

## 7 Základy kvantovej mechaniky

### 7.1 Časticové vlastnosti elektromagnetického žiarenia

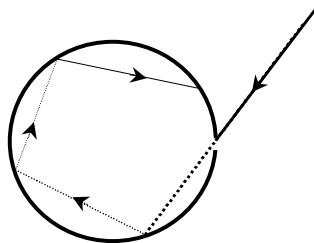
#### 7.1.1 Žiarenie absolútne čierneho telesa

Elektromagnetické vlnenie je šírením elektromagnetickej energie priestorom. Pojem elektromagnetické vlnenie zahŕňa širokú oblasť javov, ktoré sa líšia svojou vlnovou dĺžkou - rádiové vlny, tepelné žiarenie, infračervené žiarenie, svetlo, ultrafialové žiarenie, röntgenové žiarenie, atď. Na príkladoch svetla a röntgenového žiarenia sa dajú demonštrovať vlnové vlastnosti elektromagnetického žiarenia, napr. interferenčné obrazce.

Ukázalo sa ale, že existujú javy, patriace do oblasti elektromagnetického žiarenia, ktoré sa spomínaným spôsobom - v rámci vlnenia a predstáv klasickej fyziky, vysvetliť nedajú. Riešenie tohto problému viedlo k vzniku kvantovej fyziky.

Každá látka emituje elektromagnetické žiarenie, ktorého vlastnosti závisia od teploty a povahy látky. Schopnosť telesa vyžarovať úzko súvisí s jeho schopnosťou absorbovať žiarenie. To sa dá očakávať, pretože teleso pri konštantnej teplote je v tepelnej rovnováhe so svojim okolím a teda musí z neho absorbovať práve toľko energie, koľko vyžiari. Za ideálne budeme považovať také teleso, ktoré pohltí všetku naň dopadajúcu energiu (bez ohľadu na frekvenciu žiarenia) a vyžiari ju vo forme tepelného žiarenia - tzv. **absolútne čierne teleso**. Keďže schopnosť telesa emitovať žiarenie je úmerná jeho schopnosti žiarenie absorbovať, absolútne čierne teleso je súčasne aj najlepším žiaričom. Ak budeme uvažovať ideálny prípad absolútne čierneho telesa, nemusíme brať do úvahy konkrétnu povahu žiariaceho telesa, pretože všetky čierne telesá sa chovajú úplne rovnako a žiarenie bude závisieť iba od teploty. Absolútne čierne teleso si možno predstaviť ako dutý predmet napr. tvaru gule s veľmi malým otvorom (Obr. 7.1). Žiarenie dopadajúce do otvoru vstupuje do dutiny, kde sa odráža od stien až kým sa nepohltí. Pri danej teplote steny dutiny neustále emitujú a absorbujú žiarenie a práve toto žiarenie - žiarenie absolútne čierneho telesa nás zaujíma. Môžeme ho študovať pozorovaním toho, čo vychádza z otvoru. Výsledky pozorovania súhlasia so skúsenosťou:

- čierne teleso vyžaruje tým viac energie, čím je teplejšie,
- relatívne množstvo vyžiarenej energie závisí na vlnovej dĺžke a táto závislosť má pre teplejšie teleso maximum pri menších vlnových dĺžkach, v porovnaní s chladnejším telesom.



Obr. 7.1

Ak schopnosť telesa pohlcovať energiu popíšeme tzv. pohltivosťou:

$$\alpha = \frac{E_{abs}}{E},$$

kde  $E_{abs}$  je pohltená energia a  $E$  je celková dopadajúca energia, potom pre absolútne čierne teleso bude platiť  $\alpha = 1$ .

Ďalej zavedieme veličinu **intenzita vyžarovania** definovanú vzťahom:

$$I = \frac{E}{S\Delta t},$$

kde  $E$  je energia vyžiarená povrchom telesa s plošným obsahom  $S$  za časový interval  $\Delta t$ . Intenzita vyžarovania je teda energia vyžiarená jednotkovou plochou za jednotkový časový interval.

**Spektrálnu intenzitu vyžarovania** (pre určitú vlnovú dĺžku) definujeme vzťahom:

$$I_\lambda = \frac{1}{S\Delta t} \frac{dE}{d\lambda},$$

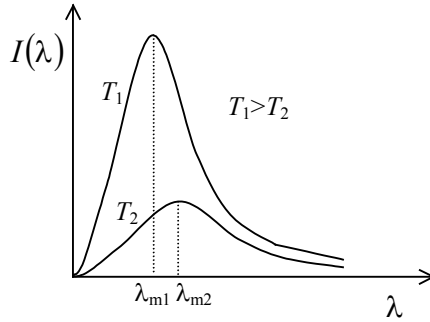
ktorá súvisí s celkovou intenzitou vyžarovania  $I_0$  podľa vzťahu:

$$I_0 = \int_0^\infty I(\lambda) d\lambda. \quad (7.1)$$

Potom pre **celkovú vyžiarenú energiu** možno písať:

$$E = \int dE_\lambda = S\Delta t \int_0^\infty I(\lambda) d\lambda.$$

Na obrázku 7.2 je znázornená závislosť intenzity elektromagnetického žiarenia



Obr. 7.2

od vlnovej dĺžky pre dve telesá rôznych teplôt, pričom platí:  $T_1 > T_2$ . Je vidieť, že čím má teleso vyššiu teplotu, tým viac energie vyžaruje (plocha pod funkciou  $I(\lambda)$  je väčšia) a súčasne vlnová dĺžka, pri ktorej vyžaruje s maximálnou intenzitou, sa posúva doľava - ku kratším vlnovým dĺžkam. Tieto skutočnosti vyjadrujú matematicky dva empirické zákony:

**Wienov posuvný zákon**, ktorý hovorí, že vlnová dĺžka, pri ktorej absolútne čierne teleso vyžaruje s maximálnou intenzitou, je nepriamo úmerná absolútnej teplote telesa

$$\lambda_m = \frac{b}{T},$$

kde  $b = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$  je Wienova konštanta,

**Stefanov - Boltzmannov zákon**, ktorý hovorí, že celková intenzita vyžarovania (pri všetkých vlnových dĺžkach) je priamo úmerná štvrtjej mocnine absolútnej teploty telesa

$$I_0 = \sigma T^4,$$

kde  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$  je Stefanova-Boltzmannova konštanta.

Keby bola explicitne známa závislosť  $I(\lambda)$ , potom Stefanov - Boltzmannov zákon by sme mohli získať integrovaním tejto závislosti podľa vlnovej dĺžky v hraniciach od nuly do nekonečna (vzťah (7.1)). Wienov zákon by sme mohli získať nájdením lokálneho extrému (maxima) tejto funkcie.

Nájsť túto závislosť sa koncom minulého storočia pokúsili Rayleigh a Jeans pomocou predstáv klasickej fyziky. Elektromagnetické žiarenie v dutine s dokonale

odrážajúcimi stenami možno popísať ako stojaté vlnenie (trojrozmerné zovšeobecnenie stojatého vlnenia na napätej strune). V tepelnej rovnováhe atómy (harmonické oscilátory), ktoré vytvárajú steny dutiny absolútne čierneho telesa emitujú a absorbujú elektromagnetické žiarenie. Pri danej teplote  $T$  je podľa ekvipartičného princípu stredná hodnota energie pripadajúca na jeden stupeň voľnosti týchto oscilátorov  $\frac{1}{2}kT$ . Pretože oscilátor má dva stupne voľnosti (kinetickú a potenciálnu energiu), stredná hodnota energie jedného oscilátora je  $2 \cdot \frac{1}{2}kT = kT$ . A teda aj každá stojatá vlna elektromagnetického žiarenia v dutine má strednú hodnotu energie  $kT$  (obsahuje elektrickú a magnetickú energiu). Na základe týchto predpokladov Rayleigh a Jeans dospeli k závislosti

$$I(\lambda) = \frac{8\pi kT}{\lambda^4},$$

kde  $k$  je Boltzmannova konštanta.

Tento vzťah má však veľký nedostatok - vyplýva z neho, že intenzita vyžarovania je tým väčšia, čím je vlnová dĺžka kratšia, čo by znamenalo, že pri ľubovoľnej teplote by všetky telesá mali vyžarovať najtvrdšie ultrafialové žiarenie a v takom svete by samozrejme nemohol existovať žiaden život. Tento zjavný nesúlad teórie a skutočnosti sa vžil pod názvom „ultrafialová katastrofa“ a predstavoval vo fyzike problém, kedy sa jav zrejme nedal vysvetliť v rámci dovedy známej klasickej fyziky.

Riešenie tohto problému vyžadovalo úplne nový prístup, s ktorým prišiel na prelome storočí Max Planck. Ekvipartičný princíp platí iba pre spojité rozdelenie možných energií. Podľa Plancka sa elektromagnetické žiarenie nevyžaruje (a tiež nepohlcuje) spojite, ale v určitých najmenších možných množstvách energie - tzv. **kvantách**, priamo úmerných frekvencii žiarenia  $f$ :

$$E = hf,$$

kde  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Js je tzv. Planckova konštanta, ktorá patrí medzi základné prírodné konštanty.

Teda aj energia oscilátorov v dutine absolútne čierneho telesa sa nemení spojite, ale skokom. Najmenšia možná zmena energie ( $hf$ ) je v prípade klasického oscilátora veľmi malá a nemá vplyv na popis chovania oscilátora, napr. malej guľôčky, ktorá vykonáva kmity na pružine. Avšak v prípade oscilátorov v mikrosвете (atómov) má predpoklad skokovej zmeny energie ďalekosiahle následky. Pre strednú hodnotu energie oscilátora  $\bar{E}$  pri teplote  $T$  sa za uvedeného pred-

pokladu Planckovi podarilo odvodiť vzťah:

$$\bar{E} = \frac{hf}{\exp\left(\frac{hf}{kT}\right) - 1},$$

z ktorého vyplýva, že pri relatívne nízkych teplotách oscilátory kmitajúce s vysokými frekvenciami nie sú vybudené (ich stredná hodnota energie je nulová), teda nedochádza k ultrafialovej katastrofe.

Pre závislosť intenzity vyžarovania od vlnovej dĺžky pri danej teplote Planck potom získal vzťah, **Planckov zákon žiarenia**:

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k\lambda T}\right) - 1}.$$

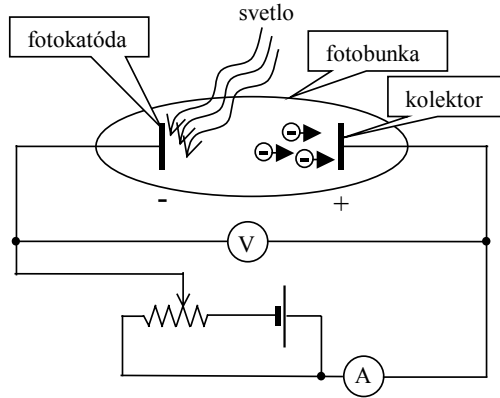
Táto funkcia sa pre malé vlnové dĺžky blíži k nule a jej priebeh je v súlade s experimentálne získanými závislosťami. Z Planckovho zákona žiarenia sa dajú vyššie spomenutými postupmi získať oba empirické zákony - Wienov i Stefanov-Boltzmannov. Keďže všetky dôsledky vyplývajúce z predpokladu kvantovania energie sú v úplnom súlade s experimentálne získanými poznatkami, je treba tento predpoklad považovať za správny.

### 7.1.2 Fotoelektrický jav

Ďalším významným experimentom, ktorý narážal na problémy pri interpretácii na základe predstáv klasickej fyziky, bol fotoelektrický jav. Možné experimentálne usporiadanie pre pozorovanie tohto javu je na obrázku 7.3. Fotobunka pozostáva zo sklenenej banky, v ktorej sa nachádzajú dve elektródy - fotokatóda a kolektor. **Fotoelektrický jav** spočíva v emisii elektrónov účinkom svetla dopadajúceho na povrch kovu.

Elektródy sú pripojené na vonkajší elektrický obvod obsahujúci jednosmerný zdroj elektromotorického napätia, ampérmeter a voltmeter. Ak je fotobunka v tme, obvodom netečie prúd. Pri osvetlení fotokatódy svetlom dostatočne vysokej frekvencie začína obvodom pretekať prúd.

Samotný fakt, že k takémuto javu dochádza, možno pochopiť aj na základe klasickej elektrodynamiky. Elektromagnetická vlna by mohla v princípe dodať elektrónu energiu dostatočnú na jeho uvoľnenie z kovu. Problémy však nastanú, ak skúmame tento jav podrobnejšie. Aparatúra na obrázku 7.3 umožňuje zmerať maximálnu kinetickú energiu  $E_{kmax}$  elektrónov emitovaných z fotokatódy. Toto urobíme tak, že otočíme polaritu zdroja (fotokatóda kladná a kolektor záporný). Elektrón, ktorý vyletí z fotokatódy, bude v takomto prípade brzdený



Obr. 7.3

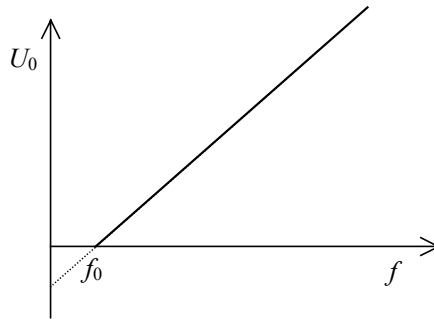
elektrickým poľom medzi elektródami. Pri malom napätí zdroja najrýchlejšie elektróny stále dosiahnu kolektor a obvodom bude tiecť prúd. Ak pri tejto polarite zdroja budeme zvyšovať jeho napätie až do okamihu, keď obvodom prestane tiecť prúd, dostaneme hodnotu napätia  $U_0$  kedy sú zabrzdené aj najrýchlejšie elektróny. Vzťah medzi  $U_0$  a maximálnou kinetickou energiou  $E_{kmax}$  vyjadruje rovnica

$$eU_0 = E_{kmax}, \quad (7.2)$$

kde  $e$  je veľkosť náboja elektrónu.

Typická závislosť napätia  $U_0$  na frekvencii je na obrázku 7.4. Zo vzťahu (7.2) je zrejmé, že rovnaká bude tiež závislosť maximálnej kinetickej energie na frekvencii. Z hľadiska klasickej vlnovej teórie je zvláštne, že pre frekvencie menšie ako istá hraničná hodnota  $f_0$ , k emisii elektrónov nedochádza. Podľa uvedenej teórie by mal byť tento efekt pozorovaný pri ľubovoľnej frekvencii, ak je intenzita svetla dostatočne veľká, avšak pri frekvencii  $f < f_0$  svetlo ľubovoľne veľkej intenzity tento efekt nevyvolá. Ďalšou zvláštnosťou je skutočnosť, že maximálna energia nezávisí na intenzite svetla.

Tretím rozporom medzi klasickou teóriou a experimentom je skutočnosť, že nebolo pozorované časové oneskorenie medzi zapnutím svetla malej intenzity a emisiou elektrónov. Podľa klasickej teórie by sa očakávalo, že je potrebný istý čas na to aby zo svetla malej intenzity elektrón naakumuloval dostatok energie na svoje uvoľnenie.



Obr. 7.4

V roku 1905 Albert Einstein zistil, že vyššie uvedené skutočnosti možno vysvetliť za predpokladu, že svetlo frekvencie  $f$  je prúd častíc nazývaných fotóny a že energia fotónu je daná vzťahom

$$E = hf,$$

kde  $h$  je Planckova konštanta. Všimnime si, že ide o najmenšie kvantum energie vyžiarené oscilátormi v Planckovej hypotéze.

Fotoelektrický jav potom možno popísať ako interakciu medzi dvomi časticami - fotónom a elektrónom, v ktorej fotón odovzdáva celú svoju energiu elektrónu. Matematicky možno fotoelektrický jav opísať Einsteinovým vzťahom

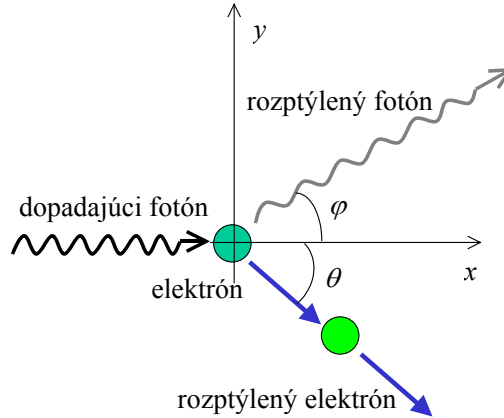
$$hf = W + E_{kmax},$$

kde  $hf$  je energia dopadajúceho fotónu,  $W$  je energia potrebná na uvoľnenie elektrónu z kovu a  $E_{kmax}$  je kinetická energia emitovaného elektrónu. Veličina  $W$  sa nazýva výstupná práca a pre daný kov má konštantnú hodnotu.

### 7.1.3 Comptonov jav

Ak je správna predstava fotónu ako častice s nulovou pokojovou hmotnosťou, malo by byť možné vyšetrovať zrážky medzi fotónmi a napr. elektrónmi ako zrážky medzi biliardovými guľami v klasickej mechanike.

Ak fotón röntgenového žiarenia narazí na elektrón, ktorý bol v pokoji, fotón sa rozptylom odchýli od svojho pôvodného smeru pohybu a elektrón sa začne pohybovať. Je to pružná zrážka, pri ktorej platí zákon zachovania energie a



Obr. 7.5

zákon zachovania hybnosti.

V špeciálnej teórii relativity sme pre celkovú energiu častice získali vzťah:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Umocnením tejto rovnice na druhú a odstránením zlomku získame súvis medzi energiou a hybnosťou

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (7.3)$$

Pre časticu s nulovou pokojovou hmotnosťou platí  $E = pc$  a teda  $p = E/c$ , pre hybnosť fotónu s energiou  $hf$  potom dostávame:

$$p = \frac{hf}{c}.$$

Nech energia fotónu pred zrážkou je  $hf_1$ , po zrážke  $hf_2$ , jeho hybnosť pred zrážkou  $\frac{hf_1}{c}$  a po nej  $\frac{hf_2}{c}$ , kinetická energia elektrónu po zrážke  $E_k$  a jeho hybnosť  $p$ .

Potom možno zapísať zákon zachovania energie:

$$hf_1 = hf_2 + E_k \quad (7.4)$$



a zákon zachovania hybnosti:

$$\vec{p}_I = \vec{p}_{II},$$

kde  $\vec{p}_I$  je celková hybnosť sústavy pred zrážkou a  $\vec{p}_{II}$  po zrážke.

Túto vektorovú rovnicu možno nahradiť dvomi skalárnymi rovnicami pre  $x$ -ové a  $y$ -ové zložky hybnosti, pretože zrážka sa deje v rovine  $xy$ :

$$\frac{hf_1}{c} = \frac{hf_2}{c} \cos \varphi + p \cos \theta \quad (7.5)$$

$$0 = \frac{hf_2}{c} \sin \varphi - p \sin \theta. \quad (7.6)$$

Rovnice (7.5) a (7.6) zapíšeme v tvare:

$$pc \cos \theta = hf_1 - hf_2 \cos \varphi \quad (7.7)$$

$$pc \sin \theta = hf_2 \sin \varphi. \quad (7.8)$$

Umocnením (7.7) a (7.8) a ich sčítaním dostaneme:

$$p^2 c^2 = (hf_1)^2 - 2hf_1 hf_2 \cos \varphi + (hf_2)^2. \quad (7.9)$$

Porovnaním (7.3) s vyjadrením celkovej relativistickej energie ako súčtu kinetickej a pokojovej energie dostaneme

$$p^2 c^2 = E_k^2 + 2E_k m_0 c^2 \quad (7.10)$$

a do výrazu (7.10) dosadíme kinetickú energiu vyjadrenú pomocou vzťahu (7.4)

$$p^2 c^2 = (hf_1)^2 - 2hf_1 hf_2 + (hf_2)^2 + 2m_0 c^2 (hf_1 - hf_2). \quad (7.11)$$

Porovnaním vzťahov (7.9) a (7.11) a jednoduchou úpravou získame

$$m_0 c^2 (hf_1 - hf_2) = hf_1 hf_2 (1 - \cos \varphi). \quad (7.12)$$

Ak (7.12) predelíme výrazom  $h^2 c^2$ , dostaneme výsledok:

$$\frac{m_0 c}{h} \left( \frac{f_1}{c} - \frac{f_2}{c} \right) = \frac{f_1}{c} \frac{f_2}{c} (1 - \cos \varphi).$$

Keďže medzi frekvenciou a vlnovou dĺžkou platí súvis  $c/f = \lambda$ , predchádzajúci vzťah možno prepísať zavedením vlnových dĺžok

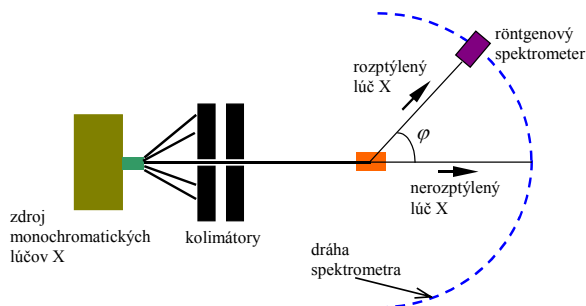
$$\frac{m_0 c}{h} \left( \frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right) = \frac{1 - \cos \varphi}{\lambda_1 \lambda_2}$$

a po úprave pre rozdiel vlnovej dĺžky odrazeného a dopadajúceho žiarenia dostávame

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \varphi). \quad (7.13)$$

Vzťah (7.13) odvodil v roku 1922 A. H. Compton a jav, ktorý popísal a ako prvý pozoroval, sa nazýva **Comptonov jav**. Rovnica (7.13) udáva zmenu vlnovej dĺžky fotónu pri jeho odraze o uhol  $\varphi$  na častici s pokojovou hmotnosťou  $m_0$ . Vlnová dĺžka sa vždy zväčší.

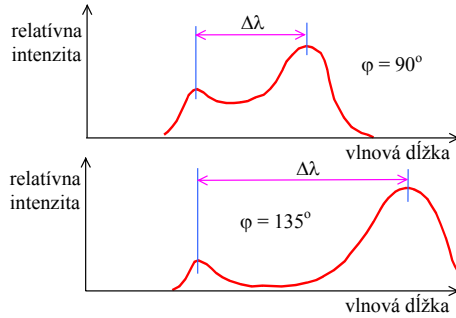
Veličina  $h/(m_0 c)$  má pre elektrón hodnotu  $0,024 \cdot 10^{-10}$  m. Najväčší možný nárast vlnovej dĺžky podľa (7.13) je pre uhol  $180^\circ$ , kedy rozdiel v zátvorke v (7.13) bude rovný 2, takže maximálna zmena vlnovej dĺžky bude  $0,048 \cdot 10^{-10}$  m, pre častice ťažšie ako elektrón bude zmena menšia. Kým pri viditeľnom svetle je zmena vlnovej dĺžky menšia ako 0,01 %, pri röntgenovom žiarení s vlnovou dĺžkou rádu  $10^{-10}$  m tvorí niekoľko percent a je ľahko pozorovateľná. Na ob-



Obr. 7.6

rázku 7.7 je vidieť experimentálny posun vlnovej dĺžky röntgenového žiarenia predpovedaný vzťahom (7.13) pre niektoré uhly odrazu. Pri každom uhle obsahujú rozptýlené lúče aj časť s pôvodnou vlnovou dĺžkou. Tie odpovedajú odrazom fotónov na viazaných elektrónoch, kde za pokojovú hmotnosť treba dosadiť hmotnosť celého atómu, takže posun bude taký malý, že je nemerateľný a teda nameriame pôvodnú vlnovú dĺžku.

Predstava o zrážke fotónu röntgenového žiarenia s voľným elektrónom v látke ako o pružnej zrážke (analogicky biliardovým guliám v klasickej mechanike) viedla teda k úplnému vysvetleniu nárastu vlnovej dĺžky odrazeného žiarenia, ktorý sa pomocou vlnových vlastností vysvetliť nedal a Comptonov jav je ďalším dôkazom časticových vlastností elektromagnetického žiarenia.



Obr. 7.7

## 7.2 Vlnové vlastnosti častíc

### 7.2.1 De Broglieho vlny, vlnovo-časticový dualizmus

Od objavu časticových vlastností elektromagnetických vĺn uplynuli temer dve desaťročia, kým sa v roku 1924 objavila myšlienka, že by mohlo byť správne aj opačné tvrdenie - že častice majú vlnové vlastnosti. V prípade objavu časticových vlastností vĺn to boli experimenty, ktoré potrebovali vysvetlenie (žiarenie čierneho telesa, fotoefekt, atď.) a aj keď toto vysvetlenie bolo revolučné, bolo ho jednoduchšie vysloviť, ako vysloviť hypotézu o vlnových vlastnostiach častíc bez podpory experimentu. A práve v takej situácii bol v roku 1924 Louis de Broglie, keď vyslovil, vedený očakávaním symetrie prírody, myšlienku, že hmota má ako časticové, tak aj vlnové vlastnosti. Táto myšlienka vyvolala hneď veľkú pozornosť a napriek tomu, že experimentálne bola potvrdená až v roku 1927, už v roku 1926 sa stala východiskom pre úspešný rozvoj kvantovej mechaniky (Born, Heisenberg, Schrödinger).

Zhrňme si najprv, čo vieme o fotóne - častici elektromagnetického žiarenia s nulovou pokojovou hmotnosťou:

hybnosť fotónu je  $p = mc$ , energia  $E = hf$ , zo špeciálnej teórie relativity vieme, že  $E = mc^2$ , takže pre jeho hybnosť potom možno písať:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

t.j. hybnosť fotónu je určená jeho vlnovou dĺžkou.

De Broglie, vedený intuitívnym očakávaním symetrie prírody, predpokladal, že

predchádzajúci vzťah je úplne všeobecný, teda použiteľný tak pre fotóny, ako aj pre všetky ostatné častice. Potom pre časticu hmotnosti  $m$  pohybujúcu sa rýchlosťou  $v$ , jej hybnosť  $mv$  súvisí s jej tzv. **de Broglieho vlnovou dĺžkou** podľa vzťahu:

$$\lambda = \frac{h}{mv}. \quad (7.14)$$

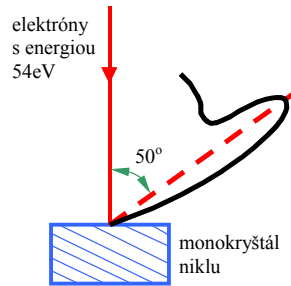
Každý častici s hmotnosťou  $m$  pri jej priamočiariom pohybe s konštantnou rýchlosťou  $v$  prislúcha rovinná monochromatická vlna s vlnovou dĺžkou  $\lambda$ . Ako vidno, čím väčšia je hybnosť častice, tým menšia bude jej vlnová dĺžka.

Vzťah (7.14) dáva do súvisu takú čisto vlnovú charakteristiku, akou je vlnová dĺžka, s čisto časticovou charakteristikou - hybnosťou a matematicky vyjadruje de Broglieho myšlienku o časticovo - vlnovom dualizme. Znamená to, že každá častica sa niekedy chová ako častica (významné sú jej časticové charakteristiky ako napr. hybnosť) a niekedy ako keby bola vlnením (významné sú jej vlnové charakteristiky ako je vlnová dĺžka). Samozrejme to platí aj o elektromagnetickom žiarení, ktoré, ako sme videli v predchádzajúcej kapitole, napriek tomu, že ho možno popísať ako vlnenie, sa niekedy chová ako prúd častíc - fotónov. Avšak nie je možné súčasne pozorovať časticové i vlnové vlastnosti hmoty. Toto vyjadruje tzv. **princíp komplementarity** (N. Bohr): K pochopeniu daného experimentu musíme použiť buď vlnovú alebo časticovú (fotónovú) teóriu, ale nikdy nie obe súčasne.

### 7.2.2 Experimentálne potvrdenie de Broglieho hypotézy

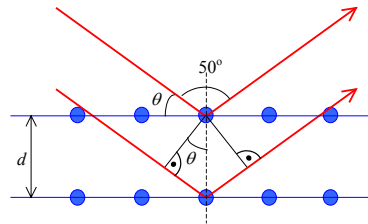
Vlnovú podstatu častíc prvýkrát experimentálne potvrdili Davisson a Germer v roku 1927, keď pozorovali **difrakciu elektrónov**. Táto difrakcia je prejavom vlnovej povahy častíc a nemá obdobu v chovaní newtonovských častíc.

Davisson a Germer študovali rozptyl elektrónov na monokryštali niklu (jeho atómy sú usporiadané do pravidelnej mriežky), pričom mohli meniť energiu dopadajúceho elektrónového zväzku i polohu detektora rozptýlených elektrónov (Obr.7.8). Podľa klasickej fyziky by rozptýlené elektróny mali vyletovať približne rovnako do všetkých smerov. Davisson a Germer však pozorovali zreteľné maximá a minimá v počtoch vyletujúcich elektrónov v závislosti od energie elektrónového zväzku. Pozrime sa, či môžu de Broglieho vlny vysvetliť tento výsledok. Pri kolmom dopade elektrónov s energiou 54 eV na niklový terčik sa ostré maximum v rozdelení rozptýlených elektrónov objavilo pod uhlom  $50^\circ$  od smeru pôvodného zväzku. Uhol dopadu i rozptylu vzhľadom k systému mriežkových rovín (Obr.7.9) potom bude  $65^\circ$ . Jedna z medzirovinných vzdialeností



Obr. 7.8

v kryštáli niklu je  $d = 0,091$  nm. Braggova rovnica pre maximá v difrakčnom obrazci röntgenového žiarenia je:



Obr. 7.9

$$2d \sin \theta = k\lambda. \quad (7.15)$$

V našom prípade, za predpokladu, že  $k = 1$ , je de Broglieho vlnová dĺžka elektrónov po difrakcii rovná:

$$\lambda = 2d \sin \theta = 0,165 \text{ nm}.$$

Ak teraz použijeme k výpočtu vlnovej dĺžky de Broglieho vzťah pri danej kinetickej energii, potom s využitím súvisu medzi kineticou energiou a hybnosťou v nerelativistickom prípade

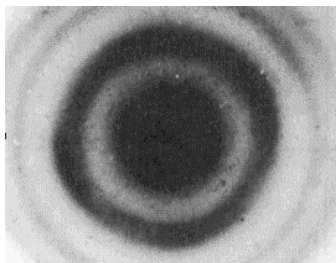
$$E_k = \frac{p^2}{2m},$$

dostávame:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = 0,166\text{nm}.$$

Tento výsledok je v dobrom súhlase s pozorovanou vlnovou dĺžkou, takže Davisson a Germer dokázali, že zväzok častíc (elektrónov) dopadajúci na monokryštal kovu vytvára rovnaký difrakčný obrazec ako vlnenie (röntgenové žiarenie) s vlnovou dĺžkou  $\lambda$ , pričom v prípade častíc je táto vlnová dĺžka de Broglieho vlnová dĺžka, takže častice prejavujú vlnové vlastnosti.

Vlnové vlastnosti elektrónov možno pozorovať aj pomocou Debyeovej - Scherrerovej metódy, ktorá sa používa na skúmanie interferencie röntgenového žiarenia. Röntgenové lúče pri prechode tenkou kovovou fóliou (predstavujúcou súbor mikroskopických kryštalov) sa ohýbajú. Tie lúče, ktorých smer vyhovuje vzťahu (7.15), tvoria plášť kužela. Keď dáme do cesty rozptýleným lúčom fotografickú platňu, kolmo na smer nalietaujúcich lúčov, vytvoria sa na nej (v miestach expozície - dopadu rozptýlených lúčov) sústredné krúžky, tzv. difraktogram. Také isté krúžky dostaneme aj vtedy, ak tenkou kovovou fóliou bude prechádzať prúd elektrónov. Rozptýlené elektróny vytvoria na fotografickej platni (expozujú ju v mieste svojho dopadu) sústavu sústredných interferenčných krúžkov - elektronogram. Takýto elektronogram prvýkrát získal Thomson na cínovej fólii (Obr. 7.10). Uvedené experimenty dokazujú, že prúd častíc, v tomto prípade



Obr. 7.10

elektrónov, sa niekedy správa ako vlnenie - má rovnaké vlnové vlastnosti, popísané Braggovým vzťahom, ako röntgenové (elektromagnetické) žiarenie. Tým teda dokazujú de Broglieho časticovo - vlnový dualizmus.

V súčasnosti je technika difrakcie elektrónov natoľko rozvinutá, že sa využíva v priemysle na skúmanie štruktúry materiálov. Prednosťou tejto metódy je, že sa

dosahuje väčšia intenzita ako pri röntgenovom žiarení (potrebná doba expozície je oveľa kratšia), je možné jednoduchým spôsobom spojiť meniť vlnovú dĺžku elektrónov (pomocou urýchľujúceho napätia), účinkom elektromagnetických polí možno meniť smer elektrónových lúčov (elektrónový mikroskop, ktorého rozlišovacia schopnosť v dôsledku krátkej vlnovej dĺžky elektrónov je oveľa vyššia ako pri optických mikroskopoch).

**Ako je to s pozorovaním vlnových vlastností v našom okolitom svete?** Časticovo - vlnový dualizmus je všeobecný prírodný zákon. Môžeme sa preto pýtať, akú de Broglieho vlnovú dĺžku má auto hmotnosti  $m = 1000$  kg, pohybujúce sa rýchlosťou 20 m/s. Po dosadení do vzťahu  $\lambda = h/(mv)$  a výpočte dostaneme pre vlnovú dĺžku hodnotu  $3,315 \cdot 10^{-38}$  m, čo je také malé číslo, že je pre nás nerozlišiteľné od nuly. Z toho je vidieť, že vlnové vlastnosti sa v našom okolitom svete neprejavujú, prejavujú sa len v mikrosvete, čo však nie je v rozpore s univerzálnosťou časticovo - vlnového dualizmu.

### 7.2.3 Popis častice pomocou vlnového balíka

Uviedli sme súvis vlnových vlastností s časticovými - jednoduchý vzťah medzi vlnovou dĺžkou a hybnosťou častice. Akého druhu sú ale vlnové javy v prípade de Broglieho vln? Aká veličina vytvára jej zmeny, tak ako zvukovú vlnu vytvárajú periodické zmeny tlaku v prostredí, či elektromagnetické vlnenie periodické zmeny intenzít elektrického a magnetického poľa? Keby sme uvažovali iba časticové vlastnosti elektrónov v Thomsonovom pokuse, dopadajúce elektróny by mali v elektronograme vytvoriť jediné maximum so stredom presne oproti dopadajúcim elektrónom. V skutočnosti však elektróny vytvoria taký istý interferenčný obraz ako röntgenové lúče prechádzajúce tenkou kovovou fóliou. Elektronogram zobrazuje pravdepodobnosť výskytu elektrónov. Pre elektróny teda musí existovať charakteristika, ktorá má vlnový charakter a súvisí s pravdepodobnosťou výskytu elektrónov v danom mieste. Táto premenná veličina, ktorá charakterizuje vlnový charakter elektrónov, je **vlnová funkcia**, ktorá súvisí s pravdepodobnosťou výskytu elektrónu v bode v čase  $t$ . Matematický tvar tejto funkcie môže byť taký istý ako pre rovinnú vlnu :

$$\Psi = \Psi_0 \sin \left[ \omega \left( t - \frac{x}{v} \right) \right] = \Psi_0 \sin \left( \omega t - \frac{2\pi x}{vT} \right) = \Psi_0 \sin (\omega t - kx),$$

kde  $k$  je tzv. vlnové číslo. Kvôli zjednodušeniu výpočtov sa používa komplexné vyjadrenie funkcie pre rovinnú vlnu :

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i\omega \left( t - \frac{x}{v} \right)}.$$

Zo vzťahov pre energiu a hybnosť v kvantovej mechanike platí:

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

a

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar},$$

a teda vlnovú funkciu možno napísať aj v tvare:

$$\Psi = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}. \quad (7.16)$$

Pravdepodobnosť  $P$ , že elektrón sa niekde nachádza v danom čase, môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu medzi dvomi hraničnými hodnotami - nulou, ktorá odpovedá istej neprítomnosti a jednotkou, odpovedajúcou istej prítomnosti. Amplitúda každej vlny môže byť ako kladná, tak i záporná, ale záporná pravdepodobnosť nemá zmysel, samotné  $\Psi$  teda nemôže byť pozorovateľnou veličinou, nie je možné ho experimentálne interpretovať, nemá teda žiaden fyzikálny zmysel. Toto sa ale netýka  $|\Psi|^2$ , štvorca absolútnej hodnoty vlnovej funkcie, čo je vždy kladné číslo. Veličina  $|\Psi|^2$  je úmerná pravdepodobnosti experimentálneho nájdenia častice v danom časovom okamihu  $t$  v mieste  $x$  a nazýva sa **hustota pravdepodobnosti**. Túto interpretáciu prvýkrát navrhol Max Born v roku 1926.

Ak navrhnutá vlnová funkcia (7.16) predstavuje časticu, hustotu pravdepodobnosti výskytu tejto častice vypočítame ako druhú mocninu absolútnej hodnoty vlnovej funkcie:

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \cdot \Psi_0^* e^{-\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = |\Psi_0|^2, \quad (7.17)$$

kde  $\Psi^*$  je funkcia komplexne združená k funkcii  $\Psi$ . Hustota pravdepodobnosti je konštantná, takže pravdepodobnosť výskytu častice je rovnaká v celom priestore. Vlna je príliš „široká“ - neurčitá na to, aby mohla predstavovať časticu. Táto vlna predstavuje časticu s presnou hodnotou vlnového čísla  $k$ , ktoré priamo súvisí s hybnosťou  $p$ . Ak hybnosť, a teda aj vlnové číslo  $k$  častice nemôžeme určiť presne, ale len s presnosťou  $< k - \Delta k, k + \Delta k >$ , potom časticu môžeme opísať superpozíciou vln, ktorých vlnové číslo je z intervalu  $< k - \Delta k, k + \Delta k >$ :

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \Psi_0(k) e^{-i[\omega(k)t - kx]} dk.$$

Reálna zložka výsledného vzťahu predstavuje konečný výsledok :



$$\Psi(x, 0) = 2\Psi_0\Delta k \cos(k_0x) \frac{\sin(x\Delta k)}{x\Delta k}. \quad (7.18)$$

Takáto vlnová funkcia sa nazýva **vlnový balík** a lepšie vystihuje polohu častice v priestore (Obr. 7.11).

Dá sa ukázať, že pri superpozícii vln blízkych hodnôt vlnového čísla sa maximum obálky výslednej vlny pohybuje **grupovou rýchlosťou**  $v_g$ , ktorá je definovaná vzťahom

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \quad (7.19)$$

V prípade častice hmotnosti  $m$  pohybujúcej sa rýchlosťou  $v$  je táto rýchlosť rovná rýchlosti častice:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left( \frac{E}{\hbar} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2} \frac{2\hbar^2 k c^2}{\sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2}}$$

$$v_g = \frac{\hbar k c^2}{m c^2} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v.$$

Keďže častice sa niekedy prejavujú ako vlnenie s určitou vlnovou dĺžkou a dajú sa popísať pomocou vlnových funkcií, možno očakávať, že existujú zásadné hranice presnosti, s ktorou možno merať ich časticové charakteristiky. V ďalšej časti ich ukážeme.

### 7.3 Heisenbergove vzťahy neurčitosti

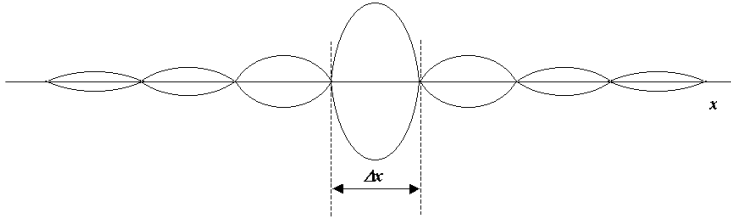
Hlavné maximum vlnového balíka (7.11) je v mieste  $x = 0$  a je ohraničené bodmi  $x_1$  a  $x_2$ , pre ktoré má funkcia (7.18) nulové hodnoty, teda platí  $x_1\Delta k = -\pi$  a  $x_2\Delta k = \pi$ . Šírka maxima sa rovná rozdielu týchto súradníc :

$$\Delta x = x_2 - x_1 = \frac{2\pi}{\Delta k}. \quad (7.20)$$

Takže platí

$$\Delta x \Delta k = 2\pi. \quad (7.21)$$

Z výsledku vyplýva, že čím je interval  $\Delta k$  širší, tým je užší interval  $\Delta x$ , ktorým je lokalizovaná častica na osi  $x$ . Vlnový balík vytvára aj ďalšie, ale podstatne



Obr. 7.11

nižšie maximá, preto, ak  $\Delta x$  má vyjadrovať interval, v ktorom sa častica môže nachádzať, vo vzťahu (7.21) treba rovnosť nahradiť nerovnosťou :

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi.$$

Ak využijeme súvis medzi hybnosťou a vlnovým číslom  $p = \hbar k$ , predchádzajúci vzťah možno napísať v tvare :

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

Exaktné výpočty ukazujú, že platí:

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2},$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Tieto dva vzťahy sa nazývajú **Heisenbergove vzťahy neurčitosti**. Prvý z nich hovorí, že nie je možné súčasne s ľubovoľnou presnosťou určiť hybnosť a polohu častice. Druhý vyjadruje skutočnosť, že ak chceme merať energiu častice počas časového intervalu  $\Delta t$ , nepresnosť nášho merania bude  $\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$ . Keďže  $h$  je veľmi malé číslo, obmedzenia kladené vzťahmi neurčitosti sú podstatné iba v subatómových rozmeroch.

**Odhad rozmeru atómu vodíka.** Pomocou prvého vzťahu neurčitosti môžeme veľmi jednoducho odhadnúť, aký musí byť minimálne polomer atómu vodíka, ak vieme, že energia  $E$  elektrónu hmotnosti  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg v atóme je  $17 \text{ eV} = 2,7 \cdot 10^{-18}$  J. Odpovedajúca hybnosť:

$$p = \sqrt{2mE} = 2,2 \cdot 10^{-24} \text{ kgms}^{-1},$$

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}, \quad \Delta x \geq \frac{h}{4\pi \Delta p}.$$

$\Delta p$  môže byť menšie alebo rovné  $p$ , takže ak za maximálne  $\Delta p$  budeme brať hodnotu hybnosti, dostaneme minimálnu hodnotu polomeru atómu vodíka:

$$x_{\min} = \Delta x = \frac{h}{4\pi p} \cong 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ m.}$$

Ako uvidíme neskôr, tento odhad je v súlade so skutočnosťou.

## 7.4 Schrödingerova rovnica

### 7.4.1 Zostavenie Schrödingerovej rovnice

V klasickej mechanike je stav častice alebo sústavy častíc úplne popísaný, ak sú známe napr. súradnice a hybnosti častice alebo sústavy častíc. V kvantovej mechanike informáciu o systéme poskytuje vlnová funkcia.

Stav častice, ktorej pohyb je obmedzený pôsobením vonkajších síl, je úplne popísaný vlnovou funkciou  $\Psi$ , ktorá je funkciou súradníc a času. Vlnovú funkciu získame riešením rovnice, ktorá musí byť lineárna a homogénna, aby vlnová funkcia spĺňala princíp superpozície, ktorý všeobecne platí pre vlnové procesy. Rovnica tiež musí byť diferenciálnou rovnicou prvého rádu vzhľadom k času. Potom vývoj vlnovej funkcie v čase môže byť popísaný na základe jej známej hodnoty v počiatočnom okamihu. Takéto úlohy rieši kvantová mechanika, ktorú rozvinuli v rokoch 1925-26 najmä Erwin Schrödinger a Werner Heisenberg.

Teraz uvedieme požiadavky, ktoré musí spĺňať vlnová funkcia  $\Psi$ . Keďže  $|\Psi|^2$  je rovné hustote pravdepodobnosti výskytu častice v danom mieste, musí byť integrál  $|\Psi|^2$  cez celý priestor rovný 1 - častica sa niekde v priestore určite nachádza:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1,$$

čo je tzv. **normovanie vlnovej funkcie** na jednotku.

Vlnová funkcia v kvantovej mechanike popisuje stav častice, pretože pomocou nej môžeme získať úplnú informáciu o všetkých merateľných veličinách v danom fyzikálnom stave častice. Preto vlnová funkcia musí byť jednoznačnou funkciou polohy a času a potom aj pravdepodobnosť bude mať jedinú hodnotu v každom mieste a čase.

Vlnová funkcia musí byť spojitá a hladká, teda jej parciálne derivácie podľa jednotlivých súradníc musia byť všade spojité. Keďže samotná vlnová funkcia

nemá fyzikálny zmysel, môže byť aj komplexnou funkciou a v jednorozmernom prípade ju možno zapísať v tvare (7.16):

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}. \quad (7.22)$$

Výraz (7.22) je matematickým popisom vlnového ekvivalentu voľnej častice s celkovou energiou  $E$  a hybnosťou  $p$  pohybujúcou sa v kladnom smere osi  $x$ .

Vlnovú funkciu pre časticu voľne sa pohybujúcu v trojrozmernom priestore potom možno napísať v tvare:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}. \quad (7.23)$$

Uvedené vlnové funkcie (7.22) a (7.23) popisujú voľnú časticu, t.j. časticu, ktorá nie je pod vplyvom žiadnych síl. Keďže úlohou kvantovej mechaniky je riešiť prípady, kedy je pohyb častice obmedzený pôsobením rôznych síl, bude treba získať všeobecnú diferenciálnu rovnicu pre vlnovú funkciu, ktorej riešením bude vlnová funkcia v danom silovom poli.

Budeme postupovať indukčnou metódou - od špeciálneho známeho riešenia dospejeme k všeobecne platnej rovnici. Vlnová funkcia je funkciou súradníc a času. Chceme teda zistiť, ako bude súvisieť časová derivácia tejto funkcie s jej deriváciou podľa súradníc.

Zderivujeme (7.23) podľa času:

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \cdot \left( -\frac{i}{\hbar} E \right),$$

čo možno písať

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = E \cdot Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}.$$

Keďže pre voľnú časticu, pohybujúcu sa rýchlosťou oveľa menšou ako je rýchlosť svetla, platí

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m},$$

máme z predchádzajúcej rovnice:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi(\vec{r}, t). \quad (7.24)$$

Zderivujeme vlnovú funkciu podľa súradníc. Pre  $x$ -ovú súradnicu dostávame:

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial x} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \cdot \left( \frac{i}{\hbar} p_x \right) \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial x} = p_x \Psi(\vec{r}, t).$$

Ak teda na vlnovú funkciu aplikujeme operátor  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , dostaneme pôvodnú vlnovú funkciu násobenú  $x$ -ovou zložkou hybnosti častice, preto tento operátor nazývame operátorom hybnosti  $\hat{p}_x$ :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Druhou deriváciou podľa súradníc dostaneme:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial x^2} = p_x^2 \Psi(\vec{r}, t).$$

V trojrozmernom prípade:

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(\vec{r}, t) &= \vec{p}^2 \Psi(\vec{r}, t), \\ -\hbar^2 \Delta \Psi(\vec{r}, t) &= \vec{p}^2 \Psi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (7.25)$$

Ak túto rovnicu predelíme  $2m$ , dostaneme

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi(\vec{r}, t) \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) = E_k \Psi(\vec{r}, t),$$

pretože  $E_k = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ .

Teda operátor  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$  aplikovaný na vlnovú funkciu dáva kinetickú energiu častice násobenú vlnovou funkciou a preto ho nazývame operátorom kinetickej energie

$$\hat{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

Porovnaním (7.24) a (7.25) dostávame **Schrödingerovu rovnicu pre voľnú časticu**:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t). \quad (7.26)$$

Rovnicu (7.26) splňa každá rovinná vlna (7.23) a lineárna kombinácia takýchto vln, t.j. de Broglieho vlnové balíky.

Ak sa častica nachádza v silovom poli s potenciálnou energiou  $V(\vec{r}, t)$ , na pravej strane (7.26) je treba namiesto operátora kinetickej energie uvažovať operátor celkovej energie:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t)$$

a Schrödingerova rovnica pre takúto časticu bude mať tvar:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t), \quad (7.27)$$

čo pomocou operátora celkovej energie  $\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{V}$  (hamiltoniánu) možno zapísať:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t).$$

V mnohých prípadoch potenciálna energia častice v silovom poli nezávisí od času, pretože sily, ktoré na časticu pôsobia, a teda i potenciálna energia, sa menia iba s polohou. Časticu potom možno popísať vlnovou funkciou:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{r}), \quad (7.28)$$

takže vlnová funkcia je súčinom časovo závislej funkcie a funkcie polohy. Vlnovú funkciu (7.28) dosadíme do Schrödingerovej rovnice (7.27)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \right) \psi(\vec{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{r}).$$

Po derivovaní a predelení celej rovnice výrazom  $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  dostávame:

$$E\psi(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r})$$

alebo

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

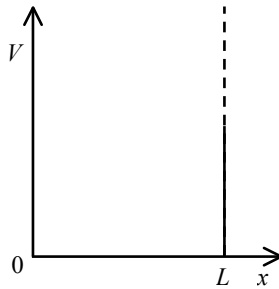
čo je **bezčasová Schrödingerova rovnica**. Riešením tejto rovnice získame vlnové funkcie a z podmienok kladených na vlnové funkcie získame možné hodnoty energie. Príklad na riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice je uvedený v nasledujúcej kapitole.

#### 7.4.2 Častica v jednorozmernej, nekonečne hlbokoj jame

Nech častica hmotnosti  $m$  sa nachádza v jednorozmernej nekonečne hlbokoj jame šírky  $L$ . To znamená, že pre polohu častice  $x$  platí:  $0 < x < L$  a pre jej potenciálnu energiu v jame:  $V = 0$ , pričom potenciálna energia všade mimo jamy je nekonečne veľká (teda častica je „uväznená“ v jame) a teda vlnová funkcia

častice mimo jamy bude nulová (Obr. 7.12).

Voľný elektrón v kove je podobne „uväznený“ - vo vnútri kovu sa môže pohybovať takmer voľne, ale von z kovu sa môže dostať iba po dodaní energie najmenej rovnej výstupnej práci. V reálnych prípadoch majú jamy konečnú hĺbku, takže pravdepodobnosť úniku častice z jamy je nenulová - vlnové funkcie za hranicou jamy nie sú celkom nulové (tzv. tunelový jav).



Obr. 7.12

$$\int_0^L |\Psi|^2 dx = 1. \quad (7.29)$$

Pre potenciálnu energiu v uvedenom intervale platí  $V = 0$  a všade inde je nekonečne veľká. Budeme teda riešiť jednorozmernú, časovo nezávislú Schrödingerovu rovnicu v tvare:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad \text{kde} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Potom

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0. \quad (7.30)$$

Rovnicu (7.30) možno zapísať v známom tvare pre diferenciálnu rovnicu druhého rádu bez pravej strany:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\omega^2\Psi, \quad \text{kde} \quad \omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Jej riešeniami sú:

$$\Psi = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x, \quad \Psi = B \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x. \quad (7.31)$$

Okrajové podmienky vyžadujú, aby platilo  $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$ . Dosadením  $x = 0$  do druhého riešenia dostaneme  $B = 0$  (pretože  $\cos(0) = 1$ ), takže nenulové ostáva iba prvé riešenie z (7.31). Ak doň dosadíme  $x = L$ , výsledok musí byť rovný nule, pretože v stene častica byť nemôže, teda aj vlnová funkcia tam musí byť nulová:

$$\Psi_{x=L} = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = 0.$$

Keďže  $A$  je rôzne od nuly, musí byť nulová funkcia sinus, čo bude splnené, ak:

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Odtiaľ pre energiu vyplýva:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2. \quad (7.32)$$

$E_n$  sú **energetické hladiny** a  $n$  je **kvantové číslo** (tzv. **hlavné**), ktoré kvantuje energiu. To teda znamená, že častica, ktorej pohyb je obmedzený na šírku jamy a inak je voľná, nemôže nadobúdať ľubovoľné hodnoty energie, nemôže energiu meniť spojite, nemôže mať ani nulovú energiu, ale jej energia môže mať iba diskkrétne hodnoty dané vzťahom (7.32). Teda z okrajových podmienok kladených na vlnovú funkciu vyplýva **kvantovanie energie**.

Zo súvisu energie (energia častice je jej kinetickou energiou) a hybnosti možno získať vzťah pre kvantovanie hybnosti častice:

$$p_n = \sqrt{2mE_n} = \pm \frac{\pi \hbar}{L} n.$$

Znamienko  $\pm$  vyjadruje pohyb v oboch smeroch osi  $x$ .

#### Príklad

Vypočítajme energetické hladiny pre:

- elektrón s hmotnosťou  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg v jame šírky  $L = 10^{-10}$  m,
- guľôčku hmotnosti  $m = 10$  g v jame šírky  $L = 10$  cm.

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$



$$\text{a) } E_n = n^2 \cdot 6 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 38 \text{ eV} \cdot n^2 \quad (1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J})$$

$$n = 1 \Rightarrow E_1 = 38 \text{ eV}$$

$$n = 2 \Rightarrow E_2 = 152 \text{ eV}$$

$$n = 3 \Rightarrow E_3 = 342 \text{ eV}$$

Všetky tieto energetické hladiny sú pozorovateľné.

$$\text{b) } E_n = n^2 \cdot 5,5 \cdot 10^{-64} \text{ J}$$

$E_1 = 5,5 \cdot 10^{-64} \text{ J}$ , rýchlosť častice s touto energiou je  $v_1 = 3,3 \cdot 10^{-31} \text{ m/s}$ , čo je nerozoznateľné od pokoja.

Pre bežne pozorovateľnú rýchlosť guľôčky  $v_n = 0,33 \text{ m/s}$  dostaneme pre príslušnú energetickú hladinu kvantové číslo  $n = 10^{30}$ . Táto hladina je nerozlišiteľná od nasledujúcej hladiny, teda energetické spektrum guľôčky sa javí nie ako diskrétné, ale ako spojité.

Ak do (7.31) dosadíme získané možné hodnoty energie, dostaneme vlnové funkcie, ktoré popisujú dané energetické stavy. Pre  $n$ -tý energetický stav takto máme:

$$\Psi_n = A \sin \frac{n\pi}{L} x. \quad (7.33)$$

Všimnime si, že keby  $n = 0$  ( $E_n = 0$ ), potom  $\Psi_n = 0$ , teda častica v jame nie je. Preto energia častice nemôže byť nulová.

Aby sme úlohu vyriešili, ostáva určiť hodnotu konštanty  $A$ . Získame ju aplikovaním normovacej podmienky (7.29) na vlastné vlnové funkcie (7.33):

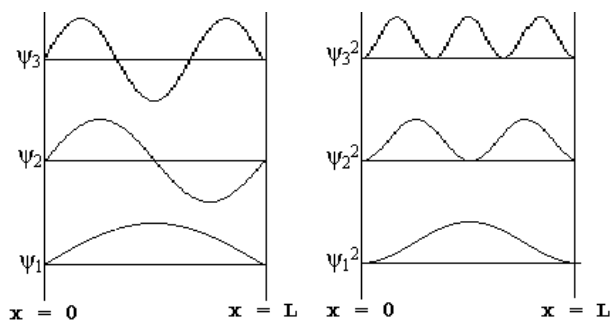
$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1.$$

Aby sme vyriešili integrál, zavedieme substitúciu  $\frac{n\pi x}{L} = y$ , potom  $dx = \frac{L}{n\pi} dy$ , pričom hranice integrovania sa zmenia nasledovne:  $x = 0 \Rightarrow y = 0$ ,  $x = L \Rightarrow y = n\pi$  a budeme mať:

$$\begin{aligned} \frac{A^2 L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 y dy &= \frac{A^2 L}{n\pi} \left[ -\frac{\cos y \sin y}{2} + \frac{y}{2} \right]_0^{n\pi} = \\ &= \frac{1}{2} n\pi \frac{A^2 L}{n\pi} = \frac{1}{2} A^2 L = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}. \end{aligned}$$

Výsledné normované vlnové funkcie potom možno písať v tvare:

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x. \quad (7.34)$$



Obr. 7.13

Na obrázku 7.13 sú znázornené priebehy vlnových funkcií a ich kvadrátov v závislosti od súradnice  $x$  pre prvé tri najnižšie možné energetické hladiny častice  $n = 1, 2, 3$ . Ako už vieme, fyzikálnu interpretáciu majú iba kvadráty vlnových funkcií. Ako je z obrázka vidieť, časticu v najnižšom energetickom stave ( $n = 1$ ) nájdeme najpravdepodobnejšie v strede jamy, kým v najbližšom vyššom energetickom stave ( $n = 2$ ) tam časticu nenájdeme vôbec, zato najpravdepodobnejšie ju nájdeme v štvrtine a troch štvrtinách  $L$ . Získali sme výsledok odlišný od predstáv klasickej fyziky, podľa ktorých by sme časticu v jame našli s rovnakou pravdepodobnosťou v ľubovoľnom mieste. Je treba si opäť uvedomiť, že všetky výsledky odlišné od klasických predstáv, ktoré sme získali pri riešení tohto problému, sa prejavujú a sú merateľné iba v subatómovom svete.