ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY

Vykazují-li částice vlnové vlastnosti, musí jejich mechanická pohybová rovnice (analog Newtonova základního zákona dynamiky) být odvoditelná z **vlnové rovnice**:

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = v_f^2 \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}} \qquad (1)$$

ψ ... funkce popisující vlnu šířící se fázovou rychlostí v_f ve směru x

Řešení rovnice (1) má tvar:

$$\psi = \underbrace{A}_{\text{amplituda}} \cdot e^{-iq(v_f t - x)} \qquad (2)$$

$q = \frac{2\pi}{\lambda}$ .... vlnočet

Z (2) najdeme:

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (iq)(iq)\psi = -q^2\psi} \quad (3)$$

Pro vlnočet $\underline{q}$ částicové vlny přitom platí:

$$q = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\left(\frac{h}{p}\right)} = \frac{1}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)} p = \frac{1}{\hbar} p$$

$\hbar$ redukovaná Planckova konst.

Tedy $\boxed{q = \frac{p}{\hbar}}$ .... (4)

p ... hybnost částice

Dosazením (4) do (3) dostaneme:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = p^2\psi} \quad (5)$$

Hybnost částice p splňuje mechanickou rovnici

$$\boxed{\underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\substack{\text{kinetická} \\ \text{energie} \\ \text{částice} \\ \text{o hmotnosti } m}} + \underbrace{V}_{\substack{\text{potenciální} \\ \text{energie} \\ \text{částice} \\ \text{ve vnějším poli}}} = \underbrace{E}_{\substack{\text{celková} \\ \text{mechanická} \\ \text{energie částice}}}} \qquad (6)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{p^2 = 2m(E-V)} \qquad (7)$$

Dosazením (7) do (5) dostaneme

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 2m(E-V)\psi$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi = E.\psi} \; ! \qquad (8)$$

Rovnice (8) je tedy hledanou

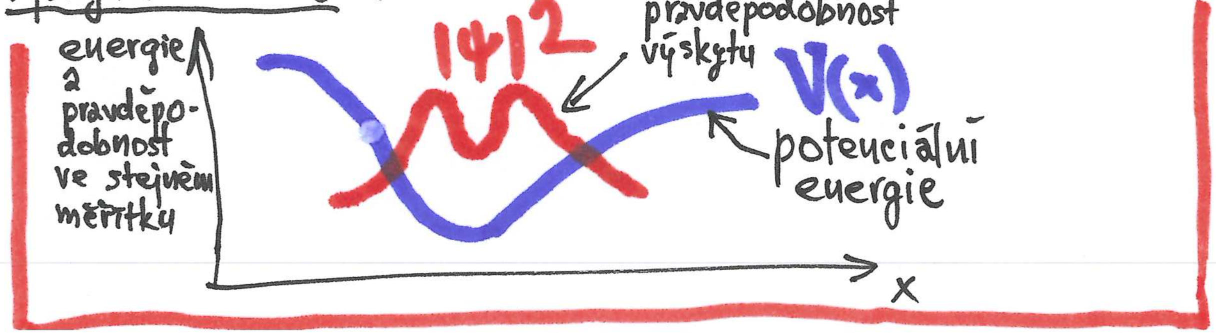
mechanickou pohybovou rovnicí částice o hmotnosti m, pohybující se ve vnějším poli s potenciální energií V a celkovou energií E. (9) !

= Schrödingerova rovnice

(základ mechaniky mikročástic projevujících vlnové vlastnosti)

Řešením Schrödingerovy rovnice (8) najdeme pravděpodobnostní vlnu příslušné částice ψ.

Spočtením kvadrátu její absolutní hodnoty pak podle pravděpodobnostního teorému najdeme prostorové rozložení výskytu částice:



(10)

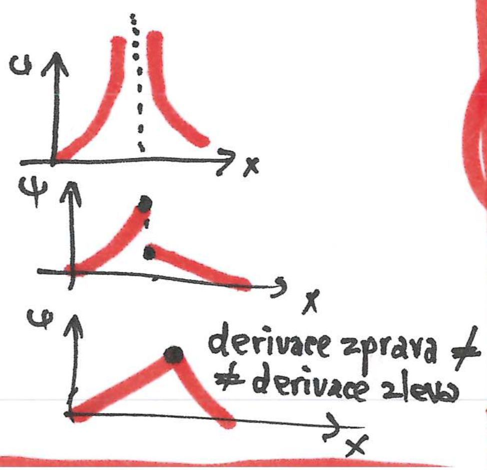
Díky <u>pravděpodobnostní</u> interpretaci $|\psi|^2$ musí zřejmě platit rovnice:

$$\boxed{\underbrace{\int |\psi|^2 \, dx}_{\text{pravděpodobnost, že částice se nachází } \underline{\text{někde}} \text{ v prostoru}} = \underbrace{1}_{\text{jistota}}} \qquad (11)$$

normovací podmínka pravděpodobnostní vlny.

Ze všech funkcí ψ, jež jsou řešením Schrödingerovy rovnice (8), se pro popis <u>fyzikálních stavů částice</u> hodí jen ty, které jsou:

- **všude konečné** ... nelze např.
- **všude spojité** ... nelze např.
- **všude hladké** ... nelze např.



(12)

Řešení Schrödingerovy rovnice splňující požadavky (11) a (12), se nazývají

vlnové funkce částice ! (13)

Vlnová funkce částice je **základním pojmem pohybu částice v kvantové mechanice**, tj. mechanice, v níž částice projevují vlnové vlastnosti, a dochází tudíž ke kvantování fyzikálních veličin, je-li pohyb částice omezen v určitém prostoru.

V kvantové mechanice je nutno **opustit pojem trajektorie částice**, tj. jeden ze základních pojmů klasické mechaniky.

Zdůrazněme ještě, že vlnová funkce **nemá žádný klasický analog**, tj. v klasické mechanice neexistuje žádná podobná veličina.

Vlnové funkce pro nejjednodušší případy řešení Schrödingerovy rovnice

• Volná částice ($V = 0$)

Z obecného tvaru Schrödingerovy rovnice (8) v tomto speciálním případě dostáváme:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\cdot\psi} \quad (14)$$

Odtud jednoduchou úpravou:

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\text{označme } k^2}\psi = 0} \quad (15)$$

diferenciální rovnice 2. řádu s konstantními koeficienty

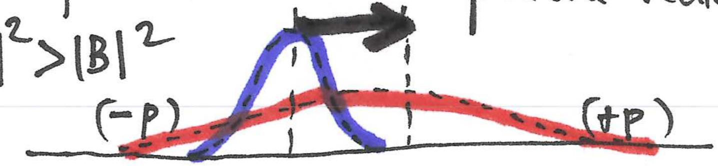
Řešení diferenciální rovnice (15) umí matematika napsat ve tvaru:

$$\boxed{\begin{gathered} \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{1}{\hbar}\underbrace{\sqrt{2mE}}_{p} = \frac{p}{\hbar} \\ A, B \ldots \text{libovolné konstanty} \end{gathered}} \qquad (16) \quad !$$

Z tohoto výsledku vidíme, že částice popsaná vlnovou funkcí $\psi(x)$ <u>nemá přesně definovanou hybnost</u>:

S pravděpodobností $|A|^2$ se pohybuje doprava hybností p a s pravděpodobností $|B|^2$ doleva hybností $(-p)$. Kam se pohybuje víc, záleží na poměru velikostí $|A|^2$ a $|B|^2$:

<u>Příklad</u>: $|A|^2 > |B|^2$



‖. (17)

Nyní spočteme pravděpodobnost nalezení částice ve stavu popsaném vlnovou funkcí (16):

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\psi^*(x) = A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}$$

$$\boxed{|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = \left(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}\right)\left(A e^{ikx} + B e^{-ikx}\right) = \underbrace{A^*A}_{|A|^2}.1 + A^*B e^{-2ikx} + B^*A e^{+2ikx} + \underbrace{B^*B}_{|B|^2}.1} \quad (18)$$

Předpokládejme pro jednoduchost, že koeficienty A, B jsou reálná čísla. Pak $A^*B = B^*A = |A||B|$, takže z posledního řádku (18) máme:

$$\boxed{|\psi(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + |A||B|\underbrace{\left(e^{-2ikx} + e^{+2ikx}\right)}_{2\cos(2kx)}} \quad (19)$$

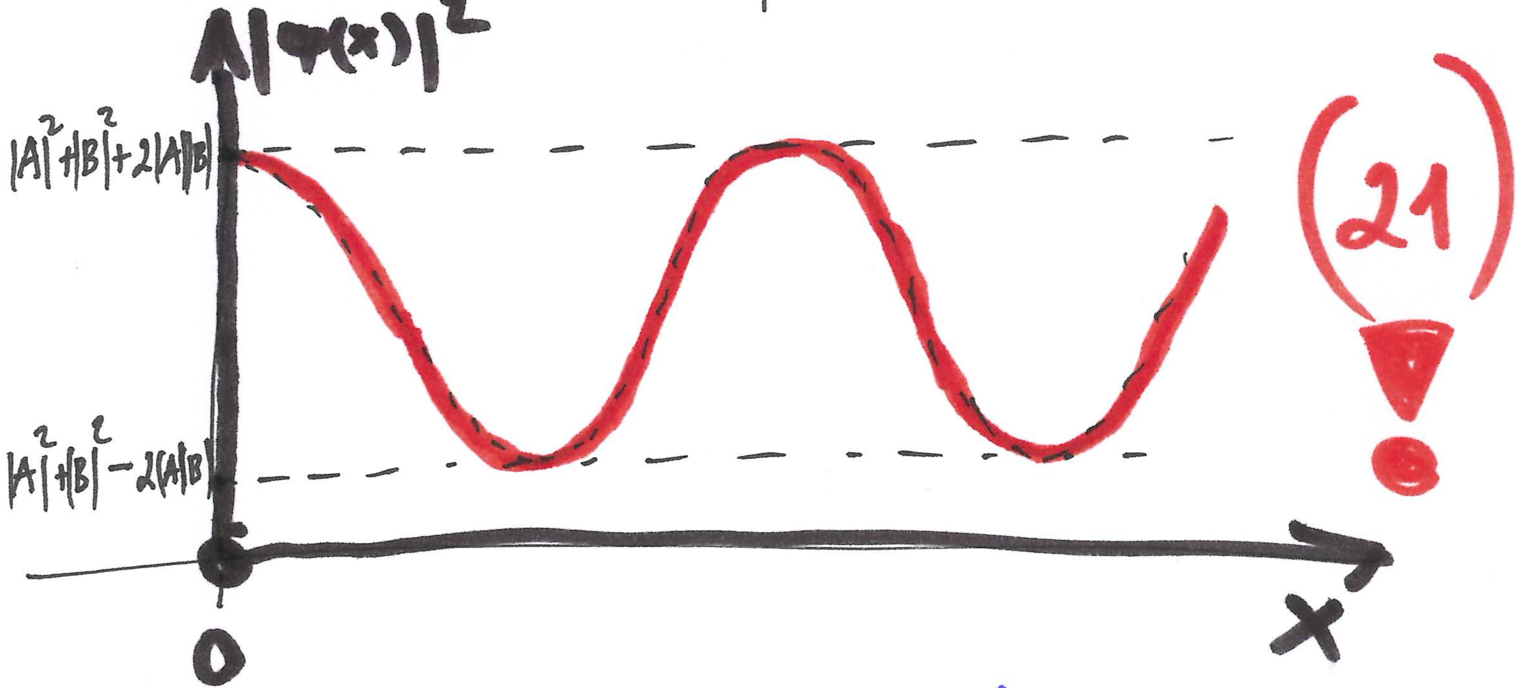
$$\Downarrow$$

$$\boxed{|\psi(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B|\cos(2kx)} \;! \quad (20)$$

Jelikož cos(2kx) je periodická funkce s hodnotami

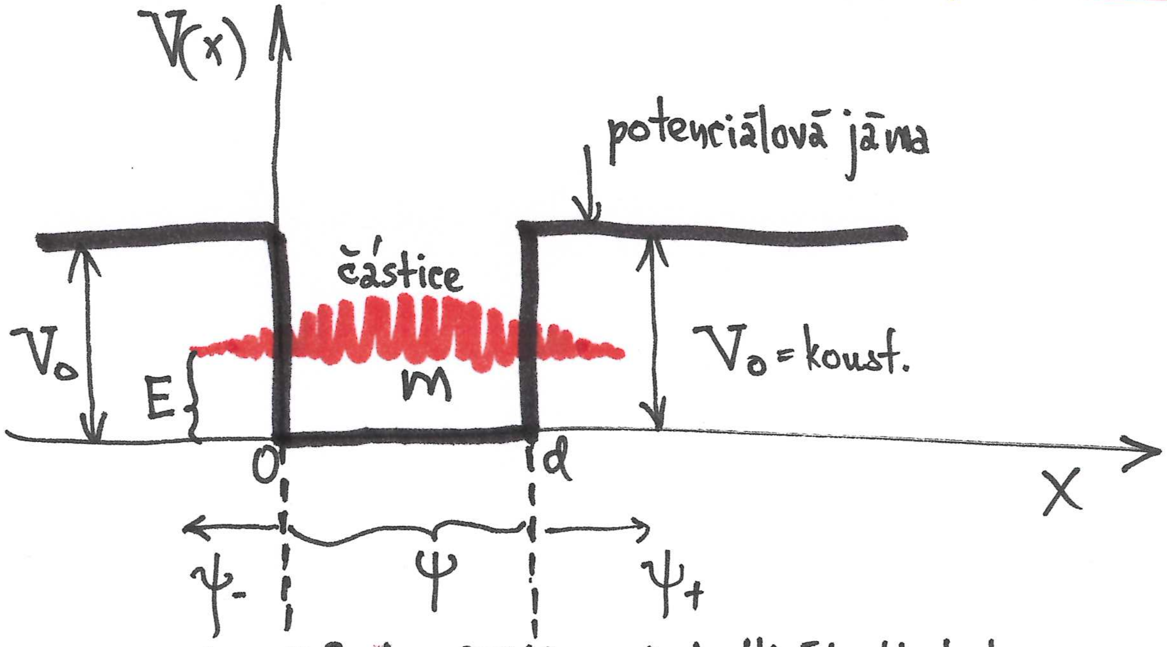
$$\boxed{-1 \leq \cos(2kx) \leq +1},$$

vypadá grafické zobrazení výsledku (20) takto:



Pravděpodobnost výskytu částice v různých místech prostoru se periodicky mění. (kvantová interference částice se sebou samou)

• Částice v potenciálové jámě



vlnové funkce částice v jednotlivých oblastech

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_-}{\partial x^2} + V_0 \cdot \psi_- = E \cdot \psi_-$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 0 \cdot \psi = E \cdot \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_+}{\partial x^2} + V_0 \cdot \psi_+ = E \cdot \psi_+$$

příslušné Schrödingerovy rovnice

11

Obecná řešení uvedené soustavy 3 diferenciálních rovnic mají tvar:

$$\psi_-(x) = A_- e^{\varkappa x} + B_- e^{-\varkappa x} \quad (-\infty \leq x \leq 0)$$

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (0 \leq x \leq d)$$

$$\psi_+(x) = A_+ e^{\varkappa x} + B_+ e^{-\varkappa x} \quad (d \leq x < +\infty)$$

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

(23)

Konstanty $A_-, B_-, A, B, A_+, B_+, E$ vystupující v (23) určíme z požadavků (12) a (11) pro vlnové funkce:

- **Konečnost:** $B_- = 0$ (neboť $\lim\limits_{x \to -\infty} e^{-\varkappa x} = \infty$)

  $A_+ = 0$ (neboť $\lim\limits_{x \to +\infty} e^{\varkappa x} = \infty$)

(24)

- **Spojitost v bodech $x = 0$ a $x = d$:**

$$\psi_-(0) = \psi(0) \quad ; \quad \psi(d) = \psi_+(d)$$

(25)

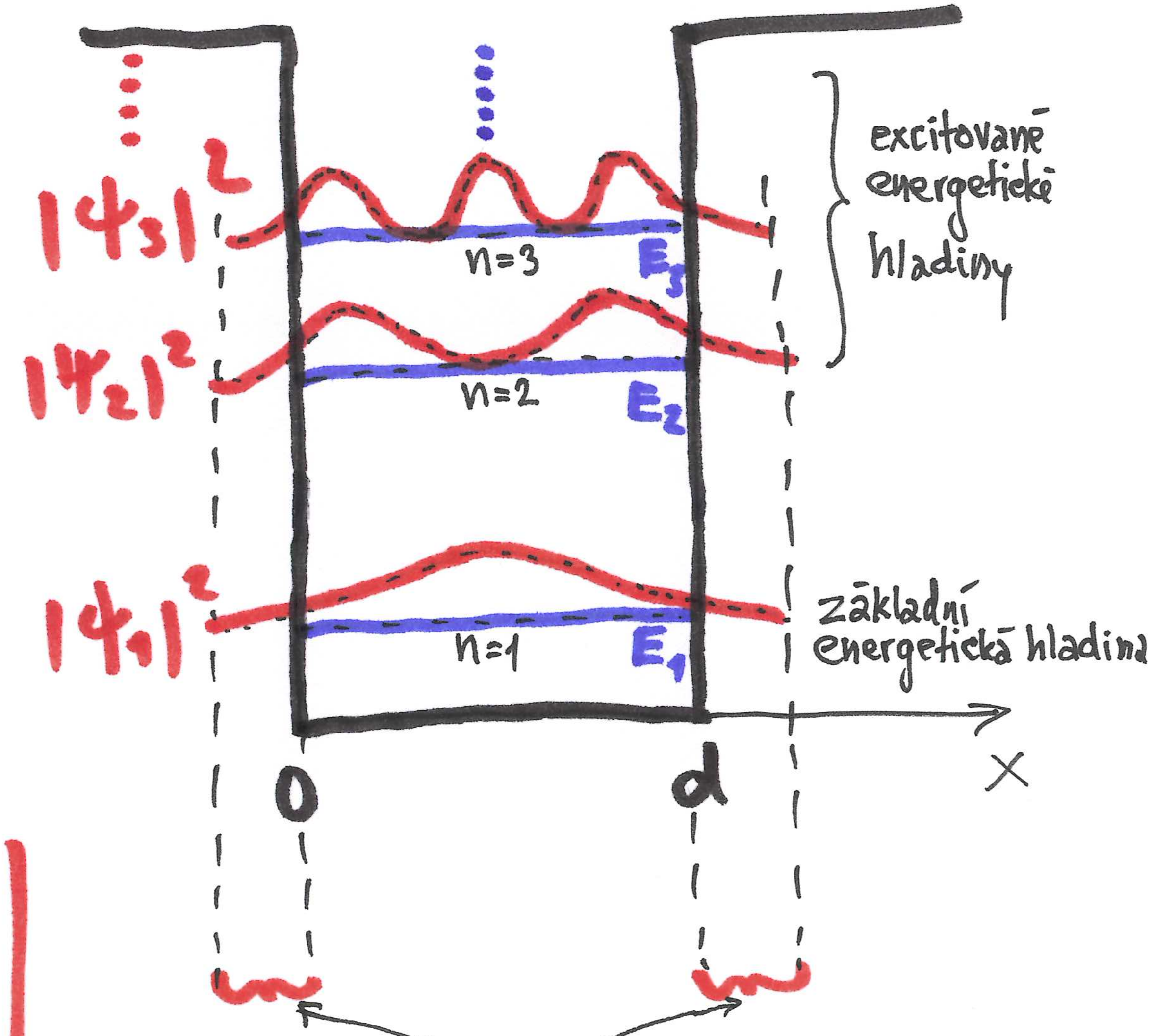
- **Hladkost v bodech $x=0$ a $x=d$**

$$\frac{\partial \psi_-}{\partial x}(0) = \frac{\partial \psi}{\partial x}(0) \; ; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(d) = \frac{\partial \psi_+}{\partial x}(d) \qquad (26)$$

- **Normovací podmínka**

$$\int_{-\infty}^{0} |\psi_-(x)|^2 dx + \int_0^d |\psi(x)|^2 dx + \int_d^{+\infty} |\psi_+(x)|^2 dx = 1 \qquad (27)$$

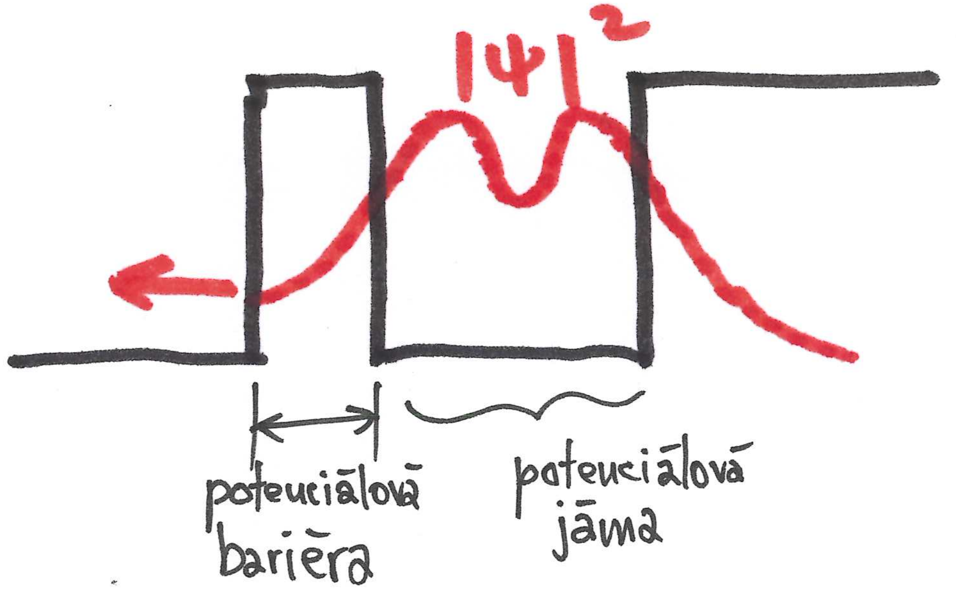
Vztahy (24) přímo určují hodnoty konstant $\underline{\underline{B_-}}$ a $\underline{\underline{A_+}}$.
Rovnice (25), (26) a (27) představují soustavu 5 rovnic pro 5 zbývajících konstant $\underline{\underline{A_-}}, \underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}, \underline{\underline{B_+}}, \underline{\underline{E}}$.
Výsledky řešení ukazují, že všechny tyto konstanty mohou nabývat jen přesně definovaných hodnot, tj. **jsou kvantovány.**
Graficky lze celou situaci částice v potenciálové jámě znázornit následovně:



nenulová pravděpodnost výskytu částice uvnitř stěn jámy – v mikrosvětě tedy platí: "Hlavou zeď prorazíš".

(28)

Uvažujme nyní mikročástici v potenciálu následujícího tvaru:



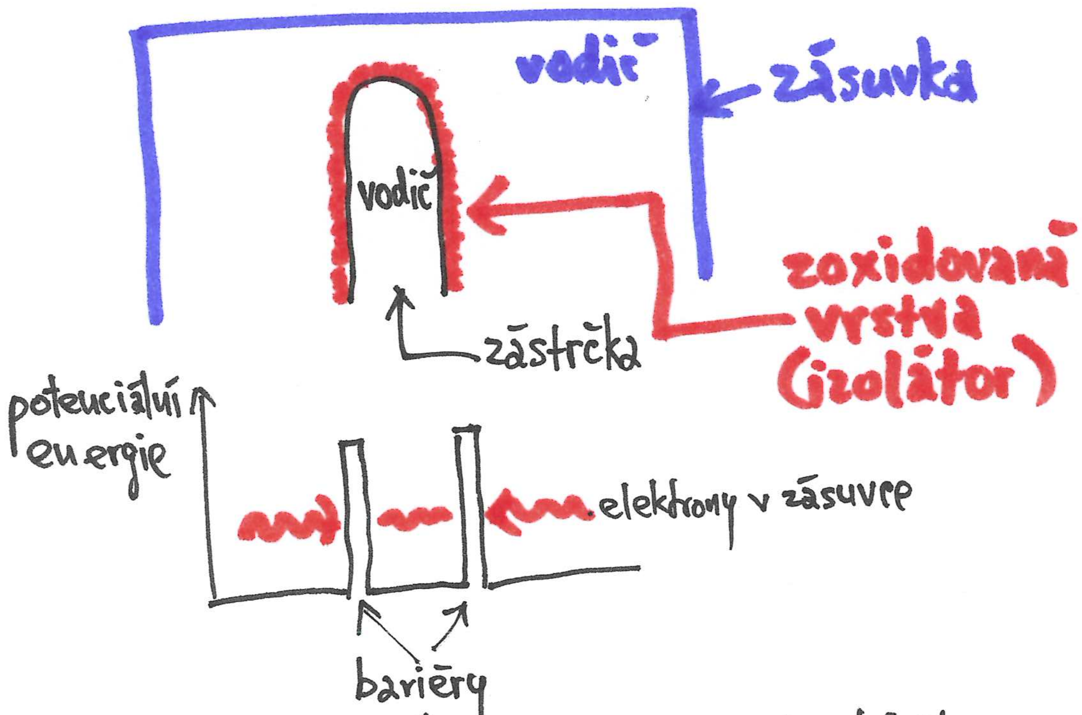
mikročástice prochází bariérou s nenulovou pravděpodobností

Kvantové tunelování
(tunelový jev)

(29)

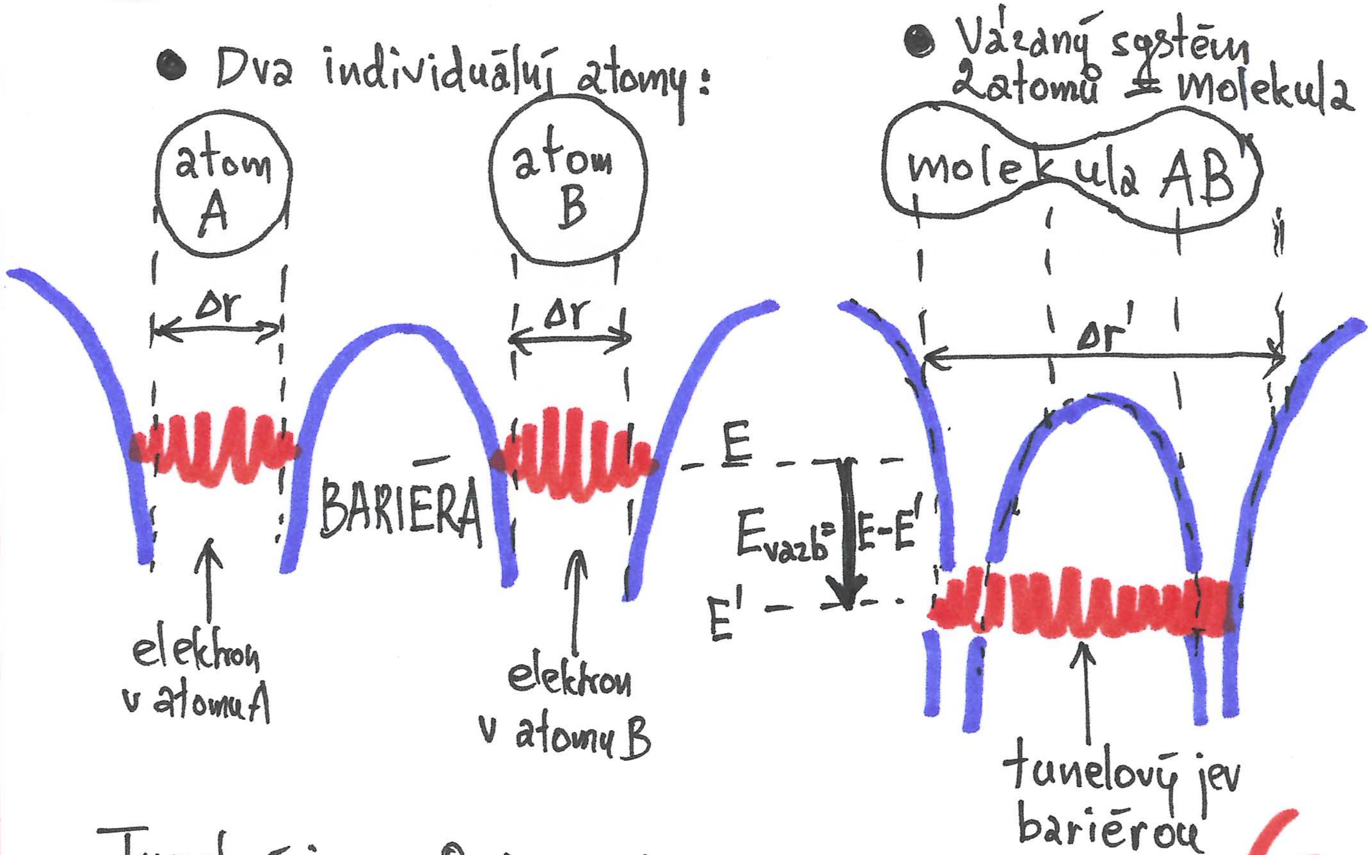
Tunelový jev se v mikrosvětě (tj. ve světě elektronů, atomů, molekul) vyskytuje prakticky všude.
Ukažme zatím 2 příklady:

① Průchod elektrického proudu místy dotyku 2 kovů:



elektrony projdou do zástrčky přes bariéry jen díky <u>tunelovému jevu</u>.

② Vznik molekul:

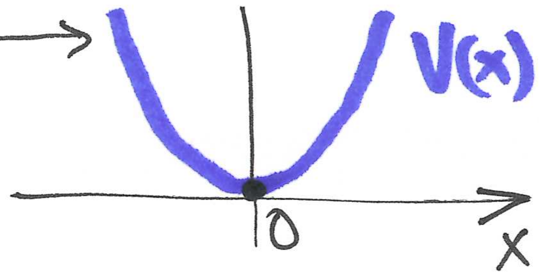


Tunelový jev způsobí, že každý elektron si může <u>zvětšit</u> svůj "životní prostor" ($\Delta r' > \Delta r$).
Podle Heisenbergova principu neurčitosti to však znamená
$\Delta p' < \Delta p \Rightarrow p' < p \Rightarrow \underline{\underline{E' < E}}$. Dojde tedy ke <u>snížení celkové energie</u> obou elektronů, a tím k vytvoření jejich <u>vázaného systému (molekuly)</u> s vazbovou energií $E_{vazb} = E - E'$!

(31)

③ Lineární harmonický oscilátor

Je to částice pohybující se s potenciální energií →



$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

<u>Schrödingerova rovnice</u> pro vlnovou funkci takové částice:

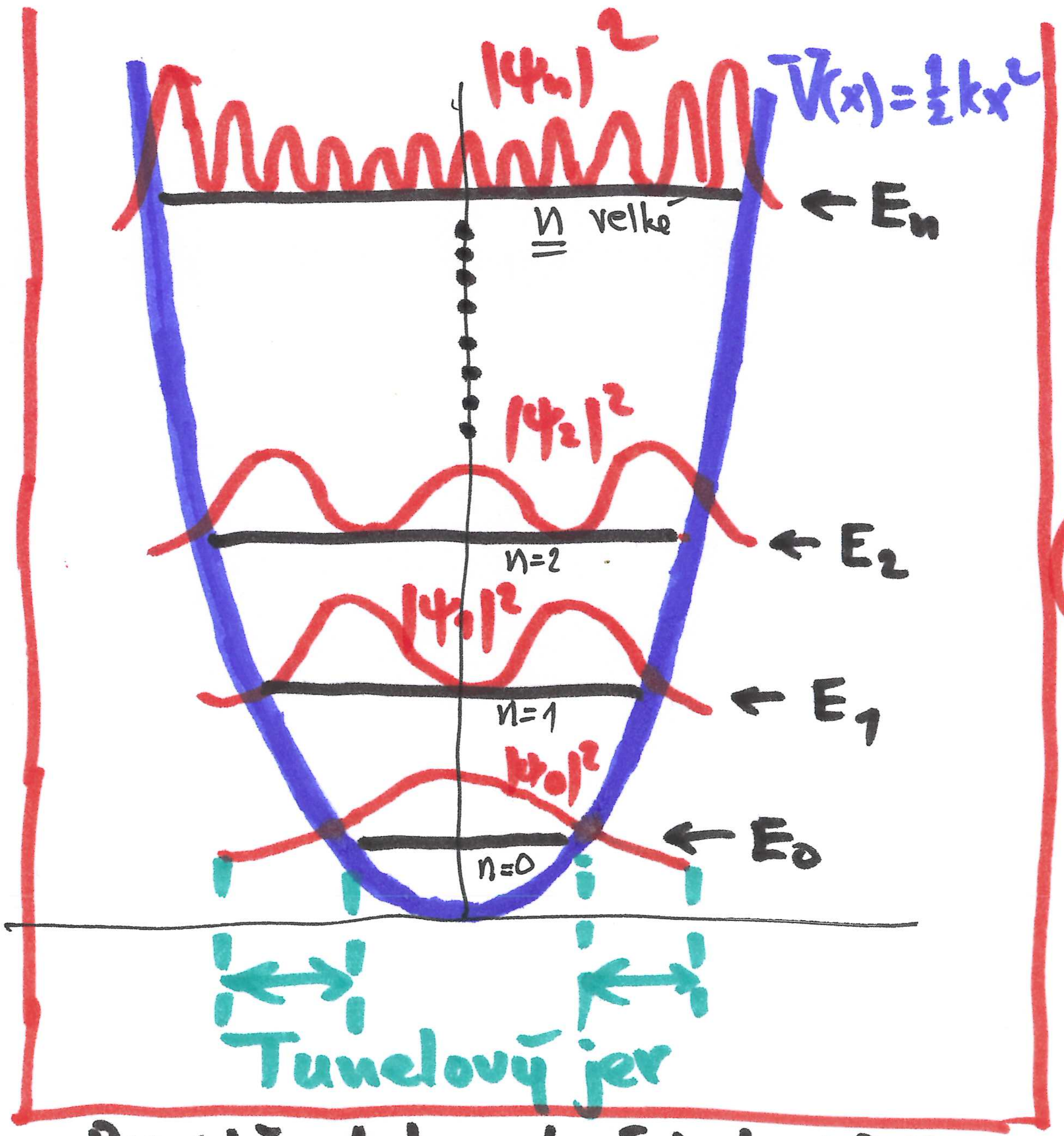
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E.\psi} \quad (32)$$

kde ψ musí být všude <u>konečná</u>, <u>spojitá</u>, <u>hladká</u> a musí splňovat normovací podmínku $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx = 1$.

Matematika umí tyto požadavky vyřešit a získané výsledky lze sumarizovat takto:

$$\boxed{E = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(\frac{1}{2}+n\right) \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots} \quad (33)$$

kvantování energie



(34)

Pravděpodobnost výskytu částice

Srovnání s klasickým oscilátorem:

- Energie klasického oscilátoru <u>nejsou kvantované</u>, tj. spojitě nabývají všech hodnot od <u>0</u> do <u>∞</u>.
- Klasický oscilátor <u>nemůže "vybočit"</u> z potenciálu — není zde tunelový jev.

* * * *