1.2 ZÁKLADY KVANTOVÉ TEORIE

V této kapitole se dozvíte:

- o vzniku kvantové teorie a jejích zákonitostech.

Budete schopni:

- odůvodnit na základě známých experimentálních skutečností nutnost aplikace přesnějších, tj. kvantových, zákonitostí v oblasti fyziky mikrosvěta;
- vysvětlit základní pojmy kvantové teorie, formulovat její důležité zákony a principy a objasnit jejich význam pro popis fyzikálních systémů.

Klíčová slova této kapitoly:

kvantová teorie, Schrödingerova rovnice

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly:

6 + 2 hodiny (teorie + řešení úloh)

Ukázalo se, že modely atomů založené pouze na představách a zákonech klasické fyziky (***Thomsonův model***, ***Rutherfordův model***) jsou v rozporu s experimentální fakty. Tyto modely neuspěly zejména při objasnění čárových spekter atomů.

Bohrův model atomu a jeho rozšíření v podobě ***Sommerfeldova modelu atomu*** využívají zákonitosti a pohybové rovnice klasické fyziky doplněné o nový postulát, který požaduje splnění kvantovacích podmínek. Tyto podmínky navržené poprvé čistě účelově (ad hoc) pro atom vodíku Bohrem a později zobecněné Sommerfeldem a Wilsonem naznačily, že původní klasická teorie musí být nahrazena obecnější teorií – ***teorií kvantovou***.

Samozřejmě, že všechny postupy a zákony klasické fyziky nejsou zatraceny, ale musí být zahrnuty do této nové teorie jako speciální případ.

Kvantová teorie se nejdříve rozvíjela ve formě, kterou dnes označujeme jako ***stará kvantová teorie*** či ***semikvantová teorie***. Stará kvantová teorie využívá při popisu dynamiky systému klasické pohybové rovnice doplněné o ***Sommerfeldovy – Wilsonovy kvantovací podmínky***. Fyzikální veličiny tak nabývají pouze určitých hodnot – hovoříme o ***kvantování.*** Nicméně zůstává představa pohybu částic po přesně určených drahách (navíc přesně určenými rychlostmi) obvyklá z klasické fyziky. Později se ukázalo, že taková představa je neudržitelná, viz např. ***Heisenbergovy relace neurčitosti***.

Potíže s objasněním čárového spektra atomů samozřejmě nebyly jediným důvodem vzniku kvantové teorie. K jejímu rozvoji přispěly i další experimentální skutečnosti, které byly v rozporu s představami či výsledky klasické teorie.

Mezi další experimentální východiska kvantové teorie můžeme počítat tyto jevy, experimenty a objevy:

- objev ***kvantové povahy elmg. záření*** **–** zavedení pojmu ***foton***,

při kterém sehrály důležitou roli

  - objasnění ***záření absolutně černého tělesa*** – odvození ***Planckova zákona*** na základě představy o kvantování energie elmg. záření – ***Planckův vztah***;

  - výsledky ***Lenardova pokusu*** zkoumajícího zákonitosti ***fotoelektrického jevu*** (stručně ***fotoefekt***) a ***Einsteinovo objasnění*** výsledků tohoto experimentu na základě představy o korpuskulární povaze elmg. záření, podle které je elmg. záření tvořeno částicemi s energií danou Planckovým vztahem, pro tyto částice byl později zaveden pojem ***foton***;

  - objasnění ***Comptonova jevu*** a odvození ***Comptonova vztahu*** na základě představy srážky ***fotonu*** s volným elektronem, které podal Compton s využitím vztahů relativistické fyziky, Planckova vztahu pro energii fotonu a ***zavedením hybnosti fotonu***, čímž byla potvrzena správnost Einsteinových představ;

- protože však ne všechny experimenty, zejména v případě difrakčních (ohybových) jevů a interferenčních jevů, bylo možné objasnit na základě představy částic elmg. záření – fotonů, byla zavedena

  - představa ***korpuskulárně vlnového dualismu*** pro elmg. záření, podle které musíme nahlížet na fotony jako na částice současně popsané elektromagnetickou vlnou,

- rozšíření těchto představ na všechny volně se pohybující částice pak představuje

  - ***de Broglieho vlnová hypotéza***, která předpokládá, že každá volná částice musí být popsána rovinnou vlnou **–** ***de Broglieho vlnou***,

- tuto hypotézu pak potvrdilo

  - objevení ***ohybových jevů pro elektrony v Davissonově – Germerově pokusu***.

De Broglieho vlnová hypotéza pak vytvořila základ pro rozvoj nové kvantové teorie označované jako

- ***vlnová kvantová teorie*** rozpracovaná Schrödingerem, kde základní rovnicí je tzv. ***Schrödingerova*** (vlnová) ***rovnice*** a stav systému popisuje ***vlnová funkce***, jejíž fyzikální význam definuje ***Bornův postulát***,

původně nezávisle se rozvíjela

- ***maticová kvantová teorie***, kterou rozpracoval Heisenberg a která naopak navazovala spíše na představy staré kvantové teorie opírající se o kvantovací podmínky, Heisenberg ovšem zavrhnul způsob popisu pohybového stavu částic používaný v klasické fyzice (časová závislost polohového vektoru) a vytvořil nový aparát s využitím maticového počtu, který umožňoval určit hodnoty pozorovatelných fyzikálních veličin.

Později se ukázalo, že maticová kvantová teorie představuje pouze ***jiný teoretický přístup v rámci jediné kvantové teorie***, která může vycházet ze stejných základních postulátů a dává bez ohledu na použitý matematický aparát (maticový či vlnový) .

1.2.1 PODSTATA ELEKTROMAGNETICKÉHO ZÁŘENÍ

Klasicky je elektromagnetické pole popisováno ***Maxwellovými rovnicemi*** (viz ***klasická elektrodynamika***). (Poznámka: Na rozdíl od Newtonových rovnic v klasické mechanice jsou Maxwellovy rovnice dokonce relativisticky invariatní.).

V nepřítomnosti elektrických nábojů a proudů (tedy pro vakuum) lze odvodit z Maxwellových rovnic ***vlnovou rovnici***, jejímž řešením je ***postupná rovinná vlna*** – tedy ***elektromagnetické záření***.

Tak bylo možno objasnit různé druhy do té doby známého záření (rádiové vlny, viditelné záření aj.) jako elmg. vlny s různou charakteristickou vlnovou délkou.

Tento ***vlnový popis*** se velmi dobře osvědčil při vysvětlení ***zákona lomu i zákona odrazu***, které je ovšem možné objasnit i na základě ***korpuskulární teorie***, původně navržené Newtonem pro světlo. Největší úspěch však vlnová teorie slavila při objasnění ***ohybových jevů*** a ***interferenčních jevů,*** které již na základě korpuskulární teorie či na základě zákonů klasické optiky objasnit nelze**.** Postupně tak byla přijata jednotná představa o ***vlnové podstatě elmg. záření***.

Byly ovšem objeveny jevy a uskutečněny experimenty, které vlnová teorie nedokázala objasnit. Tyto jevy je možné popsat pouze v rámci „nové korpuskulární teorie“ – ***fotonové teorie,*** která je zároveň ***kvantovou teorií elmg.záření***. Mezi tyto jevy a experimenty patří zejména: ***záření absolutně černého tělesa***, ***Lenardův experiment*** a ***Comptonův jev***.

1.2.2 VYZAŘOVACÍ ZÁKON (ABSOLUTNĚ) ČERNÉHO TĚLESA

Dopadá-li na reálné těleso (někdy též „šedé“ těleso) elmg. záření, pak část záření se pohltí (***absorpce***) a část se odrazí (***reflexe***) či prochází (***transmise***).

Pro zjednodušení problému se vytváří představa ***absolutně černého tělesa*** (někdy označované pouze jako ***černé těleso***).

Absolutně černé těleso

pohlcuje veškeré dopadající záření.

Při pohlcení záření se černé těleso zahřívá. Pokud naopak ohřejeme absolutně černé těleso na určitou teplotu, začne vyzařovat na všech vlnových délkách. Intenzita I emitovaného záření ovšem závisí na vlnové délce. Funkce $I(\lambda)$ představuje **spektrální závislost** či **spektrum**.

Přestože absolutně černé těleso představuje pouze fyzikální abstrakci, je potřebné, zejména pro účel experimentálního ověření tvaru spektra, vytvořit reálný model, který by se co nejvíce blížil definici absolutně černého tělesa.

Nejčastěji se absolutně černé těleso realizuje jako otvor v duté kouli či kuželu, jejichž vnitřní povrch je pokryt silně pohltivým materiálem. Záření vniká do dutiny a po mnohonásobných odrazech se zcela pohltí. Otvor se tedy jeví jako absolutně černé těleso.

Spektrum absolutně černého tělesa $I(\lambda)$ má jednoznačný tvar, a proto jej označujeme jako **vyzařovací zákon absolutně černého tělesa**.

Fyzikové hledali závislosti, které by dobře popisovaly tvar experimentálně pozorovaného spektra. Z termodynamických úvah vyplynulo, že je vhodné hledat tvar spektra ve tvaru:

$$I = \frac{1}{\lambda^5}\varphi(\lambda T),$$

kde φ je zatím neznámá funkce a T termodynamická teplota.

Wien navrhnul následující tvar funkce φ.

Wienův zákon

$$\varphi(\lambda T) = c_1 e^{-c_2/\lambda T}$$

Ukázalo se ovšem, že tento zákon je v souladu s experimentem pouze pro malé hodnoty λT.

Na druhé straně Rayleigh a Jeans odvodili na základě klasické statistické termodynamiky funkci φ v jiném tvaru.

Rayleighův – Jeansův zákon

$$\varphi(\lambda T) = c_3 \lambda T$$

Tento tvar je ale použitelný pouze pro velké hodnoty λT. Veličiny c_1, c_2, c_3 v obou zákonech jsou konstanty.

Planck navrhnul svou vlastní formuli, která správně popisovala vyzařování absolutně černého tělesa v celém rozsahu vlnových délek.

Planckův zákon

$$\varphi(\lambda T) = \frac{c_1}{e^{c_2/\lambda T} - 1}$$

Oba předchozí zákony dostaneme s využitím této formule jako přibližné vztahy.

- Pro malé λT je $e^{c_2/\lambda T} >> 1$ a tudíž 1 ve jmenovateli můžeme zanedbat a dostaneme tvar ***Wienova zákona***.
- Pro velké λT lze exponencielu ve jmenovateli nahradit přibližným vztahem (první dva členy ***Taylorova rozvoje***) $e^x \doteq 1 + x$ (pro malé $x = \frac{c_2}{\lambda T}$). Ve jmenovateli zůstane po úpravě jen $c_2/\lambda T$. Pokud tedy zavedeme konstantu $c_3 = \frac{c_1}{c_2}$, dostaneme ***Rayleighův – Jeansův*** zákon.

Výše uvedený zákon ovšem nebylo možné odvodit z klasické fyziky. Planck odvodil tento zákon teprve na základě předpokladu, dnes označovaného jako ***Planckova kvantová hypotéza.***

Planckova kvantová hypotéza

Energie elmg. záření se může měnit pouze po částech, tzv. ***kvantech***, která mají hodnotu

$E = h\nu = \hbar\omega$ (**Planckův vztah**),

kde h, resp. $\hbar = h/2\pi$ je **Planckova konstanta**, resp. „škrtnutá“ Planckova konstanta, a ν, resp. $\omega = 2\pi\nu$, je frekvence, resp. úhlová frekvence.

Úkol k textu.
Definujte pojem absolutně černé těleso. Navrhněte, jak jej prakticky realizovat. Co musel Planck předpokládat, aby objasnil tvar spektra získaného v experimentech?

Úkol k zamyšlení.
Proč Planck navrhnul kvantovou hypotézu a nespokojil se pouze se správnou formulí popisující tvar spektra absolutně černého tělesa?

1.2.3 LENARDŮV EXPERIMENT – EINSTEINOVO OBJASNĚNÍ

Fotoelektrický jev (fotoefekt)

Elektromagnetické záření (světlo) dopadající na látku může způsobit emisi elektronu z látky.

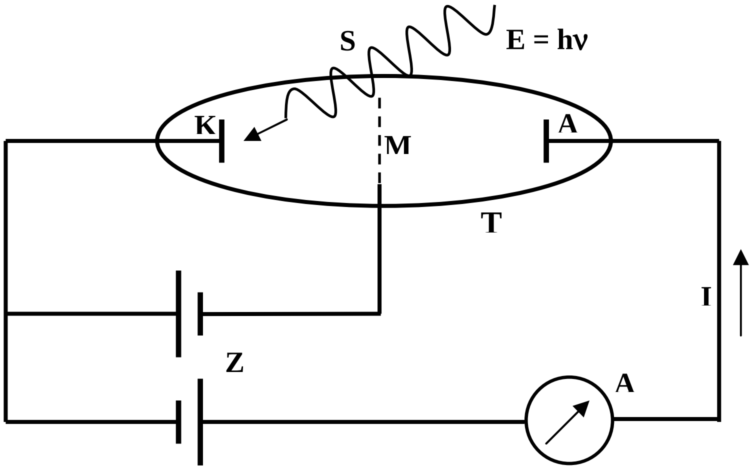
V rámci studia fotoefektu prováděl Lenard následující experiment.

Lenardův experiment
Ve vyčerpané trubici byla umístěna katoda a anoda pod elektrickým napětím. Katoda byla osvětlována monochromatickým zdrojem (jediná vlnová délka) světla. Pokud byly po dopadu světla emitovány elektrony – nositelé náboje, protékal celým obvodem elektrický proud – tzv. ***fotoproud.***

V experimentu se měřila ***závislost fotoproudu na intenzitě a frekvenci světla*** dopadajícího na katodu. Dále byla měřena ***kinetická energie vyražených elektronů*** tak, že na mřížku mezi katodou a anodou bylo přiváděno napětí U_M, které brzdilo elektrony. Pokud byla kinetická energie elektronu nižší než potenciální energie eU_M, elektrony se nedostaly přes mřížku ke katodě a nemohl být pozorován fotoproud.

Výsledky experimentu

- Kinetická energie elektronů se nezvětšuje s intenzitou světla, jak bylo očekáváno podle klasických vlnových představ (větší intenzita = větší energie nesená elmg. vlnou => očekávána větší kinetická energie elektronu).
- S intenzitou světla roste naopak fotoproud, tedy počet vyražených elektronů.
- Fotoproud se objeví až pří určité ***mezní frekvenci*** ω_{m}, pro nižší frekvence fotoproud neprotéká (nejsou tedy vyráženy elektrony).
- Kinetická energie elektronů je přímo úměrná frekvenci dopadajícího záření: $E_{\mathrm{k}}^{\mathrm{e}} \sim \omega$.



Lenardův experiment
T - vyčerpaná trubice, S – monochromatické elektromagnetické záření, K – katoda, A – anoda, M – mřížka, Z – zdroje napětí , A – ampérmetr k detekci procházejícího fotoproudu I.

Einsteinovo objasnění Lenardova experimentu
Vysvětlení výsledků Lenardova experimentu podal Einstein předpokladem, že elektrony při fotoefektu jsou z látek vyráženy částicemi elektromagnetického záření, jež mají energii úměrnou frekvenci podle stejného vztahu, který předpokládal Planck (***Planckův vztah***). Tyto částice byly později pojmenovány ***fotony.***

Foton

částice elmg. záření s energií $E^{\mathrm{f}} = h\nu = \hbar\omega$.

Při fotoefektu probíhají nepružné srážky, při nichž je pohlcen foton s energií $E^{\mathrm{f}} = \hbar\omega$. Na vyražení elektronu z látky je potřeba dodat energii, tzv. výstupní práci *A*.

Poznámky:

- Má-li být elektron vyražen z látky, musí být energie absorbovaného fotonu větší než výstupní práce: $E^{\mathrm{f}} = \hbar\omega \geq A$. Odtud tedy plyne **existence mezní frekvence** $\omega_{\mathrm{m}} = A/\hbar$.

- Pokud je předchozí podmínka splněna, pak podle zákona zachování energie musí platit $E^{\mathrm{f}} - A = E_{\mathrm{k}}^{\mathrm{e}}$ a tedy kinetická energie je úměrná frekvenci dle vztahu $E_{\mathrm{k}}^{\mathrm{e}} = \hbar\omega - A$.

1.2.4 COMPTONŮV JEV

Experiment pro pozorování Comptonova jevu

Byl sledován rozptyl krátkovlnného (rentgenového záření) s frekvencí ω_0.

Jako zdroj záření byla použita rentgenka. Rozptýlené záření bylo pozorováno ve zvoleném směru (daném rozptylovým úhlem ϑ), který byl vymezen olověným kolimátorem. Jako spektrometr sloužící k určení frekvence rozptýleného záření byl použit krystal a jako detektor ionizační komůrka.

Výsledky experimentu – Comptonův jev

- Spektrum rozptýleného záření obsahuje kromě primárního záření s frekvencí ω_0 i záření s frekvencí ω.
- Spektrální posun vlnových délek $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ je funkcí rozptylového úhlu ϑ a nezávisí na vlastnostech rozptylujícího prostředí.

Comptonovo objasnění experimentu

Výsledky experimentu objasnil Compton jako důsledek pružných srážek fotonů s elektrony.

Compton ovšem zavedl kromě energie fotonu dané ***Planckovým vztahem***, též hybnost fotonu.

Foton

je částice elektromagnetického záření s hybností $\vec{p}^{\,\mathrm{f}} = \frac{\hbar\omega_0}{c}\vec{n}$, kde c je rychlost světla a $\vec{n}$ jednotkový vektor ve směru šíření elmg. vlny.

S využitím výše uvedených předpokladů, relativistických vztahů pro energii a hybnost elektronu s klidovou hmotností m_0^{e} a zákonů zachování energie a hybnosti pro rozptyl fotonu na volném elektronu odvodil Compton vztah pro závislost posunu vlnových délek na rozptylovém úhlu.

Comptonův vztah

Pro spektrální posun vlnových délek v ***Comtonově jevu*** platí

$$\Delta\lambda = \Lambda.2\sin^2(\vartheta/2)\,,$$

kde konstanta $\Lambda = \frac{h}{m_0^e c} = 0,024265\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$ je tzv. **Comptonova vlnová délka elektronu.**

1.2.5 DE BROGLIEHO VLNOVÁ HYPOTÉZA

Elektromagnetické pole je popsáno ***Maxwellovými rovnicemi***. Pro vakuum (nulová hustota elektrického náboje, nulová hustota elektrického proudu) můžeme odvodit vlnovou rovnici pro elektrickou intenzitu a magnetickou indukci, analogickou vlnovou rovnici můžeme dostat i pro potenciály popisující elmg. pole. V případě kalibrace, v níž je elektrostatický potenciál roven nule, postačí elmg. pole ve vakuu popsat ***vlnovou rovnicí*** pro vektorový potenciál $\vec{A}$:

Vlnová rovnice elektromagnetického pole ve vakuu

$$\Delta\vec{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\vec{A} = \vec{0}$$

Řešení této vlnové rovnice se hledá ve tvaru ***postupné rovinné vlny***.

Řešení vlnové rovnice pro vakuum

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})},$$

kde ω je úhlová frekvence a $\vec{k}$ vlnový vektor elektromagnetické vlny, pro který platí obecně $\vec{k} = \dfrac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$, kde λ je vlnová délka a $\vec{n}$ jednotkový vektor ve směru šíření vlny.

Poznámky

- V případě elmg. vlny ve vakuu, pro niž navíc platí disperzní vztah $\nu \cdot \lambda = c$, lze vlnový vektor vyjádřit jako $\vec{k} = \dfrac{2\pi\nu}{c}\vec{n} = \dfrac{\omega}{c}\vec{n}$, kde ν je frekvence vlny (kmitočet).

- Na základě korpuskulárně vlnového dualismu můžeme ale elmg. záření rovněž považovat za proud částic **fotonů**, pro jejichž energii a hybnost platí

$$E = \hbar\omega \text{ a } \vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

Odtud vyplývá následující tvrzení.

Fotony

jsou částice, které lze popsat vlnou (***elektromagnetickou vlnou***) ve tvaru

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}.$$

De Broglie zobecnil tuto představu korpuskulárně vlnového dualismu v hypotéze, podle níž každé částici můžeme přiřadit vlnu.

Úkol k textu.
Dosaďte rovinnou vlnu do vlnové rovnice a zjistěte, za jakých podmínek je tato vlna řešením vlnové rovnice.

De Broglieho hypotéza

Volně se pohybující částice s energií E a hybností $\vec{p}$ je popsána postupnou rovinnou vlnou ve tvaru

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})}.$$

Tuto vlnu označujeme jako **de Broglieho vlnu**.

Úkol k zamyšlení.
Proč de Broglie zvolil ***skalární veličinu*** Ψ, když elektromagnetická vlna je popsána ***vektorem*** $\vec{A}$?

Úhlová frekvence a vlnový vektor de Broglieho vlny jsou tedy určeny tzv. ***de Broglieho vztahy***, které jsou zobecněním vztahů pro fotony.

De Broglieho vztahy

$$\omega = E/\hbar, \quad \vec{k} = \vec{p}/\hbar.$$

Poznámky:

- De Broglie použil pro popis částice ***skalární funkci*** $\Psi(\vec{r},t)$ na rozdíl od vektorové funkce $\vec{A}(\vec{r},t)$ pro fotony. Skalární funkce byla zvolena jako nejjednodušší varianta.

- Volba skalární funkce byla ovlivněna i skutečností, že zprvu nebylo jasné s jakou fyzikální veličinou vlnová funkce Ψ ***souvisí.*** Původně se předpokládalo, že by to mohla být hmotnost, protože ale vlnová funkce výše uvedeného tvaru je rozprostřena po celém prostoru a částice je lokalizována podle klasické představy v určitém místě, předpokládalo se, že částice je spíše popsána tzv. ***vlnovým balíkem***, který vznikne složením de Broglieho vln různých frekvencí s odlišnými amplitudami Ψ_0. Tato složená funkce může mít výrazně nenulovou hodnotu v daném bodě prostoru. Brzy ale bylo propočteno, že takový pohybující se vlnový balík se postupně rozplývá. Teprve později byla odhalena spojitost vlnové funkce s pravděpodobností výskytu částice (viz ***Bornův postulát***).

- Znovu zdůrazněme, že jednotlivá de Broglieho vlna popisuje volné částice a nemůže být jednoduše aplikována na vázané částice.

- De Broglieho vztahy můžeme přepsat do alternativní podoby pro kmitočet a vlnočet (reciprokou hodnotu vlnové délky), tedy $\nu = E/h, \quad \lambda^{-1} = p/h$.

- Tzv. **disperzní vztah** (např. vztah mezi ν a λ) nemusí mít (a také pro částice s nenulovou klidovou hmotností nemá) tvar obvyklý pro elmg. vlnu ve vakuu $\nu \cdot \lambda = c$, <u>obecně tedy neplatí</u> např. $p = h\nu / c$ (srovnej Comptonův vztah pro hybnost).

Přestože podstata vlny spojené s částicí nebyla zprvu známa, bylo možné na základě definovaných vlnových charakteristik (např. frekvence a vlnová délka) částice-vlny ověřit vlnové vlastnosti částic.

Podle Comptonova vztahu platí např. pro nerelativistické částice: $\lambda = \dfrac{h}{mv}$, kde m a v jsou hmotnost a rychlost částice. Vidíme tedy, že ovlivněním rychlosti částic můžeme ovlivnit velikost vlnové délky.

Důkazem vlnových vlastností je pozorování ohybových jevů (difrakce). Aby tyto jevy byly pozorovatelné, musí být <u>délka vlny srovnatelná s velikostí překážek</u>, na nichž má k ohybu docházet. <u>V provedených experimentech byly vlnové vlastnosti potvrzeny</u>**.** Mezi první experimenty, které ověřily de Broglieho vlnovou hypotézu, patřil ***Davissonův-Germerův pokus.***

Davissonův-Germerův pokus

V experimentu se pozoroval rozptyl elektronů na krystalové mřížce. De Broglieho vlnová délka elektronů odpovídala řádově vzdálenostem mezi atomovými rovinami v krystalu. Při experimentu byly pozorovány obdobné difrakční obrazce jako v případě rozptylu rentgenového záření (fotony) se stejnou vlnovou délkou.

Disperzní vztah

Tento termín původně označuje v teorii vlnění závislost fázové rychlosti vlny V, či v případě světla též indexu lomu V/c, na vlnové délce záření. Tedy závislost

$$V = V(\lambda)\,.$$

Vzhledem k platnosti definičních vztahů $k = 2\pi/\lambda$ a $V = \omega/k$ se však označují jako ***disperzní vztah*** též závislost $V = V(k)$, či závislost V na jiné veličině jednoznačně spojené s vlnovou délkou, nebo závislost

$$\omega = \omega(k)\,.$$

Název ***disperzní vztah*** pochází z optiky. Závislost fázové rychlosti šíření světla v prostředí na vlnové délce vede k jevu, který se označuje jako **disperze** – světlo různých vlnových délek se po dopadu do (disperzního) prostředí láme pod různými úhly (viz zákon lomu a rozklad světla na hranolu).

Pro **bezdisperzní prostředí** tedy platí $V = \text{konst.}$, tedy $\omega = \text{konst.}\,k$ (lineární závislost).

Disperzní vztah pro de Broglieho vlny

Vzhledem k platnosti ***de Broglieho vztahů***, které jednoznačně vážou frekvenci vlny s energií E částice a vlnový vektor s hybností částice $\vec{p}$, budeme jako ***disperzní vztah*** označovat i závislost energie volné částice na velikosti hybnosti, tedy

$$E = E(p).$$

Případ libovolné relativistické částice

Najděme obecný disperzní vztah pro de Broglieho vlnu spojenou s částicí pohybující se rychlostí v, kde $0 \le v \le c$. Částice je volná, tj. nepůsobí na ni žádná silová pole.

Jak již bylo řečeno, za disperzní vztah můžeme považovat i vztah $E = E(p)$ pro relativistickou částici. Tento vztah získáme z relativistických vztahů pro energii a hybnost částice $E = mc^2$ a $\vec{p} = m\vec{\mathrm{v}}$, kde $m = \dfrac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\mathrm{v}^2}{\mathrm{c}^2}}}$. Druhou rovnici vynásobíme c, pak každou z obou rovnic vynásobíme samu se sebou, nakonec upravené rovnice odečteme. Po úpravě pak máme $E^2 - p^2c^2 = m_0^{\,2}c^4$. Za předpokladu, že fyzikální význam má v tomto případě pouze kladná energie, dostaneme následující závislost energie-hybnost, resp. ***disperzní vztah***.

Disperzní vztah (vztah energie -hybnost) pro relativistickou částici

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

Srovnejte si tento vztah s klasickým vztahem pro malé rychlosti $E=\{m_0c^2\}+p^2/2m_0$). Do celkové energie musíme ovšem musíme započítat i energii klidovou (ve složené závorce).

Úkol k textu
S využitím de Broglieho vztahů odvoďte ***disperzní vztah*** např. pro kmitočet a vlnovou délku. Měli byste dostat následující vztah.

Disperzní vztah (vztah kmitočet –vlnová délka) pro relativistickou částici

$$\nu = h^{-1}\sqrt{h^2c^2/\lambda^2+m_0{}^2c^4}\ .$$

Vidíme, že vztah známý pro fotony $\nu = c/\lambda$ obecně neplatí pro libovolnou relativistickou částici.

Fázová rychlost a grupová rychlost de Broglieho vlny

S využitím relativistických vztahů pro energii a hybnost můžeme spočítat fázovou rychlost V a grupovou rychlost v_g de Broglieho vlny.

Fázová rychlost určuje pohyb monochromatické vlny s danou vlnovou délkou a platí pro ni

$$V=\frac{\omega}{k}=\frac{E/\hbar}{p/\hbar}=\frac{E}{p}=\frac{mc^2}{mv}=\frac{c^2}{v}\ .$$

Grupová rychlost určuje rychlost pohybu vlnového balíku, vzniklého skládáním monochromatických vln, a platí pro ni

$$v_g=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}=\frac{\mathrm{d}(E/\hbar)}{\mathrm{d}p}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}k}=\frac{\hbar}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}=\frac{1}{2}\frac{2pc^2}{E}=\frac{pc^2}{mc^2}=\frac{p}{m}\quad=v\,.$$

Vidíme, že grupová rychlost je totožná s rychlostí pohybu částice. Fázová rychlost je pak s rychlostí pohybu částice vázána jednoduchým vztahem.

Vztah rychlosti částice a fázové rychlosti de Broglieho vlny

$$V\cdot \mathrm{v}=c^2$$

Poznámky:

- Vidíme, že rychlost pohybu částice se obecně nerovná fázové rychlosti šíření de Broglieho vlny.

- Protože dle teorie relativity platí, že $v \leq c$ musí být $V \geq c$ (nadsvětelná rychlost).

Úkol k zamyšlení.
Proč neodporuje nadsvětelná fázová rychlost de Broglieho vln Einsteinovu postulátu ze speciální teorie relativity, podle kterého rychlost pohybu tělesa nemůže překročit rychlost světla ve vakuu?

Speciálním případem relativistických částic jsou ***fotony***, které se pohybují rychlostí světla.

Úkol k textu.
Odvoďte ***disperzní vztah pro elmg. záření (fotony)***. Získáte ho dosazením rovinné vlny $\vec{A}(\vec{r},t)$ do vlnové rovnice, po jejíž úpravě dostanete níže uvedený vztah.

Disperzní vztah (vztah úhlová frekvence-vlnový vektor) pro fotony

$$\omega = c \cdot k$$

POZOR! Tento vztah platí fotony, obecně jej lze použít jen pro částice s nulovou klidovou hmotností. Pro částice s nenulovou hmotností jej nesmíte použít. Stejně to platí pro jiné tvary disperzního vztahu pro fotony.

Vakuum tedy představuje pro fotony bezdisperzní prostředí, což je pochopitelné, neboť fázová rychlost $V_{\text{elmg.}} = \omega / k = c$. Na základě vztahu mezi fázovou rychlostí a rychlostí částice dostaneme pro rychlost fotonů: $\mathrm{v}_{\text{foton}} = c$.

Pokud disperzní vztah ve výše uvedeném tvaru vynásobíme $\hbar$, pak s využitím ***de Broglieho vztahů*** dostaneme ***vztah energie-hybnost pro fotony***.

Disperzní vztah (vztah úhlová energie-hybnost) pro fotony

$$E = c \cdot p$$

POZOR! Znovu opakujeme, že vztah nesmíte použít pro částice s nenulovou klidovou hmotností.

Úkol k zamyšlení.
Foton je ale relativistickou částicí, měl by pro něj tedy zároveň platit obecný ***disperzní vztah pro relativistickou částici***.

Vztah energie-hybnost pro foton můžeme dostat také z relativistických vztahů pro energii a hybnost. Lze přitom vyjít z faktu, že fázová rychlost šíření elektromagnetických vln je *c*, a tudíž (podle výše uvedeného vztahu mezi fázovou rychlostí a rychlostí částice) je rychlost fotonu rovněž *c*. Potom $E = mc^2 = c \cdot mc = c \cdot mv_{\text{foton}} = c \cdot p$.

Pro fotony přitom musí zároveň platit obecný vztah $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0{}^2c^4}$, kde m_0 bude představovat klidovou hmotnost fotonu. Porovnáním pravých stran obou vztahů dostaneme rovnici, z níž vyplývá, že <u>klidová hmotnost fotonu je nulová</u>: $m_0^{\text{foton}} = 0$.

Poznámky:

- Vidíme, že pro všechny částice s nulovou klidovou hmotností přechází obecný relativistický vztah energie-hybnost na jednoduchý lineární tvar $E = c \cdot p$.

- Částice s nulovou klidovou hmotností se musí pohybovat rychlostí světla ve vakuu *c*, neboť $E = c \cdot p = c \cdot m\text{v}$, ale zároveň $E = mc^2$ a tedy $v = c$.

- Fázová rychlost je rovna rychlosti pohybu částic pouze pro fotony nebo jiné částice s nulovou klidovou hmotností.

- Foton má nulovou klidovou hmotnost, ale jeho hmotnost je nenulová, protože $m_{\text{foton}} = E_{\text{foton}} / c^2 = \hbar\omega / c^2$.

1.2.6 SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

De Brogliho vlny musí být stejně jako elektromagnetické vlny řešením příslušné vlnové rovnice. Pro případ nerelativistických částic navrhnul Schrödinger vlnovou rovnici, která představuje základní rovnici nerelativistické kvantové mechaniky (původně vlnové mechaniky), tzv. ***Schrödingerovu rovnici*** (dále jen SR). Existují dvě Schrödingerovy rovnice. Tzv. ***časová SR*** (někdy též ***nestacionární SR***), která představuje základní pohybový zákon ***nerelativistické kvantové mechaniky.*** ***Bezčasová SR*** (někdy též ***stacionární SR***) vybírá **dovolené stavy systému** a jim odpovídající **dovolené hodnoty energie**.

Pohybový zákon (pohybová rovnice) umožňuje určit časový vývoj stavu systému. Tak jako např. **Newtonovy zákony klasické fyziky** umožňují určit časový vývoj stavu systému, tedy časovou závislost poloh všech částic systému, **časová SR** umožňuje určit časovou závislost vlnové funkce, která popisuje stav v kvantové mechanice.

Časová SR je základní pohybová rovnice kvantové mechaniky, a proto <u>se neodvozuje</u>, stejně jako jiný postulát nějaké teorie.

Bezčasovou SR je pak možno odvodit z časové SR za předpokladu, že systém zachovává celkovou energii, což je např. pro izolovaný systém (nedochází k výměně energie s okolím). Systém se pak nachází pouze ve stavech s neměnnou energií, které označujeme jako stacionární energetické stavy.

Přestože časová SR je tedy postulátem, historický vývoj byl takový, že tvar bezčasové SR byl nejdříve navržen tak, aby z něj vyplynulo řešení pro speciální případ vlnových funkcí pro volné částice (de Broglieho vlny) a později byl zobecněn. Byla vyslovena hypotéza, že tento tvar je obecně platným zákonem (rozšíření oboru použitelnosti SR na libovolný systém). Výsledky dalších experimentů pak byly ve shodě s řešením SR. Samozřejmě, že v případě nesrovnalostí je nutné teorii doplňovat (viz např. ***zavedení spinu***). Pokusme se přiblížit postup, jakým se dospělo k SR. Z důvodu uvedených dříve budeme označovat tento postup jako navození.

1.2.7 NAVOZENÍ SCHRÖDINGEROVY ROVNICE

Je tedy třeba nejdříve najít vlnovou rovnici, jejímž řešením je ***de Broglieho vlna***. Není možné použít stejný tvar rovnice jako pro elmg. vlny, protože by vedl k nesprávnému disperznímu vztahu $E = konst \cdot p$. Byl navržen jiný tvar rovnice. Tato rovnice obsahuje na levé straně ***Laplaceův operátor*** jako v případě vlnové rovnice pro elmg. vlny, na straně pravé pak parciální časovou derivaci první řádu:

$$\Delta\Psi = K\frac{\partial}{\partial t}\Psi\,,$$

kde K je zatím neznámá konstanta.

Poznámka :

Exponenciální funkce e^x je po zderivování opět exponencielou, tedy $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(e^x) = e^x$, resp. $\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(e^{ax}) = a^n e^{ax}$. Jelikož de Broglieho vlny jsou rovněž vlastně exponenciálními funkcemi proměnných (x,y,z) a t, dá se očekávat, že budou výše uvedené diferenciální rovnici, v níž se vyskytují derivace druhého resp. prvního řádu podle těchto proměnných, skutečně vyhovovat.

Průvodce studiem.

Pokud vás to začíná trochu děsit, tak následující pasáž klidně přeskočte. V tom případě ale přijměte Schrödingerovu rovnici jako fakt. Ostatně podobně jste to už v životě udělali s řadou věcí, jen si to neuvědomujete. Ve fyzice ovšem musíme mít na paměti, že přijmout lze jen teorii, která dává správné experimentální předpovědi.

Část pro zájemce.
Dosazením de Broglieho vlny do této rovnice dostaneme podmínku, kterou musí splňovat hybnost a energie volně se pohybující částice: $-\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi = -K\frac{iE}{\hbar}\Psi$.

Pokud vynásobíme tuto podmínku $-\frac{\hbar^2}{2m}$, kde m ($m = m_0$) je hmotnost částice, dostaneme $\frac{p^2}{2m}\Psi = \frac{i\hbar}{2m}K \cdot E\Psi$. Vidíme, že na levé straně rovnice vystupuje kinetická energie nerelativistické částice, v případě volné částice (pokud nezahrnujeme klidovou energii) je to zároveň celková energie částice. Tedy $E = E_k = \frac{p^2}{2m}$ (závislost energie na hybnosti). Platí tedy $E\Psi = \frac{i\hbar}{2m}K \cdot E\Psi$ a pro netriviální řešení ($\Psi \neq 0$) musí platit pro konstantu $K = -i\frac{2m}{\hbar}$. V tomto případě vyplyne z výše uvedené rovnice správný, ovšem pouze pro nerelativistický případ použitelný, tvar disperzního vztahu, resp. vztahu energie hybnost.

Rovnice má tedy po dosazení hodnoty a K a vynásobení $-\frac{\hbar^2}{2m}$ následující tvar.

Průvodce studiem.
Pokud jste předchozí text přeskočili, tak se nyní alespoň podívejte k čemu jsme dospěli. Navíc je vhodné, abyste vyřešili navazující úkol.

Časová SR pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Úkol k textu
Ověřte, zda je de Broglieho vlna skutečně řešením této rovnice. Po jejím dosazení do SR rovnice pro volnou částici zjistíte, že řešením mohou být pouze ty de Broglieho vlny, které splňují nerelativistický disperzní vztah pro volnou částici, tj. $E = p^2/2m$.

Poznámky:

- Pokud aplikujeme operátor $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ na de Broglieho vlnu Ψ, zjistíme, že jeho působení je ekvivalentní vynásobení Ψ kinetickou energií (nerelativistické) částice $E_k = \dfrac{p^2}{2m}$, proto se tento operátor označuje jako **operátor kinetické energie částice** a značí se $\hat{E}_k$.

- Analogicky můžeme ověřit, že vynásobení de Broglieho vlny celkovou energií E je ekvivalentní aplikaci **operátoru celkové energie** $\hat{E} = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}$.

- Vidíme, že **v kvantové mechanice se zavádí k fyzikálním veličinám operátory** (značí se značkou příslušné veličiny, nad níž je stříška). Kromě operátoru kinetické energie můžeme odvodit např. tvar **operátoru hybnosti** $\hat{\vec{p}}$, který musí splňovat podmínku $\hat{E}_k = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$.

Úkol k textu
Ověřte si, že $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

Část pro zájemce
V principu je možné sestavit vlnovou rovnici pro de Broglieho vlny, která obsahuje druhou derivaci času. Tedy rovnici analogickou rovnici pro elmg. vlny, ovšem takovou, aby z ní plynul relativistický disperzní vztah $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. Tato rovnice je známa jako **Kleinova-Gordonova rovnice (KGR)**. Existovaly ovšem problémy s interpretací řešení této rovnice, později se pak ukázalo, že KGR má v rámci relativistické kvantové mechaniky jen omezený význam a nepředstavuje obecný základní pohybový zákon na rozdíl od Schrödingerovy rovnice v nerelativistické kvantové mechanice. KGR je možno sestavit na základě **principu korespondence** mezi kvantovou a klasickou (nekvantovou) mechanikou, podle nějž odpovídají fyzikálním veličinám klasické fyziky operátory v kvantové mechanice. Pokud nahradíme v relativistickém vztahu mezi energií E a hybností $\vec{p}$ tyto veličiny příslušnými operátory, získáme operátorovou rovnost. Aplikací operátorů levé a pravé strany rovnosti na vlnovou funkci získáme KGR.

Zatím jsme nalezli tvar SR pro volnou částici. Nyní se pokusme zobecnit tvar SR pro případ vázané (nerelativistické) částice, která se pohybuje v poli s potenciálem $U(\vec{r})$. V tomto případě je celková energie E rovna součtu energie kinetické a potenciální $E = \dfrac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$. Aplikace operátoru kinetické energie na vlnovou funkci vázané částice (již se nejedná o de Broglieho vlnu) by tedy mělo být ekvivalentní s vynásobením vlnové funkce kinetickou energií $E_k = E - U(\vec{r})$, tedy $-\hbar^2 \dfrac{\Delta}{2m}\Psi = [E - U(\vec{r})]\Psi$. Současně by mělo platit pro operátor celkové energie $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = E\Psi$, odkud po dosazení $E\Psi$ do předcházejícího vztahu a převedení členu s potenciální energií na levou stranu dostáváme SR v následujícím tvaru.

Schrödingerova rovnice pro vázanou částici

$$\left[-\hbar^2\frac{\Delta}{2m}+U(\vec{r})\right]\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Poznámky:

- Řešením výše uvedené SR již není de Broglieho vlna (můžete si ověřit dosazením).
- Z této rovnice dostaneme pro $U(\vec{r}) = 0$ ***SR pro volnou částici***.
- Řešení této komlexní rovnice je obecně komplexní vlnová funkce Ψ, řešením komplexně sdružené SR je komplexně sdružená funkce Ψ^*.
- Fyzikální význam vlnové funkce je definován tzv. ***Bornovým postulátem*** (viz dále).
- Již víme, že fyzikálním veličinám v kvantové mechanice přiřazujeme odpovídající operátor na základě **principu korespondence** mezi klasickou a kvantovou mechanikou, podle kterého musí vztahy klasické fyziky (lze ji použít v případech, kdy Planckovu konstantu můžeme zanedbat) být speciálním případem vztahů mechaniky kvantové. Operátor v hranatých závorkách tedy odpovídá celkové energii částice vyjádřené jako funkce hybnosti a polohy částice, která se v klasické (nekvantové) fyzice jmenuje **Hamiltonova funkce,** též **hamiltonián** a značí se *H*, resp. $H(\vec{p},\vec{r})$. Proto se příslušný operátor v kvantové mechanice označuje jako **Hamiltonův operátor**, či rovněž **hamiltonián** a značí se $\hat{H}$.
- Funkci $U(\vec{r})$ pak můžeme považovat za **operátor potenciální energie**. Protože tento operátor neobsahuje derivace, není nutné označit jej „stříškou“.

Obecný tvar SR

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi,$$

kde ***hamiltonián*** systému $\hat{H}$ získáme na základě **principu korespondence,** tzn. v ***Hamiltonově funkci*** nahradíme formálně hybnost operátorem hybnosti.

1.2.8 FYZIKÁLNÍ VÝZNAM VLNOVÉ FUNKCE

Už v případě de Broglieho vln fyzikové dlouho spekulovali o fyzikálním významu vlnové funkce (viz poznámky k ***de Broglieho hypotéze***). V rámci nerelativistické kvantové mechaniky se podařilo najít fyzikální interpretaci vlnové funkce Bornovi. Vzhledem k tomu, že vlnová funkce je obecně komplexní a měřené fyzikální veličiny mají pouze reálné hodnoty, bylo jasné, že význam měřitelné veličiny může mít pouze reálný výraz sestavený pomocí vlnových funkcí. Nejjednodušší takový výraz je modul vlnové funkce, resp. jeho druhá mocnina.
Interpretace vlnové funkce formulovaná Bornem se dnes považuje za postulát nerelativistické kvantové mechaniky.

Bornův postulát

Druhá mocnina modulu vlnové funkce $\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = \Psi(r,t)\Psi^*(r,t)$ má význam hustoty pravděpodobnosti nalezení částice v místě $\vec{r}$ a čase t.

Poznámky:

- K této interpretaci a k jejímu ověření přispěly pokusy s rozptylem, ohybem a interferencí „elektronových vln“, při kterých byly detekovány jednotlivé elektrony. Elektron je detekován v určitém místě, přestože vlna je „rozprostřena“ v prostoru. Tedy část elektronu nemůže dopadnout nebo se odrazit jinam.

- **Bornův postulát** je možno analogicky formulovat i **pro vícečásticový systém**. Kvadrát modulu vlnové funkce závislé na souřadnicích všech částic pak představuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částic v příslušných polohách (určených souřadnicemi částic).

- **Pravděpodobnost nalezení částice** v určitém vymezeném objemu V prostoru je dána integrálem: $P_V = \int_V \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 \mathrm{d}\vec{r}$.

- Pokud Ψ je řešením SR, můžeme se přesvědčit, že také $\mathrm{konst}\cdot\Psi$ je řešením SR. Aby se zajistila jednoznačnost řešení SR, klade se na vlnovou funkci Ψ tzv. ***normovací podmínka*** (viz dále).

- Protože bývá zvykem volit pravděpodobnost, která odpovídá absolutní jistotě, rovnu 1, je vhodné **normovat vlnovou funkci**, tzn. vynásobit vlnovou funkci číselným faktorem (normovací faktor) takovým, že pravděpodobnost nalezení částice, kdekoliv v prostoru je rovna 1. Normovaná vlnová funkce tedy musí vyhovovat **normovací podmínce**, která má v kartézských souřadnicích tvar: $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,y,z)\right|^2 \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = 1}$.

  Normovat lze ale pouze v případě, že integrál na levé straně nediverguje. Nelze například normovat de Broglieho vlnu.

1.2.9 BEZČASOVÁ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

Pokud se celková energie systému zachovává, nezávisí hamiltonova funkce a tudíž ani hamiltonián (operátor) explicitně na čase. Hamiltonova funkce závisí pouze na souřadnicích a hybnostech a v hamiltoniánu tedy vystupuje pouze závislost na souřadnicích a derivacích podle souřadnic, nikoliv časová proměnná.

V takovém případě je možné hledat řešení časové SR metodou separace proměnných. Postup je zcela obecný a použitelný i pro vícečásticový systém, pro jednoduchost a též vzhledem k tomu, že jsme zatím uvedli tvar SR pouze pro případ jedné částice, popíšeme odvození pro jednočásticovou vlnovou funkci $\Psi(\vec{r},t)$.

Vzhledem k výše uvedeným vlastnostem hamiltoniánu, který vystupuje na pravé straně SR a vzhledem k tomu, že na pravé straně bezčasové SR naopak vystupuje operátor energie obsahující první derivaci podle času, můžeme separovat proměnné, tedy hledat řešení rovnice ve tvaru

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r}) \cdot \Psi(t),$$

kde každá s funkcí v součinu je již funkcí pouze jedné z proměnných, polohy nebo času. (Pozn.: Na rozdíl od matematiky, kde značka funkce je jednoznačně spojena s tvarem funkce, např. sin(x), f(x), ve fyzice je značka jednoznačně spojena s fyzikální veličinou bez ohledu na tvar funkční závislosti, $\vec{F}(\vec{r})$, $\vec{F}(t)$).)
Po dosazení do bezčasové SR máme

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

kde hamiltonián obsahující derivace podle souřadnic působí pouze na funkci závislou na poloze a funkci závislou na čase můžeme považovat za konstantu (vzhledem k poloze). Na pravé straně je situace analogická, avšak derivace podle času působí naopak pouze na funkci závislou na čase a funkci závislou na poloze můžeme považovat za konstantu (vzhledem k času). Můžeme tedy podle pravidel derivování provést úpravu:

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

Pokud předpokládáme netriviální řešení SR, můžeme rovnici dělit vlnovou funkcí (opět vyjádřenou ve tvaru součinu $\Psi(\vec{r})\cdot\Psi(t)$) a dostáváme rovnici

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

v níž levá strana je pouze funkcí polohy a pravá strana pouze funkcí času (separace proměnných). Protože obě proměnné jsou nezávislé (nejsou vázány žádným vztahem), můžeme rovnost obou stran zajistit pouze za předpokladu, že se jedná konstanty, které mají stejnou hodnotu. Tuto hodnotu označme *E*.

Z rovnosti levé strany a *E* dostaneme po jejím vynásobení $\Psi(\vec{r})$ rovnici, která se označuje jako ***bezčasová Schrödingerova rovnice.***

Bezčasová Schrödingerova rovnice

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

Z rovnosti pravé strany a *E* dostaneme po jejím vynásobení $\Psi(t)$ rovnici:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = E\Psi(t)\,,$$

která určuje časový vývoj vlnové funkce.

Poznámky:

- Řešení $\Psi(\vec{r})$ bezčasové SR se označuje jako **stacionární řešení.**

- Netriviální stacionární řešení je možné nalézt obecně pouze pro určité tzv. **dovolené hodnoty energie** (též energetické hladiny)**.** Soubor dovolených hodnot energie označujeme jako **energetické spektrum.**

- Řešení bezčasové SR pro nějaký systém představuje <u>základní úlohu (nerelativistické) kvantové mechaniky</u>.

- Řešením bezčasové SR dostáváme jednak ***vlnové funkce*** (stacionární řešení) a jim odpovídající dovolené hodnoty energie, tedy ***energetické spektrum*** systému.

- Rovnice pro na čase závislou část vlnové funkce je snadno řešitelná. Můžete si ověřit, že její řešení je ve tvaru totožném s tvarem časové závislosti de Broglieho vlny, tedy: $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E\cdot t)}$.

Úkol k textu

Ověřte dosazením do příslušné rovnice tvrzení uvedené v předchozí poznámce.

- Protože hustota pravděpodobnosti ρ je rovna $\Psi^*\Psi$, dostáváme pro případ stacionárních stavů

  $$\rho = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r})\Psi^*(t)\Psi(\vec{r})\Psi(t) =$$

  $$= \Psi^*(\vec{r})\Psi(\vec{r})\, e^{\frac{i}{\hbar}(E\,t)} e^{-\frac{i}{\hbar}(E\,t)} = \Psi^*(\vec{r})\Psi(\vec{r}).$$

  <u>Pro případ stacionárních stavů nezávisí hustota pravděpodobnosti na čase</u>, přestože vlnová funkce časovou závislost obsahuje.

1.2.10 HEISENBERGOVY RELACE NEURČITOSTI

V klasické fyzice je v principu možné naměřit libovolné dvě veličiny charakterizující systém s libovolnou přesností. V praxi je samozřejmě tato možnost omezena přesností měřících přístrojů a tím, že nejsme ve skutečnosti schopni zahrnout velké množství malých vlivů, které ovlivňují stav systému – tyto vlivy označujeme jako „náhodné“.

V kvantové fyzice ovšem dochází k tomu, že některé dvojice fyzikálních veličin není možné ani teoreticky současně určit absolutně přesně. Tato vlastnost totiž vyplývá přímo z teoretického aparátu kvantové fyziky (z vlastností operátorů fyzikálních veličin) a je v souladu s pravděpodobnostní interpretací vlnové funkce v kvantové mechanice. Přesnost, s níž je možné takové dvojice veličin měřit, je určena vztahy, které se označují jako **relace neurčitosti**.

Poprvé odvodil tyto vztahy na základě představ kvantové fyziky Heisenberg pro odpovídající si složky polohového vektoru $\vec{r}$ a vektoru hybnosti částice $\vec{p}$. Např. pro *x*-ové složky obou vektorů platí níže uvedená relace neurčitosti.

Heisenbergova relace neurčitosti pro polohu a hybnost

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar / 2 \,,$$

kde veličiny Δx, resp. Δp_x představují chybu v určení hodnot x, resp. p_x. Tyto chyby bývá zvykem v kvantové mechanice označovat jako **neurčitosti** („neurčitost polohy“, resp. „neurčitost hybnosti“).

Poznámky:

- Analogické vztahy jako pro *x*-ové složky samozřejmě platí i pro složky *y*-ové a *z*-ové.
- Protože nás většinou zajímá pouze řádový odhad principielně nejlepší přesnosti měření, píší se relace neurčitosti často ve tvaru $\boxed{\Delta x \Delta p_x \approx h}$..

Nepřesnost určení souřadnice částice s danou hybností

V případě, že je přesně určena složka hybnosti p_x, tedy $\Delta p_x = 0$, je podle Heisenbergovy relace $\Delta x \approx \lim\limits_{\Delta p_x \to 0} \dfrac{h}{\Delta p_x} = \infty$. Stejně to platí pro ostatní dvojice souřadnic.

Polohu částice s přesně určenou („ostrou“) hybností nelze určit, částice se může nacházet kdekoliv.

Výše uvedený poznatek je v souladu s pravděpodobnostní interpretací vlnové funkce. Volná částice s hybností $\vec{p}$ je popsána vlnovou funkcí $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ ve tvaru de Broglieho vlny, kde $\vec{p}$ představuje parametr a $\vec{r}$ proměnnou. V tomto případě se můžeme přesvědčit, že hustota pravděpodobnosti je konstantou nezávislou na poloze, $\rho_{\vec{p}}(\vec{r}) = \Psi_0^2$ (de Broglieho vlny není možné normovat).

Úkol k textu
Ověřte si tvrzení předchozí poznámky prostým dosazením tvaru de Broglieho vlny do výrazu pro hustotu pravděpodobnosti.

Částice s „ostrou“ hybností se tedy může nacházet se stejnou hustotou pravděpodobnosti kdekoliv v prostoru, tak jak to vyplývá i z příslušné relace neurčitosti.

Nepřesnost určení hybnosti pro částici s danou polohou
Analogicky, v případě, že je přesně určena x-ová složka polohového vektoru, tedy $\Delta x = 0$, je podle Heisenbergovy relace $\Delta p_x \approx \lim\limits_{\Delta x \to 0} \dfrac{h}{\Delta x} = \infty$. Stejně to platí opět pro ostatní dvojice souřadnic.

Hybnost částice s přesně určenou polohou nelze přesně určit, hybnost může být libovolná.

Toto tvrzení je opět v souladu s pravděpodobnostní interpretací vlnové funkce. V případě přesně určené polohy ovšem musíme příslušnou de Broglieho vlnu chápat jako funkci hybnosti a naopak $\vec{r}$ jako parametr, tedy $\Psi_{\vec{r}}(\vec{p})$. Hustota pravděpodobnosti nalezení částice s hybností $\vec{p}$ je analogicky s předchozím případem konstantou nezávislou na hybnosti, $\rho_{\vec{r}}(\vec{p}) = \Psi_{\vec{r}}^{*}(\vec{p})\Psi_{\vec{r}}(\vec{p}) = \Psi_0^2$. Částice s „ostrou“ polohou (lokalizovaná částice) tedy může mít se stejnou hustotou pravděpodobnosti libovolnou hybnost ve shodě s příslušnými relacemi neurčitosti.

Poznámky:

- Výše uvedené vyjádření vlnové funkce (jako funkce hybnosti) se označuje jako **hybnostní reprezentace** vlnové funkce, zatímco původní vyjádření (funkce souřadnic) jako **souřadnicová reprezentace** vlnové funkce.

- Obecně existují i jiné dvojice fyzikálních veličin f a g, pro které platí ***relace neurčitosti*** $\boxed{\Delta f\, \Delta g \approx h}$. Například není možné současně měřit libovolné dvě složky momentu hybnosti $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$.

- Na druhé straně existují dvojice fyzikálních veličin f a g, které je možno současně měřit s libovolnou přesností $\boxed{\Delta f\, \Delta g \approx 0}$. Například všechny ostatní (než sobě si odpovídající) kombinace souřadnic poloh a hybností nebo velikost momentu hybnosti a některá z jeho složek.

V kvantové fyzice se také používá ***vztah neurčitosti pro energii a čas***, jehož formální tvar je obdobný tvaru výše uvedených ***relací neurčitosti***. Tento vztah je ovšem nutno chápat jinak než výše uvedené vztahy (odvozuje se též jiným způsobem na základě ***nestacionární poruchové teorie***).

Relace „neurčitosti“ pro energii a čas

$$\Delta E \Delta t \approx h$$

V tomto vztahu ΔE představuje neurčitost hodnoty energie během doby Δt, kterou můžeme též chápat jako dobu měření energie, resp. interval mezi dvěma měřeními energie systému (nejedná se tedy o neurčitost času).

V kvantové mechanice se tedy energie zachovává nejvýše s přesností $\Delta E \approx \dfrac{h}{\Delta t}$.

Čím kratší je doba měření (omezená dobou života systému), tím je větší minimální nepřesnost v určení energie.

Test

Vyberte správná tvrzení (podrobný návod je uveden v testu na konci první kapitoly), označte je v tabulce za úkolem a srovnejte správné řešení z klíče.

Úkol 4.

A. **Lineární je vztah mezi**
B. **Jako disperzní vztah můžeme označit vztah mezi**

a) energií a úhlovou frekvencí pro de Broglieho vlnu částice
b) energií a hmotností pro de Broglieho vlnu částice
c) energií a kmitočtem pro de Broglieho vlnu částice
d) hybností a vlnovým vektorem pro de Broglieho vlnu částice
e) velikostí hybnosti a vlnočtem pro de Broglieho vlnu částice
f) kmitočtem a vlnočtem pro de Broglieho vlnu částice
g) kmitočtem a vlnočtem pro foton
h) úhlovou frekvencí a velikostí vlnového vektoru pro de Broglieho vlnu částice
i) úhlovou frekvencí a velikostí vlnového vektoru pro foton
j) úhlovou frekvencí a kmitočtem pro de Broglieho vlnu částice
k) velikostí vlnového vektoru a vlnočtem pro de Broglieho vlnu částice

Tabulka pro označení správných odpovědí.

4. A	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k
4. B	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k

Otázky

1. **Fotonová hypotéza.** Uveďte experimentální skutečnosti, které vedly k formulování fotonové hypotézy. Popište tyto skutečnosti – jevy a experimenty. Proč nebylo možné tyto jevy vysvětlit na základě vlnové teorie? Uveďte, které zákony či vztahy bylo třeba postulovat, aby tyto jevy a experimenty bylo možno objasnit. Definujte pojem fotonu. Uveďte vztahy mezi vlnovými charakteristikami elmg. záření (kmitočet, úhlová frekvence, vlnový vektor, vlnočet, vlnová délka) a fyzikálními veličinami, které charakterizují částice – fotony (energie, hybnost, rychlost, hmotnost). Co se rozumí pod pojmem korpuskulárně – vlnový dualismus?

2. **De Broglieho vlnová hypotéza.** Uveďte, které skutečnosti vedly de Broglieho k formulování vlnové hypotézy. Uveďte formulaci vlnové hypotézy. Uveďte vztahy mezi fyzikálními veličinami, které charakterizují částice (energie, hybnost, rychlost, hmotnost) a vlnovými charakteristikami (kmitočet, úhlová frekvence, vlnový vektor, vlnočet, vlnová délka). Objasněte fyzikální podstatu de Broglieho vln – srovnejte tehdejší a současné představy. Vysvětlete, co je to disperzní vztah. Odvoďte disperzní vztah pro relativistické částice s nenulovou a nulovou hmotností. Srovnejte takto získané vztahy s disperzním vztahem pro elmg. vlny ve vakuu. Odvoďte vztah mezi rychlostí pohybu částice a fázovou rychlostí šíření její de Broglieho vlny. Stručně popište experiment, který prokazuje vlnové vlastnosti částic. Objasněte pojem korpuskulárně - vlnového dualismu. Za jakých podmínek se mohou projevit vlnové vlastnosti částic?

3. **Schrödingerova rovnice**. Napište tvar BSR rovnice pro volnou částici. Dokažte, že jejím řešením je prostorová část de Broglieho vlny. Objasněte význam členů a symbolů v rovnici – stručně vysvětlete pojem operátoru. Napište BSR rovnici pro částici v poli s potenciálem $U(\vec{r})$ a porovnejte ji s rovnicí pro volnou částici. Uveďte, které fyzikální informace dostaneme řešením BSR.

4. **Časově závislá SR.** Napište tvar ČSR. Ukažte, že řešením této rovnice v případě volné částice je (rovinná monochromatická) de Broglieho vlna. Separací časové proměnné t a prostorové proměnné $\vec{r}$ převeďte ČSR na BSR a rovnici pro složku vlnové funkce $\Psi(t)$ závislou na čase. Najděte řešení rovnice pro $\Psi(t)$ a ukažte, že v hustotě pravděpodobnosti se časová závislost neprojeví.

5. **Vlnová funkce.** Objasněte fyzikální význam vlnové funkce – Bornův postulát.

6. **Heisenbergovy relace neurčitosti.** Uveďte relace neurčitosti pro složku hybnosti a odpovídající složku polohy. Je možné podle představ klasické fyziky měřit veličiny s libovolnou přesností? Rozveďte. Je možné použitím dokonalejší experimentální techniky zlepšit přesnost měření pod meze dané relacemi neurčitosti? Uveďte příklady dalších fyzikálních veličin, které není možné současně měřit s libovolnou přesností. Je možné v rámci představ kvantové mechaniky najít dvojice fyzikálních veličin, které je možné měřit současně s libovolnou přesností?

Korespondenční úkol
Zpracujte písemně otázky zadané tutorem, řiďte se přitom jeho pokyny.

Shrnutí kapitoly.

Kvantová teorie je novou fyzikální teorií, která umožnila vysvětlit řadu experimentálních faktů, zejména těch z oblasti mikrosvěta, nepochopitelných z pohledy fyziky klasické, tj. nekvantové. Kvantová teorie přitom nepopírá výsledky klasické fyziky, ale jen přesněji vymezuje oblast platnosti jejích zákonů, které jsou jen speciálními, či přibližnými, případy zákonů kvantových.

Nová teorie vznikala nejdříve zejména na základě nutnosti vysvětlit nová experimentální fakta, často ale i na základě hypotéz, které byly dodatečně potvrzeny experimentem.

Významný vliv na rozvoj kvantové teorie měl zejména vznik fotonové hypotézy. Nesoulad mezi experimentálním a teoretickým spektrem záření absolutně černého tělesa vedl Placka k formulování kvantové hypotézy, podle níž se energie elmg. záření mění po přesně definovaných kvantech. Einstein vysvětlil neobvyklé výsledky Lenardova experimentu na základě představy, že elmg. záření je možno chápat jako proud částic s přesně definovanou energií v souladu s Planckovou hypotézou. Částice byly později nazvány fotony. Compton objasnil pozorovanou závislost vlnové délky na úhlu rozptylu pro rentgenového záření rozptylující se v látce. Použil přitom představu rozptylu fotonu s definovanou energií i hybností na volném elektronu. Přes úspěchy fotonové teorie nebylo možné zcela opustit popis fotonů (částic elmg. pole) pomocí elmg. vln. Byla tedy zavedena představa korpuskulárně-vlnového dualismu, kterou de Broglie rozšířil i na jiné částice než jsou fotony a zavedl pojem vlnové funkce částice. Předpovědi jeho hypotézy se poprvé potvrdily při rozptylu elektronů v látce.

Schrödinger pak formuloval rovnici pro výpočet vlnové funkce. Dlouho nebyl jasný fyzikální význam vlnové funkce. Dnes je v rámci nerelativistické kvantové fyziky přijata na základě experimentálních faktů Bornova pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce. V kvantové fyzice tak lze s pomocí vlnové funkce vyjádřit pouze pravděpodobnost výskytu částice v určité oblasti v daném okamžiku. Další skutečností neobvyklou z pohledu klasické fyziky je nemožnost určit současně přesné hodnoty některých dvojic fyzikálních veličin, kterou popisují Heisenbergovy relace neurčitosti.

Kvantová teorie se i dnes uplatňuje při vysvětlení jevů a řešení problémů hlavně na mikroskopické úrovni. Současné modely atomů, atomových jader, ale také procesů na úrovni elementárních částic se bez použití kvantové teorie neobejdou. Na druhou stranu zejména nové objevy v oblasti fyziky elementárních částic podněcují další rozvoj kvantové teorie.

Průvodce studiem.

I když kvantové zákonitosti mohou často odporovat vaší běžné zkušenosti, jejich znalost pro pochopení světa atomů je nezbytná.