Úvod do kvantové mechaniky

Historie

- Max Planck (1900) - záření černého tělesa - světlo je vyzařováno po kvantech - energie je úměrná frekvenci (konstanta úměrnosti $h = 6{,}626.10^{-34}$ J.s je nazývána Planckovou konstantou).
- Albert Einstein (1905) - vysvětlil fotoelektrický jev předpokladem, že energie světla je kvantována.
- Niels Bohr (1913) - model atomu - předpokládal, že elektrony v elektronovém obalu atomu mohou nabývat jen určitých energií.
- Louis de Broglie (1924) - je možné dívat se na částici o hmotnosti m pohybující se rychlostí v jako na vlnu s vlnovou délkou $\lambda = h/(mv)$.
- Erwin Schrödinger (1926) - zveřejnil vlnovou rovnici popisující chování kvantově mechanického systému.

Princip neurčitosti

V klasické fyzice měření neovlivňuje experiment (nebo se ovlivňování dá minimalizovat). Heisenbergův princip říká, že čím přesněji určíme jednu z konjugovaných vlastností, tím méně přesněji můžeme určit tu druhou - bez ohledu na to, jak dobré přístroje máme. To také znamená, že představa z klasické fyziky, že můžeme předpovědět chování systému pokud známe jeho počáteční stav, je v praxi k ničemu: počáteční stav systému nikdy nemůžeme zjistit dostatečně přesně (protože nelze dostatečně přesně zjistit oba tyto konjugované parametry). Konjugované veličiny jsou např. poloha a hybnost nebo energie a čas.

$$\Delta x \Delta p \geqslant \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta E \Delta t \geqslant \frac{h}{4\pi}$$

Vlnová funkce

V klasické mechanice je stav částice popsán její polohou a hybností. K kvantové mechanice tyto veličiny nemusí mít nějaké konkrétní hodnoty, ale při měření těchto veličin můžeme dostat různé výsledky s různou pravděpodobností.

V kvantové mechanice je stav systému popsán komplexní vlnovou funkcí $\Psi(x,t)$, kdy platí, že $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$. V okamžiku měření dojde k tzv. kolapsu vlnové funkce a pozorovatel naměří nějaké konkrétní hodnoty veličin.

Schrödingerova rovnice

Vlnová funkce Ψ je řešením Schrödingerovy rovnice

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

kde *m* je hmotnost částice, *V* je potenciální energie částice a Δ je Laplaceův operátor.

Pro jednorozměrný případ a nezávisí-li stav systému na čase (stacionární případ), lze Schrödingerovu rovnici napsat:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0$$

Volná částice - zadání

Pro částici, na kterou nepůsobí vnější síly $V = 0$.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0$$

Substituce: $$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0$$

Volná částice - řešení

Zkusme řešení: $\Psi(x) = \exp(\lambda x)$

$\lambda^2 \Psi + k^2 \Psi = 0$

$\lambda^2 + k^2 = 0$

$\lambda = \pm ik$

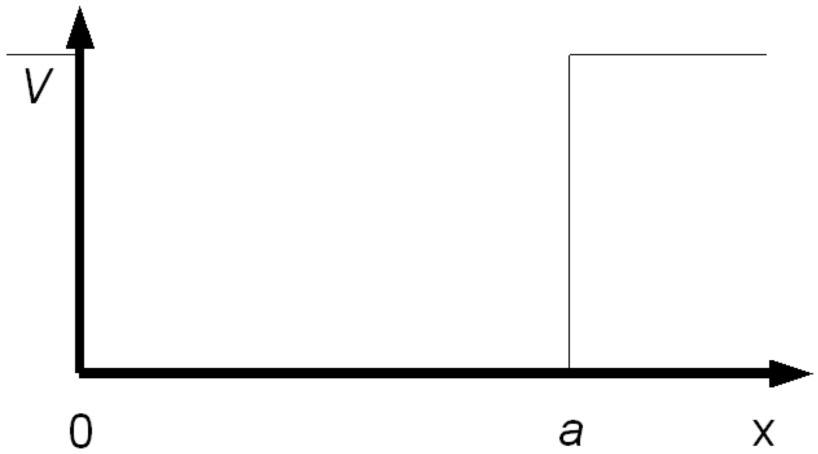
Vlnová funkce: $\Psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$

$|\Psi|^2 = A^2 + B^2$

Částice v potenciálové jámě

Mějme částici v nekonečně hluboké 1D potenciálové jámě o velikosti *a*. Potenciální energie v jámě V=0. Potenciální energie mimo jámu $V \to 0$.

V jámě: $$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0$$



Mimo jámu: Ψ = 0.

Řešení v jámě: $\Psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$

Vlnová funkce musí být spojitá.

$\Psi(0) = A + B = 0$, tedy $A = -B$.

$\Psi(a) = A(\exp(ikx) - \exp(-ikx))$

Existuje řešení pro $k_n = n\pi/a$ a tedy

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} n^2$$

Tunelový jev

V rámci relace neurčitosti nemusí platit zákon zachování energie.

Pravděpodobnost průchodu bariérou:

$$P \approx e^{-\frac{2\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}d}$$