmíru. Žiarenie však môže byť absorbované molekulami prítomnými v atmosfére. Množstvo absorbovanej energie závisí od koncentrácie absorbujúcich plynov. Rozhodujúci vplyv pre absorpciu žiarenia má vodná para. V posledných rokoch ale silnejú indície, že v atmosfére narastá koncentrácia iných

molekúl, ktorá má za následok zvýšenie teploty atmosféry. Tento efekt je známy ako skleníkový efekt. Najefektívnejšie absorbujúcimi molekulami sú CO_2, absorbujúci na vlnových dĺžkach okolo 2,5, 4,2 a 15,4 μm, metán CH_4 (7,7 μm) a NO_2 (7,7 μm). Všetky tieto absorpčné čiary zodpovedajú prechodom medzi dvoma vibračnými módmi molekúl.

10.3 Kmity kryštalickej mriežky

V kryštalickej mriežke sú atómy periodicky usporiadané v priestore. Rovnovážna poloha je tak ako v molekule daná minimom celkovej energie kryštálu. V reálnom kryštáli atómy kmitajú okolo svojich rovnovážnych polôh. Pretože sú k sebe viazané väzobnými silami, môžeme kmity celej sústavy opísať ako kmity viazaných harmonických oscilátorov.

Odvoďme najprv klasické pohybové rovnice pre pozdĺžne (longitudinálne) kmity atómov. Na obrázku 10.2 je ukázaná schéma jednorozmerného kryštálu. Ak odchýlku n-tého atómu od rovnovážnej polohy označíme u_n, dostaneme z Newtonovej pohybovej rovnice pre n-ty atóm pohybovú rovnicu

$$M\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = -k(u_n - u_{n+1}) - k(u_n - u_{n-1}) \tag{10.24}$$

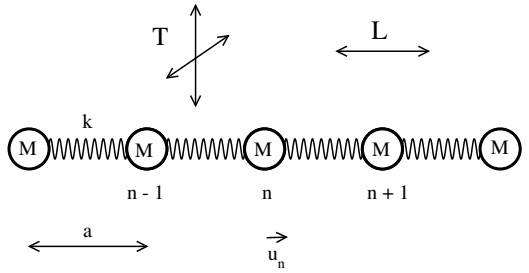
kde M je hmotnosť atómu.

Rovnicu (10.24) môžeme napísať pre ľubovoľný atóm n. Ak je v mriežke N atómov, dostaneme tak systém N lineárnych homogénnych rovníc pre N neznámych výchyliek u_n. Pretože systém rovníc je lineárny, budú kmity atómov harmonické. Z rovníc preto môžeme po substitúcii

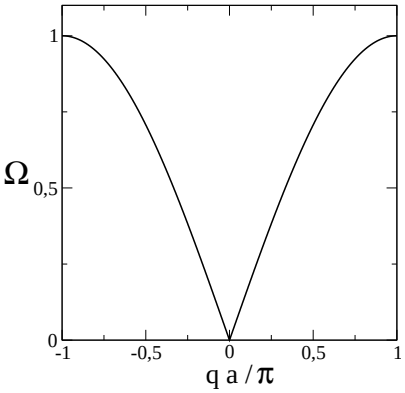
$$u_n = U_n e^{-i\omega t} \tag{10.25}$$

vylúčiť čas. Dosadením (10.25) do rovnice (10.24) dostaneme systém časovo nezávislých lineárnych rovníc

$$\left[-\omega^2 + \frac{2k}{M}\right] U_n - \frac{k}{M}U_{n-1} - \frac{k}{M}U_{n+1} = 0 \tag{10.26}$$



Obr. 10.2. Schematicky náčrt kmitov molekúl v jednorozmernej kryštalickej mriežke. Atómy môžu kmitať v troch rôznych smeroch, preto rozoznávame dva priečne (transverzálne – T) módy, kedy molekuly kmitajú kolmo na spojnicu medzi nimi, a jeden pozdĺžny (longitudinálny - L) mód. Všetky atómy majú rovnakú hmotnosť M. Rovnovážna vzdialenosť medzi atómami je a. Konštanta k určuje väzbu medzi susednými atómami (rovnica 10.24) a u_n je výchylka n-tého atómu z rovnovážnej polohy.



Obr. 10.3. Disperzný vzťah pre pozdĺžne kmity atómov v jednorozmernej kryštalickej mriežke. Frekvencia $\Omega = \omega \times \frac{1}{2}\sqrt{\frac{M}{k}}$.

Hľadajme funkciu U_n v tvare

$$U_n = Ae^{iqan} + Be^{-iqan} \tag{10.27}$$

Po dosadení do rovnice (10.26) nájdeme vzťah medzi vlnovým číslom q a frekvenciou ω

$$\omega^2 = \frac{k}{M}\left[2 - e^{+iqa} - e^{-iqa}\right] = \frac{2k}{M}\left[1 - \cos qa\right] \tag{10.28}$$

Frekvencia je teda funkciou vlnového čísla q,

$$\omega^2 = 4\frac{k}{M}\sin^2\frac{qa}{2} \tag{10.29}$$

Rovnica dáva disperzný vzťah medzi vlnovým číslom a frekvenciou pozdĺžnej vlny šíriacej sa kryštálom (obrázok 10.3).

Možné hodnoty vlnového vektora dostaneme z okrajových podmienok na hranici kryštálu. Ak predpokladáme, že kryštál je konečný, potom prvý a N-tý atóm má len jedného suseda. V príklade 10.8 odvodíme, že povolené hodnoty q sú

$$q_n = \frac{\pi}{a}\frac{n}{N+1}, \qquad n = 1,2,\ldots,N \tag{10.30}$$

Výchylka atómov potom vytvára stojatú vlnu, ukázanú aj na obrázku 3.1. Pre nekonečný kryštál ($N \to \infty$) je spektrum q spojité.

V kryštáli sa teda môžu šíriť vibračné vlny, ktorých frekvencia je daná vzťahom (10.29).

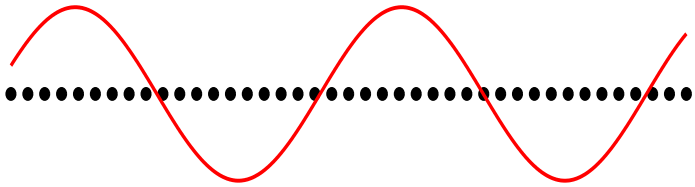
10.3.1 Vplyv kryštalickej štruktúry na disperzný vzťah

Pre malé hodnoty

$$qa \ll 1 \tag{10.31}$$

môžeme disperzný vzťah (10.28)

$$\omega = 2\sqrt{\frac{k}{M}}\sin\frac{qa}{2} \tag{10.32}$$



Obr. 10.4. Ak je vlnová dĺžka $\lambda \gg a$, potom vlna len slabo ovplyvnená detailami mriežky a jej disperzný vzťah je lineárny (rovnica 10.33).

rozvinúť do Taylorovho radu, $\sin x \approx x$ a dostaneme lineárny disperzný vzťah, známy z mechaniky spojitých prostredí. Frekvencia takýchto vibračných módov je priamo úmerná vlnovému číslu q,

$$\omega \approx \sqrt{\frac{k}{M}} aq = vq \tag{10.33}$$

a rýchlosť šírenia vlny $v = \sqrt{\frac{k}{M}} a$ nezávisí od frekvencie. Podmienka (10.31) znamená, že vlnová dĺžka je oveľa väčšia, ako je medziatómová vzdialenosť:

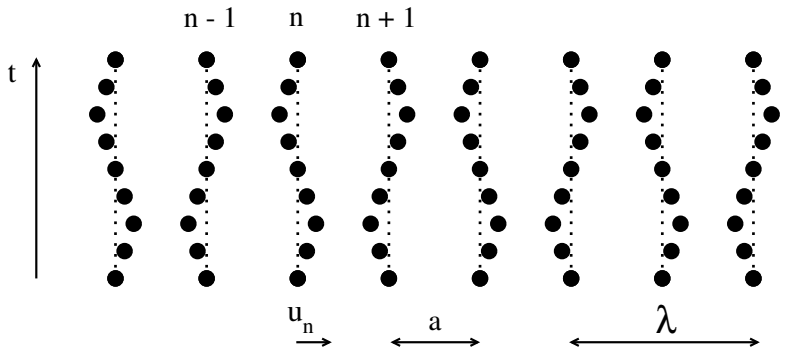
$$\lambda = \frac{2\pi}{q} \gg a \tag{10.34}$$

(obrázok 10.4). Vlna preto „nevidí" detaily mriežky a pohybuje sa v nej ako v spojitom prostredí.

Pre väčšie hodnoty vlnového vektora q vlnová dĺžka klesá. Neprekvapuje, že keď je λ porovnateľná s medziatómovou vzdialenosťou, potom bude disperzný vzťah vlny ovplyvnený periodickou štruktúrou látky, čo vidieť aj zo vzťahu (10.32), ktorý sa pre veľké hodnoty qa odlišuje od lineárneho. Rýchlosť šírenia vlny je určená grupovou rýchlosťou

$$v_g = \frac{\partial \omega(q)}{\partial q} = v \cos \frac{qa}{2} \tag{10.35}$$

ktorá klesá s rastúcou hodnotou vlnového vektora q. Pre najväčšie možné hodnoty vlnového vektora $q_{\max} = \pi/a$ je grupová rýchlosť rovná nule: $v_g = 0$. To môžeme vysvetliť, ak si



Obr. 10.5. Pozdĺžne kmity atómov s vlnovým číslom $q_{\max} = \pi/a$ a vlnovou dĺžkou $\lambda = 2a$. Body označujú polohy atómov v časoch $t_\alpha = \frac{T}{8}\alpha$ ($\alpha = 0,1,\ldots,8$) kde $T = 2\pi/\omega$ je časová perióda oscilácií. Atómy kmitajú okolo rovnovážnych polôh, ale nevytvárajú vlnu postupujúcu v priestore (sprava doľava).

uvedomíme, že pre vlnový vektor $q_{\max}$ je vlnová dĺžka rovná len dvojnásobku mriežkovej konštanty, $\lambda = 2a$. Jednotlivé atómy vtedy oscilujú oproti sebe (obrázok 10.5). Taká vlna sa nešíri priestorom, preto sa jej rýchlosť rovná nule.

Pre nás je podstatná skutočnosť, že vlny s menšou vlnovou dĺžkou ako $2a$ sa kryštálom nemôžu šíriť, pretože medziatómová vzdialenosť a definuje najkratšiu dĺžkovú škálu v systéme.

10.3.2 Merné teplo kryštálov

Mechanické kmity atómov mali dôležitú úlohu vo vývoji kvantovej mechaniky.

Pri zohrievaní kryštálov sa atómy rozkmitajú a celková energia mechanických kmitov narastie. Preto rastie aj celková energia kryštálu. Zaujímavou veličinou v termodynamike aj vo fyzike tuhých látok je merné teplo, definované ako zmena vnútornej energie pri zmene teploty,[2]

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \tag{10.36}$$

Experimentálne merania merného tepla kryštalickej mriežky rôznych kovov ukázali, že pri teplotách vyšších ako izbová teplota, $T \sim 300$ K je merné teplo prepočítané na jeden mol látky univerzálnou konštantou,

$$C_{\mathrm{mol}} = 3\, N_A k_B = 24{,}9 \text{ J/(mol K)} \tag{10.37}$$

nezávislou od teploty. Tento výsledok je známy ako Dulongov-Petitov zákon. Pre nízke teploty však experimenty ukázali inú univerzálnu závislosť merného tepla, ktoré klesá s teplotou

$$C(T) \sim T^3 \tag{10.38}$$

Takúto teplotnú závislosť klasická fyzika nevie vysvetliť.

Aby sme vysvetlili oba uvedené výsledky, potrebujeme nájsť celkovú energiu kmitajúcej kryštalickej mriežky.[3] Budeme postupovať tým istým spôsobom, ako pri výpočte energie elektromagnetického poľa v dutine v časti 1.2. Aby sme si zjednodušili výpočet, predpokladajme, že disperzný vzťah vibračných vĺn je lineárny,

$$\omega = vq \tag{10.40}$$

a rýchlosť v je rovnaká pre priečne aj pre pozdĺžne vlny. Pre také vlny sme v dodatku 3.4.1 odvodili hustotu stojatých vĺn s daným vlnovým vektorom q

$$\rho(q) = \frac{q^2}{2\pi^2} \tag{10.41}$$

[2] Uvažujeme merné teplo pri konštantnom objeme.

[3] Dulongov-Petitov zákon môžeme odvodiť aj z predstavy, že každý atóm v kryštalickej mriežke kmitá ako oscilátor v troch rôznych smeroch. Ak je stredná hodnotu energie oscilátora $k_B T$, potom energia každého atómu je $3k_B T$ a energia jedného mólu atómov bude $U_{\mathrm{mol}} = 3N_A k_B T$. Merné teplo dostaneme derivovaním podľa teploty,

$$C_{\mathrm{mol}} = \partial U_{\mathrm{mol}}/\partial T = 3N_A k_B \tag{10.39}$$

čo je vzťah (10.37).

(rovnica G.7), z ktorého odvodíme počet vĺn s frekvenciou v intervale ω,$\omega + \mathrm{d}\omega$.

$$\rho(\omega) = 3\rho(q)\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega} = \frac{3}{2\pi^2}\frac{\omega^2 \mathrm{d}\omega}{v^3} \tag{10.42}$$

(faktor 3 zohľadňuje tri vibračné módy s daným vlnovým vektorom q). Ak by sme každému vibračnému módu pripísali energiu $\frac{1}{2}k_BT$, dostaneme hustotu energie

$$u(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{3k_BT}{2\pi^2}\frac{\omega^2 \mathrm{d}\omega}{v^3} \tag{10.43}$$

a celkovú energiu

$$U(T) = \int_0^{\omega_\mathrm{D}} \mathrm{d}\omega u(\omega) \tag{10.44}$$

Až potiaľto opakujeme výpočet hustoty energie elektromagnetického poľa v dutine z časti 1.2. Rozdiel medzi oboma problémami je ale v tom, že frekvencia mechanických kmitov mriežky je zhora ohraničená (pozri obrázok 10.3), pretože mriežka má konečnú priestorovú periódu. Najvyššiu frekvenciu ω_D (Debyeovu frekvenciu) nájdeme v príklade 10.10.[4] Integrál (10.44) je teda v prípade vibračných módov mriežky konečný. Po integrovaní dostaneme

$$U(T) = \frac{k_B\omega_\mathrm{D}^3}{2\pi^2 v^3}\, T \tag{10.45}$$

Celková energia vibračných módov je teda lineárnou funkciou teploty a merné teplo od teploty nezávisí, čo súhlasí s Dulongovým-Petitovým zákonom.

Rovnicu (10.45) sme odvodili za predpokladu, že každý vibračný mód má energiu $k_BT/2$. Tento predpoklad platí len pre vysoké teploty,

$$k_BT \gg \hbar\omega_D \tag{10.46}$$

Nízkoteplotnú závislosť merného tepla, $C \sim T^3$ (rovnica 10.38) pozorovanú v experimente, odvodíme, ak si každý vibračný mód v kryštáli predstavíme ako kvantový harmonický oscilátor. Kvantový oscilátor má vlastné energie (pozri kapitolu 5)

$$E_n = \hbar\omega\left[n + \frac{1}{2}\right], \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{10.47}$$

Strednú energiu jedného vibračného módu pri teplote T preto môžeme nájsť zo vzťahu

$$\langle E(\omega)\rangle = \frac{E_0 e^{-\frac{E_0}{k_BT}} + E_1 e^{-\frac{E_1}{k_BT}} + \ldots}{e^{-\frac{E_0}{k_BT}} + e^{-\frac{E_1}{k_BT}} + \ldots} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1} \tag{10.48}$$

(pozri rovnicu 1.21 a príklady 1.2 a 10.9). Ak teda každému vibračnému módu v kryštáli priradíme namiesto energie k_BT energiu $\langle E(\omega)\rangle$ z rovnice (10.48), dostaneme celkovú energiu kmitov mriežky v tvare

$$U(T) = U_0 + \frac{3}{2}\frac{\hbar}{\pi^2 v^3}\int_0^{\omega_\mathrm{D}} \frac{\omega^3 \mathrm{d}\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1} = U_0 + \frac{3}{2\pi^2}\frac{k_B^4 T^4}{v^3\hbar^3}\int_0^{\frac{k_BT}{\hbar}} \mathrm{d}x \frac{x^3 \mathrm{d}x}{e^x - 1} \tag{10.49}$$

[4] V probléme žiarenia čierneho telesa sme žiadne ohraničenie na hodnotu frekvencie alebo vlnového vektora nezaviedli, pretože sme uvažovali spojité prostredie, v ktorom sa môžu šíriť (a aj sa šíria) vlny s ľubovoľne vysokou frekvenciou.

($x = \hbar\omega/k_BT$), kde

$$U_0 = \frac{3}{4}\frac{\hbar}{\pi^2 v^3}\int_0^{\omega_{\rm D}} \omega^3 {\rm d}\omega = \frac{3}{16\pi^2}\frac{\hbar\omega_D^4}{v^3} \tag{10.50}$$

je teplotne nezávislá časť energie. Ak nás zaujímajú nízke teploty, $k_BT \ll \hbar\omega_{\rm D}$, môžeme hornú hranicu integrálu na pravej strane rovnice (10.49) nahradiť nekonečnom. Integrál sa potom rovná $\pi^4/15$ (pozri rovnicu 1.30) a celkovú energiu vibrácií dostaneme v tvare

$$U(T) = U_0 + \frac{\pi^2}{10}\frac{k_B^4}{v^3\hbar^3}\,T^4 \qquad \text{pre nízke teploty} \quad T \ll \frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_B} \tag{10.51}$$

takže merné teplo

$$C(T) = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{2\pi^2}{5}\frac{k_B^4}{v^3\hbar^3}\,T^3 \tag{10.52}$$

naozaj závisí od teploty podľa vzťahu (10.38).

Všimnime si podobnosť vzťahu (10.51) so vzťahom (1.31) pre hustotu energie elektromagnetického poľa v dutine. Koeficienty úmernosti pri T^4 sa líšia len faktorom 3/2, ktorý súvisí s počtom nezávislých vĺn (dve pre fotóny, tri pre vibračné kmity) a zámenou rýchlosti svetla c za rýchlosť vibračných vĺn v.

10.3.3 Fonóny

Experimentálne meranie merného tepla makroskopických látok nás doviedlo k poznaniu, že mechanické kmity kryštalickej štruktúry majú kvantový charakter. Každej stojatej vlne – vibračnému módu v kryštáli – sme priradili energiu kvantového oscilátora. Einstein v r. 1905 odvodil tú istú závislosť energie od teploty, keď predpokladal, že stojaté vlny pozostávajú z konečného počtu kvánt energie

$$E_{\rm ph} = h\nu = \hbar\omega \tag{10.53}$$

tak isto, ako elektromagnetického žiarenie v dutine pozostávalo z fotónov. V kryštalickej mriežke preto môžeme definovať kvantá mechanických kmitov – fonóny – a považovať ich za samostatné častice pohybujúce sa rýchlosťou v. Každá z nich nesie kvantum energie $\hbar\omega$. Podobne ako fotóny, aj fonóny vstupujú do interakcie s elektrónmi. Môžu byť elektrónom pohltené alebo excitované.

Fonóny nie sú jedinými kvázičasticami, pohybujúcimi sa v tuhej látke. Ich štúdium prenecháme fyzike tuhých látok.

10.3.4 Kmity mriežky pri nulovej teplote

V predchádzajúcej časti sme našli, že energiu mechanických kmitov mriežky môžeme vyjadriť ako súčet energií harmonických oscilátorov s tými istými frekvenciami. Energia každého jednotlivého oscilátora je $\hbar\omega(n + 1/2)$. Z takejto predstavy plynie dôležitý záver, že energia mechanických kmitov mriežky nie je nikdy nulová. Aj keby sme aj kryštál schladili na nulovú

termodynamickú teplotu $T = 0$ (čo sa nemôže podariť), aj vtedy by každý vibračný mód mriežky mal energiu

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{10.54}$$

Mriežka by teda nezamrzla v nehybnom stave, ale naďalej by kmitala. Každý vibračný mód by bol vo svojom základnom stave s frekvenciou $\hbar\omega/2$. Tieto kmity nenájdeme z merania merného tepla kryštálov, pretože merné teplo udáva len zmenu energie mriežky súvisiacu so zvýšením teploty, nie celkovú hodnotu energie. Pri zvyšovaní teploty by energia každého módu, a teda aj mriežky, rástla o hodnoty $\hbar\omega$, čo môžeme interpretovať tak, že do systému zakaždým pribudol jeden fonón s energiou $\hbar\omega$. Pri konečnej teplote sa teda mriežkou pohybuje veľké množstvo fonónov rôznych frekvencií.

10.4 Kvantovanie elektromagnetického poľa. Vákuum

Vráťme sa teraz k našej diskusii elektromagnetického poľa v dutine. Podobnosť módov elektromagnetického poľa s vibračnými kmitmi mriežky je taká veľká, že si každý mód elektromagnetickej vlny skúsime predstaviť ako harmonický oscilátor s energiou

$$E(\nu) = h\nu\left[n + \frac{1}{2}\right] \tag{10.55}$$

kde n je počet fotónov. Prídeme k záveru, že najmenšia možná energia elektromagnetického poľa nie je nulová, ale je sumou energií $h\nu/2$ pre všetky možné frekvencie ν poľa. Takýto stav s najnižšou možnou energiou je označovaný za vákuum. Z vlastností kvantového oscilátora tak dostaneme, že vákuum nie je stav s nulovou energiou, ale stav s najnižšou možnou energiou.

Našu diskusiu, samozrejme, nemôžeme chápať ako dôkaz kvantovania elektromagnetického poľa. Ten získame až v rámci kvantovej elektrodynamiky. Naším cieľom bolo len poukázať na podobnosť medzi rôznymi fyzikálnymi sústavami – mechanickými kmitmi mriežky a elektromagnetickými vlnami – a nájsť prijateľné vysvetlenie pre nenulovú energiu vákua.

10.5 Príklady

10.1. Nájdite merné teplo pri konštantnom objeme C_v plynného hélia He.
Riešenie: Hélium je inertný plyn, preto je jeho molekula tvorená len jedným atómom. Hmotnosť jedného atómu je $4m_p = 6{,}67\times10^{-27}$ kg, preto sa v jednom kilograme plynného hélia nachádza $N = 1{,}496\times10^{26}$ atómov hélia. Pri zvýšení teploty o $\Delta T = 1$ K sa priemerná energia každého atómu zvýši o energiu

$$\Delta E = \frac{3}{2}k_B\Delta T = 2{,}07\times10^{-23}\ \text{J} \tag{10.56}$$

Merné teplo pri konštantnom objeme je $C_v = N\Delta E = 3{,}096$ kJ/kg. Táto získaná hodnota súhlasí s experimentálnou hodnotou $C_v = 3{,}12$ kJ/kg.

10.2. Vzdialenosť dvoch protónov v molekule vodíka je 0,074 nm $= 1{,}4\ a_0$ (tabuľka 1.7). Odhadnite rotačné energie molekuly vodíka H_2.
Riešenie: Po dosadení do vzťahu (10.9) $\xi = 1{,}4$ a $A_1 = A_2 = 1$ dostaneme

$$E_0 \approx 7{,}4 \times 10^{-3} \frac{1}{\xi^2} \frac{1+1}{1}\ \text{eV} = 0{,}00755\ \text{eV} \tag{10.57}$$

10.3. Merné teplo pri konštantnom objeme C_v plynného hélia He, vodíka H_2 a kyslíka O_2 je postupne 3,12, 10,16 a 0,66 kJ/kg (pri teplote $T = 293$ K a atmosferickom tlaku). Pomer hodnôt merných tepiel je teda približne $30 : 100 : 6{,}6$. Vysvetlite tento jednoduchý vzťah.
Riešenie: Merné teplo hélia sme našli v príklade 10.1. Merné teplo vodíka a kyslíka nájdeme, ak si uvedomíme, že pre hmotnosti jednotlivých molekúl platí jednoduchý vzťah

$$M_{\text{He}} : M_{\text{H}_2} : M_{\text{O}_2} = 4 : 2 : 32 \tag{10.58}$$

a molekuly H_2 a O_2 majú 5 stupňov voľnosti.

10.4. Pomocou dát v tabuľke 10.1 rozhodnite, či sa rotačné módy molekúl môžu excitovať aj pri teplote $T = 200$ K. [Porovnajte energie E_0 s typickou energiou $\frac{1}{2}k_BT$ pri teplote $T = 200$ K.]

10.5. V molekulovej fyzike sa definuje Poissonova konštanta

$$\kappa = \frac{i+2}{i} \tag{10.59}$$

kde i je počet stupňov voľnosti molekuly. Vysvetlite prečo pre dvojatómové molekuly používame $\kappa = 1{,}4$, hoci taká molekula má teoreticky 6 stupňov voľnosti.

10.6. Odhadnite, pri akej teplote bude mať Poissonova konštanta vodíkového plynu (molekuly H_2) hodnotu $\kappa = 1{,}66$.
Riešenie: Hodnota $\kappa = 1{,}66 = 5/3$ znamená, že molekula má len 3 stupne voľnosti. Preto teplota musí byť taká malá, aby rotačné stupne voľnosti nemohli byť excitované tepelnými zrážkami molekúl. V príklade 10.2 sme našli typickú energiu pre rotácie molekuly vodíka $E_0 \approx 0{,}00755$ eV $= 1{,}2 \times 10^{-21}$ J. Z rovnice

$$\frac{1}{2}k_BT < E_0 \tag{10.60}$$

dostaneme teplotu $T < 174$ K.

10.7. Pomocou dát v tabuľke 10.2 odhadnite, pri akej teplote sa budú v dvojatómových molekulách excitovať aj vibračné módy

10.8. Nájdite vlastné hodnoty vlnového čísla q pozdĺžneho vibračného módu retiazky N atómov.
Riešenie: Z rovnice (10.28) máme

$$-\omega^2 + \frac{2k}{M} = \frac{2k}{M}\cos qa \tag{10.61}$$

Po dosadení do rovnice (10.26) dostaneme jednoduchšiu rovnicu pre výchylky U_n:

$$2U_n \cos qa - U_{n-1} - U_{n+1} = 0 \tag{10.62}$$

Pretože prvý a N-tý atóm má len jedného suseda, má prvá a N-tá rovnica tvar

$$2U_1 \cos qa - U_2 = 0, \qquad 2U_N \cos qa - U_{N-1} = 0 \tag{10.63}$$

Dosaďme do týchto rovníc za U_n z rovnice (10.27):

$$\begin{array}{lclcl} U_1 & = & Ae^{iqa} & + & Be^{-iqa} \\ U_2 & = & Ae^{i2qa} & + & Be^{-i2qa} \\ U_N & = & Ae^{iNqa} & + & Be^{-iNqa} \\ U_{N-1} & = & Ae^{i(N-1)qa} & + & Be^{-i(N-1)qa} \end{array} \tag{10.64}$$

do rovníc (10.63) a dostaneme dve lineárne rovnice pre neznáme A a B

$$\begin{array}{lclcl} A & + & B & = & 0 \\ Ae^{+i(N+1)qa} & + & Be^{-i(N+1)qa} & = & 0 \end{array} \tag{10.65}$$

ktoré majú riešenie, len ak determinant sústavy je nulový, teda ak

$$\sin qa(N+1) = 0 \tag{10.66}$$

a teda

$$q = \frac{\pi}{a(N+1)}n, \qquad n = 1,2,\ldots,N \tag{10.67}$$

10.9. V kapitole 5 sme našli, že energia harmonického oscilátora s frekvenciou ω je

$$E_{\mathrm{ho}} = \hbar\omega\left[n + \frac{1}{2}\right] \tag{10.68}$$

Ukážte, že stredná energia vibračného módu pri teplote T je daná vzťahom (10.48).
Riešenie: Strednú energiu napíšeme v tvare

$$\begin{array}{lclcl} \langle E(\omega)\rangle & = & \frac{E_0 e^{-\frac{E_0}{k_B T}} + E_1 e^{-\frac{E_1}{k_B T}} + \ldots}{e^{-\frac{E_0}{k_B T}} + e^{-\frac{E_1}{k_B T}} + \ldots} & = & \frac{E_0 + E_1 e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}} + \ldots}{1 + e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}} + \ldots} \\ & = & E_0 + \frac{1 + (E_1 - E_0) e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}} + \ldots}{1 + e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}} + \ldots} & = & \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1} \end{array} \tag{10.69}$$

($E_0 = \hbar\omega/2$) kde sme využili výsledok príkladu 1.2. Ten istý výsledok sme mohli napísať aj priamo, pretože ak každú energiu zvýšime o E_0, potom je prirodzené, že stredná energia sa tiež zvýši o E_0.

Tab. 10.3. Mriežkové konštanty a (v Angstrőmoch) a Debyeova teplota T_{D} v Kelvinoch pre tri vybrané kovy.

Kov	a [10^{-10} m]	T_{D} [K]
Al	1,77	428
Cu	2,28	343
Au	2,57	170

10.10. Nájdite najvyššiu možnú frekvenciu ω_D kmitov kryštalickej mriežky (Debyeovu frekvenciu).
Riešenie: Frekvenčnú hustotu vibračných módov sme našli v časti 10.3.2 (rovnica 10.42)

$$\rho(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{3}{2}\frac{\omega^2}{\pi^2 v^3}\mathrm{d}\omega \tag{10.70}$$

Celkový počet vibračných módov v kryštáli $\mathcal{N}$ sa musí rovnať počtu mechanických stupňov voľnosti. Ak má vzorka tvar kocky so stranou ℓ, potom je v nej ℓ^3/a^3 atómov a $\mathcal{N} = 3\ell^3/a^3$. Tou istou úvahou ako v časti 3.4.2 nájdeme

$$\int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \rho(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{3}{a^3} \tag{10.71}$$

a po integrovaní

$$\omega_{\mathrm{D}} = (6\pi^2)^{1/3}\frac{v}{a} \tag{10.72}$$

Frekvenciu ω_{D} môžeme nájsť aj z porovnania dvoch výrazov pre merné teplo kryštálov pri vysokých teplotách. Z Dulongovho-Petitovho zákona poznáme mólové merné teplo $C_{\mathrm{mol}} = 3N_A k_B$ (rovnica 10.39). Pretože jeden mól atómov zaberá objem $V = N_A a^3$, je merné teplo na jednotku objemu

$$C = \frac{3k_B}{a^3} \tag{10.73}$$

Na druhej strane, z rovnice (10.45) dostaneme

$$C = \frac{k_B \omega_{\mathrm{D}}^3}{2\pi^2 v^3} \tag{10.74}$$

Porovnaním oboch vyjadrení dostaneme opäť vzťah (10.72).

10.11. S Debyeovou frekvenciou ω_{D} súvisí Debyeova teplota

$$T_{\mathrm{D}} = \frac{\hbar\omega_{\mathrm{D}}}{k_B} \tag{10.75}$$

Odhadnite jej hodnotu.
Riešenie: Debyeovu teplotu vyjadríme v tvare

$$T_{\mathrm{D}} = (6\pi^2)^{1/3}\frac{\hbar}{k_B}\frac{v}{a} = 2{,}978 \times 10^{-11}\frac{v}{a} \quad [\mathrm{K}] \tag{10.76}$$

Ak dosadíme typickú rýchlosť zvuku v kove 2000 m/s a $a \sim 2 \times 10^{-10}$ m, dostaneme typickú Debyeovu teplotu $T_{\mathrm{D}} \sim 300$ K. Tento odhad súhlasí s experimentálnymi hodnotami uvedenými v tabuľke 10.3. Súhlas s experimentom nemôže byť dokonalý, pretože sme zanedbali rozdiel v rýchlostiach pozdĺžnych a priečnych vĺn. Neuvažovali sme ani závislosť rýchlosti vĺn od frekvencie.

KAPITOLA 11

Klasická a kvantová mechanika

V predchádzajúcich kapitolách sme študovali základné vlastnosti kvantových systémov. Ukázali sme, že kvantové systémy majú špecifické vlastnosti, aké v klasickej mechanike nepozorujeme. Zostáva nám ešte vysvetliť, ako kvantová mechanika súvisí s klasickou mechanikou. Z každodennej skúsenosti vieme, že väčšina dejov okolo nás môže byť opísaná klasickou fyzikou. Kde sú hranice, za ktorými klasická fyzika prestáva platiť? Naznačíme tieto hranice v prvých dvoch častiach tejto kapitoly.

S otázkou hraníc medzi kvantovou a klasickou fyzikou súvisí aj problém, ako v kvantovej mechanike opísať proces merania. V časti 11.3 ukážeme, s akými problémami sa pri opise merania stretávame. Nakoniec, v poslednej časti ukážeme, ako teplota ovplyvňuje kvantové prejavy látky.

11.1 Planckova konštanta

Vo všetkých kvantových vzťahoch vystupuje Planckova konštanta. Dá sa preto predpokladať, že ak sú všetky veličiny v systéme dostatočne veľké na to, aby sme Planckovu konštantu mohli zanedbať, potom taký systém môžeme opísať klasicky. Uvažujme napríklad vlnovú dĺžku kvantovej častice

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{11.1}$$

Ak by sme Planckovu konštantu mohli pokladať za ľubovolne malú, potom by častice mali nekonečne malú vlnovú dĺžku a správali by sa ako klasické.

Pri konečnej hodnote Planckovej konštanty má každá častica nenulovú vlnovú dĺžku. Jej vlnové vlastnosti sa však prejavia len vtedy, ak sa pohybuje v prostredí, ktorého typická dĺžková škála je porovnateľná s vlnovou dĺžkou. Napríklad v časti 1.6 sme videli, že vlnový charakter elektrónu sa prejavil, keď dopadal na kryštalickú mriežku niklu, pretože mriežková konštanta a kryštálu niklu bola porovnateľná s vlnovou dĺžkou elektrónu.

Rovnica (11.1) tiež ukazuje, že aj pri konečnej hodnote Planckovej konštanty sa správanie častice môže zmeniť z kvantového na klasické, ak podstatným spôsobom zväčšíme jej hybnosť. To je v súhlase s výsledkami časti 5.2, kde sme porovnávali klasický a kvantový oscilátor. Ukázali sme, že čím je energia kvantového oscilátora vyššia, tým viac sa jeho vlastnosti podobajú klasickému oscilátoru. Všimnime si, že častica s vyššou energiou má menšiu vlnovú dĺžku.

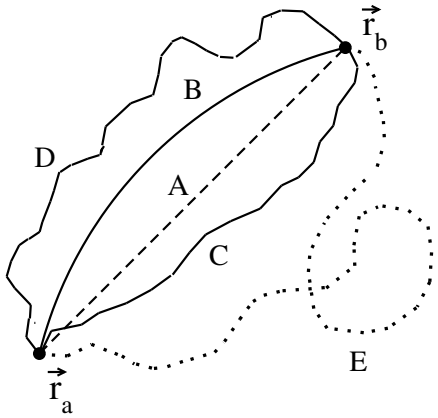
K podobnému záveru prídeme aj pri štúdiu atómu vodíka. Bohr odvodil kvantovanie energií z podmienky, že kruhová dráha elektrónu musí byť celočíselným násobkom vlnovej dĺžky. Pre vlnovú dĺžku porovnateľnú s polomerom atómu dostaneme diskrétne energetické spektrum. Malým vlnovým dĺžkam, podstatne menším ako je polomer atómu, však zodpovedajú veľké hodnoty kvantového čísla n. Vtedy je rozdiel medzi n-tou orbitou dĺžky $n\lambda$ a $(n+1)$-ou orbitou $(n+1)\lambda$ veľmi malý v porovnaní s $n\lambda$. Ešte menší je rozdiel medzi energiami viazaných stavov $E_{n+1} - E_n$, takže vonkajší pozorovateľ má pocit, že spektrum je spojité a žiadne kvantovanie energie nepozoruje.

Sú ale veličiny, ktoré v klasickej fyzike nemajú žiadnu analógiu, napríklad spin častice. Pretože jeho hodnoty sa rovnajú súčinu Planckovej konštanty $\hbar$ a malého čísla, neexistuje klasická veličina, ktorá by zodpovedala spinu. Podobne nemá klasickú analógiu Heisenbergov princíp neurčitosti. V limite $h \to 0$ by všetky operátory komutovali.

11.2 Princíp najmenšieho účinku

Vynikajúcu diskusiu o vzťahu klasickej a kvantovej mechaniky a o úlohe Planckovej konštanty podáva Feynman v knihe [5]. Zopakujme v krátkosti jeho argumentáciu.

Newtonovu klasickú mechaniku môžeme formulovať pomocou veličiny, ktorá sa volá účinok. Uvažujme klasické teleso, ktoré sa v čase t_a nachádza v bode $\vec{r}_a$ a v čase t_b sa má nachádzať v bode $\vec{r}_b$. Ak chceme vypočítať dráhu telesa medzi bodmi $\vec{r}_a$ a $\vec{r}_b$ a časmi t_a a t_b, môžeme



Obr. 11.1. Častica sa môže z bodu $\vec{r}_a$ do bodu $\vec{r}_b$ dostať po rôznych dráhach. V klasickej mechanike si zvolí dráhu, pre ktorú je účinok, definovaný funkciou (11.3) najmenší (napríklad dráhu A). Dráha, ktorú si častica zvolí, závisí od potenciálnej energie $V(\vec{r})$ v priestore. V kvantovej fyzike je hodnota účinku vypočítaného pre všetky naznačené dráhy menšia ako Planckova h. Všetky nakreslené dráhy by preto boli rovnocenné. Nedá sa preto predpovedať, po ktorej z nich by sa častica pohybovala. Dráha častice tak stráca fyzikálny zmysel. Namiesto dráhy preto definujeme vlnovú funkciu a správanie častice opisujeme pomocou nej.

definovať Lagrangeovu funkciu

$$\mathcal{L} = T - V \tag{11.2}$$

ako rozdiel kinetickej energie častice T a potenciálnej energie V. Z Lagrangeovej funkcie zostrojíme účinok S ako integrál

$$\mathcal{S}(\vec{r}_a,\vec{r}_b,t_a,t_b) = \int_{t_a}^{t_b} \mathrm{d}t\mathcal{L} \tag{11.3}$$

Účinok môžeme vypočítať pre ľubovoľnú dráhu, ktorá spája body $\vec{r}_a$ a $\vec{r}_b$. Niekoľko možných dráh ukazuje obrázok 11.1. Očakávame, že pre každú dráhu dostaneme inú hodnotu účinku, pretože častica sa bude pohybovať v oblasti s inou potenciálnou energiou a voľba dráhy ovplyvní aj jej rýchlosť počas pohybu. Princíp minimálneho účinku hovorí, že teleso sa bude pohybovať po takej dráhe, pre ktorú má účinok (11.2) najmenšiu hodnotu. Dá sa ukázať, že podmienka minima účinku vedie k Newtonovej pohybovej rovnici.

Pohyb telesa v klasickej mechanike teda môžeme formulovať ako problém hľadania minimálnej hodnoty účinku $\mathcal{S}$. Metóda výpočtu je založená na variačnom počte a je predmetom štúdia teoretickej mechaniky. V kvantovej mechanike však minimalizačná úloha nemá jednoznačné riešenie. Ukazuje sa totiž, že pre kvantovú časticu je hodnota účinku menšia alebo porovnateľná s Planckovou konštantou h, a to prakticky pre každú zvolenú dráhu medzi bodmi $\vec{r}_a$ a $\vec{r}_b$. Feynman argumentuje, že ak je účinok menší alebo porovnateľný s Planckovou konštantou, potom je každá možná dráha medzi dvoma bodmi $\vec{r}_a$ a $\vec{r}_b$ rovnako akceptovateľná. Za takej situácie ale dráha prestáva byť jednoznačne definovaná a stráca význam. Kvantová mechanika sa teda prejaví v procesoch, v ktorých je účinok častice $\mathcal{S}$ porovnateľný s Planckovou konštantou.

11.3 Meranie v kvantovej mechanike

Na probléme merania orientácie spinu elektrónu ukážeme problémy, ktoré má kvantová mechanika s opisom merania. V tejto časti sa budeme zaoberať len spinovými stupňami voľnosti. Uvažujme elektrón so spinom 1/2, tentoraz bez prítomnosti magnetického poľa. Vlastné vektory priemetov spinu do jednotlivých osí (ide o vlastné vektory Pauliho matíc σ_x, σ_y a σ_z) sme vyšetrovali v kapitole 6. Našli sme pre priemet spinu do osi z

$$\chi_z^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_z^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{11.4}$$

pre priemety do osi x (príklad 7.5)

$$\chi_x^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \chi_x^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{11.5}$$

a pre priemety spinu do osi y (príklad 7.7)

$$\chi_y^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \qquad \chi_y^- = \frac{1}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \tag{11.6}$$

Uvažujme spin v počiatočnom stave

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{11.7}$$

a predstavme si, že sme schopní merať priemet spinu do jednotlivých smerov x, y a z. V ďalšom texte nájdeme, aké výsledky merania získame podla zákonov kvantovej mechaniky.

11.3.1 Pravdepodobnosť namerania niektorej hodnoty

Najprv vyšetrime, aká je pravdepodobnosť, s akou pri meraní priemetu spinu do osi z nájdeme spin orientovaný v kladnom alebo zápornom smere. Aby sme našli odpoveď, musíme stav c rozložiť do superpozície vlastných vektorov matice σ_z:

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{11.8}$$

Z rozkladu vidíme, že pravdepodobnosť namerania kladnej hodnoty spinu je $|c_1|^2$ a pravdepodobnosť, že nameriame zápornú hodnotu, je $|c_2|^2$. Podobne, ak by nás zaujímal priemet spinu napríklad do osi y, musíme rozložiť vektor c do vlastných stavov Pauliho matice σ_y

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{c_1 - ic_2}{\sqrt{2}}\chi_y^+ + \frac{c_1 + ic_2}{\sqrt{2}}\chi_y^- \tag{11.9}$$

takže pravdepodobnosť, že nameriame kladnú hodnotu $s_y = \hbar/2$ je

$$P_+(c_1,c_2) = \frac{1}{2}(c_1^* + ic_2^*)(c_1 - ic_2) = \frac{1}{2}\big[c_1^*c_1 + c_2^*c_2 - i(c_1^*c_2 - c_1c_2^*)\big] \tag{11.10}$$

a zápornú hodnotu $S_y = -\hbar/2$ nameriame s pravdepodobnosťou

$$P_-(c_1,c_2) = \frac{1}{2}(c_1^* - ic_2^*)(c_1 + ic_2) = \frac{1}{2}\big[c_1^*c_1 + c_2^*c_2 + i(c_1^*c_2 - c_1c_2^*)\big] \tag{11.11}$$

Samozrejme, $P_+ + P_- = 1$, pretože $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Rovnakým spôsobom nájdeme aj pravdepodobnosti získania kladnej, resp. zápornej hodnoty priemetu spinu do osi x.

Kvantová mechanika nám teda poskytuje len pravdepodobnosť, s akou nameriame príslušnú hodnotu. Všimnime si, ako tieto pravdepodobnosti súvisia so strednými hodnotami operátorov. Ak pravdepodobnosť namerať kladnú hodnotu napríklad priemetu spinu S_x je P_+ a pravdepodobnosť namerať zápornú hodnotu je P_-, potom zrejme

$$\langle s_x \rangle = +\frac{\hbar}{2}P_+ - \frac{\hbar}{2}P_- = \frac{\hbar}{2}\big[P_+ - P_-\big] \tag{11.12}$$

v súlade s rovnicou (2.44) z časti 2.3.2.

11.3.2 Redukcia vlnovej funkcie

Uvažujme opäť elektrón v spinovom stave c. Predpokladajme, že sme merali hodnotu S_z a namerali sme kladnú hodnotu, $S_z = +\hbar/2$. Spin pred meraním bol v stave c. V akom stave bude po meraní?

Odpoveď je netriviálna: po meraní bude spin v stave χ_z^+ – teda vo vlastnom stave spinu otočeného v kladnom smere osi z. Podobne, keby výsledkom merania bol $S_z = -\hbar/2$, nachádzal by sa systém po meraní v stave χ_z^-. Meranie teda pôsobí na kvantový stav ako operátor, ktorý z počiatočného stavu c vyprojektuje niektorý z vlastných stavov – presne ten, ktorý zodpovedá nameranej vlastnej hodnote. Kvantová mechanika nedokáže opísať, ako tento proces prebieha. To ani nie je prekvapujúce, pretože meranie vždy spočíva v interakcii meraného objektu – malého spinu – s meracím prístrojom, ktorý je z princípu makroskopický (teda pozostáva z obrovského množstva častíc). V súčasnosti nie je známy postup, ako takúto interakciu v rámci kvantovej mechaniky opísať.

Pre nás je podstatné, že po meraní sa spin nenachádza v tom istom stave, ako pred meraním. Pred meraním bol elektrón v stave c danom rovnicou (11.7). Po meraní spinu bol alebo v stave χ_z^+, ak výsledkom merania bol spin orientovaný v kladnom smere osi z, alebo v stave χ_z^-, ak výsledkom merania bol spin orientovaný v zápornom smere osi z. Neexistuje teda spôsob, ako merať vlastnosti kvantového stavu a zároveň ho, istým spôsobom, nezničiť. Výnimkou je špeciálny prípad, keď sa systém už pred meraním nachádzal vo vlastnom stave.

11.3.3 Následné merania

Predstavme si teraz, že prebehlo prvé meranie, ktoré ukázalo, že spin je orientovaný v kladnom smere osi z. Položme si teraz otázku, ako by dopadli výsledky ďalších meraní? Napríklad, aká je pravdepodobnosť, že ďalším meraním nameriame $S_z = -\hbar/2$?

Odpoveď nájdeme, ak si uvedomíme, že po meraní sa spin nachádza v stave

$$c' = \chi_z^+ = \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{11.13}$$

Jeho spin je teda určite $S_z = +\hbar/2$. Pravdepodobnosť, že by sme ho po následnom meraní našli obrátený v zápornom smere, je teda nulová. Opakované merania tej istej veličiny dajú ten istý výsledok.

Ako by dopadlo meranie spinu v smere osi y ? Pravdepodobnosti, že nájdeme spin orientovaný v kladnom, resp. zápornom smere, získame, ak do pravdepodobností $P_+(c_1,c_2)$ a $P_-(c_1,c_2)$ (rovnice 11.10 a 11.11) dosadíme $c_1 = 1$ a $c_2 = 0$. Dostaneme, že s pravdepodobnosťou 1/2 nameriame $S_y = +1/2$ a rovnako s pravdepodobnosťou 1/2 nameriame spin $S_y = -1/2$.

Keby sme uvažovali veľký počet elektrónov, ktoré by všetky mali spin otočený v kladnom smere osi z, po meraní zložky spinu v smere osi y by sme dostali, že polovica elektrónov má spin otočený v kladnom a polovica v zápornom smere osi y. Taký výsledok merania je úplne odlišný od toho, čo by sme predpokladali na základe klasickej fyziky: Keby elektrón bol klasická častica a spin bol klasická veličina, po meraní orientácie spinu v smere osi y by všetky elektróny opustili meraciu aparatúru so spinom v kladnom smere osi z, teda také, aké do aparatúry vošli. Fyzikálny stav klasických objektov nie je vo všeobecnosti meraním narušený. V kvantovej fyzike sa stav

všetkých elektrónov zmení – opustia prístroj alebo v stave χ_y^+ alebo v stave χ_y^-, pričom nevieme ani dopredu určiť, v ktorom v týchto stavov daný elektrón bude.

Predpokladajme, že sme namerali kladnú hodnotu $S_y = \hbar/2$. Po meraní sa teda spin nachádza v stave

$$c'' = \chi_y^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \tag{11.14}$$

Urobíme teraz tretie meranie: po meraní spinu v smere osi y budeme opäť merať spin v smere osi z. Pretože spin vstupuje do merania v stave χ_y^+, dostaneme, že pravdepodobnosť namerania kladnej hodnoty S_z je $1/2$.

Zhrňme doterajšie merania: Po prvom meraní sme mali spin otočený v smere osi z a všetky následné merania S_z dávali hodnotu $S_z = 1/2$. Po meraní spinu v smere osi y sa však stav spinu zmenil – z prístroja vyšiel otočený v smere osi y, v stave χ_y^+, v ktorom je jeho stredná hodnota $\langle S_z \rangle = 0$. Informáciu o svojej pôvodnej orientácii v smere osi z stratil, takže v treťom meraní nameriame s rovnakou pravdepodobnosťou kladnú aj zápornú orientáciu spinu do osi z.

Pôvod všetkých vyššie opísaných komplikácií je v tom, že operátory priemetu spinu navzájom nekomutujú. Preto ich nemôžeme merať súčasne. Môžeme merať ľubovoľnú zložku spinu, ale jej meraním stratíme informáciu o ostatných dvoch. V klasickej fyzike, kde môžeme merať čokoľvek, by sme tieto problémy nemali.

Nemusíme ich mať ani v kvantovej fyzike, ak sa budeme zaujímať len o veličiny, ktorých operátory komutujú. Predstavme si hypotetický experiment, v ktorom dokážeme merať veličiny charakterizujúce elektrón v atóme vodíka: energiu, moment hybnosti a jeho orientáciu do ľubovoľnej osi, aj priemet spinu. Stav elektrónu je určený kvantovými číslami (n,ℓ,m,s,s_z). Ak by sme merali najprv energiu ($E = E_n$), po nej moment hybnosti ($L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$) a potom opäť energiu, dostali by sme určite tú istú hodnotu, ako predtým. Dôvodom je to, že operátory **H** a **L** komutujú, preto meraním momentu hybnosti L nezničíme vlastný stav Hamiltoniánu **H**.

11.4 Kvantová fyzika a teplota

Na viacerých miestach tohto textu sme porovnávali energiu, typickú pre daný jav, s energiou $k_B T$. Takéto porovnanie nám napríklad umožnilo odhadnúť teplotu, pri ktorej sa rozpadajú molekuly. Pri vysokej teplote je väzba medzi jednotlivými atómami v molekule slabá na to, aby vydržala vzájomné zrážky vysoko energetických molekúl. Podobne existuje teplota, pri ktorej sa budú ionizovať atómy: elektrón, viazaný v atóme, môže v procese zrážky dvoch atómov získať dostatočnú energiu k tomu, aby sa uvoľnil z atómu.

Teplota teda pôsobí rušivo na stabilitu kvantových systémov. Štruktúry stabilné pri izbovej teplote sa môžu stať nestabilnými, keď sa teplota zvýši. Analogicky očakávame, že môžu existovať kvantové štruktúry, ktoré sú stabilné pri nízkych teplotách, ale nestabilné (a preto nepozorovateľné) pri izbovej teplote. Je to naozaj tak: pri dostatočne nízkych teplotách môžeme pozorovať nové stavy, ktoré môžu mať z hľadiska klasickej fyziky úplne nečakané vlastnosti. Príkladom je prechod väčšiny kovov pri určitej kritickej teplote do supravodivého stavu, alebo prechod kvapalného hélia do supratekutého stavu [32].

11.4.1 Teplota ako energetická škála

Pri analýze žiarenia čierneho telesa a pri výpočte merného tepla kryštálov sa ukázalo, že klasický vzťah pre strednú energiu jedného módu vlnenia, $\langle E \rangle = k_B T$, môžeme použiť len pri vysokých teplotách T, keď je energia $k_B T$ podstatne vyššia ako energia $h\nu$ kvantovej častice (fotónu alebo fonónu). To nás vedie k hypotéze, že ak je teplota systému dostatočne vysoká, potom jeho správanie môžeme nájsť v rámci klasickej fyziky. Naopak, znižovaním teploty systému sa prejavia jeho kvantové vlastnosti. Pri izbovej teplote[1] môžeme merné teplo vypočítať bez kvantovej mechaniky. Keď však znížime teplotu kryštálu hlboko pod Debyeovu teplotu,

$$T \ll T_{\mathrm{D}} \tag{11.15}$$

nájdeme novú teplotnú závislosť merného tepla, ktorá je dôsledkom kvantových procesov v kryštáli.

Klasickú limitu ale nenájdeme pre žiarenie čierneho telesa. V časti 1.2.3 sme videli, že žiadna teplota čierneho telesa nie je dostatočne nízka na to, aby sme energiu vyžiarenú čiernym telesom mohli opísať klasickou fyzikou. Stefan Boltzmanova konštanta je totiž vyjadrená pomocou Planckovej konštanty. To ale ľahko porozumieme: na rozdiel od kmitov kryštalickej mriežky v spektre čierneho telesa sa vždy, pri každej teplote, nachádzajú aj frekvencie, pre ktoré podmienka $h\nu \ll k_B T$ neplatí. Tieto módy klasickou fyzikou opísať nemôžeme.

11.4.2 Dekoherencia: Elektrónová vodivosť v kove

Príkladom, ako teplota prostredia potláča kvantové prejavy častíc, je pohyb elektrónov v kove. Ak si elektróny predstavíme ako klasické častice, odvodíme z jednoduchých fyzikálnych predstáv Ohmov zákon medzi prúdom a napätím, alebo medzi prúdovou hustotou a intenzitou elektrického poľa,

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \tag{11.16}$$

kde σ je elektrická vodivosť

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m} \tag{11.17}$$

daná koncentráciou elektrónov n, nábojom a hmotnosťou elektrónov a typickým časom τ. Vodivosť σ nezávisí od rozmerov vodiča (jeho prierezu S a dĺžky ℓ), preto elektrický odpor

$$R = \frac{1}{\sigma} \frac{\ell}{S} \tag{11.18}$$

lineárne narastá s dĺžkou vodiča.

Ohmov zákon veľmi dobre súhlasí s experimentálnymi meraniami pri dostatočne vysokých teplotách. K jeho odvodeniu sme kvantovú mechaniku vôbec nepotrebovali. Experimentálne merania však ukazujú, že vzťah (11.17) pre elektrickú vodivosť prestáva platiť, keď teplota kovu klesá. Dôvodom odchýliek od Ohmovho zákona je kvantová povaha elektrónu, ktorá pri nízkych teplotách ovplyvňuje jeho správanie.

[1] Presnejšie: pri teplote väčšej, ako je Debyeova teplota.

Prečo sa kvantová povaha elektrónu neprejaví aj pri vysokých teplotách? Elektrón v kove interaguje so svojím prostredím. Súčasťou tejto interakcie sú pružné a nepružné zrážky.[2] Pružné zrážky môžeme opísať podobne ako sme opísali zrážky kvantovej častice na potenciálovej bariére v kapitole 4. Nepružnou zrážkou je napríklad rozptyl elektrónu na kmitoch mriežky (interakcia s fonónom, resp. emisia a absorpcia fonónu). Ukazuje sa, že elektrón sa správa ako kvantová častica len v krátkom čase medzi dvoma nepružnými zrážkami. Samotný proces, ako elektrón „zabúda" svoju kvantovú podstatu, je podobný procesu merania, ktorý sme opísali v časti 11.3. Elektrón počas nepružnej zrážky interaguje s veľkým (makroskopickým) súborom častíc, z ktorých je zložená mriežka. Presný kvantovomechanický opis takejto zrážky nie je známy.

Pri vysokých teplotách je v mriežke dostatok fonónov, takže elektrón sa s nimi zráža často. Ako kvantová častica teda exituje vždy len veľmi krátky čas τ_p. Jeho kvantová povaha je preto nepozorovateľná. So znižovaním teploty však fonónov ubúda. Čas τ_p rastie a elektrón sa stále dlhšie pohybuje ako kvantová častica. Prejavom jeho kvantovej povahy sú kvalitatívne nové vzťahy pre vodivosť, pozorované v malých (mezoskopických) štruktúrach: kvantovanie elektrickej vodivosti (pozri časť 3.6), ale aj nové kvantové javy, ako Andersonova lokalizácia [23], univerzálne fluktuácie vodivosti, alebo kvantový Hallov jav [25, 26].

11.4.3 Typické teploty vo fyzike

V tabuľke 11.1 sú uvedené niektoré charakteristické teploty, s ktorými sa vo fyzikálnej praxi stretávame.

Prvá časť tabuľky udáva teplotu povrchu Slnka, povrchu Zeme a teplotu wolfrámového vlákna v žiarovke, s ktorými sme sa zaoberali v časti 1.2 pri štúdiu žiarenia čierneho telesa. Teplota 2,7 K zodpovedá vlnovej dĺžke reliktného žiarenia (príklad 1.8).

Ako sme videli v predchádzajúcich kapitolách, teploty niekoľko tisíc Kelvinov sú potrebné na disociáciu molekúl a na ionizáciu atómov. Podobne, teploty rádovo tisícky Kelvinov sú potrebné aj na prechod väčšiny kovov do kvapalného stavu. Volfrám sa taví pri 3700 K, železo pri 1800 K, zlato pri 1336 K. Najznámejšou výnimkou je ortuť Hg, ktorá sa taví už pri teplote 234,3 K a je preto pri izbovej teplote kvapalná. Do tabuľky sme zahrnuli aj Curieho teplotu pre železo, ktorá definuje kritickú teplotu prechodu železa z paramagnetického stavu to feromagnetického (časť 9.3.1).

Zaujímavé sú teploty, pri ktorých sa z „bežných" plynov stávajú kvapaliny. Pre experimentálnu fyziku je dôležitá predovšetkým teplota skvapalnenia dusíka (77 K) a hélia $^4_2$He (4,2 K), pretože kvapalný dusík a kvapalné hélium slúžia ako chladiace médiá v kryostatoch. Pre zaujímavosť sú v tabuľke uvedené aj teploty, pri ktorých dusík, kyslík a vodík tuhnú do kryštalickej mriežky.

Posledná časť tabuľky je z hľadiska modernej fyziky najzaujímavejšia. Nové pozorované javy pri nízkych teplotách sú výzvou pre rozvoj teórie. Príkladom je experimentálne pozorovanie supravodivosti kovov, ktoré viedlo k BCS teórii supravodivosti, alebo vysokoteplotná supravodivosť keramických materiálov, pozorovaná prvýkrát v r. 1986. Naopak, predpovede kvantovej teórie inšpirujú rozvoj experimentálnej fyziky: Boseho-Einsteinova kondenzácia bola experimentálne pozorovaná až 70 rokov po sformulovaní teórie. Môžeme predpokladať, že exprimentálne štú-

[2] V pružnej zrážke sa zachováva hybnosť aj energia zrážajúcich sa častíc, pri nepružnej zrážke sa časť energie častíc odovzdá okoliu.

Tab. 11.1. Typické teploty vo fyzike.

Teplota povrchu Slnka	6000 K
Teplota wolfrámového vlákna	2000 K
Teplota povrchu Zeme	300 K
Reliktné žiarenie	2,7 K
Teplota disociácie molekúl	4000 K
Teplota tavenia železa	1800 K
Curieho teplota pre železo	1040 K
Bod varu vody	373 K
kyslíka	90,2 K
dusíka	77 K
vodíka	20,3 K
hélia $^4_2$He	4,2 K
hélia $^3_2$He	3,3 K
Bod tuhnutia vody na ľad	273 K
dusíka	63 K
kyslíka	50,5 K
vodíka	14 K
Prechod do supravodivého stavu Hg	4,1 K
Pb	7,2 K
Kritická teplota vysokoteplotných supravodičov	20 – 130 K
Prechod do supratekutého stavu $^4_2$He	2,17 K
$^3_2$He	2,49 mK
Boseho-Einsteinova kondenzácia plynu Rb	170 nK

dium vlastností látok pri nízkych (mikrokelvinových a nižších) teplotách bude v budúcnosti hybnou silou rozvoja modernej fyziky, nielen ako dôležitý nástroj verifikácie nových teoretických hypotéz, ale aj zároveň ako zdroj nových, doteraz nepozorovaných experimentálnych javov, vyžadujúcich teoretické vysvetlenie.

KAPITOLA 12

Dodatky

A Základné operácie s maticami

Na príklade matíc 2×2 ukážeme niektoré základné vlastnosti matíc a operácie s nimi: Uvažujme maticu A veľkosti 2×2

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

Determinant matice A je definovaný vzťahom

$$\det A = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} \tag{A.2}$$

a stopa matice je daná súčtom diagonálnych prvkov matice:

$$\mathrm{Tr}\, A = A_{11} + A_{22}. \tag{A.3}$$

Ak je matica A *diagonálna*,

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \tag{A.4}$$

potom sú jej diagonálne prvky rovné vlastným hodnotám λ_1 a λ_2 a determinant sa rovná súčinu vlastných hodnôt,

$$\det A = \lambda_1\lambda_2 \tag{A.5}$$

a stopa sa rovná súčtu vlastných hodnôt

$$\mathrm{Tr}\, A = \lambda_1 + \lambda_2. \tag{A.6}$$

Inverzia matice, hermitovsky združená matica, unitárna matica

K matici A môžeme zostrojiť inverznú maticu A^{-1} ktorá spĺňa vzťah

$$A^{-1}A = 1 \tag{A.7}$$

Ľahko nájdeme prvky inverznej matice

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A}\begin{pmatrix} A_{22} & -A_{21} \\ -A_{12} & A_{11} \end{pmatrix} \tag{A.8}$$

Inverznú maticu môžeme zostrojiť len ak je determinant matice A rôzny od nuly.

K matici A môžeme zostrojiť hermitovsky združenú maticu $\mathbf{A}^\dagger$. Jej prvky spĺňajú vzťah

$$[A^\dagger]_{ij} = [A_{ji}]^* \tag{A.9}$$

Matica A je hermitovská, ak platí

$$A^\dagger = A. \tag{A.10}$$

Matica A je unitárna ak spĺňa podmienku

$$A^\dagger A = 1, \quad \text{teda} \quad A^\dagger = A^{-1} \tag{A.11}$$

Presvedčte sa, že pre súčin dvoch matíc platia vzťahy

$$[AB]^{-1} = B^{-1}A^{-1} \quad \text{a} \quad [AB]^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \tag{A.12}$$

K vektoru u

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \tag{A.13}$$

môžeme zostrojiť hermitovsky združený vektor

$$u^\dagger = (u_1^* \;\; u_2^*). \tag{A.14}$$

a definovať skalárny súčin

$$u^\dagger v = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 \tag{A.15}$$

Vlastné hodnoty matice

Vlastné hodnoty λ_1, λ_2 matice A dostaneme riešením rovnice

$$\det[A - \lambda] = 0. \tag{A.16}$$

Ak je matica A maticou 2×2, potom vieme vlastné hodnoty vyjadriť z riešenia kvadratickej rovnice

$$(A_{11} - \lambda)(A_{22} - \lambda) - A_{12}A_{21} = 0 \tag{A.17}$$

a teda

$$\lambda_{1,2} = \frac{A_{11} + A_{22}}{2} \mp \sqrt{\frac{(A_{11} - A_{22})^2}{4} + A_{12}A_{21}}. \tag{A.18}$$

Vlastné hodnoty môžeme vyjadriť aj pomocou determinantu a stopy matice:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left[\mathrm{Tr}A \mp \sqrt{\mathrm{Tr}^2\, A - 4\mathrm{det}\, A}\right], \tag{A.19}$$

K vlastným hodnotám vieme nájsť *vlastné vektory*. Vo všeobecnosti má matica pravé aj ľavé vlastné vektory. Pre pravé vlastné vektory platí vzťah

$$Au = \lambda u, \tag{A.20}$$

Násobenie vlastného vektora maticou je teda ekvivalentné vynásobeniu tohto vektora zodpovedajúcou vlastnou hodnotou. Prvky vlastného vektora nájdeme z riešenia systému lineárnych rovníc $(A - \lambda)u = 0$,

$$\begin{aligned} (A_{11} - \lambda)u_1 \quad & +A_{12}u_2 &= 0 \\ A_{21}u_1 \quad & +(A_{22} - \lambda)u_2 &= 0 \end{aligned} \tag{A.21}$$

Pretože determinant matice $(A-\lambda)$ sa rovná nule, dve rovnice (A.21) sú lineárne závislé. Systém rovníc (A.21) nám preto dá len jeden vzťah medzi prvkami u_1 a u_2. Druhý nájdeme z podmienky, aby vektor u bol normalizovaný, teda aby platilo

$$|u_1|^2 + |u_2|^2 = 1 \tag{A.22}$$

Podobne môžeme definovať ľavé vlastné vektory rovnicou

$$\lambda v^\dagger = v^\dagger A. \tag{A.23}$$

z ktorej dostaneme rovnice pre prvky vlastného vektora

$$\begin{aligned} (A_{11} - \lambda)v_1^* \quad & +A_{21}v_2^* &= 0 \\ A_{12}v_1^* \quad & +(A_{22} - \lambda)v_2^* &= 0 \end{aligned} \tag{A.24}$$

Podobnostná transformácia

Podobnostná transformácie matice A je definovaná vzťahom

$$A \to \tilde{A} = U^{-1}AU \tag{A.25}$$

kde U je matica tej istej veľkosti (v našom prípade 2×2) ako matica A. Najčastejšie používanou podobnostnou transformáciou je tá, ktorá diagonalizuje maticu,

$$U^{-1}AU = \Lambda \tag{A.26}$$

kde Λ je diagonálna matica. Ľahko sa presvedčíme, že stĺpce matice U pozostávajú z vlastných vektorom matice A.

B Odvodenie rovnice kontinuity

Odvodíme rovnicu kontinuity (2.82). Vyjdeme z definície pravdepodobnosti, že častica sa nachádza v oblasti $a \leq x \leq b$. Táto pravdepodobnosť je daná integrálom

$$\int_a^b \mathrm{d}x |\Psi(x,t)|^2 \tag{B.1}$$

Zmena pravdepodobnosti bude daná deriváciou

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \Psi^*\Psi \mathrm{d}x = \int_a^b \mathrm{d}x \left[\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi\right] \tag{B.2}$$

Časovú deriváciu vlnovej funkcie vyjadríme zo Schrödingerovej rovnice

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}\Psi = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi\right] \tag{B.3}$$

a podobne vyjadríme aj deriváciu komplexne združenej vlnovej funkcie

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}\Psi^* = \frac{1}{i\hbar}\left[+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - V(x)\Psi^*\right] \tag{B.4}$$

Po dosadení do rovnice (B.2) dostaneme

$$\begin{aligned}\int_a^b \left[\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right] \mathrm{d}x &= \frac{1}{i\hbar}\Bigg\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\int_a^b \left[\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\right] \mathrm{d}x \\ &\quad + \int_a^b \left[\Psi^* V(x)\Psi - \Psi V^*(x)\Psi^*\right] \mathrm{d}x \Bigg\}\end{aligned} \tag{B.5}$$

Druhý člen na pravej strane rovnice (B.5)

$$+\frac{1}{i\hbar}\int_a^b \left[\Psi^* V(x)\Psi - \Psi V^*(x)\Psi^*\right] \mathrm{d}x \tag{B.6}$$

je rôzny od nuly len vtedy, ak je potenciálna energia $V(x)$ komplexná. To by fyzikálne znamenalo, že častice môžu v objeme látky vznikať, alebo zanikať. Vo všetkých fyzikálnych problémoch, ktorými sa budeme zaoberať, je potenciálna energia $V(x)$ reálna a výraz (B.6) sa rovná nule.

K úprave prvého člena na pravej strane rovnice (B.5) využijeme identitu

$$\frac{\hbar i}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\right] = \frac{\hbar i}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\right] = -\frac{\partial}{\partial x}j(x), \tag{B.7}$$

kde sme definovali hustotu prúdu pravdepodobnosti $j(x)$ vzťahom

$$j(x) = \frac{\hbar i}{2m}\left[\Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right] \tag{B.8}$$

Potom môžeme prvý člen na pravej strane rovnice (B.5) upraviť na tvar

$$\frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\int_a^b \left[\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\right] \mathrm{d}x\right\} = -\int_a^b \frac{\partial j(x)}{\partial x}\mathrm{d}x = j(a) - j(b). \tag{B.9}$$

Odvodili sme teda rovnicu kontinuity (2.82)

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \Psi^*\Psi \mathrm{d}x = j(a) - j(b). \tag{B.10}$$

C Laplaceov integrál

V kvantovej mechanike často potrebujeme počítať integrály typu

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; x^n e^{-ax^2} \tag{C.1}$$

Ukážeme jednoduchú metódu ich výpočtu. Najjednoduchší integrál pre $n = 0$, nazývaný Laplaceov integrál

$$I(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; e^{-ax^2} \tag{C.2}$$

nájdeme známym trikom: Uvažujme jeho druhú mocninu, ktorú vyjadríme ako dvojný integrál

$$I^2(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; e^{-ax^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y\; e^{-ay^2} = \int \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\; e^{-a(x^2+y^2)} \tag{C.3}$$

Po prechode k polárnym súradniciam, $x = r\cos\phi$, $y = r\sin\phi$, $\mathrm{d}x\mathrm{d}y = r\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi$ dostaneme

$$I^2(a) = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\infty} \mathrm{d}r r e^{-ar^2} == 2\pi \frac{1}{2a} \int_0^{\infty} \mathrm{d}x e^{-x} = \frac{\pi}{a} \tag{C.4}$$

Je preto

$$I(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{C.5}$$

Pre párne $n = 2k$ nájdeme

$$\begin{aligned} I_{2k}(a) &= \int \mathrm{d}x\; x^{2k}\; e^{-ax^2} = (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} I(a) \;=\; (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ &= \frac{2^k}{(2k-1)!!} \sqrt{\frac{\pi}{a^{2k+1}}} \end{aligned} \tag{C.6}$$

kde $(2k-1)!! = 1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2k-1)$.

Pre nepárne $n = 2k+1$ dostaneme po substitúcii $u = ax^2$

$$I_{2k+1}(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; x^{2k+1} e^{-ax^2} = \frac{1}{a^{k+1}} \int_0^{\infty} \mathrm{d}u\; u^k e^{-u} = \frac{k!}{a^{k+1}} \tag{C.7}$$

Budeme ešte potrebovať integrál

$$Y(a,b) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; e^{-ax^2+bx} \tag{C.8}$$

Upravme najprv výraz v exponente:

$$\begin{aligned} -ax^2 + bx &= -a\left[x^2 - \frac{b}{a}x\right] = -a\left[x^2 - 2\frac{b}{2a}x + \frac{b^2}{4a}\right] + \frac{b^2}{4a} \\ &= -a\left[x - \frac{b}{2a}\right]^2 + \frac{b^2}{4a} \end{aligned} \tag{C.9}$$

a po substitúcii $u = x - b/2a$ dostaneme

$$Y(a,b) = e^{+\frac{b^2}{4a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u\, e^{-au^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left[+\frac{b^2}{4a}\right] \tag{C.10}$$

D Vlnový balík

Vlastnosti Laplaceovho integrálu využijeme pre výpočet parametrov vlnového balíka z časti 2.7. Vlnový balík sme definovali vzťahom

$$\Psi(x,t) = C \int \mathrm{d}k\; P(k) e^{ik(x-x_0) - \frac{i}{\hbar} E_k t} \qquad \text{s energiou} \qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{D.1}$$

a váhovou funkciou

$$P(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}} \tag{D.2}$$

Najprv nájdeme normovaciu konštantu vlnového balíka definovaného vzťahom (2.91). K tomu musíme nájsť integrál

$$I = \int \mathrm{d}x\; |\Psi(x)|^2 \tag{D.3}$$

Po dosadení z rovnice (D.1) dostaneme

$$I = |C|^2 \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}k \int \mathrm{d}k' P(k) P(k')\; e^{i(k-k')(x-x_0)}\; e^{\frac{i}{\hbar}(E_{k'} - E_k)t} \tag{D.4}$$

Integrujme najprv cez priestorovú súradnicu. Využijeme identitu (E.6)

$$\int \mathrm{d}x\; e^{ix(k-k_0)} = 2\pi\delta(k - k_0) \tag{D.5}$$

a vlastnosť δ-funkcie (E.7)

$$\int \mathrm{d}k'\; \delta(k' - k_0) F(k') = F(k_0) \tag{D.6}$$

Dostaneme tak

$$I = |C|^2 2\pi \int \mathrm{d}k\; P^2(k) = |C|^2 \frac{2\pi}{2\pi\sigma_k^2} \sqrt{\pi\sigma_k^2} \tag{D.7}$$

Kde sme dosadili za $P(k)$ z rovnice (D.2) a využili Laplaceov integrál (C.5). Pretože má platiť $I = 1$, dostaneme

$$C = \left(\frac{\sigma_k^2}{\pi}\right)^{1/4} \tag{D.8}$$

Nájdeme teraz vlnovú funkciu definovanú integrálom (D.1) v ľubovoľnom čase t:

$$\Psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \int \mathrm{d}k\, e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}}\, e^{ik(x-x_0)} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \tag{D.9}$$

Využijeme identity $k = (k - k_0) + k_0$ a

$$k^2 = [(k-k_0)+k_0]^2 = (k-k_0)^2 + 2(k-k_0)k_0 + k_0^2 = q^2 + 2qk_0 + k_0^2 \tag{D.10}$$

kde $q = k - k_0$. Po dosadení do integrálu na pravej strane rovnice (D.1) dostaneme

$$\Psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \int \mathrm{d}q\, e^{-\frac{q^2}{2\sigma_k^2} - i\frac{\hbar t}{2m}q^2 - i\frac{\hbar k_0 t}{m}q + iq(x-x_0)} \times e^{ik_0(x-x_0) - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t} \tag{D.11}$$

Integrál na pravej strane nájdeme s využitím znalosti Laplaceovho integrálu (C.10) kde

$$a = \frac{1}{2\sigma_k^2} + i\frac{\hbar t}{2m}, \qquad b = i\left(x - x_0 - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right) \tag{D.12}$$

Dostaneme tak vlnovú funkciu (2.95)

$$\Psi(x,t) \propto e^{i\left[k_0(x-x_0) - \frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right]} \exp\left\{-\frac{\left[x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m}t\right]^2}{2\sigma_x^2}\right\} \tag{D.13}$$

kde

$$\sigma_x^2 = 2a = \frac{1}{\sigma_k^2} + i\frac{\hbar t}{m} \tag{D.14}$$

Vlnovú funkciu (2.93) dostaneme dosadením $t = 0$ do rovnice (D.13).

E δ-funkcia

V mnohých fyzikálnych problémoch sa vyskytuje funkcia $\delta(x)$. Presná matematická definícia tejto funkcie presahuje tento text, podáme preto aspoň základné informácie o jej vlastnostiach.

Uvažujme Gaussovo rozdelenie

$$P_{\mathrm{G}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma}} \tag{E.1}$$

Na ľavom obrázku E.1 je ukázaná $P_{\mathrm{G}}(x)$ pre štyri hodnoty σ. Vidíme, že rozdelenie sa s klesajúcou hodnotou σ zužuje. Definujme δ-funkciu ako limitu

$$\delta(x) = \lim_{\sigma\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma}} \tag{E.2}$$

Intuitívne je zrejmé, že pre nekonečne malú hodnotu σ je Gaussovo rozdelenie nekonečne úzke a nekonečne vysoké. Rovnako platí

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x) = 1 \tag{E.3}$$

Funkciu $\delta(x)$ môžeme definovať aj inými spôsobmi. Vo fyzike sa často používa Lorentzova funkcia

$$P_{\mathrm{L}}(x) = \frac{\gamma/\pi}{x^2+\gamma^2} \tag{E.4}$$

Ako vidieť z pravého obrázku (E.1), Lorentzova funkcia je stále užšia a má vyššie maximum, keď γ klesá. Dá sa ukázať, že platí limita

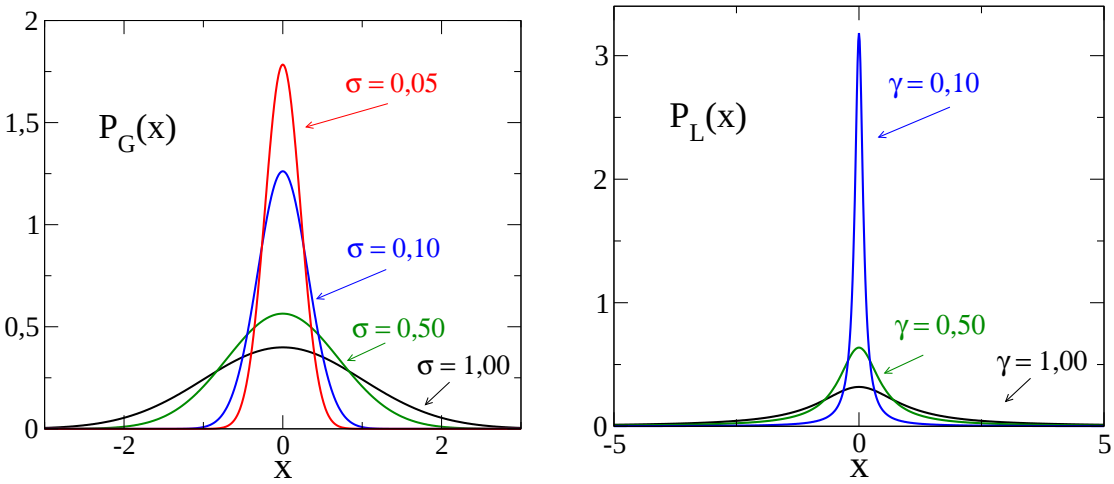
$$\delta(x) = \lim_{\gamma\to 0} \frac{\gamma/\pi}{x^2+\gamma^2} \tag{E.5}$$

Uvedieme bez dôkazu niekoľko dôležitých vlastností δ-funkcie:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ e^{ix(k-q)} = 2\pi\delta(k-q) \tag{E.6}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\ \delta(k-k_0)F(k) = F(k_0) \tag{E.7}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\ \delta[f(x)] = \frac{\delta(x-x_0)}{|f'(x_0)|} \tag{E.8}$$



Obr. E.1. Na ľavom obrázku je Gaussovo rozdelenie $P_{\mathrm{G}}(x)$ definované rovnicou (E.1) pre štyri rôzne hodnoty σ. Rozdelenie sa zužuje, keď σ klesá. V limite $\sigma \to 0$ Gaussovo rozdelenie konverguje do δ-funkcie. Pravý obrázok ukazuje Lorentzovu funkciu $P_{\mathrm{L}}(x)$, definovanú rovnicou (E.4) pre tri rôzne hodnoty γ. Rozdelenie sa zužuje, keď γ klesá a v limite $\gamma \to 0$ tiež konverguje do δ-funkcie.

V menovateli je derivácia funkcie $f(x)$ v bode x_0, pre ktorý platí $f(x_0) = 0$. Ak má rovnica $f(x) = 0$ viac riešení, $f(x_n) = 0$ pre $n = 1,2,\ldots N$, potom má rovnica (E.8) tvar

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \delta[f(x)] = \sum_{n=1}^{N} \frac{\delta(x - x_n)}{|f'(x_n)|} \tag{E.9}$$

Vlastnosti δ-funkcií nájde čitateľ v špecializovaných učebniciach, napríklad [18], alebo v dodatkoch väčšiny učebníc kvantovej mechaniky, napríklad [1].

F δ-funkčná potenciálová jama

V tejto časti definujeme jednorozmernú δ-funkčnú potenciálovú jamu, definovanú potenciálnou energiou

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda\, \delta(x). \tag{F.1}$$

Funkciu $\delta(x)$ definujeme v dodatku E Môžeme si ju predstaviť ako funkciu, ktorá má nulovú hodnotu pre všetky hodnoty $x \neq 0$, a je nekonečne veľká pre $x = 0$. Dá sa ukázať (napríklad v knihe [23], kap. 3), že δ-funkčná potenciálová jama zodpovedá pravouhlej potenciálovej jame, ktorú sme podrobne analyzovali v časti 4.1 keď šírka jamy ℓ klesá do nuly a súčasne jej hĺbka V_0 rastie do nekonečna tak, aby limitná hodnota

$$\Lambda = \lim_{\ell\to 0} \lim_{V_0\to\infty} \left[\frac{2m}{\hbar^2}\, \ell V_0\right] \tag{F.2}$$

zostala konštantná.[1] Záporné hodnoty parametra Λ zodpovedajú potenciálovej jame, kladné hodnoty potenciálovej bariére [11, 15, 23].

F.1 Základný stav častice v jednej δ-funkčnej jame

Pre výpočet viazaného stavu musíme najprv odvodiť vzťahy medzi vlnovými funkciami na oboch stranách potenciálovej jamy. Prvú podmienku dostaneme zo spojitosti vlnovej funkcie

$$\Phi(x \to 0^-) = \Phi(x \to 0^+) \tag{F.3}$$

Podmienka pre deriváciu vlnovej funkcie je zložitejšia, pretože derivácia vlnovej funkcie v bode $x = 0$ nemusí byť spojitá. Dôvodom je nekonečná hĺbka potenciálovej jamy v bode $x = 0$.[2]

Druhú podmienku pre vlnovú funkciu nájdeme zo Schrödingerovej rovnice

$$\frac{\partial^2\Phi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\Phi(x) \tag{F.4}$$

[1] Všimnime si, že parameter Λ má rozmer m^{-1}, rovnako funkcia $\delta(x)$ má rozmer m^{-1}, čo môžeme odvodiť z definície δ-funkcie ($\delta(a\xi) = a^{-1}\delta(\xi)$), ale aj z definície potenciálnej energie (F.1).

[2] V bodoch, kde sa potenciálna energia skokom mení o nekonečnú hodnotu, nemusí byť derivácia vlnovej funkcie spojitá. Príkladom je hranica nekonečne hlbokej potenciálovej jamy, alebo poloha δ-funkčnej potenciálovej jamy alebo bariéry.

s potenciálnou energiou $V(x)$ danou rovnicou (F.1). Ak obe strany rovnice integrujeme v intervale $-\epsilon < x < +\epsilon$, dostaneme na ľavej strane

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2}\, dx = \frac{\partial \Phi(+\varepsilon)}{\partial x} - \frac{\partial \Phi(-\varepsilon)}{\partial x} \tag{F.5}$$

Na pravej strane integrovaním výrazu $V(x)\Phi(x)$ dostaneme (pozri rovnicu E.7)

$$\Lambda \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)\Phi(x)\, dx = \Lambda\Phi(0) \tag{F.6}$$

V limite $\epsilon \to 0$ teda dostaneme podmienku pre deriváciu vlnovej funkcie v bode $x = 0$

$$\frac{\partial \Phi(0^+)}{\partial x} - \frac{\partial \Phi(0^-)}{\partial x} = \Lambda\Phi(0). \tag{F.7}$$

Uvažujme teraz prípad $\Lambda < 0$, ktorý zodpovedá nekonečne úzkej a zároveň nekonečne hlbokej potenciálovej jame. Budeme sa zaujímať o viazané stavy tohto systému. Vlnová funkcia častice viazanej na potenciálovú jamu klesá exponenciálne na oboch stranách jamy

$$\Phi(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x} & x < 0 \\ Be^{-\kappa x} & x > 0 \end{cases} \tag{F.8}$$

kde $\kappa > 0$. Viazané stavy sa preto nemôžu šíriť priestorom a ich energia je záporná,

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} < 0 \tag{F.9}$$

Z rovnice (F.3) dostaneme $A = B$, a z rovnice (F.7) máme $-2\kappa B = \Lambda B$, takže

$$\kappa = -\frac{\Lambda}{2} \tag{F.10}$$

a zápornú energiu viazaného stavu dostaneme

$$E_{\mathrm{b1}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda^2}{4} \tag{F.11}$$

Všimnime si, že δ-funkčná potenciálová jama má vždy len jediný viazaný stav.

F.2 Dve δ-funkčné jamy

Dve δ-funkčné potenciálové jamy nám umožňujú vytvoriť najjednoduchší model pre časticu viazanú v dvoch potenciálových jamách (kapitola 6). Jeho výhodou je to, že ho môžeme vyriešiť presne.

Uvažujme dve identické δ-funkčné potenciálové jamy, vzdialené od seba na vzdialenosť $\ell = 2a$. Potenciálna energia je teda daná funkciou

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\Lambda\ [\delta(x+a) + \delta(x-a)] \tag{F.12}$$

Záporný parameter $\Lambda < 0$ definuje schopnosť δ-funkčnej jamy viazať kvantovú časticu.

Pre výpočet viazaných stavov s energiou $E < 0$ hľadajme vlnovú funkciu častice v tvare

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{+\kappa x} & x \leq -a \\ Be^{+\kappa x} + Ce^{-\kappa x} & -a \leq x \leq +a \\ De^{-\kappa x} & +a \leq x \end{cases} \tag{F.13}$$

kde $\kappa = \sqrt{2m(-E)/\hbar^2}$. Z podmienok spojitosti vlnovej funkcie (F.3) a podmienok pre prvú deriváciu vlnovej funkcie (F.7) dostaneme štyri lineárne rovnice pre koeficienty A, B, C a D:

$$\begin{aligned} Be^{-\kappa a} + Ce^{+\kappa a} &= Ae^{-\kappa a} \\ Be^{-\kappa a} - Ce^{+\kappa a} - Ae^{-\kappa a} &= Ae^{-\kappa a}\Lambda/\kappa \\ Be^{\kappa a} + Ce^{-\kappa a} &= De^{-\kappa a} \\ -De^{-\kappa a} - (Be^{\kappa a} - Ce^{-\kappa a}) &= \Lambda De^{-\kappa a}/\kappa \end{aligned} \tag{F.14}$$

Z prvých dvoch rovníc (F.14) vyjadríme

$$B = A\left(1 + \frac{\Lambda}{2\kappa}\right), \qquad C = -A\frac{\Lambda}{2\kappa}e^{-2\kappa a} \tag{F.15}$$

Vydeľme prvú z týchto rovníc druhou:

$$\frac{B}{C} = -\frac{2\kappa + \Lambda}{\Lambda}e^{+2\kappa a} \tag{F.16}$$

Z druhých dvoch rovníc (F.14) dostaneme dve rovnice

$$B = -D\frac{\Lambda}{2\kappa}e^{-2\kappa a}, \qquad C = D\left(1 + \frac{\Lambda}{2\kappa}\right) \tag{F.17}$$

a po ich vydelení

$$\frac{B}{C} = -\frac{\Lambda}{2\kappa + \Lambda}e^{-2\kappa a} \tag{F.18}$$

Obe rovnice (F.16) a (F.18) musia byť splnené súčasne, čo je možné len vtedy, ak $B^2 = C^2$, teda ak

$$C = \pm B \tag{F.19}$$

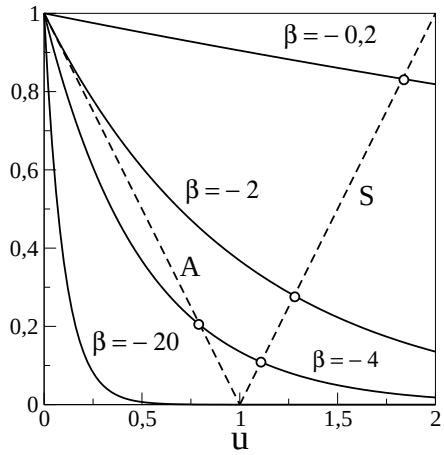
Kladné znamienko zodpovedá symetrickému riešeniu. Naozaj, ak $B = C$, potom aj $A = D$ a pre vlnovú funkciu platí $\Psi(x) = \Psi(-x)$. Podobne, ak $B = -C$, potom aj $A = -D$ a $\Psi(x) = -\Psi(-x)$.

Riešme najprv symetrický prípad $B = C$. Z rovnice (F.16) dostaneme transcendentnú rovnicu pre neznámu κ

$$\frac{2\kappa + \Lambda}{\Lambda} = -e^{-2\kappa a} \tag{F.20}$$

Pred jej riešením ešte zavedieme bezrozmerné veličiny β a u vzťahmi

$$\beta = 2a\Lambda, \qquad 2\kappa a = \frac{|\beta|u}{2}, \quad \text{teda} \quad u = \frac{4\kappa a}{|\beta|} = \frac{2\kappa}{|\Lambda|} \tag{F.21}$$



Obr. F.1. Grafické riešenie rovníc (F.22) a (F.23). Plné čiary zodpovedajú exponenciálnej funkcii $e^{-|\beta|u/2}$ pre tri hodnoty parametra $\beta = -20, \ -4, \ -2$ a $\beta = -0{,}2$. Prerušované čiary zodpovedajú funkciám $1-u$ (priamka A) a $u-1$ (priamka S). Priesečník plnej čiary a priamky S určí symetrické riešenie rovnice (F.22) pre danú hodnotu β. Podobne priesečník plnej čiary a priamky A určí antisymetrické riešenie rovnice (F.23). Z obrázku je vidieť, že rovnica (F.22) má vždy riešenie, zatiaľ čo rovnica (F.23) má riešenie len pre $\beta < -2$. Všimnime si, že symetrickému riešeniu zodpovedá väčšia hodnota u ako antisymetrickému. Preto je energia daná rovnicou (F.24) nižšia pre symetrický stav, ako pre antisymetrický.

Z rovnice (F.20) dostaneme rovnicu pre bezrozmerný parameter u:

$$e^{-|\beta|u/2} = u - 1 \tag{F.22}$$

Tým istým postupom dostaneme pre antisymetrický stav, $B = -C$, rovnicu

$$e^{-|\beta|u/2} = 1 - u \tag{F.23}$$

Podobne ako pre pravouhlú potenciálovú jamu, je parameter β jediným parametrom, ktorý charakterizuje systém. Energia viazaných stavov je

$$E_b = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda^2 u_b^2}{4}. \tag{F.24}$$

kde u_b je riešenie rovnice (F.22) pre symetrický stav alebo rovnice (F.23) pre antisymetrický stav.

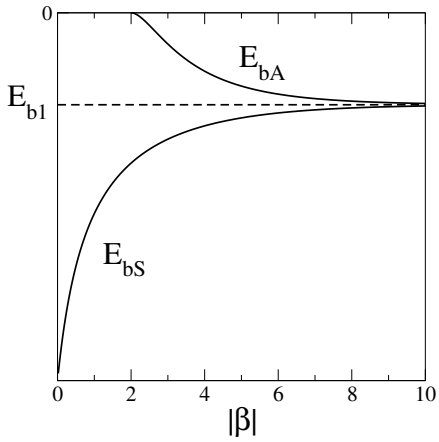
Rovnice (F.22) a (F.23) budeme riešiť graficky. Na obrázku F.1 vidíme, že energia symetrického stavu E_{bS} je nižšia ako energia antisymetrického stavu E_{bA}, pretože pre symetrický stav je $u_b > 1$, zatiaľ čo pre antisymetrický stav je $u_b < 1$. Základným stavov dvojstavového systému je preto symetrický viazaný stav s energiou E_{bS}. Pre nás je dôležité, že energia symetrického stavu je vždy nižšia, ako energia E_{b1} zodpovedajúca jedinej potenciálovej jame[3] zatiaľ čo energia antisymetrického stavu je vyššia:

$$E_{\mathrm{bS}} \ < \ E_{\mathrm{b1}} \ < \ E_{\mathrm{bA}} \tag{F.26}$$

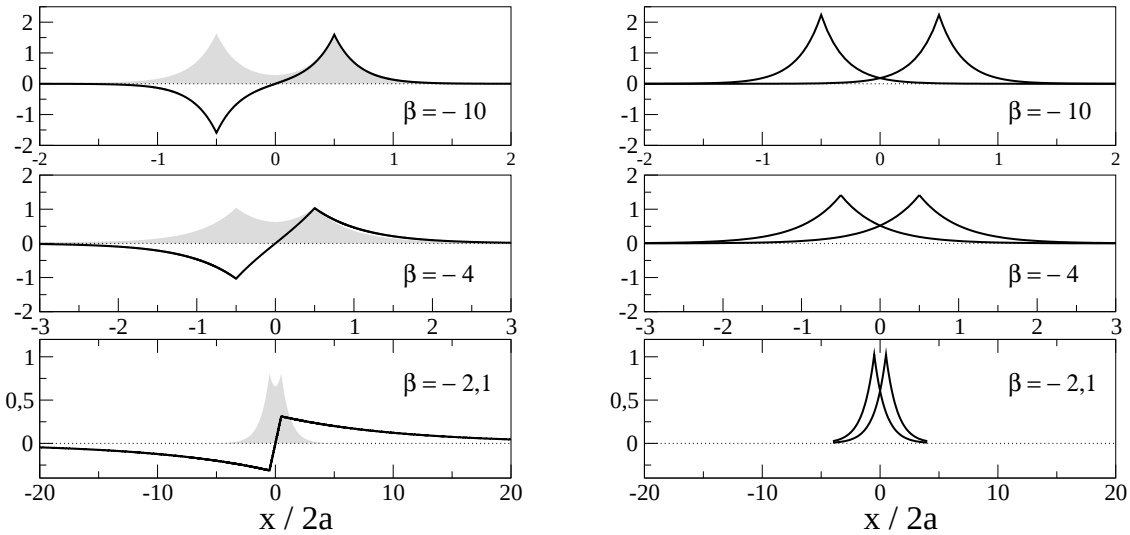
[3]Energia viazaného stavu v jednej potenciálovej jame,

$$E_{b1} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Lambda^2}{4}. \tag{F.25}$$

je daná rovnicou (F.11).



Obr. F.2. Energie viazaných stavov systému dvoch δ-funkčných potenciálových jám. Rozdiel energií rastie, keď pre konštantnú hodnotu $|\Lambda|$ zmenšujeme vzdialenosť jám. Nižšia energia E_{bS} zodpovedá základnému stavu (stavu s najnižšou energiou) systému. Táto energia je nižšia, ako je energia viazaného stavu na jednej δ-funkčnej potenciálovej jame E_{b1} (vyznačená prerušovanou čiarou). Vyššia energia E_{bA} zodpovedá antisymetrickému stavu. S klesajúcou hodnotou $|\beta|$ energia E_{bA} rastie, až pre $|\beta| = 2$ dosiahne nulu. Pre menšie hodnoty $|\beta| < 2$ antisymetrický stav neexistuje.



Obr. F.3. Ľavý obrázok ukazuje vlnovú funkciu (symetrickú a antisymetrickú) pre dvojicu δ-funkčných jám a pre tri hodnoty parametra β. Vzdialenosť jám je $2a$, mení sa hĺbka jám $|\Lambda|$. Antisymetrický stav (hrubá čiara) je stále širší, keď $\beta \to -2$. Symetrický stav je vyznačený šedou plochou pod vlnovou funkciou. Pre porovnanie sú na pravom obrázku ukázané vlnové funkcie zodpovedajúce dvom izolovaným δ-funkčným jamám. Všimnite si, ako narastá prekryv vlnových funkcií keď $|\beta|$ klesá.

Väzba medzi dvoma potenciálovými jamami teda vedie k zníženiu energie základného stavu. Toto zníženie je vlastnosťou všetkých dvojstavových systémov.

Veľké hodnoty $|\beta|$ znamenajú alebo veľmi silnú potenciálovú jamu (veľké hodnoty $|\Lambda|$), alebo veľkú vzájomnú vzdialenosť $\ell = 2a$ jám. Je pozoruhodné, že dva parametre modelu – Λ a ℓ – určujú výsledný stav len hodnotou svojho súčinu.

Zvoľme teraz fixnú hodnotu Λ a pozrime sa, ako sa riešenie mení so zmenou vzdialenosti $\ell = 2a$ medzi potenciálovými jamami. Pre veľké hodnoty ℓ sú jamy ďaleko od seba – v podstate

o sebe nevedia. V izolovaných jamách je kvantová častica viazaná s energiou E_{b1}, danou rovnicou (F.11). Je jedno, v ktorej jame sa častica nachádza. Táto limita zodpovedá limite $|\beta| \to \infty$ na obrázku F.2.

Ak sa jamy k sebe približujú, $|\beta|$ klesá. Vďaka kvantovému tunelovaniu môže častica prechádzať z jednej jamy do druhej. To vedie k zníženiu energie základného stavu. Z obrázku F.2 naozaj vidíme, že energia základného (symetrického) stavu prudko klesá, keď $|\beta|$ klesá. Naopak, energia druhého viazaného stavu (antisymetrického) narastá, až dosiahne nulovú hodnotu pre $|\beta| = 2$. Fyzikálne vysvetlenie zániku tohto viazaného stavu nájdeme z obrázku F.1. Vidíme, že ak sa hodnota β blíži k hodnote -2, zodpovedajúce riešenie u sa blíži k nule. Pretože $\kappa\ell = u|\beta|/2$ (druhá rovnica F.21), bude exponenciálny pokles vlnovej funkcie v tomto stave stále pomalší. Pre $\beta = -2$ je $\kappa = 0$ a z viazaného antisymetrického stavu sa stáva stav voľný. Symetrická a antisymetrická vlnová funkcia je ukázaná na obrázku F.3.

Podobnú analýzu môžeme urobiť pre zvolenú vzdialenosť ℓ medzi jamami, keď budeme meniť hodnotu Λ. Veľké hodnoty $|\beta|$ teraz zodpovedajú hlbokej potenciálovej jame – častica je silno viazaná a jej vlnová funkcia rýchlo klesá na nulu. Preto, ak je častica viazaná v jednej jame, nevidí druhú jamu a jej energia zodpovedá energii E_{b1}. S poklesom hodnoty $|\Lambda|$ hĺbka jamy klesá a oblasť, ktorú viazaná častica „navštevuje", sa rozširuje. Rastie preto pravdepodobnosť jej tunelovania do druhej jamy. Energia základného stavu systému sa preto štiepi tým istým spôsobom, ako v predchádzajúcom odstavci.

G Inverzný priestor (k-priestor)

V mnohých fyzikálnych problémoch študujeme stojaté vlny v uzavretom trojrozmernom priestore tvaru kocky $\ell \times \ell \times \ell$. V tomto texte potrebujeme stojaté vlny pri štúdiu elektromagnetických vĺn v dutine (časť 1.2), elektrónových stavov v trojrozmernej nekonečnej potenciálovej jame (časť 3.3) a vibračných módov kryštálov (časť 10.3). Pre všetky tieto, na prvý pohľad rozličné fyzikálne problémy je typické kvantovanie zložiek vlnového vektora $\vec{k}$, dané konečným rozmerom ℓ vzorky.

Nájdime všetky stojaté vlny, ktoré môžu vo vzorke tvaru kocky existovať. Pretože vlna musí byť nulová na hranici vzorky, musí mať tvar

$$A(x,y,z) = A_0 \sin\left(\frac{\pi}{\ell} n_x x\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell} n_y y\right) \sin\left(\frac{\pi}{\ell} n_z z\right) \tag{G.1}$$

kde n_x, n_y a n_z sú celé kladné čísla. Vlna je preto charakterizovaná troma zložkami vlnového vektora $\vec{k}$, ktorého súradnice sú

$$k_x = \frac{\pi}{\ell} n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{\ell} n_y, \quad k_z = \frac{\pi}{\ell} n_z \tag{G.2}$$

Môžeme preto definovať trojrozmerný priestor s osami k_x, k_y a k_z, v ktorom každému bodu zodpovedá vlnový vektor $\vec{k}$, ktorý jednoznačne určuje stav častice. Takýto priestor budeme volať k-priestor. V našom prípade zodpovedajú povoleným stavom častice len diskrétne body dané vzťahmi (3.28). Všimnime si, že v objeme k-priestoru

$$\Delta V_k = \left(\frac{\pi}{\ell}\right)^3 \tag{G.3}$$

sa nachádza vždy práve jeden možný stav. Naozaj, z rovnice (G.2) plynie, že minimálna vzdialenosť dvoch susedných povolených stavov v ľubovoľnom smere je π/ℓ.

Pojem k-priestoru je užitočný v mnohých fyzikálnych aplikáciách. My sa s ním stretneme pri žiarení absolútne čierneho telesa (časť 1.2), pri vyšetrovaní elektrónov v kove (časť 3.4) a pri výpočte merného tepla kryštálov v časti 10.3.2. Vo všetkých troch problémoch vychádzame z predstavy vĺn uväznených v konečnom objeme vzorky, a potrebujeme poznať, koľko vĺn s vlnovým vektorom rovným alebo menším ako k sa v objeme môže vyskytovať. Napriek tomu, že ide o rôzne fyzikálne problémy, je odpoveď na túto otázku je univerzálna.[4]

Stavy s hodnotou vlnového vektora menšou, ako je zvolená hodnota k zaberajú v k-priestore objem

$$V_k = \frac{1}{8} \times \frac{4}{3}\pi k^3 \tag{G.4}$$

(faktor 1/8 zodpovedá tomu, že hodnoty k musia byť kladné). Preto sa počet dovolených stavov rovná

$$N(k) = \frac{V_k}{\Delta V_k} = \frac{1}{6}\frac{\ell^3}{\pi^2}k^3 \tag{G.5}$$

pretože, v súlade s rovnicou (G.3) každý stav zaberá v k-priestore objem ΔV_k. Definujme počet stavov v k priestore ako počet stavov, ktoré majú hodnotu k-vektora v intervale medzi k a $k + \mathrm{d}k$:

$$n(k)\mathrm{d}k \; = \frac{\partial N(k)}{\partial k}\mathrm{d}k \; = \frac{\ell^3}{2\pi^2}k^2\mathrm{d}k \tag{G.6}$$

Vidíme, že počet týchto stavov je úmerný objemu telesa. Často je výhodné uvažovať počet stavov na jednotku objemu,

$$\rho(k)\mathrm{d}k \; = \frac{n(k)}{\ell^3}\mathrm{d}k \; = \frac{k^2}{2\pi^2}\mathrm{d}k \tag{G.7}$$

Rovnica (G.7) je východiskovým vzťahom pre výpočet hustoty energetických stavov. Ako uvidíme neskôr, hustota $\rho(k)$ závisí od dimenzie systému.

Degenerácia

V konkrétnom fyzikálnom systéme môže existovať viacero vĺn s tým istým vlnovým vektorom $\vec{k}$. Definujme preto degeneráciu $g(k)$ ako počet možných stavov s tou istou hodnotou $\vec{k}$. Funkcia $g(k)$ môže vo všeobecnosti byť komplikovanou funkciou vlnového vektora. My sa stretneme len s prípadmi, keď $g(k)$ je konštanta. Napríklad pre elektromagnetické vlny $g(k) = 2$, pretože pre každú hodnotu vlnového vektora existujú dve vlny s rôznou polarizáciou. Pre vibračné vlny v kryštáloch je $g(k) = 3$, pretože pre každú hodnotu k sa kryštálom môžu šíriť dve priečne vlny a jedna pozdĺžna (obrázok 10.2). Elektróny v kove sa môžu líšiť orientáciou svojho spinu, preto $g(k) = 2$.

[4] Jednotlivé modely sa však líšia hustotou energetických stavov, pretože vzťah medzi energiou a vlnovým vektorom je iný pre fotóny a iný pre elektróny.

G.1 Odvodenie vzťahu (1.15)

V úvodnej kapitole sme sa zaoberali žiarením absolútne čierneho telesa. Odvodíme vzťah pre hustotu stavov $\rho(\nu)$ daný rovnicou (1.15). Pretože elektromagnetická vlna môže mať dve polarizácie, každej hodnote vlnového vektora $\vec{k}$ prislúchajú dve rôzne vlny a teda $g(k) = 2$. Veličina

$$n(\nu)\mathrm{d}\nu \tag{G.8}$$

definuje počet možných elektromagnetických vĺn s frekvenciou v intervale ν,$\nu + \mathrm{d}\nu$ a veličina

$$\rho(\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{1}{\ell^3} n(\nu)\mathrm{d}\nu \tag{G.9}$$

definuje počet možných elektromagnetických vĺn s frekvenciou v intervale ν,$\nu + \mathrm{d}\nu$ v jednotke objemu. Východiskom pre jej nájdenie je vzťah medzi počtom stavov charakterizovaných vlnovým vektorom k a frekvenciou ν,

$$\rho(\nu)\mathrm{d}\nu = g(k)\rho(k)\mathrm{d}k \tag{G.10}$$

V prípade elektromagnetických vĺn je degenerácia $g(k) = 2$, pretože každá elektromagnetická vlna s vlnovým vektorom $\vec{k}$ môže mať práve dve polarizácie (pozri obrázok 1.1).

Vzťah (G.10) platí pre ľubovoľnú funkciu $\nu = \nu(k)$. Pre elektromagnetické vlny máme disperzný vzťah $\nu = c/\lambda = \frac{ck}{2\pi}$, z ktorého nájdeme

$$k = \frac{2\pi}{c}\nu, \quad \text{a} \quad \mathrm{d}k = \frac{2\pi}{c}\mathrm{d}\nu \tag{G.11}$$

Z rovnice (G.10) potom dostaneme

$$\rho(\nu)\mathrm{d}\nu = g(k)\rho(k)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\nu}\mathrm{d}\nu = 2\frac{(2\pi)^3}{c^3}\frac{\nu^2\mathrm{d}\nu}{2\pi^2} = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2\mathrm{d}\nu \tag{G.12}$$

čo je vzťah (1.15).

G.2 Hustota elektrónových stavov (rovnica 3.34)

V časti 3.4.1 sme odvodili hustotu energetických stavov pre elektróny v trojrozmernom systéme. veličina $\rho(E)\mathrm{d}E$ definuje počet povolených stavov s energiou v intervale $E, E + \mathrm{d}E$. Nájdeme ju zo vzťahu

$$\rho(E)\mathrm{d}E = g(k)\rho(k)\mathrm{d}k \tag{G.13}$$

funkcia kde $g(k)$ definuje degeneráciu stavu s vlnovým vektorom $\vec{k}$. V prípade elektrónov v kove je $g(k) = 2$, pretože pre každú hodnotu vektora $\vec{k}$ máme dva elektrónové stavy, ktoré sa líšia orientáciou spinu elektrónu.

Hustota stavov $\rho(E)$ v jednorozmernom elektrónovom plyne

Hustota stavov elektrónov $\rho(E)$ závisí od dimenzie systému. Ukážeme túto závislosť na výpočte hustoty stavov jednorozmerného elektrónového plynu. Najprv nájdeme hustotu $\rho(k)$ pre jednorozmerný systém. Každý stav zaberá v jednorozmernom k-priestore „objem"

$$\Delta V_k = \frac{\pi}{\ell} \tag{G.14}$$

Počet povolených hodnôt vlnového vektora, menších ako k, je preto

$$N(k) = \frac{k}{\Delta V_k} = \frac{\ell}{\pi} k \tag{G.15}$$

Je teda

$$n(k)\mathrm{d}k = \frac{\partial N(k)}{\partial k}\mathrm{d}k = \frac{\ell}{\pi}, \qquad \rho(k)\mathrm{d}k = \frac{n(k)}{\ell}\mathrm{d}k = \frac{1}{\pi}\mathrm{d}k \tag{G.16}$$

a hustota stavov

$$\rho(E)\mathrm{d}E = 2\rho(k)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\,\mathrm{d}E = \frac{2}{\pi}\frac{\partial k}{\partial E} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{E}}\mathrm{d}E \tag{G.17}$$

Všimnite si, že hustota stavov diverguje pre $E \to 0$. Takáto divergencia hustoty stavov je typická pre všetky jednorozmerné systémy. Dôležité je uvedomiť si, ako hustota stavov závisí od dimenzie systému. Pre trojrozmerný systém sme dostali $\rho(E) \propto E^{+1/2}$, zatiaľ čo pre jednorozmerný systém $\rho(E) \propto E^{-1/2}$.

H Prechodová matica pre pravouhlú potenciálovú bariéru

Odvoďme explicitný tvar prechodovej matice pre pravouhlú potenciálovú bariéru v prípade, kedy energia častice je väčšia, ako výška potenciálu $E > V_0 > 0$. Vlnovú funkciu v jednotlivých oblastiach v tvare

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_{\mathrm{I}}(x) &= Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < -a \\ \Phi_{\mathrm{II}}(x) &= Fe^{+ik'x} + Ge^{-ik'x} & -a < x < +a \\ \Phi_{\mathrm{III}}(x) &= Ce^{+ikx} + De^{-ikx} & +a < x \end{cases} \tag{H.1}$$

Vlnová funkcia aj jej prvá derivácia musia byť spojité na hranici potenciálovej jamy. Preto v bode $x = -a$ musí platiť

$$\begin{array}{rrcrr} e^{-ika}A & +e^{+ika}B & = & e^{-ik'a}F & +e^{+ik'a}G \\ ke^{-ika}A & -ke^{+ika}B & = & k'e^{-ik'a}F & -k'e^{+ik'a}G \end{array} \tag{H.2}$$

a v bode $x = a$ musí platiť

$$\begin{array}{rrcrr} e^{+ika}C & +e^{-ika}D & = & e^{+ik'a}F & +e^{-ik'a}G \\ ke^{+ika}C & -ke^{-ika}D & = & k'e^{+ik'a}F & -k'e^{-ik'a}G. \end{array} \tag{H.3}$$

Rovnice sú ekvivalentné rovniciam (4.8) a (4.9), ktoré sme riešili v časti 4.1. Vynásobme prvú rovnicu (H.2) vlnovým vektorom k' a dve rovnice (H.2) najprv sčítajme a potom odčítajme. Dostaneme amplitúdy F a G vyjadrené pomocou amplitúd A a B:

$$\begin{aligned} 2k'e^{-ik'a}F &= (k'+k)e^{-ika}A \quad +(k'-k)e^{+ika}B \\ 2k'e^{+ik'a}G &= (k'-k)e^{-ika}A \quad +(k'+k)e^{+ika}B. \end{aligned} \tag{H.4}$$

Podobne vynásobme prvú rovnicu (H.3) vlnovým vektorom k a vyjadrime súčet a rozdiel oboch rovníc (H.3). Nájdeme tak C a D pomocou F a G:

$$\begin{aligned} 2ke^{+ika}C &= (k+k')e^{+ik'a}F \quad +(k-k')e^{-ik'a}G \\ 2ke^{-ika}D &= (k-k')e^{+ik'a}F \quad +(k+k')e^{-ik'a}G. \end{aligned} \tag{H.5}$$

Dosaďme teraz za F a G z rovníc (H.4) do rovníc (H.5) a dostaneme

$$\begin{aligned} Ce^{ika} &= T_{11}Ae^{-ika} \quad +T_{12}Be^{ika} \\ De^{-ika} &= T_{21}Ae^{-ika} \quad +T_{22}Be^{ika} \end{aligned} \tag{H.6}$$

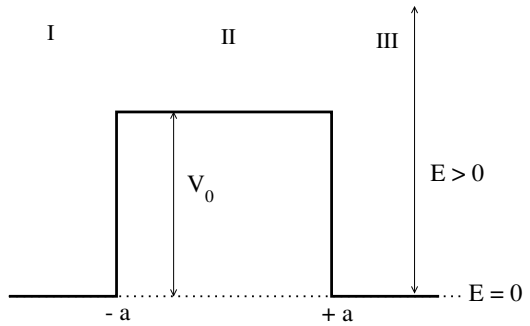
kde

$$\begin{aligned} T_{11} &= \cos 2k'a \quad +\frac{i}{2}\left(\frac{k}{k'}+\frac{k'}{k}\right)\sin 2k'a \\ T_{12} &= \qquad\qquad +\frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k}-\frac{k}{k'}\right)\sin 2k'a, \end{aligned} \tag{H.7}$$

a

$$\begin{aligned} T_{22} &= \cos 2k'a \quad -\frac{i}{2}\left(\frac{k}{k'}+\frac{k'}{k}\right)\sin 2k'a \\ T_{21} &= \qquad\qquad -\frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k}-\frac{k}{k'}\right)\sin 2k'a. \end{aligned} \tag{H.8}$$

sú prvky prechodovej matice **T**.



Obr. H.1. Pravouhlá potenciálová bariéra. Prichádzajúca častica má kladnú energiu $E > V_0$.

I Pravdepodobnosť prechodu častice cez zložitejšie sústavy

V kapitole 4 sme odvodili koeficient prechodu kvantovej častice cez pravouhlú potenciálovú bariéru a cez jednoduché kombinácie pravouhlých bariér. Ak potrebujeme nájsť koeficient prechodu cez potenciálovú bariéru zložitejšieho tvaru, musíme použiť alebo numerické metódy, alebo približné metódy výpočtu. V tejto časti ukážeme najprv jednoduchú metódu numerického výpočtu koeficientu prechodu a odrazu, založenú na metóde prechodovej matice.

Základom numerickej metódy je aproximácia potenciálu $V(x)$ po častiach konštantnou funkciou (obrázok I.1). Ľubovoľný potenciál tak môžeme nahradiť postupnosťou potenciálových schodov a úsekov s konštantným potenciálom. Pretože prechodovú maticu pre potenciálový schod aj pre konštantný potenciál poznáme, môžeme zostrojiť prechodovú maticu pre celú bariéru ako súčin prechodových matíc pre jednotlivé rozhrania a pre úseky s konštantným potenciálom

$$\mathbf{T} = \prod_i \mathbf{T}^s_{N+1}\mathbf{T}^0_N\mathbf{T}^s_N \dots \mathbf{T}^s_2\mathbf{T}^0_1\mathbf{T}^s_1 \tag{I.1}$$

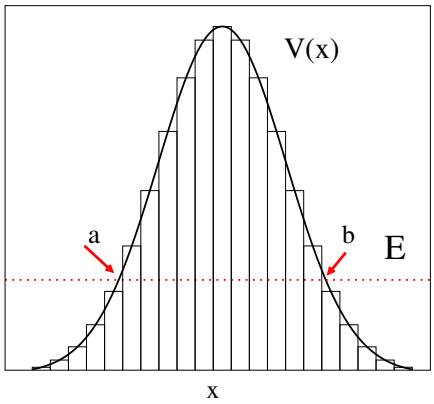
kde $\mathbf{T}^s$ je prechodová matice potenciálového schodu a $\mathbf{T}^0$ je prechodová matica pre úsek s konštantným potenciálom,

$$\mathbf{T}^s_n = \frac{1}{2k_{n+1}}\begin{pmatrix} k_{n+1}+k_n & k_{n+1}-k_n \\ k_{n+1}-k_n & k_{n+1}+k_n \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{T}^0_n = \begin{pmatrix} e^{ik_n\Delta} & 0 \\ 0 & e^{-ik_n\Delta} \end{pmatrix} \tag{I.2}$$

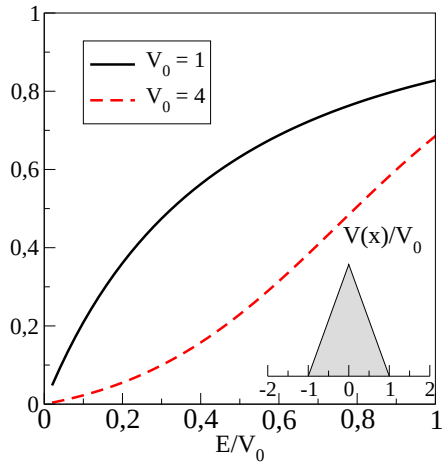
Vlnový vektor k_n je na každom úseku iný:

$$k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)} \tag{I.3}$$

a je reálny na úsekoch, kde $E > V_n$ a imaginárny na úsekoch, kde $E < V_n$.



Obr. I.1. Približný výpočet pravdepodobnosti prechodu cez zložitejšiu bariéru. Potenciál $V(x)$ aproximujeme po častiach konštantným potenciálom tak, ako aproximujeme funkciu pri numerickom výpočte integrálov. Energia E prichádzajúcej častice je znázornená bodkovanou čiarou. Šípky ukazujú body návratu, v ktorých sa potenciál rovná energii častice: $V(x = a) = E$ a $V(x = b) = E$. Klasická častica, prichádzajúca zľava, by sa po dosiahnutí bodu $x = a$ vrátila spať. Podobne, ak by klasická častica prichádzala sprava, prenikla by len po bod $x = b$. Parameter k_n, definovaný rovnicou (I.3), je reálny pre $x < a$ a $x > b$ a má rýdzo imaginárnu hodnotu pre $a < x < b$.



Obr. I.2. Koeficient prechodu cez trojuholníkový potenciál, vypočítaný metódou prechodovej matice ako funkcia energie častice ($E < V_0$). Interval, v ktorom bol potenciál nenulový, sme rozdelili na $N = 100$ malých intervalov a našli koeficient prechodu daný rovnicou (I.4).

Koeficient prechodu je potom

$$T = \frac{1}{|T_{22}|^2} \tag{I.4}$$

Metóda pracuje rýchlo a spoľahlivo, s výnimkou prípadov, keď náhodou na niektorom úseku $E = V_n$ (pozri príklad 4.7). Ako príklad použitia metódy je na obrázku I.2 ukázaný koeficient prechodu pre dve rôzne trojuholníkové bariéry vypočítaný delením oblasti na $N = 100$ častí, a nahradením potenciálu v každom intervale pravouhlým potenciálom.

I.1 Približný výpočet pravdepodobnosti tunelovania. WKB priblíženie

Z výpočtu koeficientu prechodu je vidieť, prečo ho musíme počítať numericky. Matica $\mathbf{T}^s$ daná rovnicou (I.2) totiž nie je diagonálna. Maticový prvok T_{22} je preto súčtom 2^N rôznych príspevkov. Výpočet však môžeme zjednodušiť, ak v maticiach $\mathbf{T}^s_n$ definovaných rovnicou (I.2) zanedbáme rozdiel vlnových vektorov

$$k_{n+1} - k_n \approx 0 \tag{I.5}$$

Tým sa z matíc $\mathbf{T}^s_n$ stanú jednotkové matice, a maticový prvok T_{22} sa nájde ľahko:

$$T_{22} = \prod_n e^{-ik_n\Delta} \tag{I.6}$$

Pre koeficient prechodu potom stačí vypočítať súčin

$$T = \frac{1}{|T_{22}|^2} = \prod_n^N |\exp ik_n\Delta|^2 \tag{I.7}$$

Členy v súčine na pravej strane sú rovné jednej, ak úsek n leží naľavo od bodu a alebo napravo od bodu b, pretože vtedy je k_n reálne. Ak však n-tý interval leží medzi bodmi a a b, potom

$E < V_n$ a na pravej strane rovnice (I.7) dostaneme $\exp[-2\kappa_n]\Delta < 1$. Súčin všetkých takýchto členov dá

$$T = \exp\left[-2\sum_n{}' \kappa_n \Delta\right] = \exp\left[-2\int_a^b \mathrm{d}x\kappa(x)\right] \tag{I.8}$$

Hranice integrovania na pravej strane rovnice (I.11), a a b, sa nazývajú body návratu. Sú to body, z ktorých by sa vrátila klasická častica s energiou E, ktorá by sa pokúsila prekonať potenciálovú bariéru $V(x)$ (pozri obrázok I.1). Z definície vyplýva, že platí

$$V(x = a) = V(x = b) = E \tag{I.9}$$

Po dosadení za $\kappa(x)$

$$\kappa_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_n - E)} \tag{I.10}$$

dostaneme približné vyjadrenie koeficientu prechodu

$$T = \exp\left[-2\int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]}\right] \tag{I.11}$$

Tento vzťah je známy ako semiklasické WKB priblíženie. WKB je skratka mien troch autorov metódy: G. Wentzel, H. A. Kramers, L. Brillouin. Podrobne je opísaná v učebnici [10]. Podobne ako pre výpočet pravdepodobnosti prechodu, môžeme sformulovať aj WKB metódu na približný výpočet vlastných energií viazaných stavov, ktorou sa budeme zaoberať v nasledujúcej časti J. V optike je analógiou metódy WKB metóda eikonálu [30].

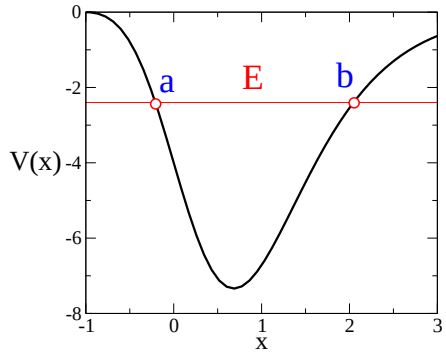
Z odvodenia rovnice (I.11) vidíme, prečo je WKB metóda len približná: pri jej odvodení sme totiž predpokladali, že častica sa počas tunelovania ani raz neodrazí (prechodovú maticu pre potenciálový schod sme nahradili jednotkovou maticou). Vlnová funkcia vo vnútri bariéry preto pozostáva len z jediného člena, ktorý exponenciálne klesá zľava doprava. Tvar potenciálu teda ovplyvňuje len rýchlosť exponenciálneho poklesu koeficientu transmisie v danom mieste.

Napriek tomuto zjednodušeniu je WKB priblíženie silným nástrojom pre štúdium tunelových prechodov v jadrovej fyzike a v mikroelektronike. Z jej odvodenia môžeme predpokladať, že bude tým lepšia, čím sa potenciál $V(x)$ mení pomalšie, pretože pre pomaly sa meniaci potenciál je aproximácia (I.5) vhodnejšia. WKB metóda by však zlyhala pri výpočte koeficientu prechodu cez akékoľvek dve bariéry (pozri napríklad časť 4.6) alebo cez pravouhlú potenciálovú jamu. To vidíme už z toho, že koeficient prechodu v rámci WKB nikdy nedosiahne hodnotu 1, pretože WKB neuvažuje možnosť, že sa častica vo vnútri bariéry odrazí.

WKB priblíženie sme odvodili len pre jednorozmerný prípad. Pre reálne fyzikálne systémy (napríklad α-rozpad jadier) by sme potrebovali trojrozmernú formuláciu teórie, ktorú čitateľ nájde napríklad v učebnici [4].

J WKB metóda výpočtu viazaných stavov

Podobne ako pre tunelovanie kvantovej častice cez potenciálovú bariéru, poznáme aj WKB priblíženie, ktoré umožňuje nájsť približné hodnoty vlastných energií viazaných stavov v systéme s



Obr. J.1. Body návratu pre potenciálovú jamu. Pre každú potenciálnu energiu $V(x)$ a pre každú energiu E vieme nájsť body a a b také, že $V(a) = V(b) = E$. Tieto body voláme body návratu, pretože zodpovedajú najvzdialenejším bodom, kam sa v potenciálovej jame môže dostať *klasická* častica.

potenciálnou energiou $V(x)$. Uvedieme len fyzikálne argumenty, ktoré vedú k WKB priblíženiu. Jeho presné odvodenie nájde čitateľ napríklad v učebnici [10].

Vlastné energie viazaných stavov kvantovej častice v potenciálovej jame definovanej potenciálnou energiou $V(x)$ sme hľadali v kapitolách 4, 5, 6 a 8 pre konkrétny tvar potenciálnej energie $V(x)$. Vo všetkých citovaných príkladoch sem našli, že vlnová funkcia základného stavu nemá nulový bod. Vlnová funkcia n-tého stavu má presne o jeden nulový bod viac, ako vlnová funkcia predchádzajúceho $(n-1)$-vého stavu. Dá sa ukázať, že táto zákonitosť platí pre každú potenciálovú jamu.

Na obrázku J.1 vidíme potenciálovú jamu $V(x)$ s bodmi návratu a a b. Definujme zmenu fázy vlnovej funkcie v bodoch návratu vzťahom

$$\Phi_n(b) \propto e^{i\phi_n}\Phi_n(a) \tag{J.1}$$

kde C_n je reálne číslo. Pretože v oblastiach mimo potenciálovej jamy, $x < a$ a $x > b$, vlnová funkcia nemôže oscilovať, musí mať n-tá vlnová funkcia medzi bodmi a a b presne $n-1$ nulových bodov. To je možné len vtedy, ak pre zmenu fázy vlnovej funkcie medzi bodmi a a b platí

$$\phi_n = [n + \alpha_n]\,\pi \tag{J.2}$$

s neznámymi konštantami $0 < \alpha_n < 1$. Fázu $\phi_{ab}^{(n)}$ odhadneme zo vzťahu $\Phi_n(b) = \mathbf{T}_{ba}\Phi_n(a)$. Prechodovú maticu $\mathbf{T}_{ba}$ môžeme vyjadriť tak ako v predchádzajúcej časti v tvare súčinu (I.1). Ak opäť nahradíme všetky prechodové matice $\mathbf{T}^s$ pre potenciálový schod jednotkovými maticami, dostaneme

$$\Phi_n(b) = \prod_\alpha e^{ik_\alpha}\Phi_n(a) = \exp\left[i\int_a^b \mathrm{d}x k(x)\right]\Phi_n(a) \tag{J.3}$$

kde $k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E_n - V(x)]}$. Porovnaním s rovnicou (J.1) dostaneme

$$\phi_n = \int_a^b \mathrm{d}x\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\,[E_n - V(x)]} \tag{J.4}$$

a rovnicu (J.2) prepíšeme do tvaru

$$\int_a^b \mathrm{d}x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E_n - V(x)]} = [n + \alpha_n]\,\pi \tag{J.5}$$

Ak do rovnice (J.5) dosadíme potenciálnu energiu harmonického oscilátora $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ a za energie $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, dostaneme po integrovaní, že všetky konštanty $\alpha_n = 1/2$. Pretože harmonický oscilátor je dobrým priblížením mnohých potenciálových jám, môžeme približné hodnoty vlastných energií častice v potenciálovej jame $V(x)$ nájsť ako energie E_n, pre ktoré platí rovnica

$$\int_a^b \mathrm{d}x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E_n - V(x)]} = \left[n + \frac{1}{2}\right]\pi \tag{J.6}$$

Rovnica (J.6) definuje WKB priblíženie pre energie viazaných stavov kvantovej častice v potenciálovej jame definovanej potenciálom $V(x)$.

WKB priblíženie v bezrozmerných súradniciach

Predpokladajme, že problém je charakterizovaný typickou energiou V_0 (napríklad hĺbka potenciálovej jamy) a má charakteristickú dĺžkovú škálu ξ (napríklad šírku jamy). Zaveďme bezrozmernú premennú

$$y = x/\xi \tag{J.7}$$

a bezrozmerný parameter

$$\beta^2 = \frac{2m\xi^2 V_0}{\hbar^2} \tag{J.8}$$

a preškálujme energiu a potenciál:

$$E \to e = \frac{E}{V_0}, \qquad v(y) = \left.\frac{V(x)}{V_0}\right|_{x=\xi y} \tag{J.9}$$

Potom rovnicu (J.6) prepíšeme do tvaru

$$\beta \int_a^b \mathrm{d}y \sqrt{e_n - v(y)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi. \tag{J.10}$$

Jediným parametrom, ktorý do rovnice vstupuje, je bezrozmerný parameter β. Veľké hodnoty β zodpovedajú klasickej limite (veľká hmotnosť m častice, alebo limita $\hbar \to 0$). Preto očakávame, že WKB bude tým presnejšou aproximáciou, čím je β väčšie. Nebude ale dobrá pre úzke potenciálové jamy (malé hodnoty ξ) ani pre plytké potenciálové jamy (malá hodnota V_0).

Z odvodenia plynie, že WKB aproximácia je presná pre harmonický oscilátor, a dá dobré priblíženie vlastných energií pre potenciálové jamy podobné harmonickému oscilátoru. Keďže harmonické priblíženie (pozri časť 5.3) je najpresnejšie v okolí minima potenciálnej energie a menej presné vo väčších vzdialenostiach od minima, očakávame, že WKB bude tým nepresnejšia,

čím vyššie energetické hladiny chceme nájsť.[5] Najpresnejšia bude pre odhad energie základného stavu.

Je treba zdôrazniť, že WKB priblíženie sa vôbec nehodí napríklad pre analýzu vlastných stavov v pravouhlej potenciálovej jame, ani iných problémov, v ktorých sa potenciálna energia mení v nejakom bode nespojite.

K Spin dvoch fermiónov

V časti 7.5 sme sa zaoberali spinovou vlnovou funkciou dvoch fermiónov. Našli sme, že fermióny môžu vytvoriť alebo symetrický triplet

$$\begin{aligned}
\chi(1,2)^1_1 &= \chi^+_z(1)\chi^+_z(2) && s=1 \quad s_z=1 \\
\chi(1,2)^1_0 &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi^+_z(1)\chi^-_z(2)+\chi^-_z(1)\chi^+_z(2)\right] && s=1 \quad s_z=0 \\
\chi(1,2)^1_{-1} &= \chi^-_z(1)\chi^-_z(2) && s=1 \quad s_z=-1
\end{aligned} \tag{K.1}$$

alebo antisymetrický singlet

$$\chi(1,2)^0_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi^+_z(1)\chi^-_z(2)-\chi^-_z(1)\chi^+_z(2)\right] \qquad s=0 \quad s_z=0 \tag{K.2}$$

V tomto dodatku nájdeme strednú hodnotu operátorov $\mathbf{S}^2$ a $\mathbf{S}_z$. Vyjadrime najprv operátor celkového spinu

$$\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{S}}_1 + \vec{\mathbf{S}}_2 \tag{K.3}$$

teda

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^2 &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\vec{\mathbf{S}}_1\cdot\vec{\mathbf{S}}_2 \\
&= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_{1x}\mathbf{S}_{2x} + 2\mathbf{S}_{1y}\mathbf{S}_{2y} + 2\mathbf{S}_{1z}\mathbf{S}_{2z}
\end{aligned} \tag{K.4}$$

Dva spinové operátory komutujú, pretože pôsobia na rôzne častice: operátor $\vec{\mathbf{S}}_n$ pôsobí len na vlnovú funkciu n-tej častice ($n = 1,2$). Pri výpočte si pomôžeme strednými hodnotami operátorov z tabuľky K.1. Napríklad v prvom riadku tabuľky K.1

$$\begin{aligned}
\chi^+_z(1)\ \chi^+_z(2)\ \mathbf{S}_{1z}\ \mathbf{S}_{2z}\ \chi^+_z(1)\ \chi^+_z(2) &= \left[\chi^+_z(1)\mathbf{S}_{1z}\chi^+_z(1)\right]\ \left[\chi^+_z(2)\mathbf{S}_{2z}\chi^+_z(2)\right] \\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned} \tag{K.5}$$

a v piatom riadku tej istej tabuľky

$$\begin{aligned}
\chi^+_z(1)\ \chi^-_z(2)\ \mathbf{S}_{1x}\ \mathbf{S}_{2x}\ \chi^-_z(1)\chi^+_z(2) &= \left[\chi^+_z(1)\ \mathbf{S}_{1x}\ \chi^-_z(1)\right]\ \left[\chi^-_z(2)\ \mathbf{S}_{2x}\chi^+_z(2)\right] \\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned} \tag{K.6}$$

[5] Na obrázkoch 4.4 a 5.1 vidíme, že vlnová funkcia vyšších stavov je širšia, ako nižších. Preto sú vyššie stavy citlivejšie na odchýlky potenciálovej jamy od harmonickej.

Tab. K.1. Stredné hodnoty spinových operátorov dvoch elektrónov v jednotlivých stavoch (K.1) a (K.2).

	operátor $\mathbf{A}$ =	$\mathbf{S}_1^2$	$\mathbf{S}_2^2$	$2\mathbf{S}_{1x}\mathbf{S}_{2x}$	$2\mathbf{S}_{1y}\mathbf{S}_{2y}$	$2\mathbf{S}_{1z}\mathbf{S}_{2z}$	$\mathbf{S}^2$
1	$\chi_z^+(1)\chi_z^+(2)\mathbf{A}\chi_z^+(1)\chi_z^+(2)$	$3\hbar^2/4$	$3\hbar^2/4$	0	0	$+2\hbar^2/4$	$2\hbar^2$
2	$\chi_z^-(1)\chi_z^-(2)\mathbf{A}\chi_z^-(1)\chi_z^-(2)$	$3\hbar^2/4$	$3\hbar^2/4$	0	0	$-2\hbar^2/4$	$2\hbar^2$
3	$\frac{1}{2}\chi_z^+(1)\chi_z^-(2)\mathbf{A}\chi_z^+(1)\chi_z^-(2)$	$3\hbar^2/8$	$3\hbar^2/8$	0	0	$-2\hbar^2/8$	$\hbar^2/2$
4	$\frac{1}{2}\chi_z^-(1)\chi_z^+(2)\mathbf{A}\chi_z^-(1)\chi_z^+(2)$	$3\hbar^2/8$	$3\hbar^2/8$	0	0	$-2\hbar^2/8$	$\hbar^2/2$
5	$\frac{1}{2}\chi_z^+(1)\chi_z^-(2)\mathbf{A}\chi_z^-(1)\chi_z^+(2)$	0	0	$2\hbar^2/8$	$2\hbar^2/8$	0	$\hbar^2/2$
6	$\frac{1}{2}\chi_z^-(1)\chi_z^+(2)\mathbf{A}\chi_z^+(1)\chi_z^-(2)$	0	0	$2\hbar^2/8$	$2\hbar^2/8$	0	$\hbar^2/2$

Pre výpočet strednej hodnoty $\langle\mathbf{S}^2\rangle$ v stave $\chi(1,2)_1^1$ sčítame príspevky z riadku (1), v stave $\chi(1,2)_{-1}^1$ sčítame príspevky z riadku (2). Strednú hodnotu $\langle\mathbf{S}^2\rangle$ v stave $\chi(1,2)_0^1$ získame sčítaním všetkých príspevkov v riadkoch (3-6). Strednú hodnotu $\langle\mathbf{S}^2\rangle$ v antisymetrickom stave $\chi(1,2)_0^0$ dostaneme, ak od príspevkov v riadkoch 3 a 4 odčítame príspevky v riadkoch 5 a 6 (výsledkom je, samozrejme, nula).

L Sférický harmonický oscilátor

Trojrozmerný harmonický osciátor kmitá vo všetkých troch smeroch x, y a z. Potenciálna energia

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{L.1}$$

závisí len od vzdialenosti od stredu r.

Riešme úlohu najprv v kartézskych súradniciach, kde poznáme vlastné energie

$$E = \hbar\omega(\frac{3}{2} + n_x + n_y + n_z) \tag{L.2}$$

kvantové čísla n_x, n_y a n_z rastú od 0. Príslušné vlnové funkcie pre niekoľko najnižších stavov sú uvedené v tabuľke L.1 (bez normalizácie, ktorá nie je v tomto okamihu dôležitá). Vidíme, že základný stav zodpovedá hodnotám troch kvantových čísiel $(0,0,0)$; prvý excitovaný stav je trikrát degenetovaný, druhý excitovaný stav je 6-krát degenerovaný.

Pretože ide o sféricky symetrický problém, môžeme úlohu riešiť aj vo sférických súradniciach tak, ako sme riešili aom vodíka. Vlnová funkcia sa napíše ako súčin radiálnej a uhlovej vlnovej funkcie. Uhlová funkcia MUSÍ byť tá istá, akú sme dostali pre atóm vodíka, pretože ide o riešenie tej istej úlohy: hľadanie vlastných funkcií a vlastných hodnôt uhlovej časti Laplaceovho operátora. Dostaneme teda, že častici v potenciáli (L.1) môžeme v jej vlastnom stave priradiť nielen energiu, ale aj vlastnú hodnotu momentu hybnosti.

Hľadajme teraz súvis medzi oboma opismi: Tabuľka 1 uvádza vlastné vlnové funkcie $\Phi_{n_x,n_y n_z}(x,y,z)$ pre prvých 10 stavov trojrozmerného harmonického oscilátora. Ak súradnice x, y a z vyjadríme vo sférických súradniciach, dostaneme (v poslednom stĺpci) vlastné stavy vo sférických súradniciach:

Základný stav je Φ_{000} nedegenerovaný.

Prvý excitovaný stav je trikrát degenerovaný. Z vlnových funkcií zostavíme lineárne kombinácie

$$\begin{array}{lclclll} \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_{100} \pm \phi_{010}\right] & = & x \pm iy & = & r\sin\theta e^{\pm i\phi} & l=1 & m=\pm 1 \\ \Phi_{001} & = & z & = & r\cos\theta & l=1 & m=0 \end{array} \tag{L.3}$$

ktoré sú, samozrejme, tiež vlastnými funkciami. Porovnaním so sférickými funkciami (Tab. 8.1 na str. 164) vidíme, že uhlová závislosť zodpovedá vlastným funkciám momentu hybnosti s vlastnou hodnotou $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ a $l = 1$. ide teda o stavy s momentom hybnosti $L = \hbar\sqrt{2}$ s troma priemetmi momentu hybnosti do smeru z: $L_z = \hbar m$, a $m = \pm 1$ a $m = 0$.

Podobne nájdeme, že druhý excitovaný stav je $6\times$ degenerovaný. Opäť urobíme lineárne kombinácie vlnových funkcií:

$$\begin{array}{lclclll} \Phi_{200} - \Phi_{020} \pm 2i\Phi_{110} & = & x^2 - y^2 \pm 2ixy & = & r^2\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} & l=2 & m=\pm 2 \\ \Phi_{101} \pm \Phi_{011} & = & xz \pm yz & = & r^2\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi} & l=2 & m=\pm 1 \\ 2\Phi_{002} - \Phi_{020} - \Phi_{200} & = & 2z^2 - x^2 - y^2 & = & r^2(3\cos^2\theta - 1) & l=2 & m=0 \\ \Phi_{200} + \Phi_{020} + \Phi_{002} & = & 4r^2 - 6 & = & 4r^2 - 6 & l=0 & m=0 \end{array} \tag{L.4}$$

Tab. L.1. Desať najnižších stavov trojrozmerného harmonického oscilátora

E	n_x	n_y	n_z	$\Phi_{n_x n_y n_z}$	$\Phi(r,\theta,\phi)$
$\frac{3}{2}\hbar\omega$	0	0	0	1	1
$\frac{5}{2}\hbar\omega$	1	0	0	x	$r\sin\theta\cos\phi$
$\frac{5}{2}\hbar\omega$	0	1	0	y	$r\sin\theta\sin\phi$
$\frac{5}{2}\hbar\omega$	0	0	1	z	$r\cos\theta$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	1	1	0	xy	$r^2\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	1	0	1	xz	$r^2\sin\theta\cos\theta\cos\phi$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	0	1	1	yz	$r^2\sin\theta\cos\theta\sin\phi$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	2	0	0	$4x^2-2$	$4r^2\sin^2\theta\cos^2\phi-2$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	0	2	0	$4y^2-2$	$4r^2\sin^2\theta\sin^2\phi-2$
$\frac{7}{2}\hbar\omega$	0	0	2	$4z^2-2$	$4r^2\cos^2\theta-2$

Druhý excitovaný stav teda obsahuje 5 stavov s $l=2$ a jeden stav s $l=0$.

Analytický výpočet je podobný ako pre atóm vodíka; napíšeme Schrödingerovu rovnicu vo sférických súradniciach, urobíme separáciu premenných: pre sférickú časť dostaneme, samozrejme, identické rovnice. To je jasné, sférická ćasť nevie nič o potenciáli, preto je rovnaká pre každý sférický symetrický problém a vedie k tým istým vlastným hodnotám a vlastným funkciám. Preto sme aj dostali kvantované hodnoty momentu hybnosti a jeho priemetu, rovnako aj tie isté vlastné funkcie z tabuľky 8.1.

Radiálna časť Schrödingerovej rovnice sa rieši ťažšie, pozri [6]. Vlastné energie sú vyjadrené vzťahom

$$E=\left(\frac{3}{2}+n\right), \qquad n=0,1,2,\ldots \tag{L.5}$$

a sú degenerované, lebo kvantové číslo n sa dá vyjadriť ako súčet

$$n=l+2n_r, \qquad l,\, n_r\geq 0 \tag{L.6}$$

[6] S. Flügge: Practical Quantum mechanics, Springer 1999

- Hladine $n = 0$ zrejme zodpovedá $l = n_r = 0$.
- Hladine $n = 1$ zodpovedá $l = 1$, $n_r = 0$ a je trikrát degenerovná lebo každá hladina s daným l je $2l + 1\times$ degenerovaná.
- Hladine $n = 2$ zodpovedá alebo $l = 0$ a $n_r = 1$ alebo $l = 2$, $n_r = 0$. Týchto stavov je spolu 6, a zodpovedajú nami nájdeným hodnotám.

Ľahko zostrojíme aj vyššie excitované stavy.

Degenerácia $\mathcal{N}(n)$ energetickej hladiny n:

Pre n párne, $n = 2k$, nadobúda l párne hodnoty 0, 2, 4, . . . , $2k$. Pre každé l máme $2l + 1$ stavov, ktoré sa líšia veľkosťou priemetu $L_z = \hbar m$, $0 \leq |m| \leq l$. Celkový počet stavov je teda

$$\mathcal{N}(n) = \sum_{i=0}^{k}(2 \times (2i) + 1) = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2) \tag{L.7}$$

To isté vyjadrenie dostaneme aj pre n nepárne, $n = 2k + 1$, je $l = 2i + 1$, $i = 0,1, \ldots ,k$:

$$\mathcal{N}(n) = \sum_{i=0}^{k}[2 \times (2i + 1) + 1] = \frac{1}{2}(n + 1)(n + 2) \tag{L.8}$$

Ľahko odvodíme rekurzívny vzťah

$$\mathcal{N}(n) = \mathcal{N}(n - 1) + (n + 1) \tag{L.9}$$

Platí tiež

$$\mathcal{N}(n) + \mathcal{N}(n - 1) = (n + 1)^2 \tag{L.10}$$

Všimnime si, že degenerácia je iná, ako degenerácia hladín v atóme vodíka. Musí byť preto ovplyvnená ďalšou symetriou systému, nesúvisiacou so sférickou symetriou.

Literatúra

[1] PIŠÚT, J. – GOMOLČÁK, L.: *Úvod do kvantovej mechaniky.* Bratislava: Alfa, 1975.

[2] PIŠÚT, J. – ČERNÝ, V.–PREŠNAJDER, P.: *Zbierka úloh z kvantovej mechaniky.* Bratislava: Alfa, 1985.

[3] PIŠUT, J. – GOMOLČÁK L. – ČERNÝ, V.: *Úvod do kvantovej mechaniky, 2. vyd.* Bratislava: Alfa, 1983.

[4] FORMÁNEK, J.: *Úvod do kvantové teorie.* Praha: Akademia, 1983.

[5] FEYNMAN, R. P. – LEIGHTON, R. B. – SANDS, M.: *Feynmanove prednášky z fyziky, 9. diel. Dostupné aj v anglickom origináli a českom a ruskom preklade* Bratislava: Alfa, 1985.

[6] WICHMANN, E. H.: *Quantum Physics. Berkeley Physics Course vol. 4.* New York: McGraw-Hill Book Comp., 1967.

[7] DAVYDOV, A. S.: *Kvantová mechanika.* Praha: SPN, 1978.

[8] MATTHEW, P. T.: *Základy kvantové mechaniky.* Praha: SNTL 1976.

[9] LANDAU, L. – Lifshitz, E. M.: *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory). Course of Theoretical Physics vol. 3. (vyšlo aj slovensky, v knižniciach je aj ruský originál)* Amsterdam: Elsevier, 1977. ISBN 978-0-7506-2634-7

[10] MERZBACHER, E.: *Quantum Mechanics, 3rd. edition.* New York: John Wiley and Sons, 1998. ISBN 0-471-88702-1

[11] COHEN-TANNOUDJI, C. – DIU, B. – LALOE, L.: *Quantum Mechanics.* New York: John Willey and Sons, 2005. ISBN 0-471-16433-X

[12] BEISER, A.: *Úvod do moderní fyziky.* Praha: Academia, 1975.

[13] SERWAY, R. – MOSES, C. J. – MOYER, C. A.: *Modern Physics. 2nd. edition.* Philadelphia: Saunders College Publishing, 1997. ISBN 0-03-001547-2

[14] HALLIDAY, D. – RESNICK, R. – WALKER, J.: *Fyzika, 5. diel: Moderní fyzika.* Brno: Vysoké učení technické v Brně, nakl. VUTIUM a PROMETHEUS (2006). ISBN 81-7196-213-9

[15] FLÜGGE, S.: *Practical Quantum Mechanics.* Berlin: Springer, 1999. ISBN 3-540-65035-0

[16] LEVY, A. F. J.: *Applied Quantum Mechanics. 2nd. edition* Cambridge: Cambridge University Press, 2003. ISBN 978-0-521-86096-3

[17] TIRPÁK, A.: *Elektromagnetizmus. 2. vydanie.* Bratislava: IRIS, 2011. ISBN 978-80-89238-46-0

[18] ARSENIN, V. A.: *Matematická fyzika.* Bratislava: ALFA, 1977.

[19] GRANDSTEYN, I. S. – RYZHIK, I. M.: *Table of Integrals, Series and Products. 7th edition.* Amsterdam: Elsevier 2007. ISBN 978-0-12-373637-6

[20] ABRAMOWITZ, M. – STEGUN, I. A.: *Handbook of Mathematical Functions.* Dover: Dover Publ., 1965 a následné reedície. SBN 486-61272-4

[21] ASHRCOFT, N. W. – MERMIN, N. D.: *Solid State Physics.* New York: Thomson Learning, 1976. ISBN 978-0030839931

[22] KITTEL, CH.: *Úvod do fyziky pevných látek.* Praha: Academia, 1985.

[23] MARKOŠ, P. – SOUKOULIS, C. M.: *Wave Propagation: From Electrons to photonic Crystals and Left-handed Materials.* Princoeton: Princeton University Press, 2008. ISBN 978-0-691-13003-3

[24] DATTA, S.: *Quantum Transport: Atom to Transistor.* Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005. ISBN 978-0-521-63145-7

[25] DATTA, S.: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems.* Cambridge: Cambridge University Press, 1995. ISBN 0-521-59943-1

[26] SHENG, P.: *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena. 2nd edition.* Berlin: Springer, 2006. ISBN 978-540-29155-8

[27] JOANNOPOULOS, J. D. – JOHNOSN, S. G. – WINN, J. N. – MEADE, R. G.: *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. 2nd edition.* Princeton: Princeton University Press, 2008. ISBN 978-0-961-12456-8

[28] YEH, P.: *Optical Waves in Layered Media. 2nd. edition. (Willey Series in Pure and Applied Optics).* New York: John Willey and Sons, 2005.

[29] Jackson, J. D.: *Classical Electrodynamics. 3rd. edition.* New York: John Willey and Sons, 1999. ISBN

[30] BORN, M. – WOLF, E.: *Principles of Optics. 7nd edition.* Cambridge: Cambridge University Press, 1999. ISBN 978-0-521-64222-4

[31] Katedra fyziky FEI STU: *Materiály k laboratórnym cvičeniam z Fyziky 2* Bratislava: http://www.kf.elf.stuba.sk.

[32] VALKO, P.: *Supravodivosť.* Zlín: Kniha Zlín, 2011. ISBN 978-80-87497-44-9

Errata

P. Markoš: Moderná fyzika

opravy tlačových chýb.

miesto	pôvodný text	správny text
str. 14 Tabuľka 1.	Priemer kovovej nanočastice,	. . . nanočastíc
str. 26	Atóm sa teda podobná	. . . podobá
str. 77 Príklad 2.6	$\mathbf{L}$	$\mathbf{L}^2$
str. 113	Z rovnice (4.7)	Z rovnice (4.85)
str. 132	Z predchádzajúcej časti F2	Z dodatku F2
srt. 147	kde $\xi^s_{m_s}$	kde $\chi^s_{m_s}$
str. 157	vlastné funkcie operátora momentu hybnosti $\mathbf{L}$	. . . operátora $\mathbf{L}^2$.
str. 229 Dodatok J	kde C_n je reálne číslo.	—
str. 234	ASHRCOFT	ASHCROFT

- Strana 77, príklad 2.3: pravú stranu rovnice (2.110) môžeme prepísať do tvaru

$$\cos\phi = \frac{R_1 + R_1}{2\sqrt{R_1 R_2}} = \frac{1}{2}\left[a + \frac{1}{a}\right], \quad a = \sqrt{\frac{R_1}{R_2}} \tag{L.11}$$

  Pretože pre každé reálne číslo a platí $a + 1/a \geq 2$, jepravá strana vždy ≥ 2. Rovnica (2.110) má preto riešenie len ak $\cos\phi = 1$.

- Z predchádzajúcej opravy vyplýva, že príklad 2.5 nie je riešený správne. Správne riešenie je, samozrejme $\cos\phi = 1$.