

Úvod do kvantové fyziky

Přehled probrané látky 2023/24

1. Vznik kvantové mechaniky

1.1. Historický přehled – starší objevy vedoucí ke kvantování, záření černého tělesa, fotoefekt, měrná tepelná kapacita pevných látek, modely atomu a Bohrovy postuláty, Comptonův jev, de Broglieho vlnová hypotéza a její experimentální potvrzení.

1.2. Měření a pravděpodobnost – pravděpodobnost naměření výsledku při opakovaném měření v klasické a kvantové fyzice, rozptyl na dvojštěrbíně pro klasické částice, klasické vlny a elektrony.

1.3. Kvantování – de Broglieho vztahy, fázová rychlost de Broglieho vln a volná částice, vázaná částice a kvantování, korpuskulárně-vlnový dualismus.

1.4. Zavedení stacionární Schrödingerovy rovnice.

2. Postuláty kvantové mechaniky

2.1. Postulát o vlnové funkci – postulát, vlnová funkce, její proměnné a dimenze, hustota pravděpodobnosti výskytu, pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce, normovací podmínka. Důsledky postulátu – požadavky na vlnovou funkci, prostory funkcí – vektory (postuláty vektorového prostoru), lineární kombinace vektorů, báze, skalární součin a ortogonalita.

2.2. Postulát o operátorech – postulát, operátor, lineární operátor, operace s operátory. Princip superpozice. Definice operátorů polohy a hybnosti a jejich vlastnosti. Popis soustavy hmotných bodů v klasické fyzice – poloha a hybnost, Lagrangeova funkce, Hamiltonova funkce. Operátor kinetické energie, Hamiltonův operátor, operátor momentu hybnosti. Komutátor operátorů a jeho vlastnosti. Hermitovský operátor a jeho vlastnosti, braketová notace.

2.3. Postulát o kvantování – postulát, střední hodnota veličiny, střední hodnota energie, Diracova symbolika. Vlastní problém, vlastní funkce a vlastní hodnota (operátoru). Souvislost výsledků jednotlivých měření a střední hodnoty – rozvoj vlnové funkce pomocí ortonormální báze vlastních funkcí, vyjádření pravděpodobnosti naměření konkrétní hodnoty veličiny.

2.4. Postulát o redukci vlnové funkce – postulát, simultánní měření veličin, úplné množiny pozorovatelných veličin, filtr.

2.5. Postulát o nestacionární Schrödingerově rovnici – postulát, počáteční a okrajové podmínky, zavedení rovnice a její vlastnosti.

3. Stacionární Schrödingerova rovnice

3.1. Odvození stacionární Schrödingerovy rovnice – separace proměnných, časově závislá část, normování, hustota pravděpodobnosti.

3.2. Stacionární stavy a jejich vlastnosti – stacionární stavy, hustota pravděpodobnosti, střední hodnota operátoru, nestacionární řešení.

4. Rovnice kontinuity – normování časově závislé vlnové funkce, rovnice kontinuity, hustota toku pravděpodobnosti.

5. Volná částice

5.1. Stacionární stavy – sestavení Schrödingerovy rovnice, podrobný postup řešení rovnice, stacionární stavy, celková energie, časově závislá vlnová funkce.

5.2 Normování – normování na konečný objem, periodické okrajové podmínky, normování na Diracovu funkci.

5.3 Vlnové klubko – řešení nestacionární rovnice ve tvaru Gaussovského vlnového klubka a jeho vlastnosti.

6. Částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě

6.1 Jednorozměrná potenciálová jáma – tvar potenciální energie, sestavení Schrödingerovy rovnice, obecné řešení (i postup). Okrajové podmínky, vztah pro vlnovou funkci i energii, normování. Vlastnosti stacionárních stavů, energetické spektrum, princip korespondence. Analogie ke kmitu struny.

6.2 Dvojrzměrná potenciálová jáma – potenciální energie, sestavení Schrödingerovy rovnice, řešení separací proměnných, vztah pro vlnovou funkci a energii, uzlové křivky. Degenerované a nedegenerované stavy pro čtvercovou jámu.

6.3 Trojrozměrná potenciálová jáma – sestavení Schrödingerovy rovnice, separace proměnných, řešení, uzlové plochy, degenerované a nedegenerované stavy.

6.4 Příklady použití potenciálové jámy jako modelu pro praktické situace – lineární konjugované molekuly, nanokrystaly a kvantové tečky, elektronový plyn.

7. Potenciálová jáma konečné hloubky a potenciálová bariéra

7.1 Potenciálová jáma konečné hloubky – sestavení Schrödingerovy rovnice, sešívací podmínky, řešení pro vázané a volné stavy (diskrétní a spojitě energetické spektrum, pouze náznak řešení a hlavní závěry), koeficient průchodu (transmise) a odrazu (reflexe) – jen kvalitativně výsledky.

7.2 Potenciálová bariéra (val) – tvar potenciálu, hlavní závěry.

7.3 Příklady využití: elektronový mikroskop, manipulace s atomy + „kvantová ohrada“.

8. Harmonický oscilátor

8.1 Harmonická aproximace – Taylorův rozvoj, rozvoj potenciální energie kolem minima, harmonický potenciál.

8.2 Lineární harmonický oscilátor – sestavení Schrödingerovy rovnice, substituce proměnných. Výsledky řešení (energie, vlnové funkce), interpretace, přechod ke klasické fyzice, střední hodnoty operátorů polohy, hybnosti a energie. Časový vývoj – řešení ve tvaru vlnového klubka, střední hodnota operátoru polohy, pohybová rovnice, střední hodnota celkové energie.

8.3 Trojrozměrný harmonický oscilátor – Taylorův rozvoj pro funkce více proměnných, sestavení Schrödingerovy rovnice pro izotropní oscilátor, separace proměnných, výsledky řešení, degenerované a nedegenerované stavy, energie nulových kmitů.

8.4 Příklady použití harmonického potenciálu jako modelu – vibrace molekuly, vibrace pevné látky – tepelné kapacity.

9. Další výsledky a aplikace kvantové teorie

9.1 Neharmonický potenciál – energetické spektrum, vázané a nevázané stavy, chování vlnové funkce. Příklady z molekulární spektroskopie: Franckův–Condonův princip, Jablonského diagram.

9.2 Relace neurčitosti – operátor odchylky od střední hodnoty, obecné relace neurčitosti, Heisenbergovy relace neurčitosti pro polohu a hybnost, důsledky (pro vzájemné měření veličin).

9.3 Vztah klasické a kvantové fyziky – přechod mezi kvantovou a klasickou mechanikou, časově nezávislé veličiny, integrál pohybu, volná částice, zákony zachování.

9.4 Interpretace kvantové mechaniky – Schrödingerova kočka, Wignerův přítel, EPR myšlenkový experiment

9.5 Zajímavé aplikace – kvantová kryptografie, teleportace, kvantové počítače.

10. Atom vodíku

10.1 Kvantování momentu hybnosti v centrálním poli – pohyb částice v centrálním poli, moment hybnosti a jeho kvantování.

10.2 Pohyb elektronů v poli jádra – Hamiltonián, pohyb jádra vs. pevné jádro.

10.3 Diskrétní energetické spektrum – Hamiltonián elektronu ve sférických souřadnicích, separace proměnných, výsledky pro řešení radiální části a úhlové části. Souvislost s naměřenými spektry atomů.

10.4 Elektron v magnetickém poli a spin – magnetický moment a moment hybnosti elektronu, hamiltonián pro nabitou částici v elmag., hamiltonián elektronu atomu vodíku v homogenním magnetickém poli. Spin, operátor spinu, Pauliho matice, Pauliho rovnice.

10.5 Postuláty speciální teorie relativity a další relativistické rovnice kvantové mechaniky (Kleinova-Gordonova, Diracova).

Literatura:

Základní: L. Skála, Úvod do kvantové mechaniky. Karolinum, Praha 2011

Doporučená: A. Beiser, Úvod do moderní fyziky, Academia, Praha 1978

Doporučená: I. Janeček, R. Kalus, D. Hrivňák, Kvantová, atomová a jaderná fyzika (multimediální encyklopedie), KFY PřF OU, 2006, <http://artemis.osu.cz/mmfyf/>