

1. TÝDEN

1.1

Úvod

Podle I. Newtona, jehož představy ovládly fyziku 18. a 19. století, je celý vesmír souborem pevných biliardových koulí různých rozměrů a různé velikosti:

planety, hvězdy	=	velké koule (megavět)
domy, lidé	=	střední koule (makrovět)
atomy, molekuly	=	malé koule (mikrovět)

Základní vlastnosti tohoto Newtonova světa biliardových koulí lze shrnout takto:

- koule mají přesně definovanou polohu a polohový stav (rychlost);
- jsou od sebe odlišitelné;
- podržují si svou identitu (jablko se spontánně nemění na pomeranč);
- jsou aditivní (1 jablko + 2 jablka = 3 jablka)
(nikoli např. 1,7 jablka)

Představme si nyní na okamžik, že se vracíme z vydatného flámu a v tomto příjemně neshřizlivém stavu pozorujeme svět kolem sebe:

- objekty již zdaleka nemají přesnou polohu a rychlost;
- nejsme si jisti, zda vidíme jedno nebo dvě auta s mořenou půlkou křehko;
- jablko a pomeranč na stole splývají v jedno, nebo se naopak rozplývají na 4 vzájemně se protínající objekty;

- při sledování provozu na ulici jsou dopravní prostředky daleko méně lokalizované, spíše vidíme zhušťující se a řidnoucí chuchvalce (podle hustoty provozu).

Tomuto "neshrzlivému" světu je však cizí svět biliardových koulí. Daleko výstřednější je zde svět vln, tj. svět neurčitých obrysů a vzájemně se pronikajících struktur.

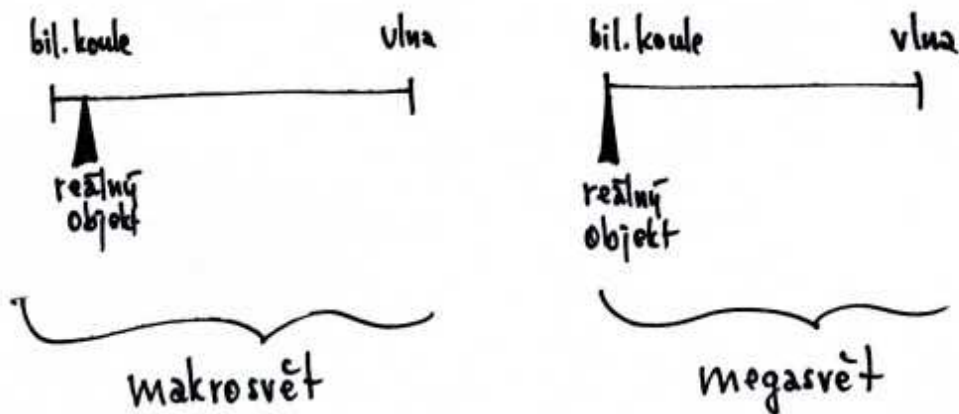
Nebylo by však zajímavé a dobrodružné zkoumat takový svět vědecky? Určitě ano, a tato věda skutečně existuje.

Jmenuje se kvantová mechanika a je základním pilířem moderní fyziky 20. století. Bez ní by nebyly tranzistory, lasery (a s nimi související CD a DVD technologie), nebyly by supravodiče a supertvrdé lehké umělé materiály, nebyly by ani největší "hity" současnosti – řízená termokleární syntéza, kvantový počítač, struktura DNA a řízená genová mutace.

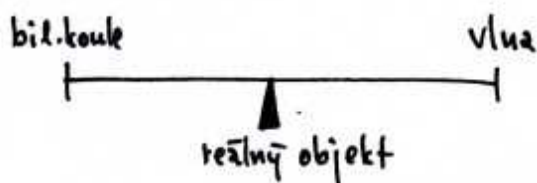
Zakladatelé kvantové mechaniky Erwin Schrödinger a Werner Heisenberg při přebírání Nobelovy ceny za fyziku řekli: "Našich výsledků jsme dosáhli jen díky tomu, že jsme se odvdělili vidět svět neshrztlivýma očima – viděli jsme automobil, který procházel pevnou zdí jako pára prochází prádlem při žehlení, viděli jsme však také kouřové obláčky jako pevně lokalizované objekty, které můžete uchopit do ruky, prostě viděli jsme to, co shrztlivýma očima vidět nelze".

Jaký je tedy skutečný stav věci – je automobil biliardová koule, která se nrazem na pevnou stěnu značně deformuje a částečně odraz zpět, anebo je automobil soubor monochromatických vln, který bez problémů projde pevnou stěnou, a jsou-li v ní nějaké otvory, tak se ohýbá a rozštěpí na několik koherentních částí, pohybujících se za stěnou různými směry?

Celý rozvoj moderní fyziky 20. století nade vše pochybnost prokázal, že všechny objekty vesmíru (tedy i uvažovaný automobil) mají současně vlastnosti biliardových koulí i vln, pouze v mega- a makrosvětě jsou vnější projevy vlastností vln silně potlačeny ve prospěch projevů vlastností biliardových koulí:



Situace je však zcela odlišná v mikrosvětě (tj. ve světě atomů a molekul), kde vlastnosti vln i biliardových koulí mají stejnou váhu,



a reálný objekt je projevuje v závislosti na tom, jakého procesu se účastní a v jakém experimentálním uspořádání jeho vlastnosti měříme.

Např. elektromagnetické pole se chová jako vlna, když volně prochází prostorem, ale když interaguje s jednotlivým atomem, vystoupí rázem do popředí vlastnosti biliardové koule, zejména ostrá prostorová lokalizace a koncentrace energie do malého prostoru.

Předobraz této situace nalézáme ve starořecké mytologii v bytostech zvaných perytóni.

Hlavu a nohy měli jeleni (parožní, 4 nohy), trup však ptačí (křídla, aviatický ocas).

Nejzajímavější bylo, že člověk je nemohl pozorovat přímo, ale jen prostřednictvím jimi vrženého stínu.

A tak např. v poledne, když perytón létal a slunce svítilo kolmo na zem, lidé viděli siluetu ptáka.

Večer, když se perytón unavil a přistál na zemi, tak v zapadajícím slunci (světelné těleso vodotrouné), viděli lidé siluetu jelena.

Jedině, co z těchto pozorování mohli lidé vydedukovat, je to, že někdy se perytón projevuje jako pták, jindy zase jako jelen. To ovšem znamená, že perytón musí mít současně vlastnosti obojího (ptáka i jelena), a to, které z nich projeví, závisí na konkrétní situaci: perytón v letu + "kolmo" slunce = pták; perytón na zemi + "vodotrouné" slunce = jelen).

Největším objevem fyziky 20. století je, že všechny objekty mikrosvětla (= mikroobjekty) se chovají jako bájní perytóni, a to v tom smyslu, že mají současně vlastnosti biliardových koulí (perytón-jelen) i vlastnosti olu volně se šířících prostorem (perytón-pták).

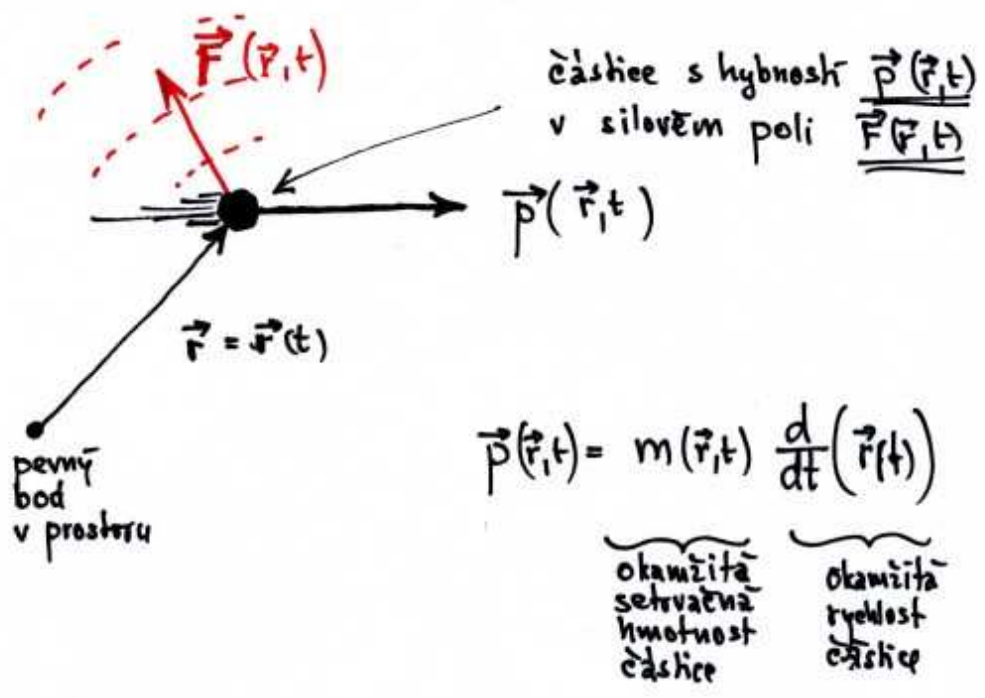
Informaci o tom, prostřednictvím které z těchto vlastností se nám mikroobjekt projeví, můžeme přitom získat pouze neptímo, a to měřením v konkrétních podmínkách (analog pozorování vrženého stínu perytóna v poledne a večer).



1.2 Stav klasické fyziky na konci 19. století

- Dvě dominanty :
- ① Newtonova mechanika částic (biliard.kouli)
(analog "jelení" stránky perytova).
 - ② Maxwellovo elektromagnetické pole
a jeho šíření prostorem ve vlnách
(analog "ptačí" stránky perytova).

ad 1 ... Newtonova mechanika částic



Pohyb částice v uvažovaném silovém poli popisuje Newtonův základní zákon dynamiky (NZZD) :

$$\frac{d}{dt}(\vec{p}(\vec{r},t)) = \vec{F}(\vec{r},t) \quad (1.2.1)$$

ad 2

Maxwellovo elektromagnetické pole a jeho šíření prostorem ve vlnách

Maxwellova myšleuka elektromagnetického pole vznikla kombinací
Ampèrova a Faradayova zákona:

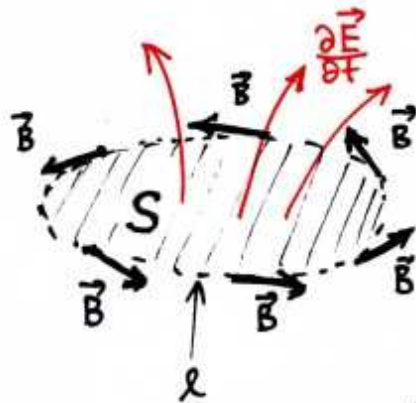
Ampèrov zákon (1. Maxwellova rovnice)

● v integrální formě

$$\oint_{\mathcal{L}} (\vec{B} \cdot \vec{\tau}) d\ell = \mu_0 \epsilon_0 \frac{d}{dt} \left\{ \int_S (\vec{E} \cdot \vec{n}) dS \right\}$$

● v diferenciální formě

$$(\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$



(1.2.2)

$$\epsilon_0 = 8.859 \times 10^{-12} [\text{A}^2 \text{kg}^{-1} \text{m}^{-3} \text{s}^4]$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} [\text{A}^{-2} \text{kg} \text{m} \text{s}^{-2}]$$

Faradayův zákon (2. Maxwellova rovnice)

● $\oint_{\mathcal{L}} (\vec{E} \cdot \vec{\tau}) d\ell = - \frac{d}{dt} \left\{ \int_S (\vec{B} \cdot \vec{n}) dS \right\}$

● $(\vec{\nabla} \times \vec{E}) = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$



(1.2.3)

Maxwellovy rovnice (1.2.2) a (1.2.3) ukazují, že magnetické a elektrické pole jsou mezi sebou natolik pevně provázány, že tvoří jedinou entitu, kterou nazýváme pole elektromagnetické.

Řešení Maxwellových rovnic v kartézském souř. systému (x, y, z) vypadá následovně:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \sum_u \vec{E}_u(x,t) \\ \vec{E}_u(x,t) &= \vec{E}_{0u} \cdot \sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \cdot t - x\right)\right\} \\ \vec{E}_{0u} &= 0\vec{i} + E_{0u}\vec{j} + 0\vec{k} \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \sum_u \vec{B}_u(x,t) \\ \vec{B}_u(x,t) &= \vec{B}_{0u} \cdot \sin\left\{\frac{2\pi}{\lambda}\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \cdot t - x\right)\right\} \\ \vec{B}_{0u} &= 0\vec{i} + 0\vec{j} + B_{0u}\vec{k} \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

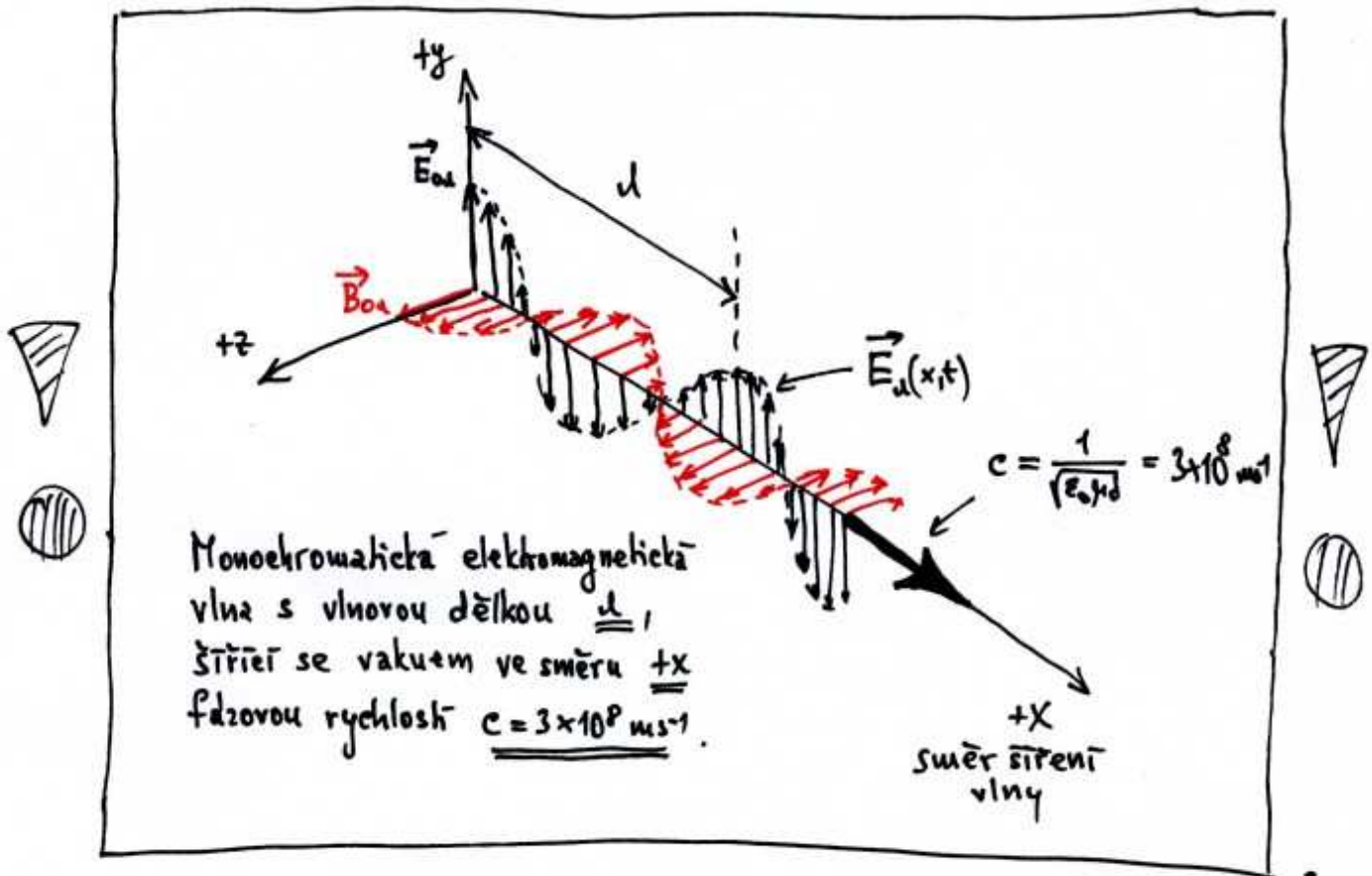
Každý ze členů $\vec{E}_u(x,t)$ resp. $\vec{B}_u(x,t)$ představuje monochromatickou harmonickou vlnu o vlnové délce λ , amplitudě \vec{E}_{0u} resp. \vec{B}_{0u} , šířící se ve směru osy x fázovou rychlostí:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3 \times 10^8 \text{ [ms}^{-1}\text{]} \quad (1.2.6)$$

↑
číselné hodnoty
viz (1.2.2)

Amplituda \vec{E}_{0u} má přitom směr osy y , kdežto amplituda \vec{B}_{0u} směr osy z .

Zobrazíme-li tyto výsledky graficky, máme:



Pomocí λ a c definujeme frekvenci elmag. vlny

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad (1.2.7)$$

majíet význam převrácené hodnoty periody harmonických oscilací elmag. pole v pevném bodě x :

$$\nu = \frac{1}{T} \quad (1.2.8)$$

Podle vztahů (1.2.4) a (1.2.5) je elektromagnetické pole (\vec{E}, \vec{B})

superpozicí výše uvedených monochromatických elmag. vln přes všechny možné vlnové délky $0 \leq \lambda < \infty$.

Máme tedy:

$$\vec{E} = \sum_u \vec{E}_u(x,t) \quad ; \quad \vec{B} = \sum_u \vec{B}_u(x,t) \quad (1.2.9)$$

elektromagnetické pole (\vec{E}, \vec{B}) jako superpozice
monochromatických elmag. vln $(\vec{E}_u(x,t), \vec{B}_u(x,t))$
($0 \leq u \leq \infty$) .

Díky vztahu (1.2.7) můžeme (1.2.9) přepsat ve tvaru:

$$\vec{E} = \sum_v \vec{E}_v(x,t) \quad ; \quad \vec{B} = \sum_v \vec{B}_v(x,t) \quad (1.2.10)$$

elektromagnetické pole (\vec{E}, \vec{B}) jako superpozice
monofrekvenčních elmag. vln $(\vec{E}_v(x,t), \vec{B}_v(x,t))$
($0 \leq v \leq \infty$) .

Výše uvedené superpozice (1.2.9) a (1.2.10) jsou přitom
kontinuální (spojité), což při praktických výpočtech
znamená náhradu

$$\sum_u \rightarrow \int_0^{\infty} du \quad ; \quad \sum_v \rightarrow \int_0^{\infty} dv \quad (1.2.11)$$

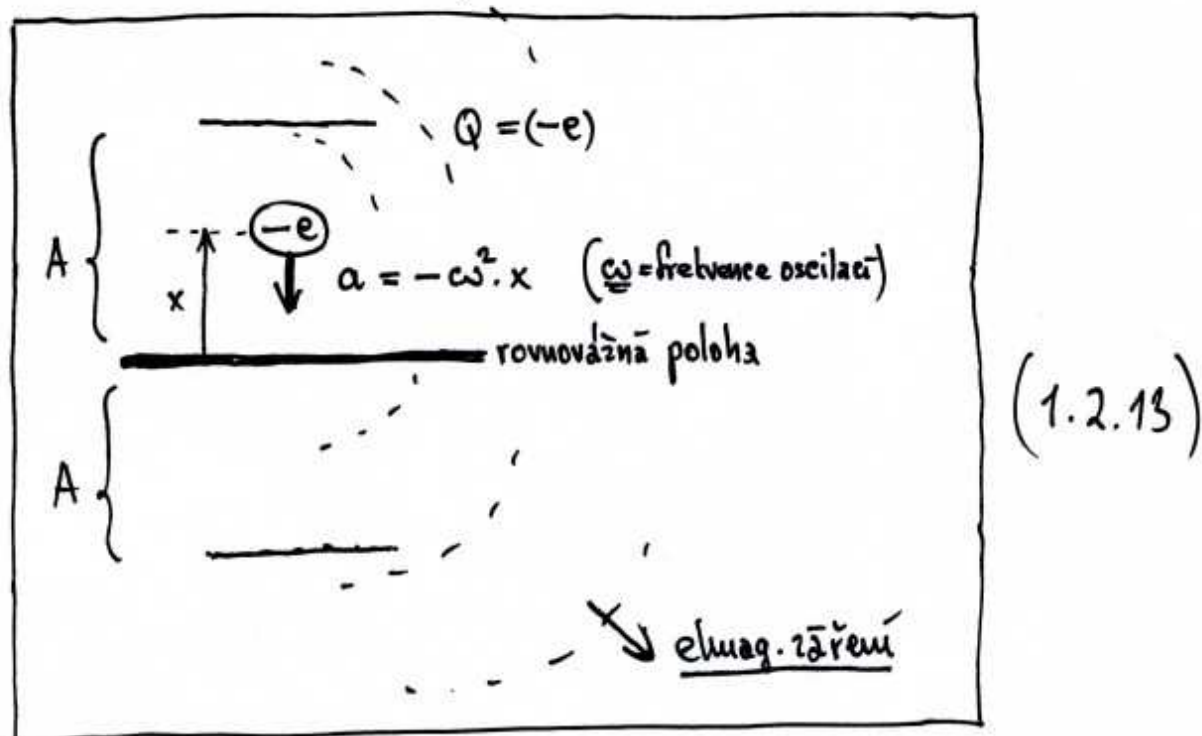
Prostřednictvím elektromagnetických vln se uskutečňuje
přenos energie elmag. pole, kterému se říká
ELEKTROMAGNETICKÉ ZÁŘENÍ .

Mějme např. objekt s nábojem Q , pohybující se
se zrychlením \underline{a} . Pak v důsledku elmag. záření
klesá jeho celková energie \underline{E} podle formule :

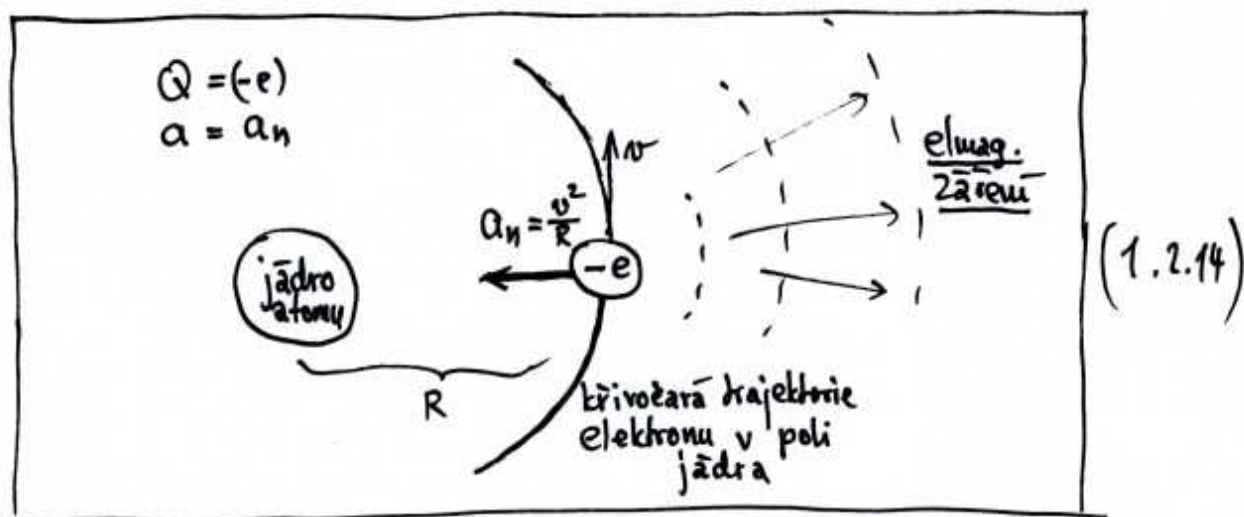
$$\nabla \quad \frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Q^2}{c^3} \cdot a^2 \quad \nabla \quad (1.2.12)$$

Larmorova vypočítací formule
(odvozená z Maxwellových rovnic)

Příklad 1 - oscilující elektron (anténa)



Příklad 2 - elektron v atomu



Kvalitativní charakteristikou elmag. záření je vlnová délka λ ,
nebo ekvivalentně, frekvence ν .

Druhy elmag. záření podle vlnových délek λ :

$$\lambda \lesssim 10^{-12} \text{ m}$$

γ -záření
(vzniká v jaderných procesech)

$$10^{-11} \text{ m} \leq \lambda \leq 10^{-9} \text{ m}$$

RTG-záření
(vzniká v atomárních procesech)

$$10^{-9} \text{ m} \leq \lambda \leq 4 \times 10^{-7} \text{ m}$$

ultrafialové (UV) záření
(přítomno v objektech s povrchovou
teplotou $T \geq 5000 \text{ K}$)

$$4 \times 10^{-7} \text{ m} \leq \lambda \leq 7 \times 10^{-7} \text{ m}$$

viditelné světlo
(dolní hranice ... fialová barva)
(horní hranice ... červená barva)

$$7 \times 10^{-7} \text{ m} \leq \lambda \leq 10^{-3} \text{ m}$$

infračervené (tepelné) záření

$$10^{-3} \text{ m} \leq \lambda \leq 10^{-1} \text{ m}$$

radarové záření

$$10^{-1} \text{ m} \leq \lambda \leq \dots$$

radiotelekomunikační záření

(1.2.15)

Kvantitativní charakteristikou elmag. záření je jeho intenzita (značíme I):

$$\text{intenzita elmag. záření } I \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\text{energie elmag. pole prošlá jednotkou plochy za jednotku času}}{\quad} \quad (1.2.16)$$



Plochou S projde za dobu dt energie elmag. pole obsažená ve zúrodněném kvádru, tj.

$$dE_{\text{elmag}} = \underbrace{\omega}_{\text{energie elmag. pole v jednotce objemu}} \cdot \underbrace{S dt}_{\text{objem kvádra}}$$

Podle (1.2.16) pak pro intenzitu elmag. záření máme:

$$\underline{I} = \frac{dE_{\text{elmag}}}{S dt} = \frac{\omega S dt}{S dt} = \underline{\omega c} \quad (1.2.17)$$

Fázová rychlost elmag. záření c je známa ($c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$), zbývá určit veličinu ω , tj. energie kumulovanou o objemově jednotce elmag. pole.

Z Maxwellových rovnic se pro ω dá odvodit následující výraz:

$$W = \frac{1}{2} \epsilon_0 (\vec{E}^2)_T + \frac{1}{2\mu_0} (\vec{B}^2)_T$$

kde $()_T$ je časová střední hodnota příslušné veličiny během 1 periody T ($T = \frac{1}{\nu}$)

(1.2.18)

Užijím vztahů (1.2.4) a (1.2.5) pro \vec{E} a \vec{B} se spočte:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{(\vec{E}^2)_T}} &= \frac{1}{T} \int_0^T \vec{E}^2 dt = \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \left(\sum_{\alpha} \vec{E}_{0\alpha} \sin^2 \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} (ct - x) \right\} \right)^2 dt = \frac{1}{2} \underline{\underline{\left(\sum_{\alpha} E_{0\alpha}^2 \right)}} \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\frac{1}{2} T \left(\sum_{\alpha} E_{0\alpha}^2 \right)} \end{aligned}$$

2 analogicky

$$(\vec{B}^2)_T = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} B_{0\alpha}^2 \right)$$

Dosažením těchto hodnot do (1.2.18) tak dostaneme:

$$W = \frac{1}{4} \left\{ \epsilon_0 \left(\sum_{\alpha} E_{0\alpha}^2 \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\sum_{\alpha} B_{0\alpha}^2 \right) \right\} \quad (1.2.19)$$

Dosažením (1.2.19) do vztahu pro intenzitu (1.2.17) nakonec máme:

$$I = cW = \frac{1}{4}c \left\{ \epsilon_0 \left(\sum_{\alpha} E_{\alpha}^2 \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\sum_{\alpha} B_{\alpha}^2 \right) \right\}$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$$
(1.2.20)

Povšimněme si, že intenzita I dle (1.2.20)

nezávisí na žádné konkrétní vlnové délce $\underline{\lambda}$, nebo ekvivalentně, na frekvenci $\underline{\nu}$, h .

$$I \neq I(\lambda) \text{ resp. } I \neq I(\nu)$$
(1.2.21)

Vztah (1.2.20) však můžeme přepsat ve tvaru

$$I = \sum_{\alpha} I_{\alpha}$$

$$I_{\alpha} = \frac{1}{4}c \left\{ \epsilon_0 E_{\alpha}^2 + \frac{1}{\mu_0} B_{\alpha}^2 \right\}$$
(1.2.22)

Veličina \underline{I}_{α} již nyní na jednotlivých vlnových délkách $\underline{\lambda}$ závisí a nazývá se spektrální rozdělení intenzity záření podle vlnových délek.

Analogicky dostaneme:

$$I = \sum_{\nu} I_{\nu}$$

$\underline{I_{\nu}}$... spektrální rozdělení intenzity záření podle frekvencí

(1.2.23)

Díky spojitosti intervalu hodnot \underline{u} resp. $\underline{\nu}$ můžeme ve vztazích (1.2.22) a (1.2.23) nahradit

$$\sum_u \rightarrow \int_0^{\infty} du \quad ; \quad \sum_{\nu} \rightarrow \int_0^{\infty} d\nu$$

čemuž pak odpovídá

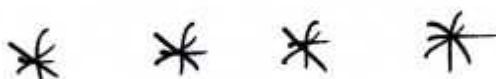
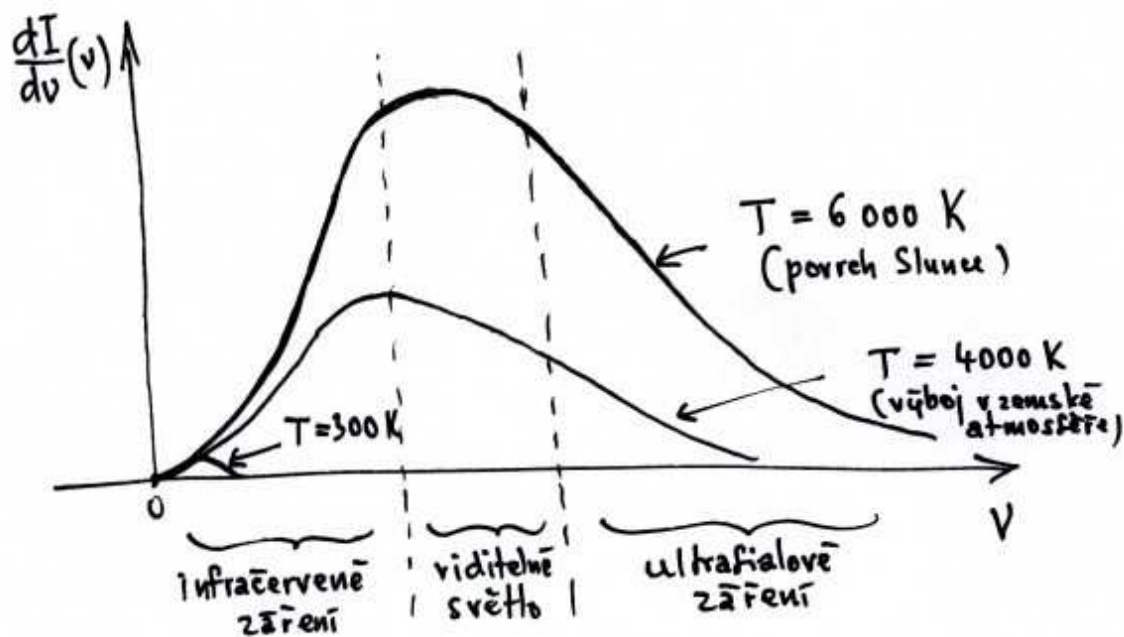
$$\left. \begin{array}{l} I_u \rightarrow \frac{dI}{du}(u) \\ I_{\nu} \rightarrow \frac{dI}{d\nu}(\nu) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{spojité spektrální} \\ \text{rozdělení intenzity} \\ \text{záření} \end{array} \begin{array}{l} \rightarrow \text{podle vln. délek} \\ \rightarrow \text{podle frekvencí} \end{array}$$

Zřejmě platí: $\int_0^{\infty} \frac{dI}{du}(u) du = \int_0^{\infty} \frac{dI}{d\nu}(\nu) d\nu = I$

(1.2.24)

Grafickým vyjádřením funkcí $\underline{\frac{dI}{du}(u)}$, $\underline{\frac{dI}{d\nu}(\nu)}$ jsou tzv. vyzařovací křivky.

Jako ilustraci si ukažme frekvenční vyzařovací křivky některých objektů při různých termodynamických teplotách \underline{T} :



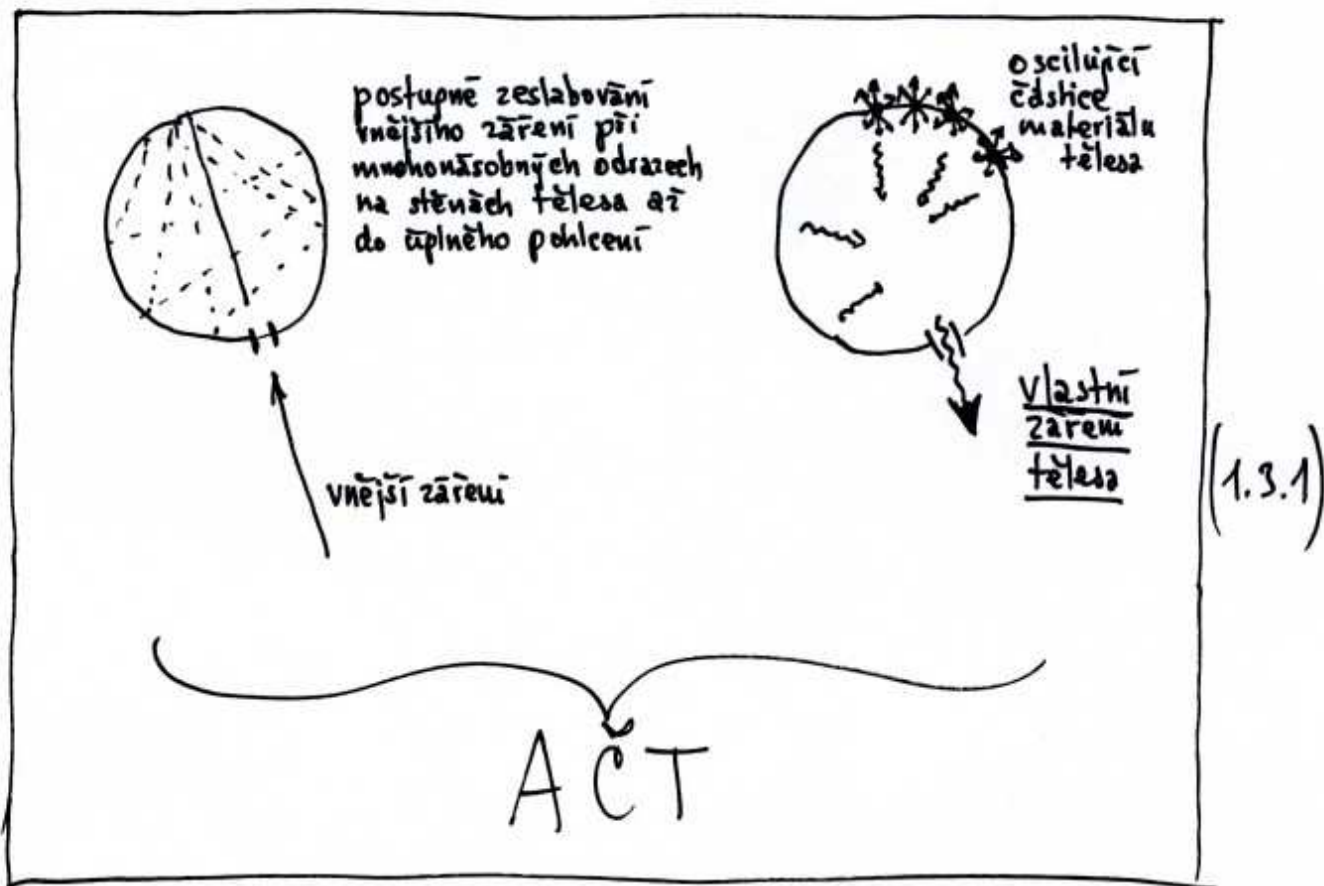
1.3

Záhady a problémy klasické fyziky
 v souvislosti s aplikací zákonitostí
 elmag. záření na systémy o atomárních rovinách

Problém č. 1 – Vyzařovací křivky absolutně černého tělesa
 – ultrafialová katastrofa .

Absolutně černé těleso (AČT) = objekt, který totálně pohlcuje
 veškeré záření, jež na něj dopadá zveněť, takže vše,
 co z něj vychází, je jeho vlastní záření, produkované
 oscilacemi éteru, z nichž se objekt skládá .

Praktická realizace AČT – velká dutina s malým otvorem :



Příklad : povrch Slunce $S = 4\pi R^2$
objem Slunce $V = \frac{4}{3}\pi R^3$

$$R \sim 7 \times 10^8 [\text{m}]$$

⇓

$$\frac{S}{V} = \frac{3}{R} \sim 10^{-8}$$

⇓

$$S \sim 10^{-8} \cdot V$$

Celý povrch Slunce je tedy jen malým otvorem v objemu prostoru uvnitř \Rightarrow Slunce lze v dobré aproximaci považovat za AČT.

Pro spojité spektrální rozdělení intenzity záření podle frekvencí se dá na základě úvah klasické statistiky odvodit pro AČT:

$$\frac{dI}{d\nu}(\nu) = \underbrace{\epsilon_{sk}}_{\substack{\text{střední energie} \\ \text{vyzařená jednou} \\ \text{oscilující částicí} \\ \text{za jednotku času}}} \cdot \underbrace{\frac{8\pi}{c^3} \cdot V \cdot \nu^2}_{\substack{\text{střední počet} \\ \text{částic rozmístěných} \\ \text{na jednotce plochy AČT} \\ \text{o objemu } V \text{ a oscilujících} \\ \text{s frekvencí } \nu}} \quad (1.3.2)$$

Pro ϵ_{sk} dostáváme podle klasické termodynamiky:

$$\epsilon_{sk} = k \cdot T$$

$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ [JK}^{-1}\text{]}$ (Boltzmannova konstanta) T ... termodynamická teplota AČT

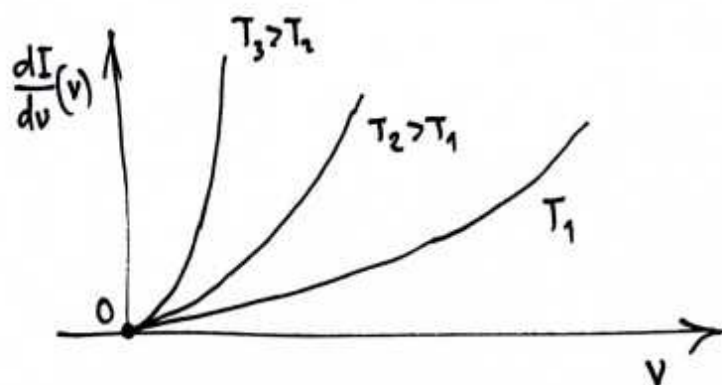
(1.3.3)

Dosažením (1.3.3) do (1.3.2) dostaneme:

$$\frac{dI}{d\nu}(\nu) = \underbrace{\frac{8\pi}{c^3} V k T}_{A(T)} \cdot \nu^2 \quad (1.3.4)$$

Rayleigh - Jeansův vyzařovací zákon
(RJVZ)

Příslušné vyzařovací křivky jsou tedy paraboly:

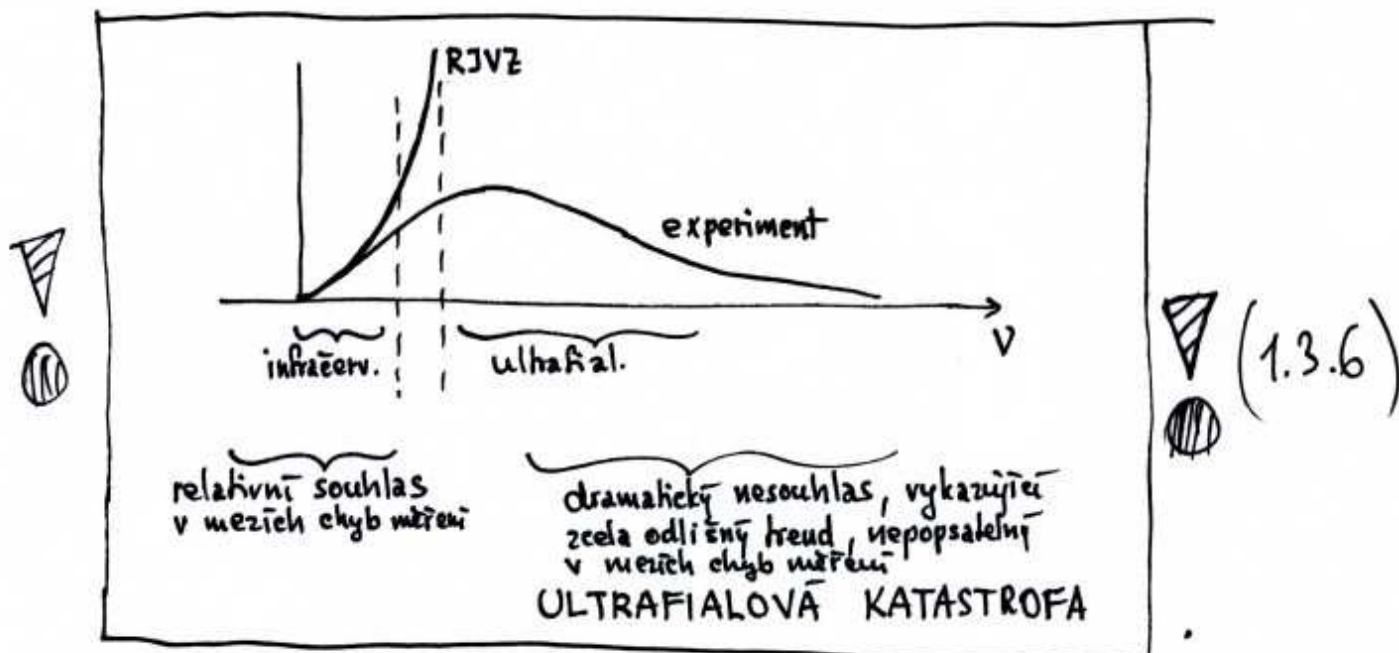


Na první pohled je zřejmé, že zde není něco v pořádku, neboť pro celkovou intenzitu I by muselo platit

$$I = \int_0^{\infty} \frac{dI}{dv}(v) dv = \frac{8\pi}{c^3} \nabla kT \cdot \int_0^{\infty} v^2 dv \rightarrow \infty \quad (1.3.5)$$

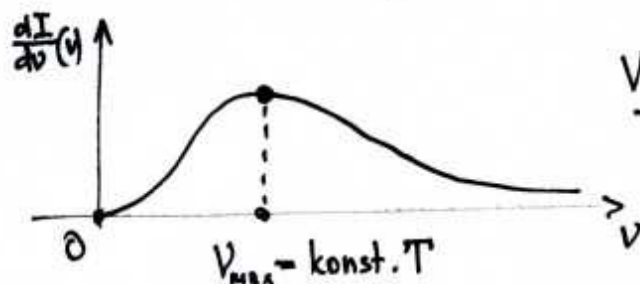
což není možné.

Vežeme-li pevnou teplotu T a porovnáme-li vyzařovací křivku dle RJWZ (1.3.4), tedy spočtenou na základě klasické fyziky, s vyzařovací křivkou měřenou experimentálně, dostaneme toto:



Experimentální vyzařovací křivka vykazuje dále následující charakteristické vlastnosti, které také nemají žádné "klasické" vysvětlení :

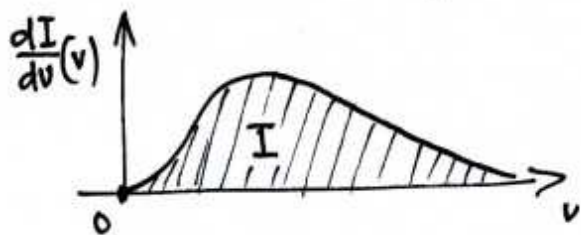
- 1) frekvence, při níž nastává maximum vyzařovací křivky, roste lineárně s teplotou :



Wienův zákon

(1.3.7)

- 2) Celková intenzita záření je úměrná čtvrté mocnině teploty :

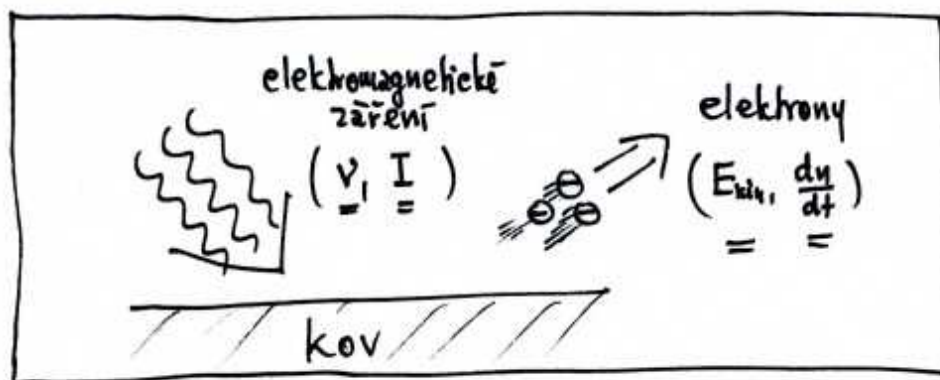


Stefan - Boltzmannův zákon

(1.3.8)

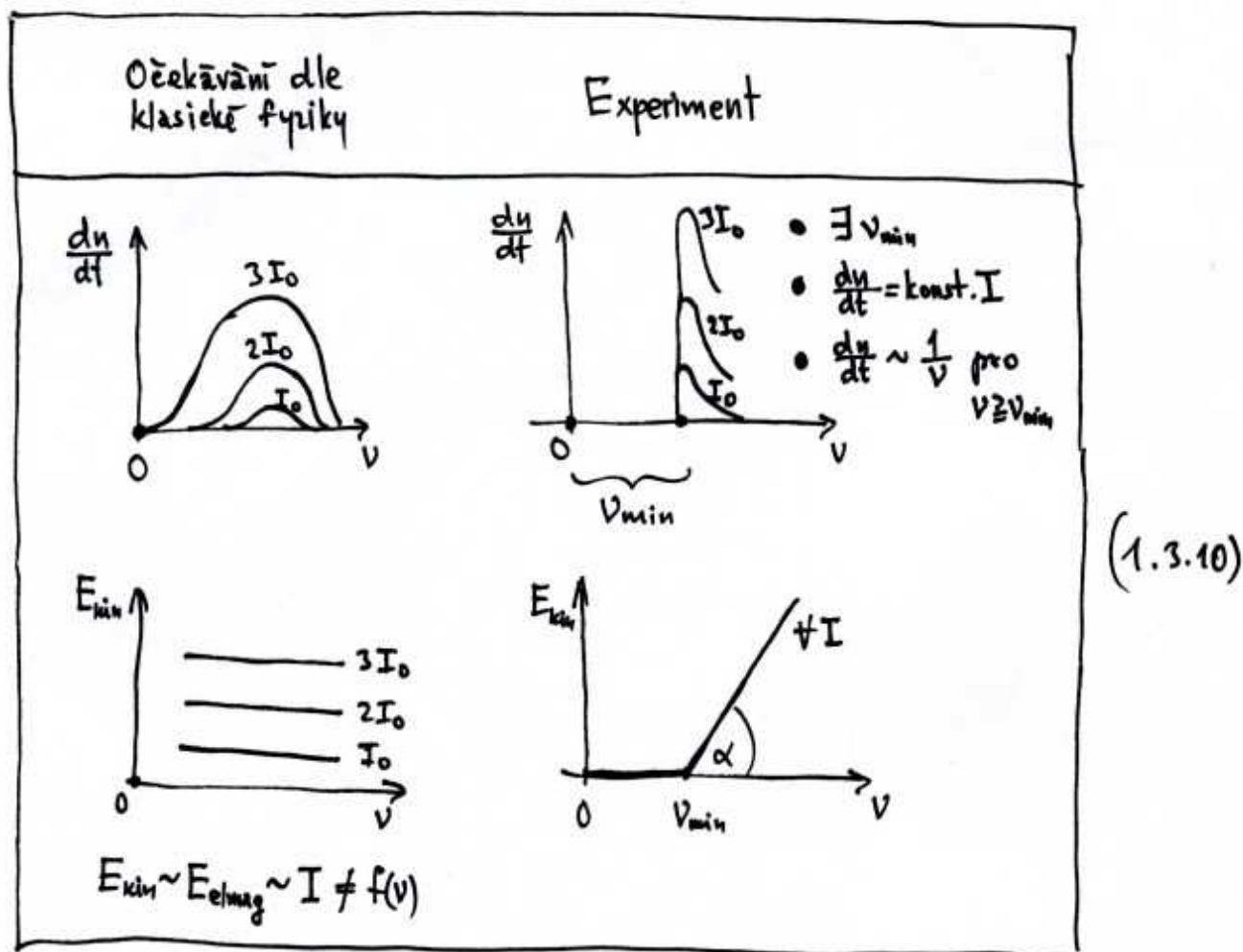
$$I = \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{dI}{dv}(v) dv}_{\text{Obsah vyřařované plochy}} = \underline{\underline{\text{konst.} \cdot T^4}}$$

Problém 8.2 - Fotoelektrický jev (fotoefekt) .



(1.3.9)

Při měření závislosti výstupních parametrů elektronů ($E_{kin}, \frac{dn}{dt}$)
na vstupních parametrech elmag. záření (ν, I)
fyzikové nepřestávali vycházet z údivu:



Dramatický nesouhlas reality s předpověďmi klasické fyziky je evidentní.

Detailnějším měřením se dále ukázalo, že směrnice
přímky $E_{kin} = E_{kin}(\nu)$ je pro všechny kovy stejná a má
hodnotu

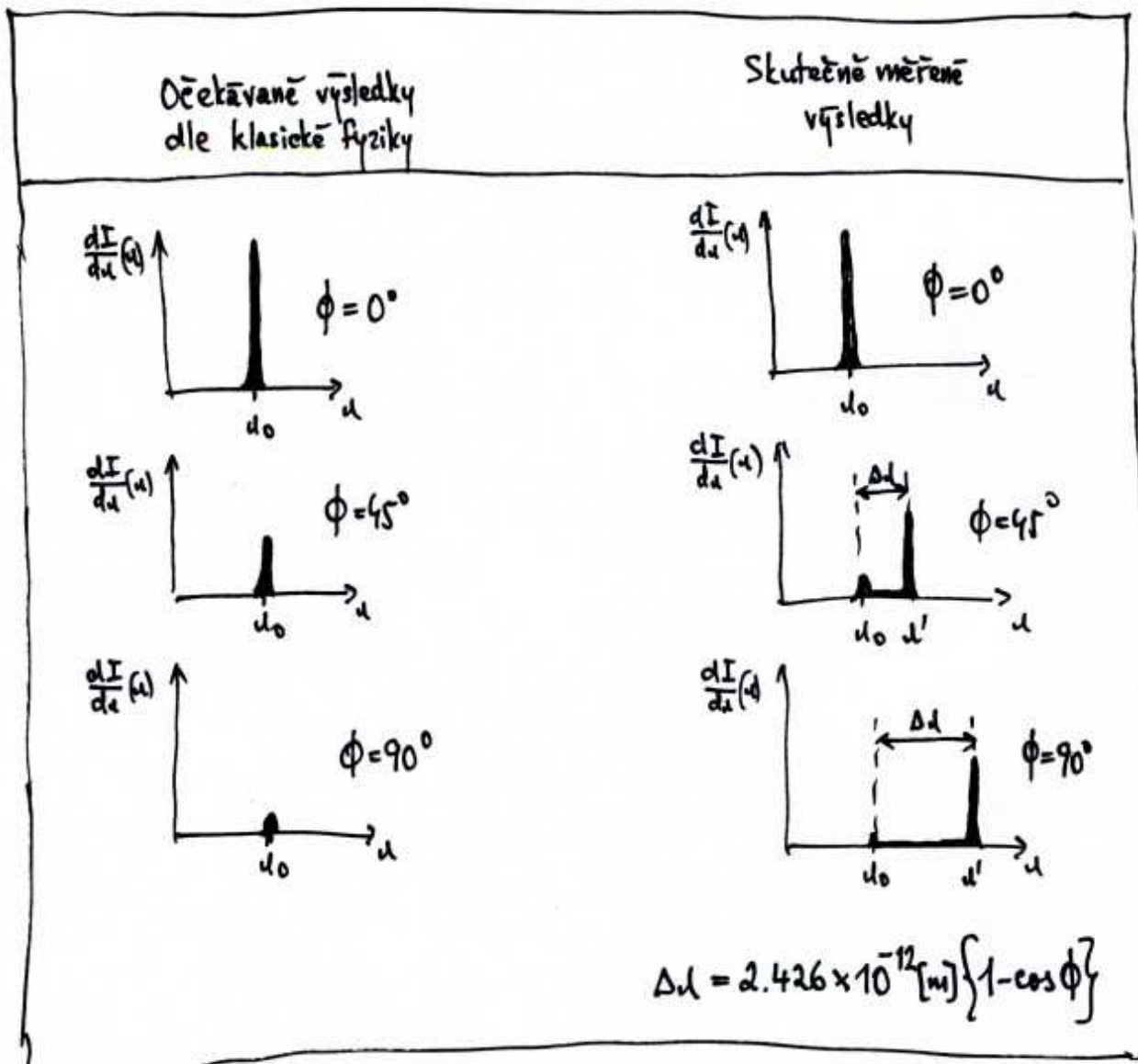
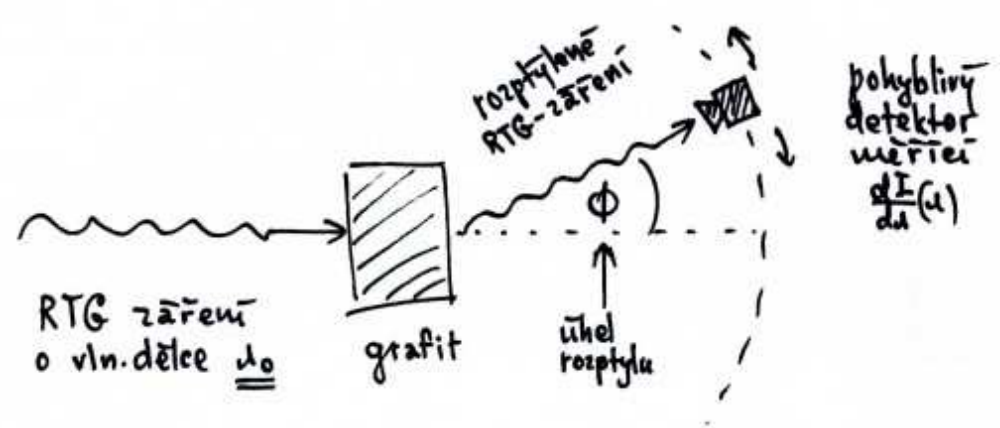
$$\boxed{\text{tg } \alpha = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]}} \quad \dots (1.3.11)$$

Jde tedy o univerzální konstantu.

Naproti tomu hodnota ν_{min} je pro každý kov jiná.

Jde tedy o materiálovou konstantu.

Problém č. 3 - Comptonův jev

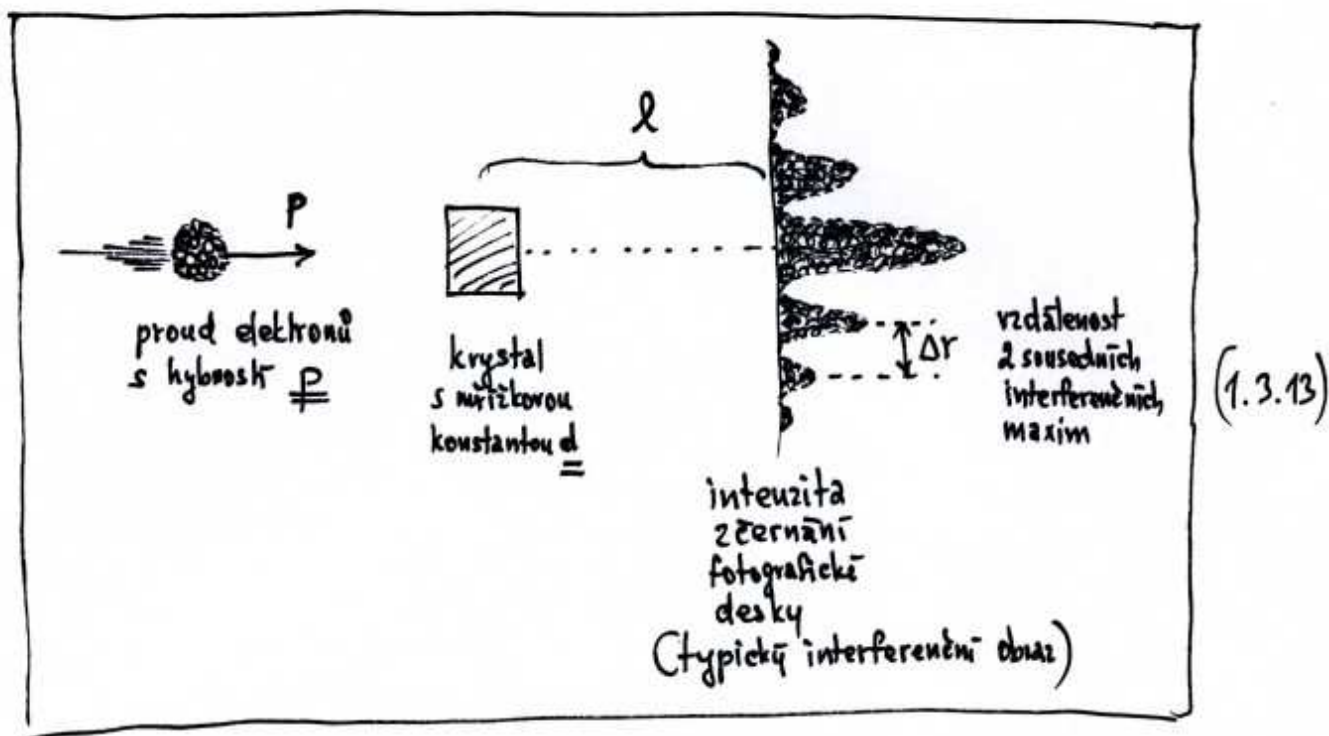


(1.5.12)

$$\Delta\lambda = 2.426 \times 10^{-12} [\text{m}] \{1 - \cos\phi\}$$

Kromě úhlu $\phi = 0^\circ$ opět výrazný nesouhlas.

Problém č. 4 - Davisson-Germerův experiment



Elektrony, dosud považované za typické částice,
 vykazují zjevnou vlastnost vln - interferenci.

Z naměřených hodnot \underline{d} , \underline{l} a $\underline{\Delta r}$ se dá podle
 klasické teorie difrakce vln na krystalu spočítat
vlnová délka vln vytvořivěch příslušný interferenční obraz:

$$\lambda = \frac{d \cdot \Delta r}{l} \quad (1.3.14)$$

Pečlivým a mnohokrát opakovaným měřením bylo navíc
 zjištěno, že součin hybnosti elektronů \underline{p} a vlnové délky $\underline{\lambda}$,
 spočtené dle (1.3.14), je neodbytně konstantní při jakýchkoli
měřeních a má hodnotu 6.625×10^{-34} [Js].

Je přímo fascinující, že tato hodnota přesně souhlasí se směrnici přímky $E_{kin} = E_{kin}(v)$ při fotoelektrickém jevu (viz (1.3.11)).

Výsledkem Davisson - Germerova experimentu je tedy pozoruhodná formule

$$p \cdot \lambda = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]}$$

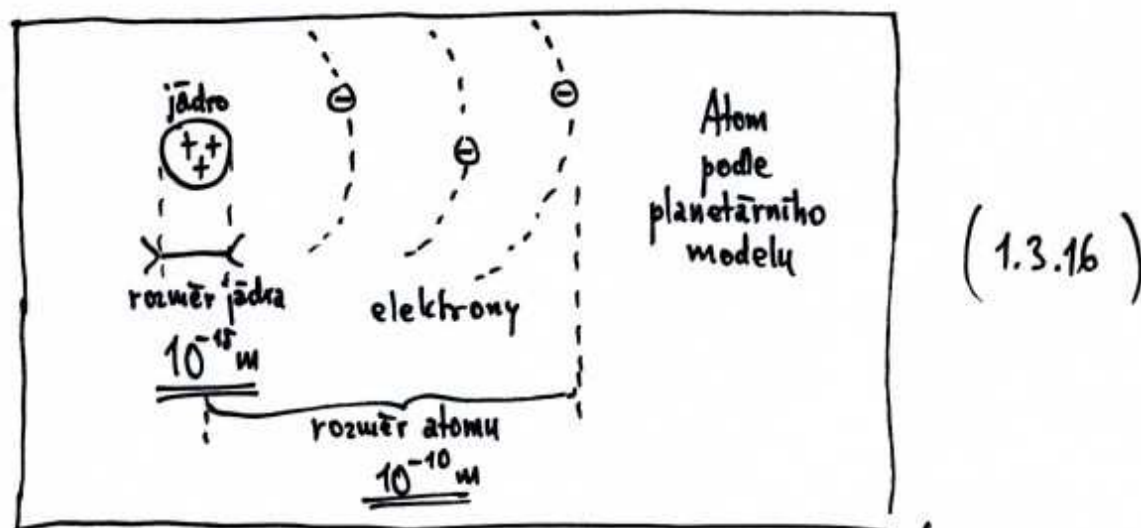
p — hybnost elektronů
 λ — vlnová délka něčeho, co je spjato s elektrony a co vytvořilo interferenční obraz charakterizovaný parametry $d, \theta, \Delta r$ (viz (1.3.14) a (1.3.13))
 6.625×10^{-34} — jakási univerzální konstanta

(1.3.15)

kluká v rámci klasické fyziky je zcela nevysvětlená .

Problém č. 5 - Záření atomů .

Rozsáhlé experimenty na počátku 20. stol. ukázaly atom jako miniaturní analog Sluneční soustavy : Slunce \approx jádro atomu, planety \approx elektrony .
 Odtud : planetární model atomu :



Problém je, že elektrony mají náboj a pohybují se po křivočaré dráze. Jejich celková energie \underline{E} tedy s časem klesá podle Larmorovy vypočítací formule (1.2.12) ($Q = (-e)$; $a = a_n$ (normálově, dostředivě zrychlení)) :

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{c^3} \cdot a_n^2$$

(1.3.14)

$$\underline{e} = 1.6 \times 10^{-19} [\text{C}]$$

$$\underline{m} = 9.1 \times 10^{-31} [\text{kg}]$$

Pro normálově (dostředivě) zrychlení elektronu máme:

$$a_n = \frac{F_{\text{Coulomb}}}{m} = \frac{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}}{m} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}$$

(1.3.18)

Obecně definice $\underline{a_n}$ říká:

$$a_n = \frac{v^2}{r}$$

(1.3.19)

takže porovnáním (1.3.18) a (1.3.19) máme rovnici:

$$\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}$$



$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r}$$

... (1.3.20)

Užitím (1.3.20) snadno zjistíme kinetickou energii E_{kin} elektronu :

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

(1.3.21)

Pro potenciální energii E_{pot} elektronu (-e) v elektrostatickém poli jádra (+e) platí :

$$E_{pot} = (-e) \cdot \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(+e)}{r} \right) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

nábij elektronu
potenciál jádra

(1.3.22)

Sečtením (1.3.21) a (1.3.22) dostaneme celkovou energii elektronu v atomu :

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} + \left(\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

tedy

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



(1.3.23)

celková energie elektronu v atomu

Vztah (1.3.18) pro \underline{a}_n a vztah (1.3.23) pro \underline{E} nyní dosadíme do Larmorovy vyzařovací formule (1.3.17):

$$\frac{d}{dt} \left(\underbrace{-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}}_E \right) = -\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{c^3} \cdot \left(\underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}}_{a_n} \right)^2$$



$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{r} \right) = K \cdot \frac{1}{r^4} \quad (1.3.24)$$

$$K = \frac{e^4}{12\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 c^3} \quad (1.3.25)$$

Nyní vyřešíme diferenciální rovnici (1.3.24), tj. najdeme parametrickou rovnici trajektorie elektronu v atomu $\underline{r} = \underline{r}(t)$.

Plak $\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{r} \right) = -\frac{1}{r^2} \frac{dr}{dt}$, takže rovnice (1.3.24) má tvar:

$$-\frac{1}{r^2} \frac{dr}{dt} = K \cdot \frac{1}{r^4} \quad (1.3.26)$$

což je obyčejná dif. rovnice 1. řádu se separovatelnými proměnnými.

Standardní úpravou (1.3.26) tak máme :

$$r^2 dr = -K \cdot dt$$

↓

$$\int r^2 dr = -K \cdot t + \text{konst.} \quad (1.3.27)$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\frac{1}{3} r^3}$

Pro $t=0$ je $r = r_{\text{atom}} \sim 10^{-10} [\text{m}]$, takže platí :

$$\frac{1}{3} r_{\text{atom}}^3 = -K \cdot 0 + \text{konst.}$$

↓

$$\text{konst.} = \frac{1}{3} r_{\text{atom}}^3 \quad (1.3.28)$$

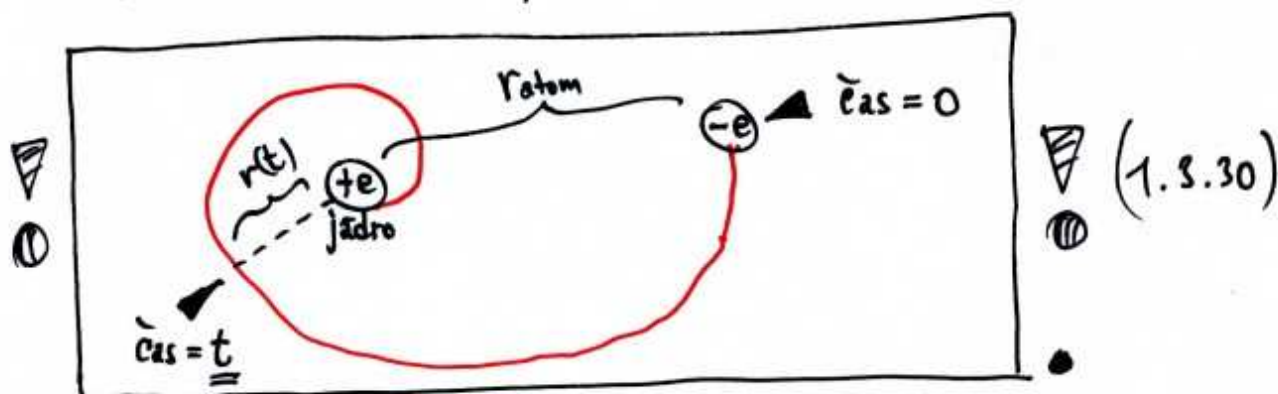
Dosažením (1.3.28) do (1.3.27) nakonec dostaneme :

$$\frac{1}{3} r^3 = -K \cdot t + \frac{1}{3} r_{\text{atom}}^3$$

↓

$$r(t) = \sqrt[3]{r_{\text{atom}}^3 - 3K \cdot t} \quad (1.3.29)$$

parametrická rovnice trajektorie elektronu v atomu ,



Označme \underline{T} čas, kdy elektron dopadne do jádra,
tj. kdy platí:

$$r(T) = r_{\text{jádro}} \quad (1.3.31)$$

Dosadíme-li do levé strany (1.3.31) funkci (1.3.29) pro $t = T$, máme:

$$\sqrt[3]{r_{\text{atom}}^3 - 3K \cdot T} = r_{\text{jádro}}$$



$$T = \frac{r_{\text{atom}}^3 - r_{\text{jádro}}^3}{3K}$$

$r_{\text{atom}} \approx 10^{-10} [\text{m}]$
 $r_{\text{jádro}} \approx 10^{-15} [\text{m}]$

$$K = \frac{e^4}{12\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 c^3} \quad (\text{viz (1.3.25)})$$

(1.3.32)

Číselně:

$$T \approx 10^{-10} [\text{s}]$$

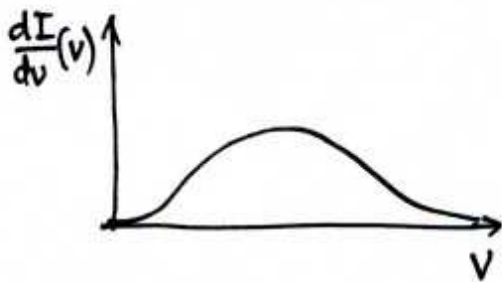
desetina nanosekundy

(1.3.33)

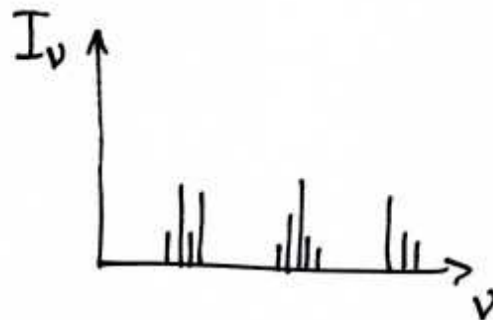
Elektron by tedy měl vyžárit veškerou svou energii během $\frac{1}{10}$ ns a zřítit se do jádra, což znamená zánik atomu.
To se evidentně neděje, takže klasická fyzika má další problém.

- Experiment říká :
- atomy existují a dokonce jsou stabilní po dlouhou dobu
(elektrony tedy do jader padat nemohou).
 - atomy přesto září
(kde ale na to berou energii, to je záhada těžkého kalibru, srovnatelná s ultrafialovou katastrofou).

Experiment dále říká, jak atomy září,
Především jinak než AČT.



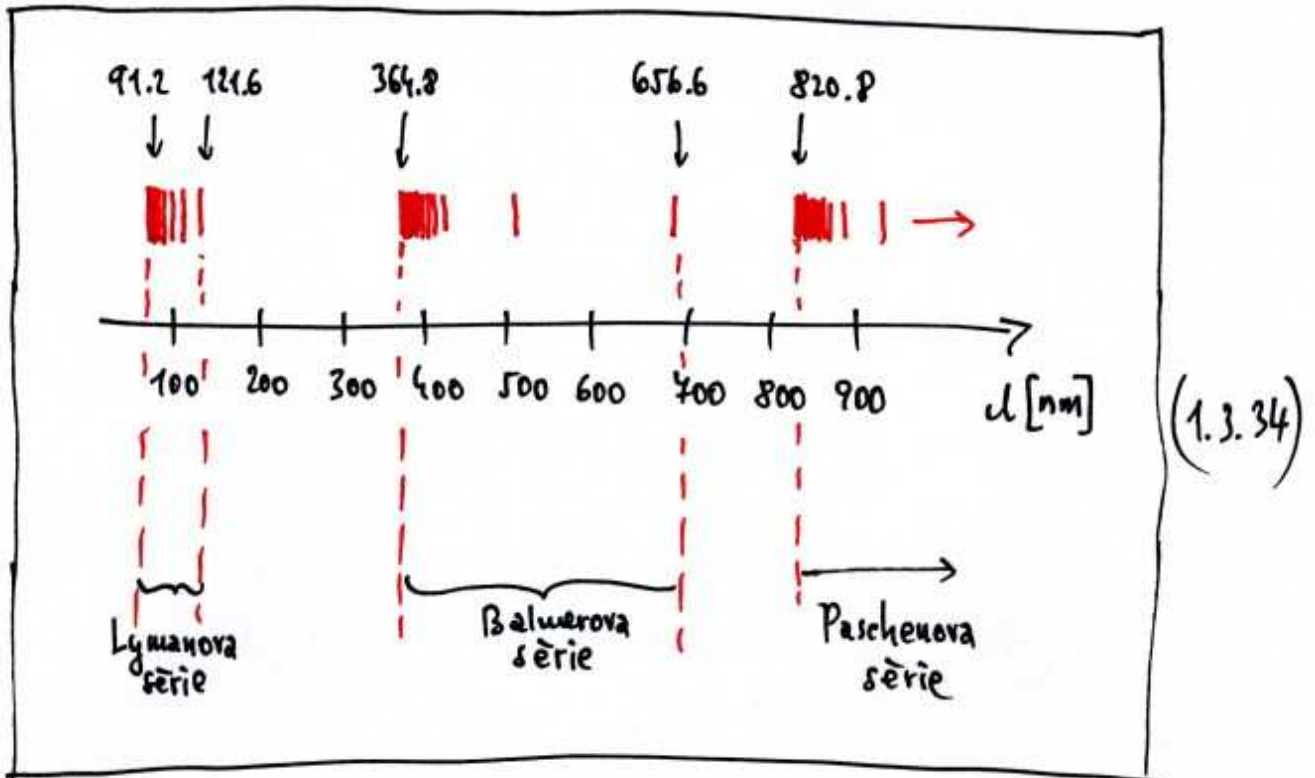
záření AČT
(spektrální rozdělení intenzity je spojité)



záření individuálního atomu
(spektrální rozdělení intenzity je nespojité a říká se mu čarově (je tvořeno tzv. spektrálními čarami))

Experiment dále ukazuje, že spektrální čáry v zářeni atomu daného chemického prvku jsou uspořádány do určitých skupin, kterým se říká série.

Jako příklad uvedme záření atomu vodíku :



Empiricky se podařilo najít následující formule pro vlnové délky spektrálních čar v jednotlivých sériích :

Lymanova série :
$$\lambda_k = \frac{9.12 \times 10^{-8} \text{ [m]}}{\left(1 - \frac{1}{k^2}\right)}$$

 $k = 2, 3, 4, \dots, \infty$

Balmerova série :
$$\lambda_k = \frac{9.12 \times 10^{-8} \text{ [m]}}{\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{k^2}\right)}$$

 $k = 3, 4, 5, \dots, \infty$

Paschenova série :
$$\lambda_k = \frac{9.12 \times 10^{-8} \text{ [m]}}{\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{k^2}\right)}$$

 $k = 4, 5, 6, \dots, \infty$



(1.3.35)

Problém č.6 - Chování atomů ve vnějším magnetickém poli
(Zeemanův jev).

Nějme zářící atom a uvažujme spektrální čáru o vlnové délce λ .

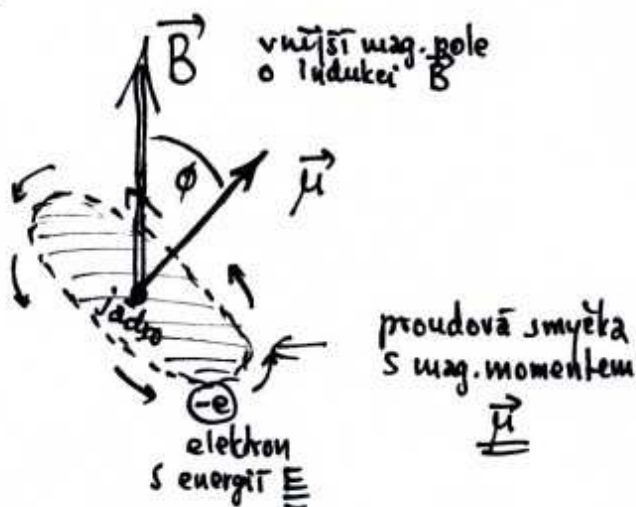
Nechť E je energie příslušného elektronu způsobujícího toto záření (zářím nezámořat).

Vložíme-li atom do mag. pole o indukci \vec{B} , pak elektron svým pohybem kolem jádra vyhrátí proudovou smyčku s určitým magnetickým momentem $\vec{\mu}$, jejíž energie v mag. poli o indukci \vec{B} je:

$$\Delta E_{\text{mag}}(\phi) = -(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = -\mu B \cos \phi$$

ϕ ... úhel mezi vektory $\vec{\mu}$ a \vec{B}

μ, B ... velikosti vektorů $\vec{\mu}$ a \vec{B}

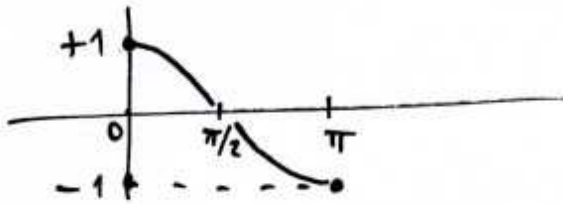


(1.3.36)

Celková energie elektronu v mag. poli tedy je:

$$E(\phi) = E + \Delta E_{\text{mag}}(\phi) = E - \mu B \cos \phi \quad (1.3.37)$$

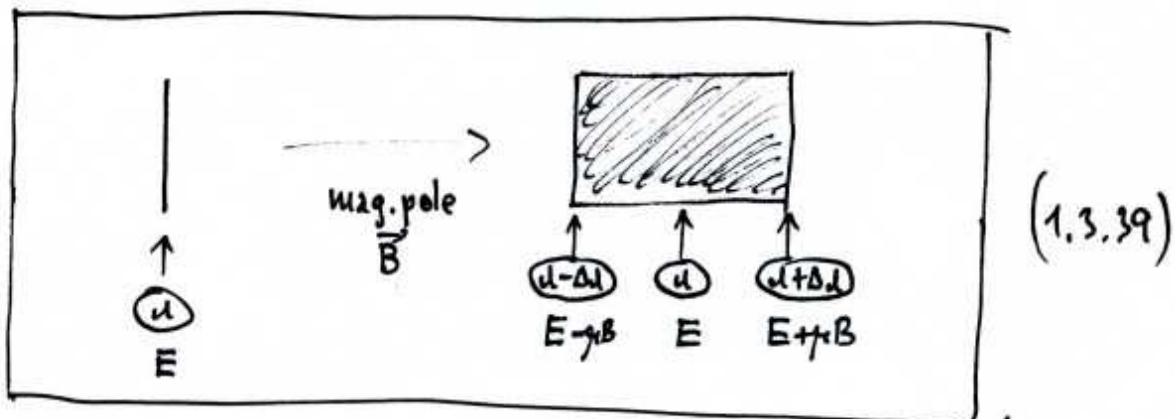
Průběh funkce $\cos \phi$ na intervalu $(0; \pi)$ je:



Při daných hodnotách B a μ se tedy energie elektronu $E(\phi)$ dle (1.3.37) spojitě mění v intervalu

$$E - \mu B \leq E(\phi) \leq E + \mu B \quad (1.3.38)$$

Jestliže před vložením do mag. pole byla energie elektronu E a tato hodnota odpovídala vlnové délce spektrální čáry λ , pak po vložení do mag. pole očekáváme podle (1.3.38) spojitě rozmazení této spektrální čáry dle schématu



Experiment však říká něco jiného :

$$\Delta d = \frac{1}{4\pi c} \cdot \frac{e}{m} \cdot u^2 \cdot B$$
 (1.3.40)

$e = 1.6 \times 10^{-19} [C]$ (náboj elektronu)
 $m = 9.1 \times 10^{-31} [kg]$ (hmotnost elektronu)
 $c = 3 \times 10^8 [m/s]$ (fyz. rychlost elmag. zář.)

Tedy nikoli "spojitě rozmařané", ale vzájemně vzdálených spektrálních čar v přesně definované vzájemné vzdálenosti Δd (Zeemanův jev).

KONEC 1. TÝDNE

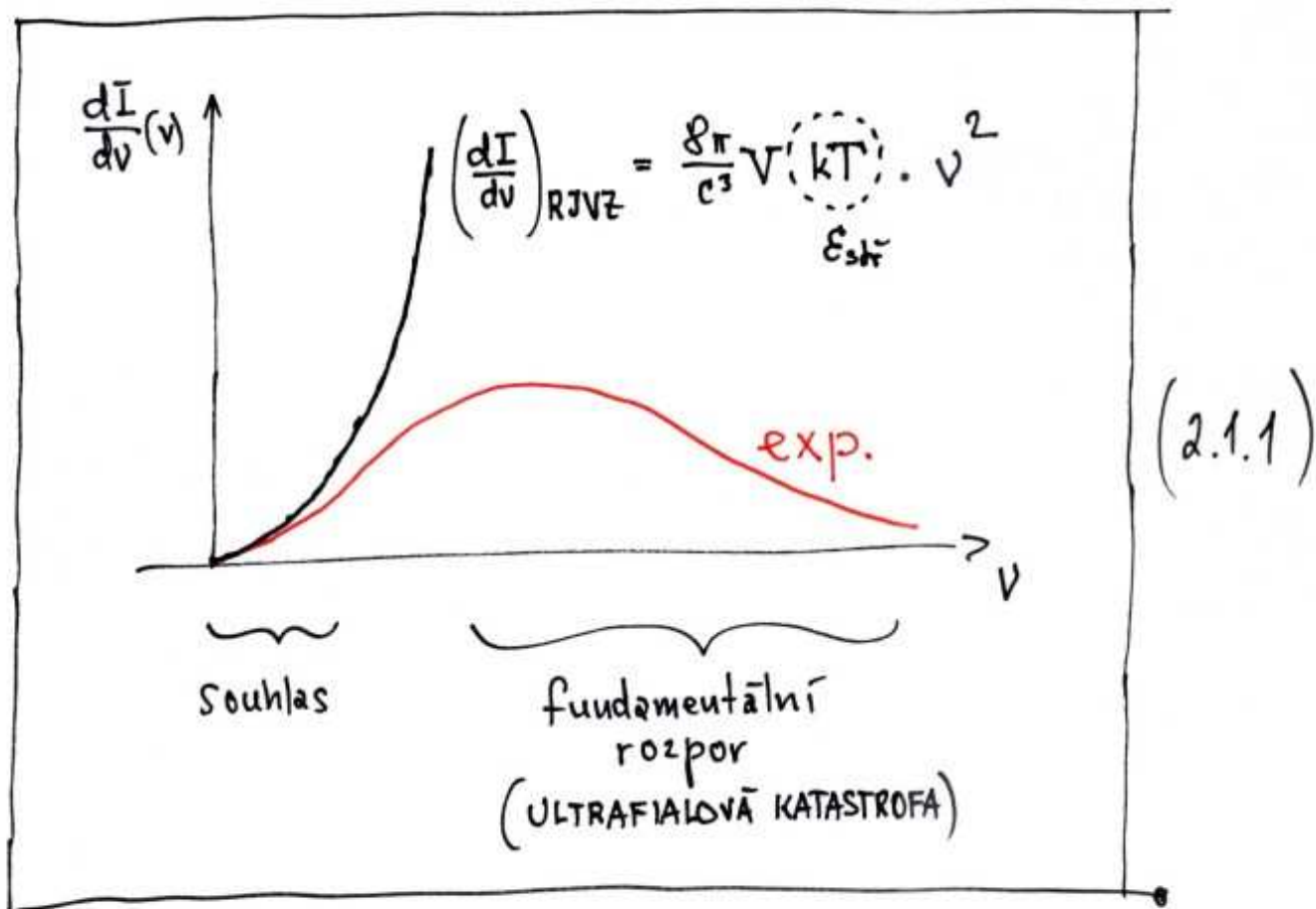


2. TÝDEN

2.1 Zrod kvantové hypotézy

Když jsou experimentální výsledky v rozporu s existující teorií, je to dobře, neboť je na obzoru pokrok: ukázala se totiž nutnost existující teorii změnit a vylepšit.

Připomeňme si fundamentální rozpor mezi teorií a experimentem při studiu záření AČT:



Řešení rozporu náleží Maxmilianu Planckovi,

Podle něj klíčem k řešení musí být veličina

$$\boxed{\varepsilon_{sh} = kT}$$

neboť v ní je obsažen vlastní mechanismus toho,
jak vlastně AČT září.

První, co je třeba udělat, je tedy důkladně a kriticky
prozkoumat, která klasická termodynamika přišla
k hodnotě $\varepsilon_{sh} = \underline{kT}$.

Necht' v materiálu AČT je :

<u>N_1</u>	atomů (oscilátorů) vyzařujících za jednotku času energii	<u>ε_1</u>
<u>N_2</u>	———— // ————	<u>ε_2</u>
⋮	⋮	⋮
<u>N_k</u>	———— // ————	<u>ε_k</u>
⋮	⋮	⋮

Celkový počet atomů (oscilátorů) :

$$\boxed{N_1 + N_2 + \dots + N_k + \dots = \sum_n N_n = N} \quad (2.1.2)$$

Celková jimi vyzařovaná energie za jednotku času :

$$\boxed{N_1 \varepsilon_1 + N_2 \varepsilon_2 + \dots + N_k \varepsilon_k + \dots = \sum_n \varepsilon_n N_n = E} \quad (2.1.3)$$

Šhredův energie vyzařovaná jedním atomem (oscilátorem) za jednotku času pak podle (2.1.2) a (2.1.3) je :

$$\mathcal{E}_{sh} = \frac{E}{N} = \frac{\sum_n \varepsilon_n N_n}{\sum_n N_n} \quad (2.1.4)$$

Podle klasické Boltzmannovy statistiky platí :

$$N_n = N \cdot e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \quad (2.1.5)$$

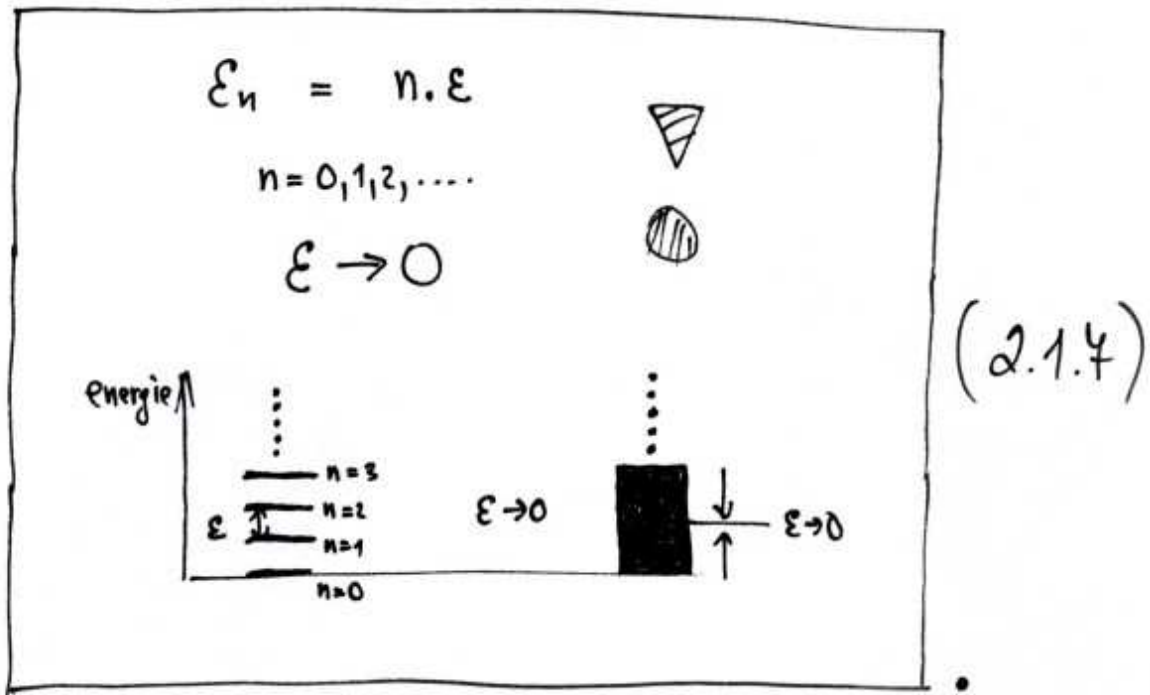
k ... Boltzmannova konstanta
 T ... termodynamická teplota

Dosažením (2.1.5) do (2.1.4) máme :

$$\mathcal{E}_{sh} = \frac{\sum_n \varepsilon_n \cdot N \cdot e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_n N \cdot e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}} = \frac{N \cdot \sum_n \varepsilon_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{N \cdot \sum_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}} = \frac{\sum_n \varepsilon_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}} \quad (2.1.6)$$

Energie $\underline{\varepsilon_n}$, které může vyzařovat atom AČT jakožto oscilátor, nejsou podle klasické fyziky nijak omezeny, mohou tedy v principu spojitě nabývat všech hodnot od $\underline{0}$ do $\underline{\infty}$.

Tuto okolnost matematicky vyjádříme následujícími předpisy :



Dosadíme-li předpis (2.1.7) do vztahu (2.1.6), máme:

$$\varepsilon_{sk} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\sum_n n \cdot \varepsilon \cdot e^{-\frac{n \cdot \varepsilon}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{n \cdot \varepsilon}{kT}}} \right\} \quad (2.1.8)$$

Zavedeme-li novou proměnnou

$$\chi = -\frac{\varepsilon}{kT} \quad (2.1.9)$$

můžeme výraz (2.1.8) upravit na tvar:

$$\varepsilon_{sk} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \varepsilon \cdot \frac{\sum_n n \cdot e^{n\chi}}{\sum_n e^{n\chi}} \right\} \quad (2.1.10)$$

Čitatel zlomku ε (2.1.10) je derivací jmenovatele podle x , neboť :

$$\frac{d}{dx} \left(\sum_n e^{nx} \right) = \sum_n \underbrace{\frac{d}{dx} (e^{nx})}_{n \cdot e^{nx}} = \sum_n n \cdot e^{nx} \quad (2.1.11)$$

Označíme-li tedy

$$f(x) = \sum_n e^{nx} \quad (2.1.12)$$

můžeme výraz (2.1.10) přepsat ve tvaru :

$$\varepsilon_{\text{stř}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \varepsilon \cdot \frac{\frac{df}{dx}(x)}{f(x)} \right\} \quad (2.1.13)$$

Funkci $f(x)$ dle (2.1.12) snadno spočteme :

$$f(x) = \sum_n e^{nx} = 1 + e^x + (e^x)^2 + \dots = \frac{1}{1 - e^x}$$

geometrická řada
 s kvocientem
 $q = e^x = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} < 1$
 ↑
 (2.1.9)

(2.1.14)


Odtud derivováním podle x :

$$\frac{df}{dx}(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1 - e^x} \right) = \frac{e^x}{(1 - e^x)^2} \quad (2.1.15)$$


Dosazení (2.1.14) a (2.1.15) do (2.1.13) pak máme:

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\mathcal{E}_{sh}}} &= \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \mathcal{E} \cdot \frac{\frac{df}{dx}(x)}{f(x)} \right\} = \\
 &= \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \mathcal{E} \cdot \frac{\frac{e^x}{(1-e^x)^2}}{\frac{1}{1-e^x}} \right\} = \\
 &= \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \mathcal{E} \cdot \frac{e^x}{1-e^x} \right\} \stackrel{\substack{= \\ \uparrow \\ (2.1.9)}}{=} \\
 &= \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \mathcal{E} \cdot \frac{e^{-\frac{\mathcal{E}}{kT}}}{1 - e^{-\frac{\mathcal{E}}{kT}}} \right\} = \\
 &= \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \frac{\mathcal{E}}{e^{\frac{\mathcal{E}}{kT}} - 1} \right\}, \\
 &\quad \underline{\underline{\hspace{10em}}}
 \end{aligned}$$

Celkem tedy:



$$\mathcal{E}_{sh} = \lim_{\mathcal{E} \rightarrow 0} \left\{ \frac{\mathcal{E}}{e^{\frac{\mathcal{E}}{kT}} - 1} \right\}$$



(2.1.16)

K výpočtu limity v. (2.1.16) použijeme:

$$e^{\frac{\varepsilon}{kT}} = 1 + \frac{\varepsilon}{kT} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)^2 + \dots}_{O(\varepsilon^2)} \quad (2.1.17)$$

Zanedbáme, neboť
počítáme $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$.

Máme tak:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1} \right\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\varepsilon}{\left(1 + \frac{\varepsilon}{kT} + \dots\right) - 1} \right\} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\varepsilon}{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)} \right\} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (kT) = \underline{\underline{kT}} \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

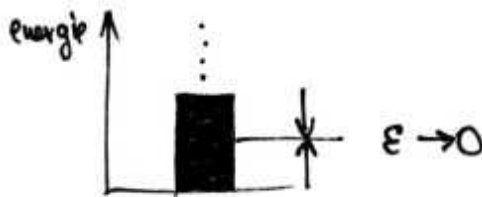
Dosažením (2.1.18) do (2.1.16) máme
konечný výsledek klasické fyziky:

$$\nabla \quad \boxed{\varepsilon_{stř} = kT} \quad \nabla \quad (2.1.19)$$

Zdůrazněme, že v klasickém výsledku

$$\epsilon_{str} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{\epsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} - 1} \right\} = kT \quad (2.1.20)$$

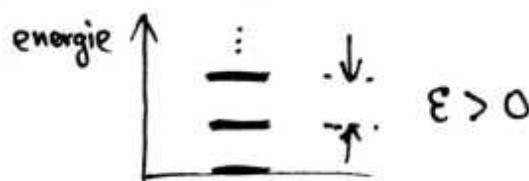
je automaticky obsažen předpoklad, že atomy AČT jakožto oscilátory vyzařují energii SPOJITĚ:



To však vede k Rayleigh-Jeansově vyzařovací křivce, která je v ultrafialové oblasti v rozporu s experimentem.

Při úvahách o řešení tohoto rozporu napadla Maxe Plancka geniální myšlenka, tzv. KVANTOVÁ HYPOTÉZA:

Co když atomy AČT nevyzařují energii spojité, ale po určitých kvantech (porcích) konečné velikosti $\epsilon > 0$?



Matematicky je to ekvivalentní škrtnutí $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$ ve vztahu (2.1.20)

Planck tedy vyslovil hypotézu, že ϵ_{str} se neřídí vztahem (2.1.20), ale vztahem:

$$\epsilon_{str}^{Planck}(\epsilon) = \frac{\epsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} - 1} \quad (2.1.22)$$

ϵ konečné, $\epsilon > 0$

Touto hypotézou samozřejmě Planck vykročil daleko
za hranice klasické fyziky, ale současně získal
určitou šanci objasnit experimentální vyzařovací
křivky AČT.

Plak totiž:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\epsilon_{sh}^{Planck}(\epsilon)}}} &= \frac{\epsilon}{e^{\frac{\epsilon}{kT}} - 1} = \frac{\epsilon}{\left(1 + \frac{\epsilon}{kT} + \frac{1}{2}\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^2 + \dots\right) - 1} = \\ &= \frac{\epsilon}{\epsilon\left(\frac{1}{kT} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{kT}\right)^2 \cdot \epsilon + \dots\right)} = \frac{1}{\underline{\underline{\left(\frac{1}{kT} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{kT}\right)^2 \cdot \epsilon + \dots\right)}}} \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

odkud je vidět, že pro každé konečně, kladné ϵ je:

$$\boxed{\epsilon_{sh}^{Planck}(\epsilon) < kT} \quad (2.1.24)$$

takže

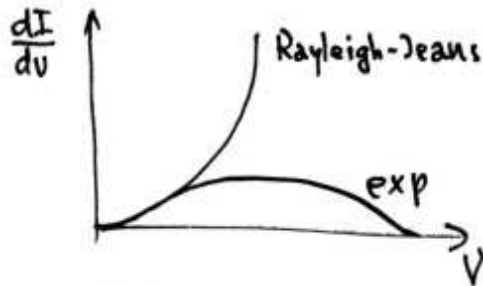
$$\underline{\underline{\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{Planck}}} = \frac{8\pi}{c^3} V \epsilon_{sh}^{Planck}(\epsilon) \cdot \nu^2 < \underbrace{\frac{8\pi}{c^3} V kT \cdot \nu^2}_{\underline{\underline{\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{Rayleigh-Jeans}}} \quad (2.1.25)$$

příčinná rozdíl mezi $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{Planck}$ a $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{Rayleigh-Jeans}$
je tim větší, čím větší je $\underline{\underline{\epsilon}}$.



Současně však Planck věděl, že

$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{exp}}$ se tím více liší od $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Rayleigh-Jeans}}$,
čím větší je frekvence ν :



(2.1.26)

Kombinací (2.1.25) a (2.1.26) Planck vyslovil další směšnou hypotézu, a sice, že

$$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}} \sim \left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{exp}}$$

pokud mezi $\underline{\varepsilon}$ a $\underline{\nu}$ bude přímá úměra.

(2.1.27)

Planck tuto přímou úměru vyjádřil požadavkem

$$\varepsilon = h \cdot \nu \quad (2.1.28)$$

kde \underline{h} je zatím neznámá konstanta.

Dosažením (2.1.28) do vztahu (2.1.22) pro $\varepsilon_{\text{str}}^{\text{Planck}}(\nu)$ tak máme:

$$\varepsilon_{\text{str}}^{\text{Planck}}(\nu) = \frac{h\nu}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)}$$

(2.1.29)

Pomocí (2.1.29) nakonec dostaneme:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}}}} &= \frac{8\pi}{c^3} V \cdot \underbrace{\epsilon_{\text{sk}}^{\text{Planck}}(\nu)}_{\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}} \cdot \nu^2 = \\ &= \underline{\underline{\frac{8\pi h V}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)}}} \end{aligned} \quad (2.1.30)$$

Místo Rayleigh-Jeansova vyzařovacího zákona

$$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Rayleigh-Jeans}} = \frac{8\pi}{c^3} V kT \cdot \nu^2 \quad (2.1.31)$$

založeného na klasické fyzice,

fak dostáváme nový, Planckův vyzařovací zákon:

$$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}} = \frac{8\pi h V}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)} \quad (2.1.32)$$

kteřý je založen na kvantové hypotéze, a kteřý tudíž vychází za rámec klasické fyziky.

Prozkoumejme nyní, jak se Planckův vyzařovací zákon chová pro malé a vysoké frekvence.

$$(\nu \rightarrow 0) \quad (\nu \rightarrow \infty)$$

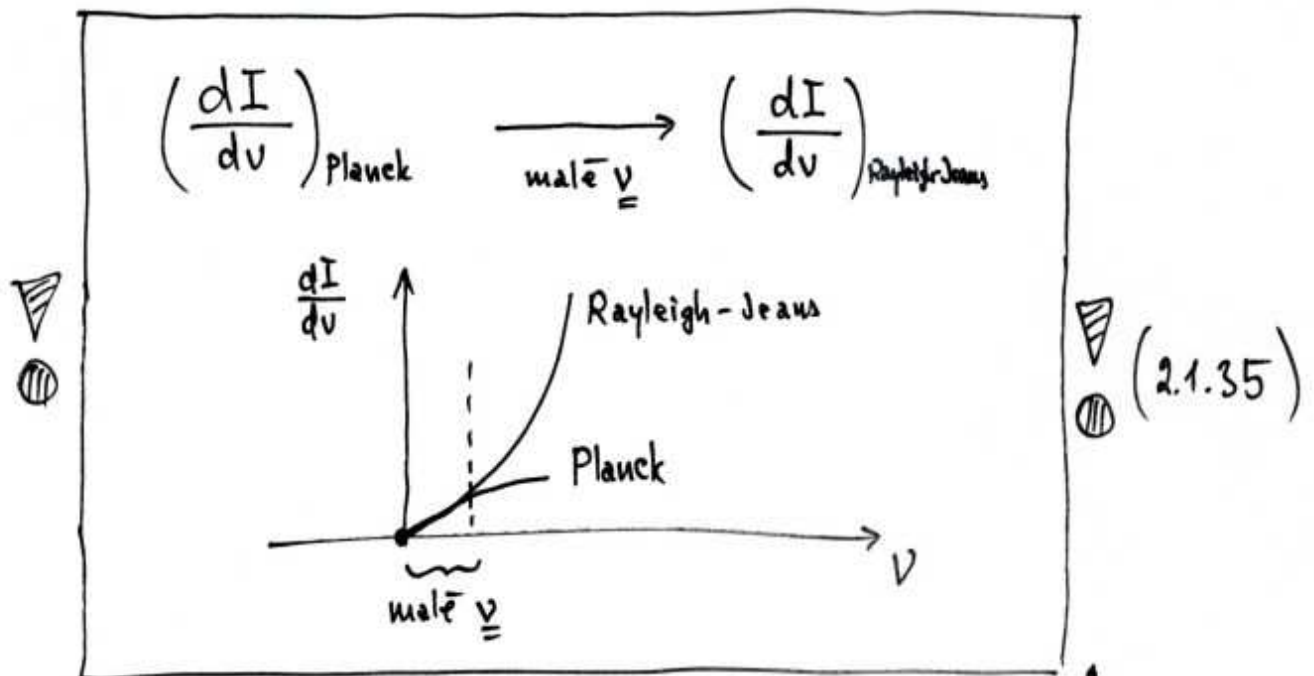
Pro $\nu \rightarrow 0$ platí:

$$\frac{\nu^3}{(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)} = \frac{\nu^3}{(1 + \frac{h\nu}{kT} + \dots) - 1} \approx \frac{\nu^3}{(\frac{h\nu}{kT})} = \frac{kT\nu^2}{h} \quad (2.1.33)$$

což dosazeno do (2.1.32) dá:

$$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}} \approx \frac{8\pi h\nu}{c^3} \cdot \frac{kT\nu^2}{h} = \underbrace{\frac{8\pi}{c^3} \nu kT}_{\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Rayleigh-Jeans}}} \cdot \nu^2 \quad (2.1.34)$$

Dostáváme tedy:

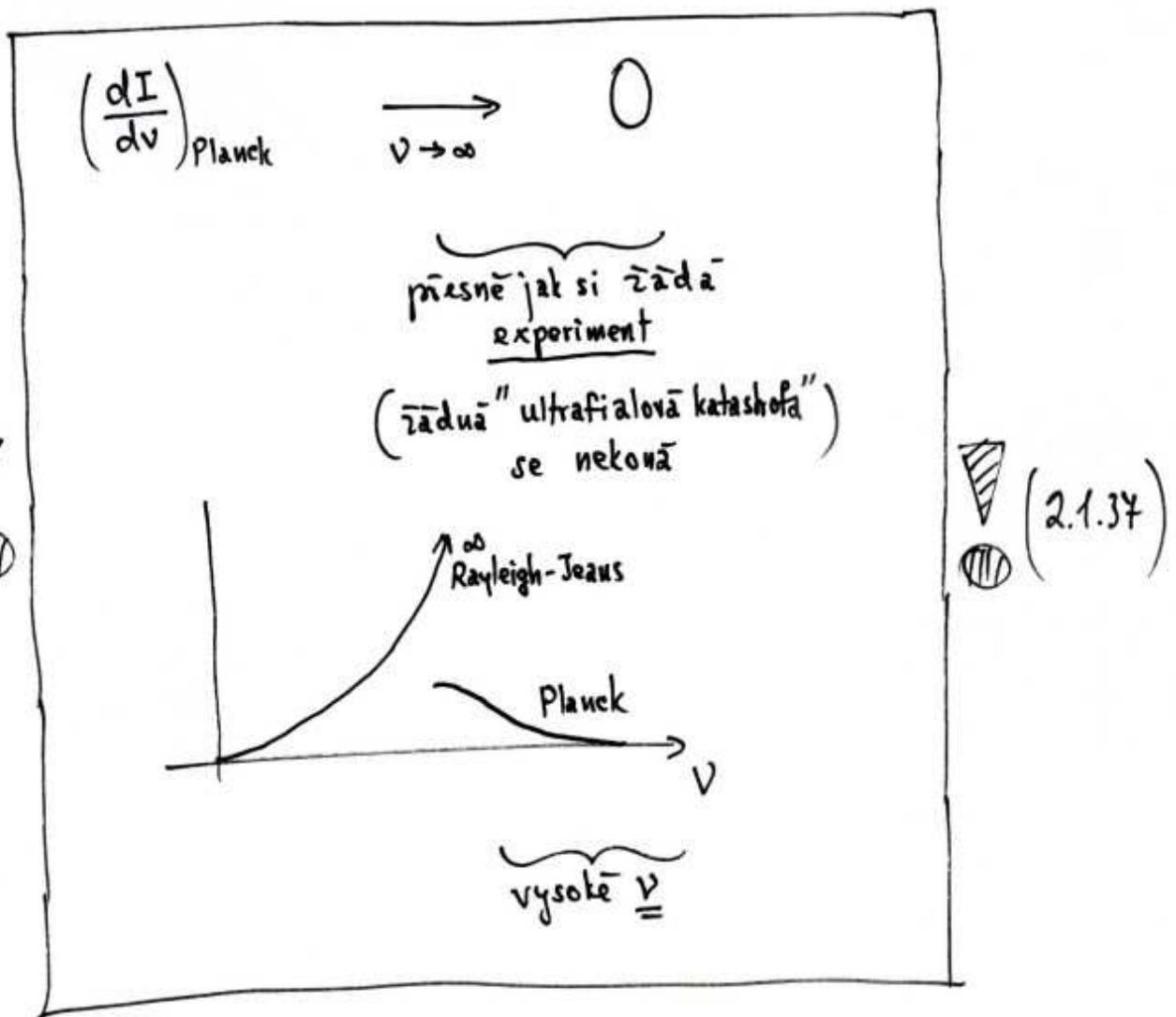


Pro vysoké frekvence ($\nu \rightarrow \infty$) naopak máme:

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \right\} = 0$$

↑
l'Hospitalovo pravidlo
3x aplikované

(2.1.36)



Najdeme dále maximum $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}}$, tj. maximum

funkce $f(\nu) = \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$:

Nutná podmínka :

$$\frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \right) \Big|_{\nu=\nu_{\text{max}}} = 0 \quad (2.1.38)$$

↓

$$3 - \frac{h\nu_{\text{max}}}{kT} \cdot \frac{e^{\frac{h\nu_{\text{max}}}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu_{\text{max}}}{kT}} - 1\right)} = 0 \quad (2.1.39)$$

Položíme

$$\frac{h\nu_{\text{max}}}{kT} = x \quad (2.1.40)$$

Rovnice (2.1.39) pak má tvar:

$$3 - x \cdot \frac{e^x}{e^x - 1} = 0 \quad (2.1.41)$$

a její řešení je

$$x = 2.84\dots \quad (2.1.42)$$

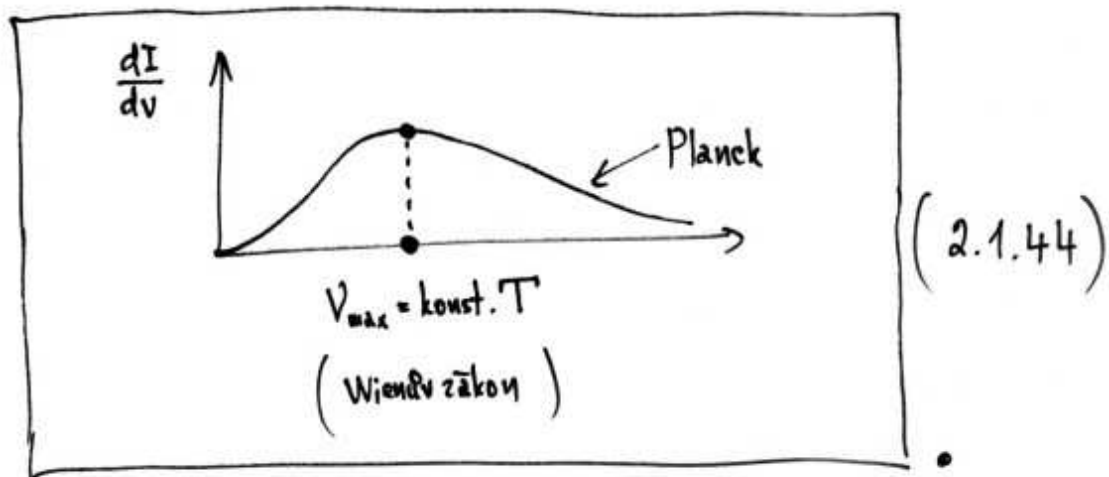
Dosadíme-li tuto hodnotu zpět do (2.1.40), postupně dostaneme:

$$\frac{h\nu_{\max}}{kT} = 2.84$$

↓

$$\nu_{\max} = \underbrace{2.84 \frac{k}{h}}_{\text{konst.}} \cdot T \quad (2.1.43)$$

a je rázem objasněn empirický Wienův zákon,
prostě jako poloha maxima Planckovy vyzářovací křivky:



Spočítáme dále celkovou intenzitu záření dle Plancka:

$$I = \int_0^{\infty} \left(\frac{dI}{d\nu} \right)_{\text{Planck}} d\nu = \int_0^{\infty} \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu \quad (2.1.45)$$

Položíme: $x = \frac{h\nu}{kT} \Rightarrow \nu = \frac{kT}{h} \cdot x$
 $d\nu = \frac{kT}{h} \cdot dx$

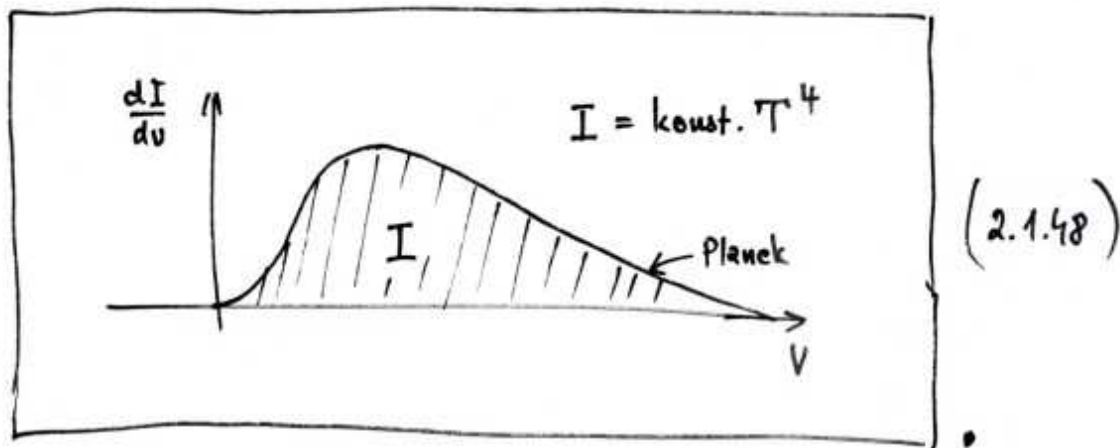
Pro integrál (2.1.45) pak máme:

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{I}} &= \frac{8\pi hV}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\left(\frac{kT}{h} \cdot x\right)^3}{e^x - 1} \cdot \frac{kT}{h} dx = \\
 &= \frac{8\pi hV}{c^3} \cdot \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \cdot \frac{kT}{h} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{\frac{1}{15} \pi^4} = \\
 &= \underbrace{\frac{1}{15} \pi^4 \cdot \frac{8\pi hV}{c^3} \cdot \left(\frac{k}{h}\right)^4}_{\text{konst.}} \cdot T^4
 \end{aligned} \tag{2.1.46}$$

také je objasněn i empirický Stefan-Boltzmannův zákon

$$\boxed{I = \text{konst. } T^4} \tag{2.1.47}$$

prostě jako plocha ohraničená Planckovou vyzařovací křivkou :



(2.1.48)

Zbývá už jediné - určit číselnou hodnotu
dosud neznámé konstanty \underline{h} tak, aby

$$\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}} = \left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{exp}} \quad (2.1.49)$$

Detailní analýza, tj. fitování souboru křivek $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}}$
pro různé hodnoty \underline{h} na exp. data tak, aby bylo
dosááno minimální středě kvadratické odchylky,
přivedla Plancka k hodnotě:

$$\nabla \quad \textcircled{11} \quad \boxed{h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]}} \quad \nabla \quad \textcircled{11} \quad (2.1.50)$$

Planck našel tuto hodnotu skutečně jen jako pomocné
číslo, které uvedlo v numerický soulad jím předpokládané
vztažovací křivky s exp. daty.

Netušil, a do konce svého života se medozvěděl, že
objevil druhou univerzální přírodní konstantu (vedle rychlosti
světla ve vakuu $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$).

Konstanta (2.1.50) na počest Plancka nosí jeho jméno (Planckova konstanta)
a učuje jakousi pomyslnou hranici mezi makrosvětlem
popraným klasickou fyzikou a mikrosvětlem popsaným

moderní (kvantovou) fyzikou: všechny zátony mikrosvěta

obsahují v sobě Planckovu konstantu \underline{h} , zatímco žádný ze
zátonů makrosvěta ji neobsahuje. Na hranici obou světů,
tj. tam, kde kvantová fyzika může být aproximována fyzikou klasickou,
Planckova konstanta z příslušných formulí automaticky vyniká,
viz přechod $\left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Planck}} \xrightarrow{\nu \rightarrow 0} \left(\frac{dI}{d\nu}\right)_{\text{Rayleigh-Jeans}}$ (formule (2.1.34)).

Shrňeme-li dosavadní poznatky, můžeme konstatovat:

- Planckův vyzařovací zákon (s hodnotou Planckovy konstanty $h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]}$) přesně vystihuje chování experimentálních vyzařovacích křivek AČT

(žádná "ultrafialová katastrofa" neexistuje)

a navíc v sobě automaticky obsahuje Wienův a Stefan-Boltzmannův zákon jako jednoduše matematické důsledky.

(2.1.51)

V dalším postupně uvidíme, že Planckova kvantová hypotéza

a hodnota Planckovy konstanty $h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]}$

sehraji klíčovou roli v objasnění dalších záhad a problémů klasické fyziky.

Nezbývá než parafrázovat známé verše Alexandra Popea, pronesené na počest I. Newtona :

Řád věcí dlouho byl
temnou nocí obestřen.
I řekl Bůh : Budiž Planck!
A jasný hned byl všude den.

2.2 Fotonová hypotéza - objasnění fotoelektrického a Comptonova jevu

Na fenomenální úspěch Planckovy kvantové hypotézy při objasnění záření AČT navázal A. Einstein ve fotonové hypotéze, podle níž:

nespojité, kvantový charakter záření není důsledkem vlastnosti zdroje (např. atomů AČT), ale existuje nezávisle na něm; znamená to, že libovolně elektromagnetické záření se bez ohledu na svůj zdroj šíří ve formě energetických kvant s energií $h\nu$.

(2.2.1)

Einstein tato energetická kvanta nazval FOTONY, odtud název "fotonová hypotéza".

Platí tedy:

$$E_{\text{elmag. záření}} = n \cdot E_{\text{fot}}$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{\text{fot}} = h \cdot \nu$$

energie fotonu

$$h = 6.625 \times 10^{-34} [\text{Js}]$$


$$\nu = \frac{c}{\lambda} \dots \text{frekvence elmag. záření}$$

(2.2.2)

FOTONOVÁ HYPOTÉZA (matematická formulace)

Fotonovou hypotézu Einstein testoval na objasnění druhého velkého problému klasické fyziky - fotoelektrického jevu.

FOTOELEKTRICKÝ JEV



$$E_{\text{fot}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

FOTON

materiál

hladina nulového potenciálu (povrch materiálu)

$$\Phi$$

elektron vázaný v materiálu

vazbová energie elektronu v materiálu (materiálová konstanta)

(2.2.3)

Př:	Materiál	Φ [eV]
	Cs	1.9
	K	2.2
	Li	2.5
	Pt	6.3

Einsteinovy úvahy byly následující :

Úvaha č.1 Je-li $E_{\text{fot}} < \Phi$, tj. $\nu < \frac{\Phi}{h}$,

foton nemá dostatečnou energii k uvolnění elektronu z vazbových sil uvnitř materiálu

↓

k fotoelektrickému jevu nedochází.

Platí tedy:

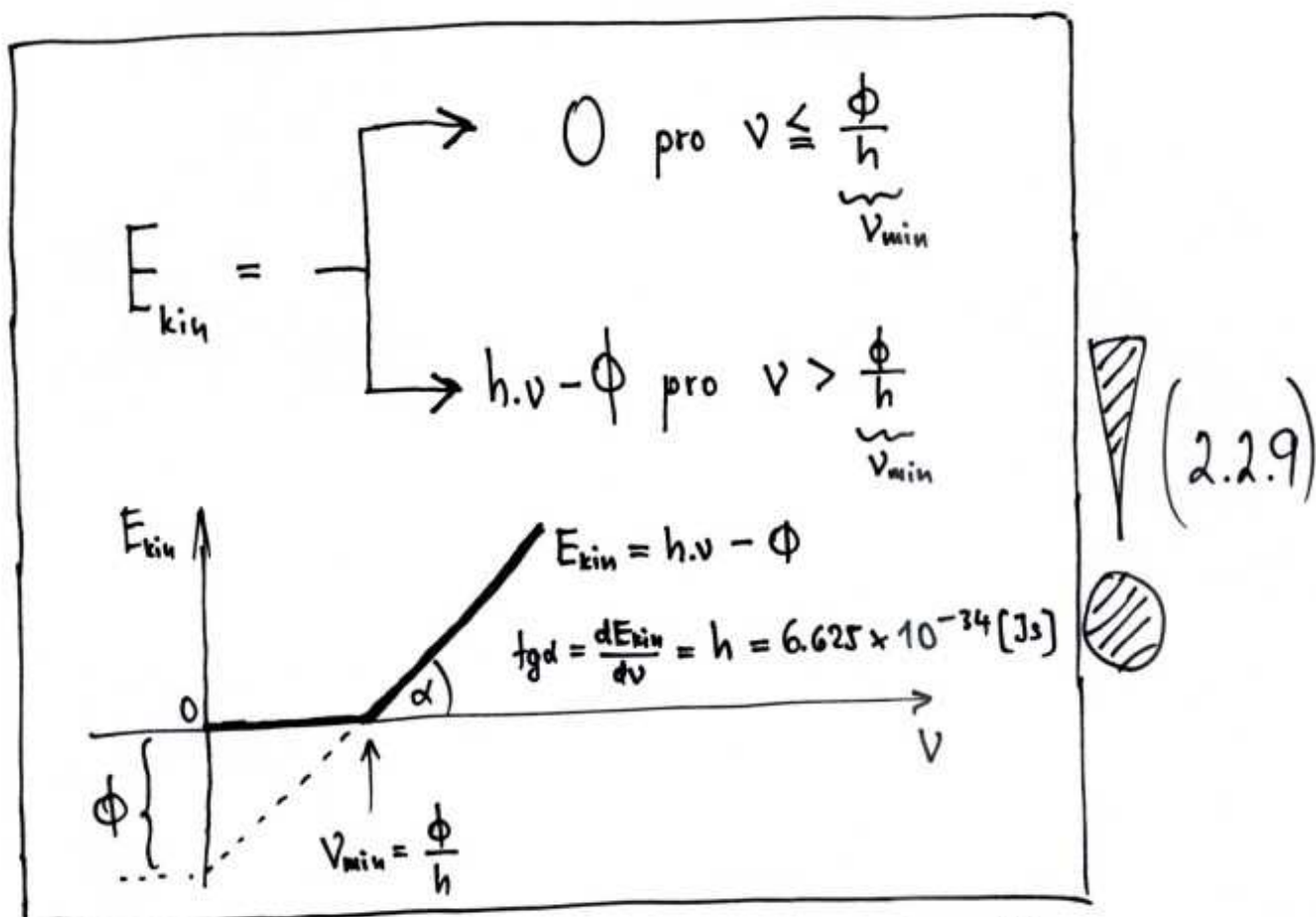
$$\underbrace{\Delta E}_{E_{\text{fot}} - \phi} = E_{\text{kin}} \quad (2.2.7)$$

$$\underbrace{h \cdot \nu}$$



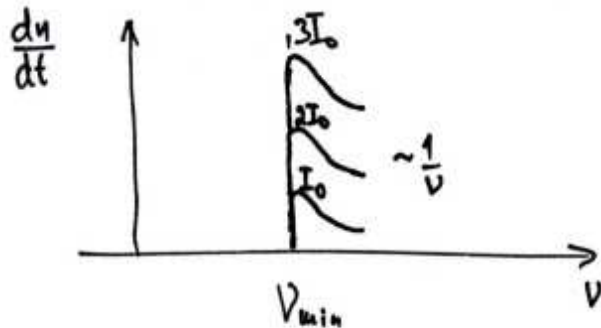
$$E_{\text{kin}} = h \cdot \nu - \phi \quad (2.2.8)$$

Spojíme-li nyní výsledky úvah č.1 a č.2, dostaneme:



Naprostý souhlas s experimentem ▽

Nyní se podívejme, jak fotonová hypotéza vysvětluje závislost počtu vyražených elektronů za jednotku času ($\frac{dn}{dt}$) na frekvenci (ν), tj. experimentální graf



① Pro $\nu < \nu_{\min}$ fotoelektrický jev dle předchozího nenastává

$$\frac{dn}{dt} = 0$$

② Pro $\nu > \nu_{\min}$ platí:

Každý foton vyrazí z materiálu 1 elektron s kinet. energií $E_{\text{kin}} = h\nu - \phi$

počet dopadnuvších fotonů
na jednotku plochy materiálu
za jednotku času

=

počet vyražených elektronů
z jednotky plochy materiálu
za jednotku času

$$\frac{E_{\text{zář}}}{E_{\text{fot}}}$$

$$\frac{1}{S} \frac{dn}{dt}$$

(2.2.70)

$\underline{E_{\text{zář}}}$... energie elmag. záření dopadnuvší na jednotku plochy
za jednotku času = intenzita záření = \underline{I}

$\underline{E_{\text{fot}}}$... energie 1 fotonu = $\underline{h\nu}$

Z (2.2.10) tedy dostáváme :

$$\frac{I}{h\nu} = \frac{1}{S} \frac{dn}{dt}$$



$$\frac{dn}{dt} = \frac{IS}{h\nu} = \left(\frac{S}{h\nu} \right) \cdot I = \text{koust.} \cdot I$$

koust. pro pevně ν

$$\left(\frac{SI}{h} \right) \cdot \frac{1}{\nu} = \text{koust.} \cdot \frac{1}{\nu}$$

koust. pro pevně I

$\frac{dn}{dt} = \text{koust.} \cdot I$

$\frac{dn}{dt} = \text{koust.} \cdot \frac{1}{\nu}$

(2.2.11)

Opět naprostý souhlas s experimentem! •

Einsteinova fotoelektrická hypotéza tedy kvantitativně objasňuje všechny pozorované zákonitosti fotoelektrického jevu •

Další rozšíření Einsteiny fotony hypotézy náleží Arthuru Comptonovi.

Úvaha č.1 : Má-li foton energii $E_{\text{fot}} = h\nu$,
pak podle Einsteiny vztahu $E = mc^2$ musí mít
i hmotnost, a to :

$$m_{\text{fot}} = \frac{E_{\text{fot}}}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda} \quad (2.2.12)$$

Např. pro foton RTG záření o vlnové délce
 $\lambda = 2.5 \times 10^{-12} \text{ [m]}$ máme :

$$m_{\text{fot}}^{\text{RTG}} \approx 10^{-30} \text{ [kg]} \approx m_{\text{elektron}} \quad (2.2.13)$$

Úvaha č.2 : Má-li foton hmotnost ($m_{\text{fot}} = \frac{h}{c\lambda}$),
a přitom se pohybuje ($v_{\text{fot}} = c$ ve všech inerciálních
systémech, neboť jde o elektromagnetické záření),
musí mít i hybnost, a to :

$$p_{\text{fot}} = m_{\text{fot}} \cdot v_{\text{fot}} = \frac{h}{c\lambda} \cdot c = \frac{h}{\lambda} \quad (2.2.14)$$

nebo přesněji

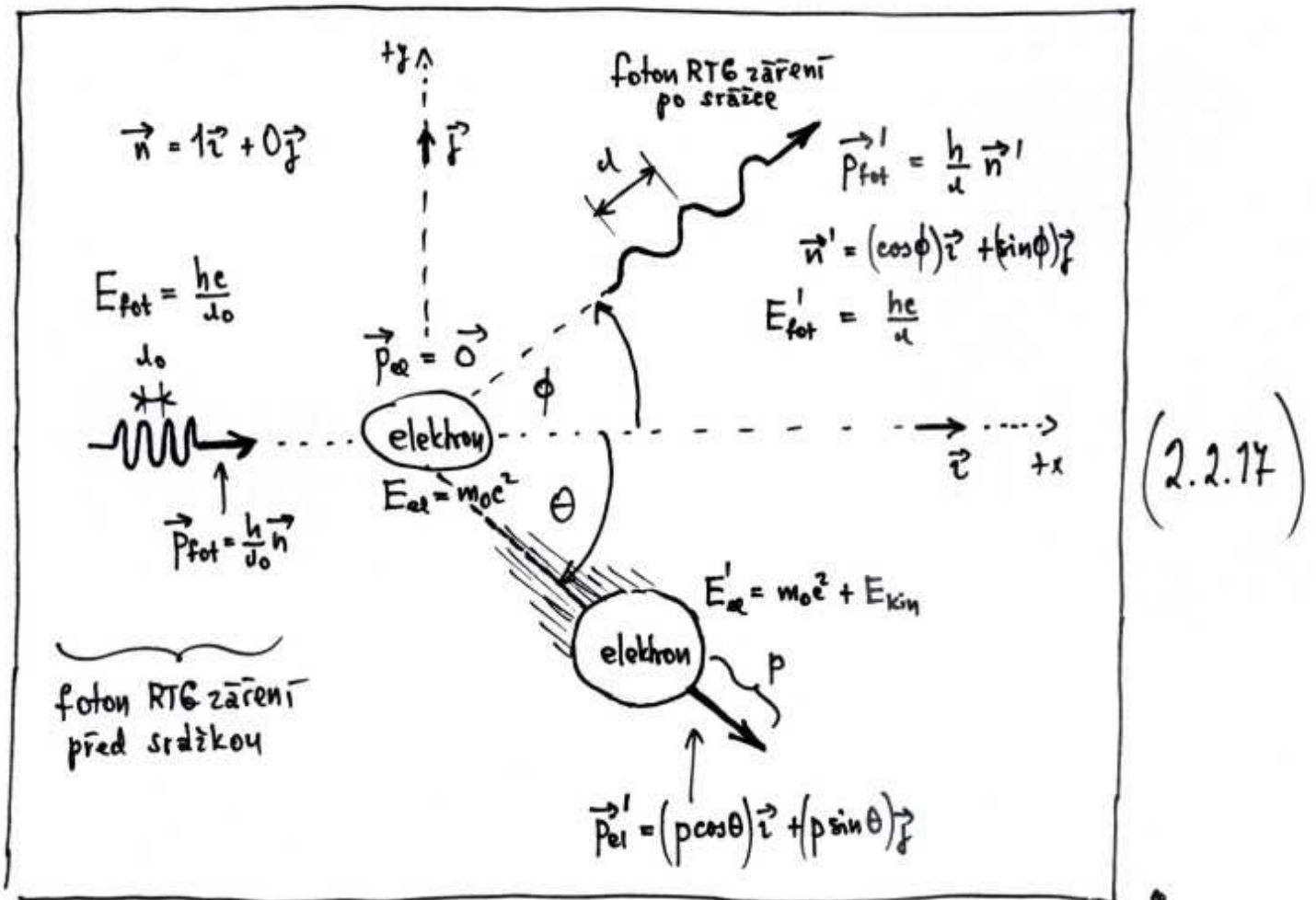
$$\vec{p}_{\text{fot}} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} \quad (2.2.15)$$

\vec{n} ... jednotkový vektor v určitém směru

Úvaha č. 3 Určuje-li vlnová délka záření hybnost příslušného fotonu ($\vec{p}_{\text{fot}} = \frac{h}{\lambda} \vec{n}$) a má-li foton RTG-záření hmotnost srovnatelnou s hmotností elektronu (viz (2.2.13)), lze rozptýlit RTG-záření na atomech nějaké látky posuzovat jako

pružnou srážku fotonu a elektronu coby dvou srovnatelně hmotných klasických objektů (Newtonových tělesic) při platnosti zákonů zachování energie a hybnosti.

(2.2.16)



Zákon zachování energie řítka :

$$E_{\text{fot}} + E_{\text{el}} = E'_{\text{fot}} + E'_{\text{el}} \quad (2.2.18)$$

↓

$$\frac{hc}{\lambda_0} + m_0c^2 = \frac{hc}{\lambda} + (m_0c^2 + E_{\text{kin}}) \quad (2.2.19)$$

⇓

$$\text{!} \quad E_{\text{kin}} = hc \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) \quad \text{!} \quad (2.2.20)$$

Zákon zachování hybnosti dává :

$$\vec{p}_{\text{fot}} + \vec{p}_{\text{el}} = \vec{p}'_{\text{fot}} + \vec{p}'_{\text{el}} \quad (2.2.21)$$

$$\underbrace{\frac{h}{\lambda_0} \vec{n}}_{\uparrow \vec{i} + 0\vec{j}} + \underbrace{0}_{\uparrow 0\vec{i} + 0\vec{j}} = \underbrace{\frac{h}{\lambda} \vec{n}'}_{\uparrow (\cos\phi)\vec{i} + (\sin\phi)\vec{j}} + \underbrace{(p\cos\theta)\vec{i} + (p\sin\theta)\vec{j}}$$

$$\frac{h}{\lambda_0} (\vec{i} + 0\vec{j}) + (0\vec{i} + 0\vec{j}) = \frac{h}{\lambda} (\cos\phi\vec{i} + \sin\phi\vec{j}) + p\cos\theta\vec{i} + p\sin\theta\vec{j} \quad (2.2.22)$$

$$\frac{h}{\lambda_0} \vec{i} + 0\vec{j} \quad \left(\frac{h}{\lambda} \cos\phi + p\cos\theta \right) \vec{i} + \left(\frac{h}{\lambda} \sin\phi + p\sin\theta \right) \vec{j}$$

Dostali jsme tak vektorovou rovnost :

$$\frac{h}{\lambda_0} \vec{z} + 0 \vec{f} = \left(\frac{h}{\lambda} \cos \phi + p \cos \theta \right) \vec{z} + \left(\frac{h}{\lambda} \sin \phi + p \sin \theta \right) \vec{f} \quad (2.2.23)$$

Porovnáním koeficientů u jednotkových vektorů \vec{z} a \vec{f} odtud máme:

$$\frac{h}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda} \cos \phi + p \cos \theta \quad (2.2.24)$$

$$0 = \frac{h}{\lambda} \sin \phi + p \sin \theta \quad (2.2.25)$$

Pro kinetickou energii E_{kin} , vystupující v (2.2.20), dále máme:

$$E_{\text{kin}} = \underbrace{\sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2}}_{\text{energie elektronu s hybností } \underline{p}} - \underbrace{m_0 c^2}_{\text{klidová energie elektronu}} \quad (2.2.26)$$

Máme nyní soustavu 4 rovnic : (2.2.20) , (2.2.24)
(2.2.25) a (2.2.26).

Eliminujeme-li z této soustavy veličiny E_{kin} , \underline{p} a $\underline{\theta}$,
můžeme vyjádřit $\underline{\lambda}$ pomocí $\underline{\phi}$:

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \phi) \quad (2.2.27)$$

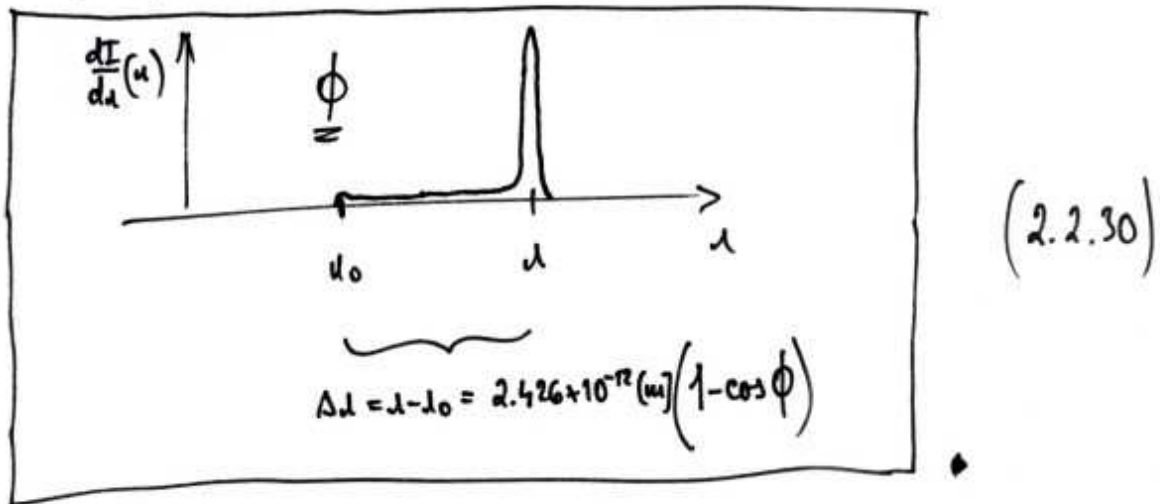
Pro číselnou hodnotu konstanty $\left(\frac{h}{m_0c}\right)$ dostaneme :

$$\frac{h}{m_0c} = \frac{6.625 \times 10^{-34} [\text{Js}]}{9.1 \times 10^{-31} [\text{kg}] \cdot 3 \times 10^8 [\text{ms}^{-1}]} = 2.426 \times 10^{-12} [\text{m}] \quad (2.2.28)$$

Rovnici (2.2.27) můžeme tedy nakonec přepsat ve tvaru :

$$\underbrace{\lambda - \lambda_0}_{\Delta \lambda} = 2.426 \times 10^{-12} [\text{m}] (1 - \cos \phi) \quad (2.2.29)$$

což je opět naprostý kvantitativní souhlas s exp! :



Konstanta $\frac{h}{m_0c} = 2.426 \times 10^{-12} [\text{m}]$ se nazývá

Comptonova vlnová délka elektronu (značí se λ_c)

a hraje úlohu určité hranice mezi světem atomů
(charakteristické rozměry $> \lambda_c$, např. $r_{\text{atom}} \sim 10^{-10} [\text{m}]$)

a světou subatomárních jevů (charakteristické rozměry $< \lambda_c$,
např. $r_{\text{jádro}} \sim 10^{-15} [\text{m}]$).

Je užitečně si uvědomit, co nového ve srovnání s fotoelektrickým jevem přineslo objasnění Comptonova jevu. Zároveň fotoelektrický jev lze beze zbytku objasnit na základě fotonové hypotézy a zákonu zachování energie, objasnění Comptonova jevu vyžaduje navíc i zákon zachování hybnosti. To rozšiřuje chápání fotonu z úrovně "kvantum energie" (fotoelektrický jev) na úroveň "Newtonova částice" (Comptonův jev).

Závěrem si povšimněme, že při objasnění všech dosud uvažovaných záhad (záření AČT, fotoelektrický jev, Comptonův jev) hraje klíčovou roli Planckova konstanta $h = 6.625 \times 10^{-34}$ [Js]. Ta vystupuje ve všech zásadních formulích, které dávají absolutní souhlas s exp. daty ve zdánlivě zcela nesouvisejících jevech.

2.3 Jevy demonstrující existenci hmotnosti fotonu

Jev č.1 - Chování fotonu v gravitačním poli :

Má-li foton hmotnost, musí na něj, jako na každý hmotný objekt, silově působit gravitační pole a ovlivňovat tak jeho charakteristiky, zejména vlnovou délku.

Uvažujme pro konkrétnost následující situaci :

kvězda o hmotnosti M
a poloměru R

$E_{\text{fot}}^{\text{elmag}} = \frac{hc}{d_0}$

$E_{\text{fot}}^{\text{grav}} = m_{\text{fot}} \cdot \left(\frac{-\alpha M}{R} \right)$

potenciál gravitačního
pole hvězdy na povrchu

$E_{\text{fot}} = E_{\text{fot}}^{\text{elmag}} + E_{\text{fot}}^{\text{grav}} =$

$$= \frac{hc}{d_0} - \frac{\alpha M}{R} m_{\text{fot}}$$

$E_{\text{fot}}^{\text{elmag}} = \frac{hc}{\lambda}$

$E_{\text{fot}}^{\text{grav}} = m_{\text{fot}} \cdot \lim_{r \rightarrow \infty} \left(\frac{-\alpha M}{r} \right) = 0$

$E_{\text{fot}}' = E_{\text{fot}}^{\text{elmag}} + E_{\text{fot}}^{\text{grav}} =$

$$= \frac{hc}{\lambda}$$

(2.3.1)

Pokud foton nebude interagovat s okolím, jeho celková energie zůstane zachována, tj.

$$E_{\text{fot}} = E_{\text{fot}}' \quad (2.3.2)$$

⇓

$$\frac{hc}{d_0} - \frac{\alpha M}{R} m_{\text{fot}} = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.3.3)$$

Pro hmotnost fotonu na povrchu hvězdy máme podle (2.2.12):

$$m_{\text{fot}} = \frac{h}{c \lambda_0} \quad (2.3.4)$$

Dosazením tohoto výrazu do (2.3.3) dostaneme:

$$\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{\alpha M}{R} \cdot \frac{h}{c \lambda_0} = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.3.5)$$

$$\frac{hc}{\lambda_0} \left(1 - \frac{\alpha M}{R c^2} \right)$$

↓

$$\frac{1}{\lambda_0} \left(1 - \frac{\alpha M}{R c^2} \right) = \frac{1}{\lambda} \quad (2.3.6)$$

↓

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\left(1 - \frac{\alpha M}{R c^2} \right)} \quad (2.3.7)$$

Z (2.3.7) je zřejmé, že $\lambda > \lambda_0$, tj. vlnová délka fotonu se ve velké vzdálenosti od hvězdy prodlouží ve srovnání s tou, kterou má na povrchu hvězdy. U viditelného světla to znamená, že všechny spektrální čáry zrudnou (posunou se k červenému (rudému) konci spektra) - odtud název uvedeného jevu:

GRAVITAČNÍ RUDÝ POSUV. Předpovědi dle formule (2.3.7) jsou ve vynikajícím souladu s experimentálními daty.

Zajímavá situace nastane, když parametry hvězdy jsou takové, že

$$\boxed{\frac{\alpha M}{R c^2} = 1} \quad (2.3.8)$$

$$\text{tj. } \frac{M}{R} = \frac{c^2}{\alpha} \sim \frac{(10^8)^2}{10^{-11}} \sim 10^{27}$$

(např. $M = 8 \times \text{Slunce}$; $R = 10 \text{ km}$).

Dosažením vztahu (2.3.8) do výrazu (2.3.7) pak máme:

$$\boxed{d = \frac{\lambda_0}{(1-1)} = \frac{\lambda_0}{0} \rightarrow \infty} \quad (2.3.9)$$



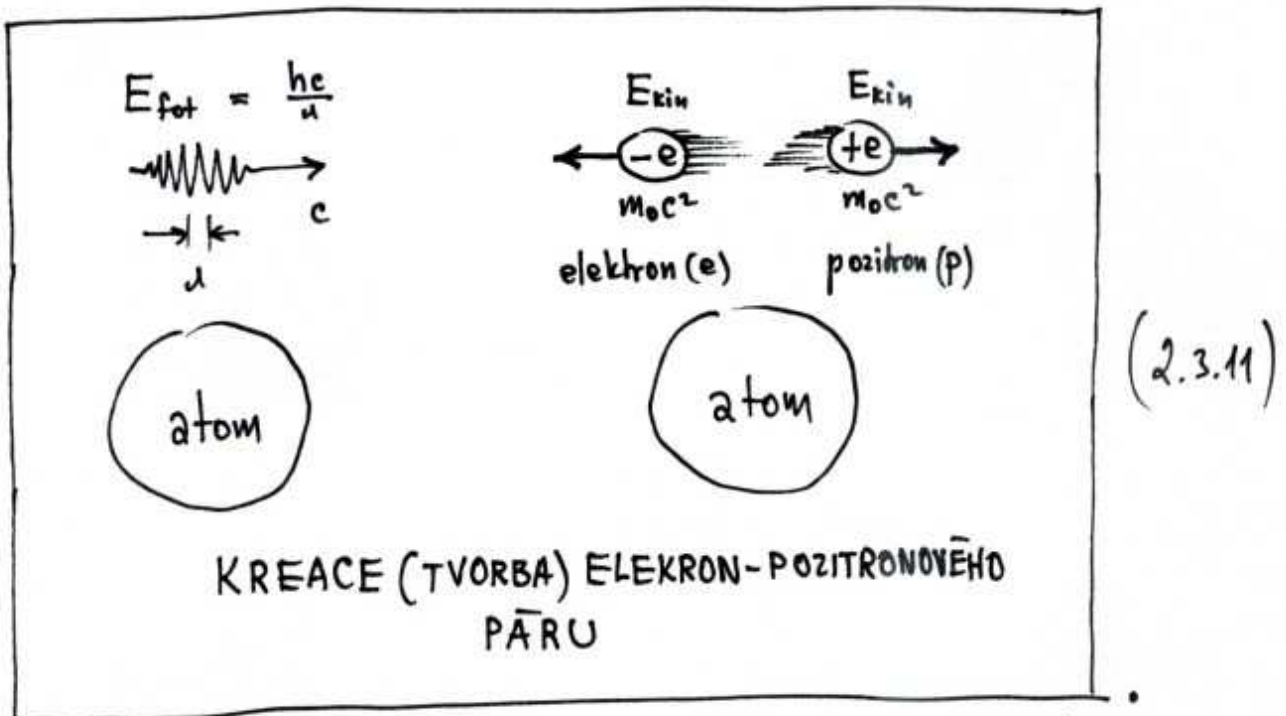
$$\begin{array}{l} \nabla \\ \circ \end{array} \boxed{\begin{array}{l} m_{\text{fot}} = \frac{h}{c\lambda} \rightarrow 0 \\ E_{\text{fot}} = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow 0 \end{array}} \begin{array}{l} \nabla \\ \circ \end{array} \quad (2.3.10)$$

tj. žádný reálný foton ve velké vzdálenosti od hvězdy nezaregistrujeme
(hvězda se chová jako černá díra).

Jev č. 2Kreace (tvorba) a anihilace (zánik)
elektron-positronového páru

V gravitačním poli se hmotnost fotonu projevuje nepřímě (prošednictvím silového působení).

Existuje však proces, v němž se foton doslova materializuje (zhmotňuje) ve formě 2 nových částic :



Positron je antičástice elektronu a budeme o něm hovořit později v 9. týdnu, až se seznámíme s důsledky uvažování relativistických efektů v mikrosvětě.

Zákon zachování energie říká:

$$E_{\text{fot}} = (m_0c^2 + E_{\text{kin}}) + (m_0c^2 + E_{\text{kin}})$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\frac{hc}{\lambda}} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{energie elektronu}} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{energie pozitronu}}$

(2.3.12)

Z rovnice (2.3.12) máme :

$$\boxed{\frac{hc}{\lambda} = 2(m_0c^2 + E_{kin})} \quad (2.3.13)$$

↓

$$\boxed{E_{kin} = \frac{hc}{2\lambda} - m_0c^2} \quad (2.3.14)$$

Proces může zřejmě proběhnout jen tehdy, když

$$\boxed{E_{kin} \geq 0} \quad (2.3.15)$$

což s uvážením (2.3.14) dává :

$$\boxed{\frac{hc}{2\lambda} - m_0c^2 \geq 0} \quad (2.3.16)$$

↓

$$\boxed{\lambda \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{m_0c}} \quad (2.3.17)$$

$\lambda_c = 2.426 \times 10^{-12} \text{ [m]}$
 (Comptonova vlnová
 délka elektronu)

↓

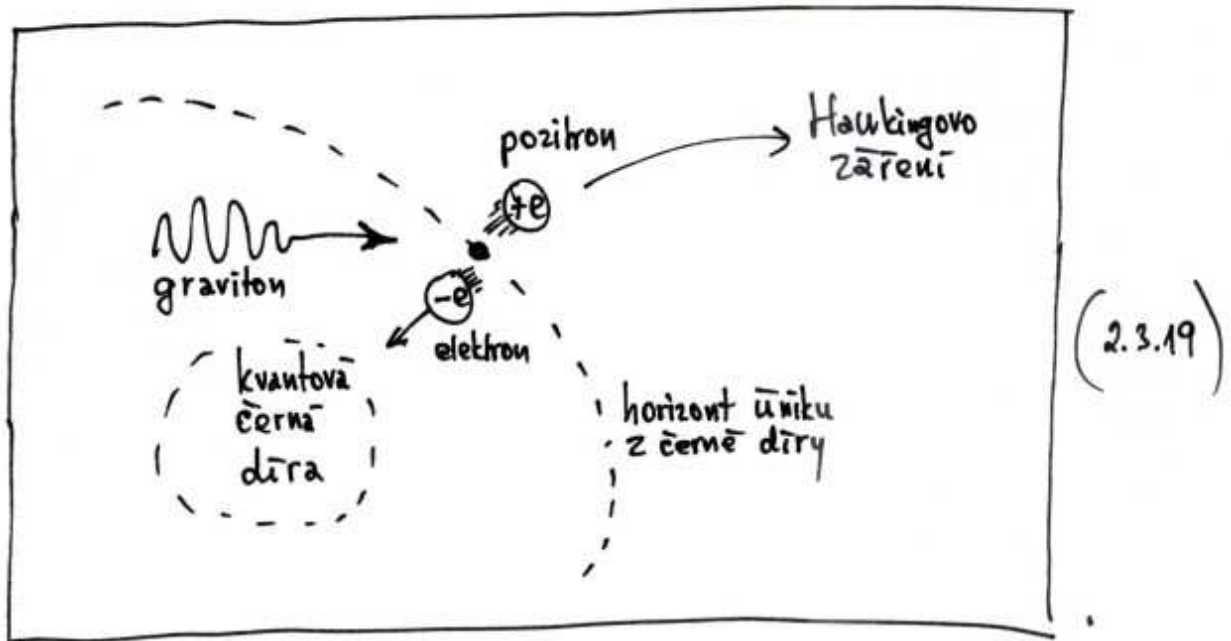
$$\boxed{\lambda \leq 1.213 \times 10^{-12} \text{ [m]}} \quad (2.3.18)$$

Takové vlnové délky má jen γ -záření, přítomné
 jsou v jaderných reakcích a kosmickém záření.

V poslední době je diskutována i možnost, že úlohu fotonu γ -záření (h. kvanta elektromagnetického pole) může přebrat graviton (h. kvantum gravitačního pole).

To ovšem vyžaduje extrémně silná gravitační pole, cca $10^5 \times$ silnější než jaká existují v "obyčejných" černých dírách, zmíněných v předchozí části. Jde zde o tzv. kvantově černé díry, pozoruhodně tím, že místo aby do sebe vše pohlcovaly, a to daleko silněji než obyčejná černá díry, tak naopak z nich tryská ven silný proud pozitronů (tzv. Hawkingovo záření).

Možné vysvětlení je následující :

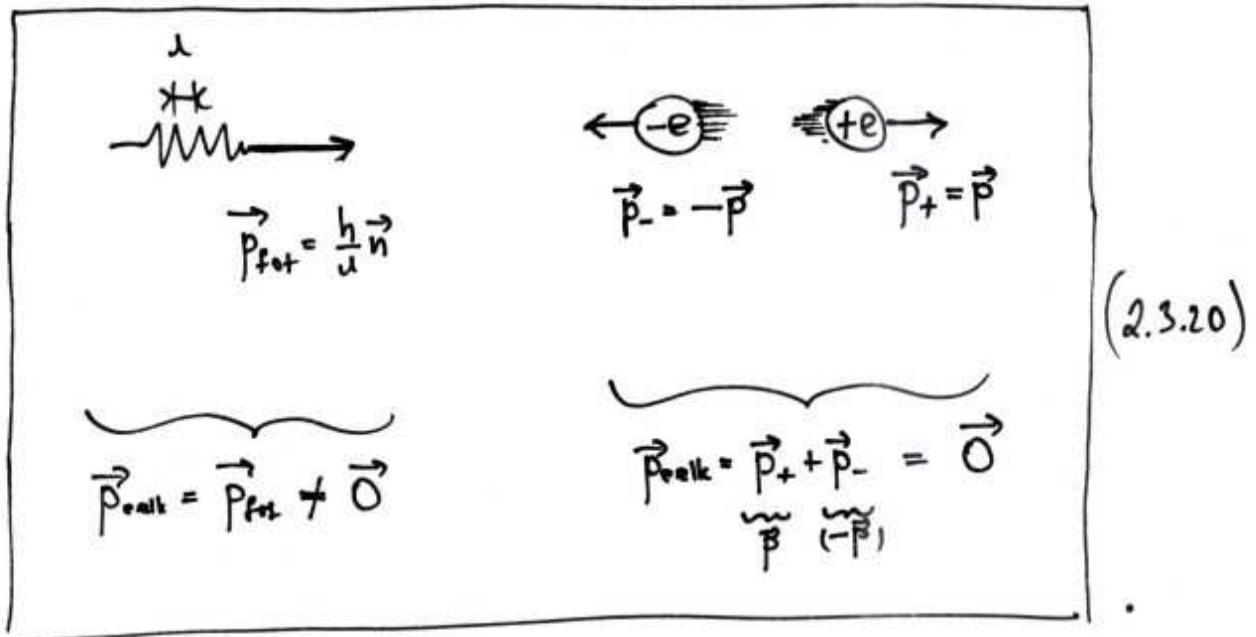


Tato problematika je ovšem v současnosti ve stádiu výzkumu, takže zde nelze činit definitivní závěry.

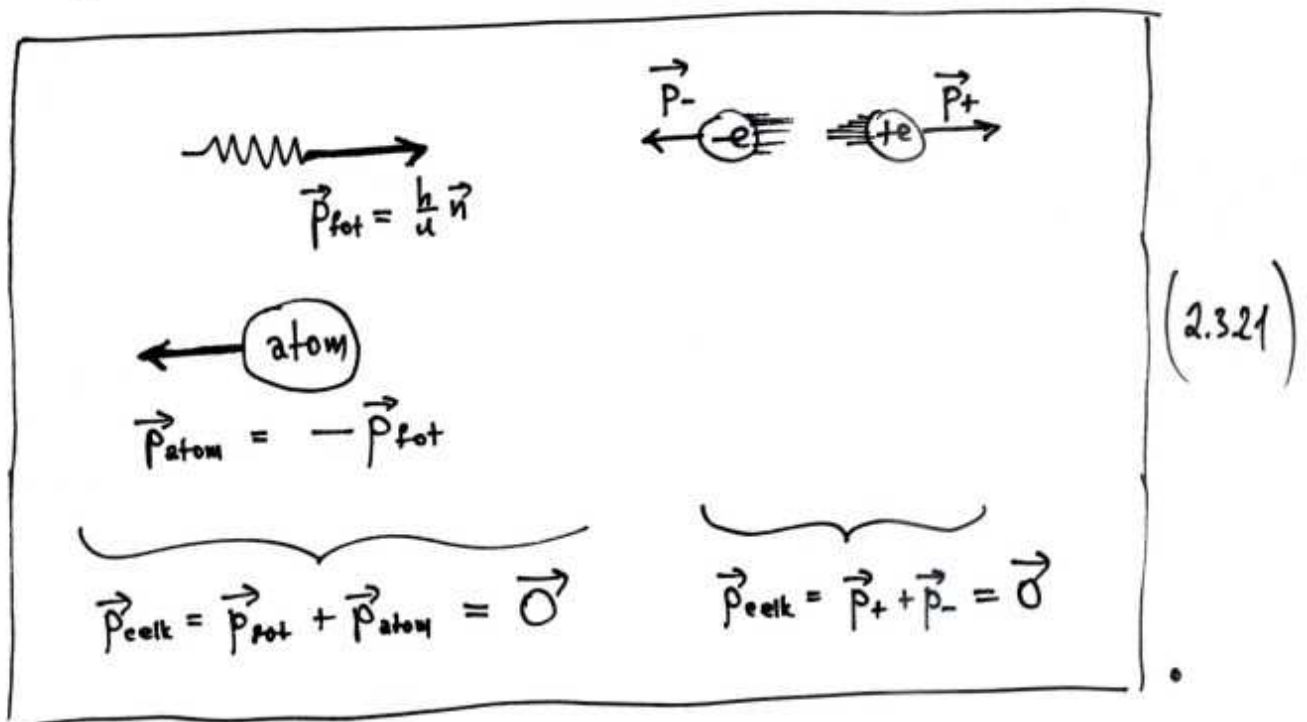
Vraťme se nyní ke standardní kreaci elektron - pozitronového páru v blízkosti atomu (viz (2.3.11)) a vysvětlíme, proč je k tomuto procesu nutná přítomnost atomu.

Z experimentu je známo, že vzlítající elektron a pozitron mají stejně velké, opačně orientované hybnosti.

Kdyby proces probíhal ve vakuu, nemohl by být splněn zákon zachování hybnosti:



Přítomnost atomu je tedy nutná proto, aby vykompenzovala hybnost fotonu:

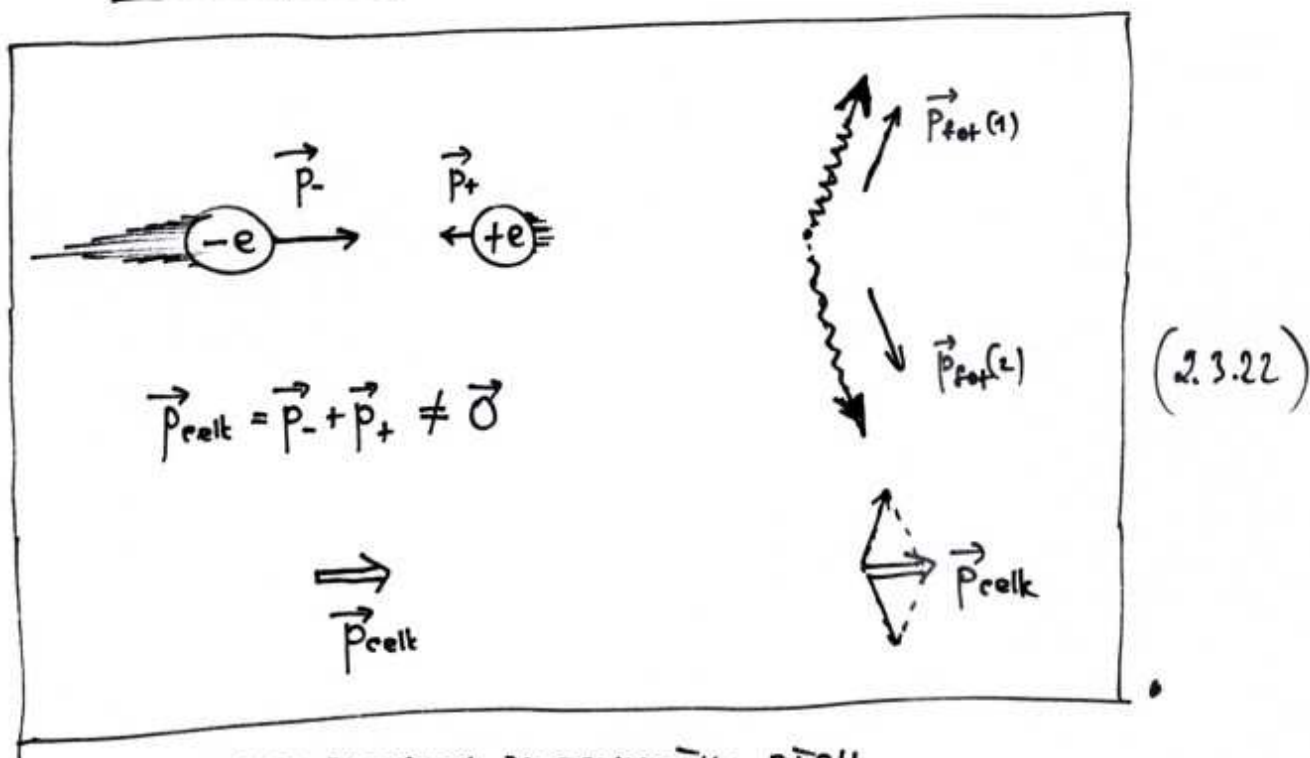


Tak jako se foton elektromagnetického záření může přeměnit na dvojici částic (elektron - pozitron), je možný i opačný proces :

ANIHILACE (ZÁNİK) ELEKTRON-POZITRONOVĚHO PÁRU a jeho

přeměna na γ -záření.

Experiment ukazuje, že při této anihilaci vznikají vždy 2 fotony, takže není nutná přítomnost dalšího objektu (atomu) a elektron i pozitron mohou mít obecně různé veliké hybnosti.



ANIHILACE ELEKTRON-POZITRONOVĚHO PÁRU .

* * * * *

Popsané procesy, tj. přeměna elektromagnetického záření na částice (= tvorba elektron-pozitronového páru) a obráceně, přeměna částic na elektromagnetické záření (= anihilace elektron-pozitronového páru) jsou nejpersvědčivější demonstrací toho, že

fotony elmag. záření evidentně vykazují vlastnosti
Newtonových částic.

Neznamená to však, že by se na elmag. záření nemělo pohlízet
také jako na vlnění – jinak by nebylo možno vysvětlit jevy
jako difrakce či interference, které elmag. záření evidentně vykazuje také.

Poprvé v historii vědy vzniká kuriózní situace, kdy pro vysvětlení
jedné fyzikální reality jsou zapotřebí dvě různé teorie:

- vlnová (vysvětluje jevy jako interference, difrakce)
- částicová (vysvětluje jevy jako záření AČT, fotoelektrický jev,
Comptonův jev, gravitační rudý posuv, kreace a
anihilace elektron-positronového páru).

Elektromagnetické záření se tedy v dané konkrétní situaci chová
BUD jako vlna NEBO jako částice (podobně jako bájný peryton
v poledne pták, večer jelen).

Elektromagnetické záření můžeme přítom pozorovat jen
zprostředkovaně pomocí jistých jevů, které způsobuje
(opět analog s perytonem, o němž se lze něco dozvědět
jen prostřednictvím vrženého šňůru).

Z výše uvedeného je zřejmé, že elektromagnetické záření
má tzv. duální (částicově-vlnový) charakter.

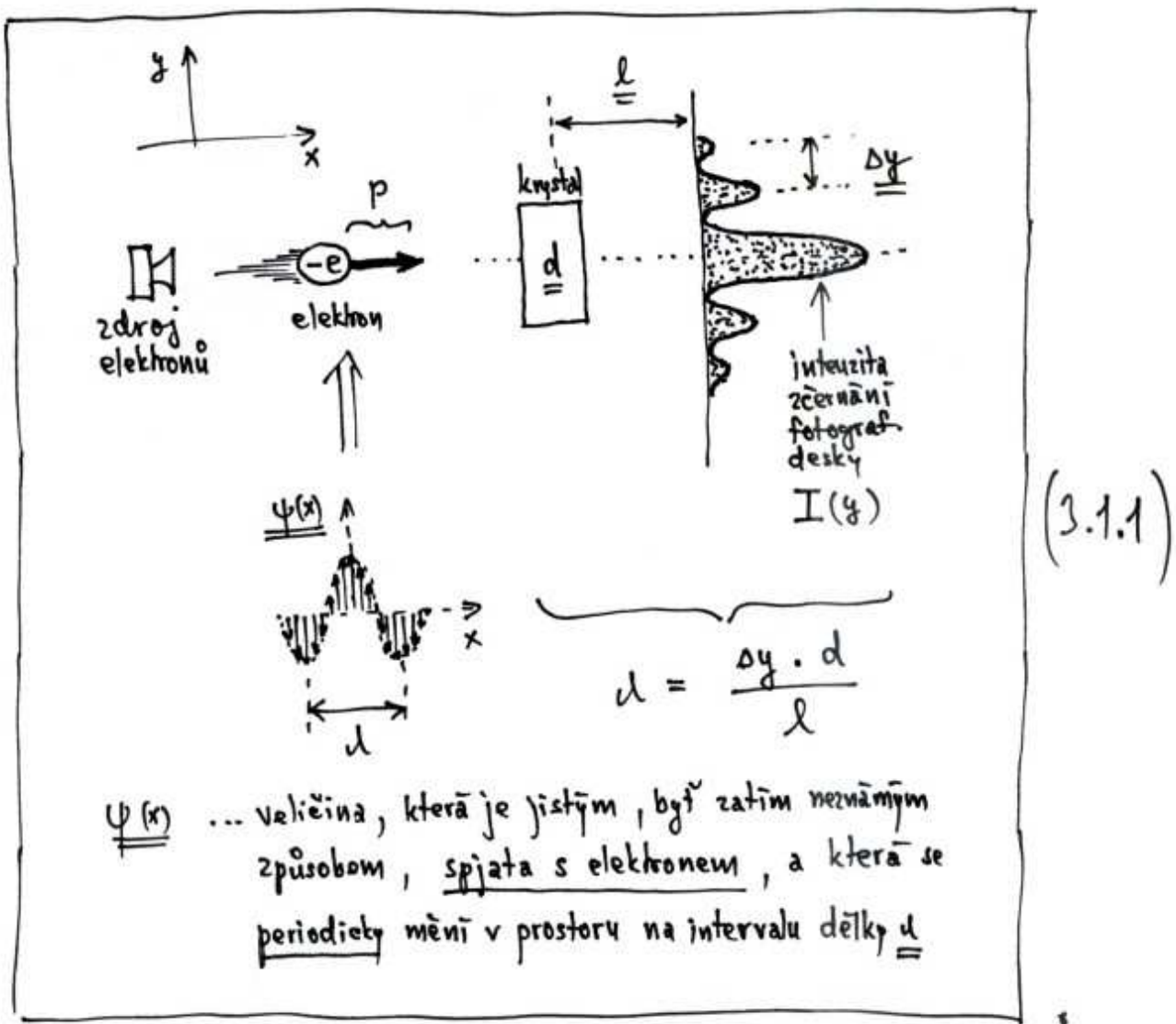
Obě stránky jeho vnějšího projevu (někdy vlna, jindy částice)
se přítom vzájemně doplňují – říkáme, že jsou
komplementární.

KONEC 2. TÝDNE

3. TÝDEN

3.1 Pravděpodobnostní vlny mikroobjektu - Heisenbergova relace neurčitosti.

Vyjdeme z Davisson - Germerova experimentu:



Z výsledků Davisson - Germerova experimentu víme, že mezi "vlnovou délkou elektronu" λ a jeho hybností p platí empirický vztah:

$$\lambda \cdot p = 6.625 \times 10^{-34} \text{ [Js]} \quad (3.1.2)$$

Z přednášky minulého týdne dále víme, že číslo stojící na pravé straně (3.1.2) není nic jiného než Planckova konstanta h . Ze vztahu (3.1.2) tedy máme:

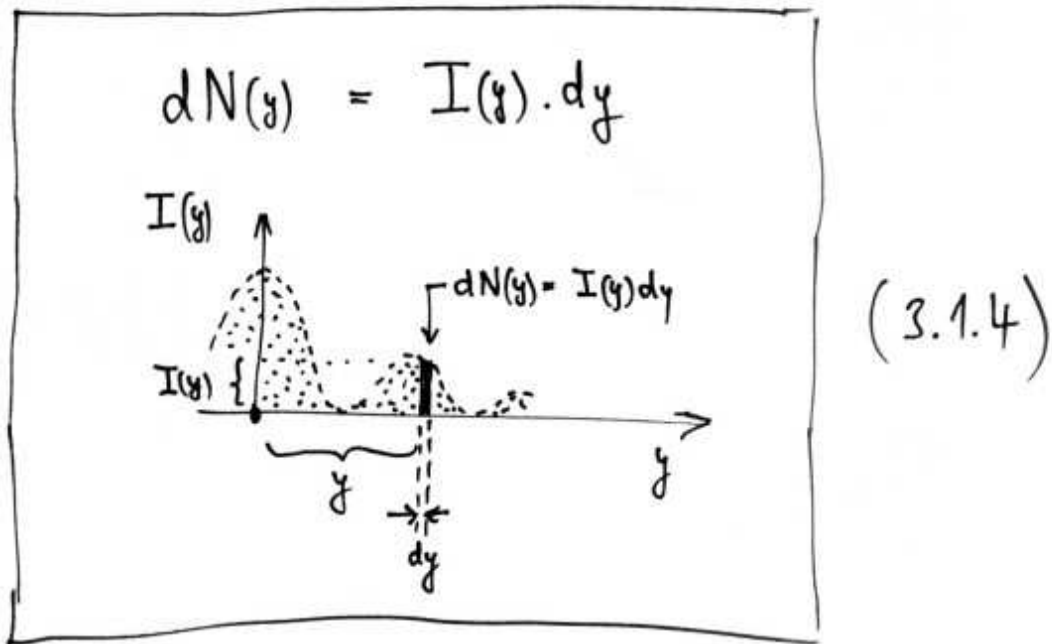
$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.1.3)$$

"vlnová délka" elektronu

p ... hybnost elektronu

Klíčovým úkolem je nyní prozkoumat veličinu $\psi(x)$ popisující "elektronovou vlnu" o vlnové délce λ (viz 3.1.1) a dát jí přijatelnou fyzikální interpretaci.

Nechť zdroj produkuje za 1 sekundu N elektronů
 a necht' $dN(y)$ je počet těch z nich, které dopadnou
 na fotografickou desku do intervalu $(y, y+dy)$.
 Tento počet je zřejmě úměrný intenzitě záření desky
 v místě y a šířce intervalu :



Zřejmě platí :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dN(y) = N$$

⇓

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dN(y)}{N} = 1$$

(3.1.5)

odkud plyne, že veličina $\left(\frac{dN(y)}{N}\right)$ může být interpretována
 jako pravděpodobnost toho, že náhodně vybraný elektron
dopadne na fotografickou desku do intervalu $(y, y+dy)$ •

Označme tuto pravděpodobnost $dP(y)$. Máme tedy:

$$dP(y) = \frac{dN(y)}{N} = \frac{I(y)dy}{N} = \frac{I(y)}{N} \cdot dy$$

↑
(3.1.4)

↓

$$\frac{dP(y)}{dy} = \frac{I(y)}{N} \quad (3.1.6)$$

Derivaci $\frac{dP(y)}{dy}$ stojící na levé straně (3.1.6) nazýváme lokální hustota pravděpodobnosti v místě y a označujeme ji symbolem $\rho(y)$, tedy:

$$\rho(y) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dP(y)}{dy} \quad (3.1.7)$$

lokální hustota pravděpodobnosti
v místě y

Užitím definice (3.1.7) můžeme výsledek (3.1.6) přepsat takto:

$$\rho(y) = \frac{1}{N} \cdot I(y)$$

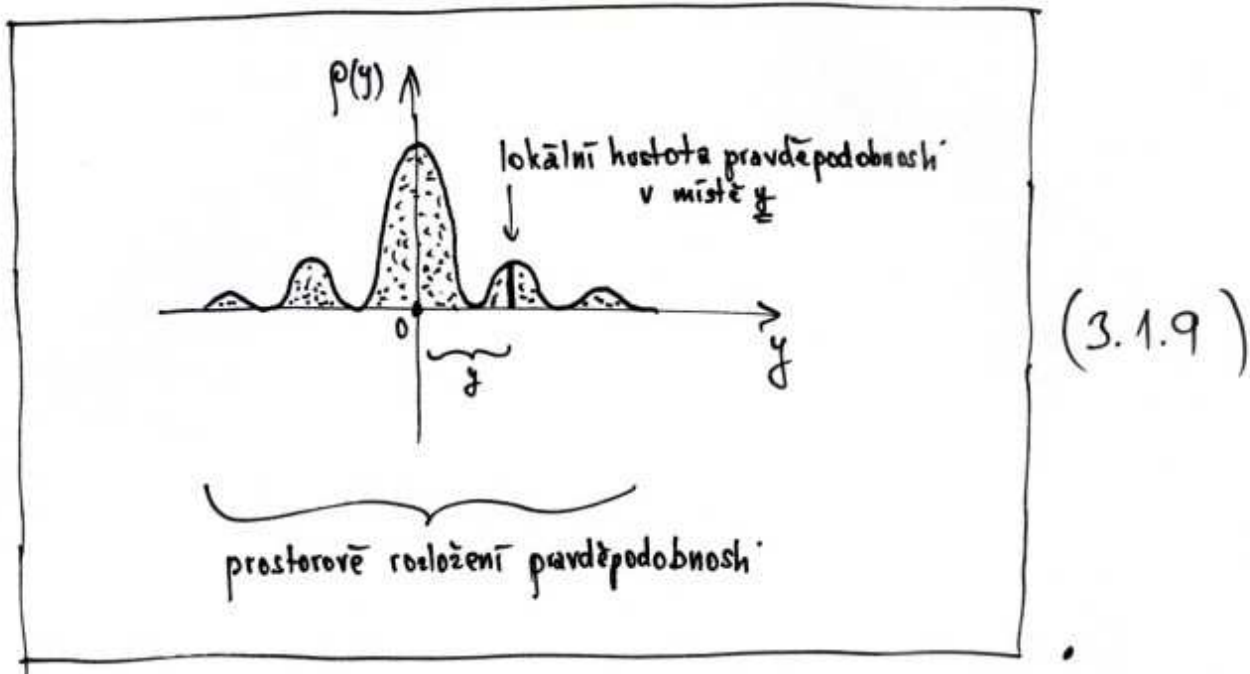
lokální hustota
pravděpodobnosti,
že elektron dopadne
do místa y

intenzita
zčernání
foto-gr. desky
v místě y

(3.1.8)

Funkci $\rho(y) \forall y \in (-\infty; +\infty)$ nazýváme

prostorově rozložení pravděpodobnosti :



Rovnici (3.1.8) můžeme tedy teď modifikovat následovně :

$$\rho(y) = \frac{1}{N} \cdot I(y) \quad ; \quad y \in (-\infty; +\infty)$$

prostorově rozložení pravděpodobnosti dopadu elektronu na fotogr. desku
prostorově rozložení intenzity zčernání fotografické desky

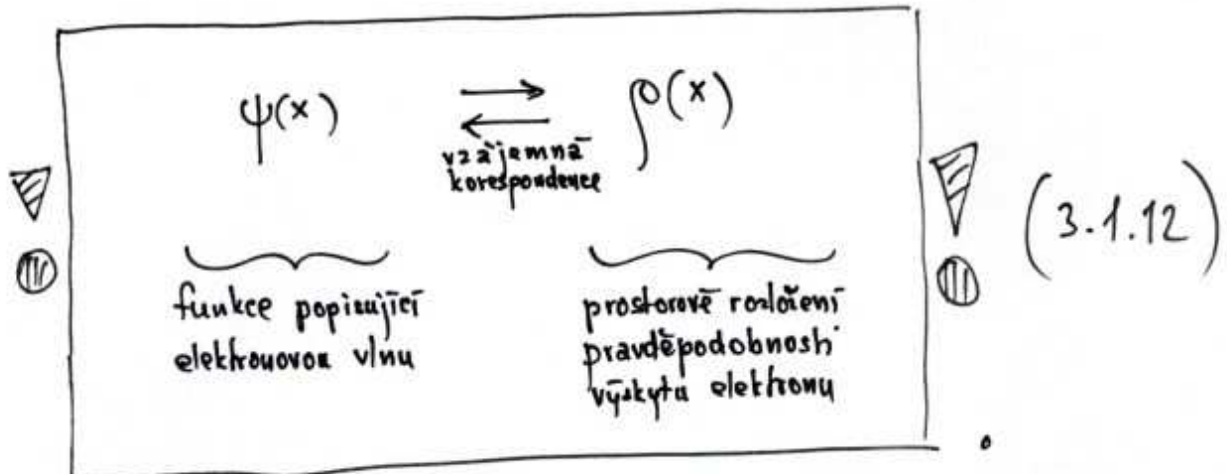
(3.1.10)

Z experimentu víme, že funkce I(y) má typický průběh, který může vyvolat pouze vlnový charakter elektronu, popsaného zatím blíže neurčenou funkcí psi(x).

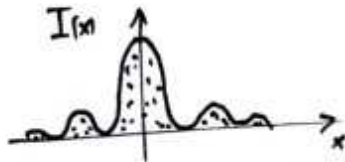
S ohledem na rovnici (3.1.10) to znamená, že

! musí existovat relativně jednoduchý vztah mezi psi(x) a rho(y) ! (3.1.11)

Z geometrie uspořádání Davisson - Germerova experimentu je zřejmé, že proměnné x a y spolu souvisejí vztahem $y = \text{konst.} \cdot x$ a že vždy můžeme zvolit např. vzdálenost krystalu od fotografické desky tak, aby konst. = 1.
Na základě (3.1.11) tedy máme:



Protože funkce $\rho(x)$ musí odrazet experimentálně pozorované vlastnosti funkce $I(x)$ (viz (3.1.10), $x = y$), jakými jsou nezápornost, spojitost a hladkost,



má nejjednodušší realizace korespondence (3.1.12) následující tvar:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$$

$\psi^*(x)$... komplexně sdružená funkce k $\psi(x)$

Funkce $\psi(x)$ elektronové vlny je tedy periodická (obecně komplexní) funkce s prostorovou periodou $\lambda = \frac{h}{p}$ (p = hybnost elektronu), jejíž kvadrát absolutní hodnoty udává prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu v prostoru.

(3.1.13)

Vlně popsané funkcí $\psi(x)$ s vlastnostmi (3.1.13) se říká pravděpodobnostní vlna elektronu.

Protože největší zásluhu na jejím zavedení do fyziky má Louis de Broglie, nazývá se tato vlna v literatuře také často de-Broglieho vlna.

Jelikož závěry Davisson-Germerova experimentu se posléze ukázaly platnými i pro jiné mikroobjekty než elektron (např. pro proton, mezon, hyperon apod.), budeme nadále obecně hovořit o pravděpodobnostních (nebo de-Broglieho) vlnách mikroobjektu.

Z rovnice (3.1.13) můžeme užitím definice (3.1.7) najít pravděpodobnost výskytu mikroobjektu na intervalu $\langle x_1, x_2 \rangle$:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2$$

$$\underbrace{\frac{dP(x)}{dx}}$$

↓

$$dP(x) = |\psi(x)|^2 dx$$

↓

$$\mathcal{P}(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (3.1.14)$$

pravděpodobnost výskytu mikroobjektu na intervalu $\langle x_1, x_2 \rangle$

Zřejmě platí :

$$\boxed{P(-\infty, +\infty) = 1} \quad (3.1.15)$$

neboť pokud mikroobjekt existuje, pak se někde v prostoru $(-\infty; +\infty)$ vyskytovat musí (P =jistota).

Dosažením (3.1.14) do (3.1.15) máme:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (3.1.16)$$

Těto rovnici se říká normovací podmínka pravděpodobnostní vlny.

Pokud jde o vlnovou délku pravděpodobnostní vlny, je užitečně porovnat její velikost pro makroobjekt a mikroobjekt :

Případ A - makroobjekt (letící stěla z pistole) :

$m \sim 10^{-1}$ (stovky gramů) $v \sim 10^2$ (stovky ms^{-1})

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \sim \frac{10^{-34}}{10^{-1} \cdot 10^2} \sim \underline{\underline{10^{-35} [m]}}$$

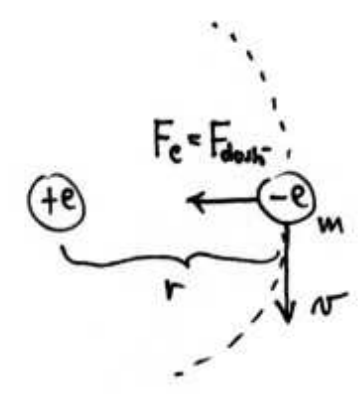
(3.1.3) o 20 řádů menší než rozměr at. jádra (jádro $\sim 10^{-15} [m]$)

||

Vlnové vlastnosti makroobjektu jsou nezjistitelné

$$(3.1.17)$$

Případ B - mikroobjekt (elektron v atomu vodíku) :



$$\underbrace{\frac{mv^2}{r}}_{F_{dosk}} = \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}}_{F_e}$$

⇓

$r \sim 10^{-10} [m]$
rozměr atomu

$$v = e \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}} \quad (3.1.18)$$

$v \sim 10^6 [ms^{-1}]$
rychlost elektronu v atomu vodíku

⇓

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{me \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}}} = \frac{h}{e} \cdot \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}} \quad (3.1.19)$$

$\lambda \sim 10^{-10} [m]$

vlnová délka pravděpodobnostní vlny elektronu v atomu vodíku

Dostáváme tedy hodnotu λ srovnatelnou s rozměrem atomu $r \sim 10^{-10} [m]$:

$\lambda_{\text{elektron}}$	\approx	r_{atom}
vlnová délka pravděpodobnostní vlny <u>elektronu</u> v atomu		charakteristický rozměr <u>celého atomu</u>

(3.1.20)

Vlnový charakter elektronu jakožto mikroobjektu při jeho výskytu v atomu je podstatný a zásadní.

Nyní obraťme pozornost ke konkrétnímu tvaru funkce $\psi(x)$,
popisující pravděpodobnostní vlnu mikroobjektu.

Výchozím bodem je 1-dimenzionální monochromatická
harmonická postupná vlna:

$$\psi_{\lambda}(x,t) = A(\lambda) \cdot e^{i \cdot \frac{2\pi}{\lambda} (\nu_f \cdot t - x)} \quad (3.1.21)$$

λ ... vlnová délka
 ν_f ... fázová rychlost
 $A(\lambda)$... amplituda

Zavedeme-li

$$\begin{aligned} \text{vlnověť} \quad \dots \quad k &= \frac{2\pi}{\lambda} \\ \text{kmitočet} \quad \dots \quad \omega &= \frac{2\pi}{\lambda} \nu_f \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

můžeme rovnici (3.1.21) přepsat ve tvaru:

$$\begin{aligned} \psi_k(x,t) &= A(k) e^{i(\omega t - kx)} \\ \omega &= k \cdot \nu_f \\ \omega t - kx &= \underbrace{\phi(x,t)}_{\text{fáze vlny}} \end{aligned} \quad (3.1.23)$$

Ze vztahů (3.1.22) máme:

$$\nu_f = \frac{\omega}{k} \quad (3.1.24)$$

Toto vyjádření fázové rychlosti bude v dalším velmi potřebné.
Připomeňme, že fázová rychlost ν_f je ta rychlost, která
vystupuje ve vlnové rovnici:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} = \nu_f^2 \cdot \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.1.25)$$

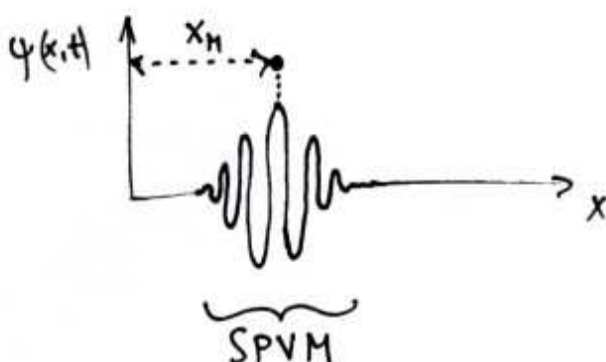
Z matematiky je známo, že obecné řešení vlnové rovnice (3.1.25) má tvar spojitě superpozice vln (3.1.23) :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x,t) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(\omega t - kx)} dk \quad (3.1.26)$$

V uvažovaném fyzikálním kontextu tedy rovnice (3.1.26) představuje superpozici pravděpodobnostních vln mikroobjektu (SPVM).

Prozkoumejme, jakou rychlost se pohybuje maximum SPVM :

Označme x_H souřadnici tohoto maxima :



Maximum SPVM je charakterizováno extrémem fázě

$$\phi(x,t) = \omega t - kx$$

vzhledem k vlnové číslu k (maximální počet monochromatických harmonických vln se skládá ve fázě) :

$$\frac{d}{dk} (\phi(x_H, t)) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d}{dk} (\omega t - kx_H) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$t \cdot \frac{d\omega}{dk} - x_H = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\frac{dx_H}{dt} = \frac{d\omega}{dk}} \quad \dots \dots \quad (3.1.27)$$

Derivace $\left(\frac{dx_n}{dt}\right)$ na levé straně (3.1.27) je

rychlost pohybu maxima SPVM.

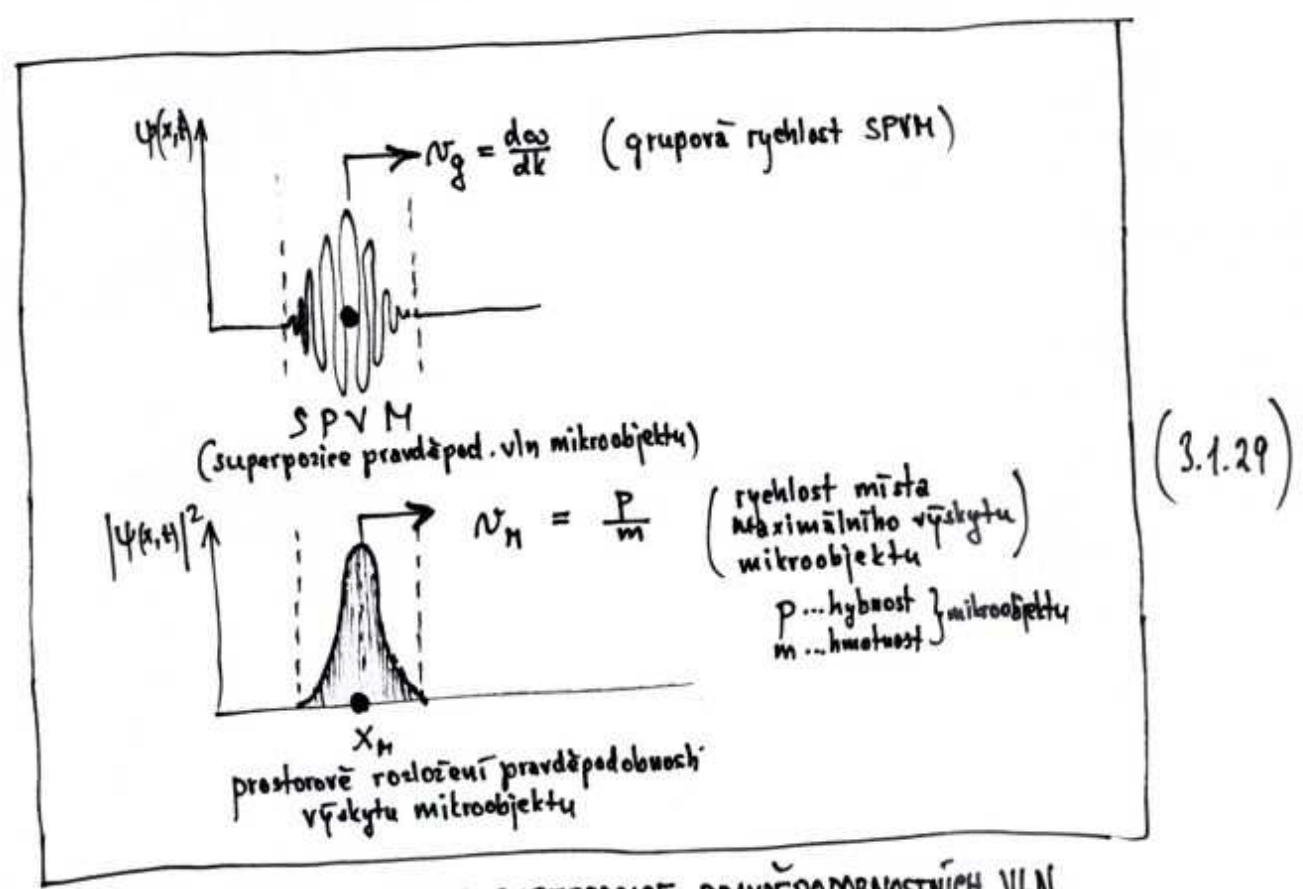
Riká se jí grupová rychlost, neboť SPVM je superpozicí (grupou) mnoha monochromatických harm.vln.

Grupovou rychlost SPVM budeme označovat v_g .

Rovnici (3.1.27) můžeme tedy přepsat ve tvaru:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (3.1.28)$$

Tento výraz má již přímý vztah k pohybu samotného mikroobjektu. Víme totiž, že $|\psi(x,t)|^2$ udává prostorově rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu. Situace je tedy následující:



MIKROOBJEKT JAKO SUPERPOZICE PRAVDĚPODOBNOSTNÍCH VLN

Z obr. (3.1.29) je zřejmé, že

$$N_g = N_M$$

↓

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} \quad (3.1.30)$$

Tohoto vztahu nyní použijeme k odvození relace mezi kvitotčtem pravděpodobnostní vlny $\underline{\omega}$ a celkovou energií mikroobjektu \underline{E} .

Upravíme postupně levou stranu rovnice (3.1.30):

Pro vlnčet \underline{k} platí:

$$\underline{k} = \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{\left(\frac{h}{p}\right)} = \frac{p}{\left(\frac{h}{2\pi}\right)} = \frac{p}{\hbar} \quad (3.1.31)$$

↑ definice ↑ výsledek
Danison-Germ.
exp.

$\frac{h}{2\pi} = \hbar$... redukovaná
↑ označení Planckova
konstanta

Pro derivaci $\frac{d\omega}{dk}$ na levé straně (3.1.30) pak postupně dostaneme:

$$\begin{aligned} \underline{\frac{d\omega}{dk}} &= \frac{d\omega}{dp} \cdot \frac{dp}{dk} = \frac{d\omega}{dp} \cdot \frac{1}{\left(\frac{dk}{dp}\right)} = \frac{d\omega}{dp} \cdot \underbrace{\frac{1}{\frac{d}{dp}\left(\frac{p}{\hbar}\right)}}_{\hbar} = \hbar \frac{d\omega}{dp} = \\ &= \hbar \frac{d\omega}{dE} \cdot \frac{dE}{dp} = \hbar \frac{d\omega}{dE} \cdot \underbrace{\frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m} + V(r)\right)}_{\frac{p}{m}} = \hbar \cdot \frac{d\omega}{dE} \cdot \underline{\frac{p}{m}} \end{aligned} \quad (3.1.32)$$

Výsledek (3.1.32) dosadíme nyní do rovnice (3.1.30):

$$\underbrace{\hbar \cdot \frac{d\omega}{dE}}_{\frac{d\omega}{dk}} \cdot \frac{p}{m} = \frac{p}{m} \quad (3.1.33)$$

\Downarrow

$$\hbar \frac{d\omega}{dE} = 1$$

\Downarrow

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (3.1.34)$$

ω ... kmitočet pravděpodobnosti vlny mikroobjektu
 E ... celková energie mikroobjektu

Porovnáme nyní vztahy (3.1.31) a (3.1.34):

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

k ... vlnočet pravděpodobnosti vlny mikroobjektu
 p ... hybnost mikroobjektu

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

ω ... kmitočet pravděpodobnosti vlny mikroobjektu
 E ... energie mikroobjektu

(3.1.35)

Vztahy (3.1.35) můžeme také obrátit:

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

hybnost
mikroobjektu

stejný vztah
jako pro hybnost
kvanta elmag.
záření (fotonu)

$$E = \hbar \omega = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi\nu = h\nu$$

energie
mikroobjektu

stejný vztah
jako pro energii
kvanta elmag.
záření (fotonu)



(3.1.36)



Vidíme tedy, že příroda nečiní žádný rozdíl mezi elmag. zářeními šířícím se ve vlnách a mikroobjekty částicového typu (např. elektronem).

Obojí mají stejnou podstatu - pouze nám, vnějším pozorovatelům, se zprostředkovane někdy jeví jako vlny, jindy jako částice (ideální obraz bájněho perytona).

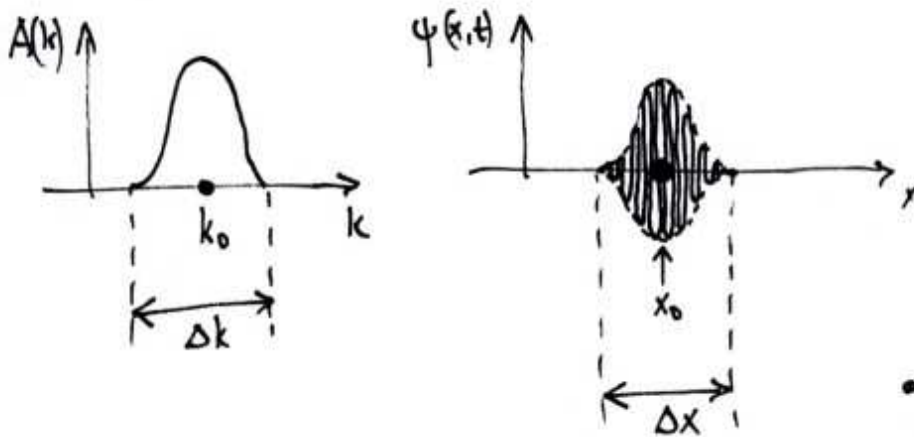
Vraťme se nyní k superpozici pravděpodobnostních vln mikroobjektu (SPVM), popsané rovnicí:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(\omega t - kx)} dk$$

viz (3.1.26)

Matematika učí, že je-li funkce $A(k)$ různá od nuly na intervalu $(k_0 - \frac{1}{2}\Delta k; k_0 + \frac{1}{2}\Delta k)$, pak funkce $\psi(x,t)$ je pro pevné t nenulová na intervalu $(x_0 - \frac{1}{2}\Delta x; x_0 + \frac{1}{2}\Delta x)$, přičemž platí:

$$\Delta k \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \quad (3.1.37)$$



Pro matematicky orientované čtenáře poznamenejme, že důkaz tohoto tvrzení se provádí užitím Parsevalova teorému a Schwartzovy nerovnosti.

Pro fyziku mikroobjektů má výše uvedené tvrzení základní význam:

Podle (3.1.31) platí: $k = \frac{p}{\hbar}$

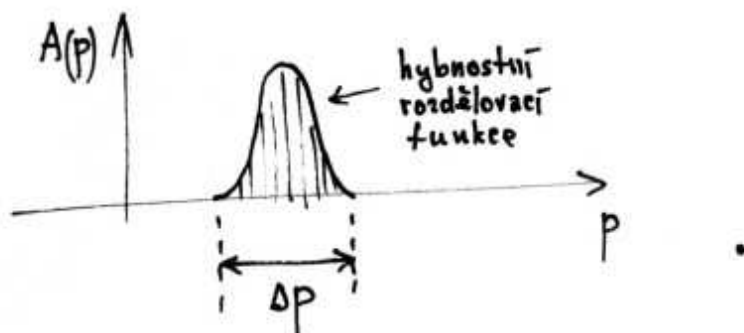
↓

$$\Delta k = \frac{1}{\hbar} \cdot \Delta p \quad (3.1.38)$$

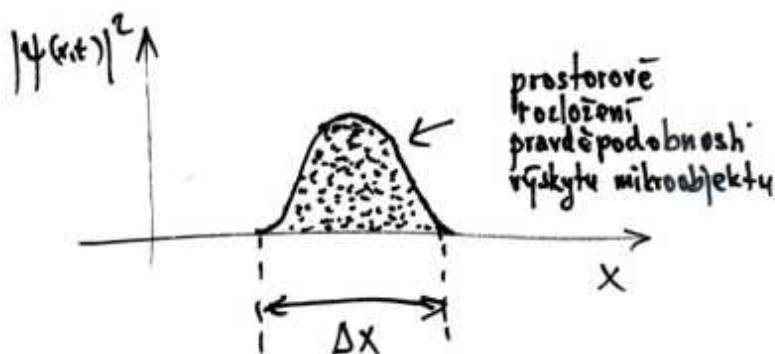
Dosažením (3.1.38) do (3.1.37) tak máme:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar \quad (3.1.39)$$

Velčina Δp v nerovnosti (3.1.39) je charakteristická
hybnostní dŕperze mikroobjektu ("neurčitost" jeho hybnosti) :

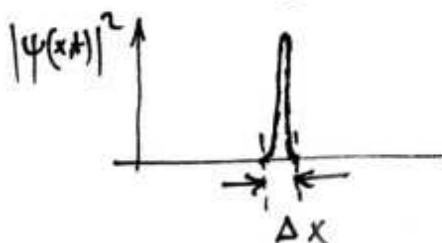
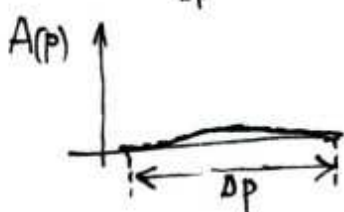
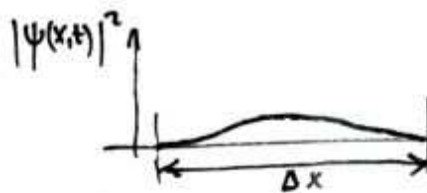
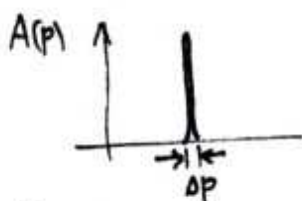


Velčina Δx v této nerovnosti je charakteristický
rozměr prostorové lokalizace mikroobjektu ("neurčitost" jeho polohy) :



Nerovnost (3.1.39) říká, že

čím přesněji určíme hybnost mikroobjektu (Δp malé),
 tím větši bude neurčitost jeho polohy (Δx velké),
 a naopak.



Nerovnost (3.1.39), tj.

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$$

se nazývá Heisenbergova relace neurčitosti (HRN)

a říká, že

hybnost a polohu mikroobjektu nemůžeme současně určit s menšími chybami než takovými, jejichž součin je zdola omezen hodnotou $\frac{1}{2} \hbar$; tato nemožnost je přitom princepiální, tj. daná vlnovými vlastnostmi mikroobjektu, nikoli našimi měřicími přístroji; chyby měřicích přístrojů se k dolní hranici $\frac{1}{2} \hbar$ přičítají.

(3.1.40)

Heisenbergovu relaci neurčitosti lze také modifikovat, a to následujícím způsobem:

$$\text{Platí: } \underbrace{\Delta p}_{F \Delta t} \cdot \Delta x = F \Delta t \Delta x = \underbrace{F \Delta x}_{\Delta E} \Delta t = \underline{\underline{\Delta E \cdot \Delta t}}$$

↓

$$\underbrace{\Delta p \cdot \Delta x}_{\Delta E \cdot \Delta t} \geq \frac{1}{2} \hbar$$

↓

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (3.1.41)$$

ekvivalentní forma HRN

Interpretace nerovnosti (3.1.41) je dvojitá :

① Energii mikroobjektu a časový okamžik, v němž je tato energie určena, nelze současně zjistit s menšími chybami než takovými, že jejich součin je zdola omezen hodnotou $\frac{1}{2}\hbar$. ; (3.1.42)

② Reálný fyzikální proces, při němž dochází ke změně energie o hodnotu $\underline{\Delta E}$, nemůže trvat kratší dobu, než je hodnota $\underline{\Delta t}$ taková, že součin $\Delta E \cdot \Delta t$ je zdola omezen hodnotou $\frac{1}{2}\hbar$. (3.1.43)

Nyní se podíváme na několik příkladů, ilustrujících důsledky HRN :

① Neurčitost rychlosti elektronu v atomu vodíku :

Z HRN $\underbrace{\Delta p}_{m \Delta v} \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar$ máme :

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m \Delta x} \quad (3.1.44)$$

$$\hbar \sim 10^{-34} \text{ [Js]}$$

$$m \sim 10^{-30} \text{ [kg]} \text{ (hmotnost elektronu)}$$

$$\Delta x \sim 10^{-10} \text{ [m]} \text{ (rozměr atomu)}$$

↓

$$\Delta v \geq 10^6 \text{ [ms}^{-1}\text{]} \quad \nabla \textcircled{\bullet} \quad (3.1.45)$$

Srovnáme-li získanou neurčitost rychlosti Δv dle (3.1.45) s hodnotou samotné rychlosti v dle (3.1.18), vidíme, že

$$\Delta v \sim v, \quad (3.1.46)$$

tj. principiální neurčitost rychlosti elektronu v atomu je řádově stejná jako rychlost sama

↓

hovořit o rychlosti elektronu v atomu vůbec nemá smysl. (3.1.47)

* * * *

② Prostorová disperze mikroobjektu v čase

Mějme mikroobjekt o hmotnosti m , který je v určitém okamžiku lokalizován v prostoru o rozměru $\Delta x_0 = 10^{-10}$ [m] (např. elektron v atomu).

Ptáme se, jaká bude neurčitost jeho polohy Δx po uplynutí času Δt , za předpokladu, že mikroobjekt může z původního prostoru uniknout (emise elektronu z atomu).

Při lokalizaci mikroobjektu v prostoru Δx_0 musí podle HRN být neurčitost jeho hybnosti taková, že

$$\Delta p \cdot \Delta x_0 \geq \frac{1}{2} \hbar$$

↓

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x_0}. \quad (3.1.48)$$

Z (3.1.48) máme pro neurčitost rychlosti mikroobjektu

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x_0} \quad (3.1.49)$$

Po uplynutí doby Δt nemůže tedy být jeho poloha známa přesněji než s chybou

$$\Delta x = \Delta v \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x_0} \cdot \Delta t$$

↑
(3.1.49)

⇓

$$\Delta x \geq \frac{\hbar \Delta t}{2m \Delta x_0} \quad (3.1.50)$$

Z výrazu (3.1.50) vidíme, že čím presněji bude učiána původní poloha ($\Delta x_0 \rightarrow 0$), tím větší bude neurčitost polohy Δx po uplynutí doby Δt ($\Delta x \sim \frac{1}{\Delta x_0}$).

Položme si např. otázku, za jakou dobu Δt se neurčitost polohy mikroobjektu zdvojnásobí, tj.

$$\Delta x = 2 \Delta x_0 :$$

Z nerovnosti (3.1.50) máme nyní konkrétně:

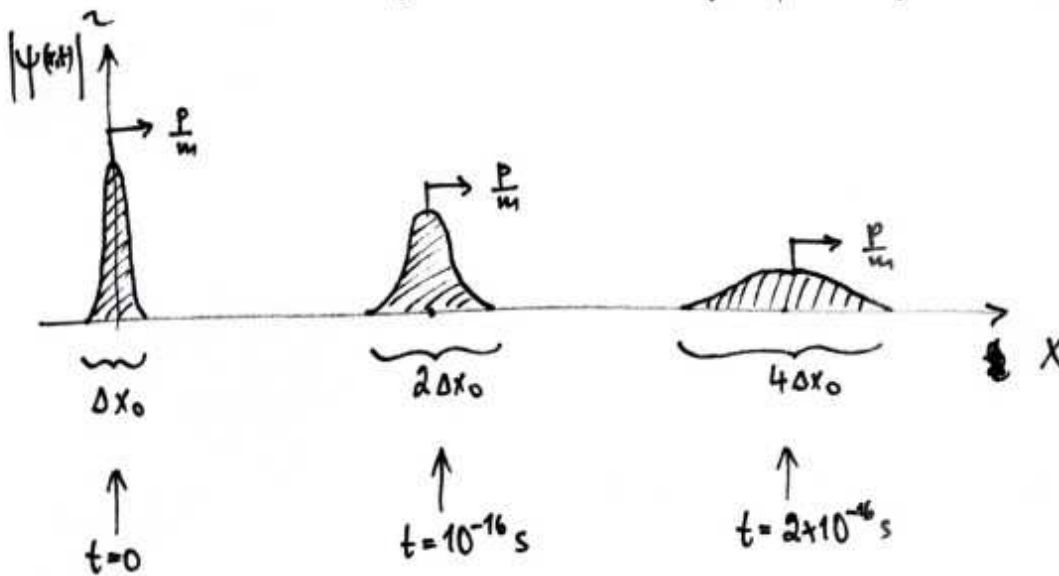
$$2 \Delta x_0 \geq \frac{\hbar \Delta t}{2m \Delta x_0}$$

$$\Delta t \leq \frac{4m(\Delta x_0)^2}{\hbar} \quad (3.1.51)$$

Pro elektron ($m \sim 10^{-30}$ [kg]), který byl původně v atomu ($\Delta x_0 \sim 10^{-10}$ [m]), formule (3.1.51) dává řádově

$$\underline{\underline{\Delta t}} \approx \frac{10^{-30} (10^{-10})^2}{10^{-34}} \approx \underline{\underline{10^{-16}}} \text{ [s]} \quad (3.1.52)$$

doba zdvojnásobení neurčitosti polohy mikroobjektu



prostorová disperze mikroobjektu
v čase

Pozu: Za 1 mikrosekundu bude Δx už řádově metry.

Podíváme se pro zajímavost na prostorovou disperzi makroobjektu v čase (např. kuličku o hmotnosti $m=1g$, jejíž počáteční polohu jsme určili s přesností $\Delta x_0=1mm$).

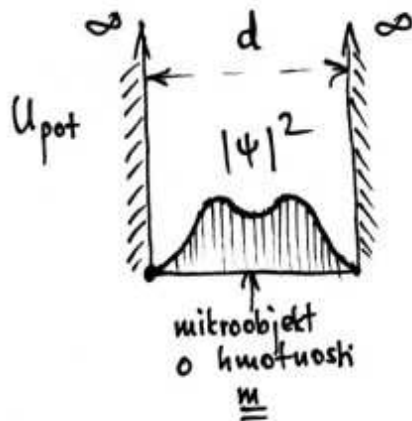
Formule (3.1.51) nyní dává řádově:

$$\underline{\underline{\Delta t}} \approx \frac{10^{-2} \cdot (10^{-3})^2}{10^{-31}} \approx \underline{\underline{10^{+25}}} \text{ [s]} \quad (3.1.53)$$

kvintilióny let

U makroobjektu je tedy prostorová disperze v čase zcela nezjistitelná !

③ Minimální energie mikroobjektu na dně ∞ -hluboké potenciálové jámy :



Uvnitř jámy je $U_{\text{pot}} = 0$, takže

$$E = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} \quad (3.1.54)$$

celková energie mikroobjektu

Mikroobjekt se vyskytuje někde v prostoru šířky d , tj. neurčitost jeho polohy je :

$$\Delta x = d \quad (3.1.55)$$

Z HRN máme pak pro neurčitost jeho hybnosti :

$$\Delta p \geq \frac{\frac{1}{2}\hbar}{\underbrace{\Delta x}_d}$$

↓

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2d} \quad (3.1.56)$$

Samotná hybnosť \underline{p} musí byť aspoň tak veľká jako její neurčitost $\underline{\Delta p}$, tj.

$$p \geq \Delta p \geq \frac{\hbar}{2d} \quad (3.1.57)$$

Podle (3.1.54) pak máme:

$$E = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{\left(\frac{\hbar}{2d}\right)^2}{2m} \quad (3.1.58)$$

↓

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8md^2} \quad (3.1.59)$$

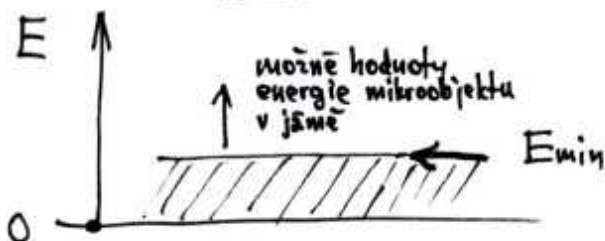
E_{\min}

Mikroobjekt o hmotnosti \underline{m} na dně ∞ -hluboké potenci. jámy šířky \underline{d} má tedy minimální energii:

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8md^2} \quad (3.1.60)$$

Řádově pro elektron v atomu:

$$\underline{E_{\min}} \approx \frac{(10^{-34})^2}{10^{-30} \cdot (10^{-10})^2} \approx 10^{-18} \text{ [J]} \approx \underline{0.1 \text{ [eV]}}.$$

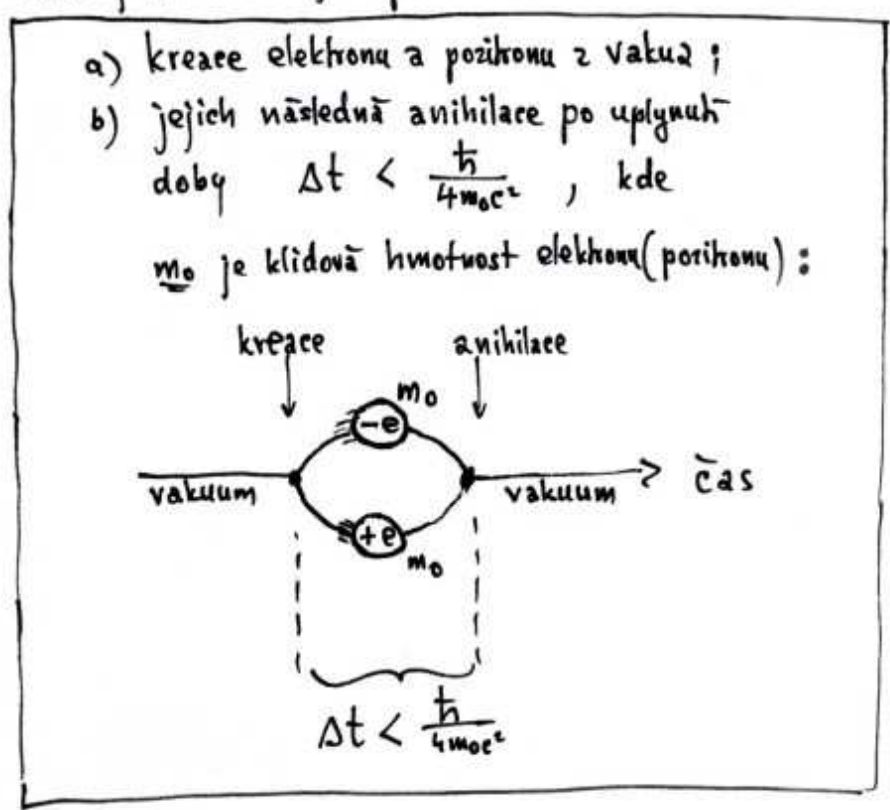


mikroobjekt nelze v jámě zastavit
(na rozdíl od makroobjektu)

x x x x

④ Virtuální elektron-pozitronová fluktuace vakua :

Uvažujme následující proces :



Křeaci elektronu a pozitronu došlo ke změně energie vakua o hodnotu :

$$\Delta E = 2m_0c^2 \quad (3.1.62)$$

Tato změna trvala po dobu

$$\Delta t < \frac{\hbar}{4m_0c^2} \quad (3.1.63)$$

než obě částice opět anihilovaly .
 Pro součin $\Delta E \cdot \Delta t$ tak dostáváme :

$$\Delta E \cdot \Delta t < \underbrace{2m_0c^2 \cdot \frac{\hbar}{4m_0c^2}}_{\frac{1}{2}\hbar} \quad (3.1.64)$$

Pro principiální neurčitost energie a času však platí
Heisenbergova relace neurčitosti :

$$\left(\Delta E \right)_{\text{HRN}} \cdot \left(\Delta t \right)_{\text{HRN}} \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (3.1.65)$$

Porovnáním (3.1.64) a (3.1.65) vidíme, že v nāmi uvařovaném
procesu je součin $\Delta E \cdot \Delta t$ ostře menši než principiálně
nejnižší možná hodnota ($= \frac{1}{2} \hbar$).

To ovšem znamená, že uvařovaný proces není reálným
fyzikálním procesem. Říkāme mu

virtuální (zdānlivā) elektron-pozitronovā fluktuace vakuu.

Znamenā to, že uvařovaný proces kreace a anihilace
elektron-pozitronovāho pāru probēhl tak rychle,
že principiální neurčitost mikrosvēta nedovoluje
zjistit, že vūbee nějakā kreace a anihilace probēhla.

Avšak pozor! Neznamenā to, že takovū virtuální
proces se zprostředkovaně nějak fyzikálně neprojeví.

Virtuálními elektron-pozitronovými fluktuacemi v nepřetržitěm
toku časových intervalů $\Delta t < \frac{\hbar}{4m_0 c^2}$ se vakuum
polarizuje, a tím pādem silově působí na
reálně nāboje :

$$\left. \begin{array}{l} \text{vakuuum} \\ \text{e}^- \text{ nāboj} \\ \text{+++++} \\ \text{polarizovanē} \\ \text{vakuuum} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{e_{\text{ef}} \neq e}{\text{efektivnī} \\ \text{nāboj}} \quad (3.1.66)$$

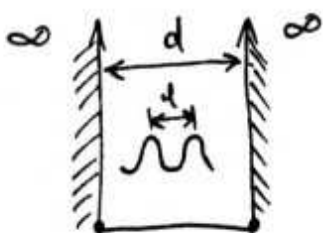
To vede např. k vysvětlení mnohých diskrepanci mezi
teorií a experimentem ve struktuře atomů.



3.2. Stacionární stavy mikroobjektů v omezeném prostoru – kvantování fyzikálních veličin,

Vraťme se nyní k superpozici pravděpodobnostních vln mikroobjektu (SPVM) a prozkoumejme, jak se taková superpozice chová v omezeném prostoru.

Uvažujme již známý mikroobjekt na dně ∞ -hluboké potenciálové jámy:



Z nauky o vlnění víme:

$$\left. \begin{array}{l} d \neq n \cdot \frac{\lambda}{2} \\ n = 1, 2, 3, \dots \end{array} \right\} \Rightarrow \text{dochází k destruktivní interferenci, výsledná vlna se zeslabuje, až úplně vymizí.} \quad (3.2.1)$$

$$\left. \begin{array}{l} d = n \cdot \frac{\lambda}{2} \\ n = 1, 2, 3, \dots \end{array} \right\} \Rightarrow \text{dochází ke konstruktivní interferenci, výsledná vlna se zesílí, vzniká stacionární (stojaté) vlnění.} \quad (3.2.2)$$

Stacionární vlnění se vyznačuje tím, že jeho energie je konstantní. Rovnice (3.2.2) se nazývá podmínka stacionarity.

Ty stavy, v nichž pravděpodobnostní vlny mikroobjektu vytvářejí stacionární vlnění, se nazývají stacionární stavy mikroobjektu v omezeném prostoru.

Prozkoumejme nyní stacionární stavy uvažovaného mikroobjektu v jámě :

Do podmínky stacionarity (3.2.2) dosadíme $d = \frac{h}{p}$

z výsledku Davisson - Germerova experimentu.

Máme tak :

$$d = n \cdot \frac{\frac{h}{p}}{2} \quad (3.2.3)$$

⇓

$$p = n \cdot \frac{h}{2d} \quad (3.2.4)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$

Z výrazu (3.2.4) vidíme, že hybnost mikroobjektu p může nabývat jen celých násobků veličiny $\frac{h}{2d}$.

Ríkáme, že hybnost mikroobjektu v uvažovaném omezeném prostoru (jámě) je kvantována, přičemž elementární (nejmenší) kvantum této hybnosti je $\frac{h}{2d}$.

Podíváme se na energii mikroobjektu v uvažovaných podmínkách :

$$E = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 \cdot \left(\frac{h}{2d}\right)^2}{2m} \quad (3.2.5)$$

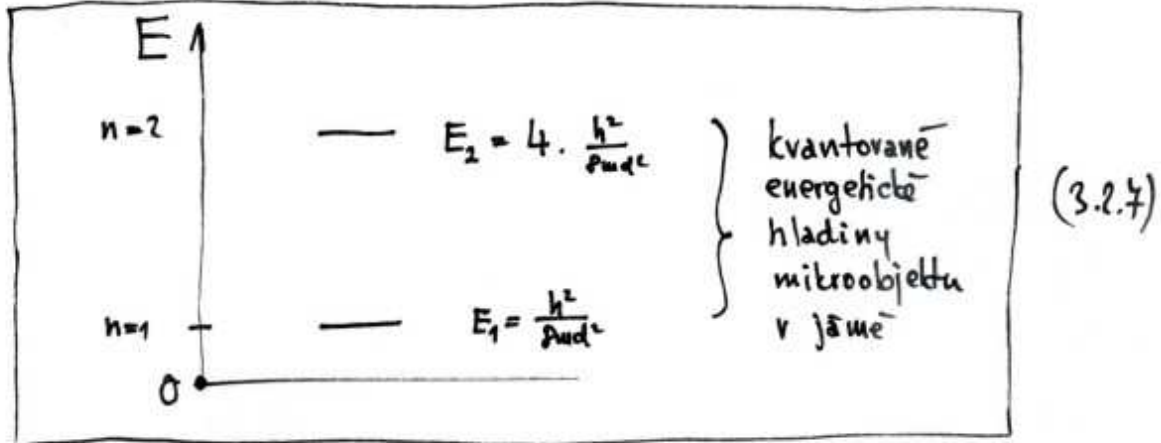
↑
(3.2.4)

⇓

$$E = n^2 \cdot \frac{h^2}{8md^2} \quad (3.2.6)$$

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

Z (3.2.6) opět vidíme, že energie mikroobjektu také je kvantována, tj. může nabývat jen celých násobků $\frac{h^2}{8\mu d^2}$, přičemž už ne všech, ale jen některých vybraných: $n^2 = 1, 4, 9, 16, \dots$.
Elementární kvantum energie má hodnotu $\frac{h^2}{8\mu d^2}$:



S uvedením (3.1.60) snadno zjistíme, že

$$E_1 = \frac{h^2}{8\mu d^2} > E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8\mu d^2} \quad (3.2.8)$$

neboť $h > \hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Elementární kvantum energie mikroobjektu v jámě je tedy větší než minimální hodnota povolená principiálně neurčitostí mikrosvěta, tj. HRN.

Omezeným prostorem pro mikroobjekt je upří. i atom.

Zde analog podmínky stacionarity (3.2.2) vypadá takto:

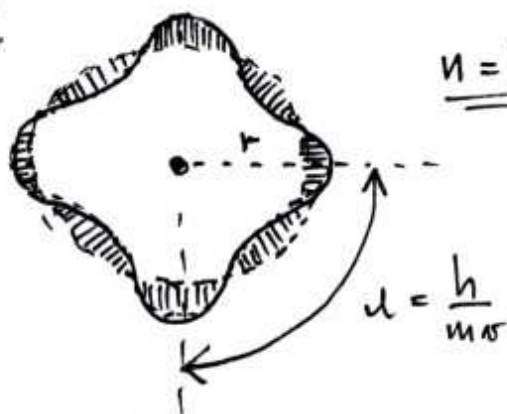
$$\begin{aligned} 2\pi r &= n \cdot \lambda \\ n &= 1, 2, 3, \dots \\ \lambda &= \frac{h}{mv} \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Podmínka (3.2.9) říká, že

na obvod "trajektorie" mikroobjektu o poloměru r musí připadnout celý násobek vln. délek λ pravděpodobnostních vln mikroobjektu

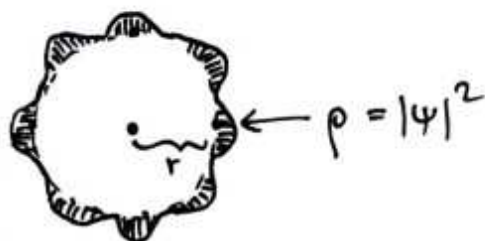
$$\left(\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \right)$$

Pr.



(3.2.10)

Stacionární vlnění nevyžaduje žádnou energii, takže mikroobjekt se po obvodu příslušné sféry může vyskytovat s časově neproměnným (stacionárním) prostorovým rozložením pravděpodobnosti výskytu:




Rovnici (3.2.9) se proto říká podmínka existence stacionárních stavů mikroobjektu v atomu.

Poznamenejme, že existence stacionárního prostorového rozlození pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu (např. elektronu) v atomu je v souladu se závěrem (3.1.47), že v atomu nená vůbec smysl hovořit o rychlosti elektronu.


Úpravou podmínky (3.2.9) dostaneme důležitý výsledek o kvantování jisté fyz. veličiny v atomu:

$$2\pi r = n \cdot \underbrace{\frac{h}{m\sigma}}_a \quad \left| \cdot \frac{m\sigma}{2\pi} \right.$$

$$\Downarrow$$

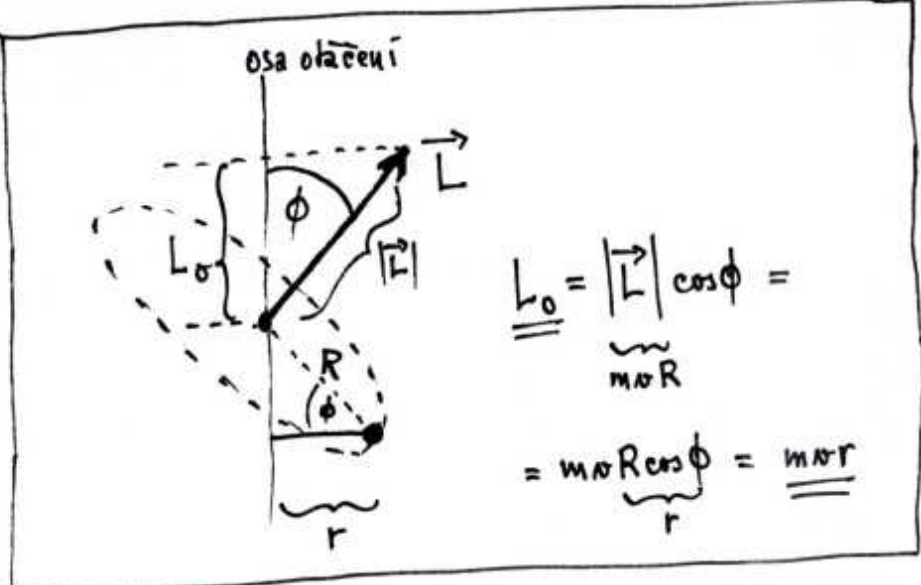


$$\underbrace{m\sigma r}_{L_0} = n \cdot \underbrace{\frac{h}{2\pi}}_{\hbar}$$




$(3.2.11)$

Na levé straně (3.2.11) je průmět momentu hybnosti mikroobjektu do osy otáčení :




$$\begin{aligned} \underline{L_0} &= \underbrace{|\vec{L}|}_{m\sigma R} \cos\phi = \\ &= m\sigma R \underbrace{\cos\phi}_r = \underline{m\sigma r} \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Zuajíce fyzikální smysl levé strany (3.2.11), můžeme tuto rovnici psát ve tvaru:



$$L_0 = n \cdot \hbar$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



$(3.2.13)$

kvantované hodnoty průmětu momentu hybnosti mikroobjektu (elektronu) do osy otáčení

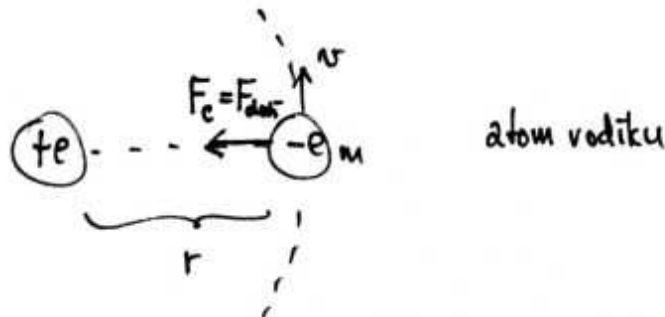
že vztahu (3.2.13) vidíme, že elementární kvantum momentu hybnosti mikroobjektu v atomu má hodnotu redukované Planckovy konstanty \hbar .

Dá se ukázat, že toto je současně nejmenší možná hodnota momentu hybnosti v přírodě vůbec.

Platí tedy:

$$\hbar = \text{elementární kvantum momentu hybnosti} \quad (3.2.14)$$

Na závěr spočítáme ještě energie mikroobjektu (elektronu) v atomu vodíku:



① Podmínka dostředivosti Coulombické síly:

$$\underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}}_{F_c} = \underbrace{\frac{mv^2}{r}}_{F_{doh}} \quad (3.2.15)$$

② Podmínka kvantování momentu hybnosti (viz (3.2.11)):

$$mvr = n \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (3.2.16)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Rovnice (3.2.15) a (3.2.16) představují soustavu 2 rovnic pro 2 neznámé r a v :

Řešením této soustavy dostaneme :

$$r = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{e^2 \pi m} \cdot n^2$$

$5.3 \times 10^{-11} \text{ [m]}$
charakteristický
poloměr atomu

(3.2.17)

$$v = \frac{e^2}{2\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{n}$$

$10^6 \text{ [ms}^{-1}\text{]}$
charakteristická
rychlost elektronu
v atomu
 $\approx (\Delta v)_{\text{HRN}}$

(3.2.18)

Pomocí takto získaných vztahů spočítáme celkovou energii elektronu v atomu :

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = - \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

13.6 [eV]
charakteristická energie
elektronu v atomu

(3.2.19)

$$\blacktriangledown \quad E_n = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{n^2} \quad \blacktriangledown \quad (3.2.20)$$

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$

kvantované hodnoty energie elektronu v atomu vodíku

3.3 Bohrov model atomu - objasnění mechanismu záření atomů a Zeemanova jevu .

Z předchozí kapitoly víme, že elektrón v atomu vodíku se může vyskytovat jen v určitých, přesně definovaných (= kvantovaných) vzdálenostech od jádra

$$r_n = (5.3 \times 10^{-11} [\text{m}]) \cdot n^2 \quad (3.3.1)$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

že průmět jeho momentu hybnosti do určitého směru σ je rovněž kvantován, a to dle formule

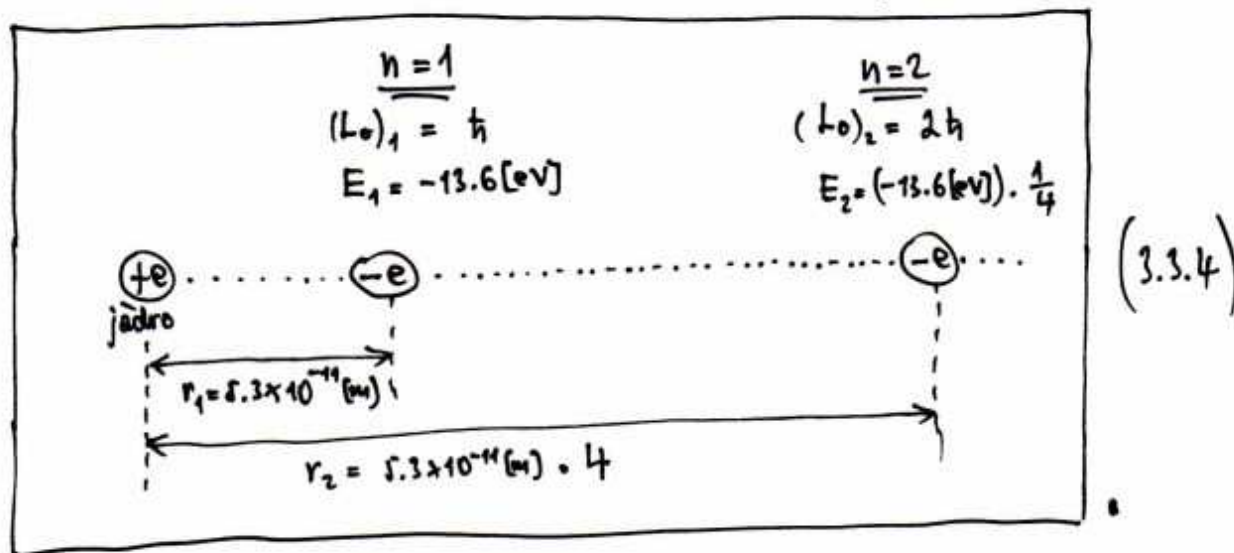
$$(L_\sigma)_n = \hbar \cdot n \quad (3.3.2)$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

a že také jeho energie je kvantována :

$$E_n = (-13.6 [\text{eV}]) \cdot \frac{1}{n^2} \quad (3.3.3)$$

$$n = 1, 2, 3, 4 \dots$$



O rychlosti elektronu v atomu nemá smysl vůbec hovořit, neboť, jak víme z Heisenbergovy relace neurčitosti, její principiální neurčitost je srovnatelná se samotnou její velikostí.

Rovnice (3.3.1), (3.3.2) a (3.3.3) představují geniální propojení planetárního modelu atomu s myšlenkou pravděpodobnostních vln, konkrétně s faktem, že pravděpodobnostní vlny elektronu mohou konstruktivně interferovat, a vytvořit tak stacionární (stojaté) vlnění, při němž se neztrácí energie.

Největší zásluhu na tomto propojení má dánský fyzik Niels Bohr, odtud BOHRŮV MODEL ATOMU (BMA), odměněný Nobelovou cenou.

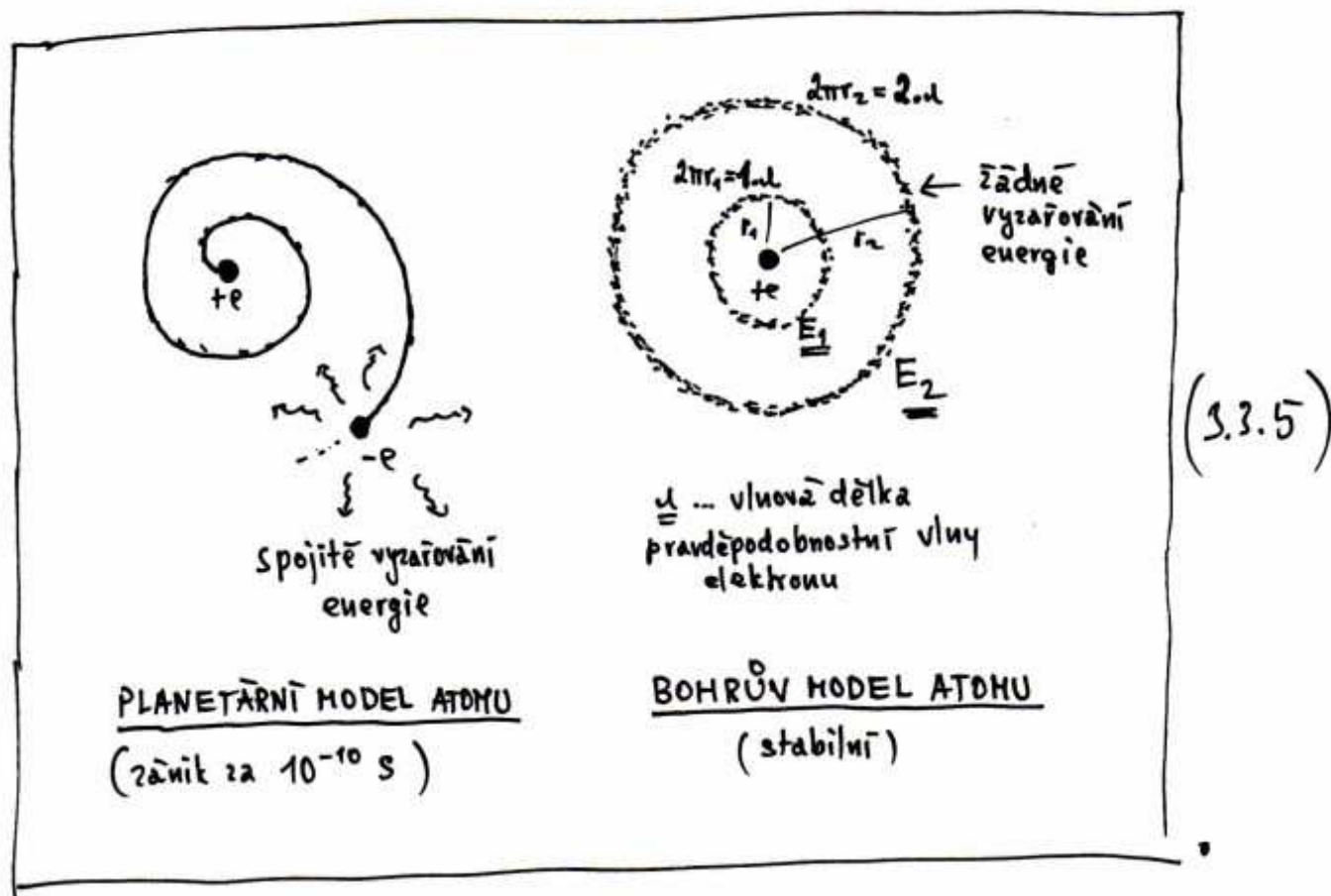
Podle tohoto modelu v poli jádra (te) existují přesně definované vzdálenosti r_n dle (3.3.1), v nichž elektron má přesně definované konstantní energie E_n dle (3.3.3).

Na rozdíl od planetárního modelu tedy elektron nepadá do jádra a atom jako celek je stabilní, což je v souladu s experimentem.

N. Bohr tak ve svém modelu zachoval základní rysy modelu planetárního (těžké malé jádro + lehký, prostorově rozsáhlý elektronový obal), ale současně vysvětlil, proč a jak se může stát, že elektron, ač nabitý a křivočarě se pohybující, ne musí nutně vyzařovat energii, jak žádá klasická Larmorova vyzařovací formule, odvozená z Maxwellových rovnic (viz 1. týden). Vtip je v tom, že elektron jakožto superpozice pravděpodobnostních vln podléhá obecným zákonům teorie vlnění, a může tedy vytvořit ovšem specifický stav, tzv. stacionární (stojaté) vlnění, kdy

energie vlničho se objektu zůstává konstantní a nevyzařuje se do prostoru.

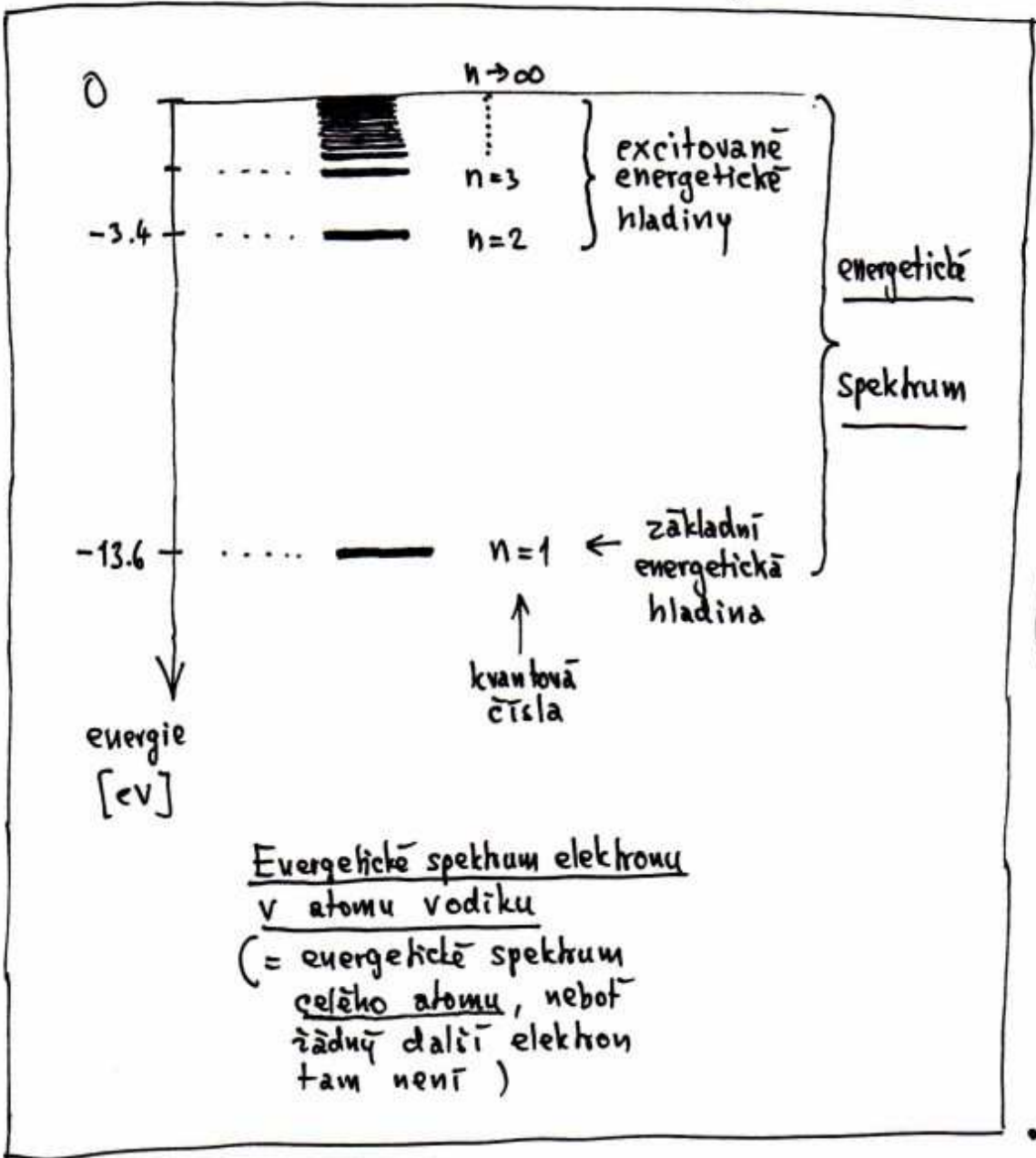
Bohr tímto způsobem vystavěl pozoruhodný most mezi částicovým pojetím planetárního modelu atomu a vlnovým pojetím záření tohoto atomu (opět analogie vlna-částice \approx peryton).



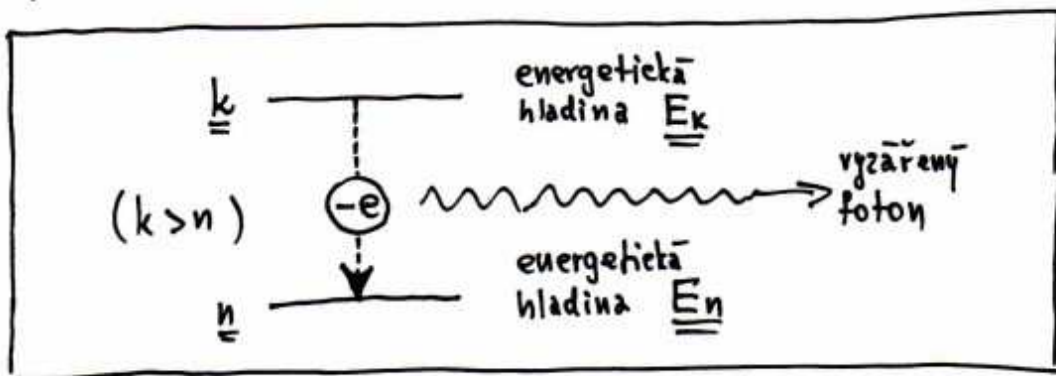
Jednotlivé hodnoty $\underline{E_n}$, vyjádřené graficky, se nazývají energetické hladiny elektronu v atomu.

Soubor všech energetických hladin tvoří energetické spektrum elektronu v atomu.

Pro atom vodíku tak na základě formule (3.3.3) máme :



Protože elektron nacházející se na některé z energetických hladin nevyzařuje žádnou energii, může k vyzaření energie dojít jen při přechodu elektronu z jedné energetické hladiny na jinou s nižší energií :



Podle zákona zachování energie musí být energie vyzařeného fotonu rovna rozdílu energií, které má elektron na energetických hladinách E_k a E_n , tj. musí platit:

$$E_{\text{fot}} = E_k - E_n$$

$$\frac{hc}{\lambda_{k \rightarrow n}} = (-13.6[\text{eV}]) \cdot \frac{1}{k^2} - (-13.6[\text{eV}]) \cdot \frac{1}{n^2} \quad (3.3.8)$$

$\lambda_{k \rightarrow n}$... vlnová délka fotonu vyzařeného při přechodu elektronu z k -tí na n -tou energetickou hladinu

Máme tedy rovnici :

$$\frac{hc}{\lambda_{k \rightarrow n}} = (-13.6[\text{eV}]) \cdot \frac{1}{k^2} - (-13.6[\text{eV}]) \cdot \frac{1}{n^2} \quad (3.3.9)$$

⇓

$$\lambda_{k \rightarrow n} = \frac{\frac{hc}{13.6[\text{eV}]}}{\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right)} \quad (3.3.10)$$

$$\frac{hc}{13.6[\text{eV}]} = \frac{6.625 \times 10^{-34} [\text{Js}] \cdot 3 \times 10^8 [\text{ms}^{-1}]}{13.6 \cdot 1.6 \times 10^{-19} [\text{J}]} = \underline{\underline{9.12 \times 10^{-8} [\text{m}]}}$$

⇓

$$\lambda_{k \rightarrow n} = \frac{9.12 \times 10^{-8} [\text{m}]}{\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right)} \quad (3.3.11)$$

Z výrazu (3.3.11) nyní postupně máme :

Pro $n=1$:

$$\lambda_{k \rightarrow 1} = \frac{9.12 \times 10^{-8} [\text{m}]}{\left(1 - \frac{1}{k^2}\right)} = \lambda_k^{\text{Lyman}}$$

$$k = 2, 3, 4, \dots \infty$$

kompletní souhlas s vlnovými délkami Lymanovy série spektr. čar (viz 1. týden)

Pro $n=2$:

$$\lambda_{k \rightarrow 2} = \frac{9.12 \times 10^{-8} [\text{m}]}{\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{k^2}\right)} = \lambda_k^{\text{Balmer}}$$

$$k = 3, 4, \dots \infty$$

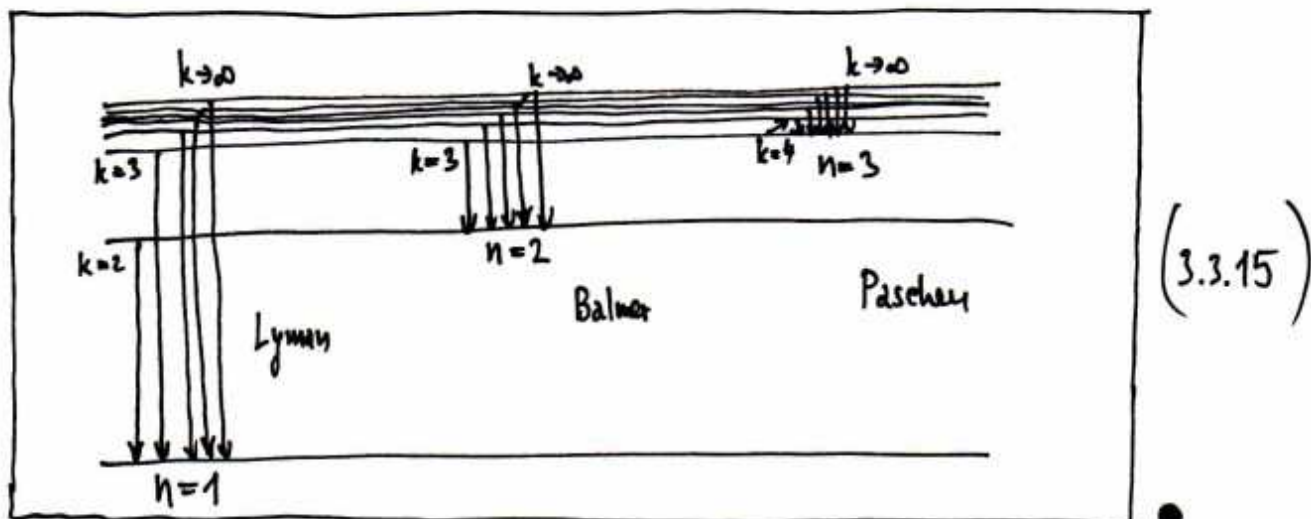
kompletní souhlas s vlnovými délkami Balmerovy série spektr. čar

Pro $n=3$:

$$\lambda_{k \rightarrow 3} = \frac{9.12 \times 10^{-8} [\text{m}]}{\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{k^2}\right)}$$

$$k = 4, 5, \dots \infty$$

kompletní souhlas s vlnovými délkami Paschenovy série spektr. čar



Z výše uvedeného je zřejmé, že Bohrův model atomu (BMA) nejen kvalitativně objasňuje čarový charakter spektrálního rozdělení intenzity záření atomu, ale dokonce kvantitativně reprodukuje vlnové délky pozorovaných sérií spektrálních čar.

Záhada, proč vůbec atomy existují déle než 10^{-10} [s], jak jim předpovídá klasická fyzika, a proč září ve formě sérií spektrálních čar, byla tedy pomocí BMA zcela objasněna

a Niels Bohr zaslouženě cestoval z Kodaně do Stockholmu pro svou Nobelovu cenu.

Nyní zbývá už poslední záhada - Zeemanův jev.

Vložíme atom vodíku do magnetického pole o indukci $\underline{\underline{B}}$.

Vektor $\underline{\underline{B}}$ bude určovat osu $\underline{\underline{z}}$, kolem které se atom bude otáčet.

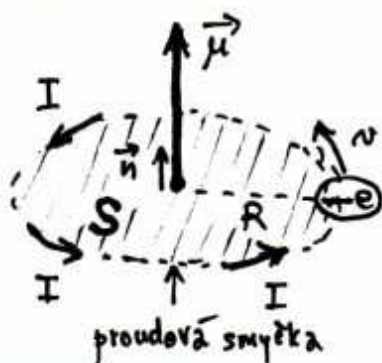
Z 1. týdne víme, že elektron s energií $\underline{\underline{E}}$ získá v mag. poli o indukci $\underline{\underline{B}}$ přídavnou energii

$$\Delta E_{\text{mag}} = -(\underline{\underline{\mu}} \cdot \underline{\underline{B}})$$

$\underline{\underline{\mu}}$... magnetický moment proudové smyčky vytvářené elektronem

(3.3.16)

;



$$\underline{\underline{\mu}} = IS \underline{\underline{n}} ;$$

$$I = \frac{(-e)}{T} = \frac{(-e)}{\left(\frac{2\pi R}{v}\right)} =$$

$$= -\frac{ev}{2\pi R} ;$$

$$S = \pi R^2 .$$

(3.3.17)

Užitím (3.3.17) dostaneme:

$$\vec{\mu} = \underbrace{\left(-\frac{e\nu}{2\pi R}\right)}_{\text{I}} \cdot \underbrace{\pi R^2 \vec{n}}_S = -\frac{e\nu R}{2} \vec{n} =$$

$$= -\frac{e}{2m} \cdot \underbrace{m\nu R \vec{n}}_{\substack{\vec{L} \\ \text{moment hybnosti}}}$$

(3.3.18)

↓

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

magnetický moment elektronu
moment hybnosti elektronu

↑
 gyromagnetický faktor
 (svazuje setrvačnou (gyroskopická) a magnetické vlastnosti elektronu)

(3.3.19)

Dosažením (3.3.19) do (3.3.16) dostaneme pro ΔE_{mag} :

$$\Delta E_{\text{mag}} = -\left(\underbrace{\left(-\frac{e}{2m} \vec{L}\right)}_{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}\right) = \frac{e}{2m} (\vec{L} \cdot \vec{B}) =$$

$$= \frac{e}{2m} |\vec{L}| |\vec{B}| \cos \phi = \frac{eB}{2m} \underbrace{|\vec{L}| \cos \phi}_{L_\sigma} \dots$$

průmět \vec{L} do směru \vec{B} , tedy do osy σ .

(3.3.20)

↓

$$\Delta E_{\text{mag}} = \frac{eB}{2m} L_\sigma$$

(3.3.21)

Průmět L_σ je však kvantován podle vztahu (3.3.2), takže výraz (3.3.21) dává:

$$\Delta E_{\text{mag}} = \frac{eB}{2m} \cdot \underbrace{n \cdot \hbar}_{L_\sigma} = \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n \quad (3.3.22)$$

⇓

$$\begin{aligned} \nabla \quad \textcircled{1} \quad \left(\Delta E_{\text{mag}} \right)_n &= \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n \quad \nabla \quad \textcircled{1} \quad (3.3.23) \\ n &= 1, 2, 3, 4, \dots \end{aligned}$$

Celková energie elektronu v magnetickém poli pak je:

$$\nabla \quad \bullet \quad \left. \begin{aligned} E_n(B) &= E + \left(\Delta E_{\text{mag}} \right)_n = E + \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \right\} \nabla \quad \bullet \quad (3.3.24)$$

Mějme nyní elektron v atomu vodíku na k -tě energetické hladině s energií E_k .

Vložení do magnetického pole o indukci B se podle (3.3.24) tato energetická hladina rozštěpí na soubor hladin:

$$\begin{aligned} E_{k,n}(B) &= E_k + \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n \\ n &= 1, 2, 3, 4, \dots \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

Uvažujme nyní přeskok elektronu na některou nížší energetickou hladinu $\underline{E_l}$ ($l < k$), která v mag.-poli \underline{B} je rovněž souborem hladin:

$$E_{l,n'}(B) = E_l + \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n' \quad (3.3.26)$$

$$n' = 1, 2, 3, \dots$$

Frekvence vyzářaných fotonů při všech možných přeskocích pak budou:

$$\begin{aligned} \nu_{(k,n) \rightarrow (l,n')}(B) &= \frac{E_{k,n}(B) - E_{l,n'}(B)}{h} = \\ &= \frac{\left(E_k + \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n\right) - \left(E_l + \frac{e\hbar B}{2m} \cdot n'\right)}{h} = \\ &= \underbrace{\frac{E_k - E_l}{h}}_{\nu_{k \rightarrow l}} + \frac{e\hbar B}{2mh} \cdot (n - n') \quad (3.3.27) \\ & \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \quad \underbrace{M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots} \\ &= \frac{e\hbar B}{2mh} = \frac{eB}{4\pi m} \end{aligned}$$

↓

$$\nu_{k \rightarrow l, M}(B) = \nu_{k \rightarrow l} + \left(\frac{eB}{4\pi m}\right) \cdot M \quad (3.3.28)$$

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

↑
označíme $\underline{\Delta\nu}$

Vztah (3.3.28) můžeme ještě vyjádřit pomocí vlnové délky.

Platí:
$$\Delta V = \left| \frac{dV}{d\lambda} \right| \Delta \lambda \quad (3.3.29)$$

$$V = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{dV}{d\lambda} = -\frac{c}{\lambda^2} \Rightarrow \left| \frac{dV}{d\lambda} \right| = \frac{c}{\lambda^2}, \text{ takže}$$

podle (3.3.29) máme:

$$\Delta V = \frac{c}{\lambda^2} \Delta \lambda \quad (3.3.30)$$

Dosadíme-li do levé strany za ΔV výraz $\left(\frac{eB}{4\pi m} \right)$ dle (3.3.28), dostaneme:

$$\frac{eB}{4\pi m} = \frac{c}{\lambda^2} \Delta \lambda$$



$$\Delta \lambda = \frac{1}{4\pi c} \cdot \frac{e}{m} \cdot \lambda^2 \cdot B \quad (3.3.31)$$

Místo (3.3.28) pak můžeme psát:

$$\lambda_{k \rightarrow 2, M}(B) = \lambda_{k \rightarrow \lambda} + \Delta \lambda \cdot M$$

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.3.32)$$

Což je plně v souladu s experimentem, včetně závislosti $\Delta \lambda$ na λ a B dle (3.3.31) - (str. 1. týden).

Vidíme tedy, že Bohrov model atomu (BMA) dokáže také plně objasnit Zeemanův jev, a to nejen kvalitativně (existence rozštěpení jedné spektrální čáry v mag. poli na několik ekvidistantních spektrálních čar), ale i kvantitativně (velikost rozštěpení má přesně pozorovanou závislost na \underline{L} a \underline{B}).

Všech 6 záhad, formulovaných v 1. týdnu v souvislosti s aplikací zákonitosti klasické fyziky na jevy odehrávající se na atomární úrovni, je tedy objasněno a náš čtenářský úkol dát tomu všemu hlubší smysl a řád, což především obnáší formulovat základní pohybové rovnice mikrosvěta.

4. TÝDEN

4.1 Schrödingerova rovnice

V této kapitole odvodíme pohybovou rovnici mikroobjektu jako jednoduchý důsledek vlnové rovnice pro jeho pravděpodobnostní vlny. V minulém týdnu jsme si k tomu již připravili potřebné "ingredience":

1) vlnovou rovnici pro pravděpodobnostní vlnu $\psi(x,t)$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(x,t) = v_f^2 \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \quad ; \quad (4.1.1)$$

2) vyjádření fázové rychlosti v_f pomocí kmitočtu ω vlnětu pravděpodobnostní vlny:

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad ; \quad (4.1.2)$$

3) vztah mezi vlnětem pravděpodobnostní vlny a hybností mikroobjektu:

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad ; \quad (4.1.3)$$

4) vztah mezi kmitočtem pravděpodobnostní vlny a energií mikroobjektu:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad . \quad (4.1.4)$$

Dosažením (4.1.3) do (4.1.2) máme:

$$\underline{\underline{N_f}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega}{\left(\frac{p}{\hbar}\right)} = \frac{\hbar\omega}{p} \quad (4.1.5)$$

Hybnost mikroobjektu \underline{p} souvisí s jeho energií \underline{E} vztahem:

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{E_{kin}} + \underbrace{U(x)}_{E_{pot}} \quad (4.1.6)$$

⇓

$$p = \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (4.1.7)$$

Ze vztahu (4.1.4) máme $\underline{E = \hbar\omega}$, což dosazením do (4.1.7) dá:

$$p = \sqrt{2m(\hbar\omega - U(x))} \quad (4.1.8)$$

Dosažením (4.1.8) do (4.1.5) nakonec máme:

$$\textcircled{1} \quad N_f = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2m(\hbar\omega - U(x))}} \quad \textcircled{1} \quad (4.1.9)$$

Klasická disperzní relace $N_f = N_f(\omega, x)$ pro vlnu šířící se v nehomogenním prostředí (závislost na \underline{x}).

Vztah (4.1.9) pro $\underline{v_f}$ nyní dosadíme do vlnové rovnice (4.1.1) :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(x,t) = \underbrace{\frac{\hbar^2 \omega^2}{2m(\hbar\omega - U(x))}}_{v_f^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \quad (4.1.10)$$

Matematika říká, že řešení diferenciální rovnice typu (4.1.10) má tvar:

$$\psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad (4.1.11)$$

(separovatelnost \underline{x} a \underline{t})

Dosažením (4.1.11) do (4.1.10) máme:

$$-\cancel{\omega^2} \cdot \psi(x,t) = \cancel{\omega^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m(\hbar\omega - U(x))} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \quad (4.1.12)$$

Tuto rovnici (po zkrácení ω^2) vynásobíme $\underline{(-1) \cdot (\hbar\omega - U(x))}$:

$$\downarrow$$

$$(\hbar\omega - U(x)) \cdot \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \quad (4.1.13)$$

$$\downarrow$$

$$\hbar\omega \cdot \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) + U(x) \cdot \psi(x,t) \quad (4.1.14)$$

určíme pomocí časové derivace (4.1.11)

Platí:
$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi(x) \cdot e^{-i\omega t}) = \psi(x) \cdot \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\omega t}) =$$

$$= -i\omega \cdot \underbrace{\psi(x) \cdot e^{-i\omega t}}_{\psi(x,t)} = \underline{\underline{-i\omega \cdot \psi(x,t)}} \quad (4.1.15)$$

↓

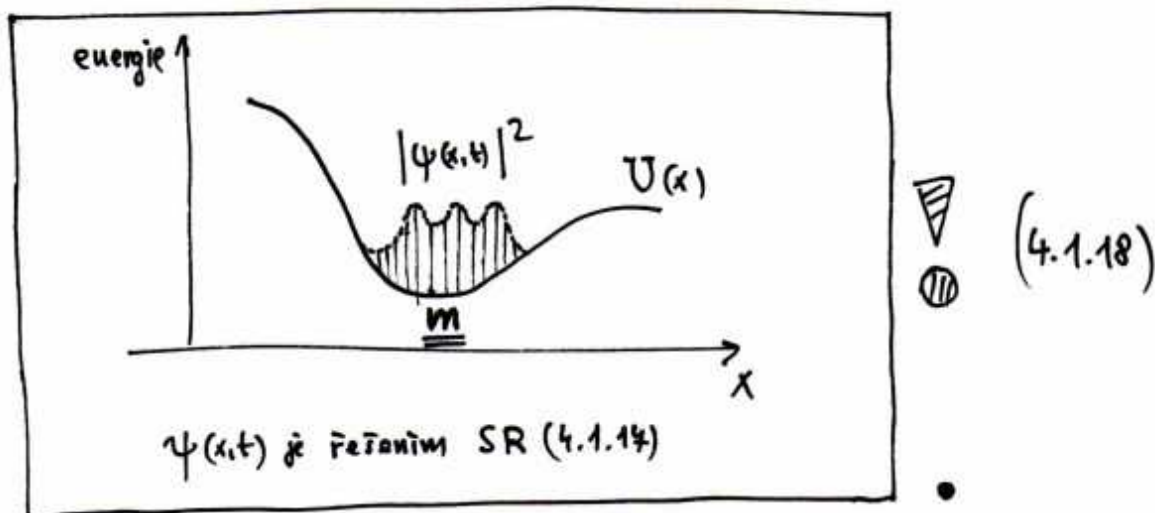
$$\underline{\underline{\omega \cdot \psi(x,t)}} = \frac{1}{(-i)} \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = \underline{\underline{i \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t)}} \quad (4.1.16)$$

Dosažením (4.1.16) do levé strany (4.1.14) nakonec máme:

$$\bullet \quad \boxed{i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x,t) + U(x) \cdot \Psi(x,t)} \quad \bullet \quad (4.1.17)$$

rovnice pro pravděpodobnostní vlnu $\underline{\psi(x,t)}$
 mikroobjektu o hmotnosti \underline{m} majícího
 potenciální energii $\underline{U(x)}$ =

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE (SR) .



Schrödingerova rovnice (SR) je základní pohybovou rovnicí
mikrosvěta.

Obsahuje v sobě:

a) reminiscenci (připomínku) částicového chování mikroobjektu:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) \sim \frac{dp}{dt} = \underbrace{-\frac{\partial U}{\partial x}}_F \quad (4.1.19)$$

první derivace!

b) reminiscenci (připomínku) vlnového chování mikroobjektu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \sim \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(x,t) = v_f^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t) \quad (4.1.20)$$

druhá derivace!

c) něco navíc, co oba tyto typy pohybu synergicky stmeluje
a vytváří tak kvalitativně nový hybrid -
částicovlnu resp. vlnočástečku (analog ptákojeleň
či jelenoptáka = porytona):

$$U(x) \cdot \psi(x,t) \sim \text{není žádný analog v pohybových rovnicích klasické fyziky} \quad (4.1.21)$$

Tři poznámky k pravděpodobnostním funkcím $\psi(x,t)$:

① Funkce $\psi(x,t)$, která je řešením SR, je obecně komplexní, tj. $\psi^*(x,t) \neq \psi(x,t)$;

② Funkce $|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t) \cdot \psi(x,t)$

udává prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu v čase t a mitom plah;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

v každém čase t

normovací podmínka ;

(4.1.22)

③ Ze všech funkcí $\psi(x,t)$, které jsou řešením SR, se pro popis fyzikálních stavů mikroobjektu hodí jen ty, které jsou všude konečné, spojité a hladké.

Taková řešení SR se nazývají VLNOVÉ FUNKCE MIKROOBJEKTU.

Z odvození SR víme, že $\psi(x,t)$ se dá zapsat ve tvaru:

$$\psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \leftarrow \text{energie mikroobjektu}$$

↑
kvantový
pravděpodobnostní
vlny

(4.1.23)

Máme tak :

$$\psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \quad (4.1.24)$$

což dosazeno do SR (4.1.17) dá :

$$E \cdot \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + U(x) \cdot \psi(x) \quad (4.1.25)$$

⇓

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U(x))}_{f(x)} \cdot \psi(x) = 0 \quad (4.1.26)$$

"BEZČASOVÁ" SCHRÖDINGEROVA ROVNICE (BSR) .

BSR určuje :

- jakou celkovou energii \underline{E} může mít mikroobjekt mající hmotnost \underline{m} a potenciální energii $\underline{U(x)}$;
 - jaké je prostorově rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu $|\psi(x)|^2$ ve stavech s touto energií \underline{E} (tzv. stacionárních stavech) ,
- (4.1.27)

Nyní přejdeme k další kapitole, v níž si uvidíme nejjednodušší aplikace BSR .

4.2 Řešení Schrödingerovy rovnice v jednoduchých případech .

1. případ - Stacionární stavy volného mikroobjektu

Stacionární stavy \Rightarrow použijeme "bezčasovou" Schrödingerovu rovnici (BSR) (4.1.26).

Volný mikroobjekt \Rightarrow potenciální energie $U(x) = 0$.

Dosažením $U(x) = 0$ do (4.1.26) tak dostáváme :

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\text{označme } \underline{k^2}} \cdot \psi(x) = 0 \quad (4.2.1)$$

\Downarrow

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

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{1}{\hbar} \underbrace{\sqrt{2mE}}_p = \frac{p}{\hbar} \quad (4.2.2)$$

A, B ... libovolné konstanty

Celková vlnová funkce mikroobjektu pak s ohledem na (4.1.24) má tvar :

$$\Psi(x,t) = \left\{ A e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \right\} e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$p = \sqrt{2mE}$$

\underline{E} ... energie volného mikroobjektu

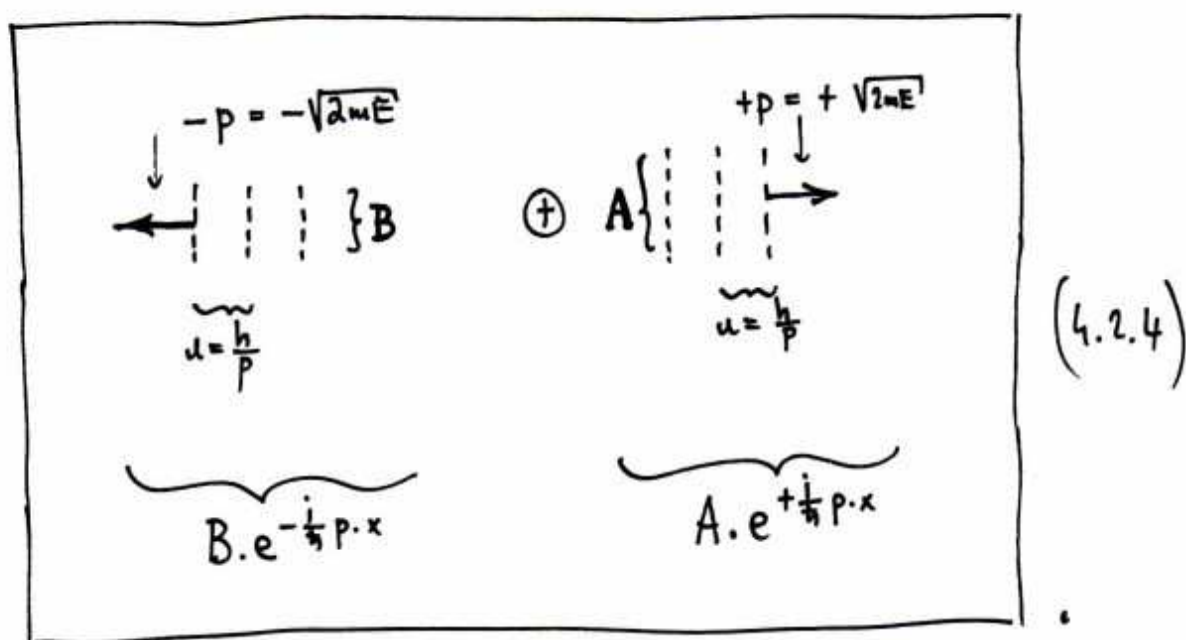
\underline{p} ... hybnost volného mikroobjektu

$$E = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$$

(4.2.3)

vlnová funkce stacionárního stavu volného mikroobjektu s energií \underline{E}

Schématická vizualizace vlnové funkce (4.2.3) :



Mikroobjekt jako celek nemá určitou hybnost.

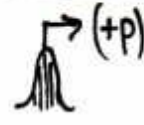

Pohybuje se částečně doprava s hybností $\underline{+p}$ a částečně doleva s hybností $\underline{-p}$.

Kam se pohybuje víc, záleží na poměru velikostí \underline{A} a \underline{B} :

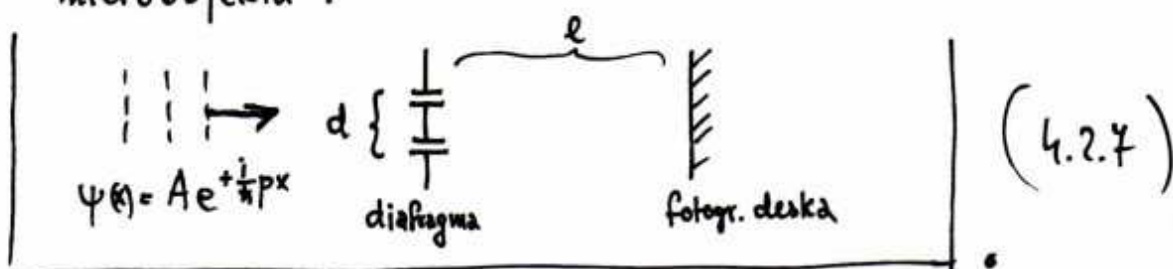
$\underline{\underline{A > B}}$... převažuje pohyb <u>doprava</u>	(4.2.5)
$\underline{\underline{A < B}}$... převažuje pohyb <u>doleva</u>	
$\underline{\underline{A = B}}$... objekt <u>stojí</u> , dochází pouze k jeho <u>prostorové disperzi</u> v čase	



V případě, že některý z koeficientů $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ je roven $\underline{\underline{0}}$, pohybuje se mikroobjekt s určitou hybností buď doprava nebo doleva:

$\underline{\underline{B = 0}}$ $\psi(x) = A \cdot e^{+i \frac{p}{\hbar} x}$...  (+p)	(4.2.6)
$\underline{\underline{A = 0}}$ $\psi(x) = B \cdot e^{-i \frac{p}{\hbar} x}$...  (-p)	

Soustředíme se nyní právě na tuto situaci a uvažujeme mikroobjekt pohybující se s hybností $\underline{\underline{+p}}$ v kladném směru osy x . Mikroobjektu postavme do cesty clonu se dvěma malými otvory ve vzájemné vzdálenosti $\underline{\underline{d}}$ (tjv. diafragma). Ve vzdálenosti $\underline{\underline{l}}$ od diafragmy ($l \gg d$) umístíme fotografickou desku schopnou zaregistrovat přítomnost mikroobjektu:

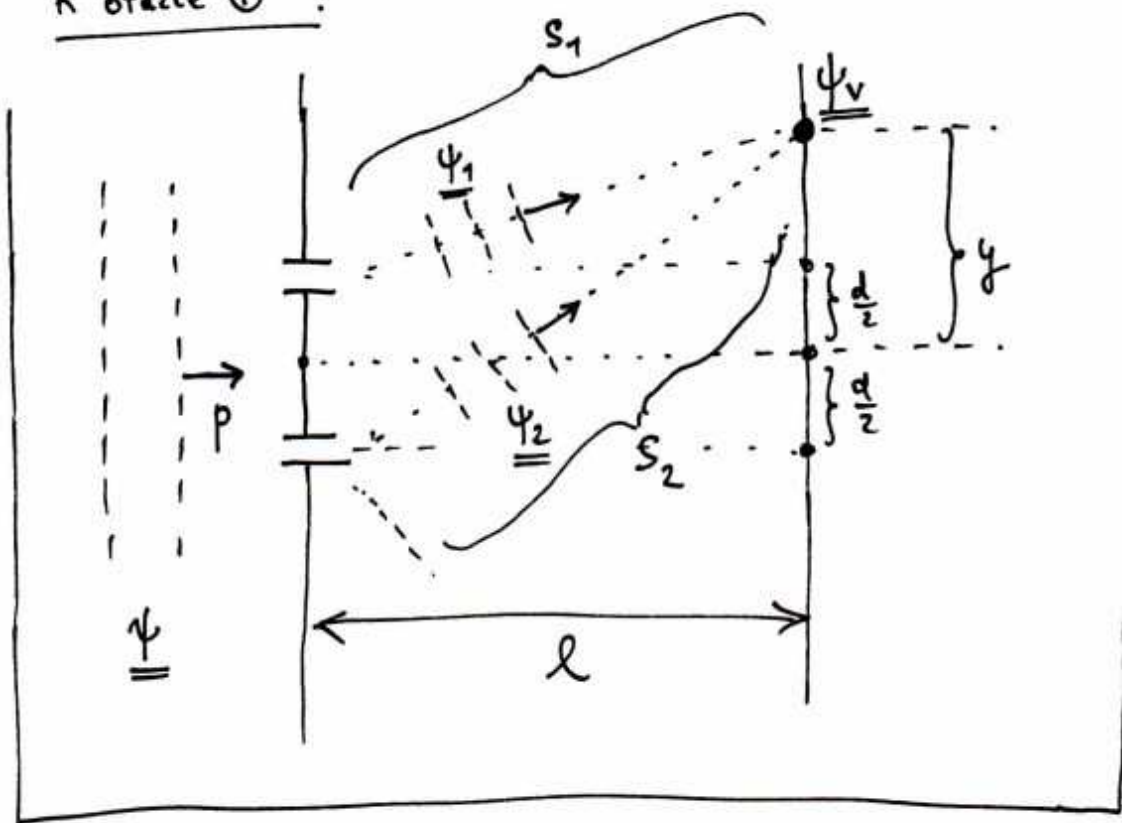


2 zásadní otázky :

- ① Jaké bude prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu na fotograf. desce po průchodu mikroobjektu diafragmou ?
- ② Jak se toto rozložení změní, určíme-li, kterým z otvorů diafragmy mikroobjekt prošel ?

(4.2.8)

K otázce ① :



(4.2.9)

Následkem "provlnění se" mikroobjektu oběma otvory diafragmy se původní vlna $\underline{\psi}$ rozštěpí na dvě koharentní komponenty $\underline{\psi}_1$ a $\underline{\psi}_2$, které pak spolu interferují na výslednou vlnu $\underline{\psi}_v$.

Zřejmě platí:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot s_1} \\ \psi_2 &= A e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot s_2} \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

⇓

$$\psi_v = \psi_1 + \psi_2 = A \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot s_1} + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot s_2} \right\} \quad (4.2.11)$$

⇓

$$\psi_v^* = \psi_1^* + \psi_2^* = A^* \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot s_1} + e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot s_2} \right\} \quad (4.2.12)$$

⇓

$$\begin{aligned} |\psi_v|^2 &= \psi_v \psi_v^* = \underbrace{A A^*}_{|A|^2} \left\{ 1 + \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (s_1 - s_2)}}_{e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot (s_2 - s_1)}} + 1 \right\} = \\ &= |A|^2 \left\{ 2 + \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot (s_2 - s_1)} + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (s_2 - s_1)}}_{2 \cos\left(\frac{p \cdot (s_2 - s_1)}{\hbar}\right)} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

⇓

$$|\psi_v|^2 = 2|A|^2 \left\{ 1 + \cos\left(\frac{p}{\hbar} \cdot (s_2 - s_1)\right) \right\} \quad (4.2.14)$$

Trochu elementární geometrie (Pythagorova věta) dává:

$$\begin{aligned} s_1^2 &= l^2 + \left(y - \frac{d}{2}\right)^2 \\ s_2^2 &= l^2 + \left(y + \frac{d}{2}\right)^2 \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

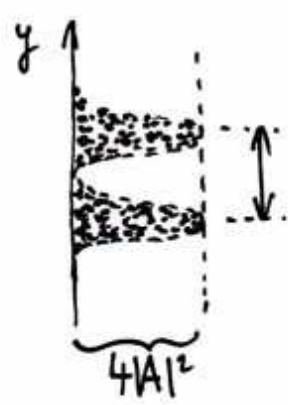
⇓

$$\begin{aligned} s_2^2 - s_1^2 &= 2yd \\ \underbrace{(s_2 - s_1)(s_2 + s_1)}_{\approx 2l} & \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

⇓

$$s_2 - s_1 = \frac{d}{l} \cdot y \quad (4.2.17)$$

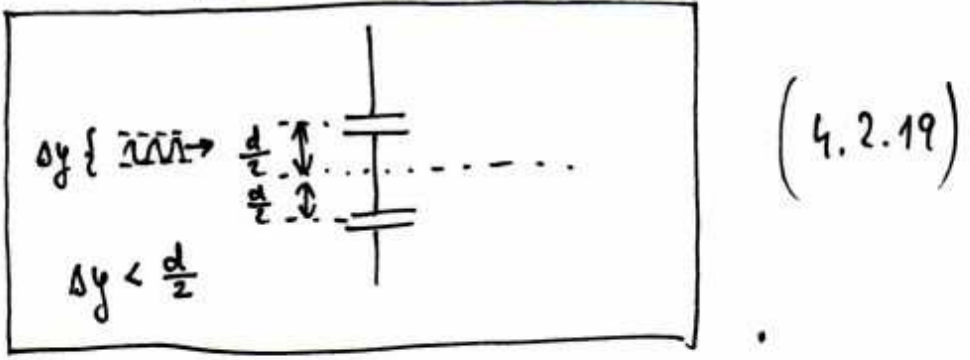
Dosažením (4.2.17) do (4.2.14) máme kvězně prostorově rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu na fotografické desce:

$$P(y) = 2|A|^2 \left\{ 1 + \cos\left(\frac{pd}{h\lambda} \cdot y\right) \right\}$$


! (4.2.18) vzdálenost dvou sousedních maxim

K otázce 2 :

Chceme-li určit, kterým otvorem diafragmy mikroobjekt protel, nesmí neurčitost jeho polohy na diafragmě převyšovat hodnotu $\frac{d}{2}$:



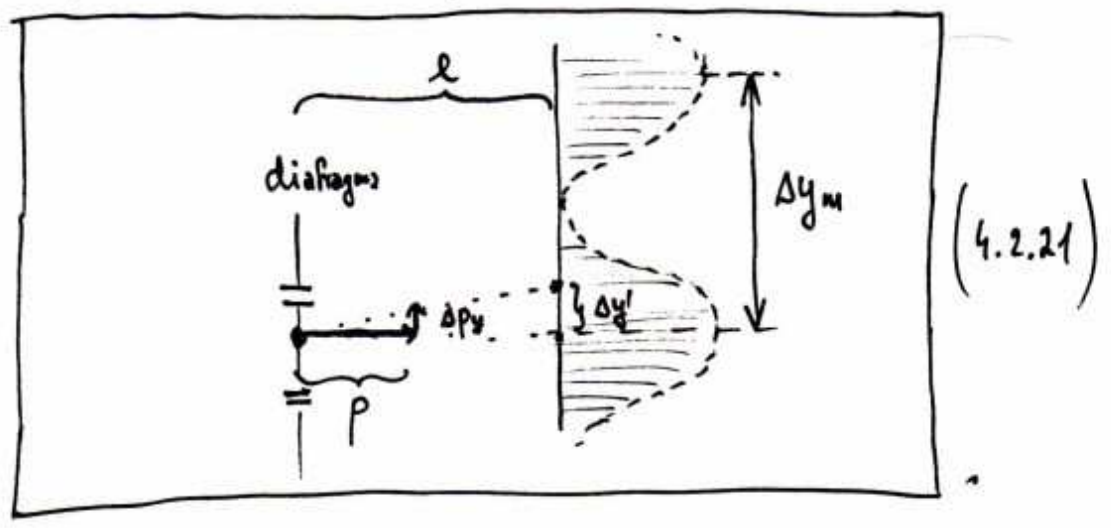
To však podle HRN vede k neurčitosti hybnosti mikroobjektu :

$$\Delta p_y \geq \frac{h}{2\Delta y} > \frac{h}{2 \cdot \frac{d}{2}} = \frac{h}{d}$$

↓

$$\Delta p_y > \frac{h}{d} \quad (4.2.20)$$

Tato neurčitost hybnosti však vyvolá neurčitost polohy mikroobjektu na skřítku $\Delta y'$:



Elementární geometrie dává:

$$\boxed{\Delta y' = \frac{l}{p} \cdot \Delta p_y} \quad (4.2.22)$$

Dosadíme-li sem za Δp_y podle (4.2.20), máme:

$$\boxed{\Delta y' > \frac{l}{p} \cdot \frac{h}{d}} \quad (4.2.23)$$

Porovnáme-li tuto hodnotu se vzdáleností 2 interferenčních maxim Δy_m dle (4.2.18), dostaneme:

$$\boxed{\frac{\Delta y'}{\Delta y_m} > \frac{\frac{lh}{pd}}{\frac{2\pi lh}{pd}} = \frac{1}{2\pi} \doteq \underline{\underline{0.16}}} \quad (4.2.24)$$

⇓

$$\boxed{\Delta y' > 0.16 \Delta y_m} \quad (4.2.25)$$

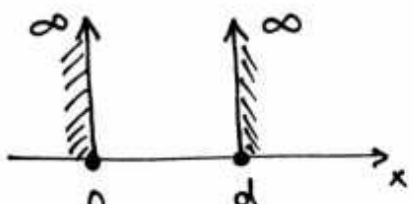
Což znamená, že interferenční obraz na fotografické desce je značně rozmazan.

Určit, kterým otvorem diafragmy mikroobjekt prošel (tj. omezení jeho polohy) tedy vede ke zničení interferenčního charakteru $p = |y|^2$. Mikroobjekt se v tomto případě projevuje spíše jako částice než vlna.

Když však jeho polohu nijak neomezujeme, tj. necháme-li jej současně procházet oběma otvory, pak se naplno projeví jako vlna, schopná rozštěpit se na 2 koherentní komponenty, které spolu interferují.

2. případ - Stacionární stavy mikroobjektu
v omezeném prostoru ∞ -hluboké
potenciálové jámy .

Nyní se vrátíme k bezčasové Schrödingerově rovnici
a aplikujeme ji na mikroobjekt, který už nebude volný,
ale bude se nacházet v potenciálu

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x \leq 0 \\ 0 & \text{pro } 0 < x < d \\ \infty & \text{pro } x \geq d \end{cases} \quad (4.2.26)$$


∞ -hluboká potenciálová jáma

Tam, kde je $U(x) \rightarrow \infty$, se mikroobjekt
vyskytovat nemůže, takže

$$\psi(x) = 0 \quad \text{pro } x \leq 0 \quad \text{a } x \geq d \quad (4.2.27)$$

↓

$$\text{Nenulová může být funkce } \psi(x) \quad (4.2.28)$$

pouze pro $0 < x < d$.

Požadavek (4.2.27) klade na $\psi(x) \neq 0$; $0 < x < d$
následující okrajové podmínky:

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} (\psi(x)) = 0 \quad (4.2.29)$$

$$\lim_{x \rightarrow d^-} (\psi(x)) = 0 \quad (4.2.30)$$

Tam, kde je $\psi(x) \neq 0$, tj. $0 < x < d$, je $U(x) = 0$,
takže bezčasová Schrödingerova rovnice (BSR) má tvar:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \psi(x) = 0 \quad (4.2.31)$$

Zavedme označení

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4.2.32)$$

takže z rovnice (4.2.31) máme:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + k^2 \cdot \psi(x) = 0$$

↓

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (4.2.33)$$

A, B ... libovolné konstanty

Až ke vztahu (4.2.33) je to stejné jako u volného mikrobjektu. Nyní však vstoupí do hry okrajové podmínky (4.2.29) a (4.2.30).

Podmínka (4.2.29) dává:

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) = 0$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{A+B} \quad (4.2.34)$$

↓

$$\nabla \boxed{B = -A} \nabla \quad (4.2.35)$$

Dosažením (4.2.35) do (4.2.33) máme:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + \underbrace{(-A)}_B e^{-ikx} = A \underbrace{(e^{ikx} - e^{-ikx})}_{2i \sin(kx)} \quad (4.2.36)$$

↓

$$\nabla \boxed{\psi(x) = 2iA \sin(kx)} \nabla \quad (4.2.37)$$

Na funkci (4.2.37) dále aplikujeme okrajovou podmínku (4.2.30):

$$\lim_{x \rightarrow d^-} (2iA \sin(kx)) = 0$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{2iA \sin(kd)} \quad (4.2.38)$$

Máme tedy:

$$\boxed{2iA \sin(kd) = 0} \quad (4.2.39)$$

$\underbrace{\quad}_{\neq 0}$

⇓

$$\boxed{\sin(kd) = 0} \quad (4.2.40)$$

Dosadíme-li do (4.2.40) za k podle (4.2.32), dostaneme:

$$\boxed{\sin\left(\underbrace{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}_{k} \cdot d\right) = 0} \quad (4.2.41)$$

Těto rovnici se říká sekulární rovnice pro možné hodnoty energie E mikroobjektu o hmotnosti m v ∞ -hluboké potenciálově jámě šířky d .

Řešení rovnice (4.2.41):

Argument sinu rovného 0 musí splňovat:

$$\boxed{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot d = n \cdot \pi} \quad (4.2.42)$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$

⇓

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \cdot n^2} \quad (4.2.43)$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Protože už dříve jsme na základě Heisenbergovy relace neurčitosti (HRN) zjistili, že

$$E \geq E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8md^2} \quad (4.2.44)$$

viz (3.1.59-60)

je hodnota $n=0$ v (4.2.43) vyloučena.

K těmto závěrům můžeme ovšem dojít i v toku prováděných výpočtů (k. bez explicitního použití HRN), a to takto:

$$\begin{array}{ccccccc} \underline{n=0} & \Rightarrow & E=0 & \Rightarrow & k=0 & \Rightarrow & \\ & \uparrow & \uparrow & & \uparrow & & \\ & (4.2.43) & (4.2.32) & & (4.2.37) & & \\ & \Rightarrow & \underline{\psi(x)=0} & , & & & \\ & (4.2.37) & & & & & \end{array} \quad (4.2.45)$$

což je ve sporu s tím, že uvnitř jámy je $\psi(x) \neq 0$.

Vidíme tedy, že HRN je implicitně zabudována v matematickém formalismu Schrödingerovy rovnice.

Vrátíme se nyní k rovnici (4.2.43) a užitím podmínky $n \neq 0$ tak dostáváme:

$$\begin{array}{ccc} \blacktriangledown & E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \cdot n^2 & \blacktriangledown \\ \bullet & n = 1, 2, 3, \dots & \bullet \end{array} \quad (4.2.46)$$

kvantované hodnoty energie mikroobjektu o hmotnosti m v ∞ -hluboké potenciálové šířky d

Uvážíme-li, že $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, můžeme výraz (4.2.46) upravit na tvar

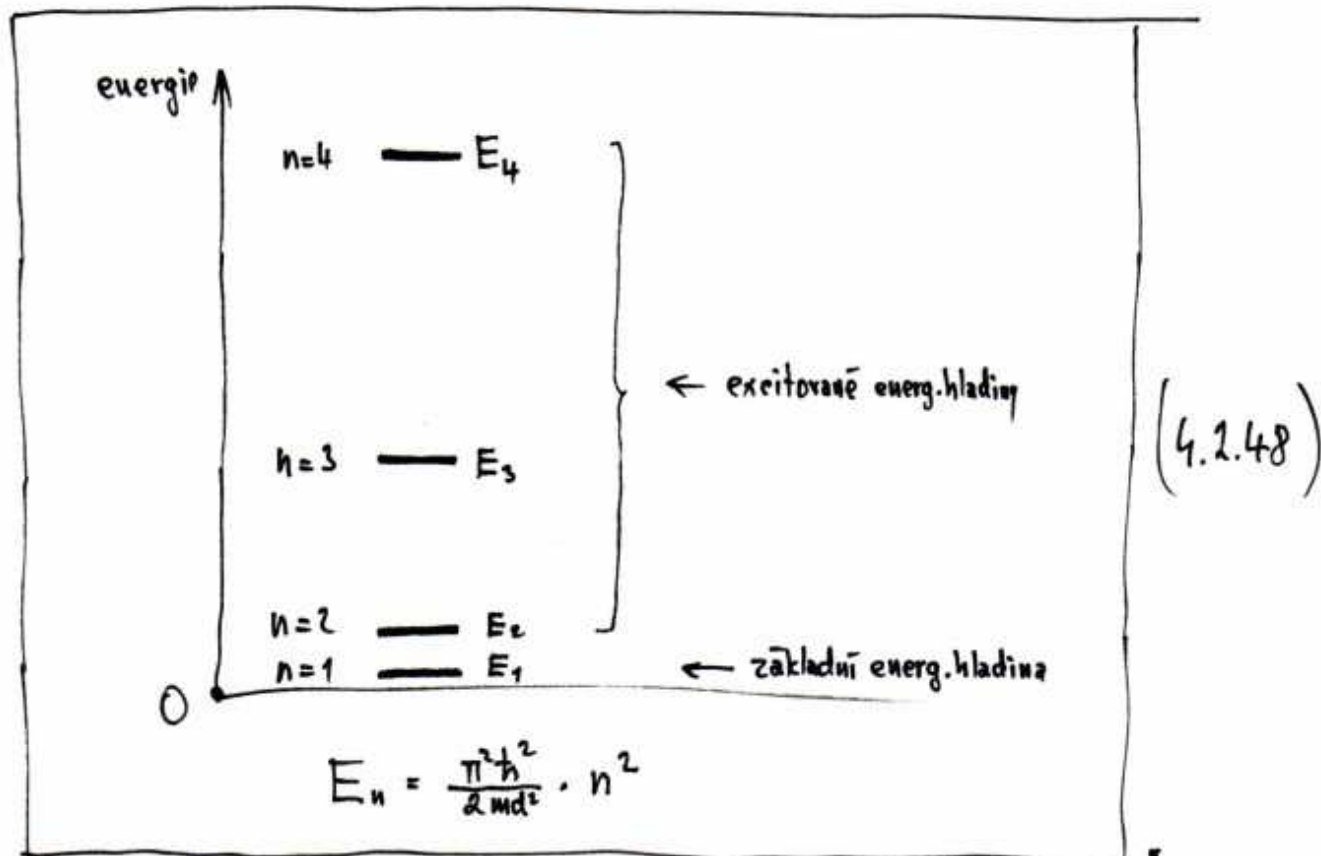
$$E_n = \frac{h^2}{8md^2} \cdot n^2 \quad (4.2.47)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

který souhlasí s výrazem (3.2.6), odvozeným ve 3. týdnu užitím podmínky stacionarity pravděpodobnostních vln mikroobjektu v jámě.

Vidíme tedy, že i tato podmínka stacionarity je implicitně zabudována v matematickém formalismu SR.

Množina všech kvantovaných hodnot energie $\underline{E_n}$ tvoří energetické spektrum mikroobjektu v uvažované jámě:



Ke každé hodnotě energie $\underline{E_n}$ dle (4.2.46) nyní najdeme vlnovou funkci $\underline{\psi_n(x)}$ příslušného stacionárního stavu mikroobjektu v jámě.

Užitím (4.2.32) nejprve spočteme:

$$\begin{aligned} \underline{k_n} &= \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \cdot n^2}{\hbar^2}} = \\ &= \sqrt{\frac{\pi^2 \cdot n^2}{d^2}} = \underline{\underline{\frac{\pi}{d} \cdot n}} \end{aligned} \quad (4.2.49)$$

Dosažením (4.2.49) do (4.2.37) pak dostaneme:

$$\psi_n(x) = 2iA \sin\left(\underbrace{n \cdot \frac{\pi}{d}}_{k_n} \cdot x\right) \quad (4.2.50)$$

Pro prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu v n -tém stacionárním stavu odtud plyne:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = 4|A|^2 \sin^2\left(n \cdot \frac{\pi}{d} \cdot x\right) \quad (4.2.51)$$

Konstantu $\underline{|A|^2}$ určíme z normovací podmínky:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (4.2.52)$$

Dosažením (4.2.51) do (4.2.52) dostaneme :

$$4|A|^2 \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \sin^2\left(n \cdot \frac{\pi}{d} \cdot x\right) dx}_{\frac{d}{2}} = 1 \quad (4.2.53)$$

⇓

$$|A|^2 = \frac{1}{2d} \quad (4.2.54)$$

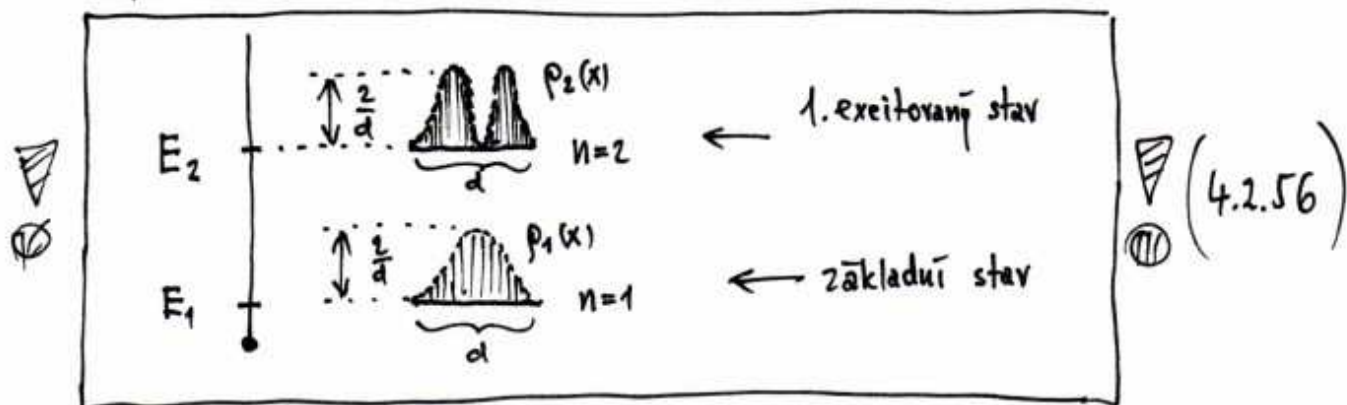
Dosažením (4.2.54) do (4.2.51) nakonec máme:

$$\rho_n(x) = \frac{2}{d} \sin^2\left(n \cdot \frac{\pi}{d} \cdot x\right) \quad (4.2.55)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$
 $0 < x < d$

prostorově rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu
v ∞ -hluboké potenciálově jámě šířky d .

Na závěr si můžeme schématicky znázornit první dva stacionární stavy mikroobjektu v uvažované jámě:



5. TÝDEN

POPIS FYZIKÁLNÍCH VELIČIN V MIKROSVĚTĚ A JEHO SOUVISLOST S VÝSLEDKY MĚŘENÍ

5.1 Operátory

V minulém týdnu jsme se seznámili se Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x) \cdot \psi(x,t) \quad (5.1.1)$$

Tuto rovnici můžeme přepsat ve tvaru:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi(x,t)) = \left\{ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)}_{\hat{H}} \right\} \psi(x,t)$$

Hamiltonův operátor mikroobjektu

$$\Downarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi(x,t)) = \hat{H} \psi(x,t) \quad (5.1.2)$$

Pro stacionární stavy s celkovou energií E , tj.
pro stavy popsané funkcemi

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \cdot \psi(x) \quad (5.1.3)$$

se levá strana (5.1.2) redukuje na $E \cdot \psi(x)$,
takže dostáváme :

$$\hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (5.1.4)$$

odkud je zřejmé, že Hamiltonův operátor \hat{H} mikroobjektu

je v nějakém vztahu k fyzikální veličině zvané celková energie mikroobjektu.

To není náhodně a vzájemná korespondence

$$\text{Operátor} \iff \text{fyzikální veličina} \quad (5.1.5)$$

je klíčovým bodem kvantové fyziky mikrosvěta.

Žastaríme se proto nejprve u pojmu "operátor".

Operátor (označení \hat{A}) je zobrazení, které nějaké funkci $\psi(x)$ přiřazuje jinou funkci $\phi(x)$:

$$\boxed{\psi(x) \xrightarrow{\text{operátor } \hat{A}} \phi(x)} \quad (5.1.6)$$

což zapisujeme:

$$\boxed{\phi(x) = \hat{A}\psi(x)}$$

funke $\phi(x)$ je výsledkom působení operátoru \hat{A} na funkci $\psi(x)$

$$(5.1.7)$$

Příklad:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sin x \\ \hat{A} &= \frac{d}{dx} ; \end{aligned} \quad \parallel \quad (5.1.8)$$

$$\hat{A}\psi(x) = \frac{d}{dx}(\sin x) = \underbrace{\cos x}_{\phi(x)}$$

Někdy se stane, že funkce $\phi(x)$ je číselným násobkem původní funkce $\psi(x)$, tj. $\phi(x) = A \cdot \psi(x)$, neboli

$$\boxed{\underbrace{\hat{A}\psi(x)}_{\phi(x)} = \underbrace{A}_{\text{číslo}} \cdot \psi(x)} \quad (5.1.9)$$

Číslo A, vystupující v (5.1.9), se pak nazývá
charakteristická hodnota operátoru \hat{A}

a funkce $\psi(x)$

charakteristická funkce operátoru \hat{A}
příslušná charakteristické hodnotě A .

Příklad :

$$\psi(x) = e^{3x}$$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}$$

$$\underline{\underline{\hat{A}\psi(x)}} = \frac{d}{dx}(e^{3x}) = 3 \cdot \underbrace{e^{3x}}_{\psi(x)} = \underline{\underline{3 \cdot \psi(x)}}$$

↓

Číslo 3 ... charakteristická hodnota
operátoru $\hat{A} = \frac{d}{dx}$

Funkce $\psi(x) = e^{3x}$... charakteristická
funkce operátoru $\hat{A} = \frac{d}{dx}$
příslušná charakteristické
hodnotě 3 .

(5.1.10)

Podíváme-li se z tohoto pohledu zpět na rov. (5.1.4), tj.

$$\hat{H}\psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

můžeme konstatovat:

celková energie mikroobjektu \underline{E} = charakteristická hodnota jeho Hamiltonova operátoru \hat{H}

vlnová funkce stacionárního stavu mikroobjektu s energií \underline{E}

= charakteristická funkce Hamiltonova operátoru mikroobjektu, příslušná jeho charakteristické hodnotě \underline{E}

(5.1.11)

Problém nalezení energií a vlnových funkcí stacionárních stavů mikroobjektu je tedy převeden na problém nalezení charakteristických hodnot a funkcí Hamiltonova operátoru mikroobjektu.

Toto je základní "pracovní princip" veškerých aplikací kvantové fyziky mikrosvěta (tj. světa fundamentálních částic, atomů a molekul).

(5.1.12)

O tom, že tento "pracovní princip" funguje, se můžeme přesvědčit na již známém příkladu mikroobjektu v ∞ -hluboké jámě:

Vlnové funkce stacionárních stavů mikroobjektu v jámě
(viz (4.2.50))

$$\dots \dots \psi_n(x) = 2iA \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \quad (5.1.13)$$

Energie stacionárních stavů mikroobjektu v jámě
(viz (4.2.46))

$$\dots \dots E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \cdot n^2 \quad (5.1.14)$$

Hamiltonův operátor mikroobjektu v jámě
(viz (5.1.2))

$$\dots \dots \hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_0 + U(x) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{uvnitř jámy}} \quad (5.1.15)$$

Působením operátoru \hat{H} na funkci $\psi_n(x)$ máme:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n(x) &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\hat{H}} \underbrace{\left\{ 2iA \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \right\}}_{\psi_n(x)} = -2iA \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \right\} = \\ &= 2iA \frac{\hbar^2}{2m} \left(n \frac{\pi}{a}\right)^2 \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \cdot \underbrace{2iA \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)}_{\psi_n(x)} = \\ &= \underbrace{\left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \cdot n^2 \right)}_{E_n} \cdot \psi_n(x) \end{aligned} \quad (5.1.16)$$

Vidíme tedy, že $\psi_n(x)$ je skutečně charakteristická funkce Hamiltonova operátoru \hat{H} příslušná charakteristické hodnotě E_n .

Množina všech charakteristických hodnot operátoru se nazývá
SPEKTRUM tohoto operátoru.

Např. množina energií

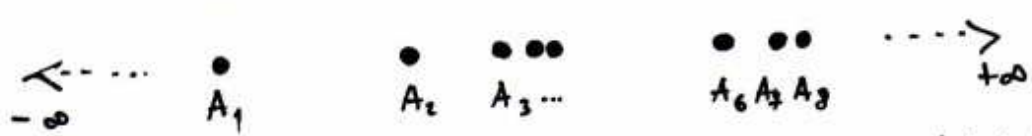
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} \cdot n^2$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

tvorí spektrum Hamiltonova operátoru mikroobjektu
 v ∞ -hluboké jámě (= energetické spektrum tohoto mikroobjektu).

Spektrum obecného operátoru může být:

- ① prázdné (neexistuje žádná charakteristická hodnota)
- ② kvantované (existuje nejvýše spočetně mnoho charakt. hodnot):



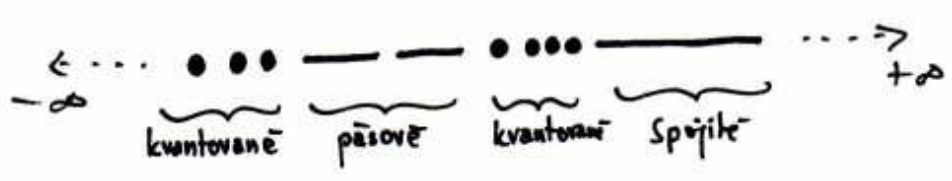
- ③ spojité (existuje nespočetně mnoho (kontinuum) charakt. hodnot):



- ④ pásově (= po částech spojité)



- ⑤ kombinované



(5.1.17)

5.2 První postulát kvantové fyziky mikrosvětá – postulát o popisu fyzikálních veličin .

Fyzikální veličiny v mikrosvětě jsou popsány pomocí operátorů, a to takových, jež mají následující vlastnosti:

① působí na množině vlnových funkcí mikroobjektu;

② jsou lineární, tj. platí pro ně:

$$\hat{A}(\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)) = \alpha(\hat{A}\psi_1(x)) + \beta(\hat{A}\psi_2(x))$$

$\alpha, \beta \dots$ libovolná komplexní čísla

$\psi_1(x), \psi_2(x) \dots$ libovolné vlnové funkce mikroobjektu;

③ jsou hermitovské, tj. platí pro ně:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) (\hat{A}\psi_2(x)) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A}\psi_1(x))^* \psi_2(x) dx$$

$\psi_1(x), \psi_2(x) \dots$ libovolné vlnové funkce mikroobjektu

(5.2.1)

Vlastnost ① říká, že fyzikální veličiny musejí nějak souviset s fyzikálním stavem mikroobjektu, jehož pravděpodobnostní vlna splňuje Schrödingerovu rovnici a přitom je všude konečná, spojitá a hladká.

Vlastnost ② (= linearita) vyjadřuje princip superpozice vln, tj. $\psi_{\text{výsledná}} = \psi_1 + \psi_2$, nikoli např. $\sqrt{\psi_1^2 + \psi_2^2}$ apod.

Vlastnost ③ (= hermitovost) zaručuje, že výsledky měření veličin, popsaných takovými operátory, jsou vždy reálná čísla. K tomu se ještě vrátíme.

Konkrétní tvar operátorů se hledá kombinací následujících dvou principů:

- ① postulát o operátoru souřadnice;
- ② kvantovací podmínky.

ad 1 ∇ $\hat{X} \psi(x) = x \cdot \psi(x)$ ∇ (5.2.2)

postulát o operátoru souřadnice

Důsledkem tohoto postulátu je, že pro libovolnou funkci souřadnic platí:

$$f(\hat{x}) \psi(x) = f(x) \cdot \psi(x) \quad (5.2.3)$$

odkud snadno najdeme např. operátor potenciální energie:

$$\hat{E}_{\text{pot}} = U(\hat{x}) \quad ;$$

$$\hat{E}_{\text{pot}} \psi(x) = U(\hat{x}) \psi(x) = U(x) \cdot \psi(x) \quad (5.2.4)$$

ad 2 - Kvantovací podmínka

$$\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = i\hbar \left(\frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x} \right)_{\text{op}}$$

$\underline{A}, \underline{B}$... klasické veličiny

$\underline{x}, \underline{p}$... souřadnice a hybnost

$\underline{\hat{A}}, \underline{\hat{B}}$... lineární hermitovské operátory popisující veličiny $\underline{A}, \underline{B}$.

index "op" ... ve výsledku formálně nahradíme klasické veličiny operátory

∇ (5.2.5)

Operátor na levé straně (5.25) se označuje symbolem $[\hat{A}, \hat{B}]$
 a nazývá se komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B} :

$$[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (5.2.6)$$

Výraz $\left(\frac{\partial A}{\partial x} \cdot \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \cdot \frac{\partial B}{\partial x}\right)$ na pravé straně (5.2.5) je znám
 v klasické mechanice pod názvem Poissonova závorka
veličin A a B a označuje se $\{A, B\}$:

$$\{A, B\} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\partial A}{\partial x} \cdot \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \cdot \frac{\partial B}{\partial x}\right) \quad (5.2.7)$$

Přidáním indexu "op", tj. nahradou klasických veličin operátory
 dostaneme tzv. operatorizovanou Poissonovu závorku $\{A, B\}_{op}$.

Kvantovací podmínku (5.2.5) můžeme pak pomocí vyznačených
 pojmů přepsat ve tvaru:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \{A, B\}_{op} \quad (5.2.8)$$

"převodní páka"
 mezi
KLASICKOU
 a
KVANTOVOU
 fyzikou

KVANTOVACÍ PODMÍNKA

Precizní odvození kvantovací podmínky není nikterak jednoduché a ve standardně dostupných učebnicích se obvykle neuvádí. Vážným zájmem však mohu zapůjčit vzácný, tiskem vydaný autorizovaný přepis přednášky W. Heisenberga "Principles of quantum mechanics", kde se mj. i této otázce detailně věnuje. Pro ostatní je 3 poznámky, umožňující alespoň kvalitativně pochopit, proč má kvantovací podmínka právě tvar (5.2.8):

① To, že mezi komutátory $[\hat{A}, \hat{B}]$ a Poissonovými závorkami $\{A, B\}$ existuje přímá úměra, plyne z toho, že oba tyto subjekty generují izomorfni algebry, tj. jejich algebraické relace jsou stejné.

② Přítomnost imaginární jednotky i plyne z toho, že komutátor hermitovských operátorů je antihermitovský, tj.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) ([\hat{A}, \hat{B}] \psi_2(x)) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} ([\hat{A}, \hat{B}] \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx .$$

(!!!)

(5.2.9)

③ Přítomnost elementárního kvanta momentu hybnosti \hbar plyne z toho, že pro změny kvantovaných veličin platí:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{\Delta A}{\Delta n} \right) &= \frac{\partial A}{\partial L} \cdot \frac{\Delta L}{\Delta n} = \frac{\partial A}{\partial L} \cdot \underbrace{\left\{ \frac{(n+\Delta n)\hbar - n\hbar}{\Delta n} \right\}}_{\hbar} \\ &= \hbar \cdot \frac{\partial A}{\partial L} \end{aligned}$$

Přítomnost \hbar , tj. konstanty řádu 10^{-34} [Js] očetáváme v kvantovací podmínce samozřejmě i na základě obecnějšího principu, že všech dosavadních úvah totiž víme, že právě Planckova konstanta odlišuje kvantový mikrosvět od klasického makrosvěta (všechny zákonitosti, které nedokáže vysvětlit klasická fyzika, obsahují Planck. konst. h nebo \hbar .)

Aplikaci kvantovací podmínky budeme nyní demonstrovat na 2 příkladech :

Příklad 1 : $A = p$ (hybnost)
 $B = U(x)$ (potenciální energie)

Poissonova závorka :

$$\left\{ p, U(x) \right\} = \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}_{(5.2.7)} \cdot \underbrace{\frac{\partial U}{\partial p}}_0 - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial p}}_1 \cdot \underbrace{\frac{\partial U}{\partial x}}_1 = \underline{\underline{-\frac{\partial U}{\partial x}(x)}} \quad (5.2.10)$$

Operatorizovaná Poissonova závorka : ve výsledku (5.2.10) formálně nahradíme $x \rightarrow \hat{x}$, tedy

$$\left\{ p, U(x) \right\}_{op} = -\frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x}) \quad (5.2.11)$$

Vztah (5.2.11) nyní dosadíme do kvantovací podmínky (5.2.8) :

$$\underbrace{[\hat{p}, U(\hat{x})]}_{\text{komutátor operátorů hybnosti a potenciální energie}} = i\hbar \underbrace{\left\{ p, U(x) \right\}_{op}}_{-\frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x}) \text{ dle (5.2.11)}} \quad (5.2.12)$$

$$\nabla \circledast [\hat{p}, U(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x}) \circledast \nabla \quad (5.2.13)$$

komutační relace mezi operátory hybnosti a potenciální energie

Uvažujme nyní speciální případ komutační relace (5.2.13),
kdy $\hat{U}(\hat{x}) = \hat{x}$:

$$\boxed{[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}}_{\substack{\hat{1} \\ \text{operátor identity} \\ \hat{1}\psi(x) = \psi(x)}}(\hat{x})} \quad (5.2.14)$$

$$\boxed{[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \hat{1}} \quad (5.2.15)$$

komutační relace mezi operátory
hybnosti a souřadnice .

Komutační relaci (5.2.15) nyní použijeme k nalezení
explicitního tvaru operátoru hybnosti \hat{p} .

Komutátor rozepíšeme podle definice (5.2.6) a celou
rovnici (5.2.15) aplikujeme na libovolnou funkci $\psi(x)$:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} &= -i\hbar \hat{1} \\ \hat{p}\hat{x}\psi(x) - \hat{x}\hat{p}\psi(x) &= -i\hbar \hat{1}\psi(x) \\ \underbrace{\hat{p}(x\psi(x))} &\quad \underbrace{x(\hat{p}\psi(x))} && \underbrace{\psi(x)} \end{aligned}}$$

$$\boxed{\hat{p}(x\psi(x)) = x(\hat{p}\psi(x)) - i\hbar\psi(x)} \quad (5.2.16)$$

\hat{p} se chová jako $\frac{d}{dx}$, předpokládáme proto :

$$\boxed{\hat{p} = \alpha \frac{d}{dx}} \quad (5.2.17)$$

Dosažením (5.2.17) do (5.2.16) dostaneme :

$$\alpha \cdot \frac{d}{dx} (x \cdot \psi(x)) = x \cdot \alpha \frac{d}{dx} (\psi(x)) - i\hbar \psi(x) \quad (5.2.18)$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{1 \cdot \psi(x) + x \frac{d}{dx} (\psi(x))}$$

↓

$$\alpha \psi(x) + \cancel{\alpha x \frac{d}{dx} (\psi(x))} = \cancel{\alpha x \frac{d}{dx} (\psi(x))} - i\hbar \psi(x)$$

↓

$$\boxed{\alpha = -i\hbar} \quad (5.2.19)$$

Dosažením (5.2.19) do (5.2.17) nakonec dostaneme:

$$\blacktriangledown \quad \boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}} \quad \blacktriangledown \quad (5.2.20)$$

explicitní tvar operátoru hybnosti .

Ukážeme nyní, že takto získaný operátor \hat{p} má vlastnosti ② a ③, požadované postulátem o popisu fyzikálních veličin (viz (5.2.1)).

Linearita :

$$\begin{aligned} \hat{p}(\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)) &= \underbrace{-i\hbar \frac{d}{dx}}_{\hat{p}} (\alpha\psi_1(x) + \beta\psi_2(x)) = \\ &= -i\hbar \left\{ \alpha \cdot \frac{d}{dx} (\psi_1(x)) + \beta \frac{d}{dx} (\psi_2(x)) \right\} = \\ &= \alpha \cdot \underbrace{(-i\hbar \frac{d}{dx})}_{\hat{p}} (\psi_1(x)) + \beta \cdot \underbrace{(-i\hbar \frac{d}{dx})}_{\hat{p}} (\psi_2(x)) = \\ &= \underline{\underline{\alpha \cdot (\hat{p}\psi_1(x)) + \beta \cdot (\hat{p}\psi_2(x))}} \end{aligned} \quad (5.2.21)$$

Hermitovost :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{p} \psi_1(x))^* \psi_2(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{(-i\hbar \frac{d\psi_1(x)}{dx})^*}_{i\hbar \frac{d\psi_1^*(x)}{dx}} \psi_2(x) dx = \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \psi_2(x) dx = i\hbar \left\{ \underbrace{[\psi_1^*(x) \psi_2(x)]}_{0-0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{d\psi_2(x)}{dx} dx \right\} = \\ &\quad \text{nebot' norm. podminky} \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_i(x)|^2 dx = 1 \quad \text{konечно} \\ &\quad \text{dava: } \boxed{\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_i(x) = 0} \\ &\quad \quad \quad i=1,2 \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{d\psi_2(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \underbrace{(-i\hbar \frac{d}{dx})}_{\hat{p}} (\psi_2(x)) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) (\hat{p} \psi_2(x)) dx \end{aligned}$$

(5.2.22)

Jako další příklad aplikace kvantovacích podmínek najdeme explicitní tvar operátoru kinetické energie :

Příklad 2 : $A = x$ (souřadnice)
 $B = E_{kin}$ (kinetická energie)

$$\boxed{\underline{\underline{\{x, E_{kin}\}}} = \left(\underbrace{\frac{\partial x}{\partial x}}_1 \cdot \frac{\partial E_{kin}}{\partial p} - \underbrace{\frac{\partial x}{\partial p}}_0 \cdot \underbrace{\frac{\partial E_{kin}}{\partial x}}_0 \right) = \frac{\partial E_{kin}}{\partial p} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \underline{\underline{\frac{p}{m}}} } \quad (5.2.23)$$

Z (5.2.23) dostaneme:

$$\boxed{\{x, E_{kin}\}_{op} = \frac{\hat{p}}{m}} \quad (5.2.24)$$

Kvantovací podmínka (5.2.8) pak dává:

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}] = i\hbar \underbrace{\{x, E_{kin}\}_{op}}_{\frac{\hat{p}}{m}} \text{ dle (5.2.24)}} \quad (5.2.25)$$

↓

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}] = i\hbar \frac{\hat{p}}{m}} \quad (5.2.26)$$

komutační relace mezi operátory
souřadnice a kinetické energie

Protože explicitní tvar operátoru \hat{p} na pravé straně (5.2.26)

již známe, můžeme této komutační relace využít ke
konstrukci explicitního tvaru operátoru \hat{E}_{kin} :

Dosazením (5.2.20) do pravé strany (5.2.26) máme:

$$\boxed{i\hbar \frac{\hat{p}}{m} = \frac{i\hbar}{m} \underbrace{(-i\hbar \frac{d}{dx})}_{\hat{p}} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx}} \quad (5.2.27)$$

takže komutační relace (5.2.26) zů:

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx}} \quad (5.2.28)$$

Dále postupujeme stejně jako v příkladu 1.

Rozepíšeme komutátor a celou rovnost (5.2.28) aplikujeme na libovolnou funkci $\psi(x)$:

$$\left(\hat{x} \hat{E}_{kin} - \hat{E}_{kin} \hat{x} \right) \psi(x) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx} (\psi(x))$$

$$\underbrace{\left(\hat{x}, \hat{E}_{kin} \right)}_{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}]} \Downarrow$$

$$\hat{x} \hat{E}_{kin} \psi(x) - \hat{E}_{kin} \hat{x} \psi(x) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\psi}{dx}(x)$$

$$\underbrace{x \cdot (\hat{E}_{kin} \psi(x))}_{x \cdot (\hat{E}_{kin} \psi(x))} \quad \underbrace{\hat{E}_{kin} (x \cdot \psi(x))}_{\hat{E}_{kin} (x \cdot \psi(x))}$$

(5.2.29)

$$\Downarrow$$

$$\hat{E}_{kin} (x \cdot \psi(x)) = x \cdot (\hat{E}_{kin} \psi(x)) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\psi}{dx}(x) \quad (5.2.30)$$

$$\Downarrow$$

\hat{E}_{kin} se chová jako $\frac{d^2}{dx^2}$, proto předpokládáme:

$$\hat{E}_{kin} = \beta \cdot \frac{d^2}{dx^2} \quad (5.2.31)$$

Dosažením (5.2.31) do (5.2.30) dostaneme po jednoduchých výpočtech:

$$\beta = -\frac{\hbar^2}{2m} \quad (5.2.32)$$

Dosažením tohoto výsledku do (5.2.31) nakonec máme:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (5.2.33)$$

explicitní tvar operátoru kinetické energie.

Nyní je už zřejmý i význam Hamiltonova operátoru :

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\hat{E}_{kin}} + \underbrace{U(\hat{x})}_{\hat{E}_{pot}} = \text{operátor celkové energie mikroobjektu} \quad (5.2.34)$$

Neuť proto divu, že charakteristické hodnoty tohoto operátoru jsou právě energie stacionárních stavů mikroobjektu (viz (5.1.16)).

Povšimněme si dále jednu pozoruhodnou vlastnost operátoru \hat{E}_{kin} , daného formulí (5.2.33) :

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{2m} \underbrace{\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)}_{\hat{p}} \underbrace{\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)}_{\hat{p}} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad (5.2.35)$$

Tato rovnost říká, že stačí vzít klasičtý výraz

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \quad (5.2.36)$$

a provést náhradu

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (5.2.37)$$

Těto okolnosti se využívá při konstrukci operátorů, jejichž odvození z kvantovacích podmínek je komplikovanější (rozumí se technicky, nikoli principiálně).

Jako příklad si tímto způsobem odvodíme operátor momentu hybnosti.

Místo kvantovací podmínky vezmeme klasický výraz

$$\begin{aligned} \vec{L} &= (\vec{r} \times \vec{p}) & \vec{r} &= (x_1, x_2, x_3) \\ & & \vec{p} &= (p_1, p_2, p_3) \end{aligned} \quad (5.2.38)$$

$$\begin{aligned} L_1 &= x_2 p_3 - x_3 p_2 \\ L_2 &= x_3 p_1 - x_1 p_3 \\ L_3 &= x_1 p_2 - x_2 p_1 \end{aligned}$$

a provedeme náhradu:

$$\begin{aligned} x_k &\rightarrow \hat{x}_k \\ p_k &\rightarrow \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \\ k &= 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (5.2.39)$$

Dostaneme tak:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\hat{L}_1}} &= \hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2 = \hat{x}_2 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_3}\right) - \hat{x}_3 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2}\right) = \\ &= i\hbar \left(\hat{x}_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - \hat{x}_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \end{aligned}$$

a analogicky pro $\underline{\underline{\hat{L}_2}}$ a $\underline{\underline{\hat{L}_3}}$.

Vektorově:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar (\hat{\vec{r}} \times \vec{\nabla})$$

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

(5.2.40)

5.3 Druhý postulát kvantové fyziky mikrosvěta - postulát o vztahu mezi operátorem a výsledky měření příslušné veličiny .

Všechny možné výsledky měření fyzikální veličiny
popsané lineárním hermitovským operátorem \hat{A}
jsou dány spektrém tohoto operátoru, tj.
množinou všech jeho charakteristických hodnot $\{A_j\}$.

Charakteristické funkce operátoru \hat{A} příslušné
těmto charakteristickým hodnotám pak popisují
tzv. charakteristické stavy mikroobjektu, tj.

fyzikální stavy, v nichž při měření příslušné
veličiny vždy s jistotou naměříme
charakteristické hodnoty A_j .

(5.3.1)

Pro konkrétnost uvažujme dále lineární hermitovský operátor \hat{A} ,
jehož spektrum je kvantované, tj.

$$\{A\} = \{A_1, A_2, A_3, \dots, A_k, \dots\} \quad (5.3.2)$$

Charakteristickou funkcí operátoru \hat{A} , příslušnou charakteristické
hodnotě A_k ($k=1, 2, \dots$) označme $\phi_k(x)$, tj.

$$\hat{A} \phi_k(x) = A_k \cdot \phi_k(x) \quad (5.3.3)$$

Z faktu, že operátor \hat{A} je hermitovský (viz (5.2.1)), se dají matematicky odvodit následující důležitě vlastnosti:

① všechny charakteristické hodnoty operátoru \hat{A} jsou reálné, tj.

$$\boxed{A_k^* = A_k \quad \forall k} \quad (5.3.4)$$

tato vlastnost v kombinaci s (5.3.1) znamená, že všechny výsledky měření veličiny popsané operátorem \hat{A} budou reálné;

② charakteristické funkce $\phi_k(x)$ tvoří ortonormální systém, tj.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_k^*(x) \phi_i(x) dx = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{pro } i=k \\ 0 & \text{pro } i \neq k \end{cases}} \quad (5.3.5)$$

RELACE ORTONORMALITY (RO)

RO má klíčový význam pro interpretaci výsledků měření ve stavech, které nejdou charakteristickými stavy mikroobjektu.

Uvažujme např. stav popsaný vlnovou funkcí

$$\boxed{\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x)} \quad (5.3.6)$$

↑
číselné koeficienty

↑
charakteristické funkce operátoru \hat{A}

Aplítací operátoru \hat{A} na vlnovou funkci (5.3.6) dostaneme:

$$\hat{A}\psi(x) = \hat{A}\left(\sum_k c_k \phi_k(x)\right) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{linearita} \\ \hat{A}}}{=} \sum_k c_k \underbrace{(\hat{A}\phi_k(x))}_{A_k \cdot \phi_k(x)} =$$

$$= \sum_k c_k A_k \phi_k(x) \quad (5.3.7)$$

Toto se však nedá obecně napsat jako

$$A \cdot \underbrace{\left(\sum_k c_k \phi_k(x)\right)}_{\psi(x)}$$

⇓

$$\nabla \quad \hat{A}\psi(x) \neq A \cdot \psi(x) \quad \nabla \quad (5.3.8)$$

což znamená, že vlnová funkce $\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x)$ není charakteristickou funkcí operátoru \hat{A} , a tudíž neopisuje charakteristický stav mikroobjektu.

Fyzikálně to znamená, že při měření veličiny popsané operátorem \hat{A} ve stavu $\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x)$ neuměříme žádnou konkrétní hodnotu této veličiny.

Avšak pozor! Není to tak beznadějně, vstoupí-li do hry relace ortonormality (5.3.5), která umožní přisoudit určitý měřitelný význam koeficientům c_k ve vln.fkci $\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x)$.

Vyjďeme z toho, ťe $\psi(x)$ jakoťto vlnov funkce splnuje normovac podmnku

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (5.3.9)$$

Pro integrl na lev stran postupn mme:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(\sum_i c_i \phi_i(x)\right)^*}_{\psi^*(x)} \underbrace{\left(\sum_k c_k \phi_k(x)\right)}_{\psi(x)} dx = \\ &= \sum_i \sum_k c_i^* c_k \underbrace{\left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \phi_k(x) dx \right\}}_{\substack{\delta_{ik} \\ (RO!!)}} = \sum_i \sum_k c_i^* c_k \delta_{ik} = \\ &= \sum_k c_k^* c_k = \underline{\underline{\sum_k |c_k|^2}} \end{aligned} \quad (5.3.10)$$

Tento vsledek v kombinaci s (5.3.9) dv:

$$\sum_k |c_k|^2 = 1 \quad (5.3.11)$$

coť umoznje interpretovat veliĥinu $|c_k|^2$ jako pravdpodobnost toho, ťe ve vlnov funkci $\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x)$ je "přítomna" charakteristick funkce $\phi_k(x)$, a tud, ťe při mření psluťn veliĥiny ve stavu $\psi(x)$ namříme charakteristickou hodnotu A_k .

Źnamen to, ťe ve stavu $\psi(x) = \sum_k c_k \phi_k(x) = c_1 \phi_1(x) + c_2 \phi_2(x) + \dots$ mme potenciln moťnost namřit vchny moťn charakt. hodnoty A_1, A_2, \dots , ale Źadnou z nich nenamříme s jistotou, pouze s urĥitou pravdpodobnost:

hodnotu $\underline{A_1}$	naměříme s pravděpodobností	$\underline{ c_1 ^2}$
hodnotu $\underline{A_2}$	naměříme s pravděpodobností	$\underline{ c_2 ^2}$
:	:	:
:	:	:
$\sum_k c_k ^2 = 1$		

(5.3.12)

Vyjádříme nyní pravděpodobnost $\underline{|c_k|^2}$ pomocí vln. funkce $\underline{\psi(x)}$:

Platí:

$$\psi(x) = \sum_i c_i \phi_i(x)$$

Tuto rovnici vynásobíme zleva funkcí $\underline{\phi_k^*(x)}$ a integrujeme přes \underline{x} :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underline{\phi_k^*(x)} \psi(x) dx = \sum_i c_i \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_k^*(x) \phi_i(x) dx}_{\delta_{ki} \text{ (RO!!)}} = \sum_i c_i \delta_{ik} = c_k \quad (5.3.13)$$

Ažítím rovnosti (5.3.13) pak máme:

$$\blacktriangledown \quad W_k = |c_k|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_k^*(x) \psi(x) dx \right|^2 \quad \blacktriangledown \quad (5.3.14)$$

pravděpodobnost, že při měření ve stavu popsaném vln. funkcí $\underline{\psi(x)}$ nalezneme charakt. hodnotu $\underline{A_k}$, odpovídající charakt. funkci $\underline{\phi_k(x)}$.

Máme-li možnost naměřit pouze určitý soubor hodnot dané veličiny s určitými pravděpodobnostmi, je potřeba zavést veličinu zvanou střední hodnota výsledků měření:

$$\overline{A} = \sum_k \omega_k A_k \quad (5.3.15)$$

\overline{A} — střední hodnota výsledků měření veličiny \underline{A}
 ω_k — pravděpodobnost, s jakými byly naměřeny hodnoty \underline{A}_k (viz (5.3.14))
 A_k — naměřené hodnoty veličiny \underline{A} = (charakt. hodnoty operátoru \hat{A} popisujícího veličinu \underline{A})

Pravou stranu (5.3.15) upravíme následovně:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sum_k \omega_k A_k}} &= \sum_k |c_k|^2 A_k = \sum_k c_k^* c_k A_k = \sum_k \left(\sum_i c_i^* c_k \delta_{ik} \right) A_k = \\ &= \sum_{ki} c_i^* c_k A_k \underbrace{\delta_{ik}}_{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^*(x) \phi_k(x) dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_i c_i^* \phi_i^*(x) \right) \underbrace{\left(\sum_k c_k A_k \phi_k(x) \right)}_{(\hat{A} \phi_k(x))} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(\sum_i c_i^* \phi_i^*(x) \right)}_{\psi^*(x)} \hat{A} \underbrace{\left(\sum_k c_k \phi_k(x) \right)}_{\psi(x)} dx = \underline{\underline{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx}} \end{aligned} \quad (5.3.16)$$

Dosadíme-li (5.3.16) do (5.3.15), máme nakonec :

$$\boxed{\overline{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx} \quad (5.3.17)$$

Tato rovnice říká, že střední hodnotu výsledků měření mohu teoreticky předpovědět aniž provádím jakákoli měření (ideál libovolně fyzikální teorie).

Potřebuji k tomu :

- explicitní tvar operátoru popisujícího danou veličinu ;
- vlnovou funkci stavu, v němž má být střední hodnota určena ;
- výpočet jednoho integrálu .

Integrál na pravé straně (5.3.17) zkráceně označujeme symbolem $\langle \hat{A} \rangle_{\psi}$ a nazýváme střední hodnota operátoru \hat{A} ve stavu ψ :

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle_{\psi} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx} \quad (5.3.18)$$

Rovnici (5.3.17) pak užitím definice (5.3.18) můžeme vyjádřit ve tvaru :

$$\boxed{\underbrace{\overline{A}}_{\substack{\text{střední hodnota} \\ \text{výsledků měření} \\ \text{veličiny } \hat{A}}} = \underbrace{\langle \hat{A} \rangle_{\psi}}_{\substack{\text{střední hodnota operátoru } \hat{A} \\ \text{ve stavu } \psi, \text{ v němž je prováděno} \\ \text{měření veličiny } \hat{A}}} } \quad (5.3.19)$$

Každá střední hodnota má smysl jen tehdy, je-li doprovázena charakteristickou fluktuací příslušné veličiny kolem této střední hodnoty.

V analogii se střední kvadratickou fluktuací v klasické statistice zavádí kvantová fyzika

KVANTOVOU FLUKTUACI veličiny A :

$$\boxed{(\Delta A)_\psi \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2}} \quad (5.3.20)$$

Kvantově fluktuace hrají klíčovou roli v souvislosti s TEORÉMEM O SOUČASNĚ MĚŘITELNOSTI FYZ. VELIČIN, který tvrdí toto:

a) $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$ veličiny A, B jsou současně měřitelné, tj.

komutátor operátorů popisujících veličiny A, B

$$\exists \psi ; \quad \begin{aligned} \hat{A}\psi &= a \cdot \psi \\ \hat{B}\psi &= b \cdot \psi \end{aligned}$$

a, b ... výsledky současného měření veličin A, B ve stavu ψ ;

b) $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \Rightarrow$ veličiny A, B nejsou současně měřitelné a pro jejich kvantově fluktuaci platí:

$$\boxed{(\Delta A)_\psi \cdot (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi|}$$

Zobecněná Heisenbergova relace neurčitosti

(5.3.21)

Teorém, na rozdíl od postulátu, je dokazatelné tvrzení.

Důkaz (5.3.21) však zdaleka není jednoduchý a matematicky orientovaně zájemce odkazují na knihu Leonard Schiff : Quantum Mechanics .

Zde se budeme spíše věnovat příkladům užití tohoto teorému .

Příklad 1

A = potenciální energie

B = souřadnice

$$\hat{A} = \hat{E}_{\text{pot}} = U(\hat{x})$$

$$\hat{B} = \hat{x}$$

$$\underline{\underline{[\hat{A}, \hat{B}]}} = \underbrace{[U(\hat{x}), \hat{x}]}_{\text{funkce } \hat{x}} = U(x) \cdot x - x \cdot U(x) = \underline{\underline{0}} \quad (5.3.22)$$

↓
potenciální energie a souřadnice

JSOU

současně měřitelné .

Příklad 2

A = hybnost

B = souřadnice

$$\hat{A} = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\hat{B} = \hat{x}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{p}, \hat{x}] \stackrel{\uparrow (5.2.15)}{=} -i\hbar \hat{1} \neq 0 \Rightarrow \begin{array}{l} \text{hybnost a} \\ \text{souřadnice} \\ \underline{\underline{NEJSOU}} \\ \underline{\underline{současně měřitelné}} . \end{array} \quad (5.3.23)$$

Teorém (5.3.24) umožňuje v tomto případě stanovit dolní hranici pro součin kvantových fluktuací $(\Delta p)_\psi \cdot (\Delta x)_\psi$:

$$\begin{aligned}
 (\Delta p)_\psi \cdot (\Delta x)_\psi &\geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{p}, \hat{x}] \rangle_\psi \right| = \frac{1}{2} \left| \langle -i\hbar \hat{1} \rangle_\psi \right| = \\
 &= \frac{1}{2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \underbrace{(-i\hbar \hat{1})}_{\psi(x)} \psi(x) dx \right| = \frac{1}{2} \left| (-i\hbar) \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx}_1 \right| = \\
 &= \frac{1}{2} \left| (-i\hbar) \right| = \underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar}}
 \end{aligned} \tag{5.3.24}$$



$$\nabla \quad \boxed{(\Delta p)_\psi \cdot (\Delta x)_\psi \geq \frac{1}{2}\hbar} \quad \nabla \tag{5.3.25}$$

Dostáváme tak standardní HRN, avšak s vyjasněným

vůzname "neurčitost" $\underline{\Delta p}$, $\underline{\Delta x}$ jako kvantových

fluktuací

$$\begin{aligned}
 (\Delta p)_\psi &= \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{p} \rangle_\psi^2} \\
 (\Delta x)_\psi &= \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{x} \rangle_\psi^2}
 \end{aligned} \tag{5.3.26}$$

Povšimněme si, že pravá strana vztahu (5.3.25), tj. dolní hranice pro součin $(\Delta p)_\psi \cdot (\Delta x)_\psi$, je univerzální konstantou, tj. nezávisí ani na konkrétním mikroobjektu, ani na fyz. stavu, v němž jsou měřeny kvantové fluktuace $(\Delta p)_\psi$, $(\Delta x)_\psi$.

Příklad 3

A = souřadnice

B = kinetická energie

$$\hat{A} = \hat{x}$$

$$\hat{B} = \hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{x}, \hat{E}_{\text{kin}}] = i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \neq 0$$

↑
(5.2.26)

⇒ souřadnice a kinet. energie NEJSOU
současně měřitelné.

$$(\Delta x)_\psi \cdot (\Delta E_{\text{kin}})_\psi \geq \frac{1}{2} \left| \underbrace{\langle [\hat{x}, \hat{E}_{\text{kin}}] \rangle_\psi}_{i\hbar \frac{\hat{p}}{m}} \right| = \frac{1}{2} \left| \frac{i\hbar}{m} \langle \hat{p} \rangle_\psi \right| \quad (5.3.27)$$

⇓

$$\text{⚠} \left(\Delta x \right)_\psi \cdot \left(\Delta E_{\text{kin}} \right)_\psi \geq \frac{1}{2} \hbar \cdot \frac{|\langle \hat{p} \rangle_\psi|}{m} \text{⚠} \quad (5.3.28)$$

Pravá strana (5.3.28) tentokrát není univerzální konstantou,
nýbrž závisí jak na konkrétním mikroobjektu (m), tak
na konkrétním fyz. stavu, v němž jsou určeny
kvantové fluktuační.

Obecně platí :

$$(\Delta A)_\psi \cdot (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2}\hbar \cdot f(m, \psi, c)$$

m ... hmotnost mikroobjektu
 ψ ... fyzikální stav mikroobjektu
 c ... nějaká jiná veličina než A, B

(5.3.29)

V příkladu 3 je např. :

$$f(m, \psi, c) = \frac{|\langle \hat{p} \rangle_\psi|}{m}$$

veličinou c je zde hybnost p

(5.3.30)

Nerovnost (5.3.29) zřetelně osvětluje, proč hovoříme o zobecněné HRN.

Standardní HRN z ní dostaneme, když

$$f(m, \psi, c) = 1$$

(5.3.31)



6. TÝDEN

6.1 Ehrenfestův teorém

V této kapitole si ukážeme, že střední hodnoty kvantových veličin se chovají klasicky, a umožňují tak najít přímou souvislost mezi kvantovou a klasickou fyzikou, včetně podmínek, kdy lze ještě použít fyziku klasickou, a kdy už je nutno pracovat s fyzikou kvantovou.

Vyděme ze střední hodnoty výsledků měření nějaké veličiny \underline{A} popsané lineárním hermitovským operátorem \hat{A} :

$$\bar{A} = \langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\psi^*(x,t) \hat{A} \psi(x,t)}_{A(t)} dx \quad (6.1.1)$$

Spočítáme nyní časovou derivaci této střední hodnoty:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\bar{A}) &= \frac{d}{dt}(A(t)) = \frac{\partial}{\partial t}(A(t)) = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{A} \psi(x,t) dx \right\} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \{ \psi^*(x,t) \hat{A} \psi(x,t) \} dx \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

↑
věta o derivaci integrálu podle parametru

Dále použijeme pravidlo derivace součinu :

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ \psi^*(x,t) \hat{A} \psi(x,t) \} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}(x,t) \hat{A} \psi(x,t) + \psi^*(x,t) \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\hat{A} \psi(x,t))}_{\hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t)} \quad (6.1.3)$$

neboť \hat{A}
na čase nezávisí

Dosažením (6.1.3) do (6.1.2) máme dále mezivýsledek :

$$\frac{d}{dt} (\bar{A}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t}(x,t) \hat{A} \psi(x,t) + \psi^*(x,t) \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) \right\} dx \quad (6.1.4)$$

Vlnová funkce $\psi(x,t)$ popisuje nějaký fyzikální stav, což znamená, že musí být řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi(x,t)) = \hat{H} \psi(x,t) \quad (6.1.5)$$

Odtud postupně máme :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(x,t) \quad (6.1.6)$$

↓

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t}(x,t) = \frac{1}{-i\hbar} (\hat{H} \psi(x,t))^* \quad (6.1.7)$$

Dosažením (6.1.6) a (6.1.7) do (6.1.4) dostaneme :

$$\frac{d}{dt}(\bar{A}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \underbrace{\frac{1}{i\hbar} (\hat{H}\psi(x,t))^* \hat{A}\psi(x,t)}_{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}(x,t)} + \psi^*(x,t) \hat{A} \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi(x,t)}_{\frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t)} \right\} dx =$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{H}\psi(x,t))^* \hat{A}\psi(x,t) dx + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{A} \hat{H}\psi(x,t) dx =$$

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{H} \hat{A} \psi(x,t) dx}_{\text{(neboť } \underline{\hat{H}} \text{ je hermitovský)}}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \psi^*(x,t) \hat{A} \hat{H} \psi(x,t) - \psi^*(x,t) \hat{H} \hat{A} \psi(x,t) \right\} dx =$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) (\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \psi(x,t) dx = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{\psi}$$

$$\underbrace{[\hat{A}, \hat{H}]}_{\text{(komutátor)}}$$

↑
definice
střední
hodnoty
operátoru
ve stavu ψ

(6.1.8)

Máme tak závěrečný výsledek :

$$\blacktriangledown \boxed{\frac{d}{dt}(\bar{A}) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{\psi}} \blacktriangledown (6.1.9)$$

Tato rovnice je klíčová pro odvození 2 Ehrenfestových vět, jejich kombinací vznikne Ehrenfestův teorém, který pak názorně demonstruje to, co bylo avizováno v úvodu kapitoly.

Vyjděme tedy z rovnice (6.1.9) a za veličinu A postupně zvolme 2 základní mechanické veličiny - souřadnici x a hybnost p :

① A = x

Rovnice (6.1.9) pro A = x má tvar :

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle_{\psi} \quad (6.1.10)$$

Pro komutátor $[\hat{x}, \hat{H}]$ na pravé straně (6.1.10) máme:

$$\begin{aligned} \underline{[\hat{x}, \hat{H}]} &= [\hat{x}, (\hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot})] = [\hat{x}, \hat{E}_{kin}] + [\hat{x}, \hat{E}_{pot}] = \\ &= [\hat{x}, \hat{E}_{kin}] + \underbrace{[\hat{x}, U(\hat{x})]}_0 = \underline{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}]} \end{aligned} \quad (6.1.11)$$

(každý operátor komutuje s libovolnou funkcí sebe samotného)

Komutátor $[\hat{x}, \hat{E}_{kin}]$ jsme však už dříve kvantovací podmínky odvodili v 5. týdnu, a to ve tvaru :

$$\underline{[\hat{x}, \hat{E}_{kin}]} = i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \quad (6.1.12)$$

Kombinací vztahů (6.1.10) - (6.1.12) tedy dostáváme :

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \frac{1}{i\hbar} \langle i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \rangle_{\psi} = \frac{1}{m} \underbrace{\langle \hat{p} \rangle}_{\bar{p}}_{\psi} \quad (6.1.13)$$

⇓

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \frac{\bar{p}}{m}$$

střední hodnoty kvantové polohy a hybnosti splňují klasický vztah mezi rychlostí a hybností

$$\underbrace{\frac{dx}{dt}}_{v} = \frac{p}{m}$$

(6.1.14)

PRVNÍ EHRENFESTOVA VĚTA

② A = p

Rovnice (6.1.9) má nyní tvar:

$$\frac{d}{dt}(\bar{p}) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle_{\psi} \quad (6.1.15)$$

Pro komutátor $[\hat{p}, \hat{H}]$ máme:

$$\begin{aligned} \underline{[\hat{p}, \hat{H}]} &= [\hat{p}, (E_{kin} + \hat{E}_{pot})] = \underbrace{[\hat{p}, \hat{E}_{kin}]}_{\frac{1}{2m} \hat{p}^2} + [\hat{p}, U(\hat{x})] = \\ &= \frac{1}{2m} \underbrace{[\hat{p}, \hat{p}^2]}_0 + \underbrace{[\hat{p}, U(\hat{x})]}_{-i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x})} = \underline{-i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x})} \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

Dosažením (6.1.16) do (6.1.15) dostaneme:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\bar{p}) &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle -i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x}) \right\rangle_{\psi} = \\ &= \left\langle \underbrace{-\frac{\partial U}{\partial x}(\hat{x})}_{F(\hat{x})} \right\rangle_{\psi} = \underbrace{\bar{F}}_{\text{střední hodnota síly}} \end{aligned} \quad (6.1.17)$$

↓

$$\frac{d}{dt}(\bar{p}) = \bar{F}$$

▼
● střední hodnoty kvantové hybnosti a síly splňují klasickou Newtonovu pohybovou rovnici
● ▼

$$\frac{dp}{dt} = F \quad (6.1.18)$$

DRUHÁ EHRENFESTOVA VĚTA

Vyjádříme-li z 1. Ehrenfestovy věty (6.1.14) :

$$\bar{p} = m \frac{d}{dt}(\bar{x}) \quad (6.1.19)$$

a dosadíme-li tento výsledek do 2. Ehrenfestovy věty (6.1.18), dostaneme:

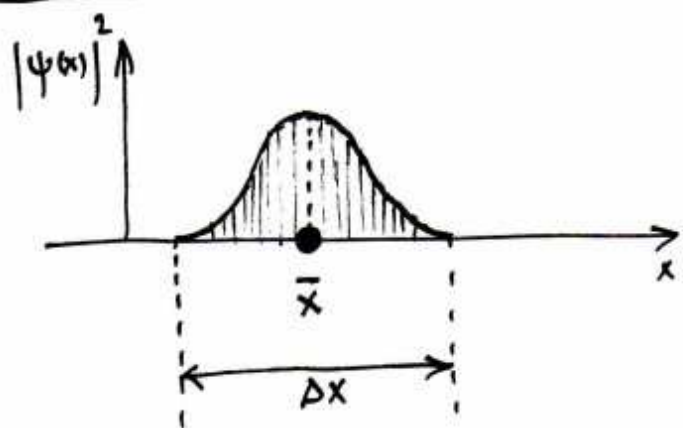
$$\frac{d}{dt} \left(m \frac{d}{dt}(\bar{x}) \right) = \bar{F} \quad (6.1.20)$$

Protože dosud jsme nikde v našich úvahách nenarazili na nutnost uvážení relativistických jevů, můžeme hmotnost mikroobjektu \underline{m} v rov. (6.1.20) pokládat za konstantní, takže tato rovnice se redukuje na tvar:

$$\boxed{m \frac{d^2}{dt^2}(\bar{x}) = \bar{F}} \quad (6.1.21)$$

EHRENFESTŮV TEORÉM (E. T.)

Střední hodnota \bar{x} , vystupující na levé straně E.T., má zřejmě význam polohy těžiště prostorové oblaci, v níž je mikroobjekt lokalizován:



$$\bar{x} = \langle \hat{x} \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \underbrace{\hat{x} \psi(x,t)}_{x \cdot \psi(x,t)} dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \underbrace{\psi^*(x,t) \psi(x,t)}_{|\psi(x,t)|^2} dx = \int_{\bar{x}-\frac{1}{2}\Delta x}^{\bar{x}+\frac{1}{2}\Delta x} x \cdot |\psi(x,t)|^2 dx \quad (6.1.22)$$

Střední hodnota \overline{F} , vystupující na pravé straně E.T. (6.1.21), je analogicky střední síla působící na mikroobjekt v oblasti jeho výskytu :

$$\overline{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) F(\hat{x}) \psi(x,t) dx = \int_{\bar{x}-\frac{1}{2}\Delta x}^{\bar{x}+\frac{1}{2}\Delta x} F(x) \cdot |\psi(x,t)|^2 dx \quad (6.1.23)$$

Funkce $\psi(x,t)$, vystupující ve formulích (6.1.22) a (6.1.23), je přitom vlnová funkce mikroobjektu, tj. řešení Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi(x,t)) = \hat{H} \psi(x,t) \quad (6.1.24)$$

Rovnice (6.1.21), vyjadřující E.T., neříká nic jiného, než že těžiště prostorové oblasti výskytu mikroobjektu se pohybuje se zrychlením

$$\nabla \quad \textcircled{\text{a}} \quad \overline{a} = \frac{d^2}{dt^2} (\overline{x}) = \frac{\overline{F}}{m} \quad \textcircled{\text{a}} \quad (6.1.25)$$

tj. podle klasického zákona síly .

Záleží však výslovně na tom, zda střední síla \overline{F} může či nemůže být aproximována silou působící v těžišti .

Tato okolnost, jak uvidíme za chvíli, určuje právě meze platnosti klasické fyziky .

Význam E.T. pro fyziku :

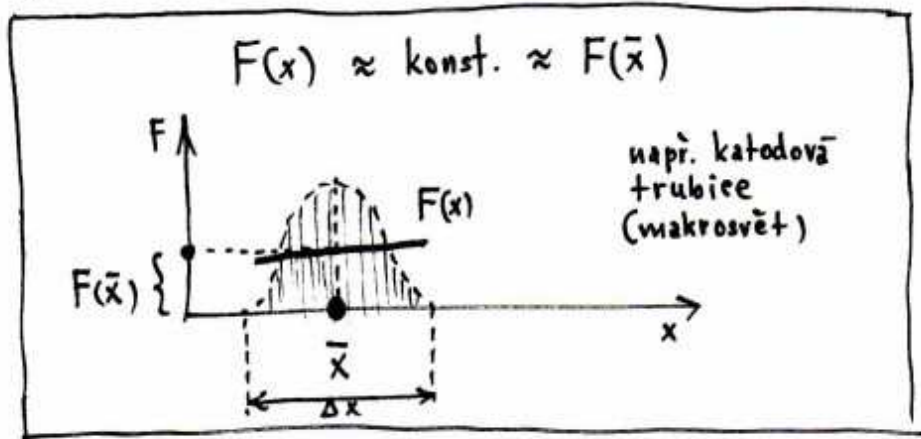


E.T. ukazuje, že klasická mechanika ($m \frac{d^2x}{dt^2} = F$) je speciálním případem mechaniky kvantové, platným pro střední hodnoty příslušných kvantových veličin. Klasická a kvantová mechanika nejsou tedy 2 různé fyziky, které by platily každá pouze ve své oblasti (jako např. elektrodynamika a termodynamika). Kvantová mechanika (a obecně celá kvantová fyzika) dává obecně zákony pohybu objektů, platné v makro- i mikrosvětě. Klasická mechanika (a obecně celá klasická fyzika) dává takové přiblížení k těmto zákonům, které je použitelné pouze v makrosvětě, zatímco v mikrosvětě nikoli.

(6.1.26)

Ukážeme si nyní význam E.T. pro vymezení podmínek platnosti klasické a kvantové fyziky na jednoduchém příkladu:

- ① Necht v oblasti prostorové lokalizace objektu Δx je síla $F(x)$ taková, že :



např. katodová trubice (makrosvět)

(6.1.27)

Pro střední hodnotu \bar{F} pak podle (6.1.23) máme:

$$\begin{aligned}
 \bar{F} &= \int_{\bar{x}-\Delta x}^{\bar{x}+\Delta x} F(x) \cdot |\psi(x,t)|^2 dx \equiv \int_{\bar{x}-\Delta x}^{\bar{x}+\Delta x} \underbrace{F(\bar{x})}_{\text{konst.}} \cdot |\psi(x,t)|^2 dx = \\
 &= F(\bar{x}) \cdot \int_{\bar{x}-\Delta x}^{\bar{x}+\Delta x} |\psi(x,t)|^2 dx = F(\bar{x}) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \\
 &= F(\bar{x}) \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}_1 = F(\bar{x})
 \end{aligned}
 \tag{6.1.28}$$

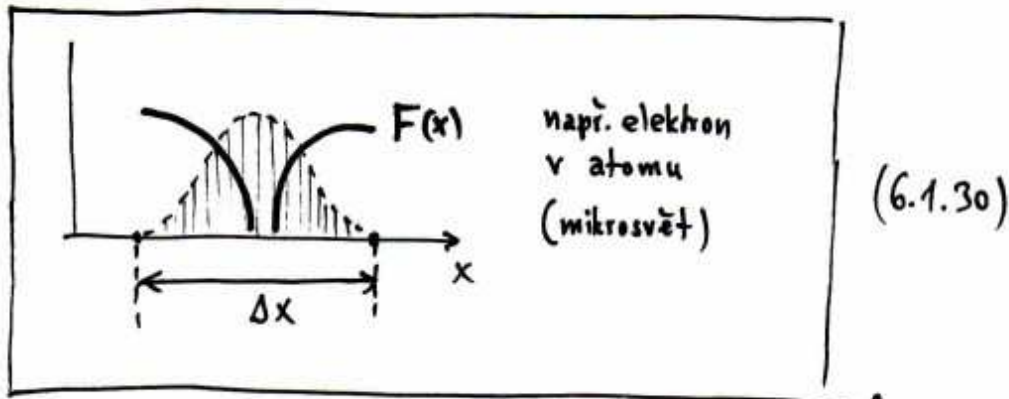
normovací podmínka vlnové funkce

Dosadíme-li tento výsledek do E.T. (6.1.21), máme

$$m \underbrace{\frac{d^2}{dt^2}(\bar{x})}_{\text{zrychlení těžiště}} = \underbrace{F(\bar{x})}_{\text{síla působící v těžišti}}
 \tag{6.1.29}$$

↓
bez problémů lze použít
klasickou mechaniku ▼

- ② Necht v oblasti prostorové lokalizace mikroobjektu Δx je síla $F(x)$ silně proměnná :



V tomto případě

$$\bar{F} = \int F(x) |\psi(x,t)|^2 dx \neq F(\bar{x}) \cdot \underbrace{\int |\psi(x,t)|^2 dx}_1$$

silně proměnná funkce

(6.1.31)

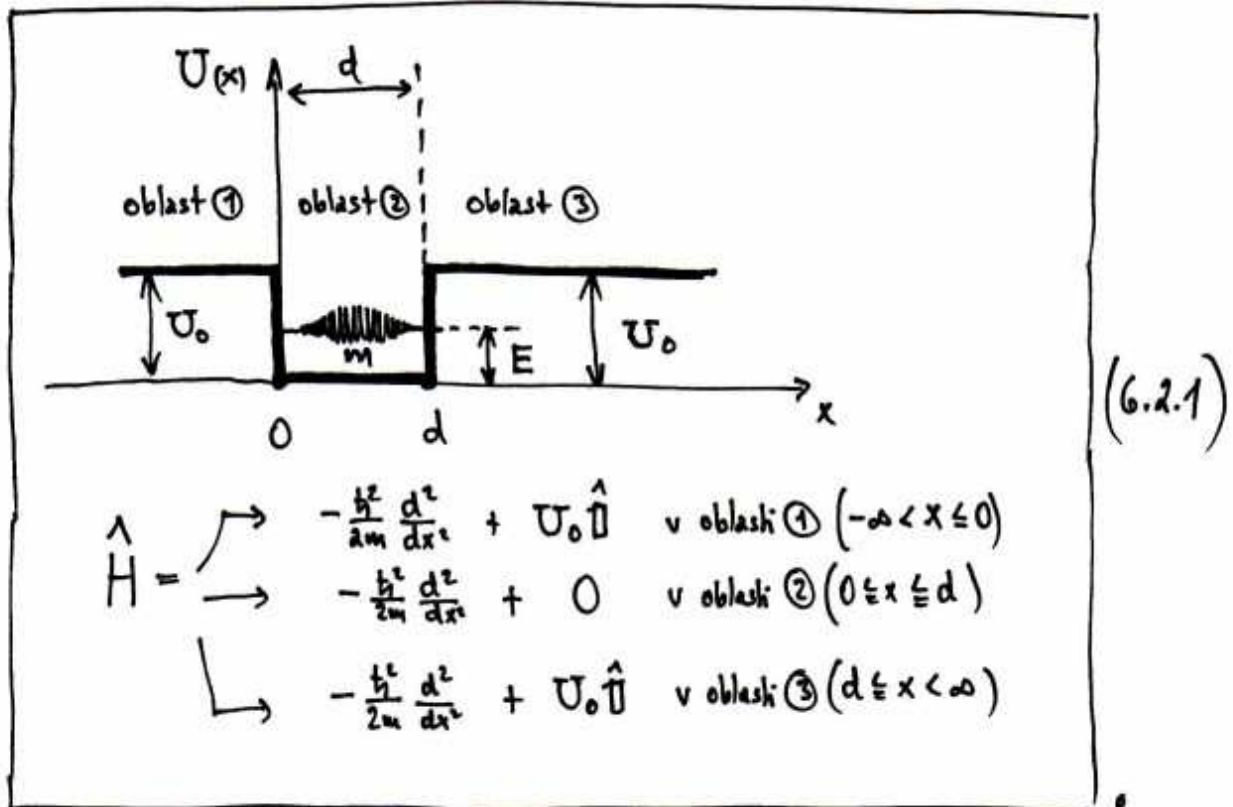
také k výpočtu \bar{F} nyní potřebujeme znát explicitní tvar vlnové funkce $\psi(x)$, a to znamená, že musíme vyřešit Schrödingerovu rovnici $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t)$.
 V tomto případě je tedy klasická mechanika nepoužitelná.

* * *

6.2 Mikroobjekt v potenciálové jámě konečné hloubky - kvantově tunelování.

Nyní, když jsme formulovali základní zákonitosti kvantově fyziky mikrosvěta a její vztah ke klasické fyzice makrosvěta, budeme tyto zákonitosti postupně aplikovat na jevy a procesy mikrosvěta, které jsou klasickou fyzikou neposkítené.

K nejzajímavějším jevům tohoto druhu patří kvantově tunelování (nebo též tunelový efekt), jež si objasníme na příkladu mikroobjektu v pravouhlej potenciálové jámě konečné hloubky:



Prostorovou část vlnové funkce stacionárních stavů mikroobjektu s energií E uvnitř potenciálové jámy hledáme ve tvaru:

$$\psi(x) = \begin{cases} \rightarrow \psi_1(x) & \dots \text{oblast } \textcircled{1} \\ \rightarrow \psi_2(x) & \dots \text{oblast } \textcircled{2} \\ \rightarrow \psi_3(x) & \dots \text{oblast } \textcircled{3} \end{cases} \quad (6.2.2)$$

Na rozdíl od dříve řešeného případu ∞ -hluboké potenciálové jámy ($U_0 \rightarrow \infty$) nemůžeme nyní a priori předpokládat, že vlnová funkce je v oblastech $\textcircled{1}$ a $\textcircled{3}$ identicky nulová.

Všechny možné vlnové funkce a jim odpovídající energie stacionárních stavů E hledáme řešením rovnice:

$$\hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (6.2.3)$$

Dosažením Hamiltonova operátoru \hat{H} dle (6.2.1) a vlnové funkce $\psi(x)$ dle (6.2.2) do rovnice (6.2.3) dostaneme:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + U_0 \cdot \psi_1(x) &= E \cdot \psi_1(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} + 0 \cdot \psi_2(x) &= E \cdot \psi_2(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} + U_0 \cdot \psi_3(x) &= E \cdot \psi_3(x) \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

Na funkce $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ a $\psi_3(x)$ jsou z titulu toho, že jejich sjednocení na intervalu $(-\infty, +\infty)$ má představovat vlnovou funkci mikroobjektu, kladeny následující okrajové a hraniční podmínky:

Okrajové podmínky :

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_1(x) &= 0 \\ \lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_3(x) &= 0 \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

jinak by nebylo možno splnit normovací podmínku pro vlnovou funkci, tj.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{|\psi(x)|^2}_{\geq 0} dx = \underbrace{1}_{\text{konečné číslo}}$$

Hraniční podmínky :

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \frac{d\psi_1}{dx}(0) &= \frac{d\psi_2}{dx}(0) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{spojitost a hladkost } \psi(x) \\ &\text{na hranici mezi obl. ①} \\ &\text{a obl. ②, tj. v bodě } \underline{x=0} \end{aligned} \\ \\ \left. \begin{aligned} \psi_3(d) &= \psi_2(d) \\ \frac{d\psi_3}{dx}(d) &= \frac{d\psi_2}{dx}(d) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{spojitost a hladkost } \psi(x) \\ &\text{na hranici mezi obl. ②} \\ &\text{a obl. ③, tj. v bodě } \underline{x=d} \end{aligned} \end{aligned} \quad (6.2.6)$$

jinak by $\psi(x)$ na celém intervalu $(-\infty; +\infty)$ nebyla vlnovou funkcí mikroobjektu.

Řešení soustavy diferenciálních rovnic (6.2.4) při okrajových a hraničních podmínkách (6.2.5) a (6.2.6) vede k následujícím výsledkům :

① Sekulární rovnice pro energie E :

$$\boxed{\operatorname{tg} \left(d \cdot \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right) = \frac{2 \sqrt{E(U_0 - E)}}{(2E - U_0)}} \quad (6.2.7)$$

② vlnové funkce příslušných stacionárních stavů s energií E :

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1(E) \exp \left(\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \cdot x \right) \\ \psi_2(x) = A_2(E) \exp \left(i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot x \right) + B_2(E) \exp \left(-i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot x \right) \\ \psi_3(x) = B_3(E) \exp \left(-\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \cdot x \right) \end{cases} \quad (6.2.8)$$

Diskuse sekulární rovnice (6.2.7) :

Ve speciálním případě $\underline{U_0 \rightarrow \infty}$ je pravá strana této rovnice $\approx \frac{\sqrt{U_0}}{-U_0} \approx -\frac{1}{\sqrt{U_0}} \rightarrow 0^-$, takže

$$\boxed{\operatorname{tg} \left(d \cdot \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right) = 0} \quad (6.2.9)$$

$$\downarrow$$

$$d \cdot \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = n\pi ; \quad n=1,2,3,\dots$$

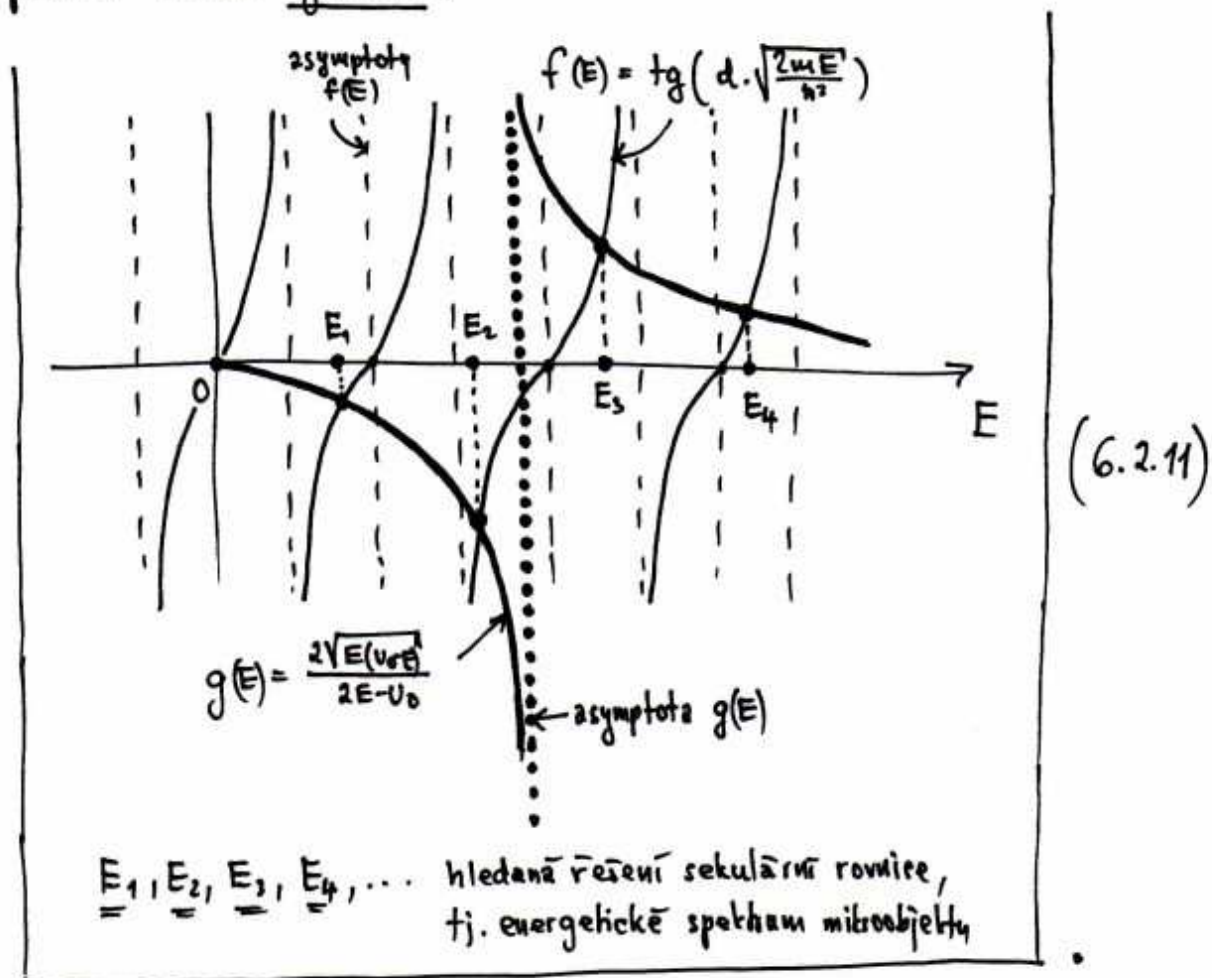
$$\Downarrow$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \cdot n^2 ; \quad n=1,2,\dots} \quad (6.2.10)$$

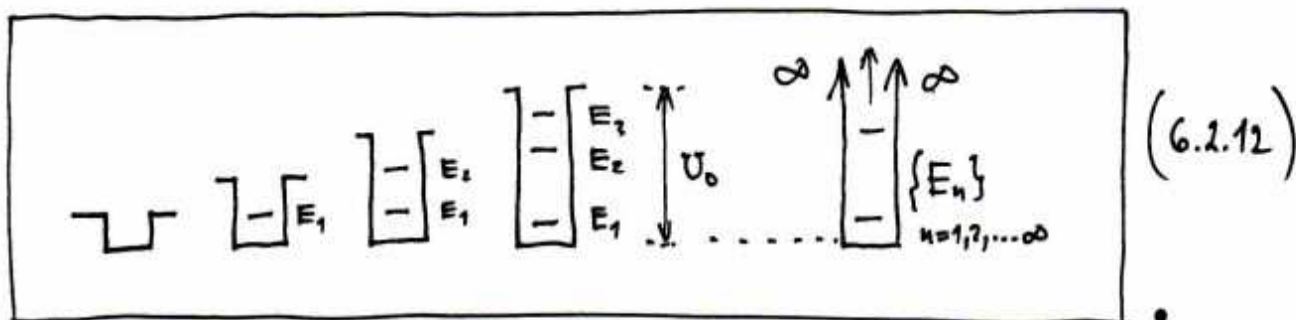
což souhlasí s dřívějším výsledkem pro energie stac. stavů mikroobjektu $\approx \infty$ -hluboké jámě (viz 4. týden).

Sekulární rovnice (6.2.7) má tedy správně limitní chování pro $\underline{U_0 \rightarrow \infty}$.

Při konečném U_0 je sekulární rovnice (6.2.7) rovnicí transcendentní, takže ji nelze vyřešit algebraickými metodami. Spokojíme-li se však pouze s kvalitativními závěry, plně postačí řešení grafické:



Takto získané energetické spektrum mikroobjektu bude zřejmě vždy kvantované. Počet možných hodnot \underline{E} ve spektru, tj. počet průsečíků křivek $f(E)$ a $g(E)$ závisí na vzájemné poloze těchto křivek, tj. na parametrech \underline{d} , \underline{m} , \underline{U}_0 . Při pevných \underline{d} a \underline{m} obecně platí, že jejich počet roste s U_0 :



Diskuse vlnových funkcí (6.2.8) :

Máme-li energetické spektrum mikroobjektu, tj. všechna řešení $\underline{\underline{E}}$ sekulární rovnice (6.2.4), doradíme tato řešení do (6.2.8), a máme tak vlnové funkce příslušných stacionárních stavů.

Vlnové funkce $\underline{\underline{\psi_1(x)}}$ a $\underline{\underline{\psi_3(x)}}$ jsou dle (6.2.8) reálné, takže pro prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu v oblastech ① a ③ máme :

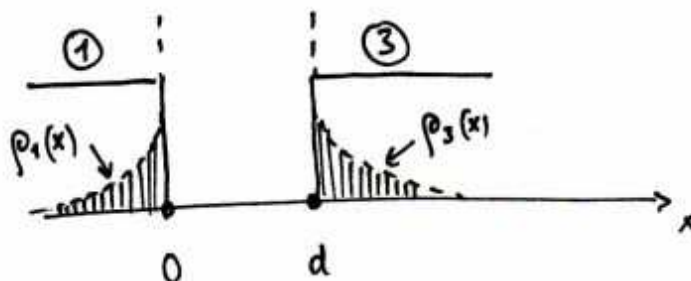
$$\rho_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = A_1^2(E) \exp\left(2\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}} \cdot x\right)$$

$$-\infty < x \leq 0$$

$$\rho_3(x) = |\psi_3(x)|^2 = B_3^2(E) \exp\left(-2\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}} \cdot x\right)$$

$$d \leq x < +\infty$$

(6.2.13)



V oblasti ② je vlnová funkce (6.2.8) komplexní, takže výpočet prostorového rozložení pravděpodobnosti výskytu mikroobjektu bude složitější :

Ozvučme pro jednoduchost

$$A_2(E) = \underline{\underline{A_2}} ; B_2(E) = \underline{\underline{B_2}} ; \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \underline{\underline{k}}$$

(6.2.14)

Podle (6.2.8) pak máme :

$$\boxed{\psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}} \quad (6.2.15)$$

↓

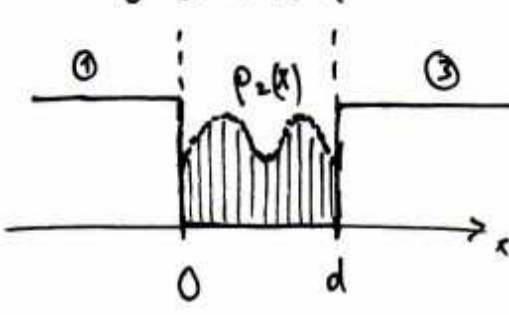
$$\boxed{\psi_2^*(x) = A_2^* e^{-ikx} + B_2^* e^{ikx}} \quad (6.2.16)$$

Spočítáme tedy:

$$\begin{aligned} |\psi_2(x)|^2 &= \psi_2(x) \cdot \psi_2^*(x) = (A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx})(A_2^* e^{-ikx} + B_2^* e^{ikx}) = \\ &= \underbrace{A_2 A_2^*}_{|A_2|^2} \cdot 1 + B_2 A_2^* e^{-2ikx} + A_2 B_2^* e^{+2ikx} + \underbrace{B_2 B_2^*}_{|B_2|^2} \cdot 1 = \\ &= |A_2|^2 + |B_2|^2 + \underbrace{|B_2| e^{i\beta}}_{B_2} \cdot \underbrace{|A_2| e^{-i\alpha}}_{A_2^*} \cdot e^{-2ikx} + \\ &\quad + \underbrace{|A_2| e^{i\alpha}}_{A_2} \cdot \underbrace{|B_2| e^{-i\beta}}_{B_2^*} \cdot e^{+2ikx} = \quad (6.2.17) \\ &= |A_2|^2 + |B_2|^2 + |A_2||B_2| \left\{ e^{-i(2kx + \alpha - \beta)} + e^{+i(2kx + \alpha - \beta)} \right\} = \\ &= |A_2|^2 + |B_2|^2 + 2|A_2||B_2| \cos(2kx + \underbrace{\alpha - \beta}_{\phi}) \end{aligned}$$

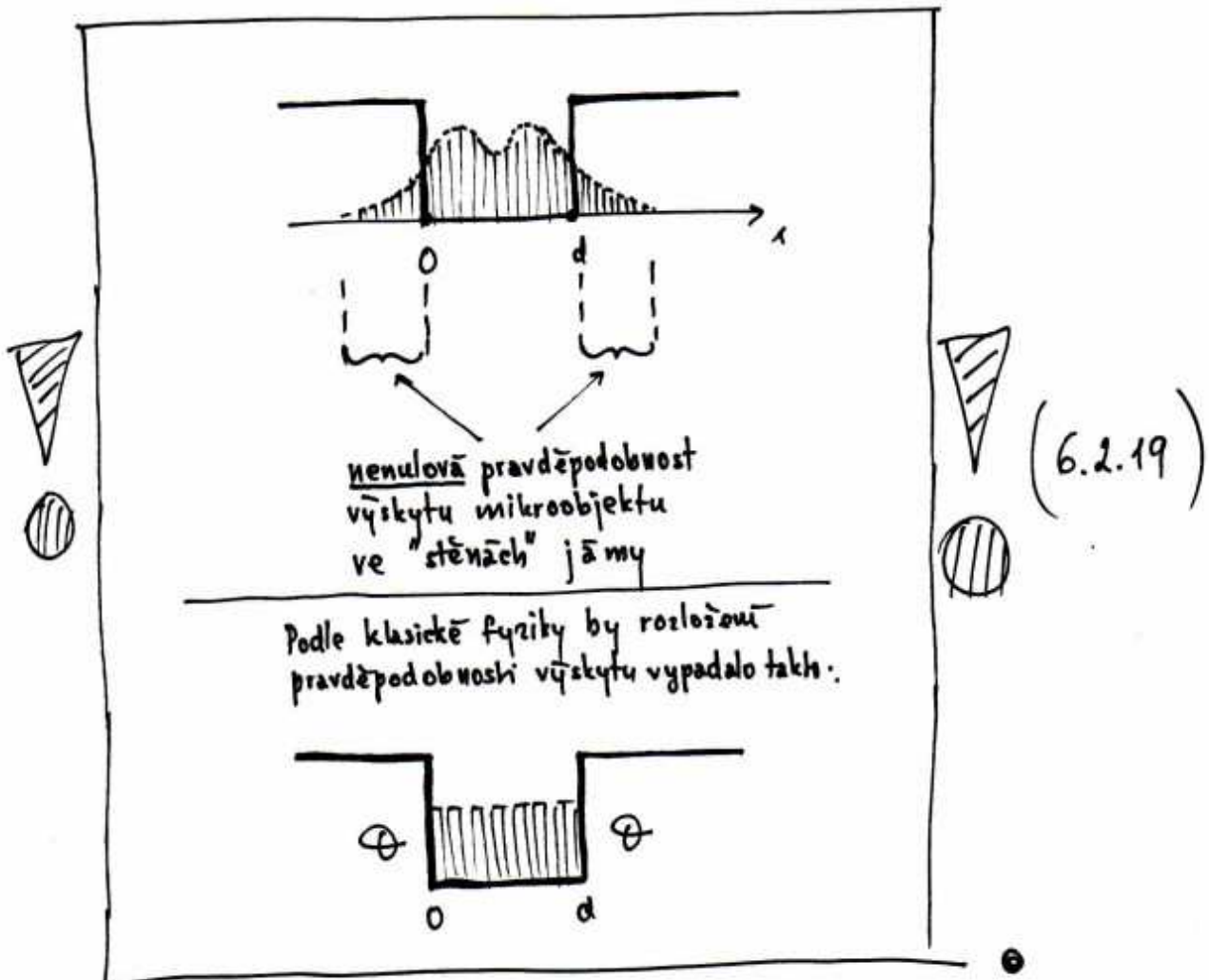
Dosadíme-li do posledního řádku (6.2.17) zpětne označení (6.2.14), dostaneme :

$$\rho_2(x) = |\psi_2(x)|^2 = |A_2(E)|^2 + |B_2(E)|^2 + 2|A_2(E)||B_2(E)| \cos\left(2\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \cdot x + \phi\right)$$

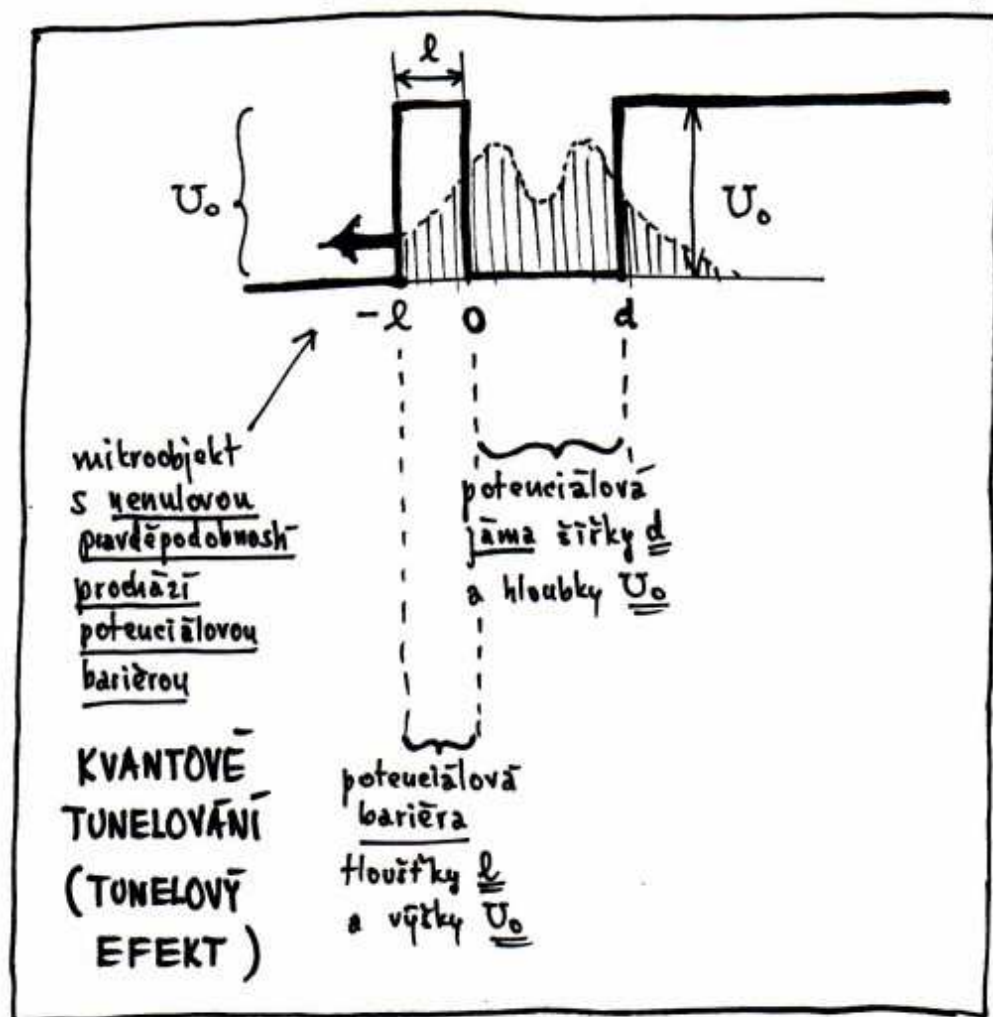
$$0 \leq x \leq d$$


(6.218)

Spojitym a hladkym navazanim (6.2.13) a (6.2.18)
na hranicich oblast $\textcircled{1-2}$ a $\textcircled{2-3}$ nakonec dostaneme :



Uvažujme nyní mikroobjekt v potenciálu následujícího tvaru:



! (6.2.20)

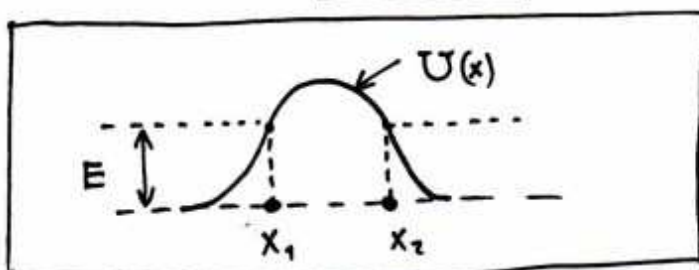
Pravděpodobnost "protunelování" mikroobjektu bariérou je zřejmě:

$$T = \frac{\rho_1(x=-l)}{\rho_1(x=0)} = \exp\left(-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E)} \cdot l\right) \quad \text{! (6.2.21)}$$

(6.2.13)

Tato pravděpodobnost se též nazývá koefficient transmise (průchodnosti) bariéry (odtud označení T).

Mā-li bariēra obecný tvar

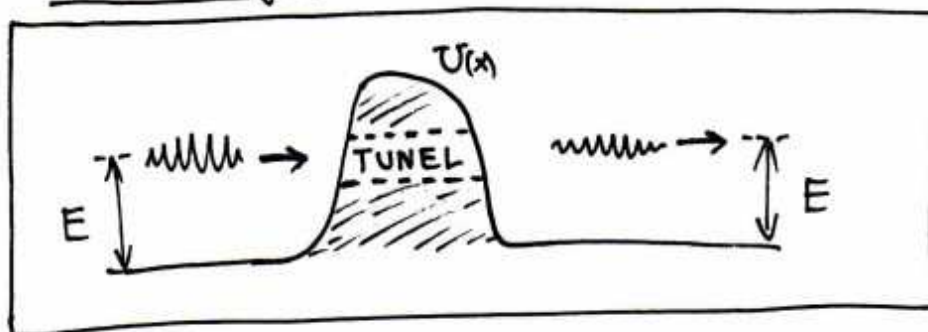


(6.2.22)

Ize vřraz (6.2.21) zobecnit takto:

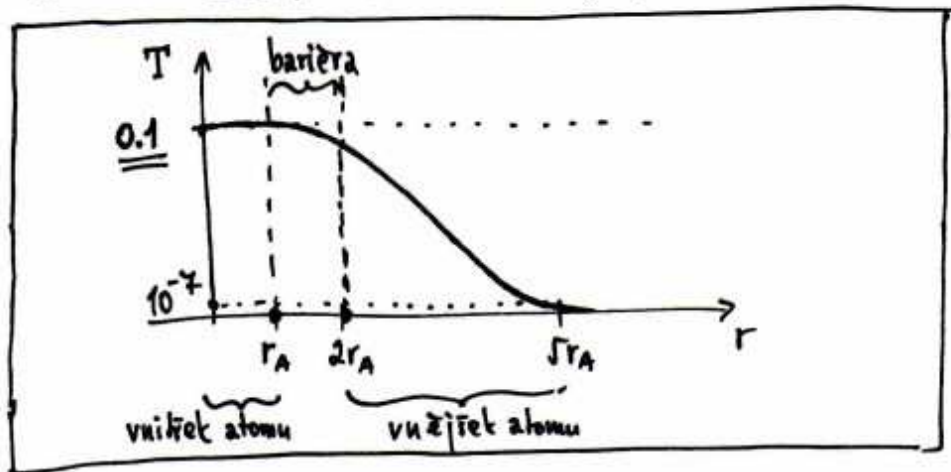
$$T = \exp\left(-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx\right) \quad (6.2.23)$$

Povřimněme si, že kvantovřm tunelovřnřm mikroobjekt neztrřci energii :



(6.2.24)

Uřitečně je rovněž uvřdovit si velikost koeficientu dtransmise T v nřjakřm realistickřm přřpadě (např. elektron v atomu, $m \sim 10^{-30}$ [kg], $U_0 - E \sim 5$ eV) :

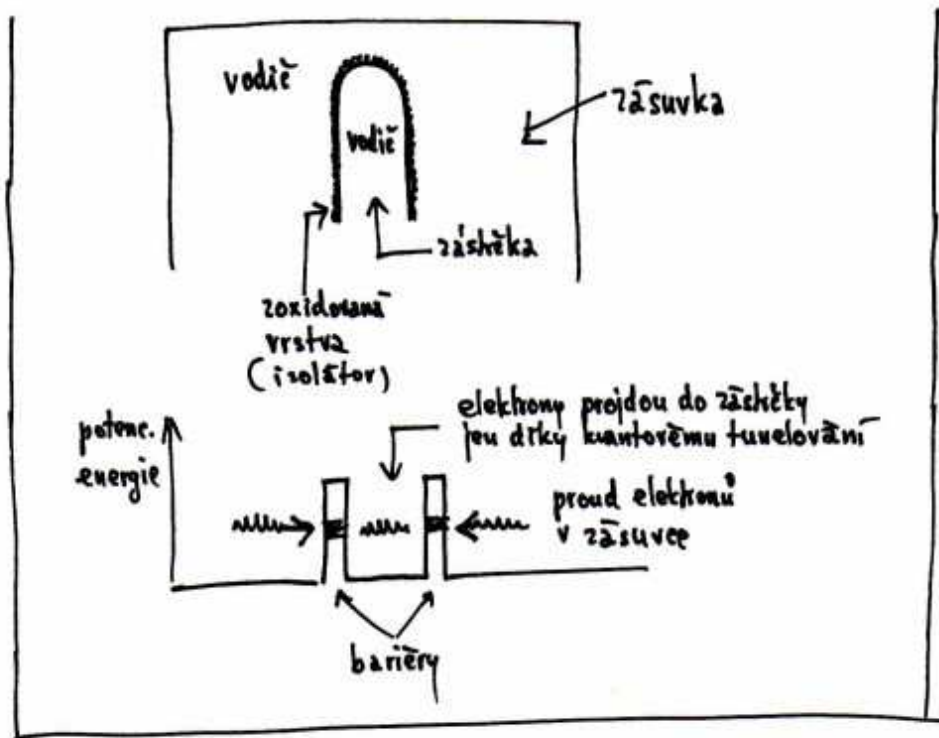


(6.2.25)

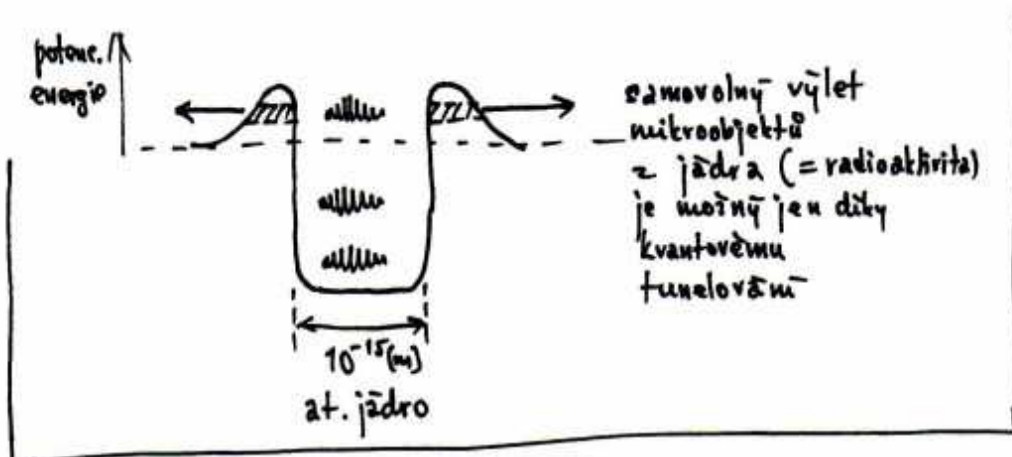
Kvantové tunelování se vyskytuje v mikrosvětě prakticky všude.
Kdykoli na ně narazíme, připomeneme jeho existenci v souvislosti s konkrétním jevem.

Nyní alespoň 3 příklady z různých oblastí fyziky a chemie :

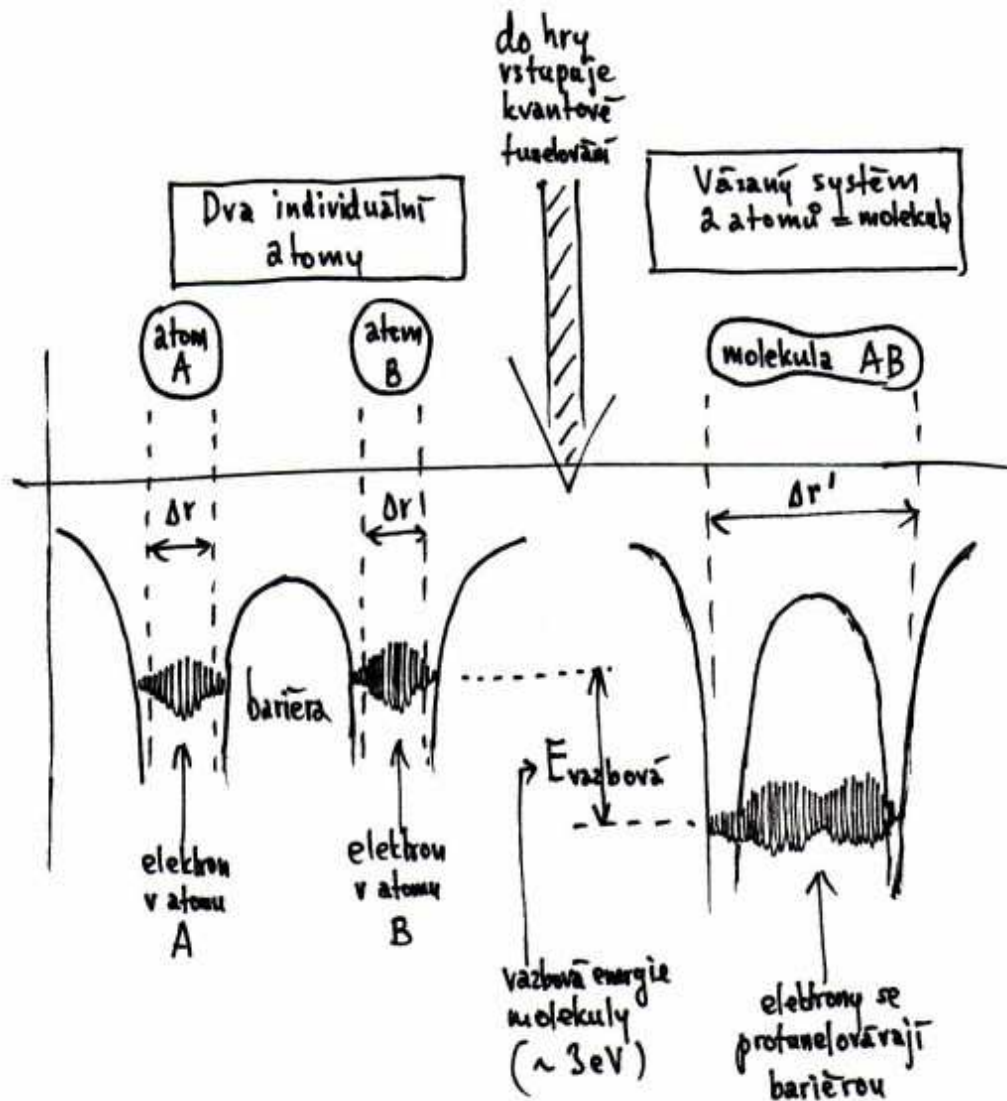
① Průchod elektrického proudu místy dotyku 2 kovů :



② Přirozená radioaktivita atomových jader :



③ Vznik molekul :



(6.2.28)

Kvantové tunelování způsobí, že každý elektron si může zvětšit svůj "životní prostor" ($\underline{\Delta r'} > \underline{\Delta r}$).

Podle HRN to však znamená $\underline{\Delta p'} < \underline{\Delta p} \Rightarrow \underline{p'} < \underline{p} \Rightarrow$

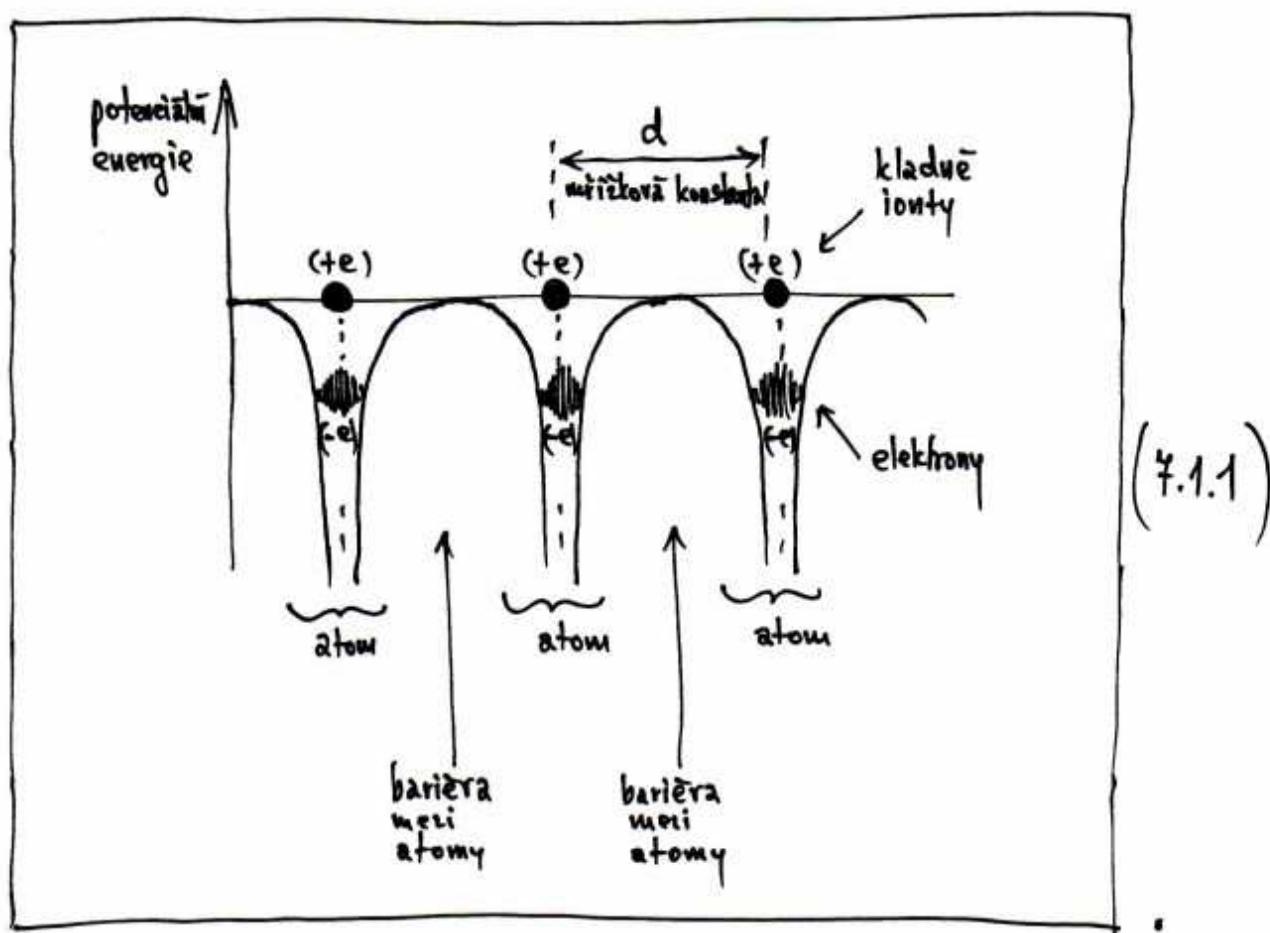
$\Rightarrow \underline{E'} < \underline{E}$. Dojde tedy ke snížení celkové energie elektronů, a tudíž k vytvoření vázaného systému 2 atomů = molekuly; $E_{\text{vazbová}} = E - E'$.



7. TÝDEN

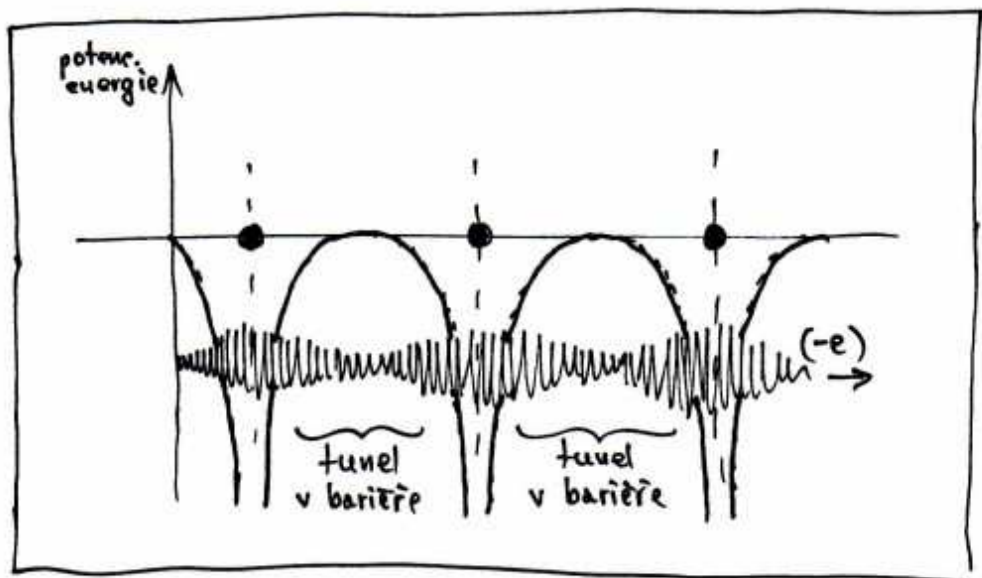
7.1 Mikroobjekt v periodickém potenciálu

Uvažujme mikroobjekt (např. elektron) v periodickém potenciálu, jaký vytvářejí určité atomy v tzv. iontových krystalických mřížkách:



Kdyby neexistovalo kvantově tunelování (tunelový efekt), každý elektron by se spokojeně "vlnil" v poli "svého" iontu, takže krystalová mřížka jako celek by nemohla vést el. proud.

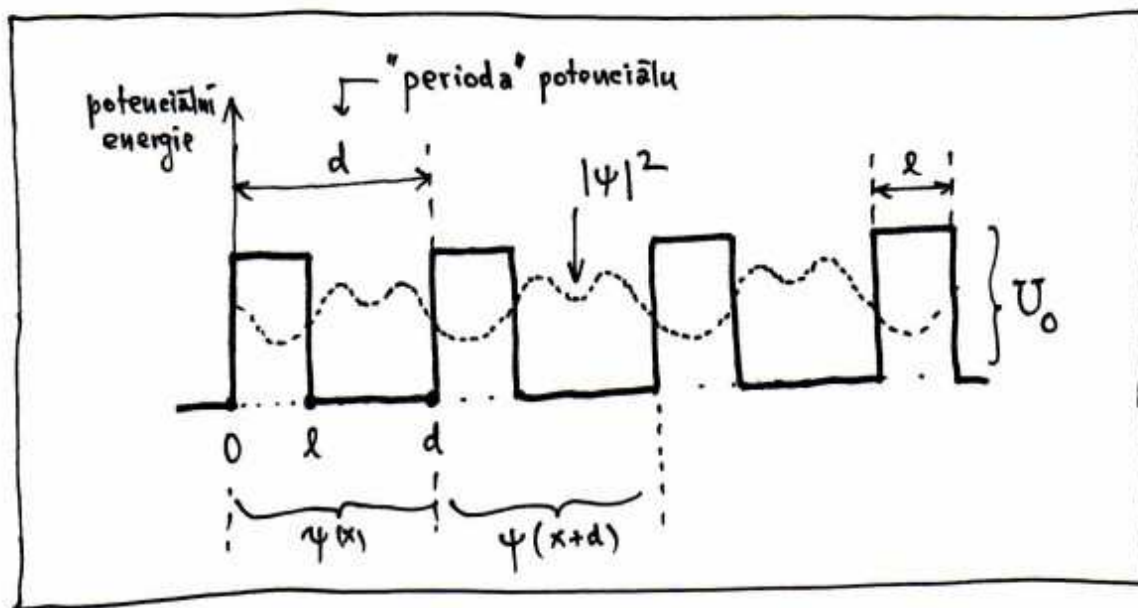
To je však v rozporu s exp. fakty, neboť např. krystalová mřížka tvořená atomy Na je vynikající vodič.
 Rozpor však lze zmizit, vstoupí-li do hry právě tunelový efekt!



(7.1.2)

Díky tunelovému efektu mohou všechny elektrony spolu navzájem interferovat v celém prostoru krystalové mřížky, takže krystalům se může volně přenášet jejich náboj.

Detailnější informace o energetickém spektru elektronů v krystalové mřížce se dají získat z následujícího zjednodušeného modelu:



(7.1.3)

Klíčovou podmínkou je zde periodičnost vlnové funkce, tj. podmínka, že $\psi(x+d)$ musí popisovat tentýž stav jako $\psi(x)$.

To samozřejmě vyžaduje stejnost prostorových rozložení pravděpodobnosti výskytu, tj.:

$$\boxed{|\psi(x+d)|^2 = |\psi(x)|^2} \quad (7.1.4)$$

Z podmínky (7.1.4) plyne:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x+d) &= \alpha \cdot \psi(x) \\ |\alpha| &= 1 \end{aligned}} \quad (7.1.5)$$

Nejobecnější komplexní číslo α takové, že $|\alpha| = 1$, má tvar:

$$\boxed{\begin{aligned} \alpha &= e^{iR} \\ \underline{R} &\dots \text{libovolné reálné číslo} \end{aligned}} \quad (7.1.6)$$

Kombinací (7.1.5) a (7.1.6) tak máme:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x+d) &= e^{iR} \cdot \psi(x) \\ \underline{R} &\dots \text{libovolné reálné číslo} \end{aligned}} \quad (7.1.7)$$

PODMÍNKA PERIODIČNOSTI VLNOVÉ FUNKCE
V PERIODICKÉM POTENCIÁLU

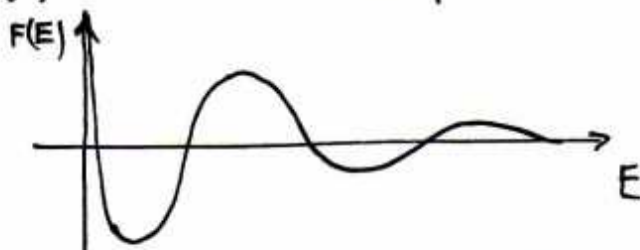
Podmínka periodičnosti vlnové funkce (4.1.7), spolu s hraničními podmínkami spojitosti a hladkosti ψ v bodech \underline{l} a \underline{d} , vede k sekulární rovnici po energii \underline{E} mikroobjektu (elektronu) v uvažovaném periodickém potenciálu.

Tato sekulární rovnice má tvar:

$$F(E) = 2 \cos R$$

kde $F(E)$ je poměrně komplikovaná funkce, jejíž grafické vyjádření je zhruba následující:

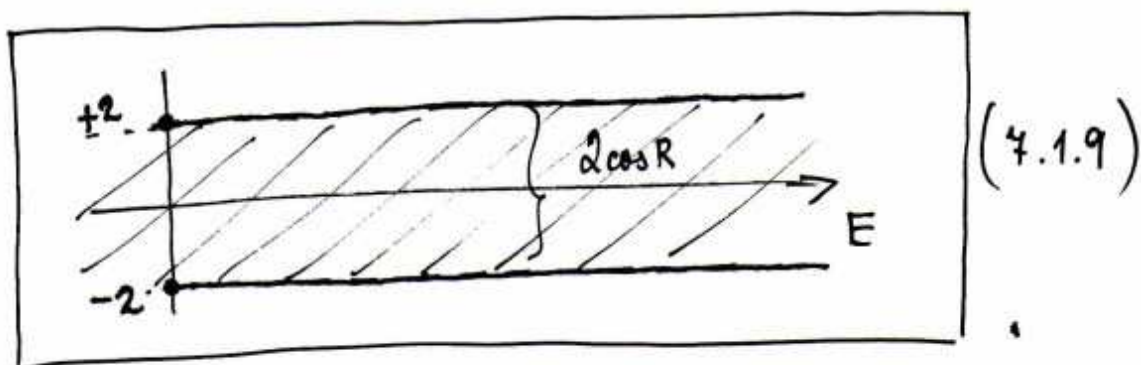
(4.1.8)



Pravá strana (4.1.8), tj. $2 \cos R$, nezávisí na \underline{E} , a protože pro libovolné reálné číslo R platí

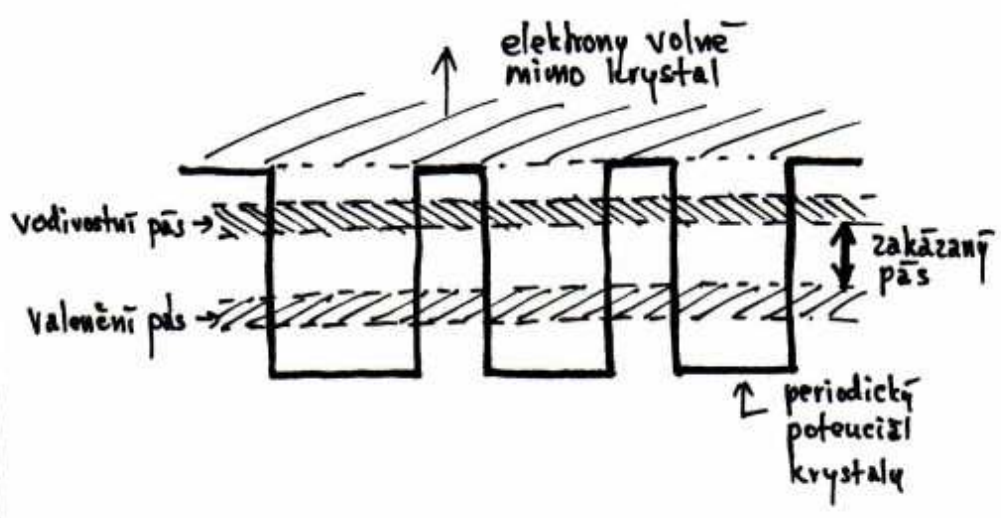
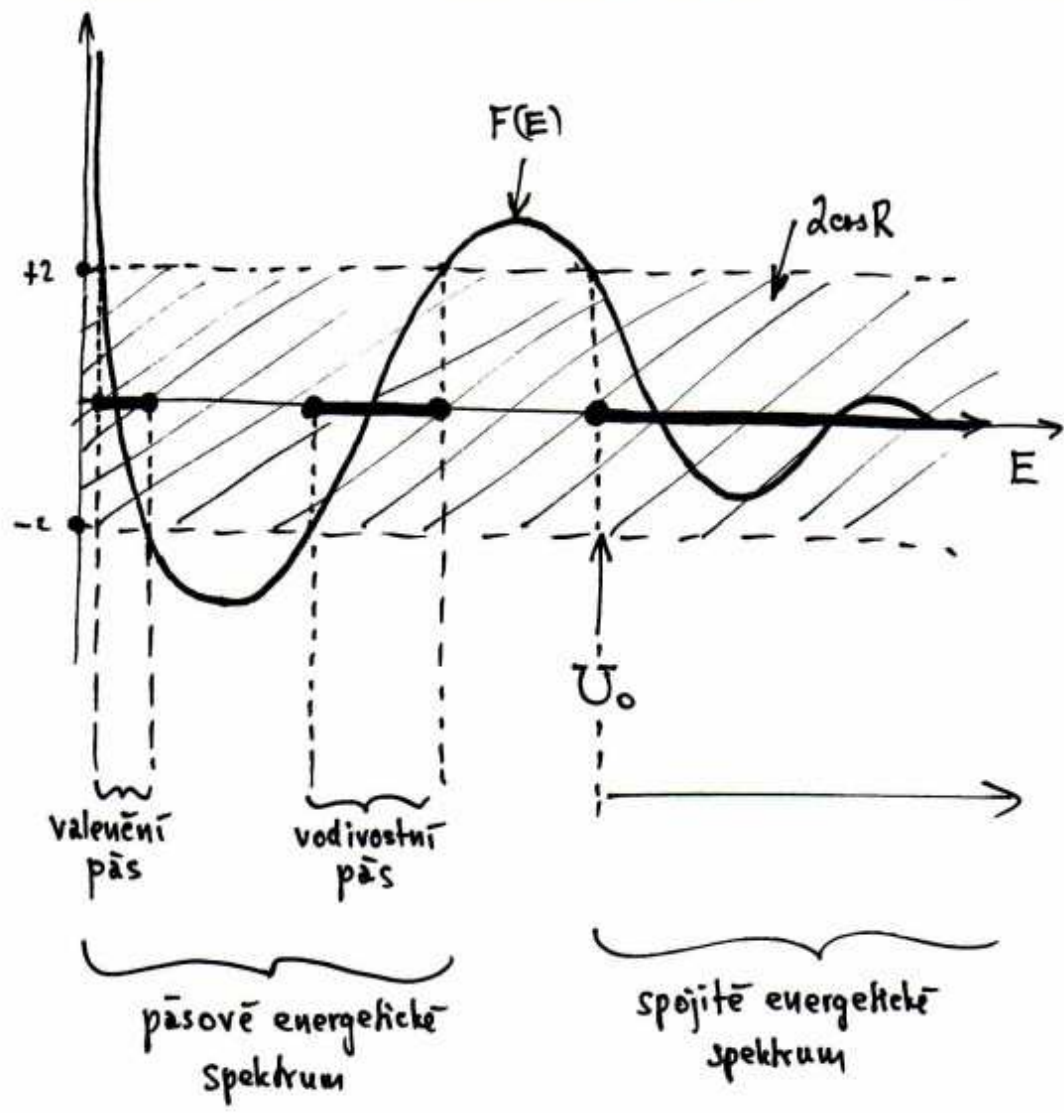
$$-1 \leq \cos R \leq +1,$$

je jejím grafem následující rovinný pás:



(4.1.9)

Řešení sekulární rovnice (4.1.8) jsou pak ty hodnoty \underline{E} , pro něž nastane průnik výše uvedených grafů:

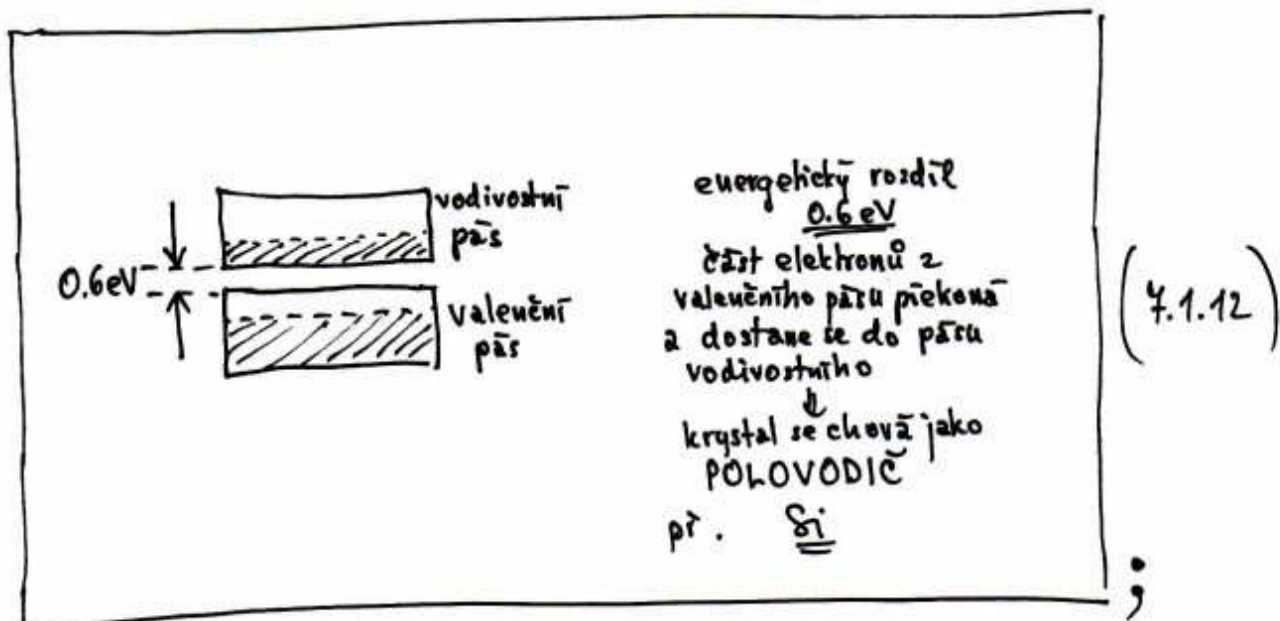
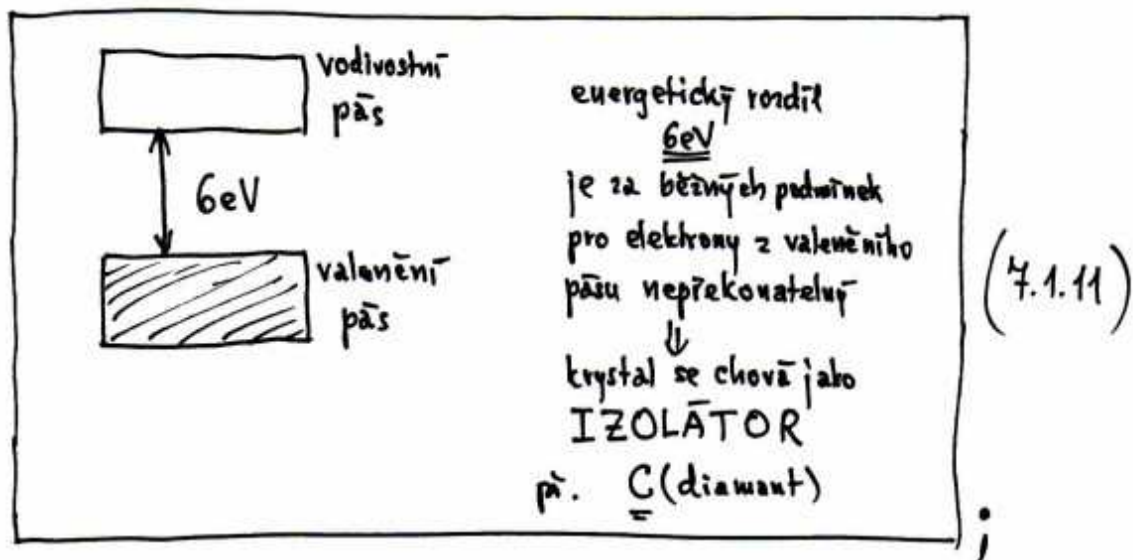


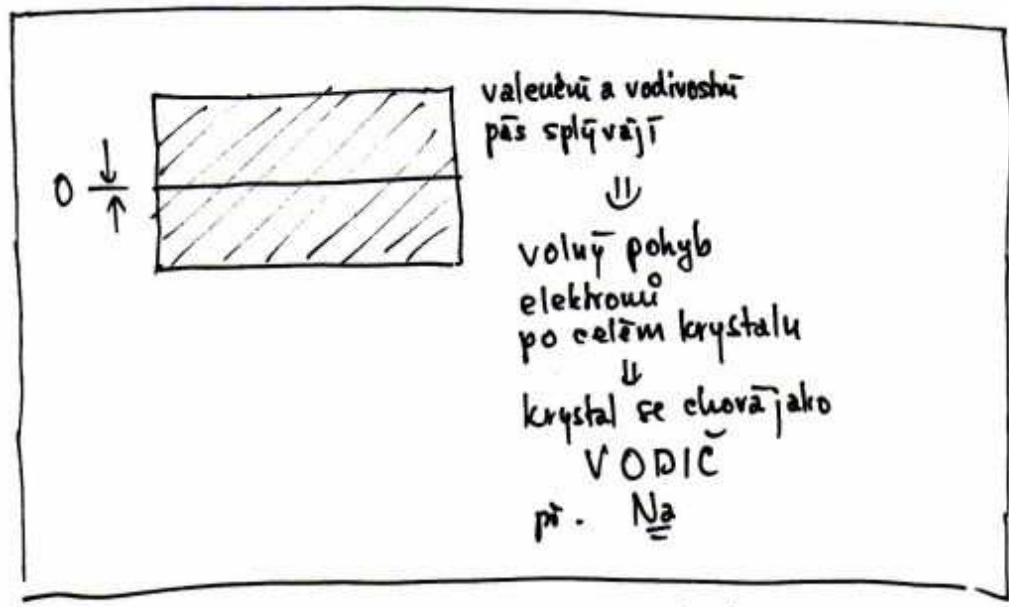
(7.1.10)

Ve valenčním pásu sídlí elektrony, je-li krystal ponechán bez vnějšího zásahu.

Do vodivostního pásu se pak elektrony mohou dostat právě vnějším zásahem (např. je-li na krystal přiloženo vnější napětí), samostatně získají-li dostatek energie k překonání zakázaného pásu.

Vzájemná poloha valenčního a vodivostního pásu (nebo ekvivalentně šířka zakázaného pásu mezi nimi) rozhoduje o tom, jaké vodivostní vlastnosti má daný krystal.



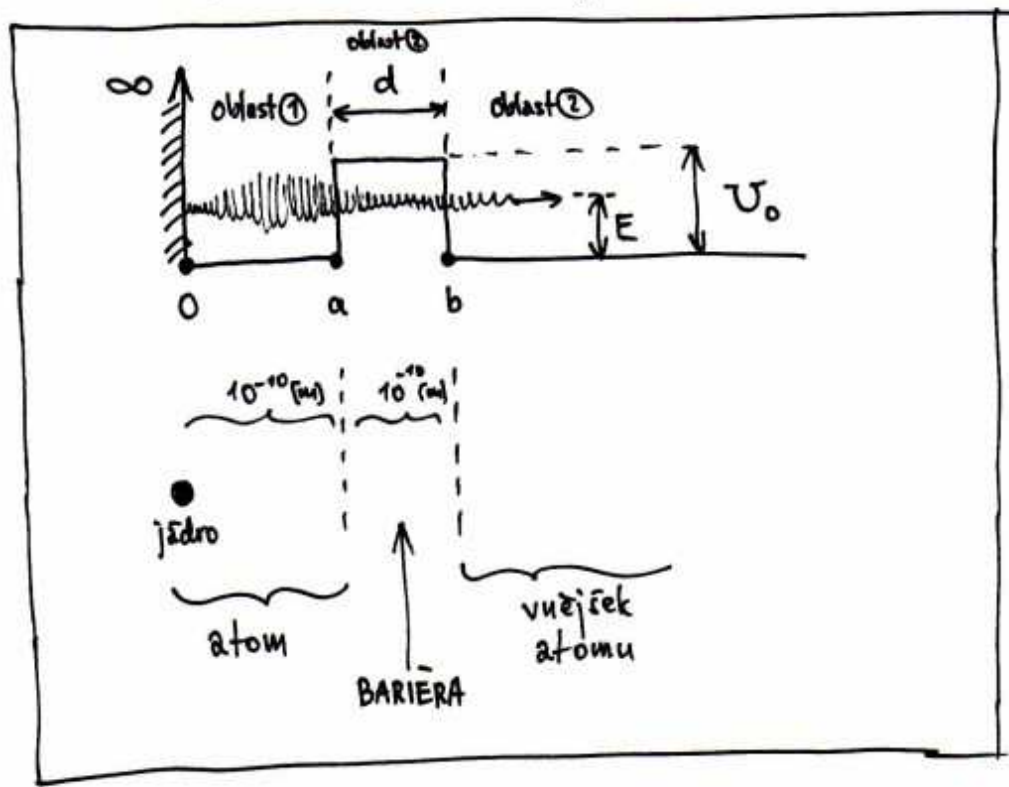


(4.1.13)

Detailnēst rozbōr problematiky vadivostk krystalickēch i jīnēch struktur je pīdmētēm specializovanē pīduāškū "Fyzika povūch lātek I+I".

4.2 Metastabilnī stavy mikroobjektu

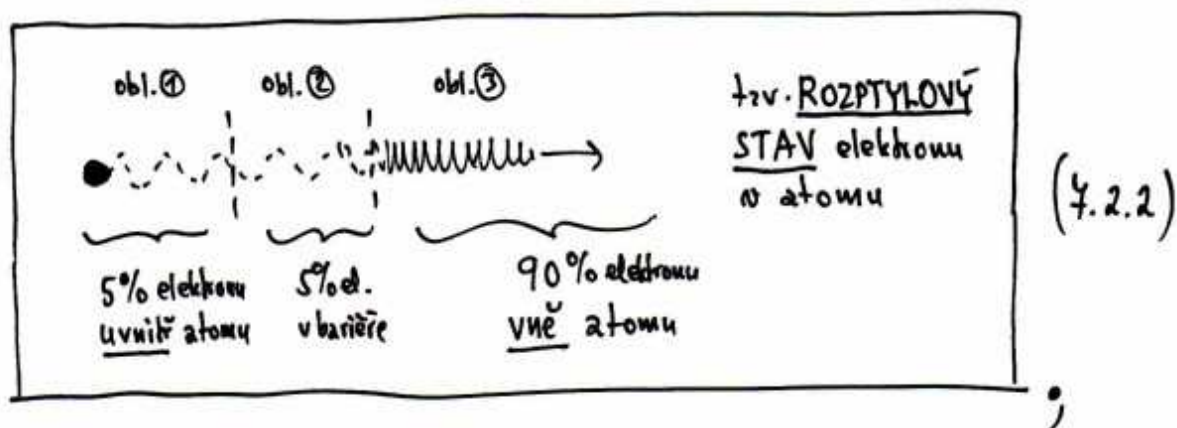
Uvažujme elektron v nāsledujīcīm modelovēm potenciālu :



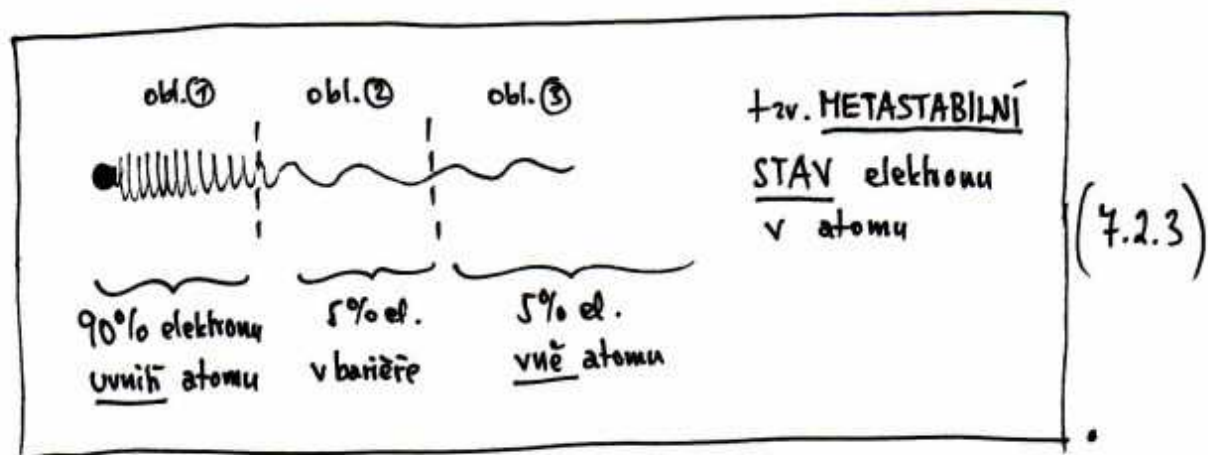
(4.2.1)

Ukážeme, že :

- a) při obecně hodnotě E je pravděpodobnost nalezení elektronu v oblasti ③ mnohem větší než v oblasti ① :



- b) při určitých specifických hodnotách E se situace obrátí, tj. pravděpodobnost nalezení elektronu v oblasti ③ bude mnohem menší než v oblasti ① :



Abychom to ukázali, je potřeba najít vlnové funkce stacionárních stavů elektronu v uvažovaném potenciálu :

$$\hat{H} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} & \dots \dots \text{obl. ①} \dots \dots \psi_1(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 \hat{1} & \dots \dots \text{obl. ②} \dots \dots \psi_2(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} & \dots \dots \text{obl. ③} \dots \dots \psi_3(x) \end{cases} \psi(x)$$

$$\hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

(4.2.4)

Rovnice (7.2.4) se řeší při okrajové podmínce

$$\boxed{\psi_1(0) = 0} \quad (7.2.5)$$

a hraničních podmínkách

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi_1(a) = \psi_2(a) \\ \frac{d\psi_1}{dx}(a) = \frac{d\psi_2}{dx}(a) \end{array} \left. \begin{array}{l} \text{spojitost} \\ \text{a hladkost } \psi \\ \text{v bodě } \underline{a} \end{array} \right\} \quad (7.2.6)$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \psi_2(b) = \psi_3(b) \\ \frac{d\psi_2}{dx}(b) = \frac{d\psi_3}{dx}(b) \end{array} \left. \begin{array}{l} \text{spojitost} \\ \text{a hladkost } \psi \\ \text{v bodě } \underline{b} \end{array} \right\}$$

Příslušné řešení je sice komplikovaná, ale rutinní záležitost. Uvedeme proto jen výsledek pro prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu v oblasti ①, tj. uvnitř atomu :

$$\rho_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = A \cdot \sin^2 \left\{ \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot x \right\}$$

$$A = \frac{16 k^2 \alpha^2}{|i\alpha - k(\alpha \sin \alpha - k \cos \alpha) e^{-\alpha d} - (k + i\alpha)(k \cos \alpha + \alpha \sin \alpha) e^{+\alpha d}|^2} \cdot \rho_3(b)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} ; \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$d = b - a \quad (\text{šířka bariéry})$$

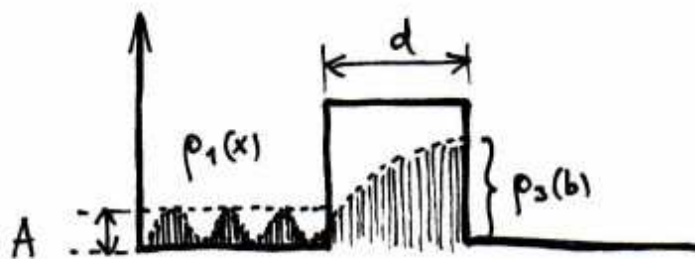
$\rho_3(b)$... lokální hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu v bodě b

! (7.2.7)

Diskuse výsledku (7.2.7) :

Při zcela obecných hodnotách \underline{E} lze ve jmenovateli výrazu pro amplitudu \underline{A} člen úměrný $e^{-\alpha d}$ zanedbat oproti členu úměrnému $e^{+\alpha d}$. Dostáváme tak :

$$A = \frac{16k^2 \alpha^2 \rho_3(b)}{(k^2 + \alpha^2)(k \cos ka + \alpha \sin ka)^2} \cdot e^{-2\alpha d}$$



(7.2.8)

Máme tak rozptýlový stav elektronu :

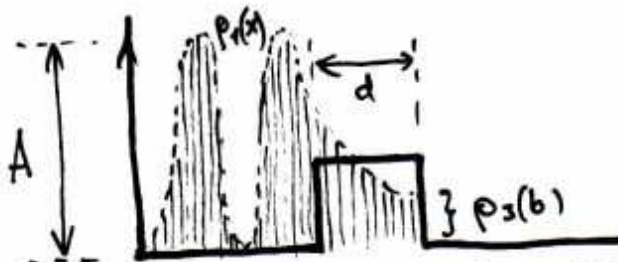
$$\rho_1(x) \ll \rho_3(x)$$

Jiná situace však nastane, když koeficient u členu $\sim e^{+\alpha d}$ bude nulový, t.j.

$$\boxed{k \cos ka + \alpha \sin ka = 0} \quad (7.2.9)$$

Pak ve jmenovateli \underline{A} zůstane pouze člen $\sim e^{-\alpha d}$, takže dostaneme :

$$A = \frac{4\alpha^2 \rho_3(b)}{(\alpha^2 + k^2) \cos^2(ka)} \cdot e^{+2\alpha d}$$



(7.2.10)

Vzniká tak metastabilní stav elektronu :

$$\rho_1(x) \gg \rho_3(x)$$

Podmínkou existence metastabilního stavu elektronu v atomu je tedy rovnice (4.2.9), z níž postupně dostaneme:

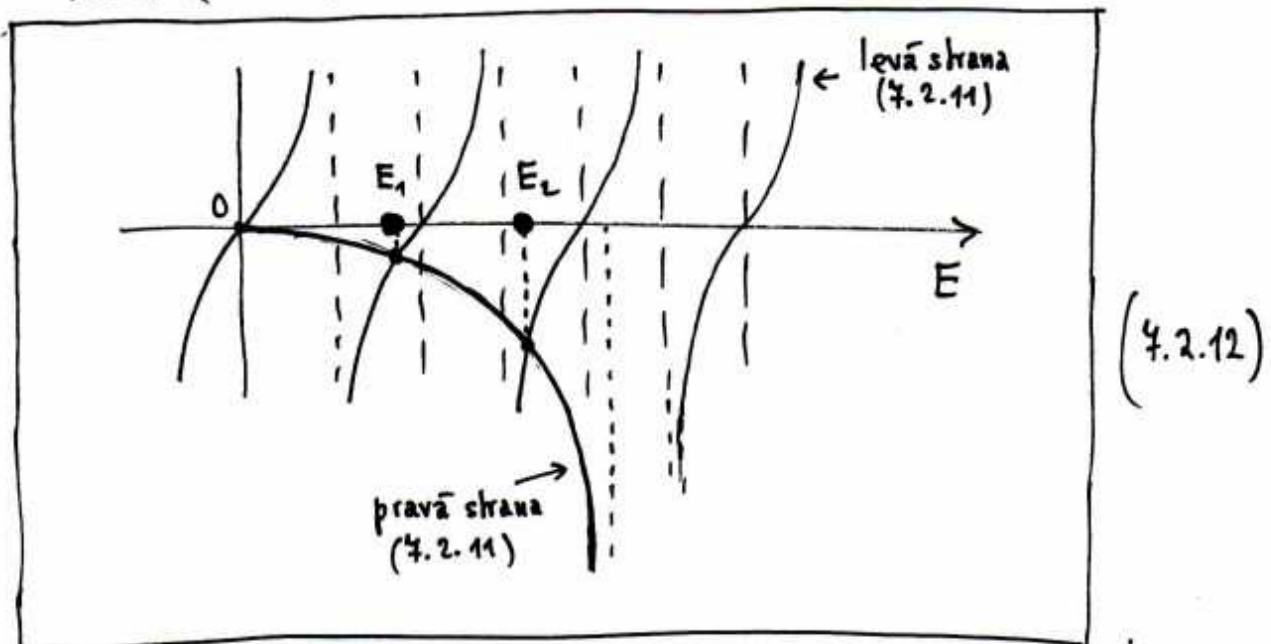
$$\operatorname{tg}(ka) = -\frac{k}{\alpha}$$

⇓

$$\operatorname{tg}\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot a\right) = -\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} \quad (4.2.11)$$

sekulární rovnice pro energie E
metastabilních stavů elektronu v atomu

Řešení (4.2.11):



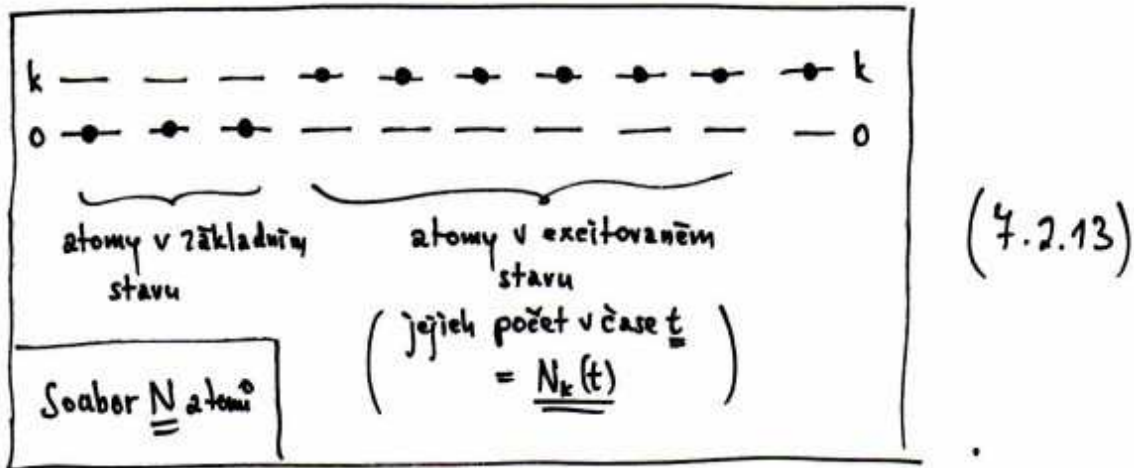
Řešení je evidentně kvantované, tj. existují jen určité, přesně definované energie (E_1, E_2 v obrázku), při kterých může elektron v atomu vytvořit metastabilní stav (90% jeho výskytu je uvnitř atomu). Při všech ostatních energiích je elektron v rozptýlovém stavu (90% jeho výskytu je mimo atom).

Zásadní otázka nyní je, jak lze metastabilní stav elektronu v atomu rozeznat od jeho ostatních stavů.

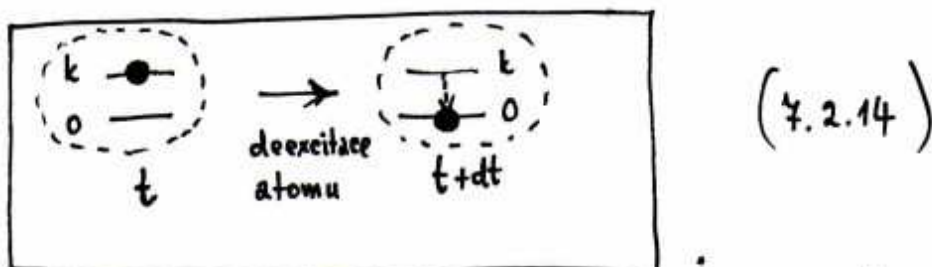
K tomu slouží veličina zvaná střední doba života atomu v excitovaném stavu.

Uvažujme soubor N atomů. Necht' v čase t se $N_k(t)$ atomů nachází v excitovaném stavu, tj. ve stavu, kdy aspoň jeden jejich elektron je na k -tém energetické hladině s energií $E_k > E_0$:

energie
základního
stavu



Necht' za časový interval dt mezi t a $t+dt$ část atomů v excitovaném stavu přejde do základního stavu :



Počet takto deexcitovaných atomů, který označíme $dN_{k \rightarrow 0}(t)$, je zřejmě úměrný :

- ① časovému intervalu dt ;
- ② počtu excitovaných atomů $N_k(t)$:

$$dN_{k \rightarrow 0}(t) = A_{k \rightarrow 0} \cdot N_k(t) \cdot dt$$

~
koeficient
úměrnosti

(4.2.15)

Počet atomů, které během časového intervalu dt mezi t a $t+dt$ deexcitovaly do základního stavu, tj. počet atomů, které po dobu t prošli v excitovaném stavu k .

Součet dob života v excitovaném stavu všech těchto atomů je:

$$d\tau_k = t \cdot dN_{k \rightarrow 0}(t) = A_{k \rightarrow 0} t N_k(t) dt$$

↑
(4.2.15)

(4.2.16)

a celková doba života všech atomů, které deexcitovaly v libovolném čase, pak je:

$$\tau_k = \int_0^{\infty} d\tau_k = A_{k \rightarrow 0} \cdot \int_0^{\infty} t N_k(t) dt$$

↑
(4.2.16)

(4.2.17)

Odtud pro střední dobu života atomu v excit. stavu máme:

$$\left(\tau_k\right)_{stř} = \frac{\tau_k}{N_k(0)} = \frac{A_{k \rightarrow 0} \cdot \int_0^{\infty} t N_k(t) dt}{N_k(0)}$$

↑
(4.2.14)

(4.2.18)

Ze vztahu (7.2.18) je zřejmé, že pro určení $(\tilde{J}_k)_{ch^-}$ potřebujeme znát funkci $\underline{N_k(t)}$.

Tu určíme z rovnice (7.2.15), uvážíme-li, že počet deexcitovaných atomů $\underline{dN_{k \rightarrow 0}(t)}$ je roven úbytku atomů excitovaných, tj. plak

$$\boxed{dN_{k \rightarrow 0}(t) = -dN_k(t)} \quad (7.2.19)$$

Dosažením (7.2.19) do (7.2.15) dostaneme:

$$\boxed{-dN_k(t) = A_{k \rightarrow 0} N_k(t) dt} \quad (7.2.20)$$

⇓

$$\frac{dN_k(t)}{N_k(t)} = -A_{k \rightarrow 0} dt$$

⇓

$$\int \frac{dN_k(t)}{N_k(t)} = -A_{k \rightarrow 0} \int dt$$

⇓

$$\ln(N_k(t)) = -A_{k \rightarrow 0} \cdot t + C_k$$



⇓



$$N_k(t) = \exp(-A_{k \rightarrow 0} \cdot t + C_k)$$

$$\underbrace{\exp(C_k)}_{N_k(0)} \cdot \underbrace{\exp(-A_{k \rightarrow 0} \cdot t)}$$

⇓

$$\boxed{N_k(t) = N_k(0) \cdot \exp(-A_{k \rightarrow 0} \cdot t)} \quad (7.2.21)$$

počet excitovaných atomů v čase \underline{t}

 počet excit. atomů v čase $\underline{0}$

Dosažením (7.2.21) do (7.2.18) dostaneme:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{(\mathcal{T}_k)_{sh}}} &= \frac{A_{k \rightarrow 0} \cdot \int_0^{\infty} t \overbrace{N_k(0) \exp(-A_{k \rightarrow 0} \cdot t)}^{N_k(t)} dt}{N_k(0)} = \\ &= A_{k \rightarrow 0} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} t \exp(-A_{k \rightarrow 0} \cdot t) dt}_{\frac{1}{(A_{k \rightarrow 0})^2}} = \underline{\underline{\frac{1}{A_{k \rightarrow 0}}}} \quad (7.2.22) \end{aligned}$$

Máme tedy:

$$\boxed{(\mathcal{T}_k)_{sh} = \frac{1}{A_{k \rightarrow 0}}} \quad (7.2.23)$$

tj. střední doba života atomu v excitovaném stavu je dána převrácenou hodnotou koeficientu úměrnosti v rovnici (7.2.15).

Koeficient $A_{k \rightarrow 0}$ vyjádříme z rovnice (7.2.21):


$$\boxed{A_{k \rightarrow 0} = \frac{1}{t} \ln \left\{ \frac{N_k(0)}{N_k(t)} \right\}} \quad (7.2.24)$$

Poměr $\left(\frac{N_k(0)}{N_k(t)} \right)$ se dá snadno vyjádřit pomocí experimentálně měřitelných veličin, a sice pomocí intenzit záření emitovaného atomem při deexcitaci v čase 0 a v čase t.

Podle (4.2.15) je počet atomů, které během intervalu $(t, t+dt)$ deexcitují do zákl. stavu, roven

$$dN_{k \rightarrow 0}(t) = A_{k \rightarrow 0} \cdot N_k(t) \cdot dt \quad (4.2.25)$$

Při každém deexcitačním přechodu $k \rightarrow 0$ atom vyžáří foton s energií

$$\hbar\omega_{k \rightarrow 0} = E_k - E_0$$


$$(4.2.26)$$

Za časový interval dt mezi t a $t+dt$ bude tedy vyžářena energie:

$$dE_{k \rightarrow 0}(t) = \hbar\omega_{k \rightarrow 0} \cdot dN_{k \rightarrow 0}(t) = \hbar\omega_{k \rightarrow 0} A_{k \rightarrow 0} \cdot N_k(t) \cdot dt \quad (4.2.27)$$

↑
(4.2.25)

Ddtud je zřejmé, že intenzita záření v čase t bude :

$$I_{k \rightarrow 0}(t) = \frac{dE_{k \rightarrow 0}(t)}{dt} = \hbar\omega_{k \rightarrow 0} A_{k \rightarrow 0} \cdot N_k(t) \quad (4.2.28)$$

↑
(4.2.27)

⇓

$$N_k(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{k \rightarrow 0} A_{k \rightarrow 0}} \cdot I_{k \rightarrow 0}(t) \quad (4.2.29)$$

Ze vztahu (7.2.29) vidíme, že

$$\boxed{\frac{N_k(0)}{N_k(t)} = \frac{I_{k \rightarrow 0}(0)}{I_{k \rightarrow 0}(t)}} \quad (7.2.30)$$

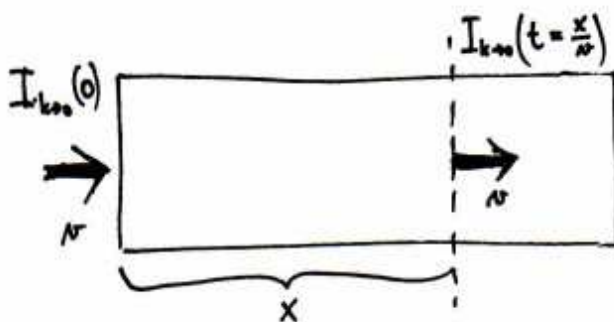
což dosazeno do (7.2.24) dá :

$$\boxed{A_{k \rightarrow 0} = \frac{1}{t} \ln \left\{ \frac{I_{k \rightarrow 0}(0)}{I_{k \rightarrow 0}(t)} \right\}} \quad (7.2.31)$$

Dosadíme-li poslední výraz ještě do (7.2.23), dostaneme:

$$\boxed{(\mathcal{T}_k)_{stř} = \frac{t}{\ln \left\{ \frac{I_{k \rightarrow 0}(0)}{I_{k \rightarrow 0}(t)} \right\}}} \quad (7.2.32)$$

Máme tedy střední dobu života atomu v excitovaném stavu $(\mathcal{T}_k)_{stř}$ vyjádřenu pomocí experimentálně měřitelných veličin:



Proženume soubor zářivých atomů rychlostí v válcovým prostorem, zvolíme x (tím je určen čas $t = \frac{x}{v}$) a změříme $I_{k \rightarrow 0}(0)$ a $I_{k \rightarrow 0}(t = \frac{x}{v})$.

Dosazením změřených hodnot do (7.2.32) tak určíme $(\mathcal{T}_k)_{stř}$

! (7.2.33)

Rozsáhlými měřeními ve výše uvedeném smyslu bylo zjištěno, že v atomech existují 2 skupiny excitovaných stavů s výrazně odlišnou střední dobou života :

$$\textcircled{1} \quad 10^{-10} [\text{s}] \leq (\mathcal{T}_k)_{\text{sk}} \leq 10^{-8} [\text{s}] \quad (4.2.34)$$

standardní excitované stavy
(cca 90% případů)

$$\textcircled{2} \quad 10^{-5} [\text{s}] \leq (\mathcal{T}_k)_{\text{sk}} \leq 10^{-3} [\text{s}] \quad (4.2.35)$$

metastabilní excitované stavy
(cca 10% případů)

Střední doba života atomu v excitovaném stavu je tedy svou rodišovací charakteristikou, která identifikuje metastabilní stavy :

$$(\mathcal{T}_k)_{\text{sk}}^{\text{metastabil}} \gg (\mathcal{T}_k)_{\text{sk}}^{\text{standard}}$$

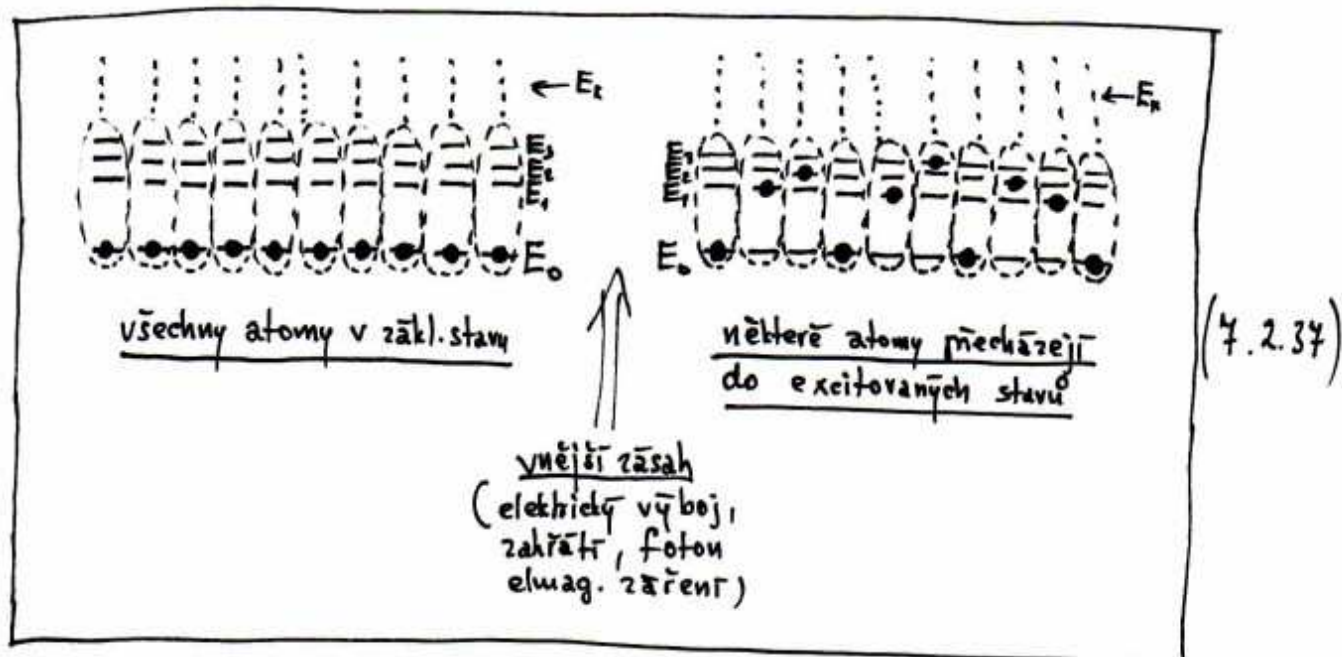
$$\sim 10^{-4} [\text{s}]$$

$$\sim 10^{-9} [\text{s}]$$

$$(4.2.36)$$

V metastabilních excitovaných stavech se tedy atomy nacházejí cca 100 000-krát déle než ve standardních excitovaných stavech, což má zásadní význam pro záření atomů, v nichž se vyskytuje metastabilní stav.

Uvažme nejprve, jaké vlastnosti má záření atomů, v nichž metastabilní stav není:

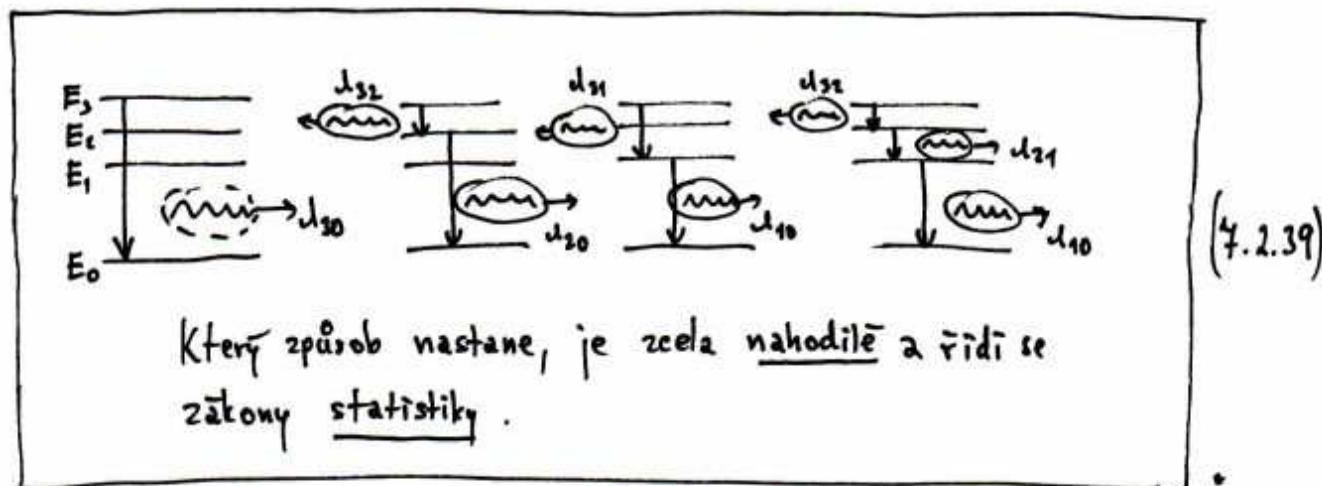


Jakmile vnější zásah přestane působit, excitované atomy se spontánně vrací do základního stavu (princip minimalizace energie izolovaného systému). Tuto spontánní návrat trvá po dobu

$$\boxed{(\tau_k)_{\text{stř}}^{\text{standard}} \sim 10^{-9} \text{ [s]}} \quad (4.2.38)$$

Přebytečnou energii přitom atomy vyzařují prostřednictvím fotonů elmag. záření (atomy září). Každý atom má samozřejmě obecně několik způsobů, jak se dostat do základního stavu.

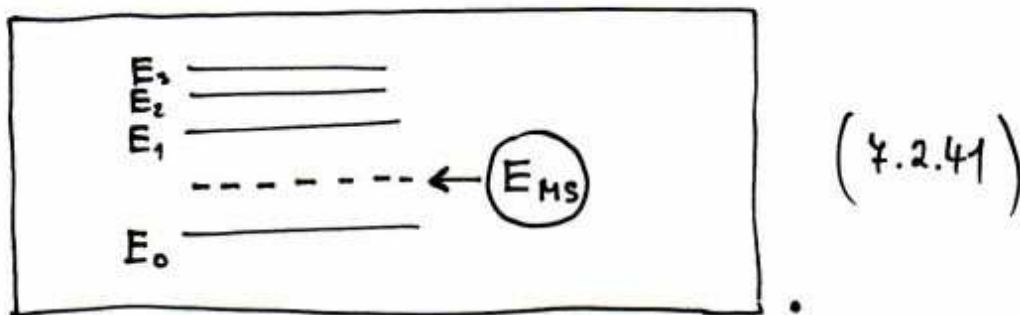
Napr. atom s elektronem na 3. excitované hladině E_3 má 4 možnosti:



Ve svém výsledku je záření atomů :

- | | | |
|--------------------------|---|----------|
| ① <u>polychromatické</u> | (mnoho různých přechodů \Rightarrow
mnoho různých vlnových délek
vyzařovaných fotonů) | (7.2.40) |
| ② <u>nekoherentní</u> | (fotony jsou vyzařovány
nekoordinovaně s různými
fázemi) | |

Nyní se podívejme, jak se situace změní, když mezi základní a excitovanými energetickými hladinami bude existovat další energetická hladina, odpovídající metastabilnímu stavu elektronu v atomu.



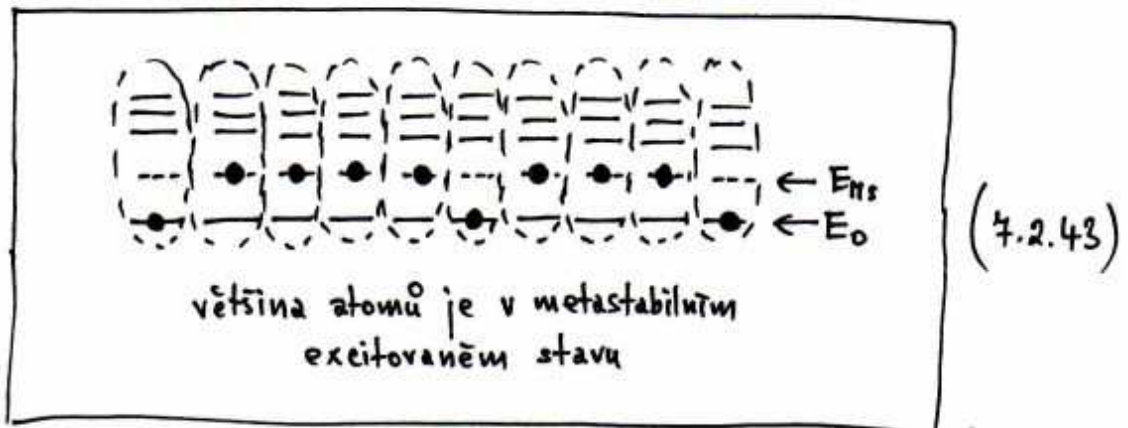
Díky dlouhé době života

$$(\tau_k)_{st}^{metastabil} \approx 10^{-4} [s] \approx 10^5 \times (\tau_k)_{st}^{standard} \quad (7.2.42)$$

(srov. (7.2.36))

má hladina E_{ms} tendenci elektrony zadržovat a shromažďovat.

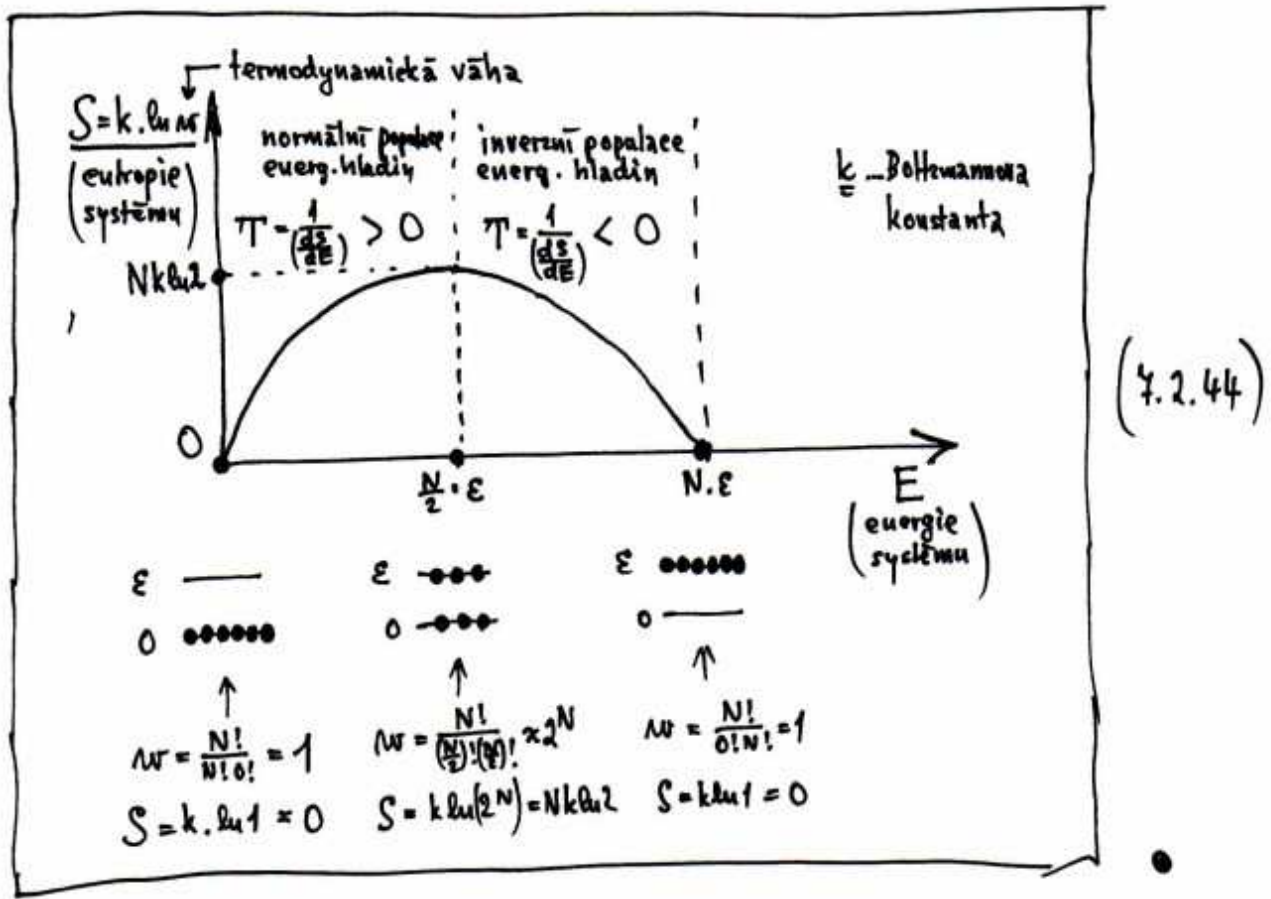
V určitém čase $\approx (\tau_k)_{st}^{metastabil}$ po "vypnutí" vnějšího působení na atom je tedy situace následující :



Vzniká zde tzv. inverzní populace (obsazenost) energetických hladin, kdy na vyšší hladině je více elektronů než na nižší (normální populace by byla :



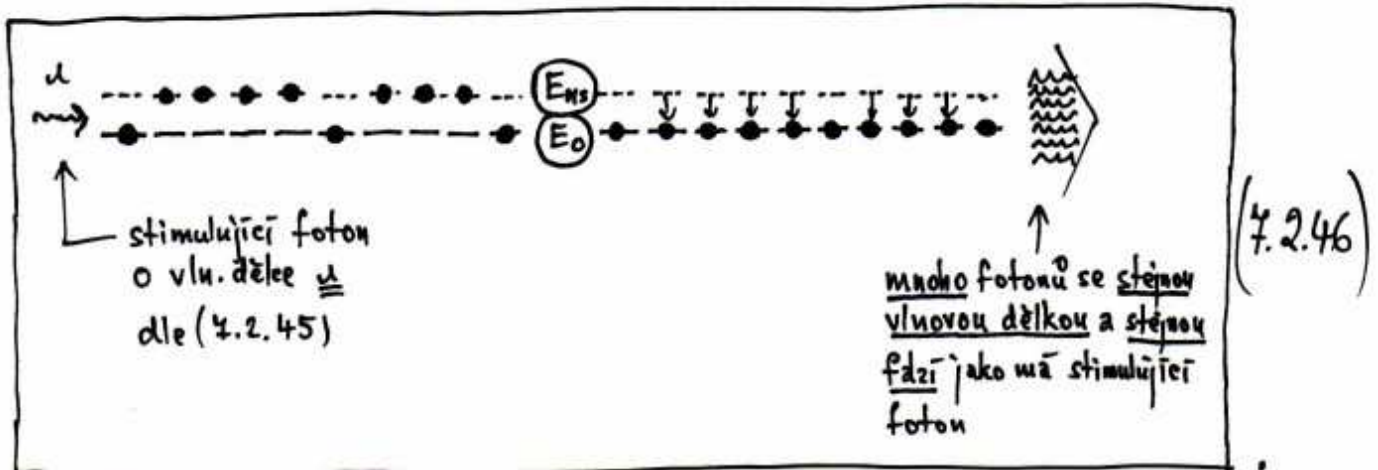
Z termodynamického hlediska má takový systém s inverzní populací zápornou termodynamickou teplotu, neboť jeho entropie s růstem energie klesá:



Posvitme si nyní na soubor atomů (4.2.43) fotoem o vlnové délce $\underline{\lambda}$ takové, že

$$\boxed{\frac{hc}{\lambda} = E_{n_2} - E_0} \quad (4.2.45)$$

Dojde zde k jevu, zvanému stimulovaná emise záření:



Díky přítomnosti metastabilního stavu elektronu v atomu, projevujícího se energetickou hladinou $\underline{E_{n_2}}$, dochází tedy k:

Zesílení světla stimulovanou emisí záření

(Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

↓
odtud atomům

▼ **LASER** ▼

(4.2.47)

Díky relaci $(T_{n_2})_{\text{metastabil}} \sim 10^5 \times (T_{n_2})_{\text{standard}}$ lze velikost zesílení kvantifikovat faktorem $\sim \underline{10^5}$, tj. "laserové" záření je $\sim \underline{10^5 \times}$ intenzivnější než standardní záření atomů bez metastabilního stavu.

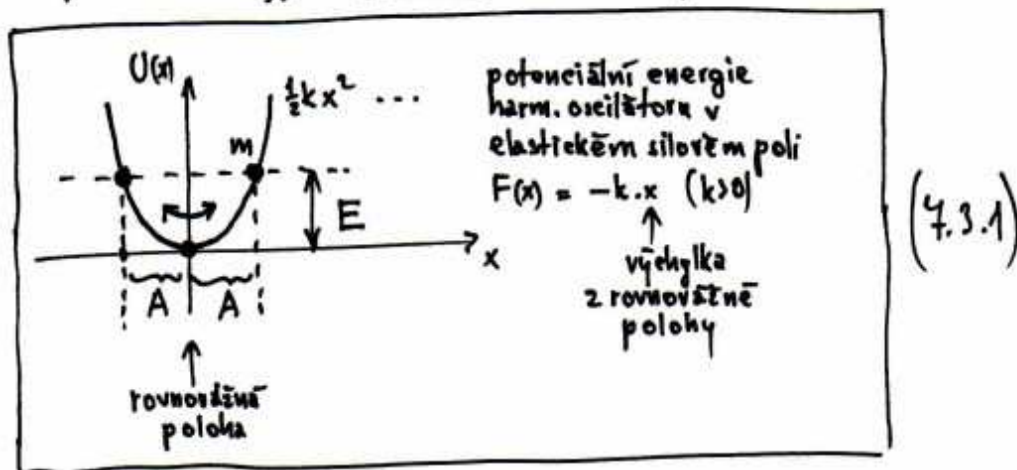
Díky vlastnostem stimulované emise je "laserové" záření navíc:

- ① monochromatické (všechny fotony mají stejnou vln. délku $\underline{\lambda}$; $\frac{hc}{\lambda} = E_{n_2} - E_0$)
- ② koherentní (všechny fotony jsou vyzařeny koordinovaně se stejnou fází),



4.3 Kvantový harmonický oscilátor

Připomeňme nejprve klasický harmonický oscilátor:



Plak :

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{E_{\text{kin}}} + \underbrace{\frac{1}{2} k x^2}_{E_{\text{pot}}} = \text{konst.}$$

$$x(t) = A \sin(\omega t)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (\text{kvadrát harmonických oscilací})$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \omega \quad (\text{frekvence --})$$

Amplituda A je určena podmínkou $p=0$ (výchylka maximální \Rightarrow oscilátor v klidu):

$$E = 0 + \frac{1}{2} k A^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2E}{k}}$$

Skemto:

Klasický harmonický oscilátor o hmotnosti m , mající celkovou energii E a nacházející se v elastickém silovém poli charakterizovaném konstantou k , koutě harmonické oscilace popsané rovnicí:

$$x(t) = \underbrace{\sqrt{\frac{2E}{k}}}_A \sin\left(\underbrace{\sqrt{\frac{k}{m}}}_{\omega} \cdot t\right) \quad (0 \leq E < \infty)$$

(4.3.2)

Kvantový harmonický oscilátor získáme přechodem

$$E \rightarrow \hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \quad (4.3.3)$$

Máme tedy:

$$\hat{H}_{osc} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \quad (4.3.4)$$

Hamiltonův operátor (hamiltonián) kvantového harmonického oscilátoru.

Jako již mnohokrát, dále hledáme stacionární stavy s energií E, tj. řešíme rovnici:

$$\hat{H}_{osc} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (4.3.5)$$

Dosažením (4.3.4) do (4.3.5) máme:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \right\} \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + \frac{1}{2} k x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

↓

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2}(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} k x^2 \right)}_{f(x)} \cdot \psi(x) = 0 \quad (4.3.6)$$

obvyčejně dif. rov. 2. řádu s nekonst. koeficienty

Zavedme substituci :

$$\boxed{\frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \alpha} \quad (7.3.7)$$

$$\boxed{\left(\frac{\sqrt{km'}}{\hbar}\right)^{1/2} \cdot x = y} \quad (7.3.8)$$

Užitím nových konstant a proměnných vypadá dif. rovnice (7.3.6) takto:

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dy^2}(y) + (\alpha - y^2) \cdot \psi(y) = 0} \quad (7.3.9)$$

Matematika umí najít obecně řešení této dif. rovnice ve tvaru :

$$\boxed{\psi(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} \cdot \left(\sum_{k=0}^{\infty} A_k \cdot y^k \right)} \quad (7.3.10)$$

kde koeficienty A_k ∞ -řady splňují rekurentní vztah:

$$\boxed{A_{k+2} = \frac{(2k+1 - \alpha)}{(k+2)(k+1)} \cdot A_k} \quad (7.3.11)$$

Fyzika musí z obecného matematického řešení vybrat jen to, které splňuje požadavky pro vlnovou funkci oscilujícího mikroobjektu.

Funkce $\psi(y)$ dle (7.3.10) je všude spojitá a hladká, jediný problém představuje nekonečnost $\psi(y)$ pro $y \rightarrow \pm\infty$, neboť řada $\left(\sum_{k=0}^{\infty} A_k y^k\right)$ s koeficienty splňujícími (7.3.11) se pro $y \rightarrow \pm\infty$ chová jako (e^{+y^2}) , takže:

$$\boxed{\psi(y) \underset{y \rightarrow \pm\infty}{\approx} e^{-\frac{1}{2}y^2} \cdot e^{+y^2} \approx e^{+\frac{1}{2}y^2} \rightarrow \infty} \quad (7.3.12)$$

Vlnová funkce mikroobjektu však vyžaduje, aby platilo:

$$\boxed{\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \{\psi(y)\} = 0} \quad (7.3.13)$$

jinak by nebylo možno splnit normovací podmínku $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(y)|^2 dy = 1$.

Požadavek (7.3.13) lze zřejmě splnit pouze tak, že nedovolíme, aby suma $(\sum_k A_k y^k)$ obsahovala ∞ mnoho členů, tj. budeme požadovat redukcí ∞ -řady na polynom stupně n :

$$\boxed{\underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} A_k y^k}_{\infty\text{-řada}} \rightarrow \underbrace{h_n(y) = \sum_{k=0}^n A_k y^k}_{\text{polynom stupně } n}} \quad (7.3.14)$$

Pak podle (7.3.10)

$$\boxed{\psi(y) \rightarrow \psi_n(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} \cdot h_n(y)} \quad (7.3.15)$$

a pro funkci $\psi_n(y)$ zřejmě platí:

$$\boxed{\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \{\psi_n(y)\} = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \left\{ \frac{h_n(y)}{e^{\frac{1}{2}y^2}} \right\} = 0} \quad (7.3.16)$$

\uparrow
 n -krát aplikované
 l'Hospitalovo
 pravidlo
 ($h_n(y)$ je polynom stupně n)

Funkce $\psi_n(y)$ tak už splňuje všechny požadavky kladené na vln. funkci mikroobjektu.

Zásadní otázka tedy je, kterak redukovat ∞ -řadu ($\sum_{k=0}^{\infty} A_k y^k$)
na polynom stupně n .

Řešení nabízí rekurentní formule pro koeficienty A_k (viz (4.3.11)).

Položme-li v této formuli

$$\alpha = 2n + 1, \quad (4.3.17)$$

dostaneme:

$$\underline{\underline{A_{n+2}}} = \frac{\overbrace{(2n+1 - (2n+1))}^{\alpha}}{(n+2)(n+1)} \cdot \underbrace{A_n}_{\neq 0} = \underline{\underline{0}}$$

↓

$$A_{n+4} = 0, A_{n+6} = 0 \dots \text{atd.}$$

h. ∞ -řada obsahuje jen n nenulových členů,
což není nic jiného než redukcí této řady
na polynom stupně n .

(4.3.18)

Rovnice (4.3.17) je tedy onaou klíčovou podmínkou, která
z obecného matematického řešení dif. rovnice dělá fyzikální
vlnovou funkci mikroobjektu.

Dosaďme do levé strany (4.3.17) za α podle (4.3.7):

$$\underbrace{\frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}}}_{\alpha} = 2n + 1 \quad (4.3.19)$$

Z rovnice (4.3.19) pak máme pro energii oscilátoru E :

$$E = \frac{1}{2} \hbar \underbrace{\sqrt{\frac{k}{m}}}_{\omega} (2n+1) \quad (4.3.20)$$

\swarrow stupeň polynomu, n .
 $n=0,1,2,3,\dots$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{kmitočet klasického oscilátoru}}$



$$E_n = \frac{1}{2} \hbar \omega + n \cdot \hbar \omega \quad (4.3.21)$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$

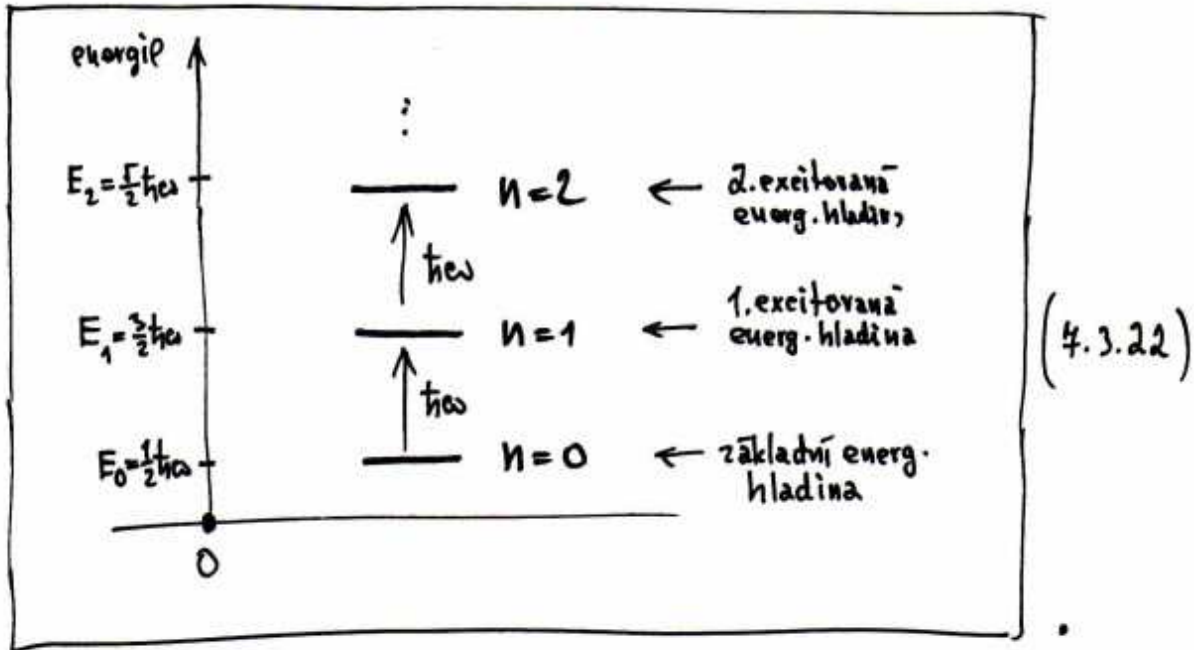
energetické spektrum kvantového harmonického oscilátoru

n "oscilátorové kvantové číslo"

$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ energie "nulových oscilací".

Kvantový oscilátor, na rozdíl od klasického, nelze tedy zastavit, což je v souladu s HRN, neboť zastavení oscilátoru by znamenalo " $p=0$ přesně" $\Rightarrow \Delta p = 0 \xrightarrow{\text{HRN}} \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p} \rightarrow \infty$, takže oscilátor by nemohl oscilovat v omezeném prostoru.

Grafické znázornění energetického spektra (4.3.21) vypadá následovně;



Energetické spektrum je kvantované a jeho únikátní zvláštností je, že je ekvidistantní, tj. mezi libovolnými dvěma sousedními energ. hladinami je konstantní rozdíl $\hbar\omega$.

Kvantový oscilátor tedy může vyzařovat či přijímat energii jen v celých násobcích elementárního kvanta energie o velikosti:

$$\hbar\omega = \frac{h}{2\pi} \omega = h \cdot \underbrace{\frac{\omega}{2\pi}}_v = h \cdot \nu \quad (4.3.23)$$

(viz Planckova kvantová hypotéza)

Z toho vidíme, jak hluboce obsažná a vnitřně konzistentní je Schrödingerova rovnice (a její důsledky), neboť při její aplikaci na konkrétní problém stacionárních stavů harmonického oscilátoru dostáváme pouhými matematickými operacemi základní fyzikální předpoklad, který stál u zrodu všech úvah vedoucích k této rovnici.

Závěrem se ještě podíváme na prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu kvantového harm. oscilátoru.

To dostaneme z vlnových funkcí (7.3.15), tj.

$$\rho_n(y) = |\psi_n(y)|^2 = e^{-y^2} |h_n(y)|^2$$

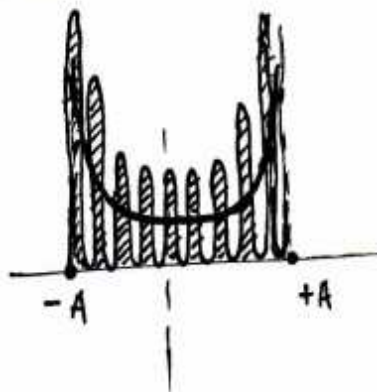
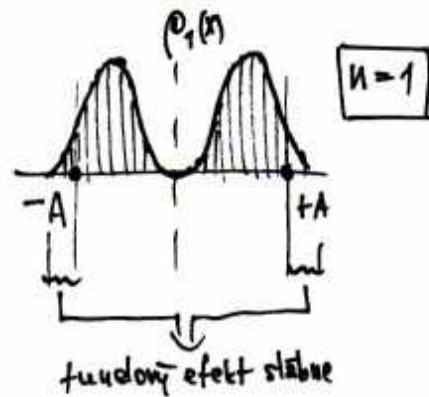
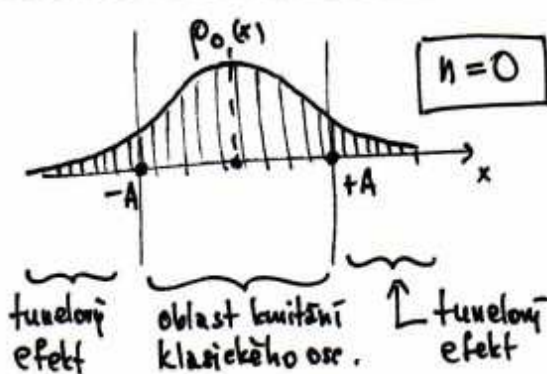
y ... vztah (7.3.9)

h_n(y) ... polynomy (7.3.14)

$$h_0(y) = 1 ; h_1(y) = 2y ; h_2(y) = 4y^2 - 2 ;$$

$$h_3(y) = 8y^3 - 12y$$

(7.3.24)



$n = \text{velké}$
 vysocí excitovaný stav kvantového oscilátoru (tunelový efekt mizí, střední hodnota $\rho_n(x)$ kopíruje klasické rozložení pravděpodobnosti)

(7.3.25)



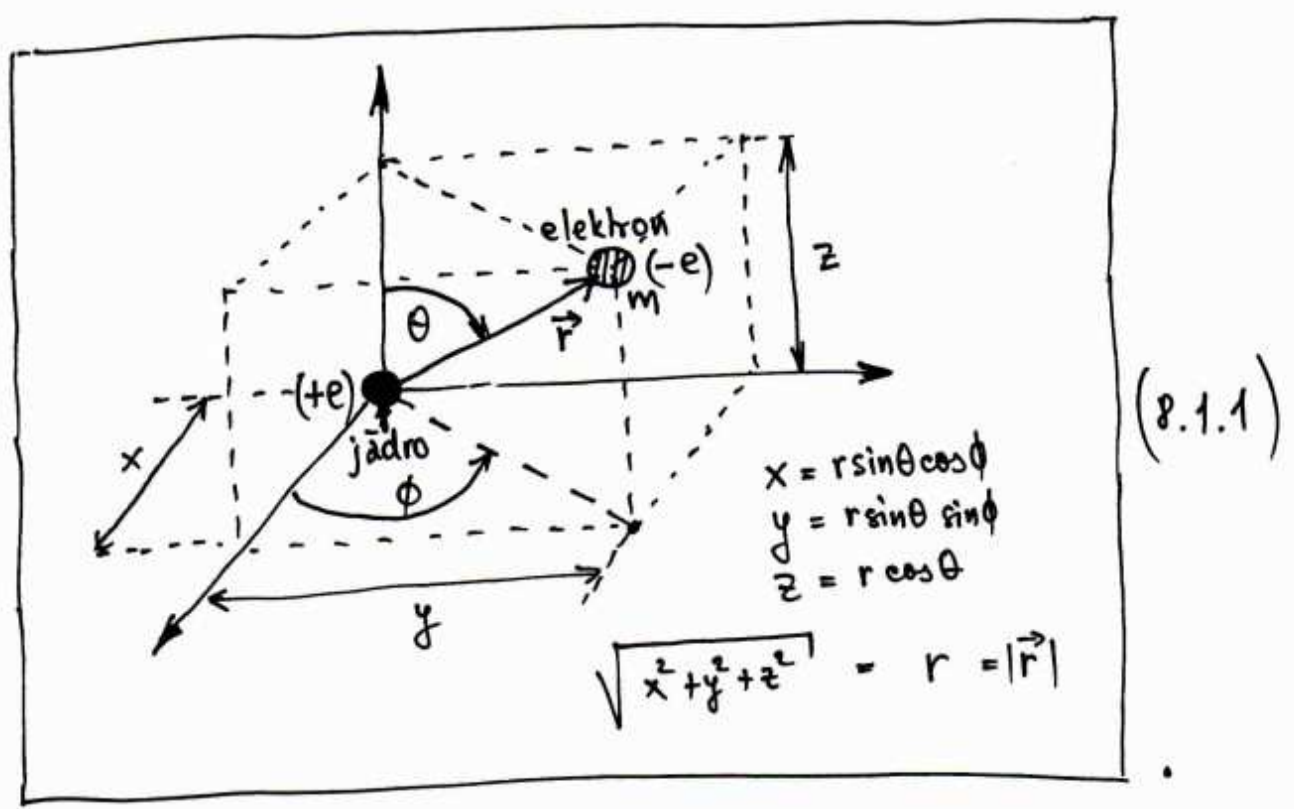
8. TÝDEN

ATOM VODÍKU

8.1 Kvantová čísla a jejich interpretace

Doposud jsme se zabývali pouze jednodimenzionálními, tedy velmi hypotetickými kvantovými systémy, ať už to byl mikroobjekt v různých typech potenciálu nebo harmonický oscilátor.

Nyní přejdeme ke skutečně reálnému, třidimenzionálnímu kvantovému systému – atomu vodíku.



Hamiltonův operátor elektronu $\{-e, m\}$ v elektrostatickém poli jádra $(+e)$ je:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)}_{\hat{E}_{kin}} + \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(+e) \cdot (-e)}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}}}_{\hat{E}_{pot} = U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})} \quad (8.1.2)$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\Delta \text{ (Laplaceův operátor)}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}} \quad (8.1.3)$$

Vlnové funkce a energie stacionárních stavů elektronu v atomu vodíku hledáme jako charakteristické funkce a hodnoty Hamiltonova operátoru (8.1.3), tj.

$$\hat{H} \underbrace{\psi(x, y, z)}_{\substack{\text{vlnové funkce} \\ \text{stacionárních} \\ \text{stavů}}} = E \cdot \underbrace{\psi(x, y, z)}_{\substack{\text{energie stacionárních stavů}}} \quad (8.1.4)$$

Díky sférické symetrii operátoru potenciální energie

$$\hat{E}_{\text{pot}} = U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{\hat{r}} \quad (8.1.5)$$

je výhodně (nikoli však nutně) řešit rovnici (8.1.4) ve sférických souřadnicích (r, θ, ϕ) .

Vlnovou funkci $\psi(x, y, z)$ hledáme proto ve tvaru:

$$\psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \phi) = \underbrace{R(r)}_{\substack{\text{radiální} \\ \text{část} \\ \text{vln. funkce}}} \cdot \underbrace{Y(\theta, \phi)}_{\substack{\text{úhlová} \\ \text{část} \\ \text{vln. funkce}} \quad (8.1.6)$$

Transformací Laplaceova operátoru Δ , vystupujícího v Hamiltoniánu (8.1.3), do sférických souřadnic dostaneme:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda}(\theta, \phi) \quad (8.1.7)$$

kde

$$\hat{\Lambda}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \quad (8.1.8)$$

Legendrův sférický úhlový operátor

Rovnice (8.1.4) má pak tvar:

$$\left\{ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \hat{\Lambda}(\theta, \phi) \right]}_{\Delta} - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}}_{U(r)} \right\} \underbrace{\left(R(r) Y(\theta, \phi) \right)}_{\psi(r, \theta, \phi)} = E \cdot \underbrace{\left(R(r) Y(\theta, \phi) \right)}_{\psi(r, \theta, \phi)} \quad (8.1.9)$$

Rovnice (8.1.9) je parciální diferenciální rovnice 2. řádu, jejíž obecně řešení umí najít matematika.

Fyzika musí ze všech možných řešení vybrat pouze ta, která splňují podmínky kladené na vlnové funkce mikroobjektů, tj. konečnost, spojitost, hladkost a v případě úhlových funkcí ještě také jednoznačnost, tj. např. $Y(\theta+2\pi, \phi+2\pi) = Y(\theta, \phi)$. Aplikace těchto podmínek na obecně řešení parc. dif. rovnice (8.1.9) vede k následujícím výsledkům:

$$E = - \frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

▽
⊙
;

(8.1.10)

$$R(r) = R_{nl}(r)$$

Laguerrův polynom
řádu n stupně l

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

▽
⊙
;

(8.1.11)

$$Y(\theta, \phi) = P_{lm}(\theta) e^{iM\phi}$$

Legendrův polynom
řádu l stupně M

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$M = \underbrace{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l}_{(2l+1) \text{ hodnot}}$$

▽
⊙
•

(8.1.12)

Detailní informace o Laguerrových a Legendrových polynomech lze najít v každé dobré matematické učebnici speciálních funkcí.

Z výrazů (8.1.11) a (8.1.12) plyne, že vlnové funkce stacionárních stavů elektronu v atomu vodíku jsou charakterizovány třemi kvantovými čísly \underline{n} , \underline{l} , \underline{M} :

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{n\ell M}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) \cdot \underbrace{P_{\ell M}(\theta)}_{Y_{\ell M}(\theta, \phi)} \cdot e^{iM\phi}$$

$Y_{\ell M}(\theta, \phi)$
sférická funkce
řádu $\underline{\ell}$, stupně \underline{M}

(8.1.13)

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$M = \underbrace{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l}_{(2l+1)}$$

Jako příklad uvedme explicitní tvary vln. funkcí pro $\underline{n=1}$ a $\underline{n=2}$:

$$\underline{n=1} \Rightarrow l=0 \Rightarrow M=0$$

$$\psi_{000}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

↑↑↑
n l M

vlnová funkce základního stavu
atomu vodíku
(nezávisí na θ a ϕ)

(8.1.14)

$$a = \frac{\epsilon_0 h^2}{e^2 \pi m} = 5.3 \times 10^{-11} [\text{m}]$$

$$\underline{n=2} \Rightarrow l = \begin{cases} 0 & \Rightarrow M=0 \\ 1 & \Rightarrow M=-1, 0, +1 \end{cases}$$

dostaneme tedy 4 různé vlnové funkce :



(8.1.15)

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2}\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$$

↑ ↑ ↑
n l m

$$\psi_{210}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \cdot \frac{r}{a} \cdot e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \cos\theta$$

↑ ↑ ↑
n l m

$$\psi_{21+1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \cdot \frac{r}{a} \cdot e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \sin\theta \cdot e^{i\phi}$$

↑ ↑ ↑
n l m

$$\psi_{21-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \cdot \frac{r}{a} \cdot e^{-\frac{r}{2a}} \cdot \sin\theta \cdot e^{-i\phi}$$

↑ ↑ ↑
n l m

(8.1.16)

vlnové funkce 4 různých excitovaných stavů atomu vodíku, odpovídajících kvantovému číslu n=2.

Pokud jde o energie stacionárních stavů elektronu v atomu vodíku, z výrazu (8.1.10) máme:

$$E = E_n = - \left(\frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 h^2} \right) \cdot \frac{1}{n^2} = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{n^2}$$

(8.1.17)

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots \infty$$

což je naprosto stejný výsledek, jaký dával už Bohrův model atomu. Avšak pozor! V Bohrově modelu byla danému kvantovému číslu n přiřazena 1 energetická hladina a této hladině 1 stacionární stav elektronu v atomu. Nyní, po vyřešení Schrödingerovy rovnice pro stacionární stavy se situace jeví jako daleko složitější:

K danému kvantovému číslu \underline{n} lze totiž najít

$$\underline{n} \text{ různých } \underline{l} \quad \left(l = \underbrace{0, 1, 2, \dots, n-1}_n \right)$$

a ke každému \underline{l} $(2l+1)$ různých \underline{M} $(M = \underbrace{-l, \dots, +l}_{2l+1})$.

Celkem tedy máme:

$$\boxed{\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2} \quad (8.1.18)$$

různých vlnových funkcí $\underline{\psi_{n,l,M}}$ s toutéž energií $\underline{E_n}$.

Říkáme, že energetická hladina $\underline{E_n}$ je n^2 -násobně degenerovaná a číslo (n^2) se nazývá stupeň degenerace energetické hladiny E_n :

$$\underline{n=1} \quad \dots \quad E_n = E_1 = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{1^2} = \underline{\underline{-13.6 \text{ [eV]}}}$$

$$\underline{n^2 = 1^2 = 1} \quad \dots \quad \text{říkáme, že hladina je} \\ \text{nedegenerovaná}$$

↓
existuje jediný stac. stav,
jeho vlnová fce viz (8.1.14)

(8.1.19)

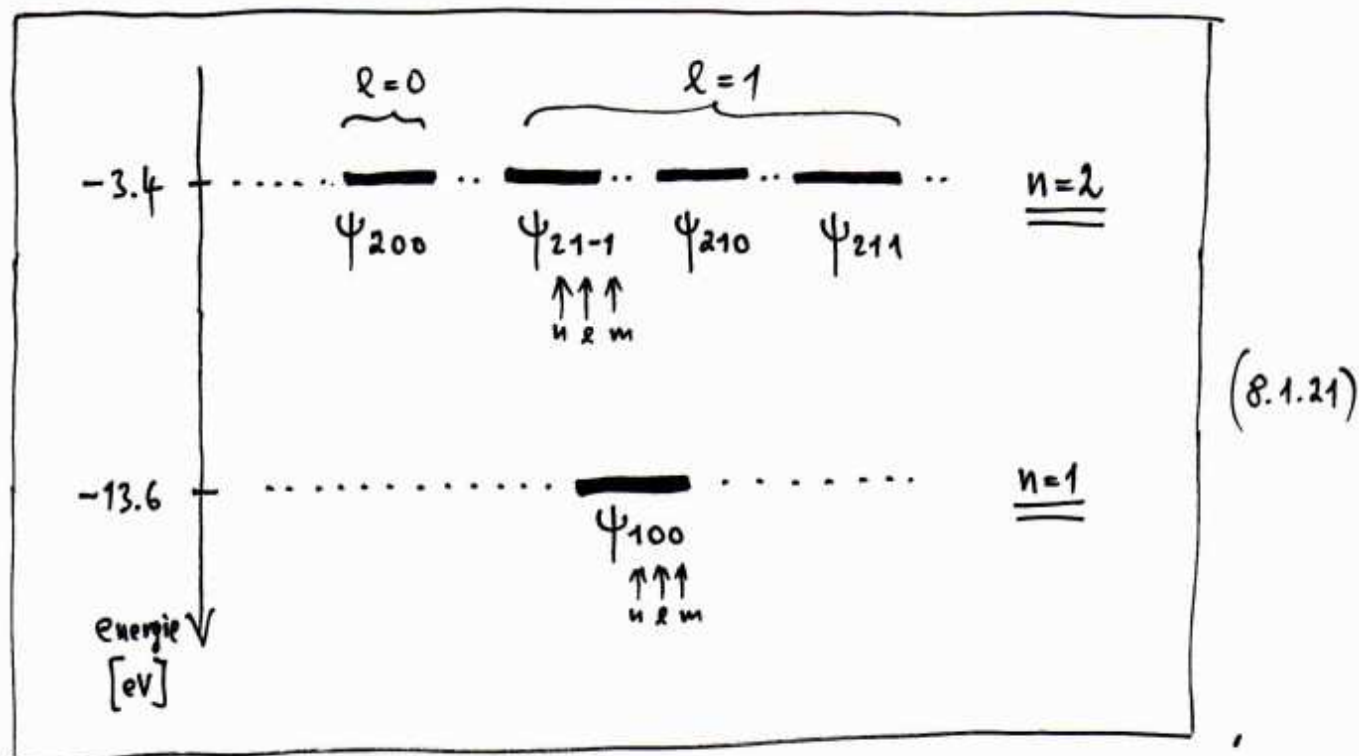
$$\underline{n=2} \quad \dots \quad E_n = E_2 = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{2^2} = \underline{\underline{-3.4 \text{ [eV]}}}$$

$$\underline{n^2 = 2^2 = 4} \quad \dots \quad \text{hladina je } \underline{4\text{-násobně}} \\ \text{degenerovaná}$$

↓
existují čtyři stacionární stavy,
jejich vlnové funkce viz (8.1.16)

(8.1.20)

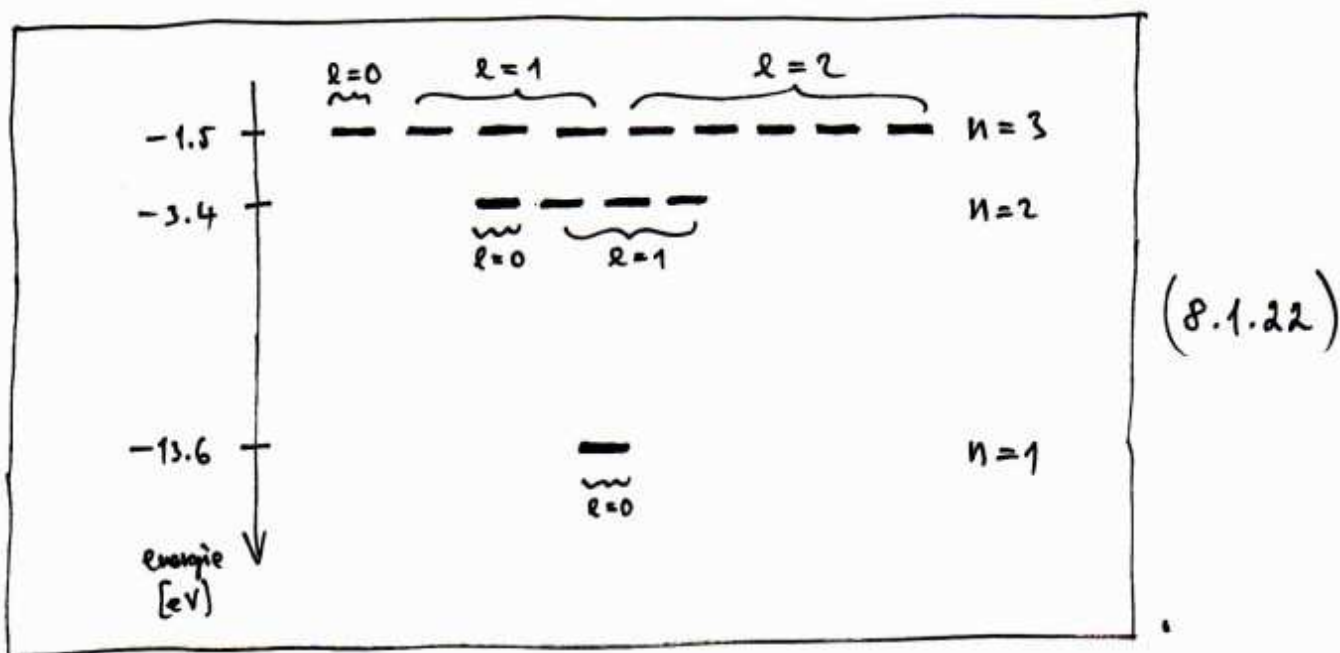
Graficky můžeme situaci zobrazit následovně



Pro $n=3$ je už stupeň degenerace $n^2 = 3^2 = \underline{9}$:

$$\underline{n=3} \Rightarrow l = \left. \begin{array}{l} 0 \Rightarrow M=0 \\ 1 \Rightarrow M=-1, 0, +1 \\ 2 \Rightarrow M=-2, -1, 0, 1, 2 \end{array} \right\} \underline{9} ,$$

či existuje 9 různých stavů s energií $E_3 \hat{=} \underline{-1.5 [eV]}$:



Různé stacionární stavy s toutéž energií E_n můžeme zřejmě rozlišit pomocí kvantových čísel \underline{l} a \underline{m} .

Podobně jako kvantové číslo n udává energi elektronu ve stacionárních stavech ($E_n = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{n^2}$), budou kvantová čísla \underline{l} a \underline{m} udávat nějaké 2 jiné fyzikální veličiny elektronu, které budou s jeho energií ve stac. stavech současně měřitelné.

Podle teorému o současně měřitelnosti fyz. veličin (viz 5.3.21)

to znamená, že operátory takových veličin musejí dávat nulový komutátor s Hamiltonovým operátorem (8.1.3).

Explicitním výpočtem lze prověřit, že tento požadavek splňují následující 2 operátory :

① operátor jedné složky momentu hybnosti elektronu, např.

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (8.1.23)$$

(viz (5.2.40) ($x_1=x, x_2=y, x_3=z$))

Volba z-ové složky je kouvená, můžeme stále dobře zvolit x-ovou nebo y-ovou, ale vždy jen jednu ze všech tří x, y, z , nikoli 2 z nich, natož pak všechny 3.

Plak totiž :

$$\left. \begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \neq 0 \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \neq 0 \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \neq 0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{tj. žádně dvě} \\ \text{složky momentu} \\ \text{hybnosti} \\ \text{nejsou současně} \\ \text{měřitelné} \end{array} \quad (8.1.24)$$

② operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti elektronu :

$$\hat{L}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(\hat{y} \frac{\partial}{\partial z} - \hat{z} \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\hat{z} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{x} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} \frac{\partial}{\partial x} \right)$$
(8.1.25)

Transformaci operátorů \hat{L}_z dle (8.1.23) a \hat{L}^2 dle (8.1.25) do sférických souřadnic dostaneme:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$\hat{\Lambda}(\theta, \phi)$$

Legendrův sférický
úhlový operátor (8.1.8)

(8.1.26)

Působíme-li těmito operátory na vlnové funkce

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot \underbrace{P_{lm}(\theta) \cdot e^{im\phi}}_{Y_{lm}(\theta, \phi)}$$
(8.1.27)

a známe-li matematické vlastnosti $\hat{\Lambda}(\theta, \phi)$ a $P_{lm}(\theta)$, snadno zjistíme, že platí;

$$\hat{L}_z \psi_{n\ell m} = \hbar M \cdot \psi_{n\ell m} \quad \text{!} \quad (8.1.28)$$

$$\hat{L}^2 \psi_{n\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \cdot \psi_{n\ell m} \quad \text{!} \quad (8.1.29)$$

což znamená, že vlnová funkce $\psi_{n\ell m}$ stacionárního stavu elektronu s energií E_n je SOUČASNĚ:

- charakteristickou funkcí operátoru \hat{L}_z příslušnou charakteristické hodnotě $\hbar M$ (viz (8.1.28));
- charakteristickou funkcí operátoru \hat{L}^2 příslušnou charakteristické hodnotě $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ (viz (8.1.29)).



Z fyzikálního hlediska to znamená, že:

Současně s energií elektronu ve stacionárním stavu $\psi_{n\ell m}$
 ($E_n = (-13.6 \text{ [eV]}) \frac{1}{n^2}$; $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$)

můžeme také změřit

- kvadrát velikosti jeho momentu hybnosti:

$$|\vec{L}|^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1); \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad \text{!} \quad (8.1.30)$$

charakteristická hodnota
operátoru \hat{L}^2 dle (8.1.29)

- přímět jeho momentu hybnosti do jedné z os, např. z:

$$\hat{L}_z = \hbar M \quad ; \quad M = \underbrace{-\ell, \dots, +\ell}_{2\ell+1}$$

charakteristická hodnota
operátoru \hat{L}_z dle (8.1.28)

Vidíme tedy, že u elektronu v atomu vodíku je kvantována nejen energie:

$$E_n = (-13.6 \text{ [eV]}) \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

energetické (hlavní) kvantové číslo

(8.1.31)

ale také velikost momentu hybnosti:

$$|\vec{L}| = \sqrt{|\vec{L}|^2} = \sqrt{\hbar^2 l(l+1)} = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

momentové (orbitální) kvantové číslo

(8.1.32)

a také průmět momentu hybnosti do určitého směru \underline{z} (daného obvykle vnějším magnetickým polem):

$$L_z = \hbar M$$

$$M = -l, \dots, +l$$

(2l+1)

M = směrové (magnetické) kvantové číslo

(8.1.33)

Příklad :

$$n = 3$$

$$E_3 = -1.5 \text{ eV}$$

$$\downarrow$$

$$l = 0, 1, 2$$

$$a) \underline{l=0} \Rightarrow \underline{M=0}$$

$$\downarrow \qquad \searrow$$

$$\underline{|\vec{L}|} = \hbar \sqrt{0(0+1)} = \underline{0} \qquad \underline{L_z} = \hbar \cdot 0 = \underline{0}$$

(8.1.34)

Ve stacionárním stavu charakterizovaném kvantovými čísly $\underline{n=3}$, $\underline{l=0}$, $\underline{M=0}$, tj. popsaném vlnovou funkcí $\underline{\psi_{300}}$ nemá elektron žádný moment hybnosti.

$$b) \underline{l=1} \Rightarrow M = \begin{matrix} +1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$$

$$\downarrow \qquad \downarrow$$

$$\underline{|\vec{L}|} = \hbar \sqrt{1 \cdot (1+1)} = \underline{\hbar \sqrt{2}} \qquad \underline{L_z} = \begin{matrix} +\hbar \\ 0 \\ -\hbar \end{matrix}$$

Ve 3 stacionárních stavech charakterizovaných kvantovými čísly $\underline{n=3}$, $\underline{l=1}$, $\underline{M = +1, 0, -1}$, tj. popsaných vlnovými funkcemi $\underline{\psi_{311}}$, $\underline{\psi_{310}}$, $\underline{\psi_{31-1}}$,

(8.1.35)

má elektron moment hybnosti o velikosti $\underline{\hbar \sqrt{2}}$, který však může v prostoru zaujímat jen takové polohy, že jeho průmět do povušho směru, daného např. vnějším magnetickým polem, jsou pouze $\underline{+\hbar}$, $\underline{0}$, $\underline{-\hbar}$.

$$\underbrace{\psi_{311}}_{+\hbar} \quad \underbrace{\psi_{310}}_0 \quad \underbrace{\psi_{31-1}}_{-\hbar}$$

$$c) \quad \underline{l=2} \quad \Rightarrow \quad M = \begin{matrix} +2 \\ +1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{matrix}$$

$$\downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow$$

$$\underline{|\vec{L}|} = \hbar \sqrt{2(2+1)} = \underline{\hbar \sqrt{6}} \qquad \underline{L_z} = \begin{matrix} +2\hbar \\ +\hbar \\ 0 \\ -\hbar \\ -2\hbar \end{matrix}$$

(8.1.36)

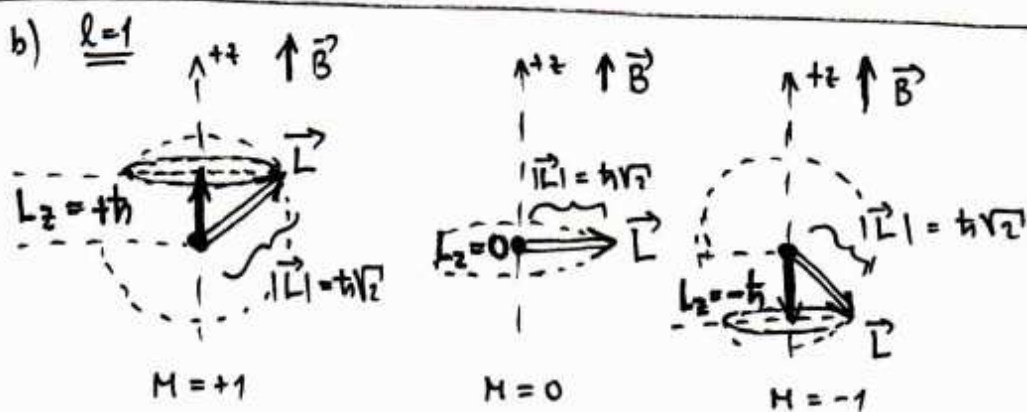
V těchto 5 stacionárních stavech ($n=3, l=2, M=-2, -1, 0, 1, 2$) má elektron moment hybnosti o velikosti $\underline{\hbar \sqrt{6}}$ a jednotlivě stavy se od sebe liší pěti možnými průměty momentu hybnosti do daného směru:

$$\underline{(+2\hbar)}, \underline{(+\hbar)}, \underline{0}, \underline{(-\hbar)}, \underline{(-2\hbar)}$$

Zobrazíme-li tyto poznatky graficky, vypadá situace následovně:

$$a) \quad \underline{l=0} : \quad \bullet \quad \vec{L} = \vec{0}$$

(8.1.37)



(8.1.38)

$$l=1$$

Na kvantových číslech n, l, M závisí nejen energie, velikost a průmět momentu hybnosti elektronu, ale také vlnová funkce ψ_{nlm} , a tudíž i prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu:

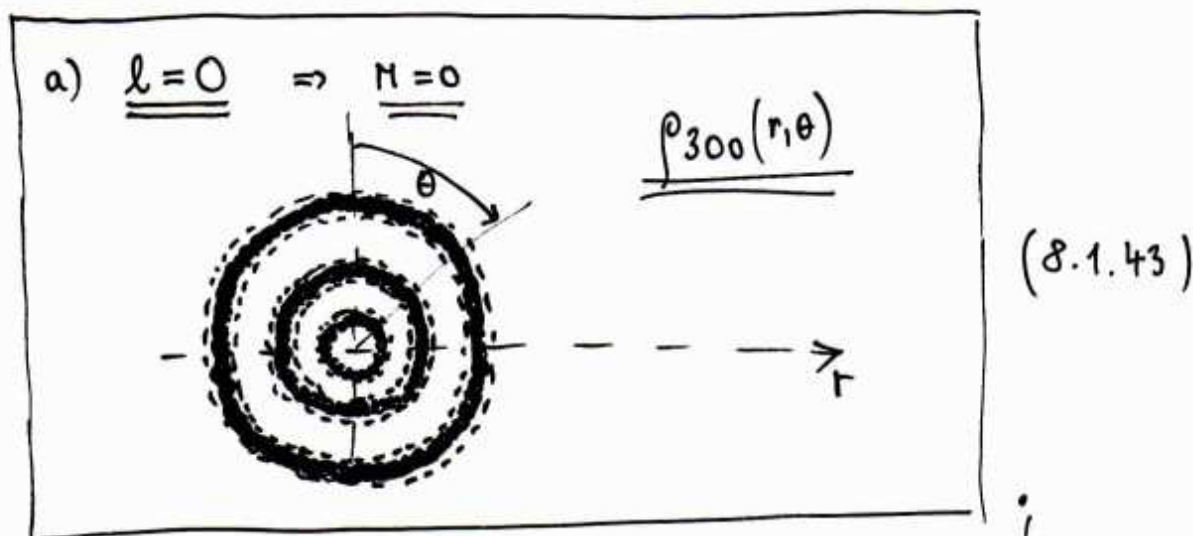
$$\begin{aligned} \rho_{nlm}(r, \theta, \phi) &= |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 = |R_{nl}(r) \cdot P_{lm}(\theta) e^{iM\phi}|^2 \\ &= |R_{nl}(r)|^2 \cdot |P_{lm}(\theta)|^2 \cdot \underbrace{|e^{iM\phi}|^2}_1 \end{aligned} \quad (8.1.41)$$

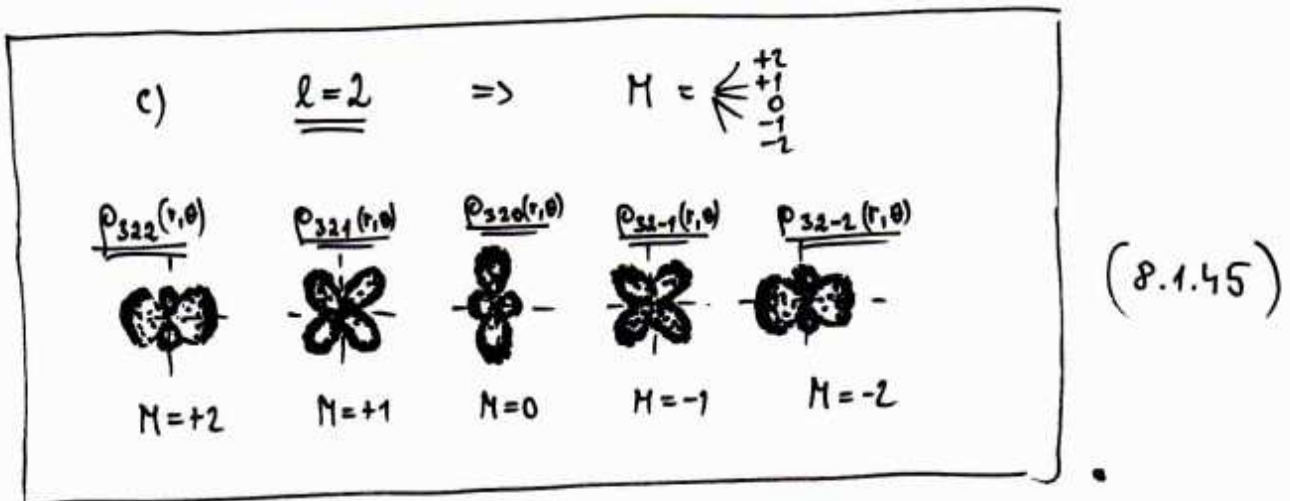
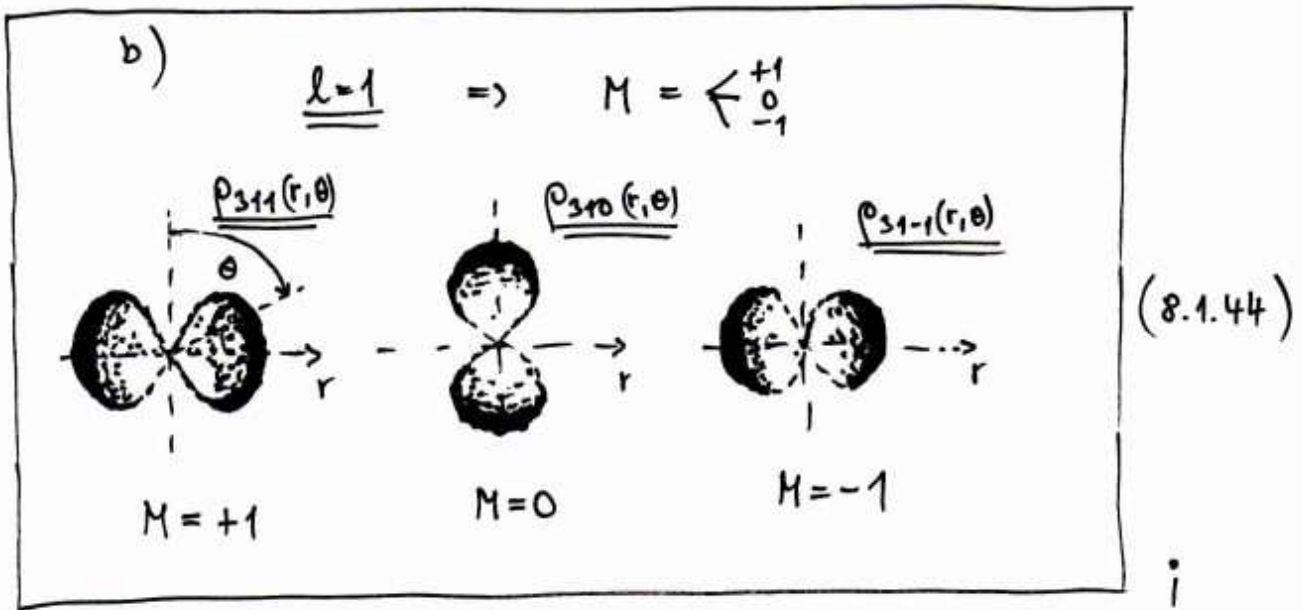
↓

$$\nabla \quad \rho_{nlm}(r, \theta) = |R_{nl}(r)|^2 \cdot |P_{lm}(\theta)|^2 \quad \nabla \quad (8.1.42)$$

Prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu nezávisí tedy na úhlu ϕ , takže stačí najít rozložení pravděpodobnosti v ploše (r, θ) a výsledek rotovat kolem osy z o úhel $\phi = 2\pi$.

Pro ilustraci vezměme již uvažovaný případ $n=3$.





Pozu: Všechny 9 stacionárních stavů uvedených v (8.1.43-45) má stejnou energii $\underline{E_3} = (-13.6 \text{ eV}) \cdot \frac{1}{3^2} \sim \underline{-1.5 \text{ eV}}$.

Z historických důvodů se stacionární stavy s $\underline{l} = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ označují symboly $\underline{s}, \underline{p}, \underline{d}, \underline{f}, \underline{g}, \dots$

Kvantové číslo \underline{n} se předřazuje před tento symbol.

Stacionární stav (8.1.43) se tedy označuje $\underline{3s}$.

Stacionární stavy (8.1.44) nesou označení $\underline{3p}$.

Konečně stac. stavy (8.1.45) jsou stavy $\underline{3d}$.

(8.1.46)

8.2 Objev a vlastnosti spinu elektronu.

Podrobnější zkoumání stacionárních stavů elektronu ve vodíkovém atomu umístěném ve vnějším magnetickém poli o indukci \vec{B} přineslo fyzikům velké překvapení. Z rozboru Zeemanova jevu víme, že v magnetickém poli získá elektron přídavnou energii

$$\underline{\underline{\Delta E_{\text{mag}}}} = -(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = -\left(-\frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B}\right) = \frac{e}{2m} \underbrace{|\vec{B}|}_{B} \underbrace{|\vec{L}| \cos \phi}_{L_z} = \underline{\underline{\frac{eB}{2m} L_z}} \quad (8.2.1)$$

Z (8.1.30) dále víme, že průmět $\underline{\underline{L_z}}$ je kvantován podle předpisu:

$$\begin{aligned} L_z &= \hbar M \\ M &= \underbrace{-l, \dots, +l}_{(2l+1)} \end{aligned} \quad (8.2.2)$$

$\underline{\underline{M}}$... magnetické kvantové číslo

Dosažením (8.2.2) do (8.2.1) dostaneme:

$$\Delta E_{\text{mag}} = \frac{eB}{2m} \cdot \underbrace{\hbar M}_{L_z} = M \cdot \underbrace{\left(\frac{eh}{2m}\right)}_{\mu = 9.27 \times 10^{-24} [\text{JT}^{-1}]} \cdot B \quad (8.2.3)$$

Bohrův magneton

Celková energie elektronu v mag. poli pak tedy je :

$$E_{n\ell M}(B) = E_n + \underbrace{M \cdot \mu \cdot B}_{\Delta E_{\text{mag}}} \quad (8.2.4)$$

$\mu = \text{Bohrův magneton}$
 $M = \underbrace{-\ell, \dots, +\ell}_{(2\ell+1)}$
 $\ell = 0, 1, \dots, n-1$



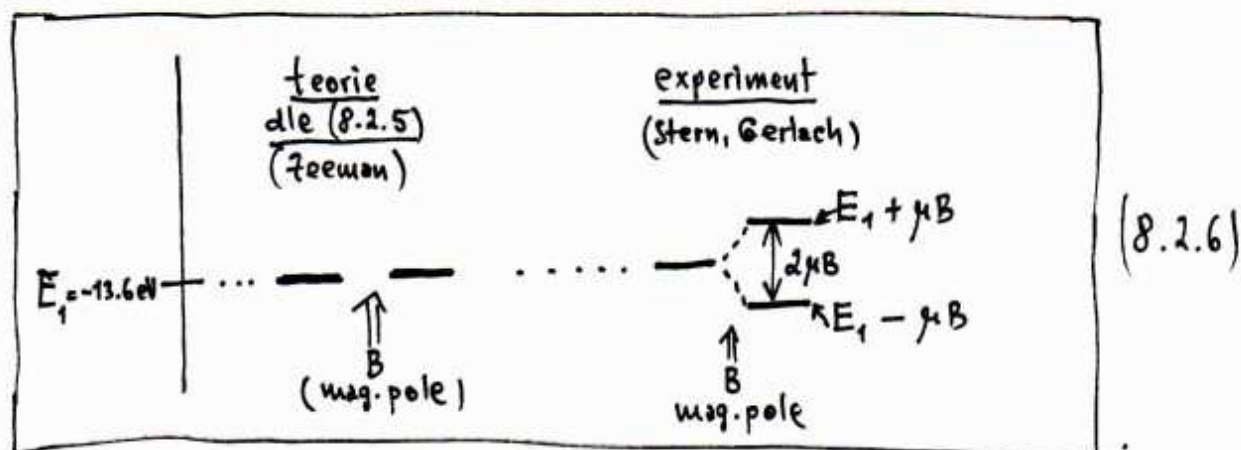
Speciálně pro všechny s-stavy ($\ell=0$, n libovolně)
odtud máme:

$$\underline{E_{n00}(B)} = E_n + 0 \cdot \mu \cdot B = \underline{E_n} \quad (8.2.5)$$

tj. energie všech s-stavů by se vložením do magnetického pole neměla změnit.

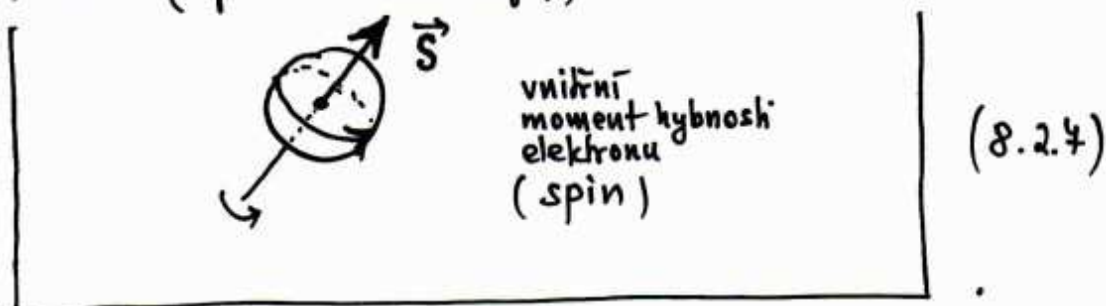
Experiment však říká, že tomu tak není.

Vezměme např. 1s-stav, tj. základní stav atomu vodíku :



Rozpor je zřejmý a říká, že elektron je ovlivňován magnetickým polem i tehdy, když má nulový moment hybnosti související s jeho pohybem v atomu.

Znamená to, že elektron musí mít nějaký vnitřní moment hybnosti, nemající s jeho pohybem v atomu nic společného. Tento vnitřní moment hybnosti se pro názornost začal nazývat SPIN na základě "klasické" představy elektronu jako rotujícího vřeteva (spin = vřeteno (angl.)).



V analogii s kvantovými čísly \underline{l} a \underline{M} , určujícími \underline{L} a L_z , byla zavedena spinová kvantová čísla \underline{s} a \underline{m} , a to podle předpisu:

$$|\vec{S}| = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad (8.2.8)$$

$$S_z = \hbar \cdot m$$

$$m = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

(2s+1) hodnot

(8.2.9)

Experiment říká, že energ. hladina E_j se v magnetickém poli rozštěpí přesně na dvě hladiny. Z toho plyne, že spinově magnetické kvantové číslo \underline{m} v (8.2.9) musí nabývat právě dvou hodnot. Protože obecný počet hodnot \underline{m} je 2s+1, máme tak podmínku:

$$\boxed{2s+1 = 2} \quad (8.2.10)$$

↓

$$\blacktriangledown \cdot \boxed{s = \frac{1}{2}} \cdot \blacktriangledown \cdot (8.2.11)$$

Pro velikost spinu pak podle (8.2.8) máme:

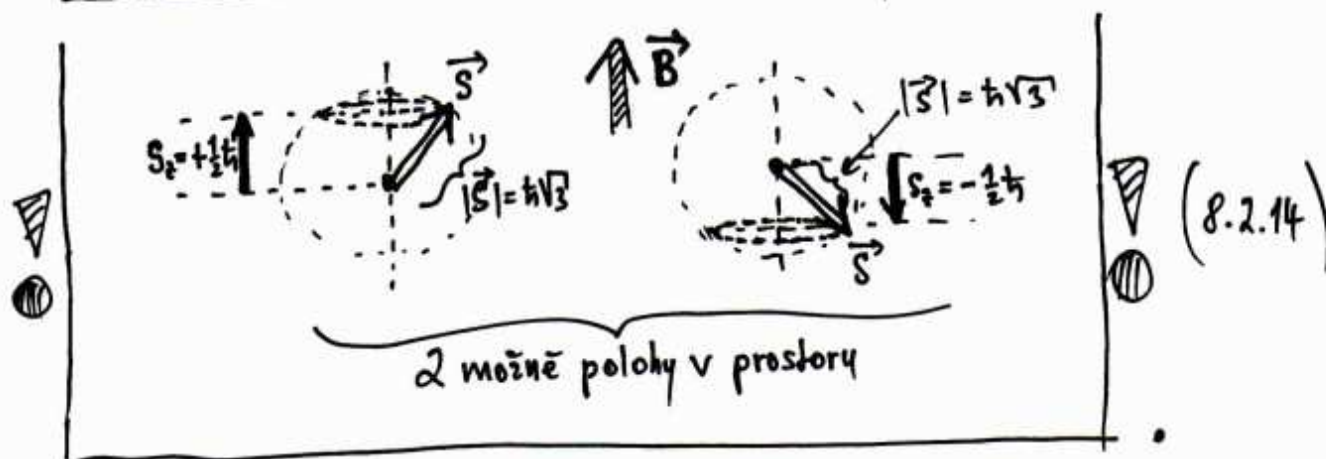
$$\boxed{|\vec{S}| = \hbar \sqrt{\underbrace{\frac{1}{2}}_s \cdot (\underbrace{\frac{1}{2} + 1}_s)} = \underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar\sqrt{3}}} \quad (8.2.12)$$

Pro průměty spinu do směru mag. pole (= osy z)
dále podle (8.2.9) dostaneme:

$$\left. \begin{array}{l} S_z = \hbar \cdot m \\ m = \underbrace{-\frac{1}{2}}_{-s}, \quad (\underbrace{-\frac{1}{2} + 1}_{+s}) = \underbrace{+\frac{1}{2}}_{+s} \end{array} \right\} \Rightarrow S_z = \begin{array}{l} +\frac{1}{2}\hbar \\ -\frac{1}{2}\hbar \end{array} \quad (8.2.13)$$

2 hodnoty

Prostorově kvantování spinu elektronu vypadá tedy následovně:



S uvážením spinu má vlnová funkce elektronu v atomu vodíku tvar:

$$\Psi_{n\ell M s m}(r, \theta, \phi) = \underbrace{\psi_{n\ell M}(r, \theta, \phi)}_{\text{prostorová část}} \cdot \underbrace{\chi_{s m}}_{\text{spinová část}}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$M = \underbrace{-\ell, \dots, +\ell}_{2\ell+1}$$

$$s = \frac{1}{2}$$

$$m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

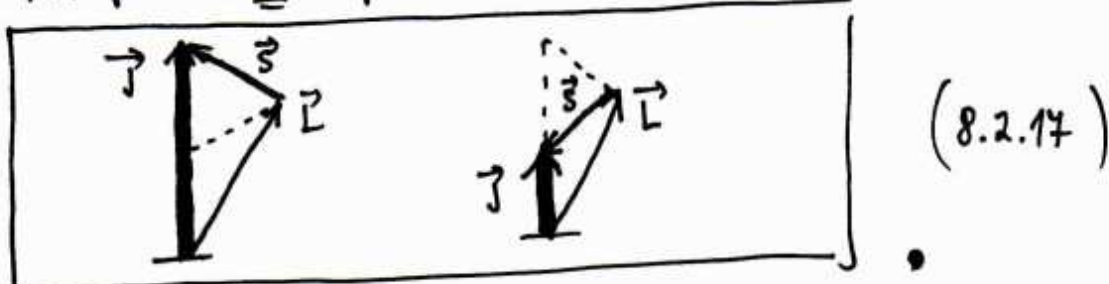
(8.2.15)

Protože ke každé trojici kvantových čísel $(n\ell M)$ existují 2 různé dvojice hodnot (sm) , tj. $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ a $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$, vidíme, že uvážením spinu se stupeň degenerace energetické hladiny E_n zdvojnásobuje, tj. má hodnotu $2n^2$, a nikoli n^2 , jak bylo spočteno dříve bez uvážení spinu.

Orbitální moment hybnosti $\underline{\underline{L}}$ a spin $\underline{\underline{S}}$ elektronu se s uvážením prostorového kvantování skládají na celkový moment hybnosti:

$$\underline{\underline{J}} = \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{S}} \quad (8.2.16)$$

Při pevném $\underline{\underline{L}}$ např. dostaneme:



Celkový moment hybnosti elektronu $\underline{\underline{J}}$ dle (8.2.16) se kvantuje zavedením nových kvantových čísel $(\underline{\underline{j}}, \underline{\underline{M_j}})$ dle předpisu:

$$\begin{aligned}
 |\underline{\underline{J}}| &= \hbar \sqrt{j(j+1)} \\
 j &= \begin{cases} |l + \frac{1}{2}| \\ |l - \frac{1}{2}| \end{cases} \\
 l &= 0, 1, 2, \dots, n-1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_z &= \hbar M_j \\
 M_j = M + m &= -j, -j+1, \dots, j-1, j \\
 &\quad \uparrow \qquad \underbrace{\hspace{10em}} \\
 &\quad (\pm 1/2) \qquad (2j+1) \text{ hodnot}
 \end{aligned}$$

(8.2.18)

Hodnota kvantového čísla $\underline{\underline{j}}$ se udává vpravo dole

u symbolu stavu, např. $2p_{1/2}$.

$\uparrow \uparrow \uparrow$
 $n \quad l=1 \quad j$

Jako příklad si ukažme klasifikaci a počty stavů pro $\underline{\underline{n=2}}$:

$$\underline{\underline{n=2}} \Rightarrow l = \begin{matrix} 0 \\ 1 \end{matrix} \quad \nabla$$

$$\text{a) } \underline{\underline{l=0}} \Rightarrow j = \begin{cases} |0 + \frac{1}{2}| = \frac{1}{2} \\ |0 - \frac{1}{2}| = \frac{1}{2} \end{cases}$$

\uparrow
 (8.2.18)

$$\Downarrow$$

$2S_{1/2}$ - stavy

$$\uparrow \uparrow \uparrow$$

$n \quad l=0 \quad j$

Takové $\underline{\underline{2S_{1/2}}}$ - stavy jsou dva ($2j+1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = \underline{\underline{2}}$).

(8.2.19)

b) $\underline{\underline{l=1}} \Rightarrow$ (8.2.18) $j = \begin{cases} |1 + \frac{1}{2}| = \frac{3}{2} \\ |1 - \frac{1}{2}| = \frac{1}{2} \end{cases}$

$2p_{3/2}$ - stavy

$\uparrow \uparrow \uparrow j=3/2$
 $n \quad l=0$

počet těchto stavů je:
 $2j+1 = (2 \cdot \frac{3}{2} + 1) = \underline{\underline{4}}$

$2p_{1/2}$ - stavy

$\uparrow \uparrow \uparrow j=1/2$
 $n \quad l=0$

počet těchto stavů je:
 $2j+1 = (2 \cdot \frac{1}{2} + 1) = \underline{\underline{2}}$

(8.2.20)

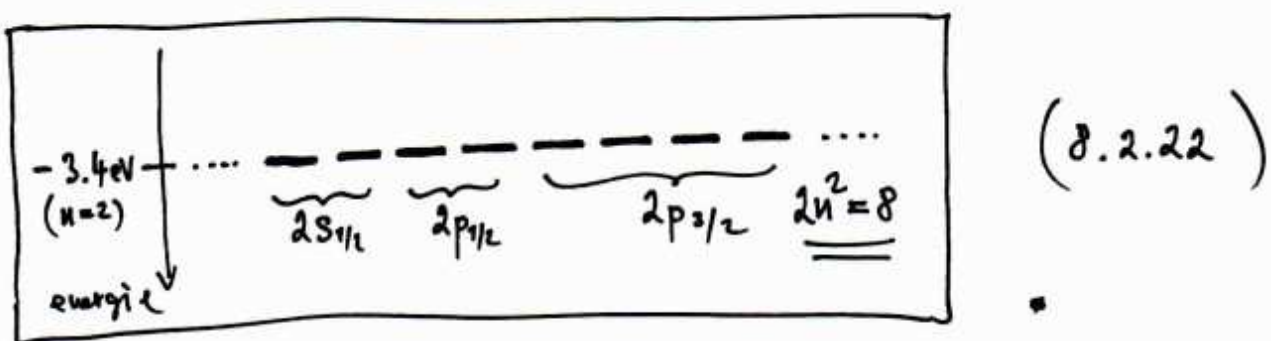
Celkový počet stavů s energií $\underline{\underline{E_{n=2}}}$ tedy je:

$$\underbrace{2}_{2s_{1/2}} + \underbrace{2}_{2p_{1/2}} + \underbrace{4}_{2p_{3/2}} = \underline{\underline{8}} = 2 \cdot \underbrace{2^2}_n$$

(8.2.21)

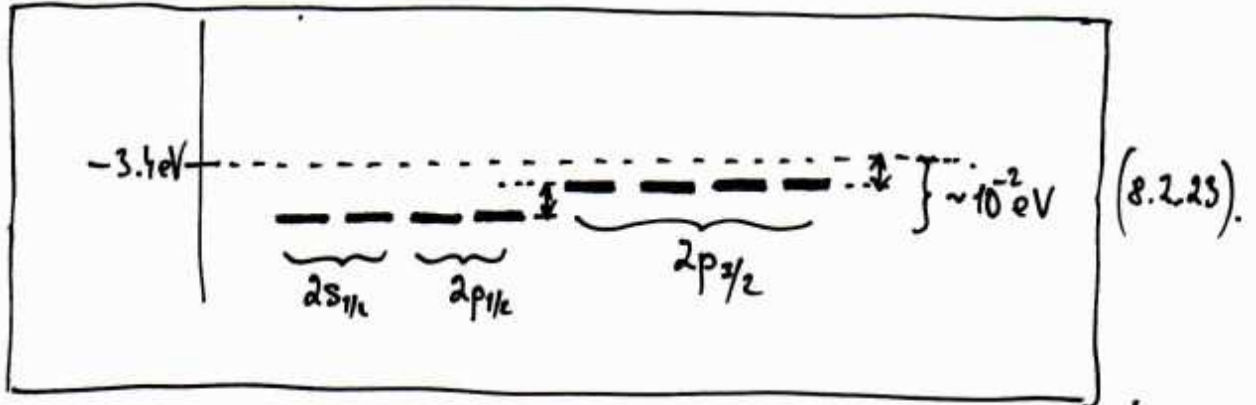
stupeň degenerace hladiny $E_{n=2}$ s uvažováním spinu.

Při vypnutém magnetickém poli by tedy situace měla vypadat takto:

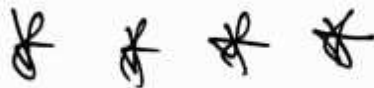


S postupným zdokonalováním experimentální techniky, když už začalo být možné rozlišovat řádově setiny eV, se však ukázalo, že příroda této jednoduše "šchrödingerovské" představě říká NE!

Experimentem zjištěná realita je komplikovanější, a síce taková:

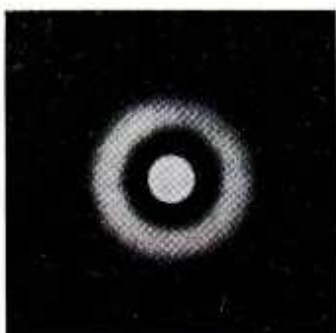


Tato distrepance mezi experimentem a výsledky řešení Schrödingerovy rovnice je zřejmě signálem, že Schrödingerova rovnice není "the whole story of the microworld" a je nutno zabývat se jejím zobrazením.





1s, $m = 0$



2s, $m = 0$



2p, $m = 0$



2p, $m = \pm 1$



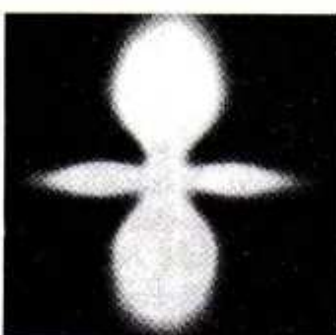
3s, $m = 0$



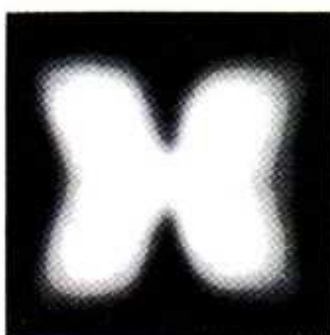
3p, $m = 0$



3p, $m = \pm 1$



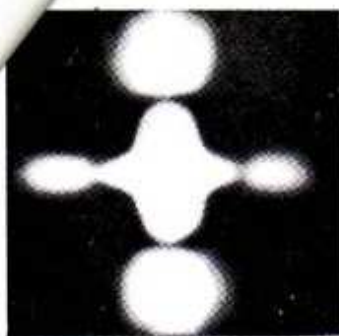
3d, $m = 0$



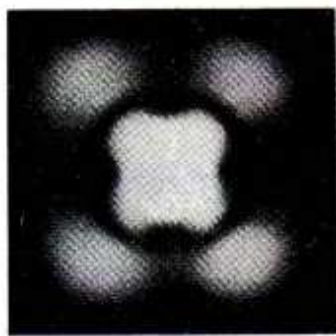
3d, $m = \pm 1$



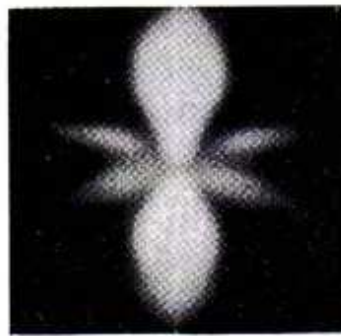
3d, $m = \pm 2$



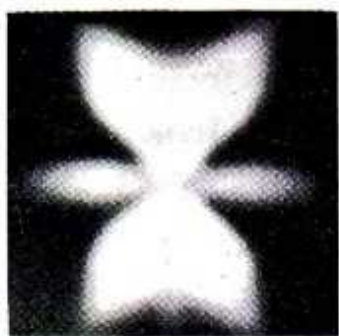
4d, $m = 0$



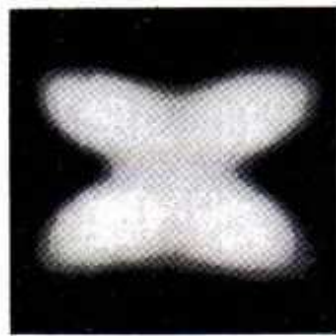
4d, $m = \pm 1$



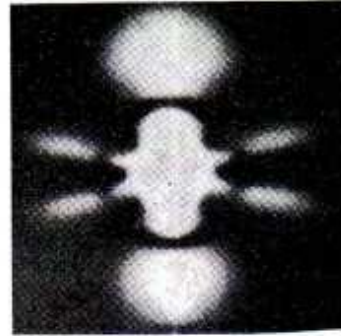
4f, $m = 0$



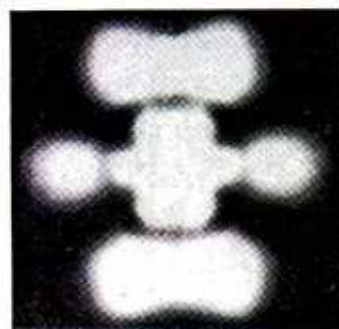
4f, $m = \pm 1$



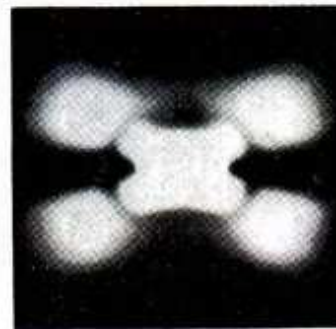
4f, $m = \pm 2$



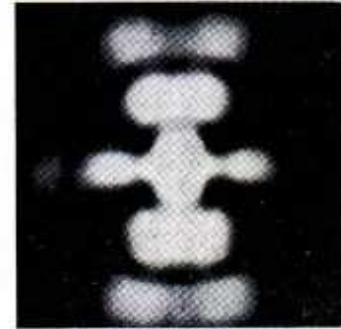
5f, $m = 0$



5f, $m = \pm 1$



5f, $m = \pm 2$



6f, $m = \pm 1$

3-6 Rozdělení hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu ve vodíkovém atomu odpovídající hlavním kvantovým číslům $n = 1, 2, 3$ a některým vybraným stavům $n = 4, 5, 6$. Zobrazení je modelové, vzniklo fotografováním světelného zdroje, který napodoboval vypočtený pohyb elektronu. Prostorové rozložení hustoty pravděpodobnosti dostaneme rotací kolem svislé osy. Na obrázcích není dodrženo měřítko, s rostoucím n roste rozměr přibližně n^2 krát.

9. TÝDEN

9.1 - Relativistické zobecnění Schrödingerovy rovnice

Základem relativistického zobecnění SR je náhrada operátoru

$$\hat{E}_{kin} = \frac{(\hat{\vec{P}})^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \quad (9.1.1)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

operátorem relativistické energie

$$\hat{E}_{rel} = \sqrt{c^2 (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + (m_0 c^2)^2} \quad (9.1.2)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{(\hat{\vec{P}})^2}$
↑
klidová energie

Relativistický hamiltonián mikroobjektu má tedy tvar :

$$\hat{H}_{rel} = \hat{E}_{rel} + \hat{E}_{pot} = \sqrt{c^2 (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + (m_0 c^2)^2} + V(x, y, z) \quad (9.1.3)$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{\text{operátor relativistické energie (tj. kinetické + klidové)}}$
 $\underbrace{\hspace{5em}}_{\text{operátor potenciální energie}}$

$\underbrace{\hspace{25em}}_{\text{operátor celkové energie}}$

zásadní problém je nyní v tom, že relativistický hamiltonián \hat{H}_{rel} dle (9.1.3) není lineární (příčinou je odmocnina $\sqrt{\quad}$), což odporuje prvnímu postulátu kvantové fyziky mikrosvěta, tj. postulátu o popisu fyzikálních veličin (viz 5. týden).

Ačkoli tento problém odrazil řadu význačných vědců, nedokázal odradit mladého doktora Paula Diraca, který provedl následující odvážnou linearizaci :

$$\sqrt{c^2(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + (m_0c)^2} = c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + \hat{\beta} m_0c^2 \quad (9.1.4)$$

kde $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z, \hat{\beta}$ jsou neznámé operátory, které je nutno najít tak, aby rovnice (9.1.4), umocněná na druhou, dávala identitu, tj. aby platilo :

$$c^2(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + (m_0c)^2 = (c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + \hat{\beta} m_0c^2)(c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + \hat{\beta} m_0c^2) \quad (9.1.5)$$

Roznásobením pravé strany (9.1.5) a porovnáním se stranou levou dostal Dirac následující podmínky :

$$(\hat{\alpha}_x)^2 = (\hat{\alpha}_y)^2 = (\hat{\alpha}_z)^2 = (\hat{\beta})^2 = \hat{1}$$

$$\hat{\alpha}_x \hat{\alpha}_y + \hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_x = \hat{0}$$

$$\hat{\alpha}_x \hat{\alpha}_z + \hat{\alpha}_z \hat{\alpha}_x = \hat{0}$$

$$\hat{\alpha}_y \hat{\alpha}_z + \hat{\alpha}_z \hat{\alpha}_y = \hat{0}$$

$$\hat{\alpha}_x \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_x = \hat{0}$$

$$\hat{\alpha}_y \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_y = \hat{0}$$

$$\hat{\alpha}_z \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_z = \hat{0}$$

$\hat{0}$... nulový operátor
(při působení na cokoliv dává nulu)

(9.1.6)

Dirac ukázal, že nejjednodušší (ireducibilní) řešení soustavy operátorových rovnic (9.1.6) má tvar následujících komplexních 4x4 matic:

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.1.4)$$

DIRACOVY MATICE

Užitím Diracovy linearizace (9.1.4) můžeme tedy relativistický hamiltonián mikroobjektu (9.1.3) vyjádřit ve tvaru:

$$\underline{\underline{\hat{H}_{rel}}} = c(\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + \hat{\alpha}_y \hat{p}_y + \hat{\alpha}_z \hat{p}_z) + \hat{\beta} m_0 c^2 + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \hat{1} =$$

$$= \underline{\underline{-i\hbar c \left(\hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \hat{1}}}; \quad (9.1.8)$$

$\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z, \hat{\beta} \dots$ Diracovy matice (9.1.4);

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

RELATIVISTICKÝ HAMILTONIÁN MIKROOBJEKTU
(= operátor celkové energie mikroobjektu, který se řídí zákonitostmi speciální teorie relativity)

Užitím relativistického hamiltoniánu (9.1.8) nyní už snadno najdeme relativistické zobenění Schrödingerovy rovnice :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) = \underbrace{\hat{H}_{rel}}_{(9.1.8)} \psi(x, y, z, t) \quad (9.1.9)$$

⇓

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) = \left[-i\hbar c \left(\hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(x, y, z, t) \quad (9.1.10)$$

DIRACOVA ROVNICE

Přítomnost 4x4 - matic $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z, \hat{\beta}, \hat{1}$ v Diracově rovnici znamená, že vlnová funkce $\psi(x, y, z, t)$ má tvar :

$$\psi(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z, t) \\ \psi_2(x, y, z, t) \\ \psi_3(x, y, z, t) \\ \psi_4(x, y, z, t) \end{pmatrix} \quad (9.1.11)$$

Diracova rovnice je tedy systemem 4 vzájemně parciálních diferenciálních rovnic 1. řádu pro 4 nezávislé funkce $\psi_i(x, y, z, t)$; $i = 1, 2, 3, 4$. Ve srovnání se Schrödingerovou rovnicí máme tedy 4-násobný počet dif. rovnic, které nejsou na sobě nezávislé, ale jsou nižšího řádu.

Takové jsou tedy důsledky uvážení zákonitostí speciální relativity pro mikroobjekt při současném zachování prvního postulátu kvantové fyziky prostřednictvím Diracovy linearizace (9.1.4).

Pokud jde o stacionární stavy relativistického mikroobjektu, ty hledáme podobně jako v případě SR:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \quad (9.1.12)$$

Dosažením (9.1.12) do Diracovy rovnice (9.1.10) máme:

$$\underbrace{\left[-i\hbar c \left(\hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \beta m_0 c^2 + V(\vec{r}, t) \right]}_{\hat{H}_{rel}} \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z) \quad (9.1.13)$$

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \\ \psi_3(x, y, z) \\ \psi_4(x, y, z) \end{pmatrix}$$

"Bezčasová" Diracova rovnice (= problém charakteristických hodnot (E) a charakteristických funkcí ($\psi(x, y, z)$) relativistického hamiltoniánu \hat{H}_{rel}).

Pro volný relativistický mikroobjekt ($V(\vec{r}, t) = 0$) mají funkce $\psi_k(x, y, z)$; $k=1, 2, 3, 4$ tvar rovinných vln:

$$\psi_k(x, y, z) = A_k \cdot e^{\frac{i}{\hbar} (p_x \cdot x + p_y \cdot y + p_z \cdot z)} \quad (9.1.14)$$

$k=1, 2, 3, 4$ $A_k \dots$ konstanty

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} (p_x \cdot x + p_y \cdot y + p_z \cdot z)} \quad (9.1.15)$$

vlnová funkce stacionárních stavů volného relativistického mikroobjektu

Výraz (9.1.15) můžeme přepsat ve tvaru :

$$\psi(x, y, z) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} \cdot \left\{ A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + A_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + A_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

čtyři různé vnitřní kvantové stavy
volného relativistického mikroobjektu ;

$A_1, A_2, A_3, A_4 \dots$ čtyři libovolné konstanty (máme 4 dif.
rovnice 1. řádu !).

(9.1.16)

Vnitřní kvantový stav znamená, že nijak nesouvisí s pohybem
mikroobjektu, ten je popsán funkcí $e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)}$ před závorkou.

9.2 Spin jako relativistický kvantový efekt

Jako relativistický mikroobjekt nyní uvažujeme elektron v atomu vodíku :

$$V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(+e) \cdot (-e)}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}} \quad (9.2.1)$$

Jeho relativistický hamiltonián bude mít podle (9.1.8) tvar :

$$\hat{H}_{rel} = -i\hbar c \left(\hat{a}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{a}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{a}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}} \quad (9.2.2)$$

Jak víme z minulého týdne, příslušný nerelativistický hamiltonián

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}} \quad (9.2.3)$$

měl tu vlastnost, že dával nulový komutátor s jednou složkou
a kvadrátem momentu hybnosti elektronu, což umožňovalo, že
operátoru

současně s energií nerelativistického elektronu bylo možno měřit i velikost a jeden prvek momentu hybnosti elektronu, daného jeho pohybem v potenciálu (9.2.1).

Podívejme se nyní, zda toto platí i v případě relativistického elektronu, popsaného hamiltoniánem (9.2.2).

Přímocárý, leč poněkud zdoluhavý výpočet, dává:

$$[\hat{L}_x, \hat{H}_{rel}] = \hbar^2 c \left(\hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial z} - \hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial y} \right) \neq \hat{0}$$

$$[\hat{L}_y, \hat{H}_{rel}] = \hbar^2 c \left(\hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial x} - \hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial z} \right) \neq \hat{0}$$

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_{rel}] = \hbar^2 c \left(\hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \neq \hat{0}$$

↓

$$[\hat{L}^2, \hat{H}_{rel}] \neq \hat{0},$$

kde $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ je operátor kvadrátu momentu hybnosti.

(9.2.4)

Vidíme tedy, že s energií relativistického elektronu v atomu vodíku není současně měřitelná ani velikost ani žádná složka jeho momentu hybnosti spjatá s pohybem v atomu.

To ovšem by znamenalo narušení sférické symetrie atomu vodíku - jeho fyz. vlastnosti by např. závisely na tom, z jakého úhlu ϕ je pozorujeme a měříme, což se experimentálně nepozoruje.

A zde opět vstupuje do hry geniální myšlení P. Diraca, který se hlouběji zamyslel nad strukturou komutátorů (9.2.4) a začal uvažovat takto:

Operátor \hat{H}_{rel} je lineární jak v "prostorových" operátorech $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$,
tak v "maticových" operátorech $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$.

Jeho komutací s "pouze prostorovými" operátory $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ dostáváme
operátory, které jsou opět lineární jak v "prostorových", tak "maticových"
operátorech (viz (9.2.4)).

Vzruká tudíž logické očekávání, že komutací \hat{H}_{rel} s nějakým
vhodným "pouze maticovým" operátorem by měl vzniknout operátor
s analogickou strukturou.

Dirac po vytrvalém bádání zjistil, že takovými vhodnými
"pouze maticovými" operátory jsou :

$$\hat{\Sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} ; \hat{\Sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} ; \hat{\Sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.2.5)$$

Povíme si, že tyto operátory mají analogickou strukturu
jako Diracovy matice $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$ dle (9.1.7), pouze
2x2 bloky $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ jsou nyní nitoli na vedlejší, ale
hlavní diagonále.

Opět přimočarým, ale zdouhavým výpočtem, se lze přivědit,
že pro komutátory operátorů $\hat{\Sigma}_x, \hat{\Sigma}_y, \hat{\Sigma}_z$ dle (9.2.5)
s relativistickým hamiltoniánem \hat{H}_{rel} dle (9.2.2) platí:

$$\begin{aligned} [\hat{\Sigma}_x, \hat{H}_{rel}] &= -2\hbar c \left(\hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial z} - \hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ [\hat{\Sigma}_y, \hat{H}_{rel}] &= -2\hbar c \left(\hat{\alpha}_z \frac{\partial}{\partial x} - \hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ [\hat{\Sigma}_z, \hat{H}_{rel}] &= -2\hbar c \left(\hat{\alpha}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\alpha}_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (9.2.6)$$

Po rovnání pravých a levých stran (9.2.4) a (9.2.6) dostaneme:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{H}_{rel}] &= -\frac{1}{2}\hbar [\hat{\Sigma}_x, \hat{H}_{rel}] \\ [\hat{L}_y, \hat{H}_{rel}] &= -\frac{1}{2}\hbar [\hat{\Sigma}_y, \hat{H}_{rel}] \\ [\hat{L}_z, \hat{H}_{rel}] &= -\frac{1}{2}\hbar [\hat{\Sigma}_z, \hat{H}_{rel}] \end{aligned} \quad (9.2.7)$$

↓

$$\begin{aligned} [\hat{\vec{L}}, \hat{H}_{rel}] &= -\frac{1}{2}\hbar [\hat{\vec{\Sigma}}, \hat{H}_{rel}] \\ \hat{\vec{L}} &= (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) ; \quad \hat{\vec{\Sigma}} = (\hat{\Sigma}_x, \hat{\Sigma}_y, \hat{\Sigma}_z) \end{aligned} \quad (9.2.8)$$

Sestrojíme-li nyní operátor

$$\hat{\vec{J}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\vec{L}} + \frac{1}{2}\hbar \hat{\vec{\Sigma}} \quad (9.2.9)$$

pak pro jeho komutátor s \hat{H}_{rel} díky relaci (9.2.8) dostaneme:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{[\hat{\vec{J}}, \hat{H}_{rel}]}} &= [(\hat{\vec{L}} + \frac{1}{2}\hbar \hat{\vec{\Sigma}}), \hat{H}_{rel}] = \\ &= [\hat{\vec{L}}, \hat{H}_{rel}] + \frac{1}{2}\hbar [\hat{\vec{\Sigma}}, \hat{H}_{rel}] = \hat{0} \\ &\quad \underbrace{-\frac{1}{2}\hbar [\hat{\vec{\Sigma}}, \hat{H}_{rel}]}_{\text{dle (9.2.8)}} \\ &\quad \hat{0} \end{aligned} \quad (9.2.10)$$

Máme tedy :

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}_{\text{rel}} \right] = \hat{\mathbf{0}} \quad (9.2.11)$$

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\hbar \hat{\Sigma}$$

což znamená, že

S celkovou energií relativistického elektronu v atomu vodíku není současně měřitelný jeho moment hybnosti $\hat{\mathbf{L}}$ související s pohybem, ale nějaký jiný moment hybnosti

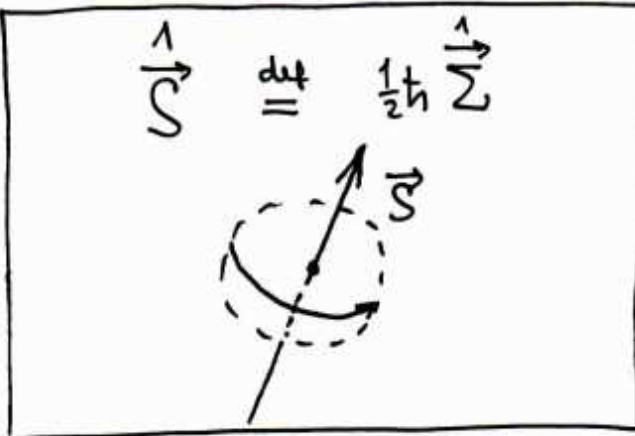
$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\hbar \hat{\Sigma}$$

moment hybnosti
daný pohybem
elektronu v atomu
(orbitální moment
hybnosti)

???

Moment hybnosti popraný operátorem $\left(\frac{1}{2}\hbar \hat{\Sigma}\right)$ má správný fyzikální rozměr (\hbar je elementární kvantum momentu hybnosti s rozměrem $[Js = kg\,m^2\,s^{-1}]$, $\hat{\Sigma}$ jsou bezrozměrné matice čísel). Na rozdíl od momentu hybnosti $\hat{\mathbf{L}}$, který souvisí s pohybem elektronu v prostoru, moment hybnosti $\left(\frac{1}{2}\hbar \hat{\Sigma}\right)$ je vnitřní charakteristikou elektronu (podobně jako náboj či klidová hmotnost), která s pohybem v prostoru nemá nic společného ($\hat{\Sigma}$ jsou matice čísel!).

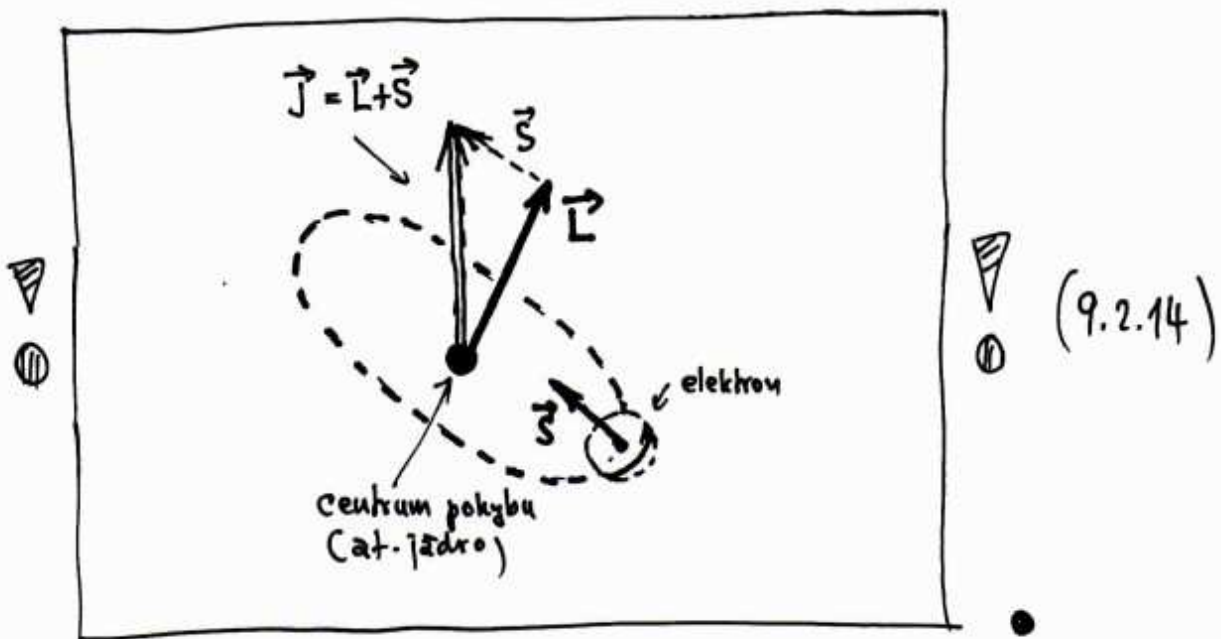
Moment hybnosti popsany operátorem ($\frac{1}{2}\hbar \vec{\Sigma}$) nazýváme vnitřní moment hybnosti nebo též spin příslušného mikroobjektu a označujeme symbolem \vec{S} a Příslušný operátor pak je:

$$\vec{S} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\hbar \vec{\Sigma} \quad (9.2.13)$$


Operátor popisující vnitřní moment hybnosti (spin) mikroobjektu,

Vnitřní moment hybnosti (spin) je samozřejmě přítomen i u mikroobjektu, který je v klidu.

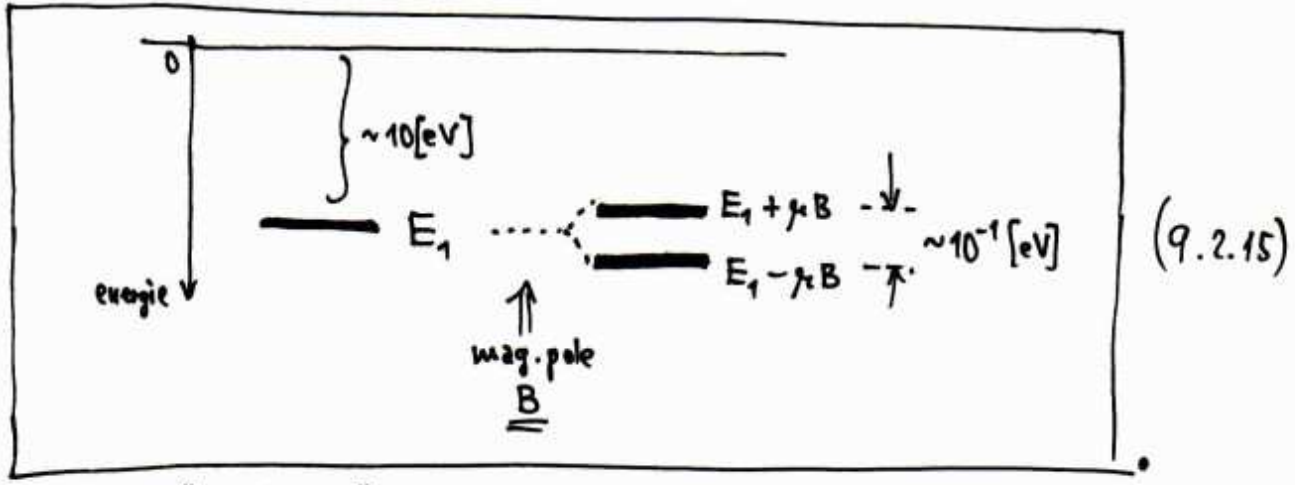
Pokud se mikroobjekt pohybuje v centrálním potenciálu (jako např. elektron v atomu H), má navíc i orbitální moment hybnosti \vec{L} , který se vektorově sčítá se spinem \vec{S} na celkový moment hybnosti \vec{J} :



Výše uvedeným matematickým postupem tak P. Dirac dospěl k nutnosti existence spinu elektronu jako logického důsledku jeho popisu pomocí relativistického hamiltoniánu \hat{H}_{rel} , a to dávno předtím, než byly provedeny příslušné experimenty, které spin objevily (viz Stern-Gerlachův experiment v předcházejícím týdnu).

Dirac vlastně říkal: "Matematika a principy kvantové fyziky mi dávají výsledek, že musí existovat nějaký vnitřní moment hybnosti elektronu (spin). Dokonce umím napsat operátor, který ho popisuje: $\hat{S} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\Sigma}$. Vážení experimentátoři, hledejte takový vnitřní moment hybnosti elektronu v atomu vodíku. Určitě existuje, pouze jste si ho dosud nevšimli."

A také že ano! Deset let trvalo, než po této Diracově prognóze se experimentální technika natolik zdokonalila, že již zmínění pánové Stern a Gerlach byli schopni objevit projevy spinu, jak bylo popsáno v minulém týdnu:



Velikost "roztěpení" energ. hladin je řádově procentu energie E_1 , takže není divu, že dokud někdo teoreticky nepředpověděl, že se jedná o fyzikální jev, bylo toto "roztěpení" zcela absorbováno v chybách měření. Stern a Gerlach však brali Diracovu předpověď vážně a cíleně zdokonalovali exp. techniku tak, až se jim podařilo prokázat příslušné rozštěpení jako fyz. jev mimo oblast statistických chyb měření a "objevit" tak Diracovu teoreticky předpovězený spin elektronu v atomu vodíku.

Podívejme se nyní na vlastnosti Diracova operátoru spinu

$$\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}\hbar \hat{\vec{\Sigma}} \quad (9.2.16)$$

① Spočteme $(\hat{\vec{S}})^2$:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{(\hat{\vec{S}})^2}} &= \left(\frac{1}{2}\hbar \hat{\vec{\Sigma}}\right)^2 = \frac{1}{4}\hbar^2 (\hat{\vec{\Sigma}})^2 = \frac{1}{4}\hbar^2 (\hat{\Sigma}_x^2 + \hat{\Sigma}_y^2 + \hat{\Sigma}_z^2) = \\ &= \frac{1}{4}\hbar^2 \cdot 3\hat{1} = \underline{\underline{\frac{3}{4}\hbar^2 \hat{1}}} \end{aligned} \quad (9.2.17)$$

↓
charakteristická hodnota operátoru $(\hat{\vec{S}})^2$ je

$$\frac{3}{4}\hbar^2$$

$$|\hat{\vec{S}}| = \sqrt{\frac{3}{4}\hbar^2} = \underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar\sqrt{3}}}$$

velikost
spinu

což je v souladu
s výsledky
Starn-Geirachova
exp. (viz minulý týden)

(9.2.18)

② Určíme charakt. hodnoty a funkce operátoru \hat{S}_z :

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\hbar \hat{\Sigma}_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 10 & 00 \\ 0-1 & 00 \\ 00 & 10 \\ 00 & 0-1 \end{pmatrix} \quad (9.2.19)$$

Standardním matematickým výpočtem (D.ev.!) snadno zjistíme :

Operátor \hat{S}_z dle (9.2.19) má

dvě charakteristické hodnoty $\underline{+\frac{1}{2}\hbar}$ a $\underline{-\frac{1}{2}\hbar}$ (9.2.20)

a každé z nich přísluší 2 různé charakt. funkce :

$$\begin{array}{l}
 S_z = +\frac{1}{2}\hbar \quad \left\{ \begin{array}{l} \chi_{+\frac{1}{2}}^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi_{+\frac{1}{2}}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array} \right. \\
 \\
 S_z = -\frac{1}{2}\hbar \quad \left\{ \begin{array}{l} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi_{-\frac{1}{2}}^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \right.
 \end{array} \quad (9.2.21)$$

jinými slovy :

$$\hat{S}_z \chi_{+\frac{1}{2}}^{(\pm)} = \left(+\frac{1}{2}\hbar\right) \cdot \chi_{+\frac{1}{2}}^{(\pm)}$$

$$\hat{S}_z \chi_{-\frac{1}{2}}^{(\pm)} = \left(-\frac{1}{2}\hbar\right) \cdot \chi_{-\frac{1}{2}}^{(\pm)}$$

Vidíme tedy, že :

- ① Průměty spinu elektronu do směru \underline{z} (= směru mag. pole) mohou být pouze $\underline{+\frac{1}{2}\hbar}$ a $\underline{-\frac{1}{2}\hbar}$.
- ② Ke každému průmětu spinu existují 2 různé spinové stavy $\underline{\chi^{(+)}}$ a $\underline{\chi^{(-)}}$.

(9.2.22)

Výsledek ① v (9.2.22) je plně v souladu s výsledky Stern-Gerlachova experimentu (viz minulý týden).

Výsledek ② v (9.2.22) pokládá zásadní otázku: čím se liší stavy relativistického mikroobjektu (elektronu) s tímtož průmětem spinu, popsané ale různými vektory.

Odpověď poskytne relativistický hamiltonián (9.1.8) pro volný mikroobjekt ($\nabla(\psi, \dot{\psi}) = 0$), který je navíc v klidu ($\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z \rightarrow 0$):

$$\boxed{\hat{H}_{\text{rel}}^0 = \hat{\beta} m_0 c^2} \quad (9.2.23)$$

hamiltonián relativistického volného mikroobjektu v klidu

Snadno zjistíme, že:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{rel}}^0 \chi_{+\frac{1}{2}}^{(+)} &= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\hat{\beta}} m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = (+m_0 c^2) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \hat{H}_{\text{rel}}^0 \chi_{+\frac{1}{2}}^{(-)} &= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\hat{\beta}} m_0 c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (-m_0 c^2) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.2.24)$$

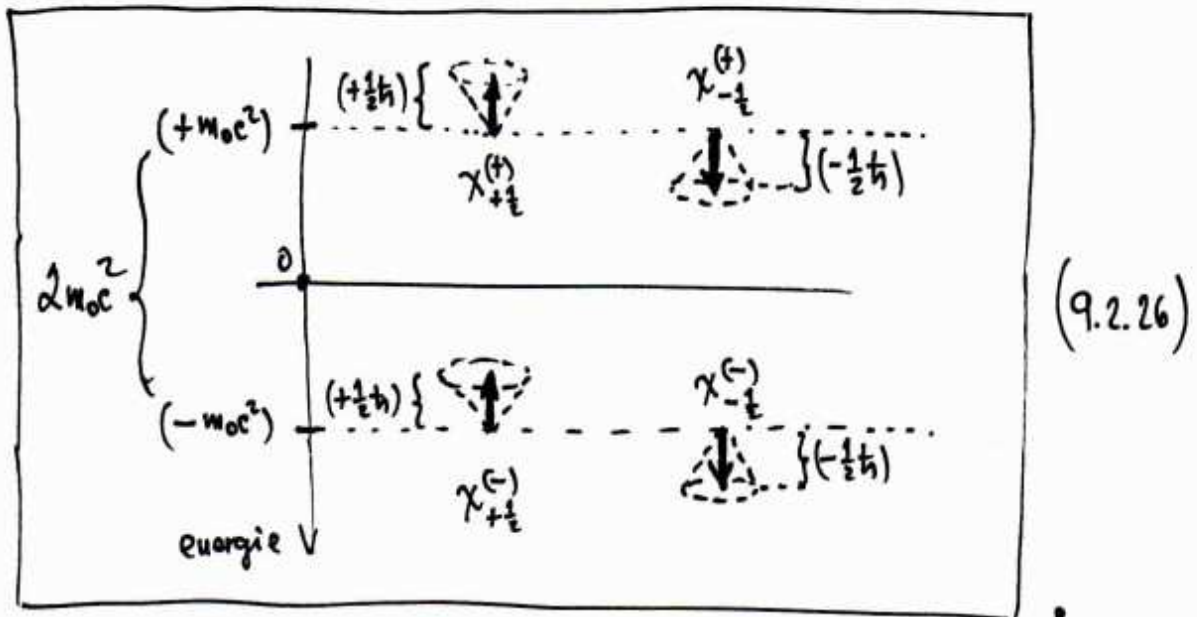
Vidíme tedy, že stavy $\chi_{+\frac{1}{2}}^{(+)}$ a $\chi_{+\frac{1}{2}}^{(-)}$ se stejným průmětem spinu ($+\frac{1}{2}\hbar$) se liší klidovou energií volného mikroobjektu.

Analogicky platí:

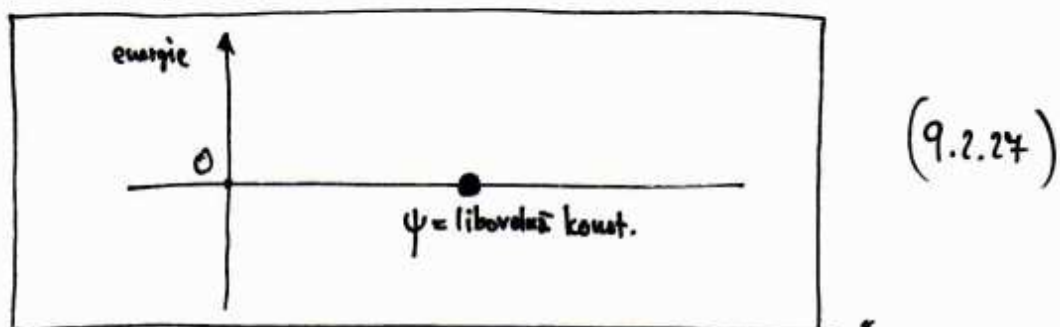
$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{rel}}^0 \chi_{-\frac{1}{2}}^{(+)} &= (+m_0 c^2) \cdot \chi_{-\frac{1}{2}}^{(+)} \\ \hat{H}_{\text{rel}}^0 \chi_{-\frac{1}{2}}^{(-)} &= (-m_0 c^2) \cdot \chi_{-\frac{1}{2}}^{(-)} \end{aligned} \quad (9.2.25)$$

tj. 2 různé stavy s tímtož průmětem spinu ($-\frac{1}{2}\hbar$) se opět liší klidovou energií volného mikroobjektu.

Z výše uvedeného je zřejmé, že pro volný relativistický mikroobjekt, který je v klidu, existují 4 možné kvantové stavy:



Pro nerelativistický volný mikroobjekt v klidu je takový stav samozřejmě jen jeden:



Rozlišení spinových stavů relativistického mikroobjektu podle klidových energií generuje další naléhavou otázku, a sice jakým způsobem fyzikálně interpretovat kvantové stavy se zápornou klidovou energií.

Zde opět zapracovala Diracova geniální fantazie a předvídavost, a my v další kapitole uvidíme, která P. Dirac v rámci odpovědi na tuto otázku předpověděl existenci antielektronu (a antihmoty vůbec), což pak byla bezvýhradně prokázána experimentem.

9.3 Aplikace Diracovy rovnice na atom vodíku - předpoklazení existence antielektronu .

Jestliže volný relativistický mikroobjekt v klidu (např. elektron) může existovat ve 4 různých kvantových stavech $\underline{\chi_{+1/2}^{(+)}}, \underline{\chi_{-1/2}^{(+)}}$, $\underline{\chi_{+1/2}^{(-)}}, \underline{\chi_{-1/2}^{(-)}}$, pak týž mikroobjekt, který se bude pohybovat v nějakém vnějším potenciálu (např. elektron v atomu vodíku), bude popsán vlnovou funkcí, která bude lineární kombinací výše uvedených stavů, přičemž koefficienty této lineární kombinace budou záviset na prostorových souřadnicích:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\Psi(r, \theta, \phi)}_{\substack{\text{vlnová funkce} \\ \text{relativistického} \\ \text{elektronu} \\ \text{v atomu vodíku}}} &= \Psi_{+1/2}^{(+)}(r, \theta, \phi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_{-1/2}^{(+)}(r, \theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \\
 &+ \Psi_{+1/2}^{(-)}(r, \theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_{-1/2}^{(-)}(r, \theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} \Psi_{+1/2}^{(+)}(r, \theta, \phi) \\ \Psi_{-1/2}^{(+)}(r, \theta, \phi) \\ \Psi_{+1/2}^{(-)}(r, \theta, \phi) \\ \Psi_{-1/2}^{(-)}(r, \theta, \phi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{n, \ell+1/2}^{(+)}(r) \cdot Y_{\ell+1/2, M+1/2}(\theta, \phi) \\ R_{n, \ell-1/2}^{(+)}(r) \cdot Y_{\ell-1/2, M-1/2}(\theta, \phi) \\ R_{n, \ell+1/2}^{(-)}(r) \cdot Y_{\ell+1/2, M+1/2}(\theta, \phi) \\ R_{n, \ell-1/2}^{(-)}(r) \cdot Y_{\ell-1/2, M-1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (9.3.1)
 \end{aligned}$$

Vlnová funkce tedy závisí na 3 kvantových číslech $\underline{n}, \underline{j}, \underline{m}$:

$$\begin{aligned}
 \Psi(r, \theta, \phi) &= \Psi_{njm}(r, \theta, \phi) \\
 n &= 1, 2, 3, \dots, \infty \quad ; \quad j = \begin{cases} \ell+1/2 \\ \ell-1/2 \end{cases} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\
 m &= M \pm 1/2 = \underbrace{-j, \dots, +j}_{2j+1}
 \end{aligned} \quad \begin{matrix} \text{!} \\ \text{!} \end{matrix} \quad (9.3.2)$$

O této vlnové funkci pak požadujeme, aby byla charakteristickou funkcí relativistického hamiltoniánu elektronu v atomu vodíku :

$$\hat{H}_{rel} \Psi_{njm}(r, \theta, \phi) = E_{njm} \cdot \Psi_{njm}(r, \theta, \phi) \quad (9.3.3)$$

charakt. hodnoty \hat{H}_{rel} ,
tj. možné hodnoty energií
relativistického elektronu
v atomu vodíku

což vede k soustavě 4 vzájemných dif. rovnic pro 4 neznámé radiální vln. funkce $R_{n, l+\frac{1}{2}}^{(+)}(r)$, $R_{n, l-\frac{1}{2}}^{(+)}(r)$, $R_{n, l+\frac{1}{2}}^{(-)}(r)$, $R_{n, l-\frac{1}{2}}^{(-)}(r)$, vystupující v (9.3.1).

Požadavek, aby všechny tyto funkce byly všude konečné, vede k podmínce:

$$E_{njm} = \begin{cases} E_{nj}^{(+)} \\ E_{nj}^{(-)} \end{cases}$$

$$E_{nj}^{(+)} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \left(n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2} \right) \right)^2}}$$

$$E_{nj}^{(-)} = E_{nj}^{(+)} - 2m_0 c^2 \quad (9.3.4)$$

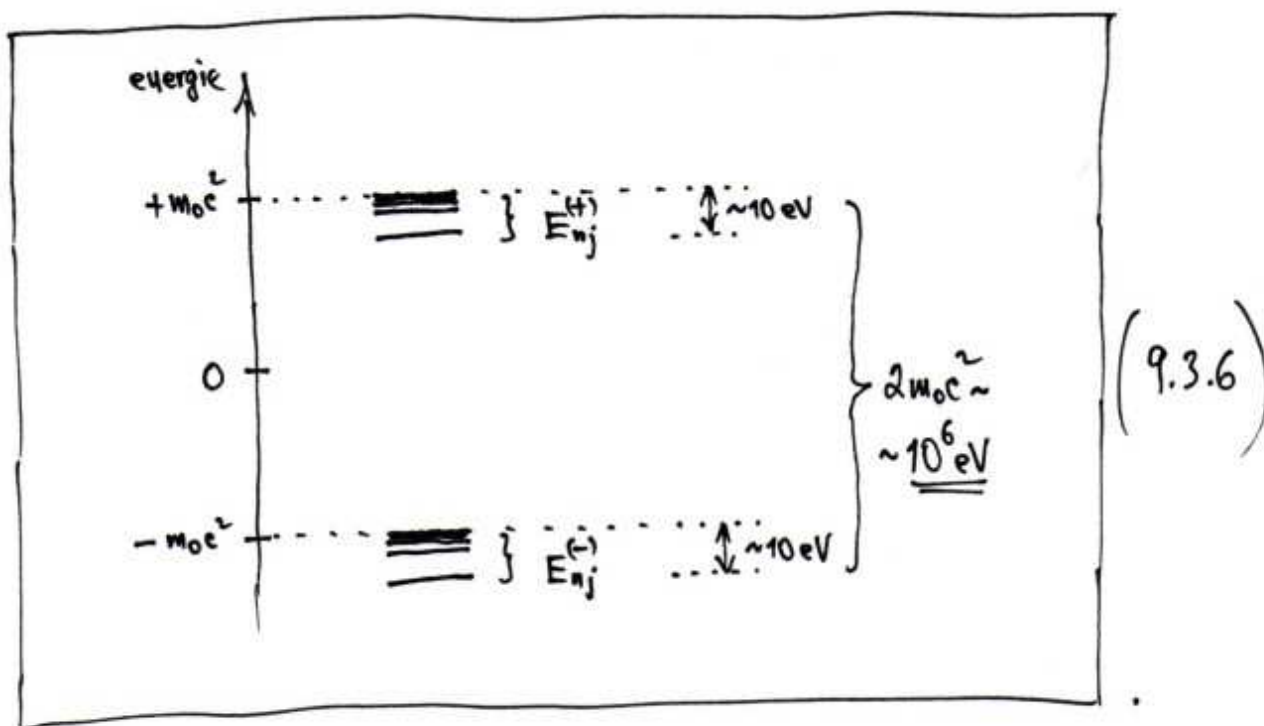
Ve srovnání se Schrödingerovým výsledkem $E_{n\ell m} = E_n = (-13.6 \text{ eV}) \cdot \frac{1}{n^2}$, kde energie závisí pouze na kvantovém čísle n, relativistická energie dle (9.3.4) závisí navíc na kvantovém čísle j, zůstává však nezávislost na m.

Ke každé dvojici (nj) přitom existují dvě hodnoty energie $E_{nj}^{(+)}$ a $E_{nj}^{(-)}$, mezi nimiž je rozdíl :

$$\Delta E_{nj} = E_{nj}^{(+)} - E_{nj}^{(-)} = 2m_0 c^2 \quad (9.3.5)$$

dvojnásobek klidové energie
elektronu

Graficky tedy situace vypadá následovně :



Nyní je nutno prozkoumat 2 věci :

① zda soubor energií $E_{nj}^{(+)}$ dokáže vysvětlit exp. data v souvislosti s rozštěpením energ. hladiny $n=2$ na 2 četvice stavů, navíc energeticky posunutých oproti Schrödingerově hodnotě (viz (8.228) v minulém týdnu) a analogicky (byť kvantitativně mnohem menší) je v u hladin s vyšším n ;

② jakým způsobem fyzikálně interpretovat soubor energií

$$\underline{\underline{E_{nj}^{(-)} < -m_0c^2}}$$

K pochopení bodu ① je užitečně rozvinout výraz (9.3.4) pro $E_{nj}^{(+)}$ v řadu :

$$E_{nj}^{(+)} = m_0 c^2 - \underbrace{\frac{e^4 m_0}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4} \cdot \frac{1}{n^2}}_{13.6 \text{ [eV]}} - \frac{e^8 m_0}{216 \pi^4 \hbar^4 c^2} \cdot \frac{1}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$ klidová energie elektronu
 $\underbrace{\hspace{10em}}$ nerelativistická vazba energie elektronu v atomu vodíku známá z řešení SR
 $\underbrace{\hspace{10em}}$ relativistické korekce závislé na n a j

- snížení energie oproti nerelativistickému výsledku (znaménko \ominus před celou korekcí)
- odstranění degenerace (rozštěpení na 2 části), neboť $j = \begin{cases} l + 1/2 \\ l - 1/2 \end{cases}$

(9.3.7)

Pro $n=2$ tedy máme :

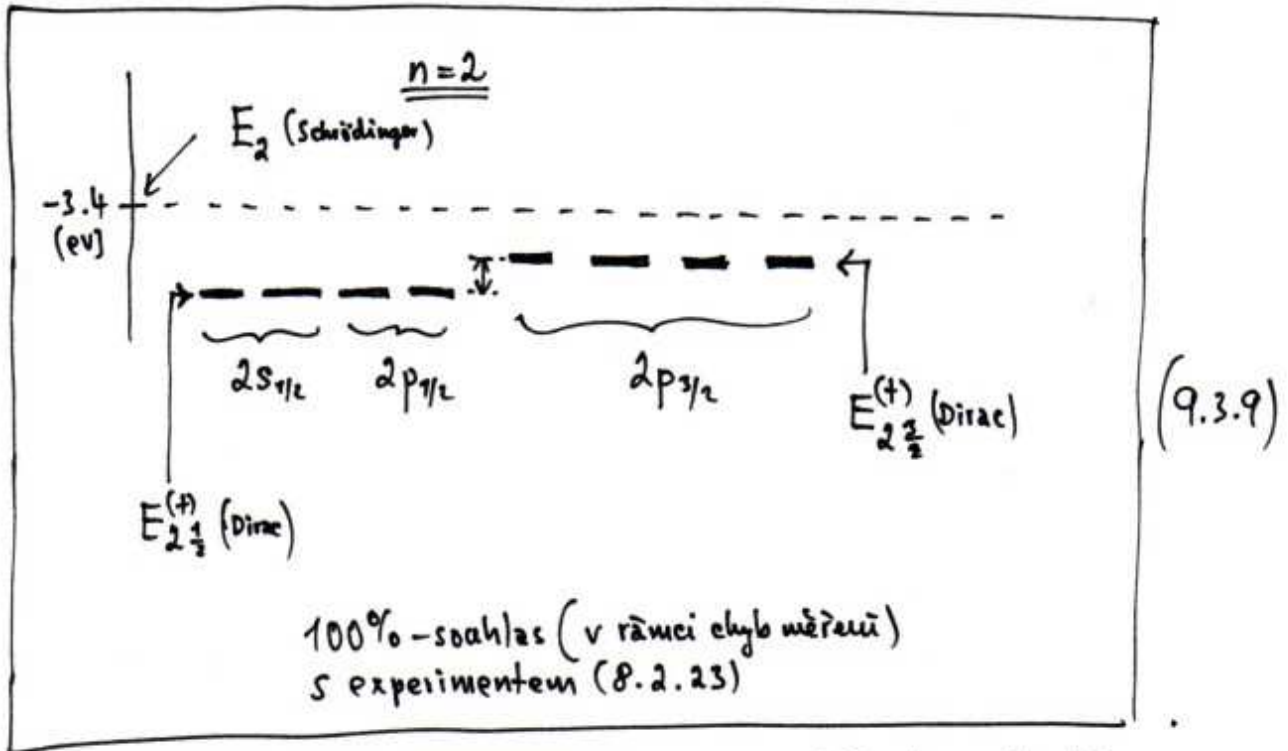
2 stavy $2s_{1/2}$ s energií $E_{2, \frac{1}{2}}^{(+)}$
 $\uparrow \uparrow \uparrow$
 $n \quad l=0 \quad j$
 $\vdots (2j+1=2)$

2 stavy $2p_{1/2}$ s toutéž energií $E_{2, \frac{1}{2}}^{(+)}$
 $\uparrow \uparrow \uparrow$
 $n \quad l=1 \quad j$
 $\vdots (2j+1=2)$
 (na l energie dle (9.3.4) resp. (9.3.7) nezávisí)

4 stavy $2p_{3/2}$ s jinou energií $E_{2, \frac{3}{2}}^{(+)}$
 $\uparrow \uparrow \uparrow$
 $n \quad l=1 \quad j$
 $\vdots (2j+1=4)$
 (j se změnilo !)

(9.3.8)

Spočítáme-li numerické hodnoty $E_{2, \frac{1}{2}}^{(+)}$ a $E_{2, \frac{3}{2}}^{(+)}$ podle (9.3.4), dostaneme :



Podobný jev (= sužení a rozštěpení energ. hladiny) nastává i pro $n = 3, 4, 5, \dots$, ale jak vidíme z (9.3.7), relativistické korekce, způsobující tento jev, jsou $\sim \frac{1}{n^3}$ (a menší), takže s rostoucím n jsou stále méně a méně zřetelné, až se brzy dostanou pod rozlišovací práh měřicích přístrojů.

Vidíme, tedy, že Diracova rovnice vystihuje realitu atomu vodíku lépe než rovnice Schrödingerova, což mj. znamená, že relativistické efekty, ať už "klasické" (klidová hmotnost elektronu, relat. závislost energie na hybnosti) nebo "kvantové" (existence spinu elektronu) jsou pro strukturu a vlastnosti atomu vodíku nezanedbatelné.

Nyní je nutno zaměřit pozornost na druhý zásadní problém, tj. na fyzikální interpretaci souboru energií $E_{n_j}^{(-)} < -m_0c^2$.

Standardní pohled na energie $E_{n_j}^{(-)} < -m_0c^2$ je následující:

Jde pouze o řešení matematické rovnice, které nemá fyzikální smysl \Rightarrow takové řešení je nutno ignorovat.

(9.3.10)

Diracův pohled na energie $E_{nj}^{(-)} < -m_0c^2$ byl však zeela odlišný:



Jde také o řešení matematické rovnice, které fyzika musí pochopit a dát mu fyzikální smysl.

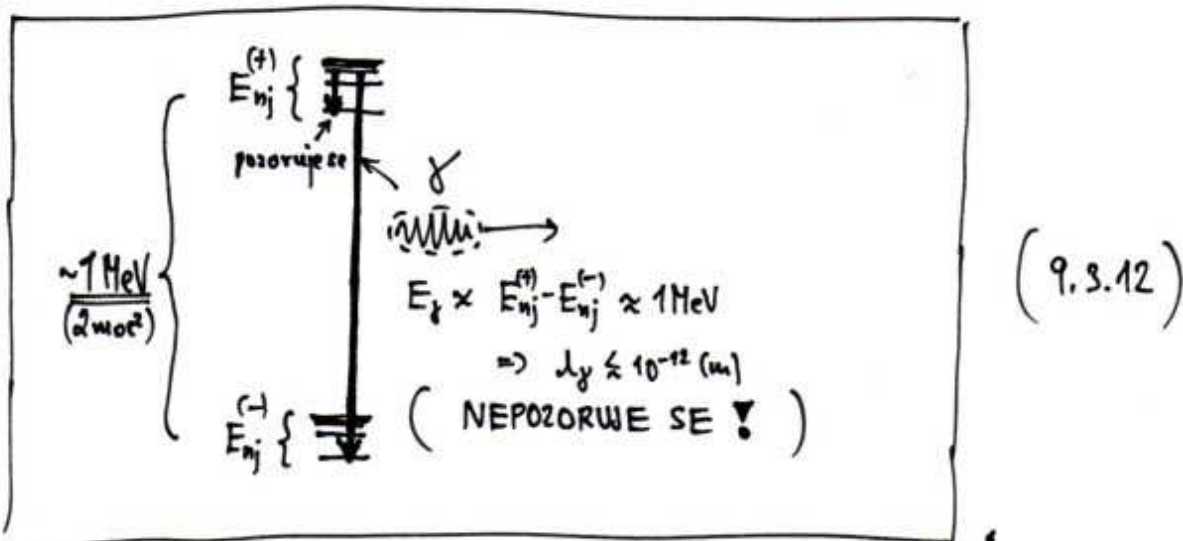


(9.3.11)

Při hledání tohoto fyz. smyslu postupoval Dirac neméně nekomfortně než jako při linearizaci odvození operátoru, vedoucí ve svém důsledku k předpovědi existence spinu.

Diracova myšlenka č.1

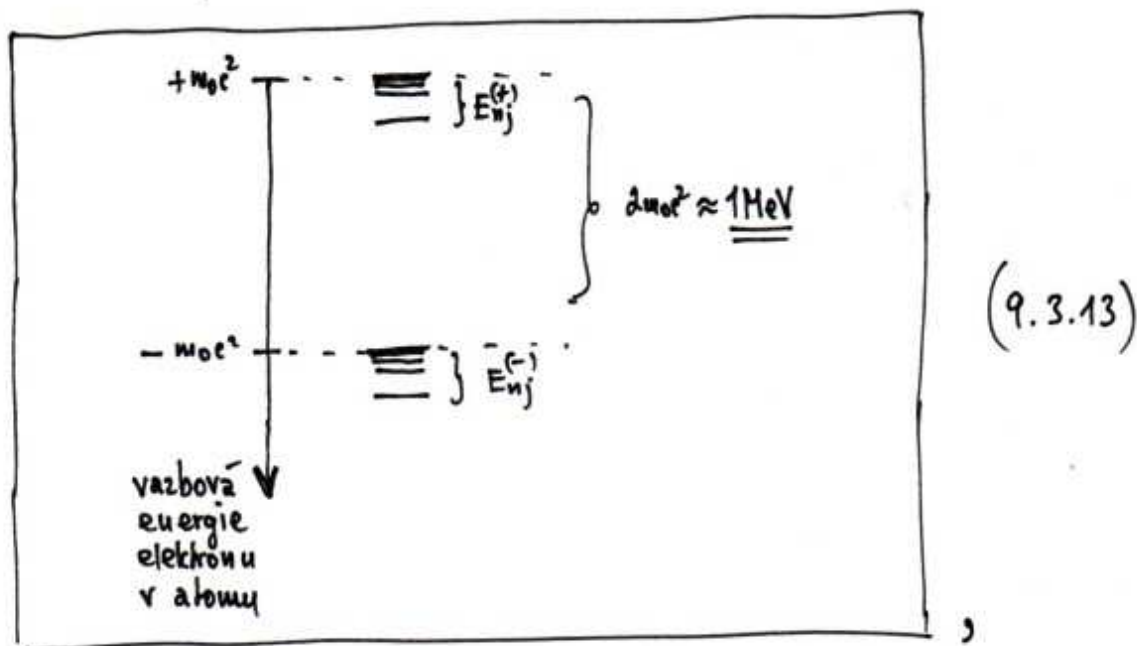
Všechny stavy s energiemi $E_{nj}^{(-)} < -m_0c^2$ musejí být zeela zaplněny elektrony, neboť jinak by nic nebránilo elektronům s $E_{nj}^{(+)} > m_0c^2$, aby samovolně reskakovaly na stále nižší a nižší energie (princip růstu entropie) a přitom vyzařovaly energii ve formě elmag. záření. Energetickému rozdílu $\Delta E_{nj} = E_{nj}^{(+)} - E_{nj}^{(-)} \approx 2m_0c^2 \approx 1\text{MeV}$ však odpovídá vlnová délka $\lambda \lesssim 10^{-12}\text{[m]}$, tj. ve spektru γ -záření. Atom vodíku by tedy spontánně musel vyzařovat γ -záření, což je v rozporu s experimentem:



Předpoklad o zaplněnosti energ. hladin $E_{nj}^{(-)}$ elektrony automaticky umožňuje přechody $E_{nj}^{(+)} \rightarrow E_{nj}^{(-)}$, čímž se dostáváme do souladu s experimentem (z atomu vodíku žádné γ -záření nevychází).

Diracova myšlenka č.2

Elektrony na hladinách s energiemi $E_{nj}^{(-)} < -m_0c^2$ musejí být fyzikálně neregistrovatelné (virtuální), neboť ve vztahu ke klidové energii elektronu jsou v atomu mnohonásobně silněji vázány než elektrony na hladinách $E_{nj}^{(+)}$:



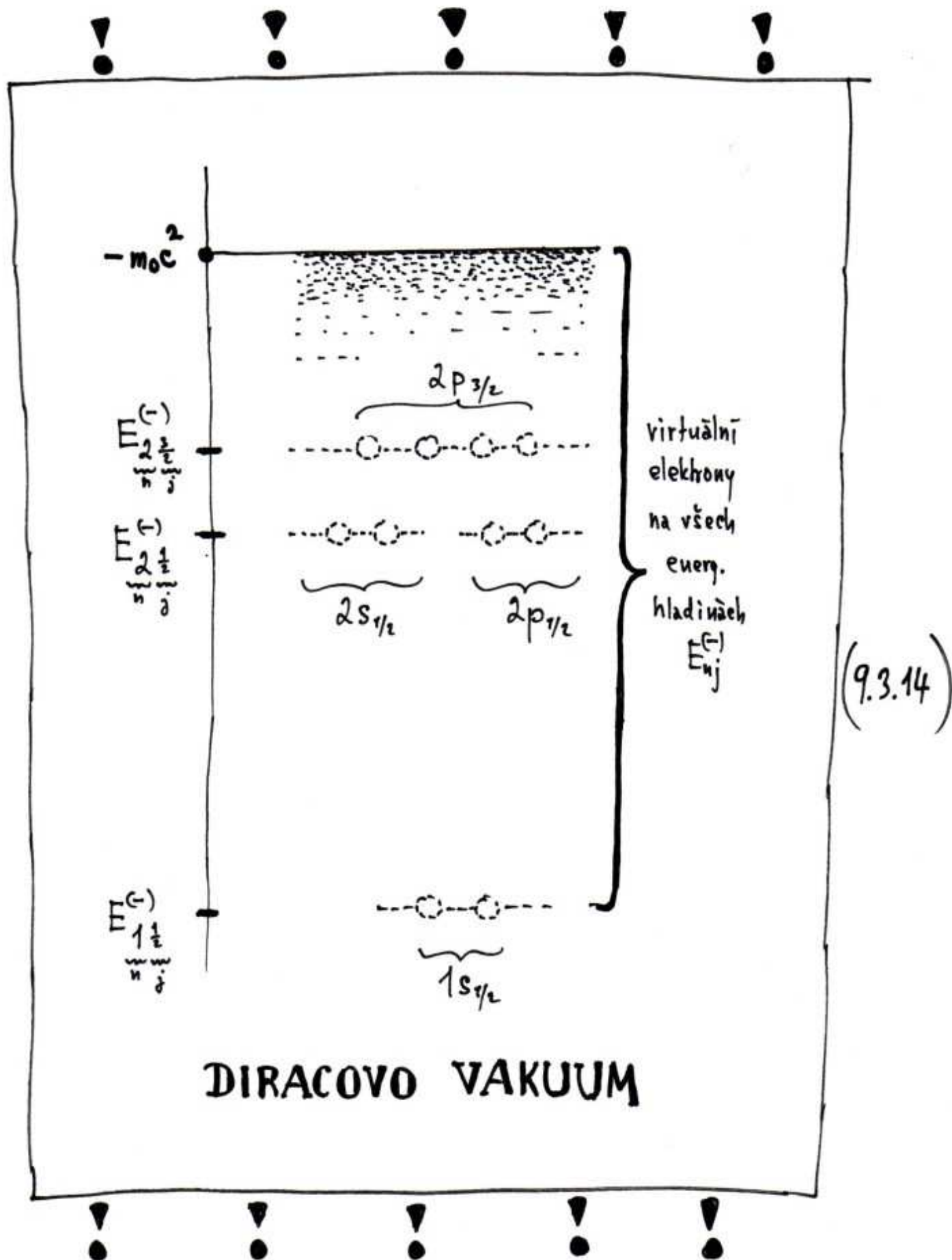
a fyzika nezná způsob, jak takto silně vázané mikroobjekty fyzikálně registrovat (měřit).

Systém fyzikálně neregistrovatelných (virtuálních) elektronů na všech energetických hladinách $E_{nj}^{(-)}$ nazval Dirac pracovní vakuum.

Dnes mu říkáme Diracovo vakuum (D-vakuum)

a v 50. letech 20. stol. se stalo jedním z výchozích bodů kvantové teorie pole (Feynmann, Schwinger, Klein).

Graficky můžeme Diracovo vakuum znázornit následovně:

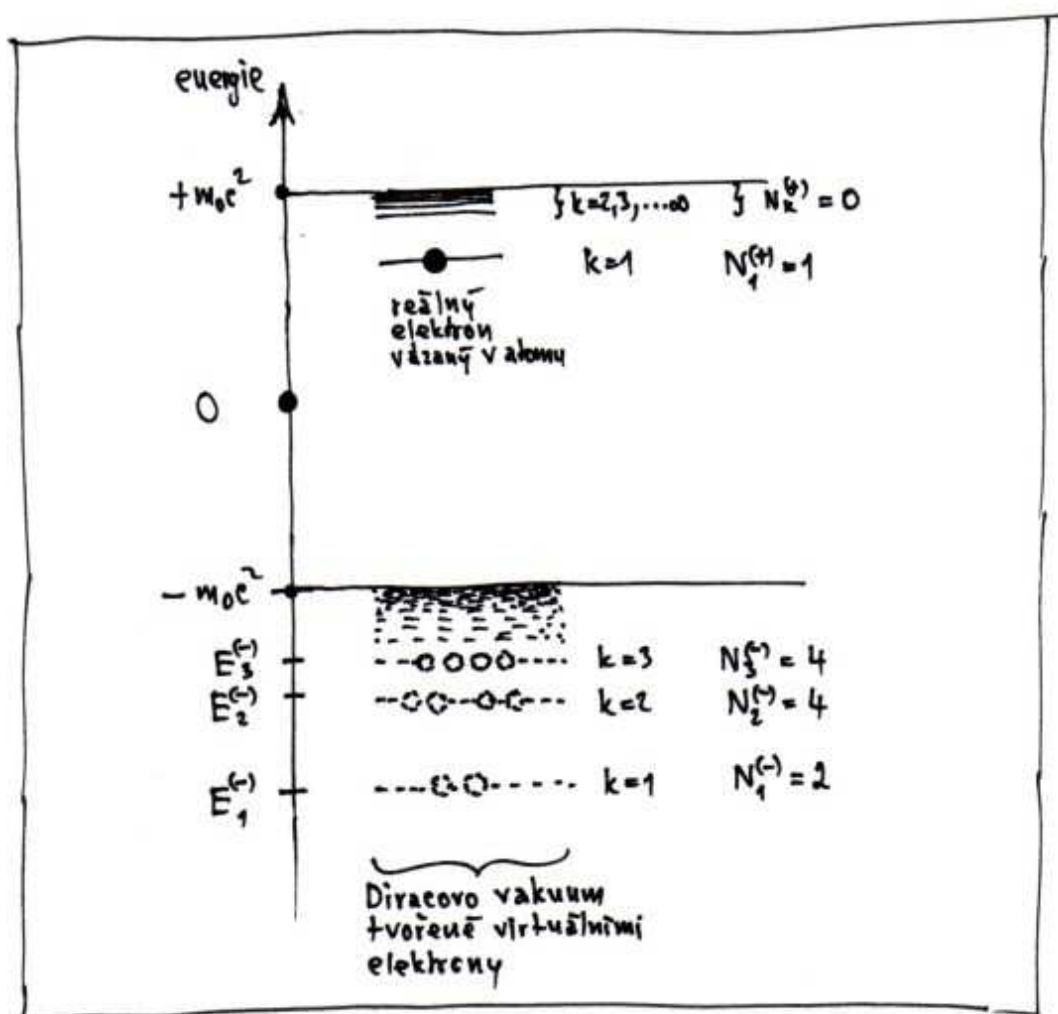


Diracova myšlenka č. 3

To, co je fyzikálně registrovatelné (reálně),
jsou odchytky (fluktuační) od stavu vakua.

(9.3.15)

Ža účelem pochopení této myšlenky očištlujeme jednotlivě energetické
hladiny indexy $\underline{k} = (nj)$ a příslušné počty elektronů označme \underline{N}_k .
Atom vodíku v základním stavu pak vypadá následovně:



Energie Diracova vakua je:



$$\mathcal{E}_v = \sum_k N_k^{(+)} E_k^{(+)}$$



(9.3.17)

Náboj Diracova vakua je :

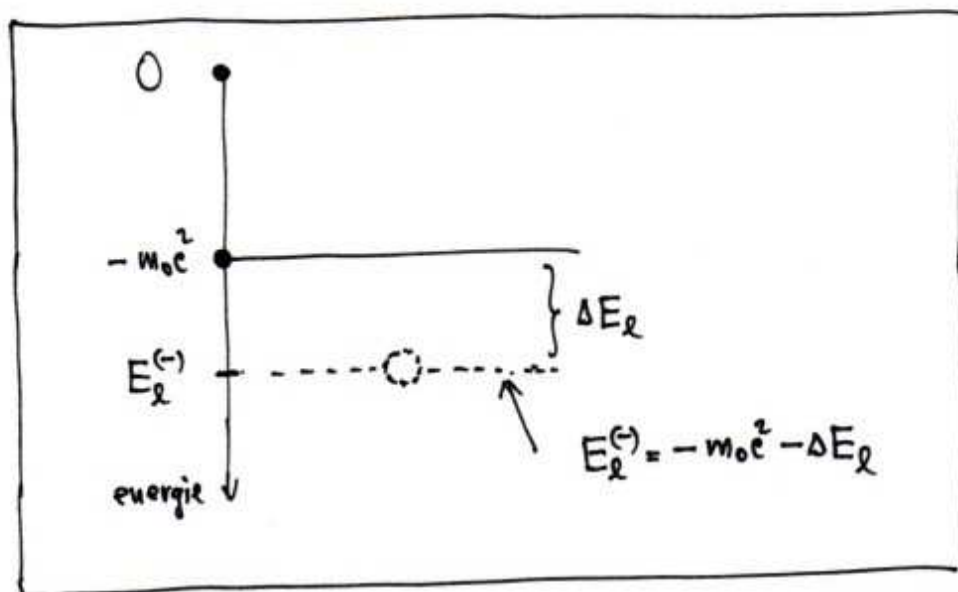


$$Q_v = \sum_k N_k^{(-)} \underbrace{Q_k}_{(-e)} = (-e) \cdot \sum_k N_k^{(-)}$$



(9.3.18)

Uvažujme nyní virtuální elektron na l -tí energetické hladině



$$(9.3.19)$$

a bombardujme atom vodíku fotonem γ -záření
s energií

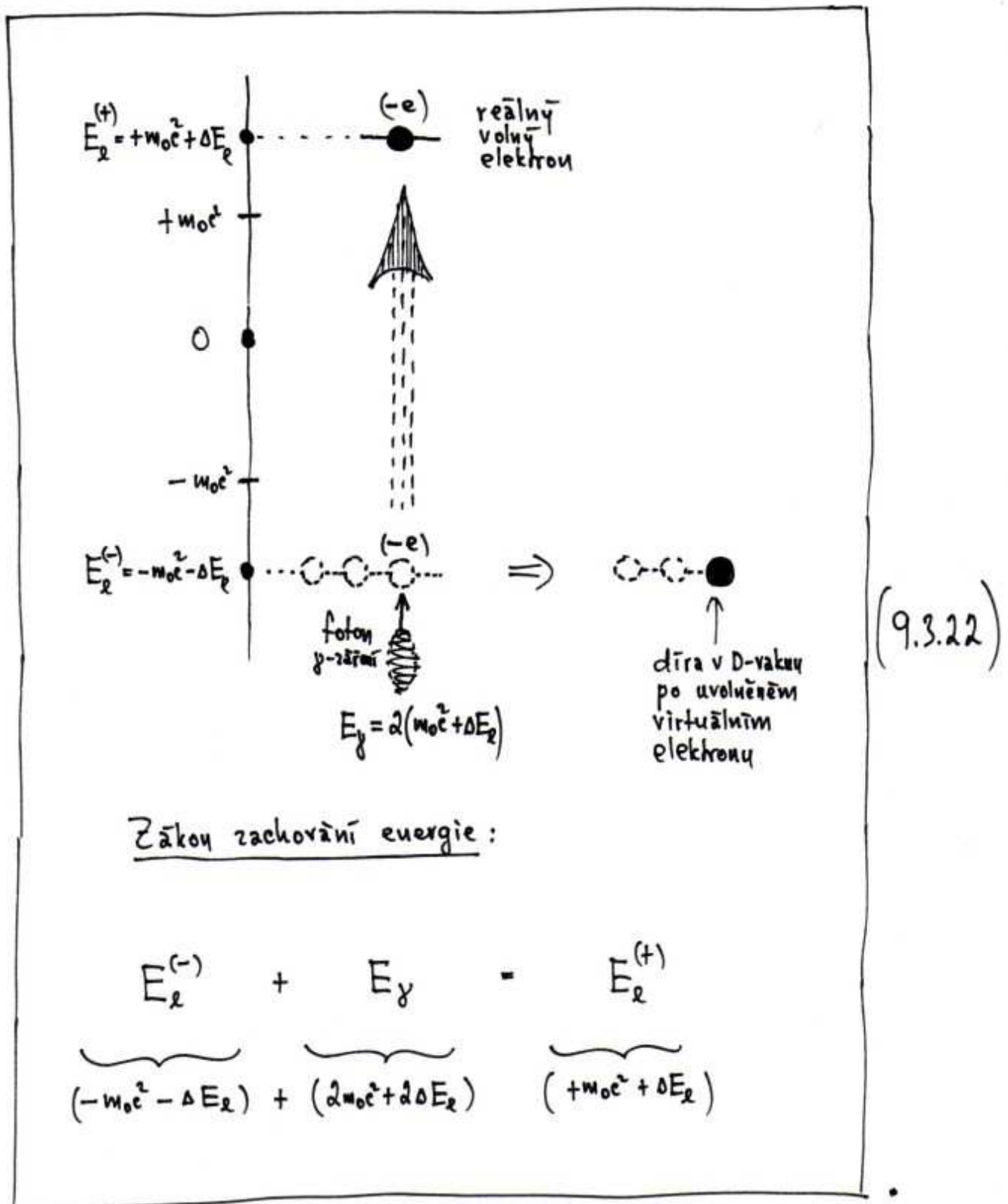
$$E_\gamma = 2(m_0c^2 + \Delta E_l) \quad (9.3.20)$$

Takový foton má dostatek energie k tomu, aby excitoval virtuální elektron se zápornou energií $E_l^{(-)} = -m_0c^2 - \Delta E_l$ do stavu s kladnou energií

$$E_l^{(+)} = +m_0c^2 + \Delta E_l \quad (9.3.21)$$

a vytvořil tak reálný volný elektron s klidovou energií $+m_0c^2$
a kinetickou energií ΔE_l .

Graficky můžeme situaci zúrodnit následovně :



Vzniklá díra v D-vakuu znamená odehytku (fluktuaci) od normálního stavu tohoto vakua. Podívejme se proto, jak se tato díra fyzikálně projeví.


Energie D-vakua s dírou na hladině $E_2^{(-)}$ je :

$$\mathcal{E}_V^{(2)} = \sum_{k \neq 2} N_k^{(-)} E_k^{(-)} + (N_2^{(-)} - 1) E_2^{(-)} \quad (9.3.23)$$

↑
chybí 1 virtuální
elektron na hladině $E_2^{(-)}$

Fyzikálně registrovatelná odchylka od energie čistého D-vakua bez díry, tj. energie díry samotné, pak bude :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Delta \mathcal{E}_V^{(2)}}} &= \mathcal{E}_V^{(2)} - \mathcal{E}_V = \\ &= \left\{ \underbrace{\sum_{k \neq 2} N_k^{(-)} E_k^{(-)} + \overbrace{N_2^{(-)} E_2^{(-)} - E_2^{(-)}}^{(N_2^{(-)} - 1) E_2^{(-)}}} \right\} - \left\{ \sum_k N_k^{(+)} E_k^{(+)} \right\} = \quad (9.3.24) \\ &= \underbrace{\sum_k N_k^{(-)} E_k^{(-)}}_{\mathcal{E}_V^{(2)}} - \underbrace{\mathcal{E}_V} \\ &= -E_2^{(-)} = -(-m_0 c^2 - \Delta E_2) = \underline{\underline{+m_0 c^2 + \Delta E_2}} \end{aligned}$$



Energie díry v D-vakuu je tedy rovna energii volně částice

s klidovou energií $m_0 c^2$ a kinetickou energií ΔE_2 .


Podobným způsobem určíme náboj díry v D-vakuu :

Náboj D-vakuu s dírou na hladině $E_2^{(-)}$ je:

$$Q_V^{(e)} = (-e) \sum_{k \neq l} N_k^{(-)} + (-e)(N_l^{(-)} - 1) \quad (9.3.25)$$

↑
chybějící
virtuální
elektron

Fyzikálně registrovatelná odchylka od náboje čistého D-vakuu bez díry,
tj. náboj díry samotné, pat bude:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Delta Q_V^{(e)}}} &= \underbrace{Q_V^{(e)}}_{(9.3.25)} - \underbrace{Q_V}_{(9.3.18)} = \\ &= \left\{ \underbrace{(-e) \sum_{k \neq l} N_k^{(-)} + (-e) N_l^{(-)} - (-e)}_{(-e) \sum_k N_k^{(-)}} \right\} - \left\{ (-e) \sum_k N_k^{(-)} \right\} = \quad (9.3.26) \\ &= \underbrace{-(-e)}_{Q_V^{(e)}} = \underline{\underline{+e}} \\ &\quad \text{opaěný náboj} \\ &\quad \text{než jaký má} \\ &\quad \text{elektron} \end{aligned}$$


Dáme-li dohromady výsledky (9.3.24) a (9.3.26), můžeme konstatovat:

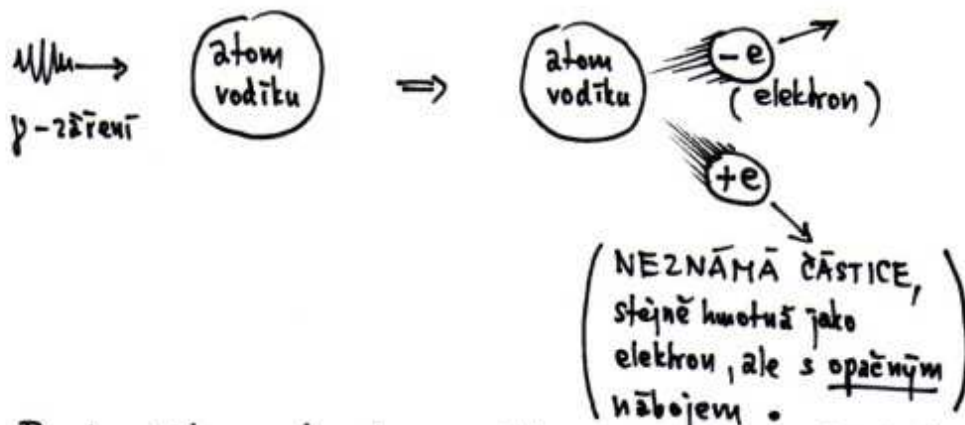


Díra v Diracově vakuu se chová jako částice,
 která má stejnou klidovou hmotnost jako elektron (m_0),
 ale opačný náboj ($+e$). (9.3.27)

V době, kdy tento závěr byl formulován, žádná částice
 s uvedenými vlastnostmi nebyla v přírodě známa.

P. Dirac tedy opět viděl daleko za hranice viditelného a vzkázal
 experimentátorům :

"Matematika mi dává jistá řešení se zápornými energiemi.
 Já věřím, že matematika věrně popisuje realitu,
 a proto se tato řešení musí nějak fyzikálně projevit.
 Umím dokonce říci, jak by se měla projevit:



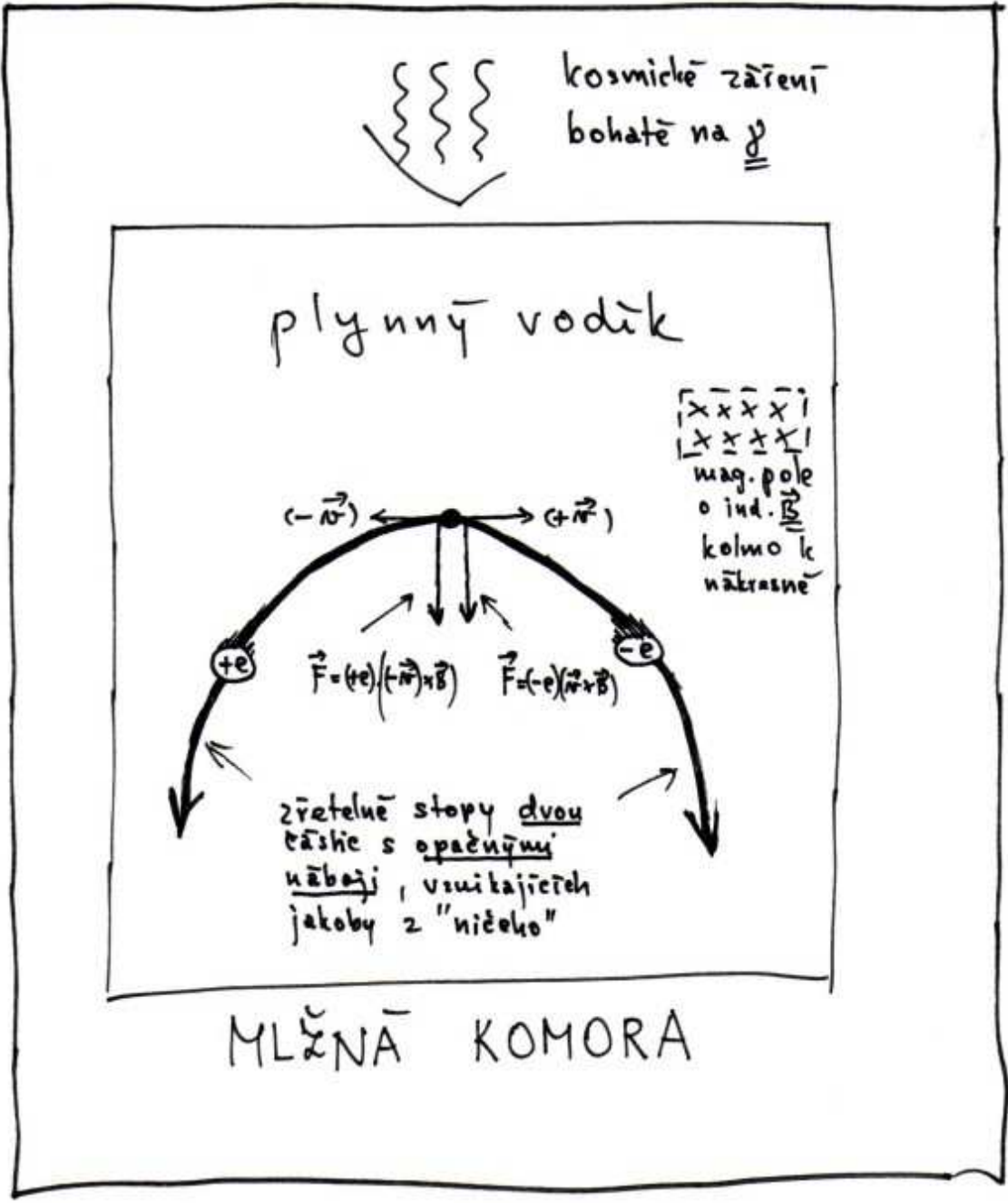
Bombardujte proto atomy vodíku γ -zářením a hleďte
neznámou částici ($+e$) !

I stalo se - několik let po Diracově předpovědi J. Andersson
podal přesvědčivý experimentální důkaz vzniku páru

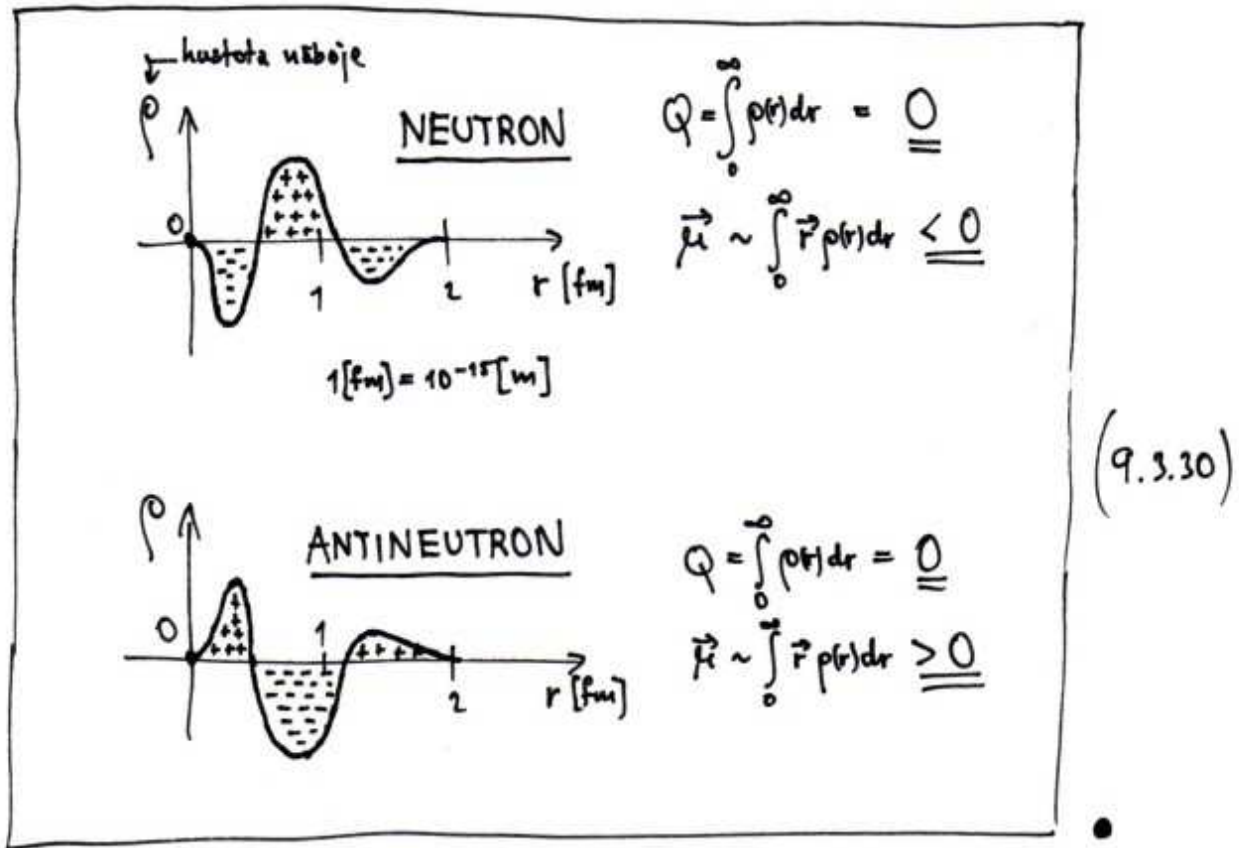
$(m_0, -e)$ + $(m_0, +e)$ při bombardování atomů vodíku
 elektron neznámá částice

kosmickým zářením, jež je velmi bohaté na γ -záření :

Princip Anderssonova experimentu :



Nezuřmā částice ($m_0, +e$) byla nazvāna antielektron, nebo tē pozitron.
 Postupem doby se ukázalo, že i jiné částice než elektron mají své antičástice (antiproton, antihyperon, antikvarkon, atd.).
 Dokonce i elektricky neutřālne částice (neutron, neutriino) mají své antičástice (antineutron, antineutriino). Ty se podobitelně nemohou lišit opačným znaměnkem nāboje, neboť $Q=0$, lišit se vřak jinou charakteristikou, např. magnetickým momentem $\vec{\mu}$:



Závěrem nelze než konstatovat, že Diracova geniální intuice a z ní vyplývající výsledky jsou dosud nepřekonanou ukázkou prediktivní síly matematiky a teoretické fyziky - z původně čistě formálních matematických operací předpověděl existenci dvou do té doby zcela neznámých fyz. jevů (spin, antičástice), které pak následně byly bez výhrad potvrzeny experimentem. Při té příležitosti jen tak jako mimochodem objasnily pozorované posuny a rozštěpení emis. hladin v atomu vodíku, které Schrödingerovou rovnicí je zcela nepostihitelné.

Navíc (viz např. R. Kuchta - Fyzika mikrosvětla - výběrová předn. pro 3. a 4. roč. FAV a PF), našel správně, h. s experimentem souhlasící hodnoty gyromagnetických faktorů orbitálního momentu hybnosti a spinu, a hlavně, objevil existenci spin-orbitální interakce, která je klíčová pro strukturu a vlastnosti složitějších atomů.



10. TÝDEN

10.1 Kvantově systémy složené ze dvou a více mikroobjektů.

Máme-li 2 mikroobjekty, které se liši alespoň v jedné z následujících charakteristik (q, m, s) ,

q
náboj

m
klidová
hmotnost

s
spin

řekáme, že jsou ROZLIŠITELNÉ (např. elektron + proton, elektron + antielektron apod.).

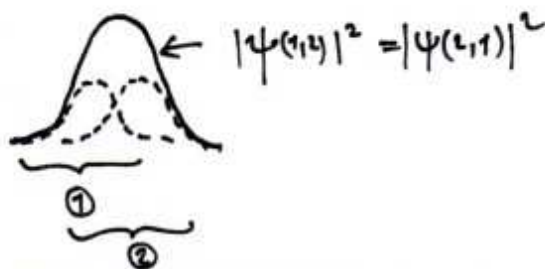
Jsou-li všechny 3 uvedené charakteristiky u obou mikroobjektů stejně, říkáme, že mikroobjekty jsou NEROZLIŠITELNÉ, (např. elektron + elektron, proton + proton).

Pro 2 nerozlišitelné mikroobjekty platí následující PRINCIP NEROZLIŠITELNOSTI :

Prostorově rozložení pravděpodobnosti výskytu 2 nerozlišitelných mikroobjektů nacházejících se blízko u sebe nezáleží na jejich "očíslování", tj.

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$$

(10.1.1)



Z principu nerozlišitelnosti (10.1.1) plyne :

buď

$$\psi(1,2) = \psi(2,1)$$

vlnová funkce obou mikroobjektů
je symetrická při záměně
 $1 \leftrightarrow 2$

(10.1.2)

nebo

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1)$$

vlnová funkce obou mikroobjektů
je antisymetrická při záměně
 $1 \leftrightarrow 2$

(10.1.3)

Mikroobjekty vyhovující požadavku (10.1.2) mají celočíslný spin
($s = 0, 1, 2, 3, \dots$) a nazývají se BOSONY (J. Ch. Bose).

Mikroobjekty vyhovující požadavku (10.1.3) mají poločíslný spin
($s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$) a nazývají se FERMIONY (E. Fermi).

V přírodě dosud nebyl nalezen žádný mikroobjekt, který by nepatřil do některé z uvedených dvou kategorií.

Označme $\psi_{\alpha_1}(1)$ a $\psi_{\alpha_2}(2)$ vlnové funkce jednoho a druhého
mikroobjektu ve stavech α_1 a α_2 .

Jejich společná vlnová funkce $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}(1,2)$ pak má

následující 3 možné tvary :

- (A) jsou-li mikroobjekty ROZLIŠITELNĚ (které, zda oba fermiony, oba bosony či 1 fermion a 1 boson):

$$\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^r(1,2) = \psi_{\alpha_1}(1) \cdot \psi_{\alpha_2}(2)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$
 žádná symetrie
 při záměně $1 \leftrightarrow 2$

(10.1.4)

- (B) jsou-li mikroobjekty NEROZLIŠITELNĚ FERMIONY:

$$\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nf}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\alpha_1}(1) \psi_{\alpha_2}(2) - \psi_{\alpha_1}(2) \psi_{\alpha_2}(1) \right\}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$
 antisymetrická funkce při
 záměně $1 \leftrightarrow 2$

(10.1.5)

tj. $\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nf}(1,2) = -\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nf}(2,1)$

- (C) jsou-li mikroobjekty NEROZLIŠITELNĚ BOSONY:

$$\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nb}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\alpha_1}(1) \psi_{\alpha_2}(2) + \psi_{\alpha_1}(2) \psi_{\alpha_2}(1) \right\}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$
 symetrická funkce při
 záměně $1 \leftrightarrow 2$

(10.1.6)

tj. $\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nb}(1,2) = +\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nb}(2,1)$

Vlnová funkce 2 rozlišitelných mikroobjektů $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}^r(1, 2)$ dle (10.1.4) říká, že u každého z nich můžeme s jistotou určit, v jakém stavu se nachází (mikroobjekt 1 je ve stavu α_1 , mikroobjekt 2 ve stavu α_2).

U dvou nerozlišitelných mikroobjektů (ať už fermionů či bosonů) to s jistotou určit nemůžeme.

Vezměme např. vlnovou funkci (10.1.5) pro 2 nerozlišitelné fermiony a přepíšme ji ve tvaru :

$$\psi_{\alpha_1, \alpha_2}^{nf}(1, 2) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \psi_{\alpha_1}(1) \psi_{\alpha_2}(2) + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \psi_{\alpha_1}(2) \psi_{\alpha_2}(1)$$

ve stavu α_1 je fermion 1
a ve stavu α_2 fermion 2,
to vše s pravděpodobností

ve stavu α_1 je fermion 2
a ve stavu α_2 fermion 1,
to vše s pravděpodobností

$$\left|\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right|^2 = \underline{\underline{\frac{1}{2}}}$$

$$\left|\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right|^2 = \underline{\underline{\frac{1}{2}}}$$

(10.1.7)



V každém stavu se se stejnou pravděpodobností
(= 50%) nacházejí oba fermiony.

Říkáme, že vlnová funkce $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}^{nf}(1, 2)$ má VÝMĚNNÝ CHARAKTER

(v daném stavu se neustále vyměňují oba fermiony, nebo ekvivalentně, daný fermion neustále vyměňuje stavy, v nichž se nachází).



Totéž platí i o vlnové funkci (10.1.6) pro 2 nerozlišitelné bosony.

Výměnný charakter vlnových funkcí nerozlišitelných mikroobjektů (ať už fermionů či bosonů) je typický kvantový efekt, vyplývající z principu nerozlišitelnosti, a nemá tudíž žádný klasický analog.

Hraje velmi důležitou roli ve fyz. jevech, jež jsou klasickou fyzikou nepostřehitelně (např. feromagnetismus, supravodivost, existence a soudržnost atomových jader).

Zaměříme nyní pozornost na vlnové funkce 2 nerozlišitelných fermionů - $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}^{nf}(1, 2)$ - vztah (10.1.5);

a 2 nerozlišitelných bosonů - $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}^{nb}(1, 2)$ - vztah (10.1.6).

Zdánilivě nevýznamný rozdíl jednoho znaménka má dramatické důsledky, jsou-li stavy obou mikroobjektů stejné ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$).

Pro 2 nerozlišitelné fermiony ve stavu α dostáváme z (10.1.5):

$$\psi_{\alpha\alpha}^{nf}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2) - \underbrace{\psi_{\alpha}(2)\psi_{\alpha}(1)}_{\psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2)} \right\} = \underline{\underline{0}}$$



$$\boxed{|\psi_{\alpha\alpha}^{nf}(1, 2)|^2 = 0}$$

pravděpodobnost nalezení 2 nerozlišitelných fermionů v témže stavu α je NULOVA

! (10.1.8)

PAULIHO PRINCIP

(P P)

Pro 2 nerozlišitelné bosony analogické omezení neplatí.
že vztahu (10.1.6) totiž máme :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\psi_{\alpha\alpha}^{nb}(1,2)}}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2) + \underbrace{\psi_{\alpha}(2)\psi_{\alpha}(1)}_{\psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2)} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 2 \psi_{\alpha}(1)\psi_{\alpha}(2) = \\ &= \underline{\underline{\sqrt{2} \cdot \psi_{\alpha}(1) \cdot \psi_{\alpha}(2)}}} \neq 0 \end{aligned}$$

⇓

$$\boxed{|\psi_{\alpha\alpha}^{nb}(1,2)|^2 = 2 \cdot |\psi_{\alpha}(1)|^2 \cdot |\psi_{\alpha}(2)|^2} \quad \nabla \quad \textcircled{1}$$

pravděpodobnost nalezení 2 nerozlišitelných bosonů v témže stavu je nejenže není nulová, ale je dokonce 2x větší než prostá statistická pravděpodobnost rovná součinu pravděpodobností $|\psi_{\alpha}(1)|^2$ a $|\psi_{\alpha}(2)|^2$

(10.1.9)

Funkce $\psi_{\alpha_1\alpha_2}^{nf}(1,2)$ dle (10.1.5) a $\psi_{\alpha_1\alpha_2}^{nb}(1,2)$ dle (10.1.6)
pro 2 nerozlišitelné mikroobjekty daného typu (fermiony, bosony)
že snadno zobecnit i na systém N nerozliš. mikroobjektů .

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_N}^{nf}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(1) & \psi_{\alpha_1}(2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(N) \\ \psi_{\alpha_2}(1) & \psi_{\alpha_2}(2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(1) & \psi_{\alpha_N}(2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(N) \end{pmatrix}$$

Slaterův determinant

(10.1.10)

Pro $N=2$ z výrazu (10.1.10) máme :

$$\Psi_{\alpha_1 \alpha_2}^{nf}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(1) & \psi_{\alpha_2}(1) \\ \psi_{\alpha_1}(2) & \psi_{\alpha_2}(2) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\alpha_1}(1)\psi_{\alpha_2}(2) - \psi_{\alpha_1}(2)\psi_{\alpha_2}(1) \right\} \quad (10.1.11)$$

což souhlasí s výrazem (10.1.5)

Při zobecnění $2 \rightarrow N$ samozřejmě zůstává v platnosti Pauliho princip.
 Budou-li kterékoli 2 stavy stejně, tj. $\alpha_i = \alpha_j = \alpha$, dostáváme
 z výrazu (10.1.10) :

$$\Psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}^{nf}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(1) & \psi_{\alpha_2}(1) & \dots & \psi_{\alpha_N}(1) \\ \psi_{\alpha_1}(2) & \psi_{\alpha_2}(2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_1}(N) & \psi_{\alpha_2}(N) & \dots & \psi_{\alpha_N}(N) \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \alpha_i \\ \leftarrow \alpha_j \end{matrix} = \underline{0} \quad (10.1.12)$$

2 řádky determinantu jsou stejné

Analogicky pro systém N nerozlišitelných bosonů dostaneme :

$$\Psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}^{nb}(1,2,\dots,N) = \sum_P P(\psi_{\alpha_1}(1)\psi_{\alpha_2}(2)\dots\psi_{\alpha_N}(N)) \quad (10.1.13)$$

součet přes všechny $N!$ permutací indexů $(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$

$$\left| \Psi_{\alpha \alpha \dots \alpha}^{nb}(1,2,\dots,N) \right|^2 = N! |\psi_{\alpha}(1)|^2 |\psi_{\alpha}(2)|^2 \dots |\psi_{\alpha}(N)|^2 \quad (10.1.14)$$

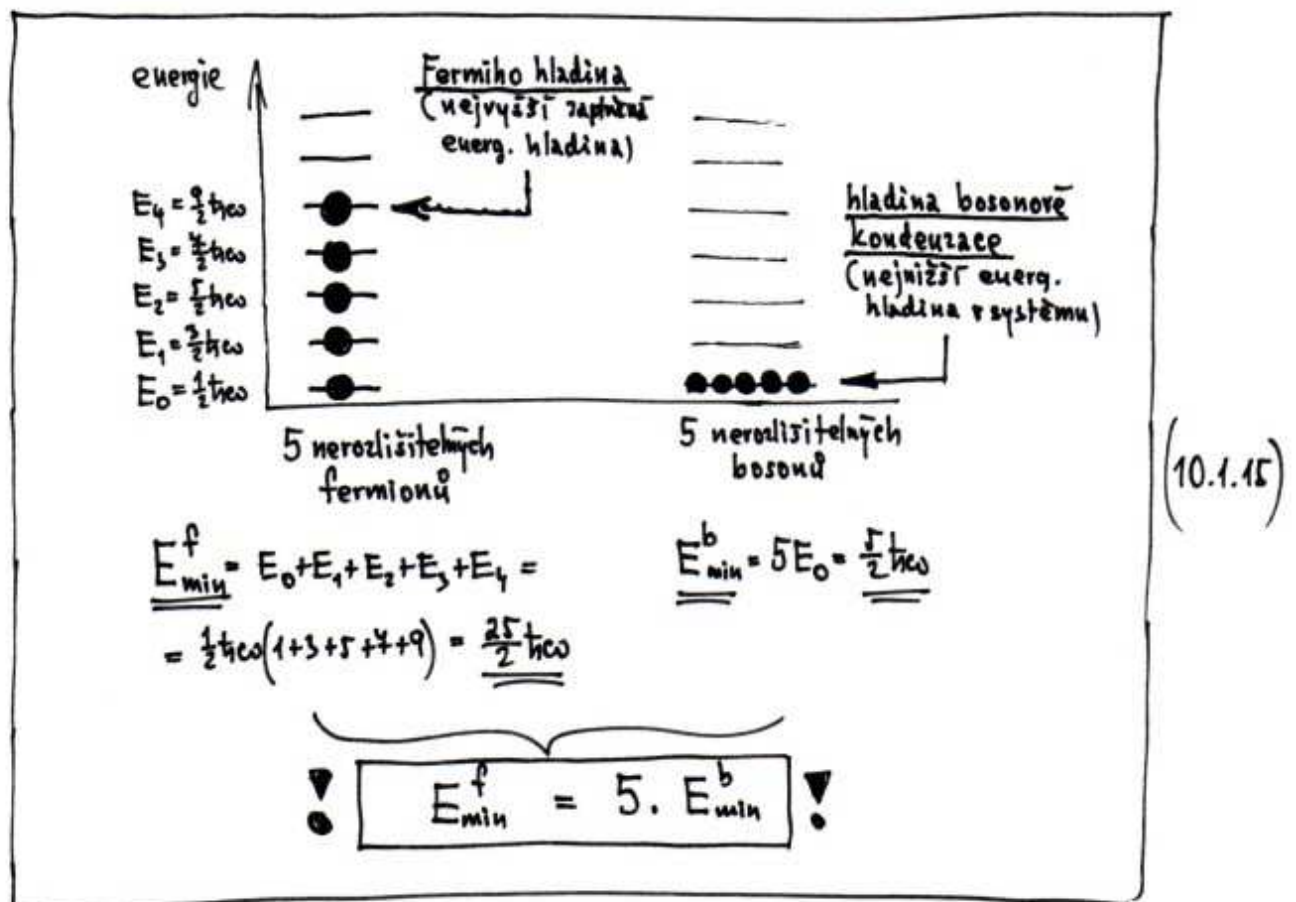
"kvantová" pravděpodobnost nalezení N nerozliš. bosonů
 v jednom stavu α je $N!$ - krát větší než příslušná
 statistická pravděpodobnost ;
 \Rightarrow bosony mají tendenci KONDENZOVAT V JEDNOM STAVU .

Porovnáme-li tedy chování N nerozlišitelných fermionů a bosonů v témže stavu, můžeme konstatovat:

Nerozlišitelné fermiony se chovají jako přísní individualisté (v jednom stavu může být maximálně jeden), zatímco nerozlišitelné bosony jsou přísními kolektivisty (preferují společnou koexistenci v jednom stavu).

Rozdílnost mezi systémem nerozlišitelných fermionů a bosonů obzvlášť vynikne při zkoumání daného systému v základním stavu (tj. ve stavu s nejnižší možnou energií).

Uvažujme např. 5 nerozlišitelných fermionů a stejný počet nerozlišitelných bosonů v potenciálu kvantového harm. oscilátoru:

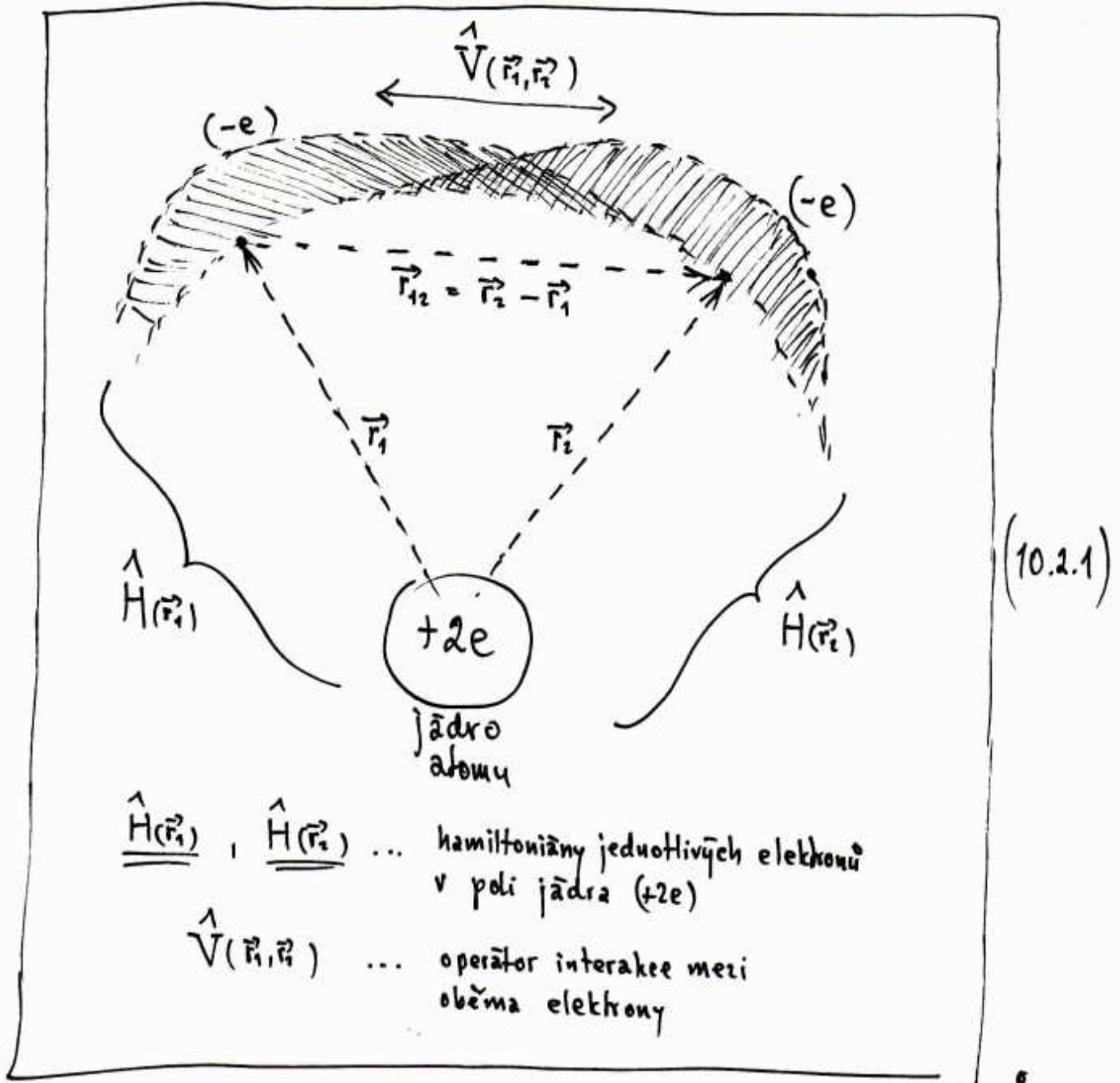


Tak značný rozdíl vede samozřejmě k velmi odlišným fyz. vlastnostem systému nerozliš. fermionů a bosonů, zejména při nízkých teplotách, kdy jsou obsazovány nejnižší energ. hladiny.

10.2. Atom He a molekula H₂

Nyní se podíváme na 2 nejjednodušší systémy, v nichž se nerozlišitelnost mikroobjektů a její důsledky, tj. výměnný charakter vlnové funkce a Pauliho princip, mohou explicitě projevit.

• Atom He



Hamiltonián atomu He má tedy tvar :

$$\hat{H} = \hat{H}(\vec{r}_1) + \hat{H}(\vec{r}_2) + \underbrace{\hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(-e)(-e)}{r_{12}}} \quad (10.2.2)$$

$$r_{12} = |\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$$

Energie jednotlivých (neinteragujících) elektronů v poli jádra ($+Ze$), tj. charakteristické hodnoty hamiltoniánů $\hat{H}(\vec{r}_1)$ a $\hat{H}(\vec{r}_2)$, označíme \underline{E}_{n_1} a \underline{E}_{n_2} . Platí tedy pro ně :

$$\hat{H}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_1) = E_{n_1} \cdot \phi_{n_1}(\vec{r}_1)$$

$$\hat{H}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) = E_{n_2} \cdot \phi_{n_2}(\vec{r}_2)$$

kde $\underline{\phi}_{n_1}(\vec{r}_1)$ a $\underline{\phi}_{n_2}(\vec{r}_2)$ jsou "prostorově" vlnové funkce jednotlivých elektronů (nezapomeňme, že elektrony mají také spin!).

Celkovou vlnovou funkci obou interagujících elektronů budeme hledat ve tvaru :

$$\Psi_{n_1 n_2 S M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{\phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\substack{\text{prostorová část} \\ \text{celkové 2-elektronové} \\ \text{vln. funkce}}} \underbrace{\chi_{SM}(1, 2)}_{\substack{\text{spinová část} \\ \text{celkové 2-elektronové} \\ \text{vln. funkce}}} \quad (10.2.4)$$

$\underline{S}, \underline{M}$... celkový spin a jeho projekce obou elektronů

Prostorové vlnové funkce $\phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a odpovídající energie obou interagujících elektronů $\epsilon_{n_1 n_2}$ určíme tak, aby byly charakteristickými funkcemi a hodnotami celkového hamiltoniánu \hat{H} dle (10.2.2), tj. aby platilo:

$$\left\{ \hat{H}(\vec{r}_1) + \hat{H}(\vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\} \phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \epsilon_{n_1 n_2} \cdot \phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (10.2.5)$$

Spinové vlnové funkce $\chi_{SM}(1,2)$ určíme dále tak, aby celková vlnová funkce $\Psi_{n_1 n_2 SM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ měla příslušné vlastnosti symetrie, plynoucí z nerozlišitelnosti obou elektronů, konkrétně aby platilo:

$$\Psi_{n_1 n_2 SM}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = -\Psi_{n_1 n_2 SM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

2 elektrony jsou 2 nerozlišitelné fermiony \Rightarrow
 \Rightarrow jejich vlnová funkce musí být antisymetrická
 při záměně $1 \leftrightarrow 2$

(10.2.6)

Nyní se soustředíme na nalezení vlnové funkce $\phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ vyhovující rovnici (10.2.5). Hledáme ji ve tvaru:

$$\phi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = x_{n_1 n_2} \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + x_{n_2 n_1} \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2)$$

($n_1 \neq n_2 \dots$ Pauliho princip!)

(10.2.7)

$\phi_{n_1}(\vec{r}_1)$, $\phi_{n_2}(\vec{r}_2) \dots$ vln. funkce jednotlivých elektronů, splňující (10.2.3);
 $x_{n_1 n_2}$, $x_{n_2 n_1} \dots$ neznámé koeficienty, hledané tak, aby platilo (10.2.5).

Poznamenáme, že vlnovou funkci $\phi_{n_1, n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nemůžeme vyjádřit ve formě prostého součinu $\phi_{n_1}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{n_2}(\vec{r}_2)$, neboť elektrony jsou nerozlišitelné, a tudíž nevíme, který z nich je ve stavu n_1 a který ve stavu n_2 . Nutno proto uvážit lineární kombinaci obou možností, jak ukazuje vztah (10.2.4).

Dosaďme nyní (10.2.4) do (10.2.5):

$$\underbrace{\left\{ \hat{H}(\vec{r}_1) + \hat{H}(\vec{r}_2) + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\}}_L \left(x_{n_1, n_2} \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + x_{n_2, n_1} \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \right) = E_{n_1, n_2} \cdot \underbrace{\left(x_{n_1, n_2} \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + x_{n_2, n_1} \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \right)}_P \quad (10.2.8)$$

Operátory $\hat{H}(\vec{r}_1)$, $\hat{H}(\vec{r}_2)$, $\hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ jsou lineární (postulát o popisu fyz. veličin!), takže levou stranu L rovnice (10.2.8) upravíme následovně:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{L}} &= x_{n_1, n_2} \left(\underbrace{\hat{H}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}_{E_{n_1} \cdot \phi_{n_1}(\vec{r}_1)} + \underbrace{\hat{H}(\vec{r}_2) \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}_{\phi_{n_1}(\vec{r}_1) \cdot \underbrace{(\hat{H}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_2))}_{E_{n_2} \cdot \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}} + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) \right) + \\ &+ x_{n_2, n_1} \left(\underbrace{\hat{H}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2)}_{E_{n_2} \cdot \phi_{n_2}(\vec{r}_1)} + \underbrace{\hat{H}(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2)}_{\phi_{n_2}(\vec{r}_1) \cdot \underbrace{(\hat{H}(\vec{r}_2) \phi_{n_1}(\vec{r}_2))}_{E_{n_1} \cdot \phi_{n_1}(\vec{r}_2)}} + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \right) = \\ &= \underline{\underline{x_{n_1, n_2} \cdot (E_{n_1} + E_{n_2}) \cdot \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}} + \underline{\underline{x_{n_2, n_1} \cdot (E_{n_1} + E_{n_2}) \cdot \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2)}} + \\ &+ \underline{\underline{x_{n_1, n_2} \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}} + \underline{\underline{x_{n_2, n_1} \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2)}} \end{aligned} \quad (10.2.9)$$

Rovnice (10.2.12) tak má tvar:

$$\nabla \left(E_{n_1} + E_{n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2} + V_{n_1 n_2} \right) \cdot x_{n_1 n_2} + \Delta V_{n_1 n_2} \cdot x_{n_2 n_1} = 0 \quad \nabla (10.2.13)$$

Vrátíme-li se nyní zpět k rovnici (10.2.11), vynásobíme-li ji tentokrát součinem $\phi_{n_2}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_1}^*(\vec{r}_2)$ a vyintegrujeme-li přes \vec{r}_1 a \vec{r}_2 , dostaneme analogicky:

$$\nabla \left(\Delta V_{n_1 n_2} \cdot x_{n_1 n_2} + (E_{n_1} + E_{n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2} + V_{n_1 n_2}) x_{n_2 n_1} \right) = 0 \quad \nabla (10.2.14)$$

Rovnice (10.2.13) a (10.2.14) představují soustavu 2 homogenních algebraických rovnic pro neznámé koeficienty $x_{n_1 n_2}$ a $x_{n_2 n_1}$.
Můžeme ji zapsat v maticovém tvaru:

$$\nabla \begin{pmatrix} (E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2}) & ; & \Delta V_{n_1 n_2} \\ \Delta V_{n_1 n_2} & ; & E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{n_1 n_2} \\ x_{n_2 n_1} \end{pmatrix} = 0 \quad \nabla (10.2.15)$$

Neuťlové řešení bude existovat jen když:

$$\det \begin{pmatrix} E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2} & ; & \Delta V_{n_1 n_2} \\ \Delta V_{n_1 n_2} & ; & E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2} \end{pmatrix} = 0 \quad (10.2.16)$$

$$\nabla \left((E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \varepsilon_{n_1 n_2})^2 - (\Delta V_{n_1 n_2})^2 \right) = 0 \quad \nabla (10.2.17)$$

Rovnice (10.2.17) představuje kvadratickou rovnici pro neznámé energie $\underline{\underline{\epsilon_{n_1 n_2}}}$ dvou interagujících elektronů.

Užítím vztahu $a^2 - b^2 = (a-b)(a+b)$ upravíme (10.2.17) následovně:

$$\left[(E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \epsilon_{n_1 n_2}) - \Delta V_{n_1 n_2} \right] \left[(E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \epsilon_{n_1 n_2}) + \Delta V_{n_1 n_2} \right] = 0$$

$E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \epsilon_{n_1 n_2} - \Delta V_{n_1 n_2} = 0$

 \downarrow

$\epsilon_{n_1 n_2}^{(-)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \Delta V_{n_1 n_2}$

$E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \epsilon_{n_1 n_2} + \Delta V_{n_1 n_2} = 0$

 \downarrow

$\epsilon_{n_1 n_2}^{(+)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} + \Delta V_{n_1 n_2}$

neinteragující
elektrony

interagující
elektrony
 (posunutí ($V_{n_1 n_2}$) a
 rozštěpení ($+\Delta V_{n_1 n_2}, -\Delta V_{n_1 n_2}$)
 energ. hladin)

(10.2.18)

Velikiny $\underline{\underline{V_{n_1 n_2}}}$ a $\underline{\underline{\Delta V_{n_1 n_2}}}$ byly formálně zavedeny v průběhu výpočtu ve výrazu (10.2.12). Prozkoumejme nyní jejich fyzikální význam:

$$V_{n_1 n_2} = \iint \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e \cdot (-e)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}}_{\rho_{n_1}(\vec{r}_1)} \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \underbrace{(-e) \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_1)}_{\rho_{n_1}(\vec{r}_1)} \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \underbrace{(-e) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \phi_{n_2}(\vec{r}_2)}_{\rho_{n_2}(\vec{r}_2)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

(10.2.19)

Dostáváme tak:

$$V_{n_1, n_2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \rho_{n_1}(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \rho_{n_2}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$\rho_{n_1}(\vec{r}_1) = (-e) \cdot |\phi_{n_1}(\vec{r}_1)|^2 \dots \text{prostorově rozložení}$$

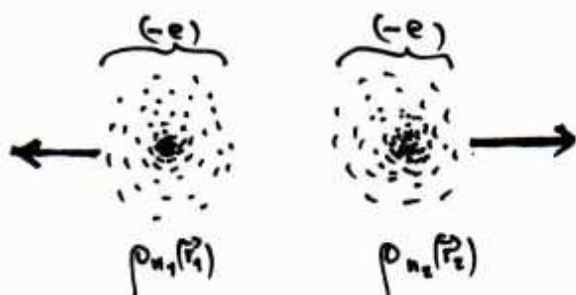
nábojové hustoty
jedubho elektronu
ve stavu $\underline{n_1}$

$$\rho_{n_2}(\vec{r}_2) = (-e) \cdot |\phi_{n_2}(\vec{r}_2)|^2 \dots \text{prostorově rozložení}$$

nábojové hustoty
druhého elektronu
ve stavu $\underline{n_2}$

V_{n_1, n_2} je tedy energie Coulombické interakce
dvou nábojů s prostorovým rozložením nábojové
hustoty $\rho_{n_1}(\vec{r}_1)$ a $\rho_{n_2}(\vec{r}_2)$.

(10.2.20)



klasické odpuzování elektronů

Interpretace $\Delta V_{n_1, n_2}$ už tak jednoduchá a přímocará není.

Podle (10.2.12) máme:

$$\Delta V_{n_1, n_2} = \iint \phi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \phi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(-e)(-e)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}}_{\text{Coulomb interaction}} \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

(10.2.21)

Na rozdíl od předchozího případu, ve formuli (10.2.21) pro $\Delta V_{n_1 n_2}$ nelze žádným způsobem dát k sobě funkce $\underline{\phi}^*$ a $\underline{\phi}$ tak, aby měly současně stejné indexy i stejné argumenty, tj. aby bylo možno vytvořit kvadrát abs. hodnoty $|\phi|^2 = \phi^* \phi$, který má odpovídající fyz. interpretaci.

Budto můžeme formuli (10.2.21) přepsat ve tvaru

$$\Delta V_{n_1 n_2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \underbrace{(-e)\phi_{n_1}^*(\vec{r}_1)\phi_{n_2}(\vec{r}_1)}_{\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_1)} \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \underbrace{(-e)\phi_{n_2}^*(\vec{r}_2)\phi_{n_1}(\vec{r}_2)}_{\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_2)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (10.2.22)$$

mobo ve tvaru

$$\Delta V_{n_1 n_2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \underbrace{(-e)\phi_{n_1}^*(\vec{r}_1)\phi_{n_1}(\vec{r}_2)}_{\rho_{n_1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \underbrace{(e)\phi_{n_2}^*(\vec{r}_1)\phi_{n_2}(\vec{r}_2)}_{\rho_{n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (10.2.23)$$

Funkce $\underline{\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_1)}$, $\underline{\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_2)}$, vystupující v (10.2.22), si můžeme představit jako prostorové rozložení nábojové hustoty jednotlivých elektronů, které se však mohou částečně nacházet v kvantových stavech $\underline{n_1}$ i $\underline{n_2}$, tj. jejich kvant. stav je neurčitý.

Analogicky, funkce $\underline{\rho_{n_1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}$, $\underline{\rho_{n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}$, vystupující v (10.2.23), můžeme interpretovat jako prostorové rozložení nábojové hustoty v daných (určitých) kvantových stavech $\underline{n_1}$ a $\underline{n_2}$, na kterém se ovšem podílejí oba elektrony, tj. párod nábojové hustoty v daném kvantovém stavu je neurčitý (v tom smyslu, že uovíme, od kterého elektronu pochází).

Ať tak či onak, vždy je situace taková, že :

bud' • daný elektron se současně, ale přitom jen částečně, nachází ve dvou různých stavech ;

nebo • v daném stavu se vyskytují současně, ale přitom jen částečně, oba elektrony (úplná současná přítomnost obou elektronů není možná podle Pauliho principu).

Lze to též interpretovat tak, že daný elektron neustále vyměňuje stavy, ve kterých se nachází, takže jej nelze charakterizovat určitými kvantovými čísly.

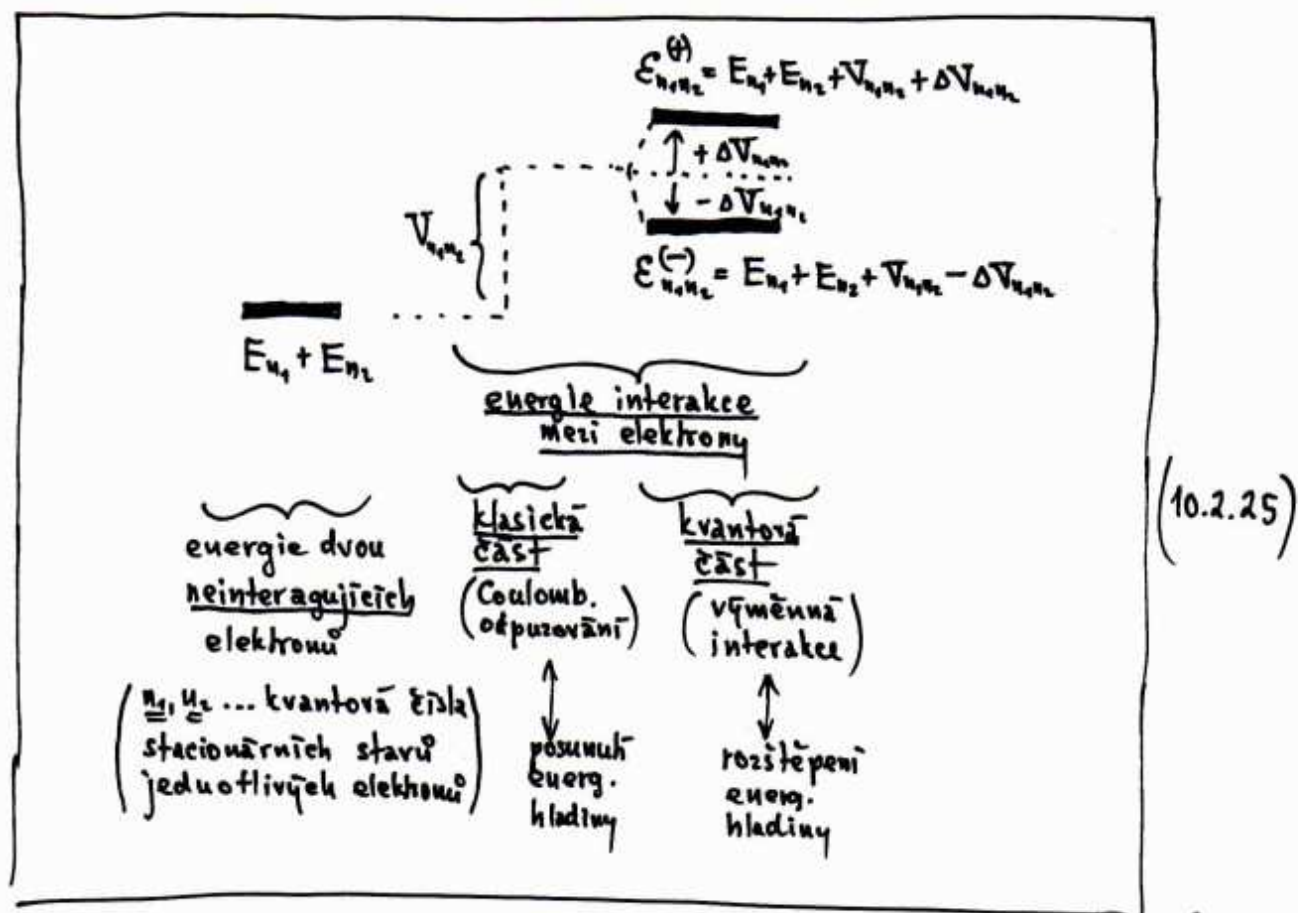
Nebo obráceně, v daném stavu se neustále vyměňují polohy obou elektronů, takže kvantovým číslem nelze přiřadit určitý elektron.

(10.2.24)

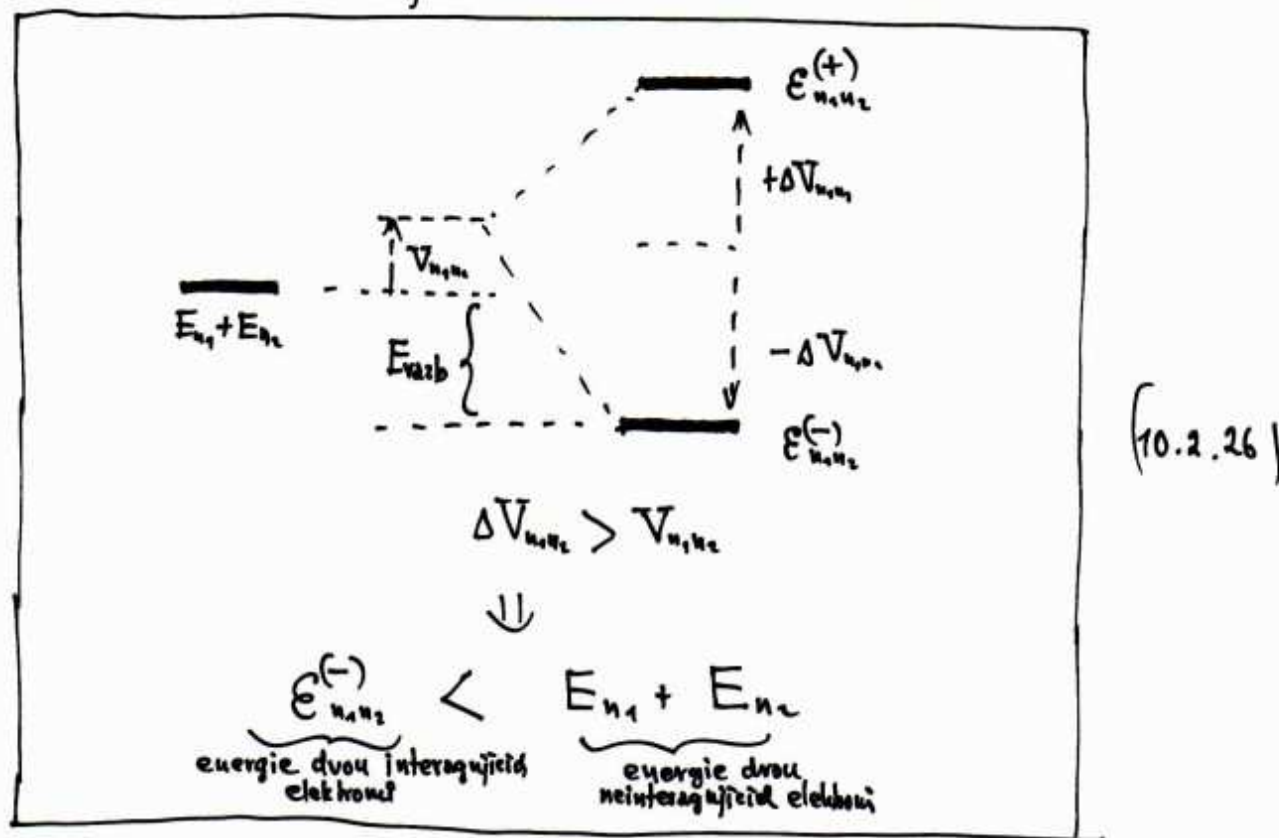
Z výše uvedených důvodů se energie $\Delta V_{n_1 n_2}$ dle (10.2.22) resp. (10.2.23) nazývá energie výměnné interakce a je zřejmým důsledkem výměnného charakteru vlnové funkce nerozlišitelných elektronů, o němž jsme hovořili v obecném úvodu k dané problematice.

Formule (10.2.22) resp. (10.2.23) se neztotožňuje s řádnou klasickou formulí pro energii interakce nábojů jakýmkoli způsobem rozložených v prostoru. Tato energie $\Delta V_{n_1 n_2}$ je tedy výlučeným kvantovým jevem, který je klasickou fyzikou nepostihnutelný.

Vrátíme-li se nyní zpět k (10.2.18), můžeme formální matematice tam obsažené dát srozumitelnější fyzikální význam :



Protože velikosti energií $V_{n_1 n_2}$ a $\Delta V_{n_1 n_2}$ závisí na vlnových funkcích kontrárních stavů jednotlivých elektronů v atomu H α (viz 10.2.20-21), může nastat i následující situace



Obr. (10.2.26) říká, že účinkem výměnné interakce může mezi elektrony vzniknout přitažlivá síla (na základě klasické fyziky nemožné - souhlasně nábije se vždy odpuzují).
Dva elektrony tak vytvoří vázaný systém (tzv. Cooperův pár) s zápornou energií

$$\begin{aligned}
 \underline{E_{\text{vazb}}} &= (E_{n_1} + E_{n_2}) - \mathcal{E}_{n_1, n_2}^{(+)} = \\
 &= (E_{n_1} + E_{n_2}) - (E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1, n_2} - \Delta V_{n_1, n_2}) \\
 &= \underline{\underline{(\Delta V_{n_1, n_2} - V_{n_1, n_2})}} \quad (10.2.27) \\
 &\quad (> 0)
 \end{aligned}$$

Kvantový efekt výměnné interakce je tedy schopen nejen vykompenzovat, ale i převážit elektrostatické odpuzování souhlasných nábojů.
Vznik vázaných elektronových párů je klíčový pro objasnění supravodivosti krystalů, či supratekutosti kapalin (za nízkých teplot) nebo atomových jader (za vysokých teplot).

Nyní, když již leccos víme o energii interakce mezi elektrony v atomu He (viz (10.2.25)), můžeme se vrátit zpět k soustavě rovnic (10.2.15) a dopočítat koeficienty $\underline{x_{n_1, n_2}}$ i $\underline{x_{n_2, n_1}}$, určující prostorovou vlnovou funkci $\phi_{n_1, n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dle (10.2.7).

Dosazením hodnoty $\mathcal{E}_{n_1, n_2}^{(+)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1, n_2} + \Delta V_{n_1, n_2}$ do soustavy (10.2.15) dostaneme

$$\boxed{x_{n_2, n_1} = x_{n_1, n_2}} \quad (10.2.28)$$

↓

$$\boxed{\phi_{n_1, n_2}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = x_{n_1, n_2} \left\{ \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \right\}; \quad \underline{x_{n_1, n_2}} \text{ libovolné}} \quad (10.2.29)$$

Dosažením hodnoty $\mathcal{E}_{n_1 n_2}^{(-)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \Delta V_{n_1 n_2}$ do rovnice (10.2.15) dále dostaneme:

$$\boxed{x_{n_2 n_1} = -x_{n_1 n_2}} \quad (10.2.30)$$

$$\boxed{\phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = x_{n_1 n_2} \{ \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) - \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \}}; \underline{x_{n_1 n_2}} \text{ libovolné} \quad (10.2.31)$$

Konkrétní hodnotu $\underline{x_{n_1 n_2}}$ určíme z požadavku, že vlnové funkce $\underline{\phi_{n_1 n_2}^{(+)}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a $\underline{\phi_{n_1 n_2}^{(-)}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dle (10.2.29) a (10.2.31)

musejí splňovat normovací podmínku:

$$\boxed{\iint |\phi_{n_1 n_2}^{(\pm)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 1} \quad (10.2.32)$$

Dosažení (10.2.29) a (10.2.31) do (10.2.32) vede k výsledku

$$\boxed{x_{n_1 n_2} = \frac{1}{\sqrt{2!}}} \quad (10.2.33)$$

což dosazeno do (10.2.29) a (10.2.31) dá:

$$\boxed{\phi_{n_1 n_2}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \{ \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) + \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \}}$$

(prostorová část vlnové funkce 2 interagujících elektronů v atomu He, odpovídající jejich energii)

$$\mathcal{E}_{n_1 n_2}^{(+)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} + \Delta V_{n_1 n_2} \quad (10.2.34)$$

$$\phi_{n_1 n_2}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{n_1 n_2}^{(+)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

symetrická při změně $1 \leftrightarrow 2$

$$\phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \phi_{n_1}(\vec{r}_1) \phi_{n_2}(\vec{r}_2) - \phi_{n_2}(\vec{r}_1) \phi_{n_1}(\vec{r}_2) \right\}$$

(prostorová část vlnové funkce 2 interagujících elektronů v atomu He, odpovídající jejich energii)

$$E_{n_1 n_2}^{(-)} = E_{n_1} + E_{n_2} + V_{n_1 n_2} - \Delta V_{n_1 n_2}$$

(10.2.35)

$$\phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = - \phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

antisymetrická při záměně 1↔2

Celková vlnová funkce $\Psi_{n_1 n_2 S M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dle (10.2.4) musí být za všech okolností antisymetrická při záměně 1↔2, což znamená, že spiny obou elektronů se musejí uspořádat tak, aby spinová část celkové vlnové funkce $\chi_{SM}(1,2)$ byla :

a) antisymetrická při symetrické prostorové části $\phi_{n_1 n_2}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ b) symetrická při antisymetrické prostor. části $\phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

(10.2.36)

Spinové vln. funkce jednotlivých elektronů budou : $\chi_{\pm\frac{1}{2}}(1)$; $\chi_{\pm\frac{1}{2}}(2)$, kde každá funkce $\chi_{\pm\frac{1}{2}}$ je dvojdimenzionálním zúžením Diracových spinových funkcí $\chi_{\pm\frac{1}{2}}^{(0)}$:

$$\chi_{+\frac{1}{2}}^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\chi_{-\frac{1}{2}}^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(10.2.37)

Takové dvojdimenziální řešení si můžeme dovolit tehdy, když atom He nebude pod bombardující správkou γ -záření, a nebudou se tudíž excitovat virtuální elektrony z Diracova vakua a vsáknat tak nově elektron-pozitronové páry.

Spinové vln. funkce $\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ a $\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ tedy popisují spinové stavy reálného elektronu, když Diracovo vakuum nefluktuje.

Pro 2 elektrony můžeme vytvořit 4 součiny spinových funkcí $\chi_{\pm\frac{1}{2}}$:

$$\begin{array}{l} \chi_{+\frac{1}{2}}(1) \cdot \chi_{+\frac{1}{2}}(2) \\ \chi_{+\frac{1}{2}}(1) \cdot \chi_{-\frac{1}{2}}(2) \\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1) \cdot \chi_{+\frac{1}{2}}(2) \\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1) \cdot \chi_{-\frac{1}{2}}(2) \end{array} \quad (10.2.38)$$


z nichž lze vytvořit 1 antisymetrickou a 3 symetrické kombinace:


$$\chi_{00}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \chi_{+\frac{1}{2}}(1) \chi_{-\frac{1}{2}}(2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(1) \chi_{+\frac{1}{2}}(2) \right\}$$

$\begin{array}{c} \uparrow \uparrow \\ S \ H \end{array}$

antisymetrická spinová vln. funkce 2 elektronů.

Symbolické označení:





$S=0$ celkový spin obou e.

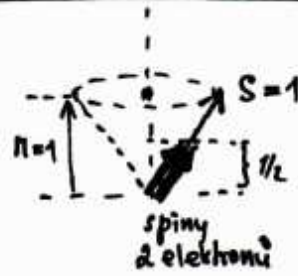
Graficky:

(10.2.39)

ANTISYMETRICKÝ SPINOVÝ SINGLET

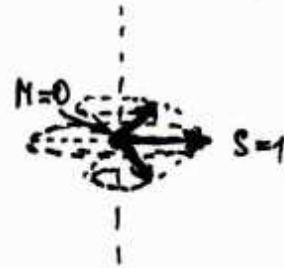
$$\chi_{11}(1,2) = \chi_{+\frac{1}{2}}(1)\chi_{+\frac{1}{2}}(2)$$

$\uparrow\uparrow$
 $S\ M$



$$\chi_{10}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \chi_{+\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2) + \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{+\frac{1}{2}}(2) \right\}$$

$\uparrow\uparrow$
 $S\ M$



$$\chi_{1-1} = \chi_{-\frac{1}{2}}(1)\chi_{-\frac{1}{2}}(2)$$

$\uparrow\uparrow$
 $S\ M$



(10.2.40)

tři symetrické spinové
vln. funkce 2 elektronů.

Symbolické označení : $(\uparrow\uparrow)$

SYMETRICKÝ SPINOVÝ TRIPLET

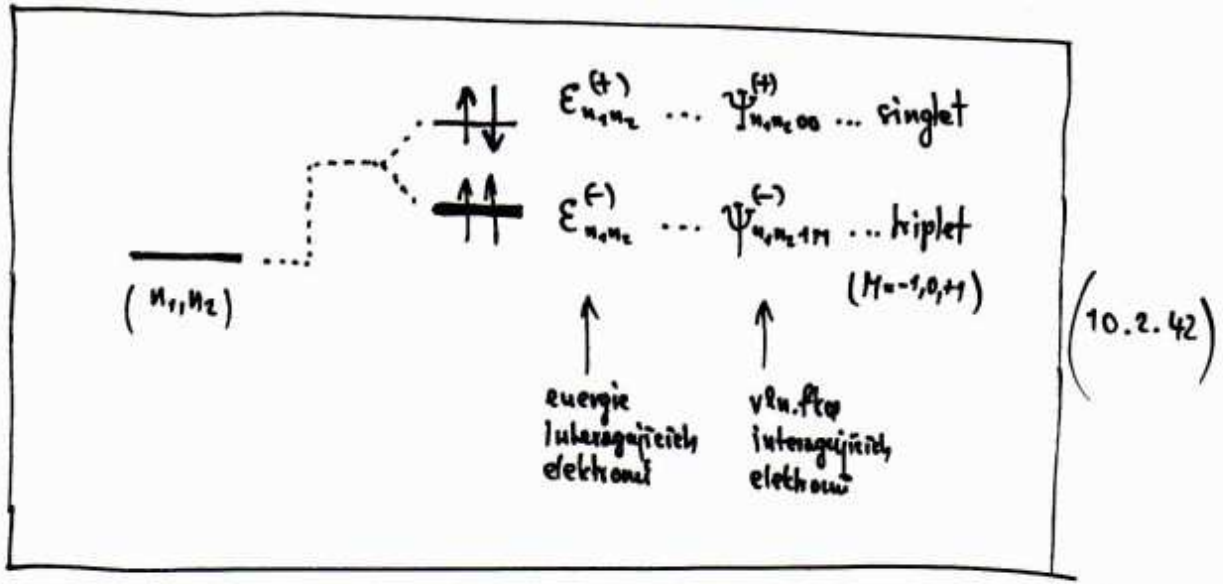
Zkombinujeme-li nyní výsledky (10.2.34), (10.2.35), (10.2.39) a (10.2.40), a uvážíme-li (10.2.36), můžeme napsat výsledně vlnové funkce 2 elektronů v atomu He:

$$\underbrace{\psi_{n_1 n_2 00}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{antisym.}} = \underbrace{\phi_{n_1 n_2}^{(+)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{sym.}} \cdot \underbrace{\chi_{00}(1,2)}_{\text{antisym.}} \dots \text{singlet} \quad (1 \text{ stav})$$

$$\underbrace{\psi_{n_1 n_2 1M}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{antisym.}} = \underbrace{\phi_{n_1 n_2}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{antisym.}} \cdot \underbrace{\chi_{1M}(1,2)}_{\text{sym.}} \dots \text{triplet} \quad (3 \text{ degenerované stavy: } M = -1, 0, +1)$$

(10.2.41)

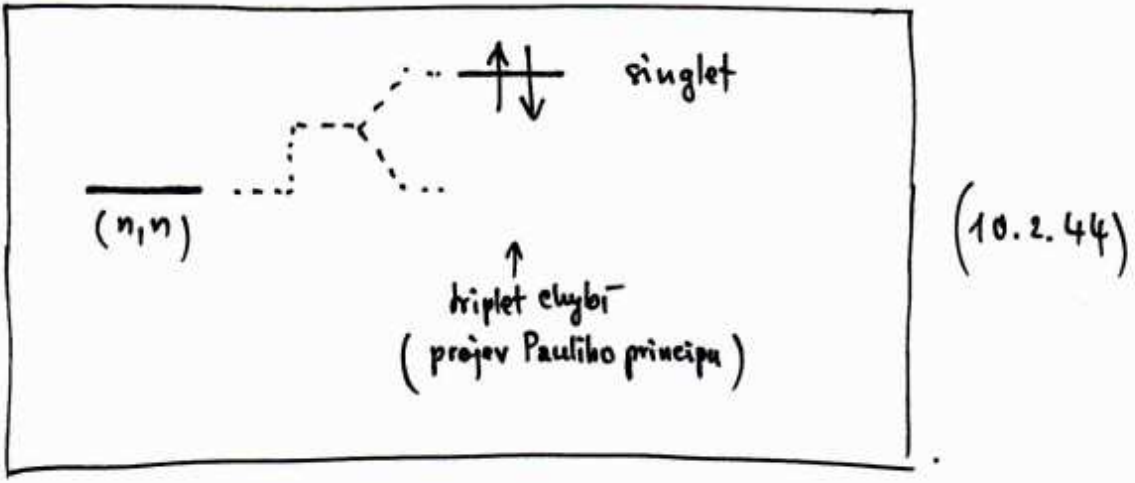
Shrneme-li nyní získané poznatky o energii interakce a vlnových funkcích 2 elektronů v atomu He, můžeme situaci přehledně znázornit takto:



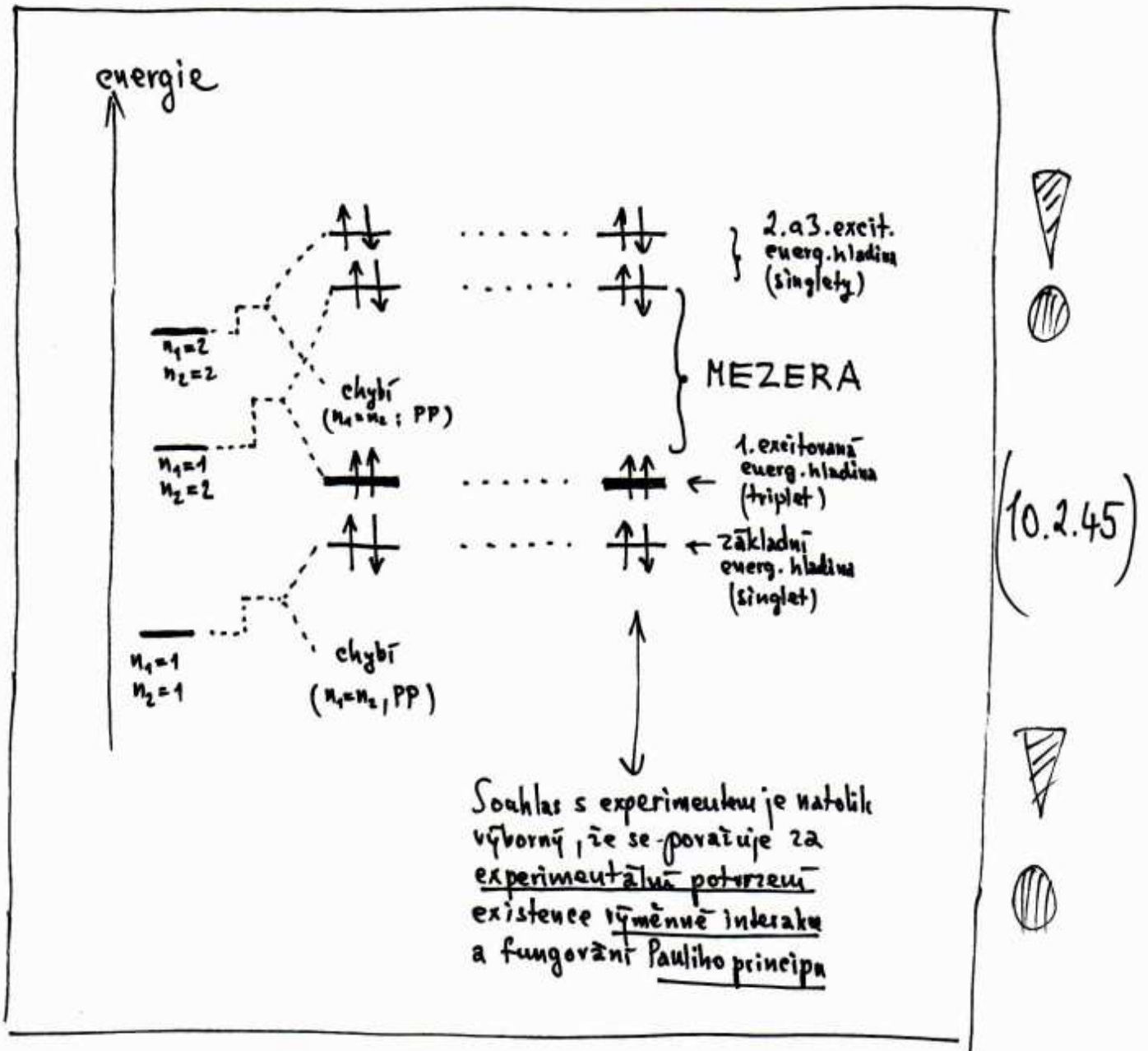
Je-li $\underbrace{n_1 = n_2}_n$, spodní energ. hladina $\underline{E_{nn}^{(-)}}$ chybí, neboť

$$\underline{\underline{\underline{\Psi_{nn11}^{(-)}}}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left\{ \phi_n(\vec{r}_1)\phi_n(\vec{r}_2) - \phi_n(\vec{r}_2)\phi_n(\vec{r}_1) \right\}}_0 \cdot \chi_{11}(1,2) \equiv \underline{\underline{\underline{0}}} \quad (10.2.43)$$

Situace vypadá tedy následovně:



Nyní již můžeme získat názornou představu o nejnižších energetických hladinách atomu He:



ENERGETICKÉ SPEKTRUM A SPINOVÁ
STRUKTURA NEJNIŽŠÍCH STAVŮ
ATOMU He

Energetické spektrum atomu He dle (10.2.45) má 2 zřetelné důsledky :

①

atom He
v základním stavu = boson
- klíč k pochopení
supratekutosti He
při $T \rightarrow 0$
(bosonová kondenzace!)

(10.2.46)

②

mezera

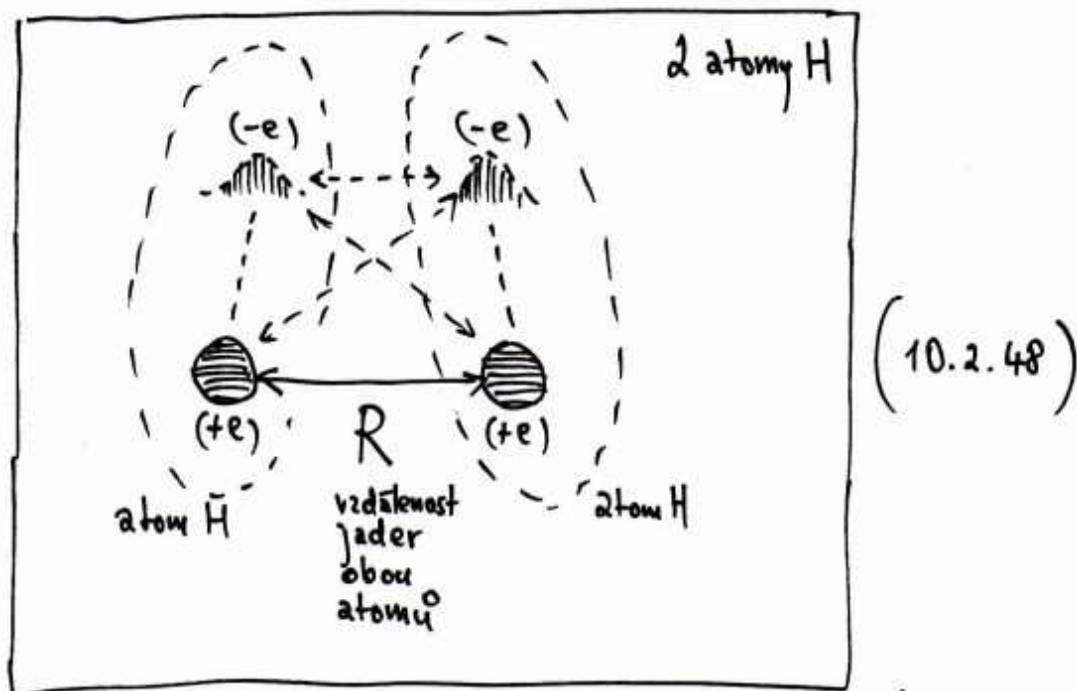
atom He v zákl. stavu 0
atom He v zákl. st. 0
atom He v 1. exc. st. 1
atom He v zákl. st. 0

řetězec $\approx 10^{23}$ silně zchlazených atomů He ($T \rightarrow 0$)
(1 mol $\sim 4g$) = registr pro binární kódování čísel v kvantovém počítači

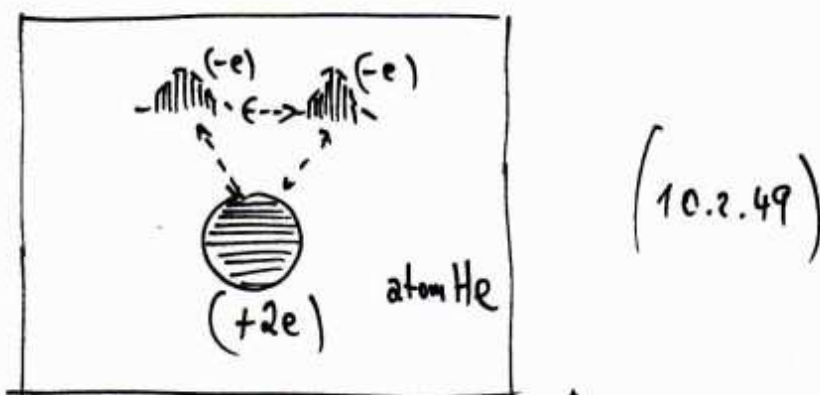
(10.2.47)

Detailnější informace o kvantovém počítači a dalších jovech kvantové informatiky, jako jsou husté kódování a teleportace, lze nalézt v přednášce R. Kuchta : Kvantová teorie (3.roč.FAV + 4.roč PF ZČU)

Podobný systém jako atom He tvoří 2 interagující atomy vodíku :



V limitě $R \rightarrow 0$ přechází tento systém v atom He.



Výsledky pro atom He lze proto zobecnit i na 2 interagující atomy H, pouze příslušné výpočty jsou zase o stupeň komplikovanější:

Komplikace č.1 : Energie i vln.funkce závisí navíc na vzdálenosti R jader obou atomů.

Komplikace č.2 : Hamiltonián je komplikovanější, neboť každý mikrosbjekt interaguje se všemi ostatními, jak je naznačeno v obr. (10.2.48).

Komplikace 3: Pro vln. funkce elektronů neplatí normovací podmínka a relace ortonormality (rov. (10.2.12)), neboť tyto vln. funkce se nyní vztahují k různým kvantovým systémům (= atomům)

Všechny tyto 3 komplikace jsou však výlučně matematického (výpočetního) charakteru, fyzikální úvahy a myšlenky jsou naprosto stejně, jak bylo diskutováno v případě atomu He.

Vlnová funkce obou elektronů se opět hledá jako lineární kombinace součinu vln. funkcí elektronů v jednotlivých atomech (metoda LCAO ... Linear Combination of Atomic Orbitals):

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R) = X_{AB}(R) \cdot \underbrace{\psi_A(\vec{r}_1)}_{\substack{\uparrow \\ \text{elektron} \\ \text{v atomu A}}} \underbrace{\psi_B(\vec{r}_2)}_{\substack{\uparrow \\ \text{elektron} \\ \text{v atomu B}}} + X_{BA}(R) \cdot \psi_B(\vec{r}_1) \psi_A(\vec{r}_2)$$

(10.2.50)

Koeficienty $X_{AB}(R)$, $X_{BA}(R)$ nyní funkcemi R!

Podobně pro energii interakce obou elektronů máme:

$$E_{\text{int}}^{\downarrow\downarrow}(R) = V_{n_1 n_2}(R) + \Delta V_{n_1 n_2}(R)$$

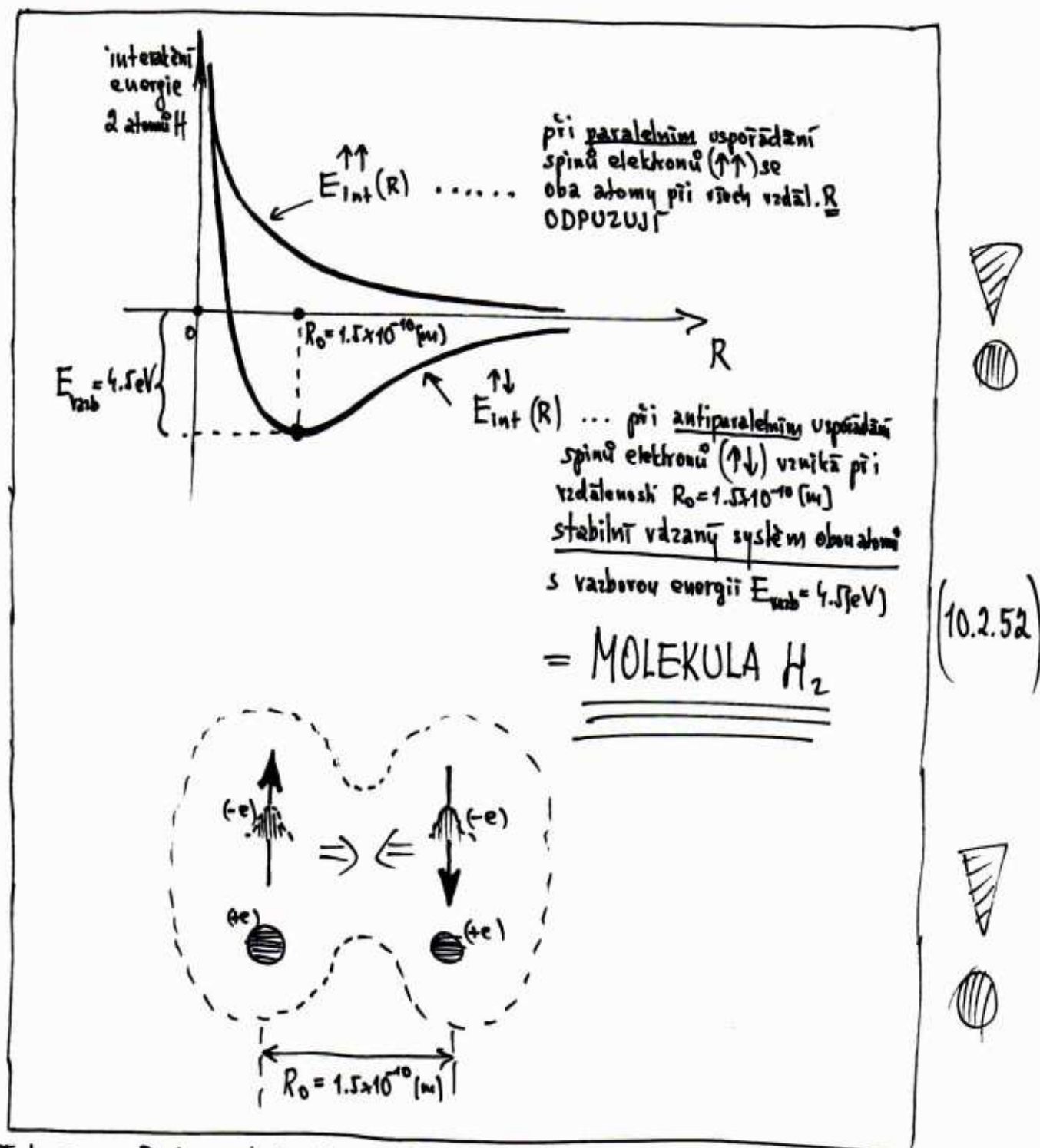
$$E_{\text{int}}^{\uparrow\uparrow}(R) = V_{n_1 n_2}(R) - \Delta V_{n_1 n_2}(R)$$

(10.2.51)

vyměnná interakce

Energie interakce elektronů ve dvou atomech H, jejichž jádra jsou od sebe vzdálena o R, při 2 možných uspořádáních spinů elektronů

Numerické výpočty (London, Heitler) pro $E_{int}^{\uparrow\downarrow}(R)$ a $E_{int}^{\uparrow\uparrow}(R)$ dávají:



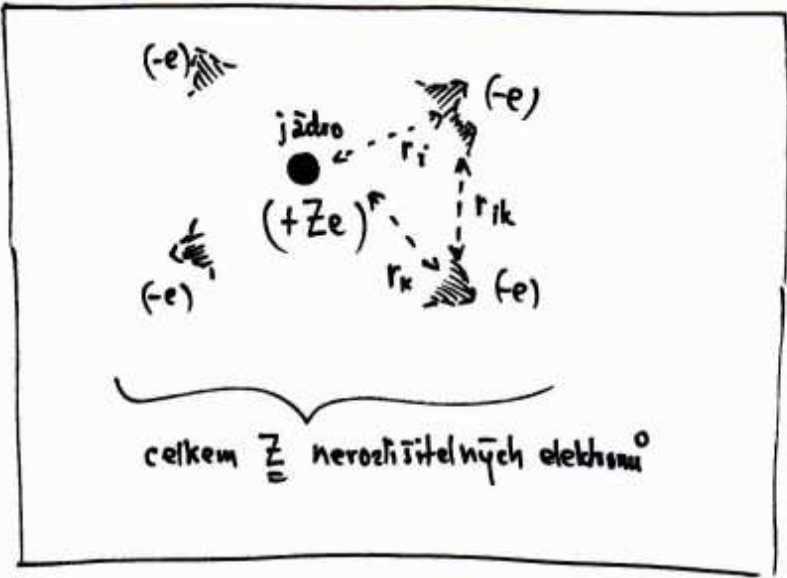
Takovým způsobem tedy teprve kvantová fyzika na základě výměnné interakce mezi nerozlišitelnými elektrony vyrůstila 100-letý problém chemiků - proč vlastně vzniká molekula, tj. proč se vážou 2 neutrální atomy. Neut divu, že Nobelova cena pro autory neuchala na sebe dlouho čekat. Další pozoruhodné vlastnosti molekul (vibrace, rotace apod.) se rozebírají ve výběrově přednášce R. Kuchta: "Fyzika mikrosvěta".



11. TÝDEN

MNOHAELEKTRONOVÉ SYSTÉMY

Uvažujme atom s atomovým číslem Z :



(11.1)

Hamiltonián atomu je :

$$\hat{H}_{\text{atom}} = \sum_{i=1}^Z \left\{ \hat{E}_{\text{kin}}(i) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(+Ze)(-e)}{r_i} \right\} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^Z \sum_{k \neq i}^Z \frac{(-e)(-e)}{r_{ik}}$$

energie jednotlivých elektronů v elst. poli jádra $(+Ze)$
interakce mezi jednotlivými elektrony

(11.2)

Vlnovou funkcií Z nerozlišitelných elektronů (= fermionů se spinem $1/2$) má tvar Slaterova determinanta (viz 10. týden) ;

$$\Psi_{\text{atom}} = \Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_Z}(1, \dots, Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(1) & \dots & \psi_{\alpha_1}(Z) \\ \psi_{\alpha_2}(1) & \dots & \psi_{\alpha_2}(Z) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\alpha_Z}(1) & \dots & \psi_{\alpha_Z}(Z) \end{pmatrix} \quad (11.3)$$

$$\alpha_i = (n_i, l_i, M_i, \frac{1}{2} m_i)$$

Pro $Z \geq 3$ je nalezení charakteristických funkcí hamiltoniánu \hat{H}_{atom} dle (11.2) ve tvaru Slaterových determinantů Ψ_{atom} dle (11.3) z matematického hlediska prakticky nemožné. Proto jsou nutně aproximace.

Jako nejefektivnější se ukazuje Hartree-Fockova aproximace (HFA) pomocí selfkonzistentního středního atomárního pole.

Princípem je předpoklad, že každý elektron se pohybuje v jistém stabilním atomárním poli, které vzniká ustředněním interakcí mezi všemi elektrony navzájem.

Matematicky je tato myšlenka vyjádřena požadavkem

$$\left\langle \hat{H}_{\text{atom}} \right\rangle_{\Psi_{\text{atom}}} = \text{minimum} \quad (11.4)$$

selfkonzistentnost atomárního pole
 (střední hodnota hamiltoniánu atomu ve stavu popsaném Slater-det. Ψ_{atom})

stabilita atomárního pole

Dosažením (11.2) a (11.3) do (11.4) a následnou variační procedurou minimalizace funkcionálu mnoha proměnných dostali Hartree a Fock následující system vzájemných nelineárních integrodiferenciálních rovnic (Hartree-Fockovy (HF) rovnice):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + (e)U(r_i) \right\} \psi_{d_i}(r_i) - \sum_k \int \frac{\rho(r_k, r_i)}{r_{ik}} \psi_{d_i}(r_i) dr_k = E_{d_i} \cdot \psi_{d_i}(r_i)$$

atomem vytvořený
potenciál, v němž
se nachází i -tý
elektron
= coulombická (klasická)
složka středního
atomárního pole

výměnná interakce
 i -tého elektronu
se všemi ostatními
= pauliovská (kvantová)
složka středního
atomárního pole

energie a vln. funkce
 i -tého elektronu
ve střed. stavěch d_i
středního atomárního
pole

Funkce $U(r_i)$ a $\rho(r_k, r_i)$ závisí na hledaných funkcích $\psi_{d_i}(r_i) \Rightarrow$
 \Rightarrow nelinearita příslušných rovnic :

$$U(r_i) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(+Ze)}{r_i} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_k \int \frac{(-e) \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(r_k)|^2}{r_{ik}} dr_k$$

(11.5)

potenciál vytvořený
v místě r_i jádrem
atomu (+Ze)

potenciál vytvořený
v místě r_i všemi
elektrony různými
od i -tého
(stíníci potenciál)

$$\rho(r_i, r_k) = \sum_{\alpha} (-e) \psi_{\alpha}^*(r_k) (e) \psi_{\alpha}(r_i)$$

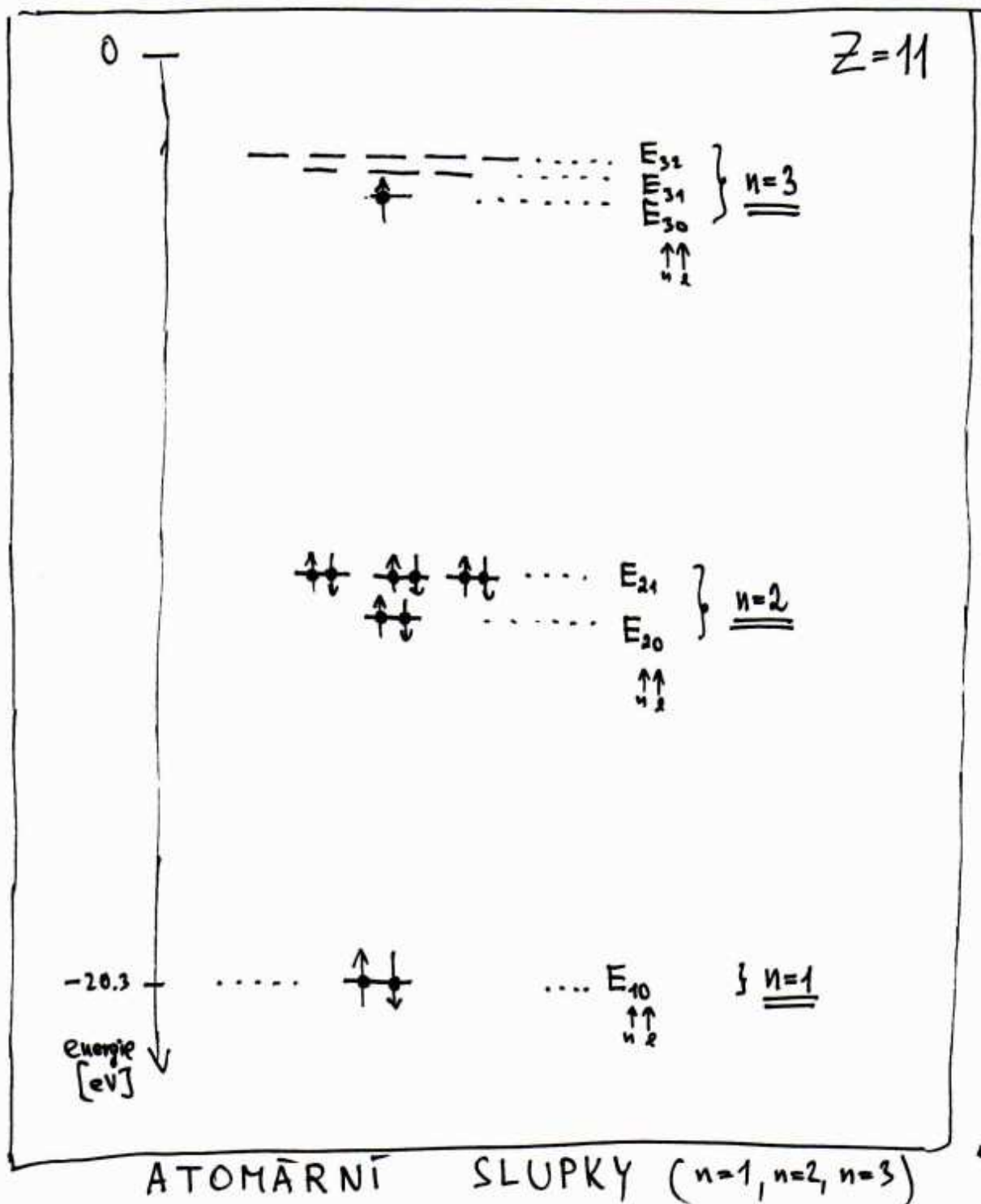
nábojová hustota spjatá
s přeléváním (výměnou)
elektronového "oblaku"
mezi místy r_i a r_k



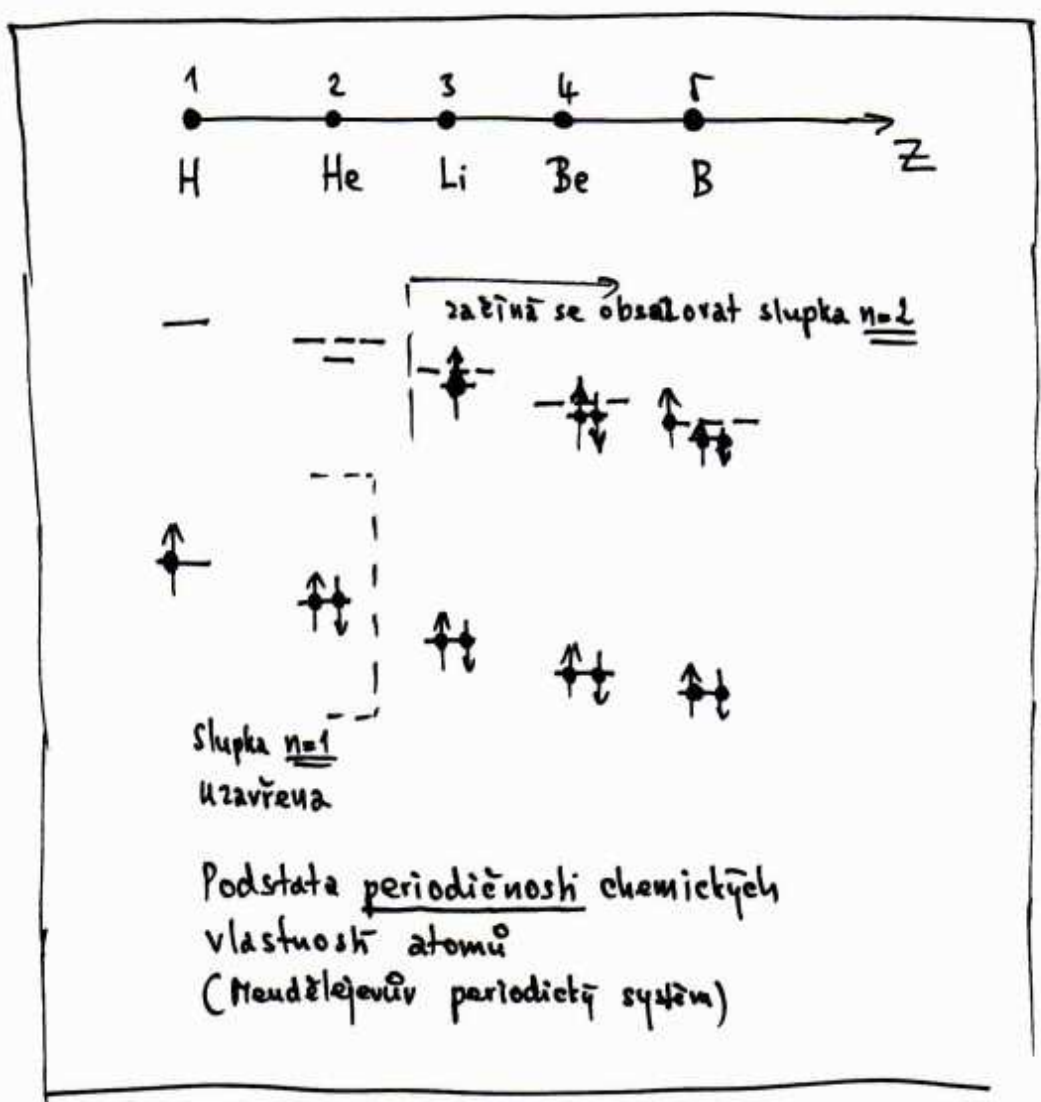
HARTREE-FOCKOVY (HF) ROVNICE

HF - rovnice se řeší standardními iteračními procedurami, přičemž za výchozí bod se berou vlnové funkce elektronu v atomu H, jejich analytická forma je známa: $\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.

Jako ilustraci výsledků uvedme získané energie E_{ni} pro atom Na ($Z=11$) v základním stavu - tyto energie vyhráňují tzv. atomární slupky charakterizované kvant. čísly n :



Obsazování jednotlivých slupek a podslupek se děje v souladu s Pauliho principem



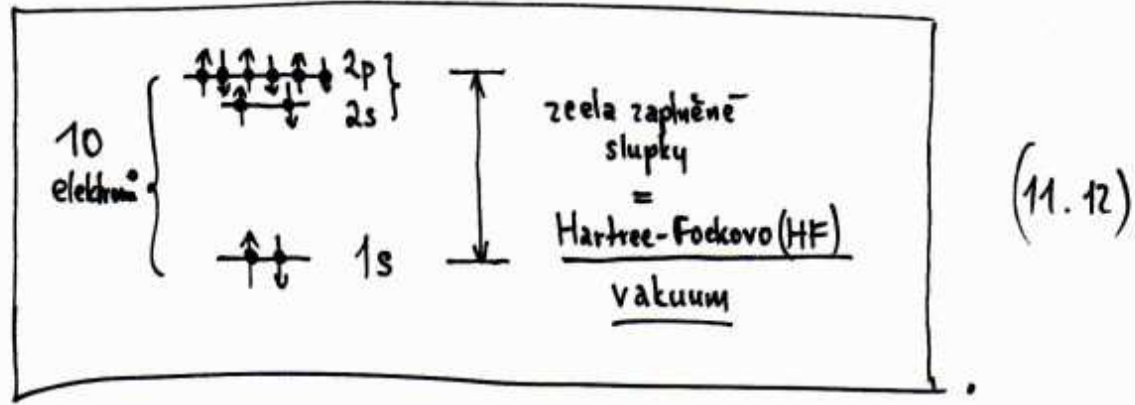
(11.10)

Sklední atomární pole bere do úvahy jen část všech interakcí mezi elektrony, ale "nevyčerpává" je všechny :

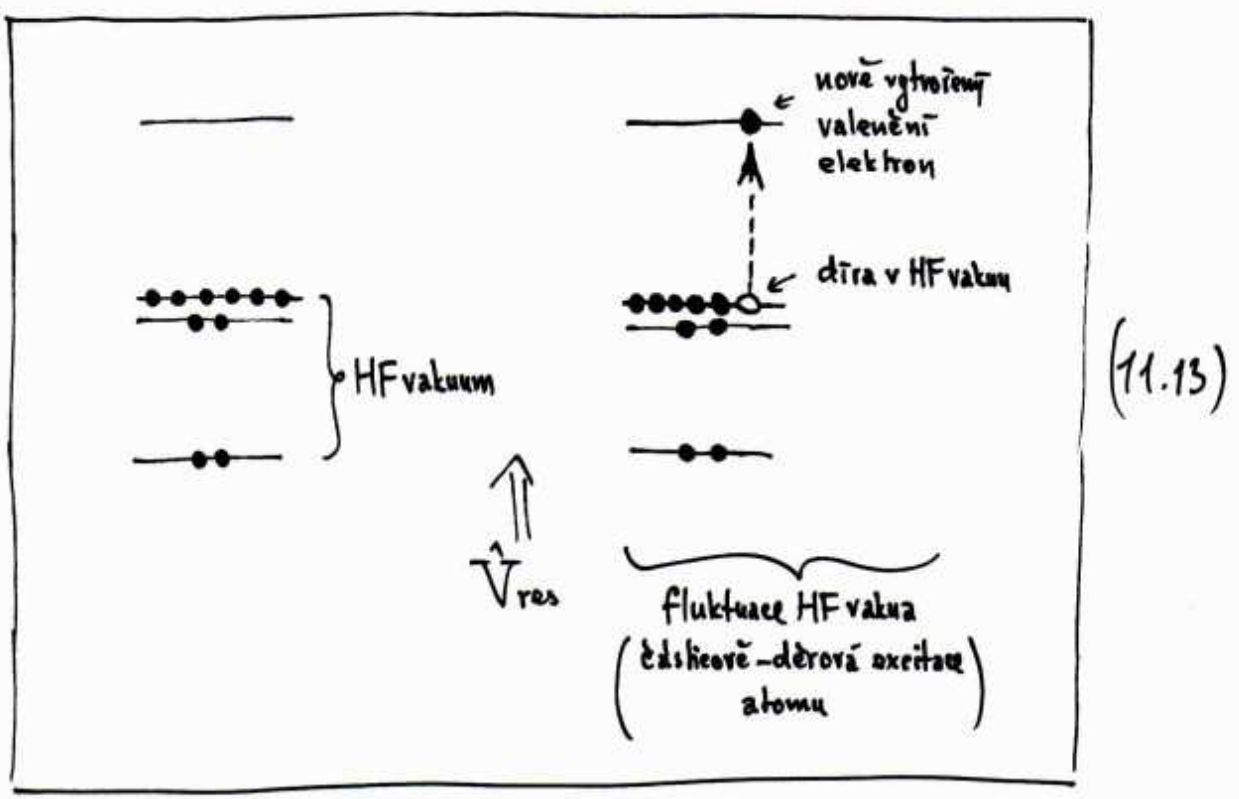
$$\hat{H}_{atom} = \underbrace{\langle \hat{H}_{atom} \rangle_{\psi_{atom}}}_{\text{sklední atomární pole}} + \underbrace{\hat{V}_{res}}_{\text{reziduální (zbytková) interakce mezi elektrony}}$$

(11.11)

Podívejme se, jaký efekt může způsobit reziduální interakce.
 Ukažme si to na nejjednodušším příkladu atome s uzavřenými
slupkami, např. Z=10 :



To, co způsobí reziduální interakce \hat{V}_{res} , se nazývá
fluktuaace HF-vakua, nebo též časlicově-děrová
excitace atomu ;



Linoární kombinací částicově-děrových excitací atomu se pak hledají vlnové funkce a energie excitovaných stavů atomu, a to tak, aby byly charakt. funkcemi \hat{H}_{atom} .

Znájíce střední atomární pole, tj. vyřešivše HF-rovnice, máme tak celý problém redukován na problém dvou mikroobjektů, analogický atomu He:

$$\boxed{\underline{2 \text{ elektrony v He}} \leftrightarrow \underline{1 \text{ částice (= valenční elektron) + 1 díra}} \text{ v HF-vakuu složitějších atomů} \quad (11.14)}$$

Aplikace této myšlenky ukázala využívající přiblížení k exp. výsledkům prakticky pro všechny atomy s uzavřenými slupkami, nebo dokonce jen podslupkami.

Hartree-Fockova aproximace (HFA) a sní související Hartree-Fockovy rovnice (HFR) fungují pro individuální atomy s $Z \lesssim 60$, a v případě $Z \lesssim 10$ i pro několik atomů soustředěných v prostoru $\lesssim 10^{-9}$ [m].
To je přesně ta oblast, již se zabývají tzv. nanotechnologie.

HFA a HFR jsou tedy východním elementem posuňání pro chápaní a rozvíjení tohoto oboru.

Pracujeme-li ne s několika, ale s velkým množstvím atomů (např. s 1 molem látky, kde je $N_A \sim 6 \times 10^{23}$ atomů), je už HFA neúčinná a nastupuje nový přístup - KVANTOVÁ STATISTIKA.



12. TÝDEN

PRINCIPY KVANTOVÉ STATISTIKY A JEJICH DŮSLEDKY

Základním cílem kvantové statistiky je nalézt nejpravděpodobnější způsob, kterým určitá energie \underline{E} může být rozdělena mezi \underline{N} mikroobjektů nacházejících se ve stavu termodynamické rovnováhy charakterizované teplotou \underline{T} , a to tak, že

\underline{n}_1	mikroobjektů bude mít energii	$\underline{\varepsilon}_1$	(12.1)
\underline{n}_2	— // —	$\underline{\varepsilon}_2$	
⋮		⋮	
\underline{n}_k	— // —	$\underline{\varepsilon}_k$	
⋮		⋮	

přičemž

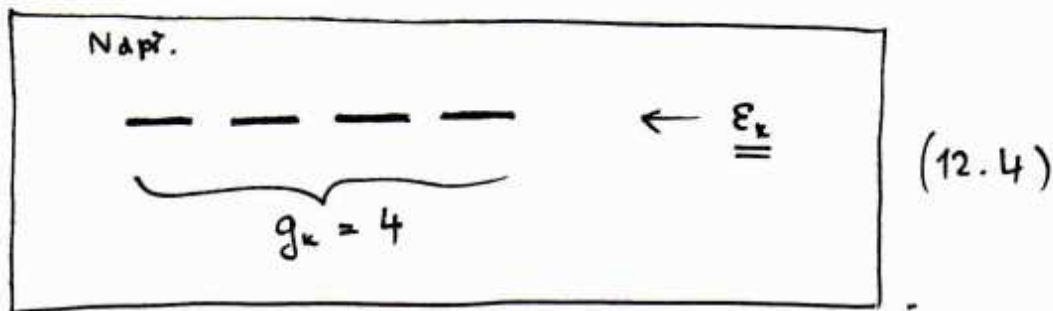
$\sum_k n_k = N$;	$\sum_k \varepsilon_k n_k = E$	(12.2)
------------------	---	--------------------------------	--------

Na cestě k dosažení tohoto cíle vychází kvantová statistika ze 2 principů :

- ① Princip stejných šancí - každý stav s danou energií $\underline{\varepsilon}_k$ má stejnou pravděpodobnost být obsazen nějakým mikroobjektem.
- ② Princip většinové demokracie : pravděpodobnost určitého rozdělení mikroobjektů podle energií je tim větší, čím větší je počet různých způsobů, kterými lze toto rozdělení uskutečnit. Označíme-li tento počet symbolem \underline{W} , platí tedy :

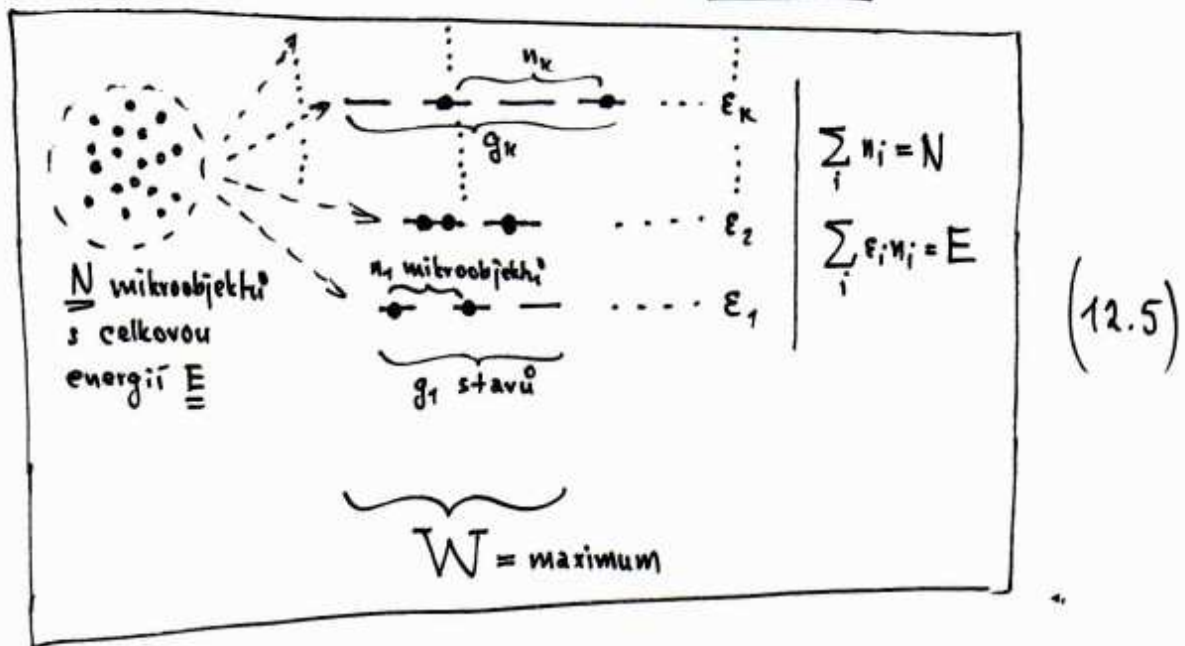
Nejpravděpodobnější rozdělení je to, pro něž $W = \text{maximum}$	∇ 	(12.3)
---	--------------	--------

Necht g_k je počet různých kvantových stavů s energií $\underline{\epsilon_k}$, tj. stupeň degenerace energetické hladiny $\underline{\epsilon_k}$:



Číslo g_k nazýváme v kvantové statistice statistická váha energetické hladiny $\underline{\epsilon_k}$.

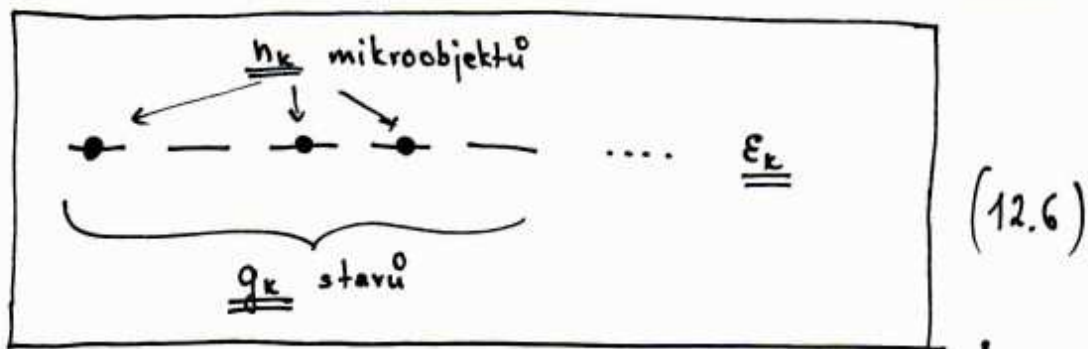
V souladu s principem většinové demokracie (12.3) musíme nyní vyjádřit počet různých způsobů \underline{W} , kterými lze na soubor energetických hladin $\{\underline{\epsilon_k}\}$ se statistickými vahami $\{g_k\}$ rozmístit \underline{N} mikroobjektů s celkovou energií \underline{E} , a pak najít takové rozmístění, při něm je \underline{W} maximální:



Nyní určíme \underline{W} pro 3 případy:

- ① mikroobjekty jsou nerozlišitelné fermiony;
- ② mikroobjekty jsou nerozlišitelné bosony;
- ③ mikroobjekty jsou rozlišitelné (lhostejno, zda fermiony či bosony).

- ① Mikroobjekty jsou nerozlišitelné fermiony (tj. v každém stavu může být maximálně 1 mikroobjekt (Pauliho princip!)) :



g_k stavů lze permutovat $(g_k!)$ způsoby, ale $(n_k!)$ permutací obsazených stavů a $(g_k - n_k)!$ permutací volných stavů vede díky neroslišitelnosti ke stejnému výslednému rozdělení mikroobjektů \Rightarrow

\Rightarrow existuje $W(n_k, g_k) = \frac{g_k!}{n_k! (g_k - n_k)!}$ různých způsobů rozdělení

na hladině $\underline{\underline{\epsilon_k}}$.

Cellkem pak:

$$W(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; g_1, g_2, \dots, g_k, \dots) = \prod_i \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!}$$

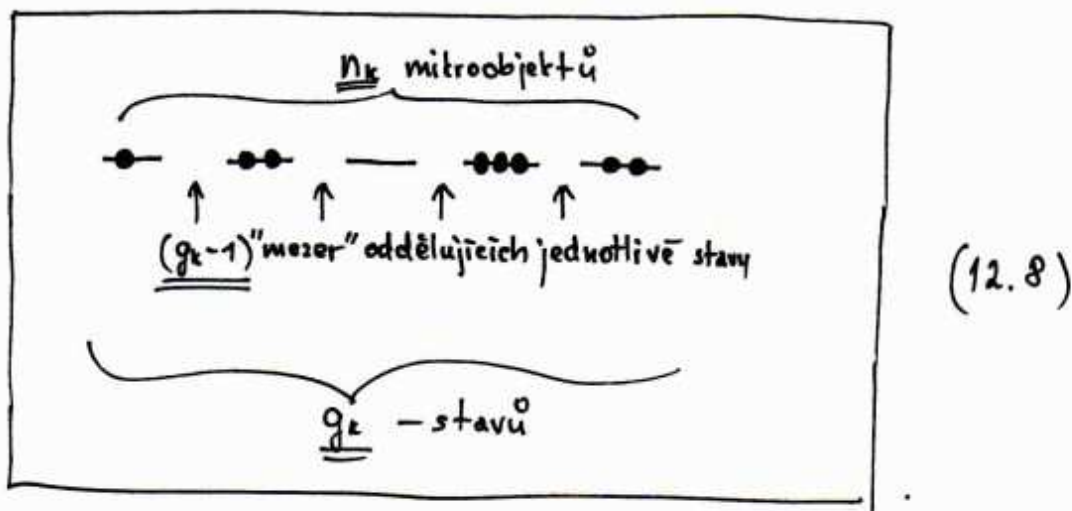
počet různých způsobů rozdělení na všechny hladiny

$$\sum_i n_i = N ; \sum_i \epsilon_i n_i = E$$

(12.7)

FERMI-DIRACOVA STATISTIKA

- ② Mikroobjekty jsou nerozlišitelné bosony (v každém stavu může být libovolný počet mikroobjektů) :



Mikroobjekty a "mezery" můžeme nyní mezi sebou libovolně permutovat, neboť je hostejno, kolik mikroobjektů bude v kterém stavu.

Takto můžeme vytvořit $(n_k + g_k - 1)!$ permutací.

$\underbrace{\hspace{2em}}_{\text{počet mikroobjektů}} \quad \underbrace{\hspace{2em}}_{\text{počet "mezer"}}$

Z tohoto počtu však $(n_k)!$ permutací mezi samotnými mikroobjekty a $(g_k - 1)!$ permutací mezi samotnými "mezerami" neovlivní celkové rozdělení \Rightarrow

\Rightarrow existuje $W(n_k, g_k) = \frac{(n_k + g_k - 1)!}{n_k! (g_k - 1)!}$ různých rozdělení.

||

$$W(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; g_1, g_2, \dots, g_k, \dots) = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!}$$

$\sum_i n_i = N \quad ; \quad \sum_i \epsilon_i n_i = E$

⚠ (12.9)

BOSE - EINSTEINOVÁ STATISTIKA

③ Mikroobjekty jsou rozlišitelné (lhostajno zda bosony či fermiony):

$$W(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; g_1, g_2, \dots, g_k, \dots) = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k! \dots} (g_1)^{n_1} (g_2)^{n_2} \dots (g_k)^{n_k} \dots$$

počet různých rozdělení na jednotlivé hladiny počet různých rozdělení n_k mikroobjektů do g_k stavů na k -tější hladině



$$W(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; g_1, g_2, \dots, g_k, \dots) = N! \prod_i \frac{(g_i)^{n_i}}{n_i!}$$

$$\sum_i n_i = N ; \quad \sum_i \epsilon_i n_i = E$$

▽ (12.10)

MAXWELL-BOLTZMANNANOVA STATISTIKA

Nyní hledáme $n_1, n_2, \dots, n_k, \dots$ tak, aby :

$$W(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots; g_1, g_2, \dots, g_k, \dots) = \text{maximum}$$

$$\sum_i n_i = N$$

$$\sum_i \epsilon_i n_i = E$$

▽ (12.11)

Matematicky jde o vyřešení vázaného extrému funkce W při dvou vedlejších podmínkách.

Velmi účinným postupem je zde metoda Lagrangeových multiplikátorů.

Zavedme funkci

$$\tilde{W}(n_1, n_2, \dots; d_1, d_2; g_1, g_2, \dots; E, N, z, \epsilon_2, \dots) = \ln W(n_1, n_2, \dots; g_1, g_2, \dots) + \lambda_1 \left(\sum_i n_i - N \right) + \lambda_2 \left(\sum \epsilon_i n_i - E \right) \quad (12.12)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{neznamé veličiny}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{vstupní (známé) parametry}} \quad \uparrow \text{přiroc. logaritmus} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Lagrange. multiplikátory}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{vedlejší podmínky (analog mechanických vazeb)}}$

Z (12.12) je zřejmé, že:

- ① $\tilde{W} = \ln W$;
 - ② \tilde{W} má maximum pro fantýž soubor hodnot n_1, n_2, \dots jako W , neboť \ln je monotónně rostoucí funkce ;
 - ③ všechny neznámé n_1, n_2, \dots jsou nezávislé, neboť vedlejší podmínky (vazby) jsou uvázeny automaticky za cenu zvýšení počtu neznámých o 2 (d_1, d_2).
- (12.13)

Podmínka pro volný extrém funkce $\tilde{W} = \ln W$ pak zní:

$$\frac{\partial}{\partial n_k} (\tilde{W}) = 0 \quad (12.14)$$

$k = 1, 2, \dots, M$

Dosažením (12.12) do (12.14) máme :

$$\frac{\partial}{\partial n_k} (\ln W) + \underbrace{\lambda_1}_{1} \cdot \frac{\partial}{\partial n_k} \left(\sum_i n_i - N \right) + \underbrace{\lambda_2}_{\epsilon_k} \cdot \frac{\partial}{\partial n_k} \left(\sum_i \epsilon_i n_i - E \right) = 0 \quad (12.15)$$

⇓

$\frac{\partial}{\partial n_k} (\ln W) + \lambda_1 + \lambda_2 \epsilon_k = 0$ $k = 1, 2, \dots, M$	∇ $\textcircled{1}$ (12.16)
Současně : $\sum_i n_i = N$ $\sum_i \epsilon_i n_i = E$	
Celkem: <u>M+2</u> rovnic pro <u>M+2</u> neznámých $n_1, n_2, \dots, n_M, \lambda_1, \lambda_2$	

Jako příklad konkrétního výpočtu si vezměme W dle Fermi-Diracovy statistiky (12.7) :

$$W = \prod_i \frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!}$$

⇓

$$\ln W = \sum_i \ln \left(\frac{g_i!}{n_i! (g_i - n_i)!} \right) = \sum_i \left\{ \ln(g_i!) - \ln(n_i!) - \ln(g_i - n_i)! \right\} \quad (12.17)$$

Ve statistice uvažujeme obrovské soubory mikroobjektů ($n_i \sim 10^{23}$) a mnohonásobně degenerované energetické hladiny ($g_i \sim 10^{23}$).

Pro takto velká čísla platí (s přesností $\sim 99,999\%$):

$$\begin{aligned} \ln(n_i!) &\approx n_i \ln n_i - n_i \\ \ln(g_i!) &\approx g_i \ln g_i - g_i \end{aligned} \quad \left(\text{Stirlingův vztah} \right) \quad (12.18)$$

Posazením (12.18) do (12.17) dostaneme:

$$\begin{aligned} \ln W &\approx \sum_i \left\{ (g_i \ln g_i - g_i) - (n_i \ln n_i - n_i) - (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i) - (g_i - n_i) \right\} = \\ &= \sum_i \left\{ \cancel{n_i \ln n_i} + \cancel{n_i} + \cancel{g_i} - \cancel{n_i} - (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i) + g_i \ln g_i - \cancel{g_i} \right\} \\ &= \sum_i \left\{ (n_i - g_i) \ln(g_i - n_i) - n_i \ln n_i \right\} + \underbrace{\sum_i g_i \ln g_i}_{\text{konst.}} \end{aligned} \quad (12.19)$$

Odtud derivováním podle n_k :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n_k} (\ln W) &= \sum_i \left\{ \frac{\partial}{\partial n_k} \left((n_i - g_i) \ln(g_i - n_i) \right) - \frac{\partial}{\partial n_k} (n_i \ln n_i) \right\} = \\ &= \sum_i \left\{ \delta_{ik} \ln(g_i - n_i) + \underbrace{(n_i - g_i)}_{(-1)} \frac{1}{(g_i - n_i)} (-1) \delta_{ik} - \delta_{ik} \ln n_i - n_i \frac{1}{n_i} \delta_{ik} \right\} = \\ &= \sum_i \left\{ \delta_{ik} \ln(g_i - n_i) + \cancel{\delta_{ik}} - \delta_{ik} \ln n_i - \cancel{\delta_{ik}} \right\} = \\ &= \sum_i \delta_{ik} \left\{ \ln(g_i - n_i) - \ln n_i \right\} = \ln(g_k - n_k) - \ln n_k = \\ &= \underline{\underline{\ln \left(\frac{g_k - n_k}{n_k} \right)}} \end{aligned} \quad (12.20)$$

Dosažením (12.20) do (12.16) dostaneme:

$$\ln \left(\frac{g_k - n_k}{n_k} \right) + \lambda_1 + \lambda_2 \varepsilon_k = 0 \quad (12.21)$$

\Downarrow

$$\frac{g_k - n_k}{n_k} = e^{-\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_k}$$

\Downarrow

$$n_k = \frac{g_k}{(e^{-\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_k} + 1)} \quad (12.22)$$

Zavedme nyní nové parametry $\underline{\Omega}$ a $\underline{\mu}$, definované vztahy:

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= -\frac{1}{\Omega} \\ \lambda_1 &= \frac{\mu}{\Omega} \end{aligned} \quad (12.23)$$

Pomocí nich máme:

$$-\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_k = -\frac{\mu}{\Omega} + \frac{1}{\Omega} \varepsilon_k = \frac{\varepsilon_k - \mu}{\Omega} \quad (12.24)$$

odkud vidíme, že $\underline{\mu}$ i $\underline{\Omega}$ mají fyzikální význam (stejných energií, neboť exponent $(-\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_k)$ v (12.22) musí být fyzikálně bezrozměrný.

Dosažením (12.24) do (12.22) nakonec máme:

$$n_k = \frac{g_k}{(e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\Omega}} + 1)} \quad (12.25)$$

Dvě neznámé energie $\underline{\Omega}$ a $\underline{\mu}$, vystupující v (12.25),
dostaneme ze dvou rovnic:

$$\sum_k \underbrace{\frac{g_k}{(e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\alpha}} + 1)}}_{n_k} = N$$

$$\sum_k \epsilon_k \cdot \underbrace{\frac{g_k}{(e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\alpha}} + 1)}}_{n_k} = E$$
(12.26)

⇓

$$\mu = \mu(g_1, g_2, \dots; \epsilon_1, \epsilon_2, \dots; N, E)$$

známé vstupní parametry

$$\Omega = \Omega(g_1, g_2, \dots; \epsilon_1, \epsilon_2, \dots; N, E)$$

známé vstupní parametry

(12.27)

Tyto nalezené funkce dosadíme zpět do (12.25) a máme tak

$$n_k = n_k(g_1, g_2, \dots; \epsilon_1, \epsilon_2, \dots; N, E)$$

známé vstupní parametry

(12.28)

Tím je nalezeno nejpravděpodobnější rozdělení ~~pro~~ N nerozlišitelných fermionů s celkovou energií E na jednotlivé energetické hladiny $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ se statistickými vahami g_1, g_2, \dots . Říká se mu Fermi-Diracovo rozdělení:

$$\text{FD } n_k = \frac{g_k}{(e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\alpha}} + 1)} \quad ; \quad \underline{\mu}, \underline{\Omega} \dots \text{ řeší rovnice (12.26)}$$
(12.29)

Zcela analogickým způsobem [viz rov. (12.17) - (12.29)]
dostaneme nejpravděpodobnější rozdělení N nerozliš. bosonů
s celk. energií E na hladiny $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$ se statistickými vahami
 g_1, g_2, \dots - Bose-Einsteinovo rozdělení :

$$n_k^{BE} = \frac{g_k}{\left(e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\alpha}} - 1\right)}$$

kde μ, α jsou řešením rovnic

$$\sum_k \frac{g_k}{\left(e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\alpha}} - 1\right)} = N ; \sum_k \varepsilon_k \frac{g_k}{\left(e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{\alpha}} - 1\right)} = E$$

(12.30)

Stejně tak dostaneme nejpravděpodobnější rozdělení
 N rozlíšitelných mikroobjektů - Maxwell-Boltzmannovo rozdělení :

$$n_k^{MB} = g_k \cdot e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\alpha}}$$

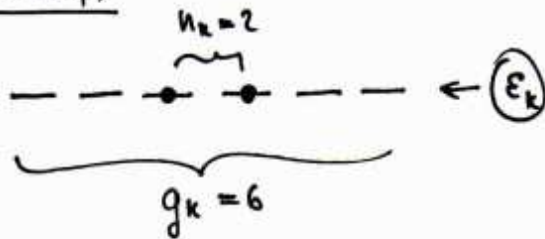
kde μ a α jsou řešením rovnic

$$\sum_k g_k \cdot e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\alpha}} = N ; \sum_k \varepsilon_k \cdot g_k \cdot e^{\frac{\mu - \varepsilon_k}{\alpha}} = E$$

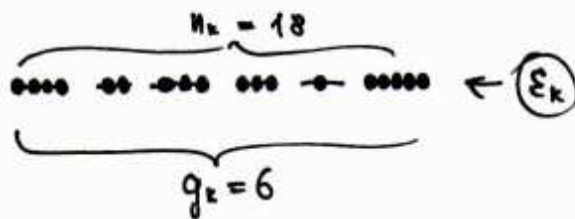
(12.31)

Zavedme nyní tzv. ROZDĚLOVACÍ FUNKCI, která
realizuje vše uvedená rozdělení (12.29) - (12.31) :

$$f_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_k}{g_k} \quad (12.32)$$

Př. 1 (fermiony)

$$\underline{f_k} = \frac{n_k}{g_k} = \frac{2}{6} = \underline{\underline{\frac{1}{3}}} \quad (\text{obecně } \underline{\underline{f_k}} \leq 1)$$

Př. 2 (bosony)

$$\underline{f_k} = \frac{n_k}{g_k} = \frac{18}{6} = \underline{\underline{3}} \quad (\text{obecně žádné omezení shora, možno tedy i } \underline{\underline{f_k}} \gg 1)$$

Rozdělovací funkce $\underline{f_k}$ má tedy význam průměrného počtu mikroobjektů v 1 kvantovém stavu na dané energetické hladině ϵ_k .

(12.33)

Užitím (12.29) - (12.31) dostaneme nyní podle definice (12.32):

$$f_k^{FD} = \frac{n_k^{FD}}{g_k} = \frac{1}{(e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\alpha}} + 1)} \quad (12.34)$$

FERMI - DIRACOVA ROZDĚLOVACÍ FUNKCE
(pro soubor nerozlišitelných fermionů)



$$f_k^{BE} = \frac{n_k^{BE}}{g_k} = \frac{1}{(e^{\frac{\epsilon_k - \mu}{\alpha}} - 1)} \quad (12.35)$$

BOSE - EINSTEINOVA ROZDĚLOVACÍ FUNKCE
(pro soubor nerozlišitelných bosonů)

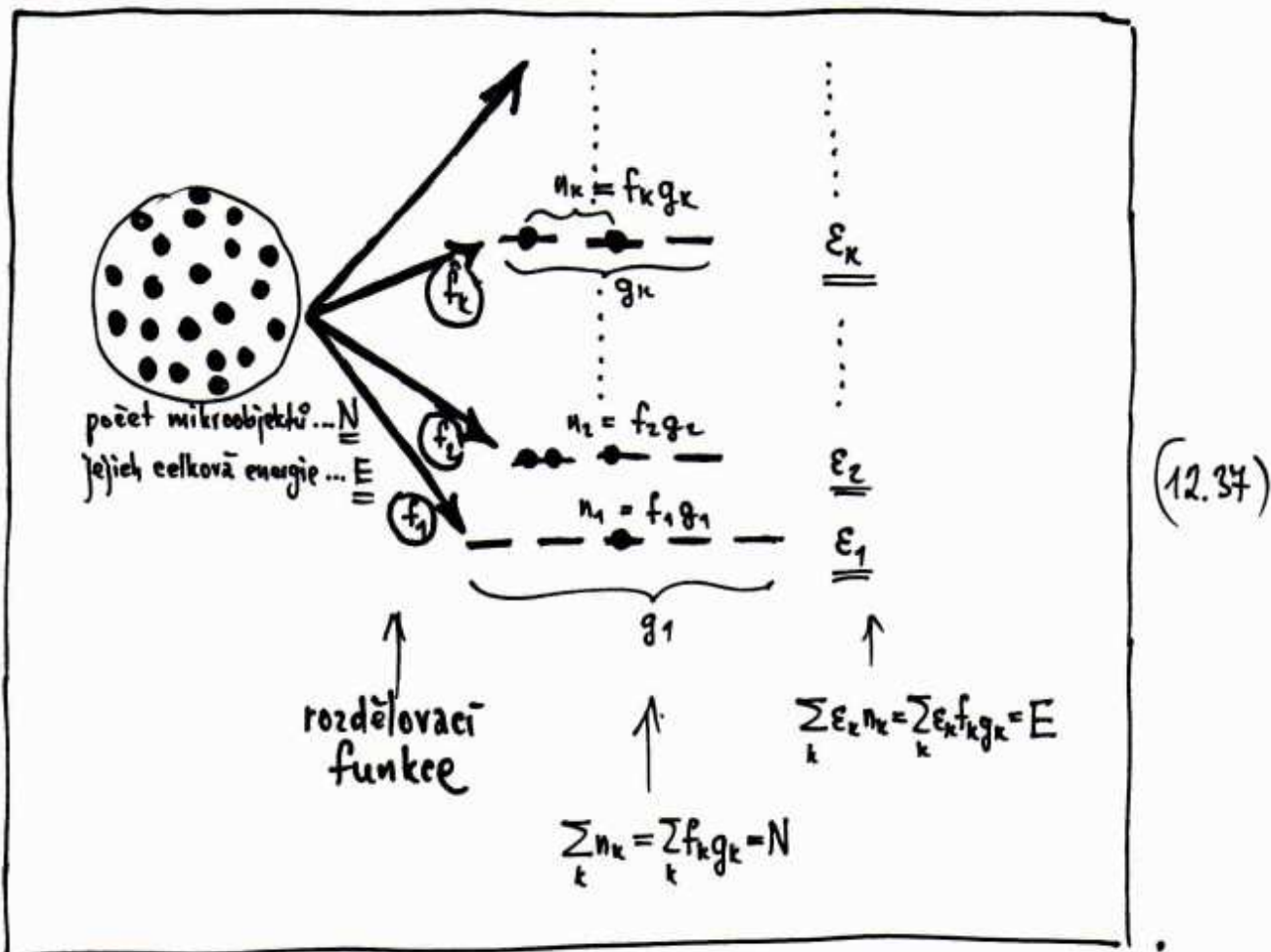


$$f_k^{MB} = \frac{n_k^{MB}}{g_k} = e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{\alpha}} \quad (12.36)$$

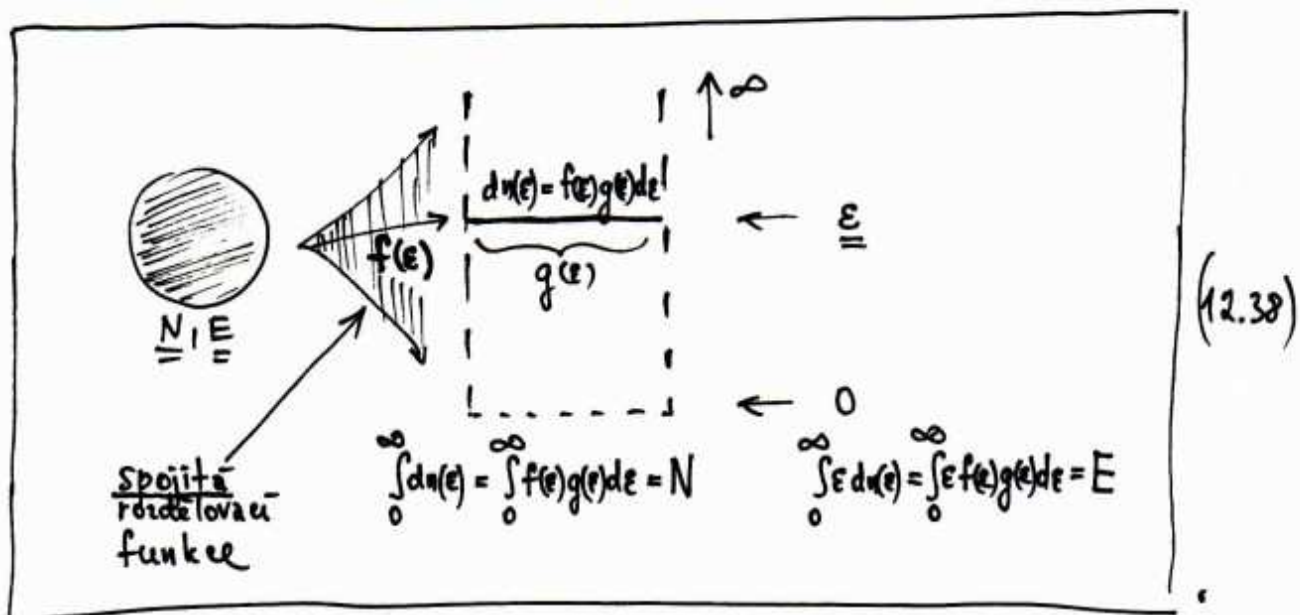
MARWELL - BOLTZMANNOVA ROZDĚLOVACÍ FUNKCE
(pro soubor rozlišitelných mikroobjektů)



Z definice (12.32) máme $n_k = f_k \cdot g_k$, takže rozdělovací funkci si můžeme názorně představit následovně:



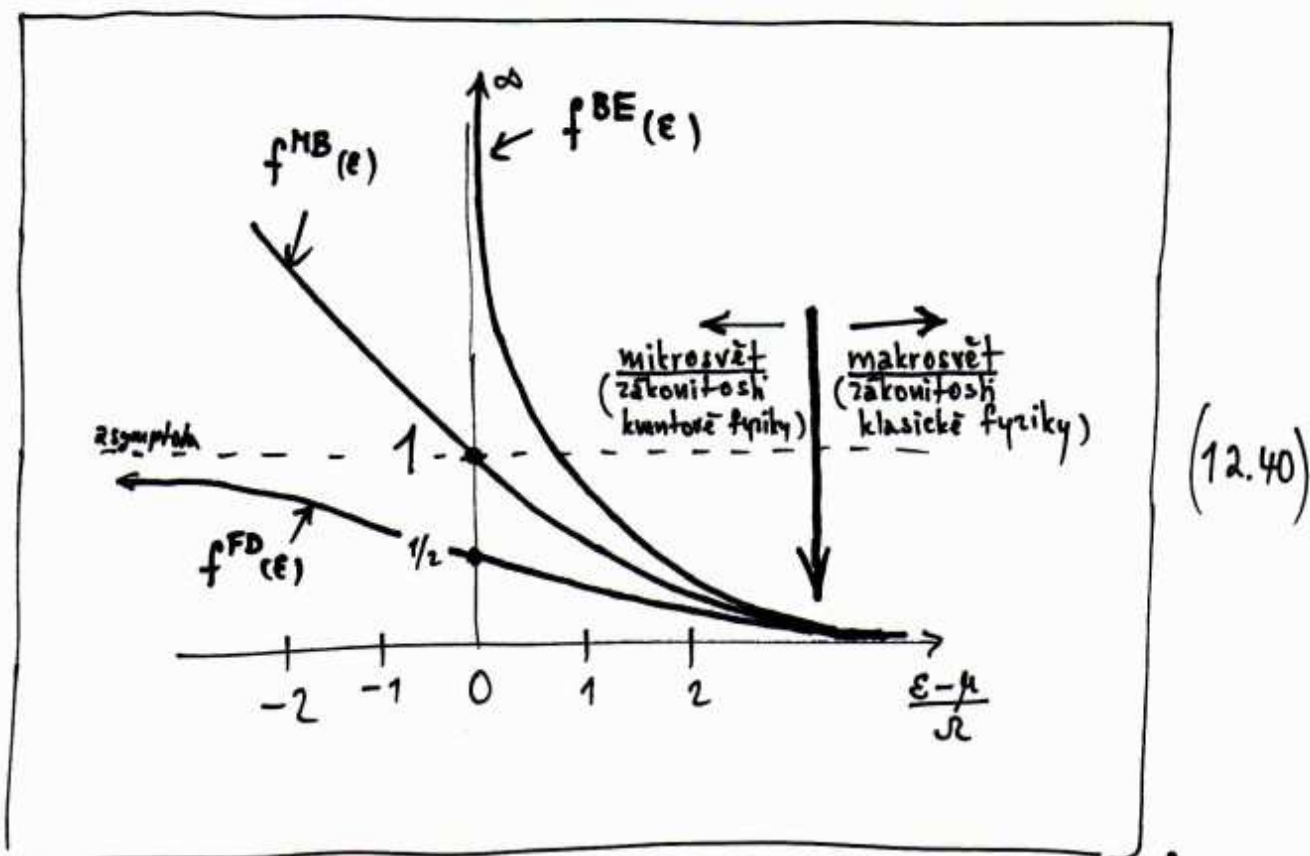
Při počtu mikroobjektů $N \sim 10^{23}$ jsou jednotlivé energetické hladiny tak blízko u sebe, že jejich energie lze považovat za spojitě se měnící od 0 do ∞ . Dostáváme tak spojitý analog (12.34):



Spojitě verze rozdělovacích funkcí (12.34) - (12.36) mají zřejmě následující tvar :

$$\begin{aligned}
 f^{\text{FD}}(\epsilon) &= \frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon-\mu}{\alpha}} + 1\right)} && \text{(Fermi-Dirac)} \\
 f^{\text{BE}}(\epsilon) &= \frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon-\mu}{\alpha}} - 1\right)} && \text{(Bose-Einstein)} \\
 f^{\text{MB}}(\epsilon) &= e^{\frac{\mu-\epsilon}{\alpha}} && \text{(Maxwell-Boltzmann)}
 \end{aligned}
 \tag{12.39}$$

Je užitečně porovnat si jejich průběh graficky :



Pro velké hodnoty $\left(\frac{\epsilon-\mu}{\alpha}\right)$ všechny 3 rozdělovací funkce splyvají.
To je přímo vidět z explicitního tvaru všech funkcí (12.39) :

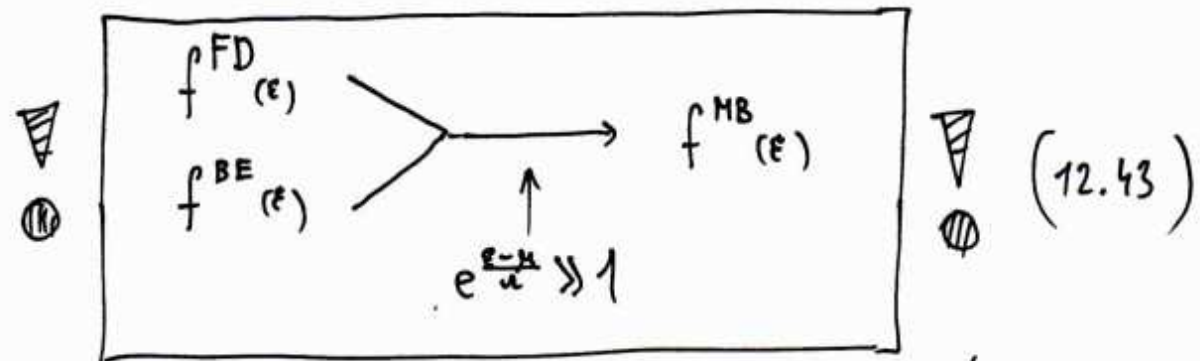
Je-li

$$e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} \gg 1 \quad (12.41)$$

platí:

$$\begin{aligned}
 \underline{f^{FD}(\epsilon)} &= \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} + 1} \approx \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}}} = e^{-\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} = \underline{f^{MB}(\epsilon)} \\
 &\quad \begin{array}{c} \gg 1 \\ \uparrow \\ \text{ lze zanedbat} \\ \text{ oproti} \end{array}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \underline{f^{BE}(\epsilon)} &= \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} - 1} \approx \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}}} = \dots = \underline{f^{MB}(\epsilon)} \\
 &\quad \begin{array}{c} \gg 1 \\ \uparrow \\ \text{ lze zanedbat} \end{array}
 \end{aligned}
 \quad (12.42)$$



což můžeme interpretovat tak, že za podmínky $e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} \gg 1$ kvantová statistika přechází v klasickou.

Protože $\epsilon \in (0; \infty)$, platí

$$e^{\frac{\epsilon - \mu}{\alpha}} = \underbrace{e^{\epsilon}}_{\geq 1} \cdot e^{-\frac{\mu}{\alpha}} \geq e^{-\frac{\mu}{\alpha}} \quad (12.44)$$

Nerovnost (12.44) říká, že ke splnění podmínky $e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \gg 1$
STAČÍ, aby platilo:

$$\left(\begin{array}{c} \nabla \\ \ominus \end{array} \right) \boxed{e^{-\frac{\mu}{kT}} \gg 1} \left(\begin{array}{c} \nabla \\ \ominus \end{array} \right) \quad (12.45)$$

postačující podmínka přechodu
 kvantové statistiky v klasickou.

Nyní, máme k dispozici spojitě verze rozdělovacích funkcí ($f(\epsilon)$),
 zaměříme pozornost na spojitou verzi statistických vah g_k ,
 tj. na funkci $g(\epsilon)$ v obr. (12.38); $g(\epsilon)$ = počet kvantových
 stavů s energií ϵ (stupně degenerace energ. hladiny ϵ):

$$\underbrace{g(\epsilon)}_{\text{počet kvantových stavů s energií } \epsilon} = \frac{N_f(\epsilon)}{N_f(\text{min})} \quad (12.46)$$

$N_f(\epsilon)$... objem fázového prostoru mikroobjektu s energií ϵ ;

$N_f(\text{min})$... objem elementárního kvanta fázového prostoru ;

fázový prostor ... $V_f = \{ \underbrace{(x, y, z, p_x, p_y, p_z)}_{\text{bód}} \}$

Pro 6-dimenzionální element fázového prostoru máme:

$$d^6 V_f = dx dy dz dp_x dp_y dp_z \quad (12.47)$$

V mikrosvětě podle Heisenbergovy relace neurčitosti platí:

$$\begin{aligned} (dx) \cdot (dp_x) &\geq \frac{1}{2} \hbar \\ (dy) \cdot (dp_y) &\geq \frac{1}{2} \hbar \\ (dz) \cdot (dp_z) &\geq \frac{1}{2} \hbar \end{aligned} \quad (12.48)$$



$$\begin{aligned} dx dy dz dp_x dp_y dp_z &\geq \left(\frac{1}{2} \hbar\right) \left(\frac{1}{2} \hbar\right) \left(\frac{1}{2} \hbar\right) \\ &= \frac{1}{8} \hbar^3 = \underline{N_f(\min)} = \\ &= \text{objem elementárního} \\ &\quad \text{kvanta fázového prostoru} \end{aligned} \quad (12.49)$$

Užitím (12.49) můžeme vztah (12.46) přepsat ve tvaru:

$$g(\epsilon) = \frac{N_f(\epsilon)}{\frac{1}{8} \hbar^3} = \frac{8}{\hbar^3} N_f(\epsilon) \quad (12.50)$$

Funkci $\underline{N_f(\epsilon)}$ určíme fakto:

Vyjdeme z (12.47):

$$d^6 V_f = \underbrace{dx dy dz}_{dV} \cdot \underbrace{dp_x dp_y dp_z}_{p^2 \sin \theta dp d\theta d\phi} = (dV) \cdot (p^2 dp) (\sin \theta d\theta) (d\phi) \quad (12.51)$$

Ve vztahu (12.51) je dV element objemu souřadnicového prostoru,
 $p^2 \sin \theta$ "jakobián" transformace $(p_x, p_y, p_z) \rightarrow (p, \theta, \phi)$..

Nyní vezmeme 5-dimenzionální integrál z (12.51) přes
všechny proměnné kromě velikosti hybnosti p :

$$dV_f(p) = \underbrace{\left(\iiint_V dV \right)}_V \cdot \left(p^2 dp \right) \cdot \underbrace{\left(\int_0^\pi \sin \theta d\theta \right)}_2 \cdot \underbrace{\left(\int_0^{2\pi} 1 d\phi \right)}_{2\pi} \quad (12.52)$$

objem souřadnicového
 prostoru, v němž
 se nachází daný
 soubor mikroobjektů



$$\blacktriangledown \quad \boxed{dV_f(p) = 4\pi V p^2 dp} \quad \blacktriangledown \quad (12.53)$$

element objemu fázového prostoru, v němž
 mikroobjekt má velikost hybnosti v $\text{Int.}(p, p+dp)$.

Předpokládejme dále, že uvnitř souřadnicového objemu V ,
 v němž se mikroobjekt nachází, nepůsobí na něj žádné
 síly a pohybuje se nerelativisticky. Pak platí:

$$\underbrace{\varepsilon}_{\text{celková energie mikroobjektu}} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{kinetická energie mikroobjektu s hybností } p} \quad (12.54)$$

že vztahu (12.54) máme :

$$p = \sqrt{2m\varepsilon} \quad (12.55)$$

↓

$$dp = \sqrt{2m} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \cdot d\varepsilon \quad (12.56)$$

Dosažením (12.55) a (12.56) do (12.53) dostaneme :

$$dV_f(p) = 4\pi V \cdot \underbrace{p^2}_{2m\varepsilon} \cdot \underbrace{dp}_{\sqrt{2m} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \cdot d\varepsilon} \quad (12.57)$$

↓

$$dV_f(\varepsilon) = 4\pi\sqrt{2} \cdot V \cdot m^{3/2} \cdot \sqrt{\varepsilon} \cdot d\varepsilon \quad (12.58)$$

↓

$$N_f(\varepsilon) = \frac{dV_f(\varepsilon)}{d\varepsilon} = 4\pi\sqrt{2} V m^{3/2} \cdot \sqrt{\varepsilon} \quad (12.59)$$

objem fázového prostoru s energií ε

Dosažením tohoto výrazu do (12.50) nakonec dostaneme :

$$g(\varepsilon) = \frac{\rho}{h^3} \cdot \underbrace{4\pi\sqrt{2} V m^{3/2} \cdot \sqrt{\varepsilon}}_{N_f(\varepsilon)} \quad (12.60)$$

↓

$$g(\varepsilon) = 32\pi\sqrt{2} \cdot \frac{1}{h^3} \cdot V \cdot m^{3/2} \cdot \sqrt{\varepsilon} \quad (12.61)$$

počet kvantových stavů volného nelineárního mikroobjektu s energií ε a hmotností m nacházejícího se v prostoru o objemu V

Užitím (12.61) odvodíme nyní explicitní tvar parametru α a μ pro Maxwell-Boltzmannovu rozdělovací funkci.

Podle (12.39) máme:

$$f^{MB}(\epsilon) = e^{\frac{\mu - \epsilon}{\alpha}} \quad (12.62)$$

Pro celkový počet částic N a jejich celkovou energii E platí podle (12.38):

$$\int_0^{\infty} f^{MB}(\epsilon) \cdot g(\epsilon) d\epsilon = N$$

$$\int_0^{\infty} \epsilon \cdot f^{MB}(\epsilon) \cdot g(\epsilon) d\epsilon = E$$
(12.63)

Dosažením (12.62) a (12.61) do (12.63) dostaneme:

$$\int_0^{\infty} \underbrace{e^{\frac{\mu - \epsilon}{\alpha}}}_{f^{MB}(\epsilon)} \cdot \underbrace{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \sqrt{\epsilon}}_{g(\epsilon)} d\epsilon = N$$

↓

$$32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} e^{\frac{\mu}{\alpha}} \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{\alpha}} d\epsilon = N \quad (12.64)$$

$$\int_0^{\infty} \underbrace{\epsilon}_{\epsilon} \cdot \underbrace{e^{\frac{\mu - \epsilon}{\alpha}}}_{f^{MB}(\epsilon)} \cdot \underbrace{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \sqrt{\epsilon}}_{g(\epsilon)} d\epsilon = E$$

↓

$$32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} e^{\frac{\mu}{\alpha}} \int_0^{\infty} \epsilon \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{\alpha}} d\epsilon = E \quad (12.65)$$

V integrálech vystupujících v (12.64) a (12.65) zavedeme substituci:

$$\boxed{\frac{\varepsilon}{\Omega} = x}$$

$$\Rightarrow \varepsilon = \Omega x ; d\varepsilon = \Omega dx \quad (12.66)$$

také :

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{\Omega}} d\varepsilon = \int_0^{\infty} \sqrt{\Omega} \cdot \sqrt{x} \cdot e^{-x} \cdot \Omega dx = \Omega^{3/2} \int_0^{\infty} \underbrace{x^{1/2} e^{-x}}_{\sqrt{\pi}} dx \quad (12.67)$$

$$= \underline{\underline{\sqrt{\pi} \Omega^{3/2}}}$$

$$\int_0^{\infty} \varepsilon \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{\Omega}} d\varepsilon = \int_0^{\infty} \Omega x \sqrt{\Omega x} e^{-x} \Omega dx = \Omega^{5/2} \int_0^{\infty} \underbrace{x^{3/2} e^{-x}}_{\frac{3}{2} \sqrt{\pi}} dx \quad (12.68)$$

$$= \underline{\underline{\frac{3}{2} \sqrt{\pi} \Omega^{5/2}}}$$

Dosažením výsledků (12.67) a (12.68) do (12.64) a (12.65) dostaneme:

$$\boxed{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \sqrt{\pi} \Omega^{3/2} = N} \quad (12.69)$$

$$\boxed{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{\pi} \Omega^{5/2} = E} \quad (12.70)$$

↓

$$\boxed{\frac{E}{N} = \frac{3}{2} \Omega} \quad (12.71)$$

Podíl $\left(\frac{E}{N}\right)$ však není nic jiného než šřední energie
 částice ve statistickém souboru řídícím se MB-rozdělovací funkcí:

$$\frac{E}{N} = \epsilon_{st} = \frac{3}{2} kT$$

↑
klasická
termodynamika

k ... Boltzmannova konstanta
 T ... termodynamická teplota souboru částic

(12.42)

Porovnáním (12.41) a (12.42) máme:

$$\Omega = kT \quad (12.43)$$

Dosažením tohoto výsledku do rovnice (12.69) dále dostaneme:

$$32\pi^{3/2} \sqrt{2}^{\frac{1}{2}} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} (kT)^{3/2} = N \quad (12.44)$$

↓

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \frac{h^3 N}{32\pi^{3/2} \sqrt{2}^{\frac{1}{2}} V m^{3/2} (kT)^{3/2}}$$

↓

$$\mu = kT \ln \left\{ \underbrace{\frac{h^3}{32\pi^{3/2} k^{3/2} \sqrt{2}^{\frac{1}{2}}}}_{\text{univerzální konstanta}} \cdot \underbrace{\frac{N}{V} \cdot \frac{1}{m^{3/2}} \cdot \frac{1}{T^{3/2}}}_{\text{charakteristiky souboru částic}} \right\}$$

$\frac{N}{V}$... objemová koncentrace částic v souboru
 $\frac{m}{T}$... hmotnost 1 částice souboru
 $\frac{1}{T}$... termody. teplota souboru

(12.45)

Vztahy (12.43) a (12.75) určují tedy parametry $\underline{\Omega}$ a $\underline{\mu}$ vystupující v MB-rozdělovací funkci (12.62)

Parametr $\underline{\Omega}$ je podle (12.73) jednosvačnou funkcí termodynamické teploty souboru částic a má fyz. význam ~~at~~ $2/3$ střední energie jedné částice souboru: $\underline{\Omega} = kT = \frac{2}{3} \cdot \underbrace{\frac{3}{2} kT}_{\underline{E_{sh}}} = \underline{\frac{2}{3} E_{sh}}$.

Parametr $\underline{\mu}$ dle (12.75) závisí nejen na termodynamické teplotě \underline{T} , ale též na hmotnosti jednotlivých částic (\underline{m}) a jejich objemové koncentraci ($\frac{N}{V}$). Parametr $\underline{\mu}$ se nazývá chemický potenciál daného souboru částic.

Kombinací vztahů (12.62), (12.73) a (12.75) máme nyní kompletně určenou Maxwell-Boltzmannovu rozdělovací funkci:

$$f^{MB}(\epsilon) = e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}}$$

$$\mu = kT \ln \left\{ \frac{h^3}{32\pi^2 k^2 h^2 \sqrt{2}} \frac{N}{V} \cdot \frac{1}{m^{3/2}} \cdot \frac{1}{T^{3/2}} \right\}$$

(12.76)

Maxwell-Boltzmannova rozdělovací funkce pro soubor \underline{N} rozlišitelných mikroobjektů (částic) o hmotnostech \underline{m} , nacházejících se v objemu \underline{V} při termodynamické teplotě \underline{T} .

Pomocí explicitního tvaru chemického potenciálu $\underline{\mu}$ dle (12.75) můžeme nyní formulovat postačující podmínku přechodu kvantové statistiky v klasickou (viz (12.45)) v následujícím tvaru:

$$e^{-\frac{\mu}{\alpha}} \gg 1$$

↓

$$e^{-\frac{kT \ln \{ \dots \}}{kT}} \gg 1$$

$$e^{-\ln \left\{ \frac{h^3}{32\pi^{3/2} k^{3/2} \sqrt{2}} \cdot \frac{N}{V} \cdot \frac{1}{m^{3/2}} \cdot \frac{1}{T^{3/2}} \right\}}$$

$$e^{+\ln \left\{ \frac{32\pi^{3/2} k^{3/2} \sqrt{2}}{h^3} \cdot \frac{m^{3/2} \cdot T^{3/2}}{\left(\frac{N}{V}\right)} \right\}}$$

(12.77)

↓

$$\frac{32\pi^{3/2} k^{3/2} \sqrt{2}}{h^3} \cdot \frac{m^{3/2} \cdot T^{3/2}}{\left(\frac{N}{V}\right)} \gg 1$$

↓

$$\frac{m^{3/2} \cdot T^{3/2}}{\left(\frac{N}{V}\right)} \gg \frac{h^3}{32\pi^{3/2} k^{3/2} \sqrt{2}}$$

$\sim 10^{-64}$

Postačující podmínka přechodu kvantové statistiky v klasickou, vyjádřená pomocí fyzikálních charakteristik souboru:

m ... hmotnost částic souboru

T ... termodynamická teplota souboru

$\frac{N}{V}$... objemová koncentrace částic souboru

Typická situace, kdy podmínka (12.78) splněna je, a lze tudíž bez obav použít klasickou, tj. MB - statistiku, je následující:

- těžké částice (m velké)
 - vysoké teploty (T velké)
 - nízké obj. koncentrace (N/V malé)
- (např. řídký horký plyn tvořený víceatomovými molekulami)
- (12.79)

Typická situace, kdy podmínka (12.78) naopak splněna není, je následující:

- lehké částice (m malé)
 - nízké teploty (T malé)
 - vysoké koncentrace (N/V velké)
- (např. hustý oblak elektronů v silně zchlazených krystalech, nebo kapalné helium při $T \rightarrow 0$)
- (12.80)

Protože podmínka (12.78) je pouze postačující, nikoli nutná, její nesplnění neznamená automaticky nepoužitelnost MB - statistiky, pouze signalizuje, že se musí explicitně použít kvantová statistika (FD či BE) a výsledky porovnat s MB statistikou, zda souhlasí či nikoli. V žádném případě však MB statistiku v této situaci nelze použít a priori - může to vést k velkým omylům.

Ukazuje se zejména, že při $T \rightarrow 0$ jsou rozdíly mezi výsledky klasické a kvantové statistiky obrovské, takže při těchto teplotách je nezbytné používat kvantovou statistiku a rozlišovat, jaký druh mikroobjektů (fermiony či bosony) uvažujeme, např.

elektrony v zchlazených krystalech ... fermiony ... FD - statistika
 atomy He při $T \rightarrow 0$... bosony ... BE - statistika



13. TÝDEN

CHOVÁNÍ SOUBORU KVANTOVÝCH MIKROOBJEKTŮ PŘI RŮZNÝCH TEPLOTÁCH - SUPRATEKUTOST A SUPRAVODIVOST.

13.1 Soubor nerozlišitelných fermionů

Víme, že pro takový soubor platí Fermi-Diracova
rozdělovací funkce (viz (12.39)) =

$$f^{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\Omega}} + 1} \quad (13.1.1)$$

Parametr Ω se volí stejný jako u MB-rozdělovací funkce, tj.

$$\Omega = kT \quad (13.1.2)$$

a veškeré roditelky se absorbují do chemického potenciálu μ .

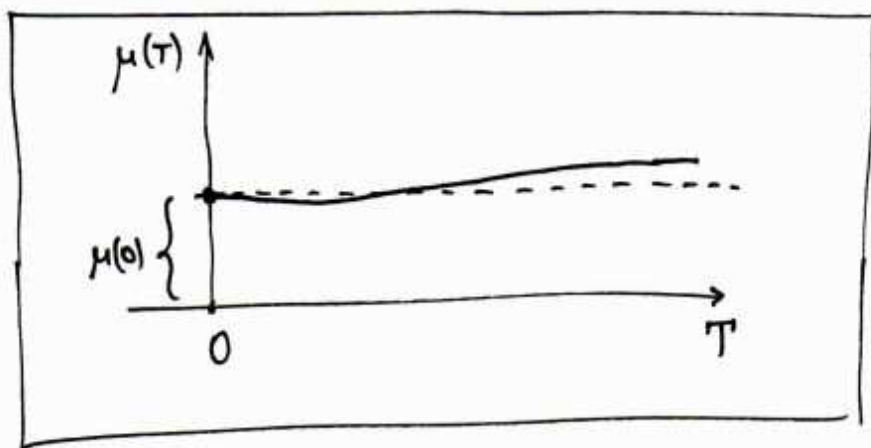
Máme tedy:

$$f^{FD}(\epsilon) = \frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1\right)} \quad (13.1.2)$$

$$\int_0^{\infty} \underbrace{f^{FD}(\epsilon)}_{\frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1\right)}} \underbrace{g(\epsilon)}_{32\pi^{1/2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \sqrt{\epsilon}} d\epsilon = N \quad (13.1.3)$$

Rovnice (13.1.3), na rozdíl od analogické rovnice pro $f^{MB}(e)$, (viz (12.63)), která umožňovala analytické řešení pro μ , takový luxus neposkytuje, a hledaný chem. potenciál je z ní nutno extrahovat numericky.

Grafické znázornění výsledků μ jako funkce T je následující:



(13.1.4)

Existuje však jeden důležitý speciální případ - tzv. dvouhladinový systém (jehož reprezentantem je např. LASER - metastabilní stav / zákl. stav), kdy $\mu(T)$ lze získat v analytické formě:

energie

$\dots E_{MS} \dots$

$\dots 0 \dots$

n_{MS}

n_0

g_{MS}

g_0

$$n_{MS} = g_{MS} \cdot \frac{1}{(e^{\frac{E_{MS} - \mu}{kT}} + 1)}$$

$$n_0 = g_0 \cdot \frac{1}{(e^{\frac{0 - \mu}{kT}} + 1)}$$

(13.1.5)

$$n_0 + n_{MS} = N$$

⇓

$$\left\{ g_{MS} \cdot \frac{1}{(e^{\frac{E_{MS} - \mu}{kT}} + 1)} + g_0 \cdot \frac{1}{(e^{-\frac{\mu}{kT}} + 1)} \right\} = N \quad (13.1.6)$$

Předpokládejme pro jednodušnost, že $g_{ns} = g_0 = g$.

Pak rovnici (13.1.6) můžeme postupně upravit na tvar:

$$\frac{N}{g} \cdot e^{\frac{E_{ns}}{kT}} \cdot \left(e^{-\frac{E}{kT}}\right)^2 + \left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right) \left(\frac{N}{g} - 1\right) \left(e^{-\frac{E}{kT}}\right) + \left(\frac{N}{g} - 2\right) = 0 \quad (13.1.7)$$

⇓

$$\mu = -kT \ln \left\{ \frac{g}{2N} e^{-\frac{E_{ns}}{kT}} \left[\left(1 - \frac{N}{g}\right) \left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right) + \sqrt{D} \right] \right\} \quad (13.1.8)$$

$$D = \left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right)^2 \left(\frac{N}{g} - 1\right)^2 + 4 \frac{N}{g} e^{\frac{E_{ns}}{kT}} \left(2 - \frac{N}{g}\right)$$

analytický výraz pro chemický potenciál μ souboru N nerozlišitelných fermionů, rozmístěných na g energet. hladinách (0 a E_{ns}) se stejnou statistickou vahou g .

Uvažujme nyní speciální případ $N \ll g$, tj.

$$\frac{N}{g} \rightarrow 0 \quad (13.1.9)$$

Dosažením (13.1.9) do (13.1.8) dostaneme:

$$D \cong \left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right)^2$$

$$\mu \cong -kT \ln \left\{ \frac{g}{2N} e^{-\frac{E_{ns}}{kT}} \left[\underbrace{\left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right) + \sqrt{\left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right)^2}}_{2\left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right)} \right] \right\}$$

⇓

$$\mu \cong -kT \ln \left\{ \frac{g}{N} e^{-\frac{E_{ns}}{kT}} \left(1 + e^{\frac{E_{ns}}{kT}}\right) \right\} \quad (13.1.10)$$

Pomocí (13.1.10) spočítáme :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{e^{-\frac{\mu}{kT}}} &= e^{\ln\left\{\frac{g}{N}\left(e^{-\frac{E_{MS}}{kT}} + 1\right)\right\}} = \\ &= \frac{\left(e^{-\frac{E_{MS}}{kT}} + 1\right)}{\underbrace{\left(\frac{N}{g}\right)}_{\ll 1}} \gg \underline{\underline{1}} \end{aligned} \quad (13.1.11)$$

Zavedme nyní bezrozměrný parametr

$$\eta \stackrel{\Delta}{=} \frac{n_{MS}}{n_0 + n_{MS}} \quad (13.1.12)$$

$0 \leq \eta \leq 1$

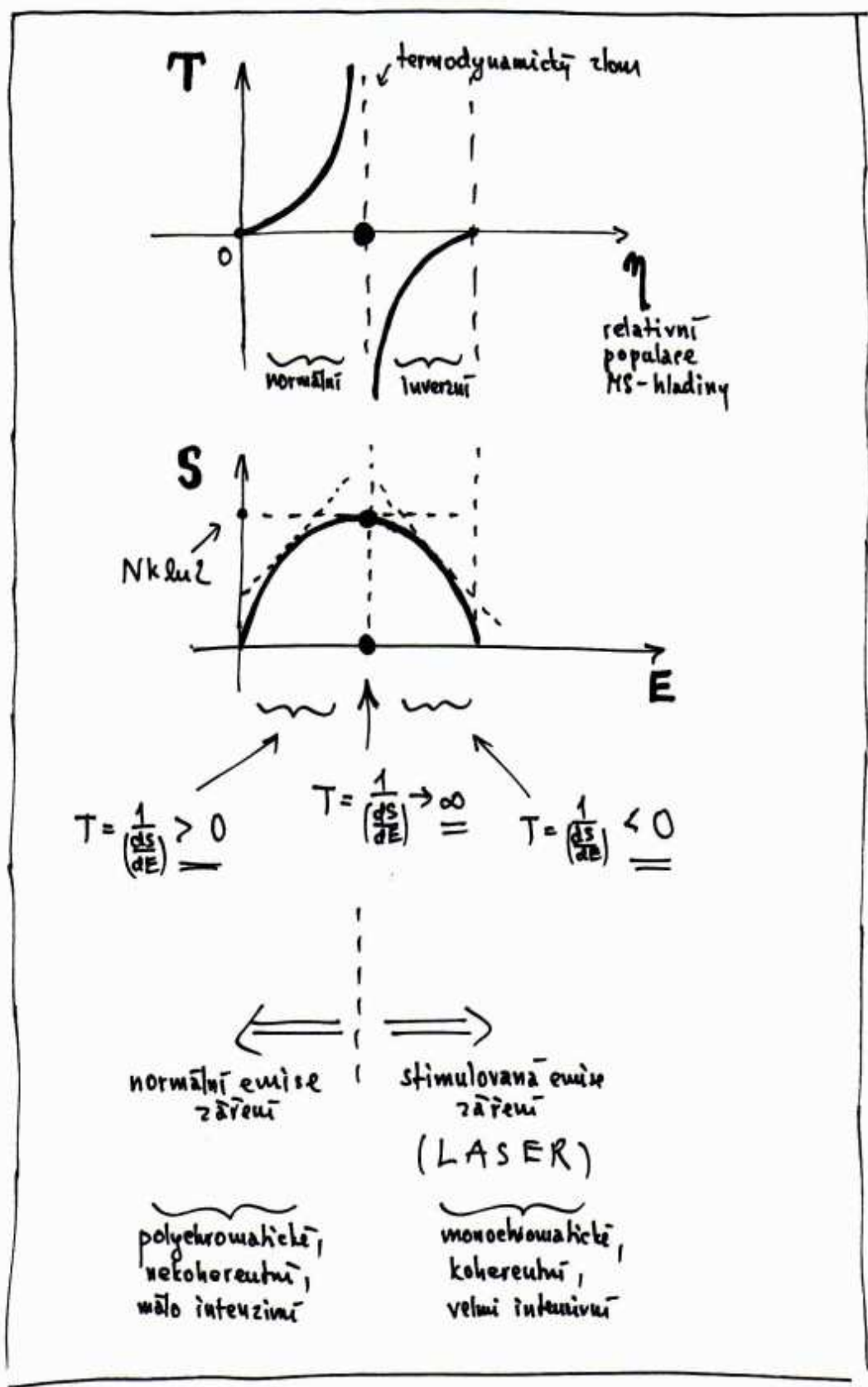
udávající relativní populaci (obsazenost) metastabilní energetické hladiny E_{MS} .

Dosažením za $\underline{\underline{n_{MS}}}$ a $\underline{\underline{n_0}}$ (s uvažováním, že $g_{MS} = g_0 = g$) podle (13.1.5) dostaneme :

$$\eta = \frac{\frac{g}{\left(e^{\frac{E_{MS}-\mu}{kT}} + 1\right)}}{\left(\frac{g}{\left(e^{-\frac{\mu}{kT}} + 1\right)} + \frac{g}{\left(e^{\frac{E_{MS}-\mu}{kT}} + 1\right)}\right)} = \frac{\left(e^{-\frac{\mu}{kT}} + 1\right)}{\left(e^{-\frac{\mu}{kT}}\left(1 + e^{\frac{E_{MS}}{kT}}\right) + 2\right)} \quad (13.1.13)$$

Při platnosti podmínky (13.1.11) můžeme v čitateli a jmenovateli výrazu (13.1.13) zanedbat $\underline{\underline{1}}$ a $\underline{\underline{2}}$ oproti $e^{-\frac{\mu}{kT}} \gg 1$, takže máme :

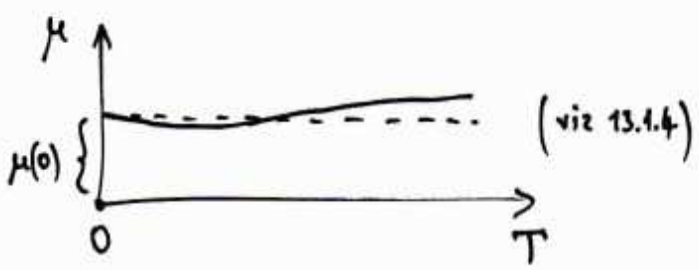
Termodynamický zlom v (13.1.16) zřejmě odpovídá maximu závislosti entropie uvažovaného dvuhladinového systému na energii :



(13.1.17)

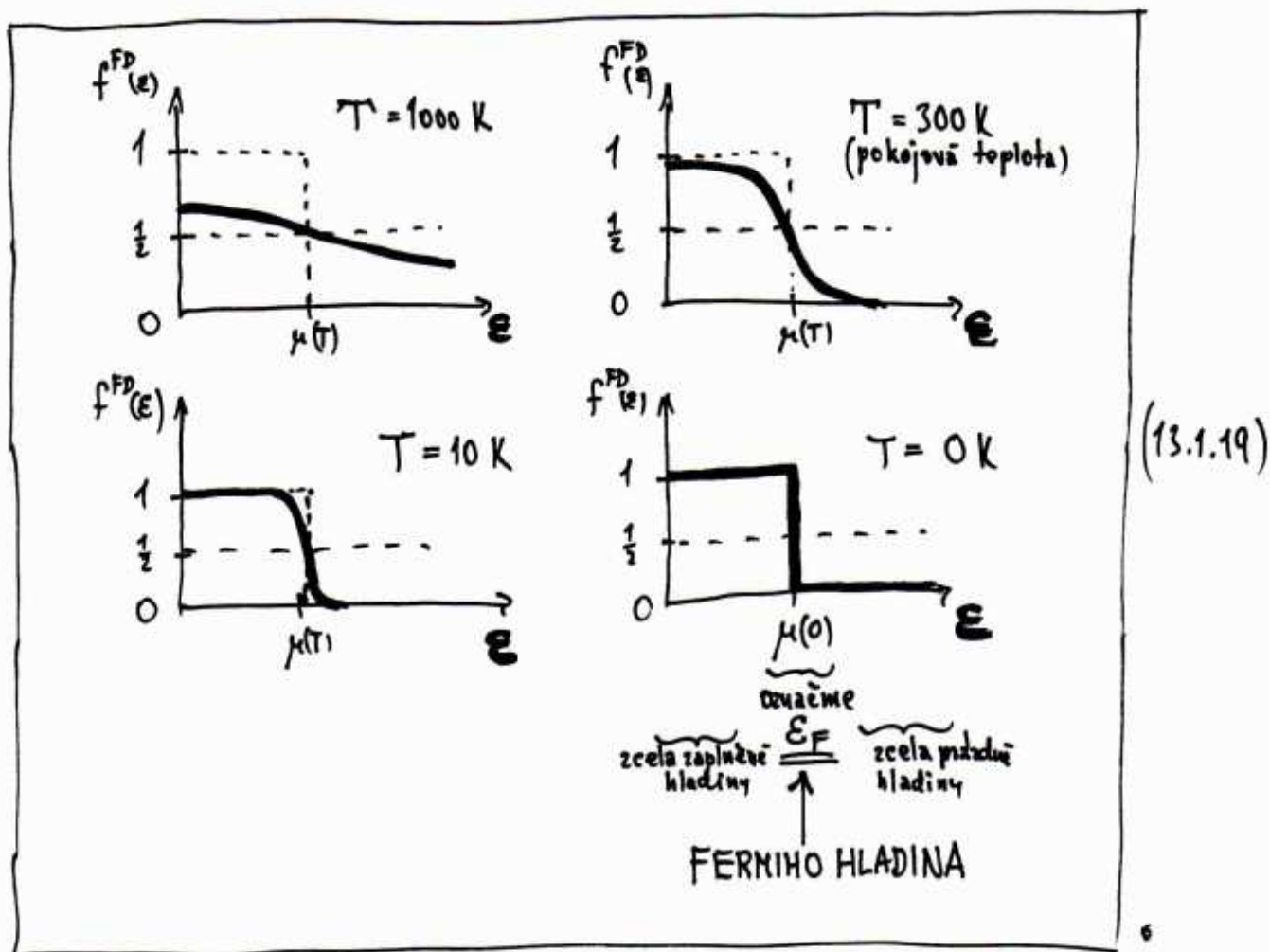


Nyní se vraťme k FD rozdělovací funkci (13.1.2)
pro obecný případ spojitěho souboru enery. hladin $0 \leq \epsilon < \infty$:

$$f^{FD}(\epsilon) = \frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1\right)}$$


(13.1.18)

Zobrazme si $f^{FD}(\epsilon)$ pro 4 různé teploty T :



Energii Fermiho hladiny $\underline{\varepsilon_F}$ určíme následovně:

Vyjedeme z podmínky

$$\int_0^{\infty} f^{FD}(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon = N \quad (13.1.20)$$

Při teplotě $\underline{T=0K}$ je

$$f^{FD}(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{pro } \varepsilon \leq \varepsilon_F \\ 0 & \text{pro } \varepsilon > \varepsilon_F \end{cases} \quad (13.1.21)$$

Dosažením do (13.1.20) máme:

$$\int_0^{\varepsilon_F} 1 \cdot g(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\infty} 0 \cdot g(\varepsilon) d\varepsilon = N$$

$$\underbrace{\int_0^{\infty} f^{FD}(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon}_{\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon} = N \quad (13.1.22)$$

↓

$$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = N$$

$$\uparrow$$

$$32\pi\sqrt{2} \frac{1}{4\pi} V m^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (\text{viz 12.61})$$

$$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = N \quad (13.1.23)$$

↓

$$32\pi\sqrt{2} \frac{1}{4\pi} V m^{3/2} \underbrace{\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}_{\frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2}} = N \quad (13.1.24)$$

↓

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\frac{64}{3} \pi \sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \epsilon_F^{3/2} = N} \quad (13.1.25)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\epsilon_F = \left(\frac{3h^3}{64\sqrt{2} \pi m^{3/2}} \cdot \frac{N}{V} \right)^{2/3}} \quad (13.1.26)$$

energie Fermiho hladiny souboru N nerozlišitelných fermionů o hmotnosti m , nacházejících se v objemu V

Pomocí ϵ_F můžeme dále spočítat např. šední energii 1 fermionu v uvažovaném souboru :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\epsilon_{sh}}} &= \frac{E}{N} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} f^{FD}(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} f^{FD}(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon \cdot 1 \cdot g(\epsilon) d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} 1 \cdot g(\epsilon) d\epsilon} = \\ &= \frac{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \cdot \int_0^{\epsilon_F} \epsilon \cdot \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{32\pi\sqrt{2} \frac{1}{h^3} V m^{3/2} \cdot \int_0^{\epsilon_F} \sqrt{\epsilon} d\epsilon} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2} d\epsilon} = \\ &= \frac{\frac{2}{5} \epsilon_F^{5/2}}{\frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}} = \underline{\underline{\frac{3}{5} \epsilon_F}} \end{aligned} \quad (13.1.27)$$

Nyní obrátíme pozornost k souboru nerozlišitelných bosonů .

13.2. Soubor nerozlišitelných bosonů

Takový soubor se řídí Bose-Einsteinovou rozdělovací funkcí :

$$f^{BE}(\epsilon) = \frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1\right)}$$

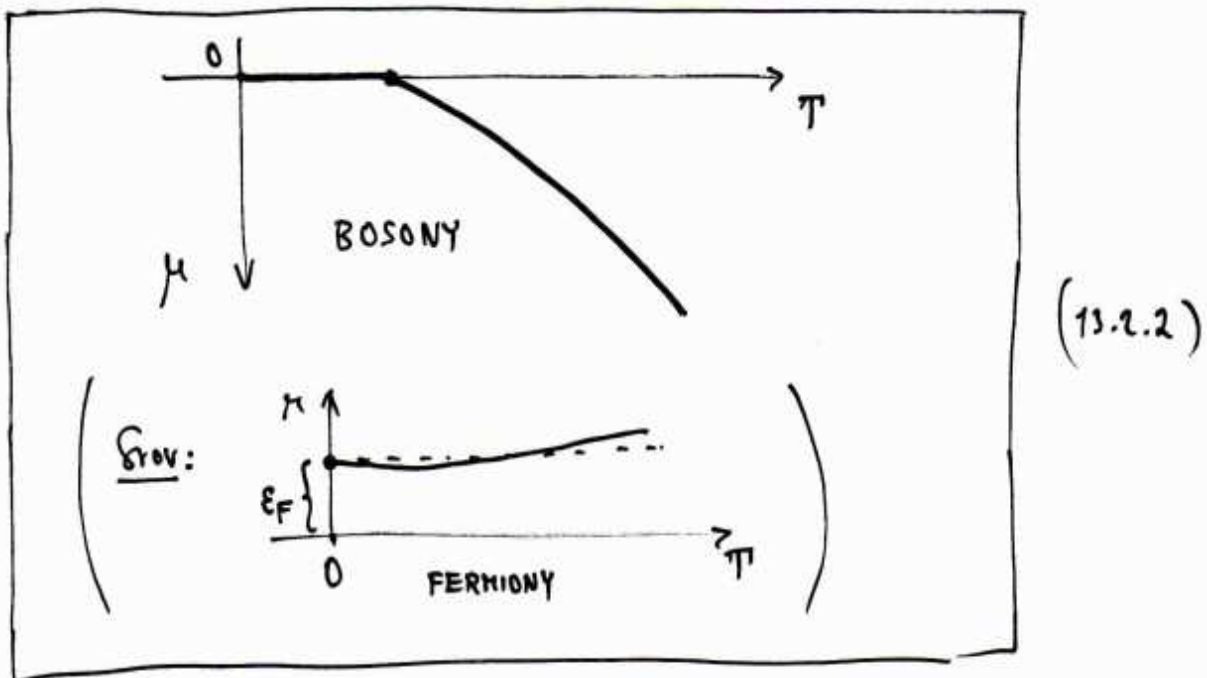
$$\int_0^{\infty} \underbrace{f^{BE}(\epsilon)}_{\frac{1}{\left(e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} - 1\right)}} \underbrace{g(\epsilon)}_{32\pi^2 \frac{1}{h^3} V m^2 \sqrt{\epsilon}} d\epsilon = N \quad (13.2.1)$$

↓

$\mu = \dots$

Podobně jako v případě nerozliš. fermionů, ani zde nelze chemický potenciál μ určit obecně v analytické formě.

Numerické výsledky dávají:

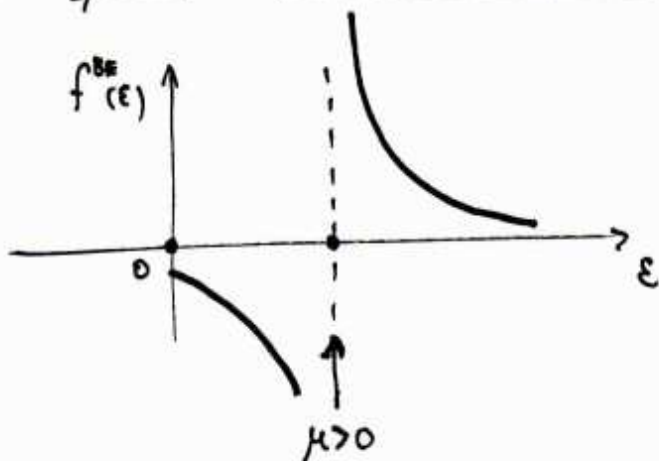


z (13.2.2) vidíme 2 zásadní odlišnosti od předchozího případu nerozlišitelných fermionů:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad & \mu \leq 0 ; \\ \textcircled{2} \quad & \mu(0) = 0 \dots \text{ tj. neexistuje "bosonový" analog Fermiho hladiny .} \end{aligned} \quad (13.2.3)$$

První relaci snadno pochopíme, zobrazíme-li si $f^{BE}(\epsilon)$

pro $\mu > 0$:

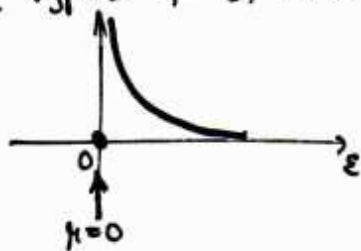


$$\underline{f^{BE}(\epsilon) < 0}$$

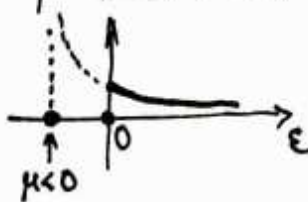
odporuje to definici
rozdělovací funkce
jako průměrného
počtu částic v 1 stavu

$$\Rightarrow \underline{\underline{\mu \leq 0}} .$$

Pro $\mu = 0$ vypadá $f^{BE}(\epsilon)$ takto:

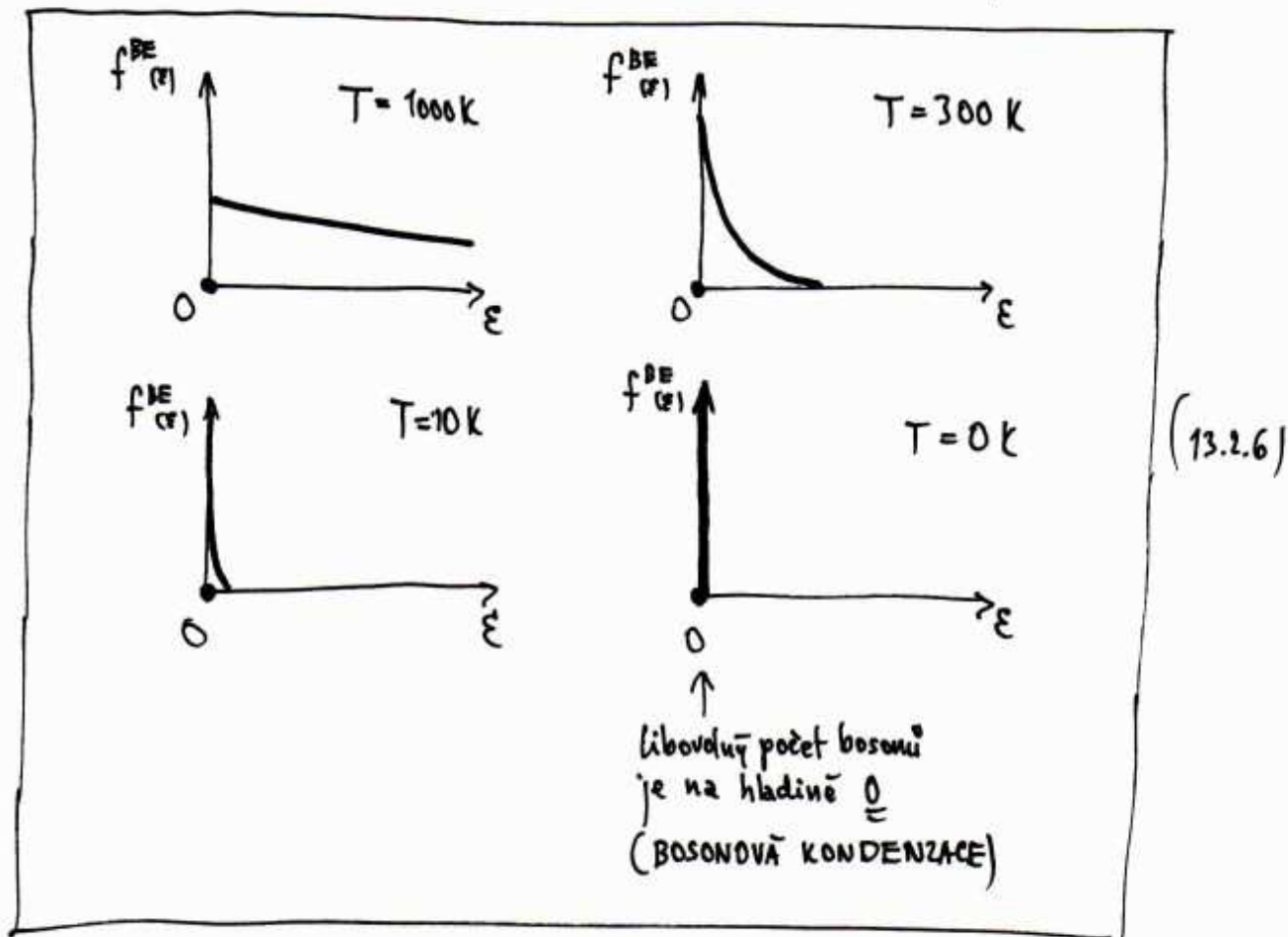


pro $\mu < 0$ takto:

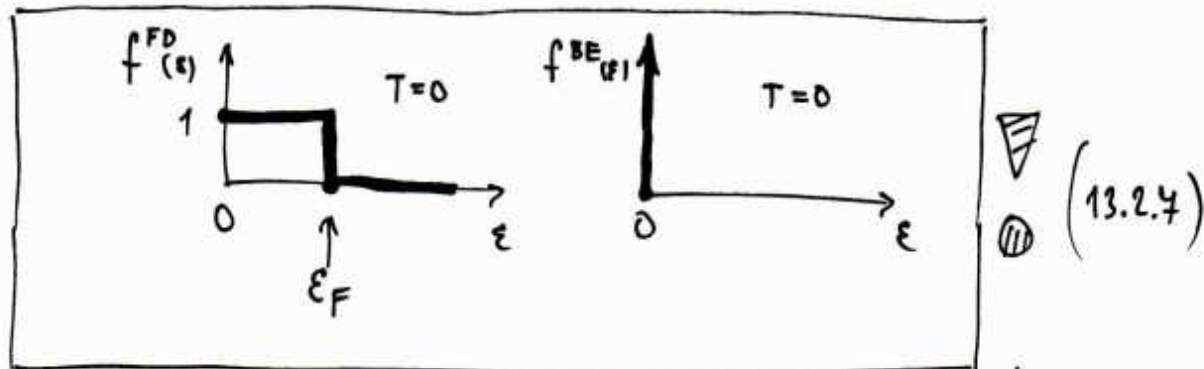


takže na intervalu energií $0 \leq \epsilon < \infty$ je všude $f^{BE}(\epsilon) > 0$.

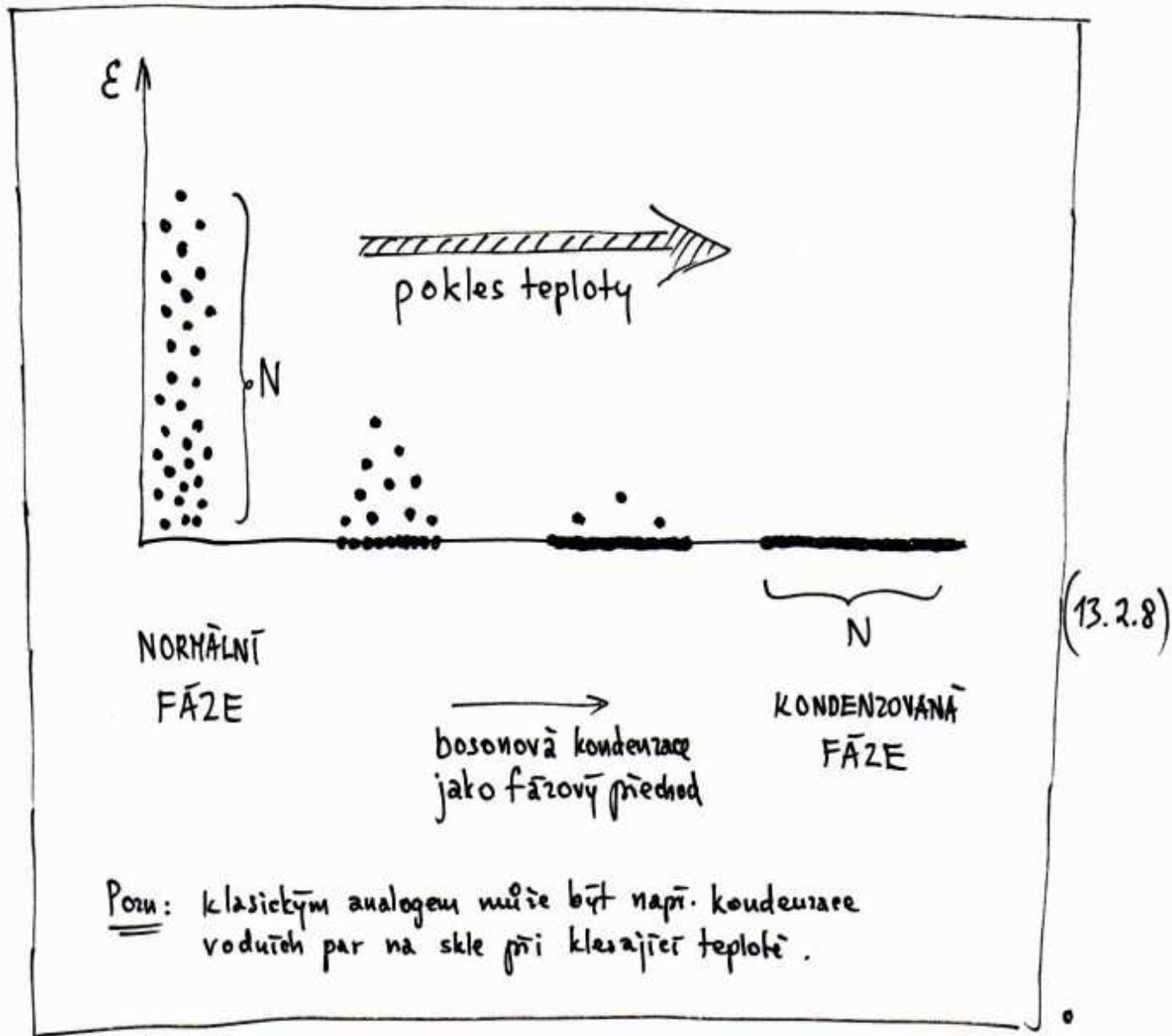
Neexistenci bosonového analogu Fermiho hladiny snadno pochopíme, zobrazení-li si průběh $f_{BE}^{BE}(\epsilon)$ pro různé teploty



Srovnáním (13.2.6) a (13.1.19) vidíme, že při teplotách $T \sim 1000$ K se $f_{FD}^{FD}(\epsilon)$ a $f_{BE}^{BE}(\epsilon)$ od sebe příliš neliší, avšak při teplotách $T \rightarrow 0$ je mezi nimi dramatický rozdíl:



Z (13.2.6) dále vidíme, že s klesající teplotou postupně přibývá bosonů s energií $\epsilon = 0$. Bosonovou kondenzaci tak můžeme chápat jako fázový přechod mezi normální a kondenzovanou fází daného souboru bosonů:



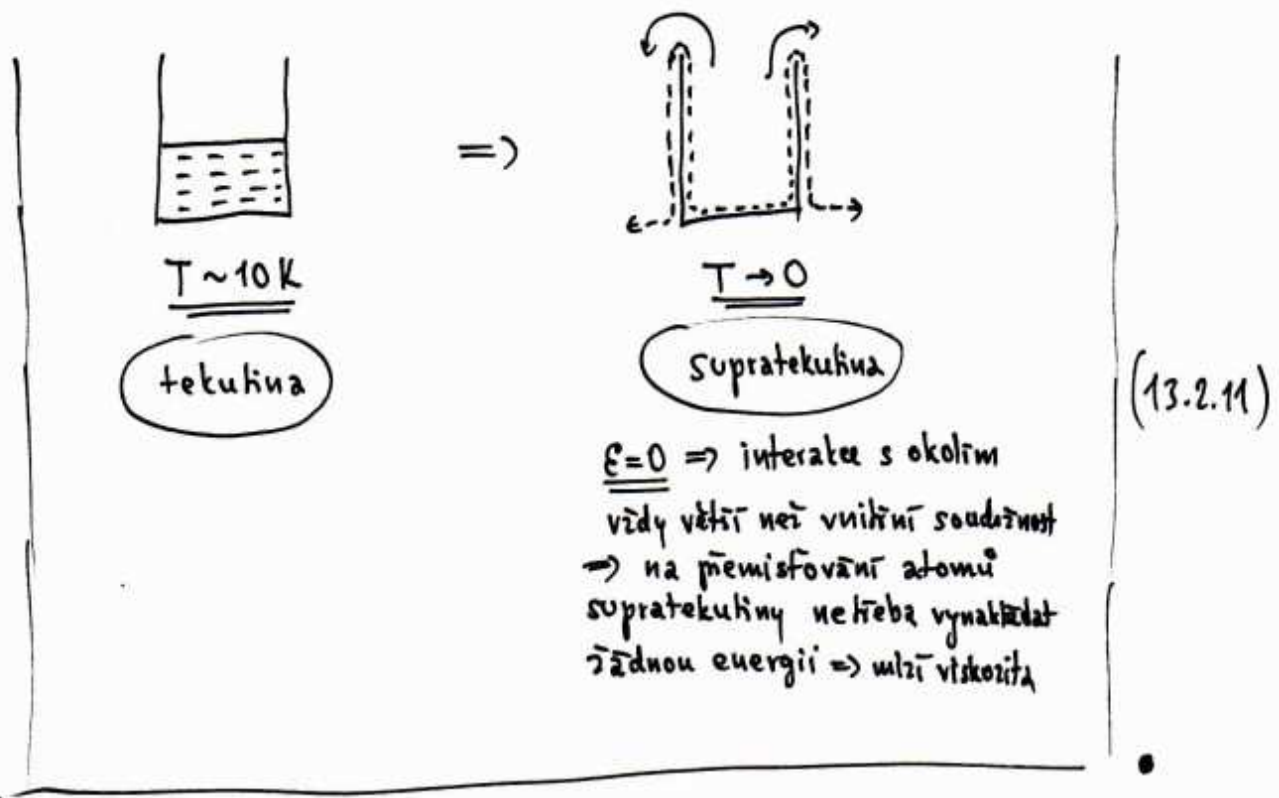
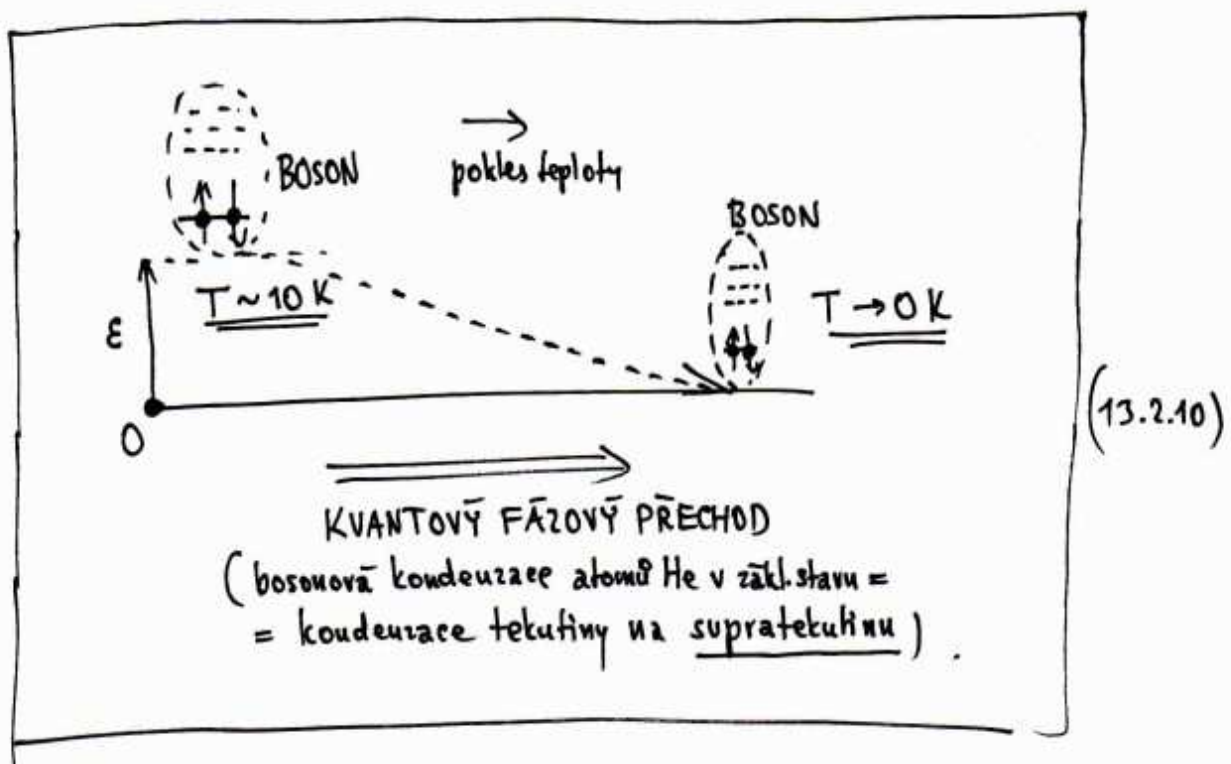
Bosonová kondenzace má klíčový význam pro objasnění jevů, jakými jsou SUPRATEKUTOST a SUPRAVODIVOST látek.

① Supratekutost

Uvažujme statistický soubor atomů He ($N \sim 10^{23}$):

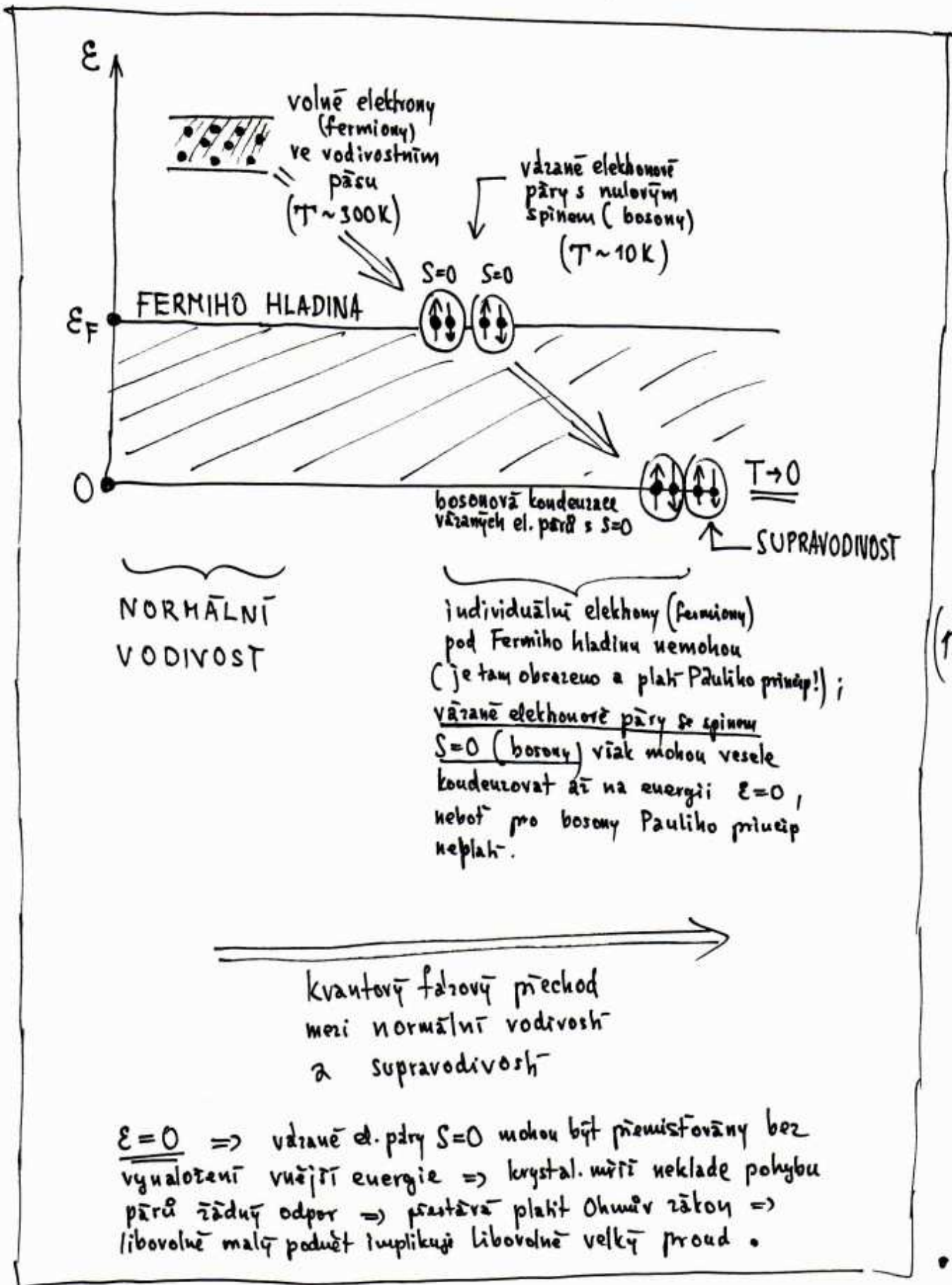


Dalsí pokles teploty :



② Supravodivost

Uvažujme statistický soubor elektronů v krystalu :



(13.2.12)

Klíčová otázka tedy je : Co způsobuje vznik vázaných elektronových párů se spinem $S=0$?

- Odpověď :
- 1) interakce elektronů s elementárními kvanty oscilací krystal. mřížky (= fonony) ;
 - 2) výměnná interakce mezi elektrony jako nerozlišitelnými mikroobjekty .

Suamární přítahlivou interakci popíšeme velmi schématickým modelovým operátorem :

$$\hat{V}(1,2) = -V_0 \hat{\uparrow} \hat{\downarrow} \quad (13.2.13)$$

↑
konst.

Hamiltonián 2 interagujících elektronů bude :

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + \hat{V}(1,2)$$

$\hat{H}(1)\psi_{\uparrow}(E) = E \cdot \psi_{\uparrow}(E)$

$\hat{H}(2)\psi_{\downarrow}(E) = E \cdot \psi_{\downarrow}(E)$

ΔE {
 sířka vodivosti pásu těsně nad Ferm. hladinou
 $\leftarrow E_F + \Delta E$
 $\leftarrow E$
 $\leftarrow E_F$

(13.2.14)

Charakteristické funkce hamiltoniánu \hat{H} hledáme ve tvaru:

$$\Phi_{\uparrow\downarrow} = \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \Delta\varepsilon} x(E) \underbrace{\psi_{\uparrow}(E)}_{\text{ⓐ}} \underbrace{\psi_{\downarrow}(E)}_{\text{ⓑ}} dE \quad (13.2.15)$$

superpozice přes všechny energie vodivostního pásu

Pořadujeme o nich, aby platilo:

$$\hat{H} \Phi_{\uparrow\downarrow} = \varepsilon \cdot \Phi_{\uparrow\downarrow}$$

↑
hledaná energie interagujícího páru

(13.2.16)

Dosažením \hat{H} dle (13.2.14) a $\Phi_{\uparrow\downarrow}$ dle (13.2.15) do (13.2.16) dostaneme:

$$(E + \varepsilon) x(E) - V_0 \cdot \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \Delta\varepsilon} x(E') dE' = \varepsilon \cdot x(E) \quad (13.2.17)$$

Označme:

$$C(\varepsilon_F, \Delta\varepsilon) = \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \Delta\varepsilon} x(E') dE' \quad (13.2.18)$$

Z rovnice (13.2.17) pak máme:

$$(\Delta\varepsilon - \varepsilon) x(E) = V_0 \cdot C(\varepsilon_F, \Delta\varepsilon)$$

↓

(13.2.19)

$$\text{ⓐ} \quad x(E) = \frac{V_0 \cdot C(\varepsilon_F, \Delta\varepsilon)}{\Delta\varepsilon - \varepsilon} \quad \text{ⓑ} \quad (13.2.20)$$

Dále dosadíme (13.2.20) do (13.2.18) :

$$\cancel{C}(\epsilon_F, \Delta\epsilon) = \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \Delta\epsilon} \underbrace{\frac{V_0 \cdot \cancel{C}(\epsilon_F, \Delta\epsilon)}{2\epsilon' - \epsilon}}_{\chi(\epsilon')} d\epsilon' \quad (13.2.21)$$

$$\frac{1}{V_0} = \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \Delta\epsilon} \frac{1}{2\epsilon' - \epsilon} d\epsilon' \quad (13.2.22)$$

$$\frac{1}{2} \ln \left\{ 1 + \frac{2\Delta\epsilon}{2\epsilon_F - \epsilon} \right\}$$

$$\underbrace{2\epsilon_F - \epsilon}_{\substack{\text{minimální energie} \\ \text{2 volných elektronů}}} = \frac{2\Delta\epsilon}{\left(\exp\left(\frac{2}{V_0}\right) - 1 \right)} \quad (13.2.23)$$

energie 2 vázaných elektronů

Vazbová energie páru
(E_{vazb})

$$\bullet \quad \boxed{E_{\text{vazb}} = \frac{2\Delta\epsilon}{\left(\exp\left(\frac{2}{V_0}\right) - 1 \right)}} \quad \bullet \quad (13.2.24)$$

vazbová energie elektronového páru
se spinem $S=0$ (Cooperova páru)

K O N E C