

# Základy kvantové mechaniky

Něco formalismu a počítání



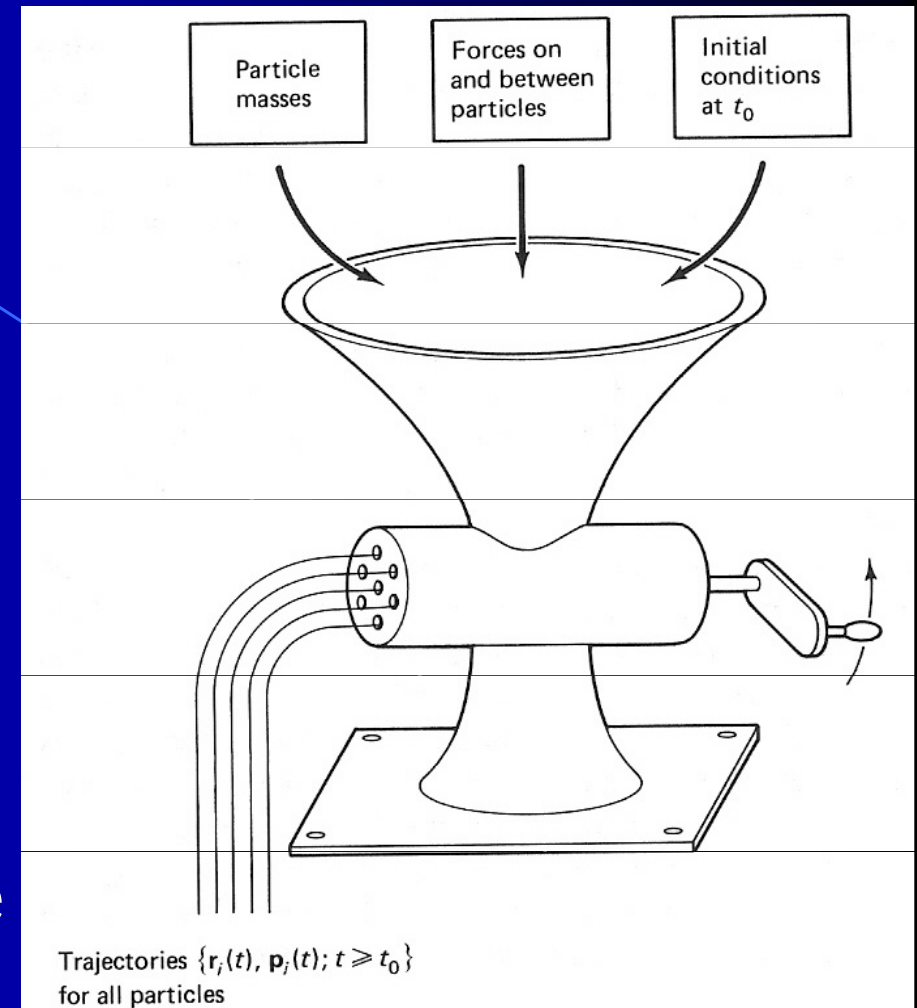
# Klasická mechanika

- Stav částice

$$\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)$$

- Pohybová rovnice částice

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = \sum \mathbf{F}_i$$



**Figure 1.1** The Newtonian Universe Grinder. Fed the proper information, the great machine of classical mechanics can predict the future of the universe. This machine is now obsolete.

# Kvantová mechanika

- Stav mikročástice

$$\Psi(\mathbf{r}, t)$$

**vlňová funkce**

Požadavek – *princip superpozice*

- Pohybová rovnice mikročástice

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

**Schrödingerova rovnice (1926)**

# Schrödingerova rovnice

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

**H**

hamiltonian

+ okrajové podmínky

$$i\hbar \dot{\Psi} = \mathbf{H} \Psi$$

*„Erwin with his psi can do  
calculations quite a few.  
But one thing has not been seen  
Just what does psi really mean.“*

W. Hückel

## *Co znamená vlnová funkce?*

Pravděpodobnost výskytu/nalezení částice v čase  $t$   
v elementárním objemu  $dV = dx dy dz$  opsaném kolem  
bodu  $\mathbf{r} = (x, y, z)$

$$dP(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

Bornova pravděpodobnostní interpretace (1927)

## Dva pohledy na $\psi(r)$

Einstein

Bohr

(Kodaňská škola)

$$|\psi(\mathbf{r})|^2$$

udává pravděpodobnost výskytu

je pravděpodobnost nalezení

- částice je někde
- je tam sama o sobě
- dá se zjistit více než  $|\psi(\mathbf{r})|^2$

⇒ QM funguje, ale je neúplná

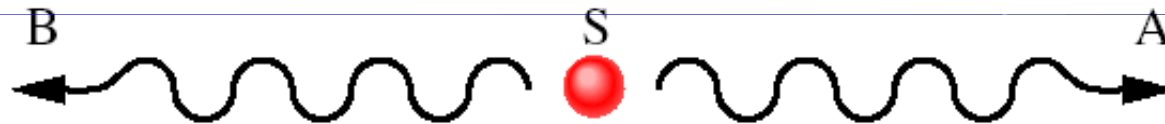
- bez detekce částice není nikde
- detekce v kontextu s přístrojem
- neurčitost – základní omezení

⇒ QM je úplná  
(poznání je oslabeno, „divné“)

**Kanonická interpretace**

EPR (1935) ↔ J. S. Bell (1965)

## 40.8 PŘÍKLAD PODIVNOSTI KVANTOVÉ FYZIKY



**Obr. 40.22** Zdroj S emituje současně dva fotony do vzájemně opačných směrů. Pozorovatel si může libovolně zvolit, kterou ze dvou možných vlastností fotonu A bude měřit. Obdobně i druhý pozorovatel si může libovolně zvolit, kterou ze dvou stejných možných vlastností fotonu B bude měřit on. Avšak v okamžiku, kdy jeden pozorovatel provede měření, je výsledek měření druhého pozorovatele již zcela předvídatelný, ačkoli jsou oba fotony od sebe velmi vzdáleny a oba pozorovatelé se o svých výsledcích vzájemně neinformují.

# Vlnová funkce a dvojštěrbinový experiment

- otevřena štěrba 1

$$\Psi_1$$

- otevřena štěrba 2

$$\Psi_2$$

- otevřeny obě štěrbiny

$$\Psi_{1+2} = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$P_{1+2} \propto (\Psi_1 + \Psi_2)(\Psi_1 + \Psi_2)^* =$$

$$= \underbrace{\Psi_1 \Psi_1^*}_{P_1} + \underbrace{\Psi_2 \Psi_2^*}_{P_2} + (\Psi_1 \Psi_2^* + \Psi_2 \Psi_1^*)$$

$P_1$

$P_2$

interference



# Kvantová realita

počáteční stav



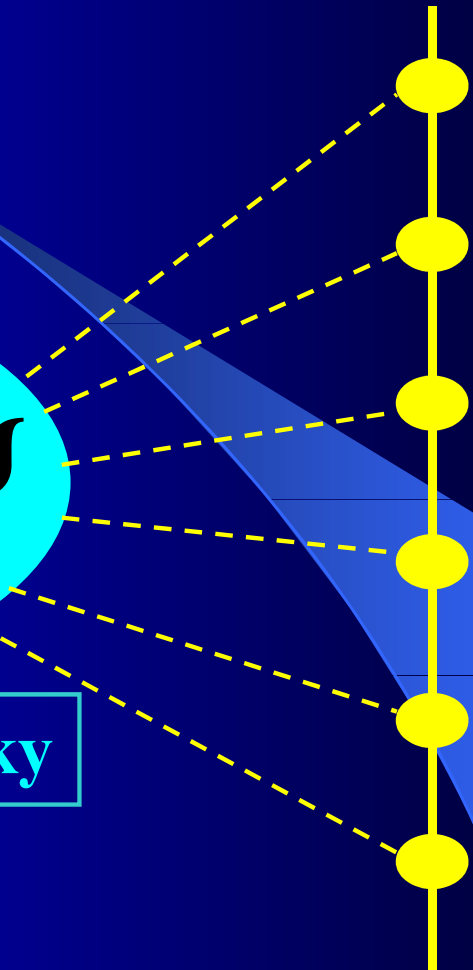
$$i\hbar\dot{\Psi} = H\Psi$$

+ okrajové podmínky

kvantová kauzalita

redukce  
kvantového  
stavu

$\rightarrow \exists \rho \rightarrow \rho \in \Sigma$



# Stacionární stav

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i(E/\hbar)t}$$

Protože

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$$

hustota pravděpodobnosti nezávisí na čase

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Bezčasová Schrödingerova rovnice

## Bezčasová Schrödingerova rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})$$

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

**H**

+ okrajové podmínky

$$\mathbf{H}\psi = E\psi$$

Problém vlastních hodnot operátoru energie

A 43

# ANNALEN DER PHYSIK

GEGRÜNDET 1799 DURCH F. A. C. GREN  
UND FORTGEFÜHRT DURCH L. W. GILBERT,  
J. G. POGGENDORFF, G. u. E. WIEDEMANN,  
P. DRUDE

VIERTE FOLGE

BAND 79  
DER GANZEN REIHE 384. BAND

KURATORIUM:  
M. PLANCK, E. WARBURG

UNTER MITWIRKUNG  
DER DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT  
HERAUSGEGEBEN VON

W. WIEN UND M. PLANCK

MIT ZEHN TAFELN



I 9 2 6

LEIPZIG · VERLAG VON JOHANN AMBROSIUS BARTH

### 3. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger.*

(Erste Mitteilung.)

§ 1. In dieser Mitteilung möchte ich zunächst an dem einfachsten Fall des (nichtrelativistischen und ungestörten) Wasserstoffatoms zeigen, daß die übliche Quantisierungsvorschrift sich durch eine andere Forderung ersetzen läßt, in der kein Wort von „ganzen Zahlen“ mehr vorkommt. Vielmehr ergibt sich die Ganzzahligkeit auf dieselbe natürliche Art, wie etwa die Ganzzahligkeit der *Knotenzahl* einer schwingenden Saite. Die neue Auffassung ist verallgemeinerungsfähig und rührt, wie ich glaube, sehr tief an das wahre Wesen der Quantenvorschriften.

Die übliche Form der letzteren knüpft an die Hamiltonsche partielle Differentialgleichung an:

$$(1) \quad H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E.$$

Es wird von dieser Gleichung eine Lösung gesucht, welche sich darstellt als *Summe* von Funktionen je einer einzigen der unabhängigen Variablen  $q$ .

Wir führen nun für  $S$  eine neue unbekanntete  $\psi$  ein derart, daß  $\psi$  als ein *Produkt* von eingriffigen Funktionen der einzelnen Koordinaten erscheinen würde. D. h. wir setzen

$$(2) \quad S = K \lg \psi.$$

Die Konstante  $K$  muß aus dimensionellen Gründen eingeführt werden, sie hat die Dimension einer *Wirkung*. Damit erhält man

$$(1') \quad H\left(q, \frac{K}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E.$$

Wir suchen nun *nicht* eine Lösung der Gleichung (1'), sondern wir stellen folgende Forderung. Gleichung (1') läßt sich bei Vernachlässigung der Massenveränderlichkeit stets, bei Berücksichtigung derselben wenigstens dann, wenn es sich um das *Ein-*elektronenproblem handelt, auf die Gestalt bringen: quadratische



Form von  $\psi$  und seinen ersten Ableitungen = 0. Wir suchen solche reelle im ganzen Konfigurationsraum eindeutige endliche und zweimal stetig differenzierbare Funktionen  $\psi$ , welche das über den ganzen Konfigurationsraum erstreckte Integral der eben genannten quadratischen Form<sup>1)</sup> zu einem *Extremum* machen. *Durch dieses Variationsproblem ersetzen wir die Quantenbedingungen.*

Wir werden für  $H$  zunächst die Hamiltonsche Funktion der Keplerbewegung nehmen und zeigen, daß die aufgestellte Forderung für *alle positiven*, aber nur für eine *diskrete Schar von negativen  $E$ -Werten* erfüllbar ist. D. h. das genannte Variationsproblem hat ein diskretes und ein kontinuierliches Eigenwertspektrum. Das diskrete Spektrum entspricht den Balmerischen Termen, das kontinuierliche den Energien der Hyperbelbahnen. Damit numerische Übereinstimmung bestehe, muß  $K$  den Wert  $h/2\pi$  erhalten.

Da für die Aufstellung der Variationsgleichungen die Koordinatenwahl belanglos ist, wählen wir rechtwinkelige kartesische. Dann lautet (1') in unserem Fall ( $e, m$  sind Ladung und Masse des Elektrons):

$$(1'') \quad \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi^2 = 0 .$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} .$$

Und unser Variationsproblem lautet

$$(3) \quad \left\{ \begin{array}{l} \delta J = \delta \iiint dx dy dz \left[ \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi^2 \right] = 0 , \end{array} \right.$$

das Integral erstreckt über den ganzen Raum. Man findet daraus in gewohnter Weise

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \delta J = \int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} - \iiint dx dy dz \delta\psi \left[ \Delta\psi + \right. \\ \left. + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi \right] = 0 . \end{array} \right.$$

Es muß also erstens

$$(5) \quad \Delta\psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi = 0$$

1) Es entgeht mir nicht, daß diese Formulierung nicht ganz eindeutig ist.

und zweitens muß das über die unendlich ferne geschlossene Oberfläche zu erstreckende Integral

$$(6) \quad \int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0 .$$

(Es wird sich herausstellen, daß wir wegen dieser letzteren Forderung unser Variationsproblem noch durch eine Forderung über das Verhalten von  $\delta\psi$  im Unendlichen zu ergänzen haben, damit auch das oben behauptete *kontinuierliche* Eigenwertspektrum wirklich existiere. Doch davon später.)

Die Lösung von (5) läßt sich (zum Beispiel) in räumlichen Polarkoordinaten  $r, \vartheta, \varphi$  bewerkstelligen, indem man  $\psi$  als *Produkt* je einer Funktion von  $r$ , von  $\vartheta$ , von  $\varphi$  ansetzt. Die Methode ist sattsam bekannt. Für die Abhängigkeit von den Polarwinkeln ergibt sich eine *Kugelflächenfunktion* für die Abhängigkeit von  $r$  — die Funktion wollen wir  $\chi$  nennen — erhält man leicht die Differentialgleichung:

$$(7) \quad \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\chi}{dr} + \left( \frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) \chi = 0 .$$

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

Die Beschränkung von  $n$  auf ganze Zahlen ist bekanntlich *notwendig*, damit die Abhängigkeit von den Polarwinkeln *eindeutig* werde. — Wir benötigen Lösungen von (7), die für alle nicht-negativen reellen  $r$ -Werte endlich bleiben. Nun hat<sup>1)</sup> die Gleichung (7) in der komplexen  $r$ -Ebene *zwei* Singularitäten, bei  $r = 0$  und  $r = \infty$ , von denen die zweite eine „Stelle der Unbestimmtheit“ (wesentlich singuläre Stelle) *aller* Integrale ist, die erste hingegen nicht (für kein Integral). Diese beiden Singularitäten bilden gerade die *Randpunkte unseres reellen Intervalls*. In einem solchen Falle weiß man nun, daß die Forderung des *Endlichbleibens* in den Randpunkten für die Funktion  $\chi$  einer *Randbedingung* gleichkommt. Die Gleichung hat *im allgemeinen* überhaupt kein Integral, das in *beiden* Randpunkten endlich bleibt, sondern ein solches Integral existiert

1) Für die Anleitung zur Behandlung der Gleichung (7) bin ich Hermann Weyl zu größtem Dank verpflichtet. Ich verweise für die im folgenden nicht bewiesenen Behauptungen auf L. Schlesinger, Differentialgleichungen (Sammlung Schubert Nr. 13, Göschen 1900, besonders Kap. 3 und 5.)

# Pohyb v jednorozměrném potenciálovém poli

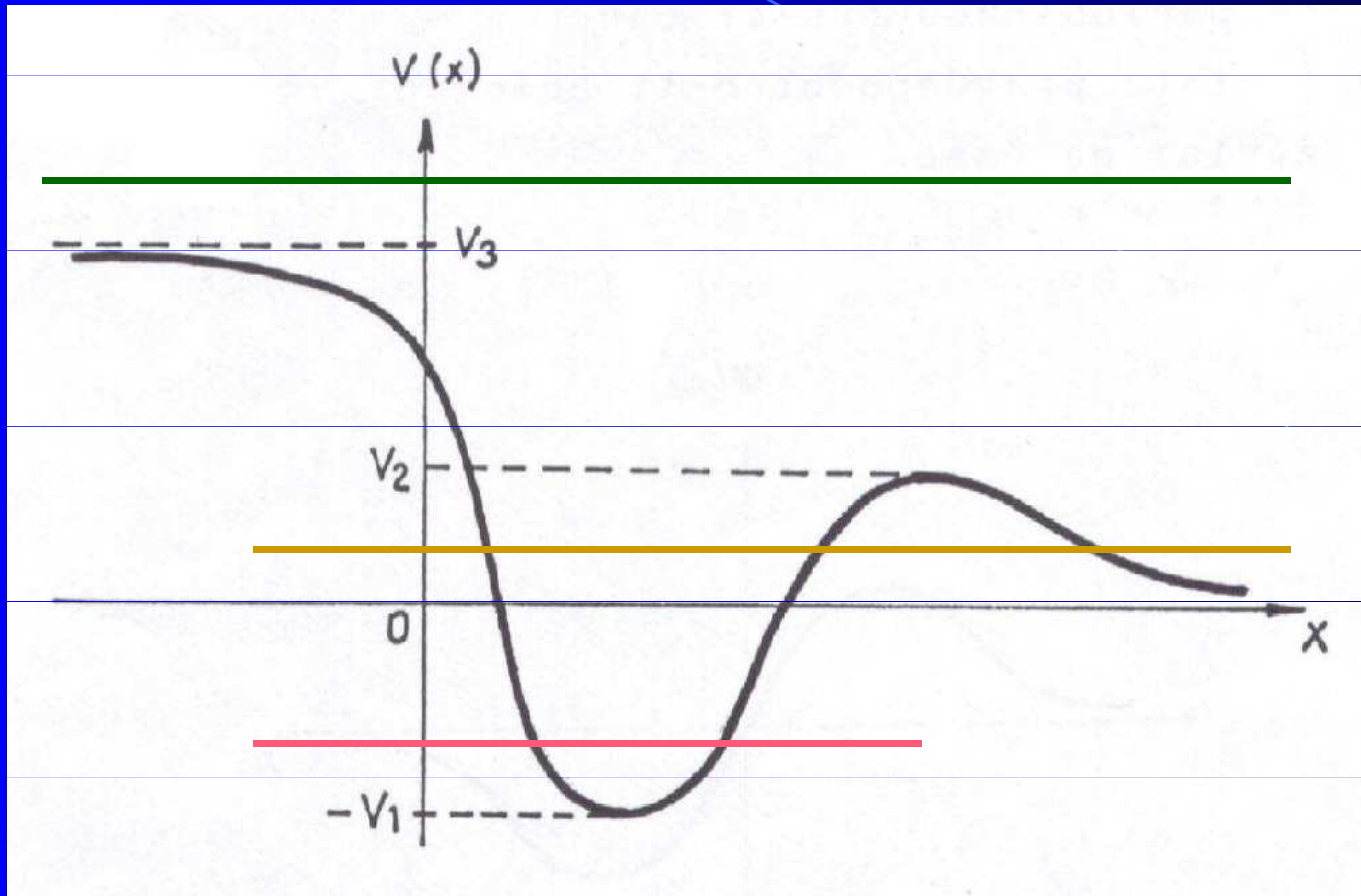
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi(x) = 0$$

+ okrajové podmínky

Požadavky na vlnovou funkci

- jednoznačná
- všude spojitá i se svojí první derivací
- normovatelná

# Pohyb v jednorozměrném potenciálovém poli



tunelování

kvantování

# Volná mikročástice

- Monochromatická vlna
- Vlnové klubko

Heisenbergovy relace neurčitosti

# Mikročástice a potenciálová bariera

Tunelování

# Zachycení mikročástice: mikročástice v potenciálové jámě

Kvantování energie



# Volná mikročástice

- Monochromatická vlna

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0$$

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

kde

➤  $A$  a  $B$  jsou konstanty

➤  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , takže  $E = (\hbar k)^2 / 2m$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)}$$

# Volná mikročástice

- Monochromatická *postupná* vlna

## Vlnová funkce

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\Psi(x, t) = B e^{-i(\omega t + kx)}$$

## Hustota pravděpodobnosti

$$|\Psi(x, t)|^2 = |A|^2 = \text{konst.}$$

# Volná mikročástice

- Monochromatická *stojatá* vlna

## Vlnová funkce

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= A e^{-i(\omega t - kx)} + A e^{-i(\omega t + kx)} = \\ &= 2A e^{-i\omega t} \cos kx\end{aligned}$$

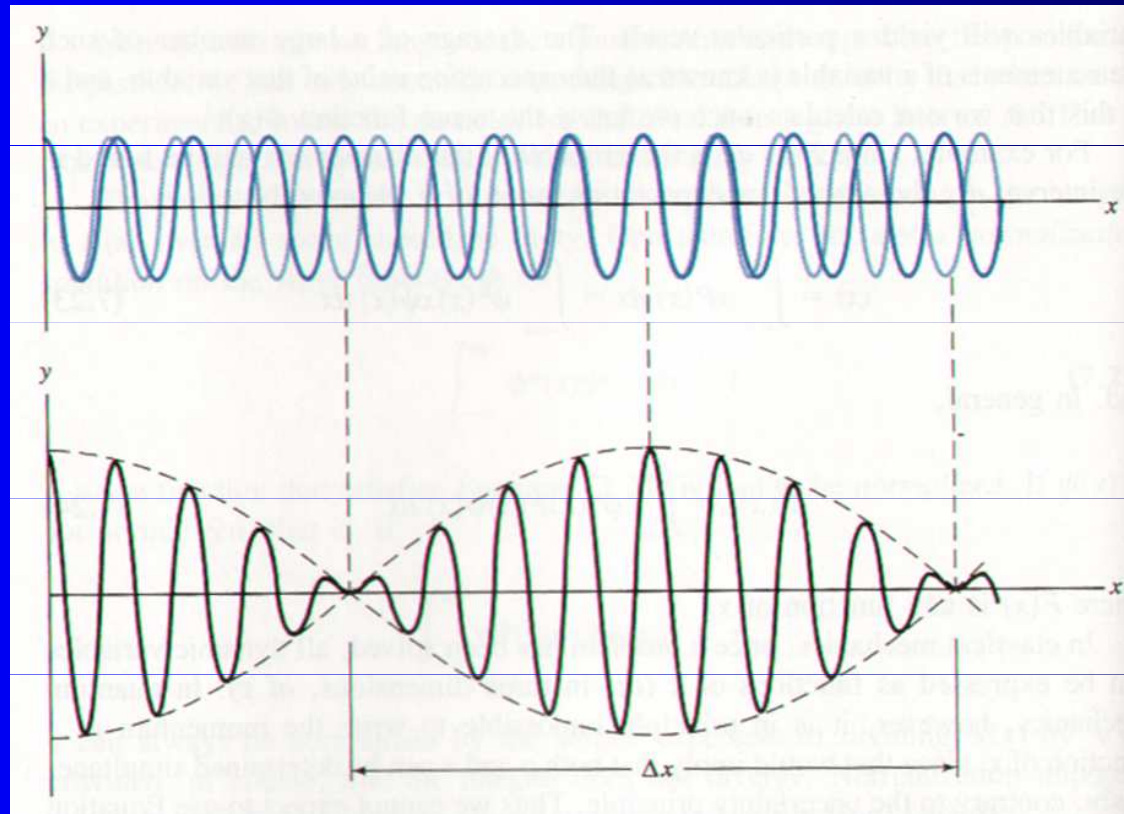
## Hustota pravděpodobnosti

$$|\Psi(x, t)|^2 = 4|A|^2 \cos^2 kx$$

# Volná mikročástice

- Vlnové klubko → není stacionární stav

$$\Psi(x, t) = \sum_{\ell} A_{\ell} e^{-i(\omega_{\ell} t - k_{\ell} x)}, \text{ kde } \omega_{\ell} = \frac{\hbar k_{\ell}^2}{2m}$$



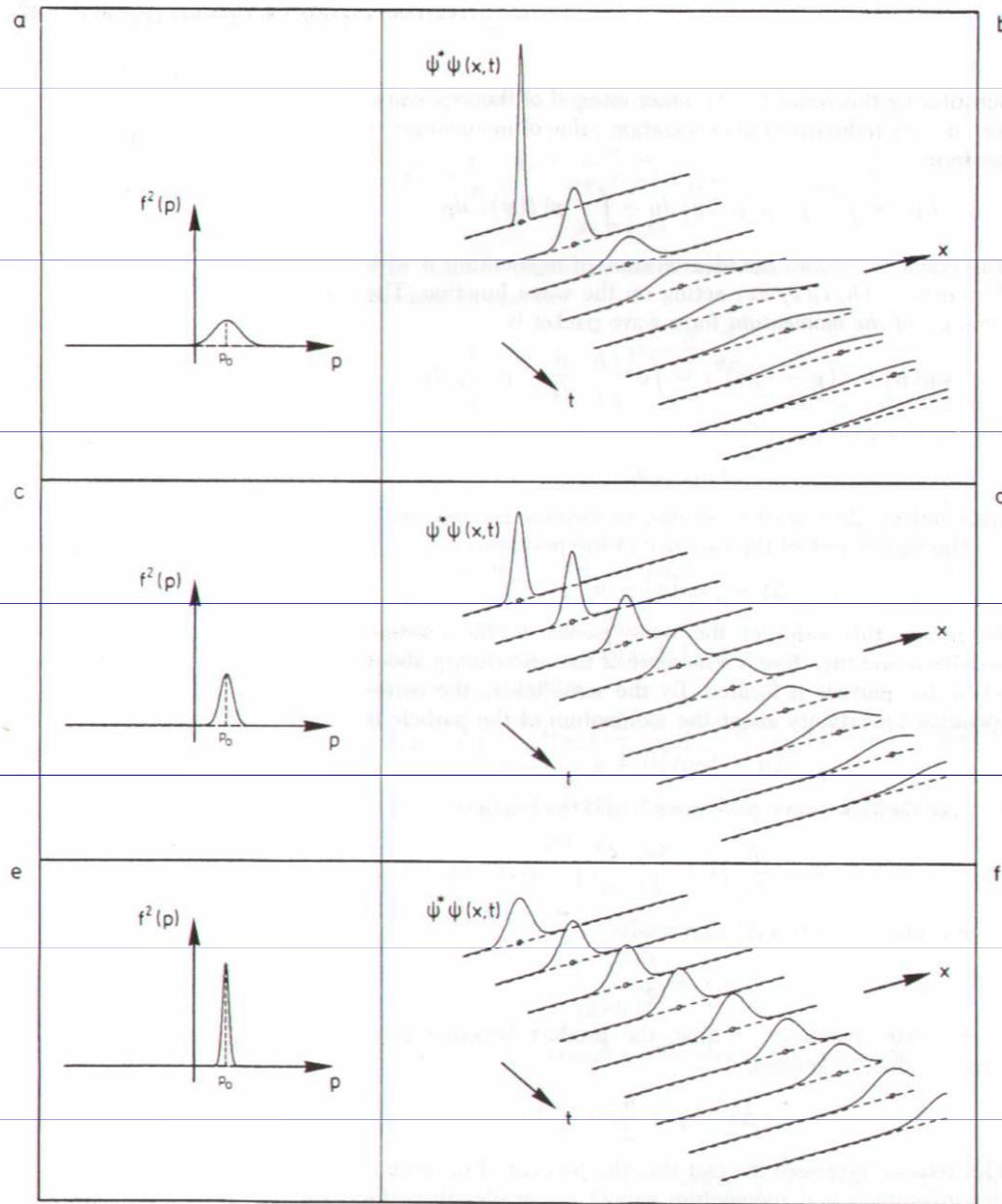


Figure 3.5 Heisenberg's uncertainty principle. For three different Gaussian wave packets the square  $f^2(p)$  of the spectral function is shown on the left, the time development of the

probability density in space on the right. All three packets have the same group velocity but different widths  $\sigma_p$  in momentum. At  $t = 0$  the widths  $\sigma_x$  in space and  $\sigma_p$  in momentum fulfill the

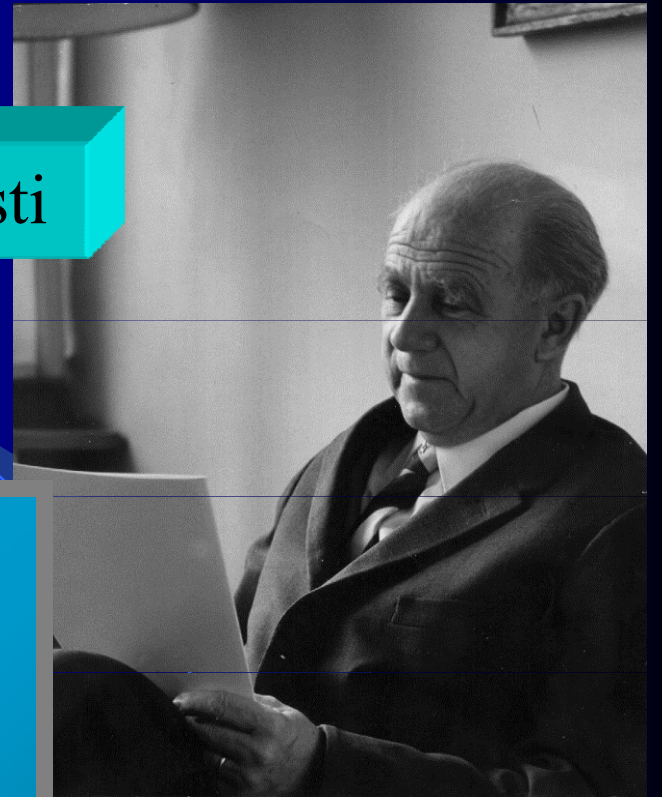
equality  $\sigma_x \sigma_p = \hbar / 2$ . For later moments in time the wave packets spread in space so that  $\sigma_x \sigma_p > \hbar / 2$ .

## Heisenbergovy relace neurčitosti

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

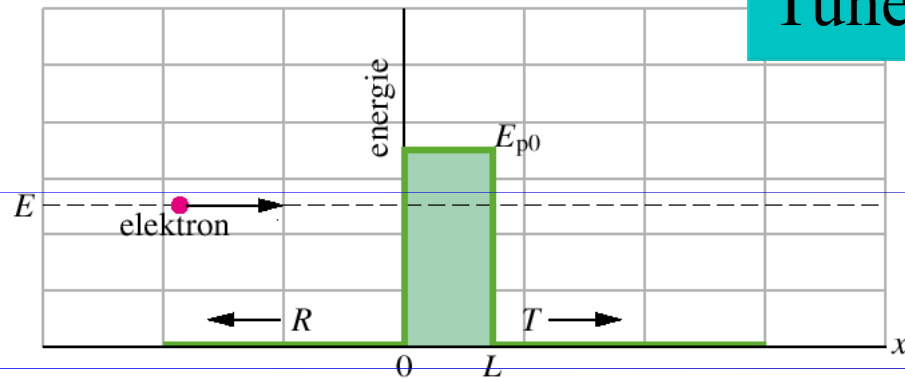
$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$$

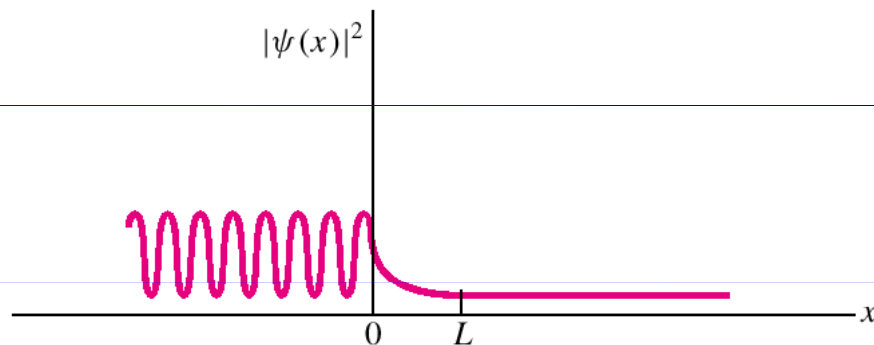


# Mikročástice a potenciálová bariéra

## Tunelování



(a)

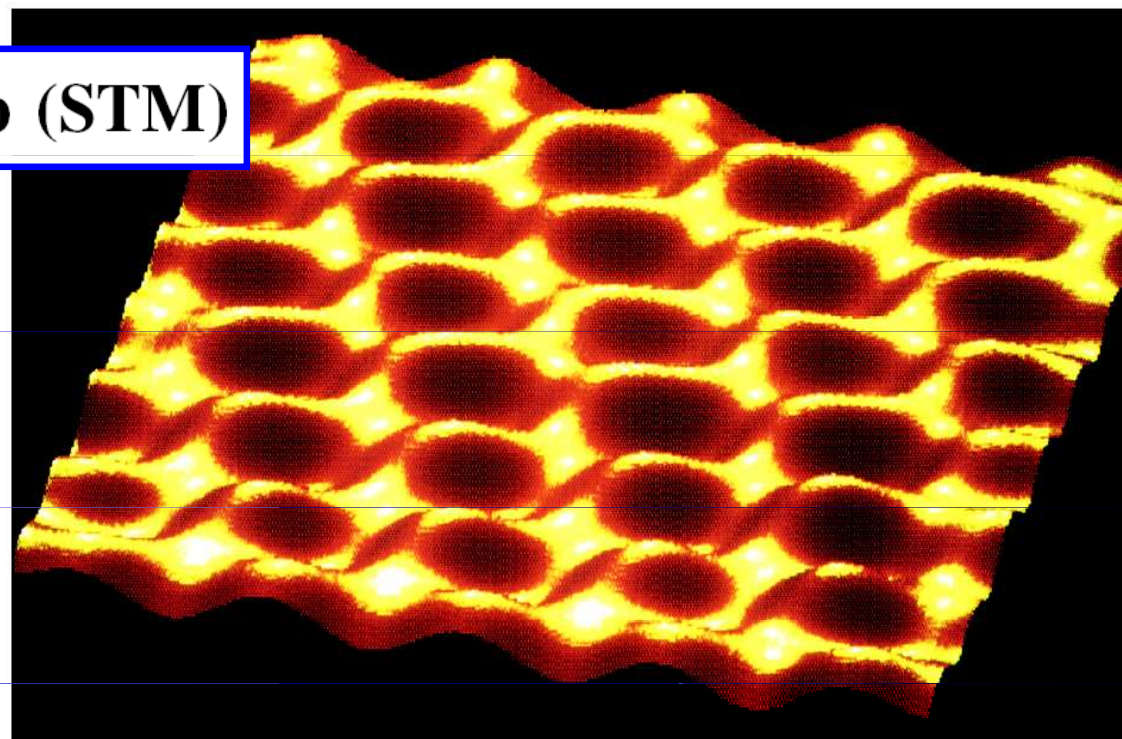


(b)

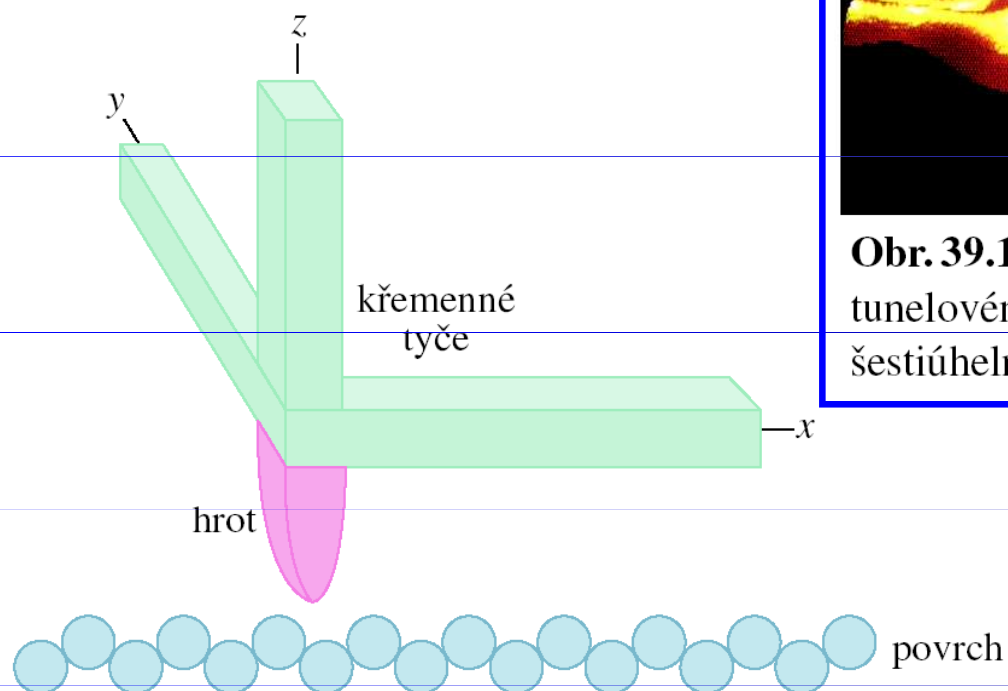
**Obr. 39.13** (a) Průběh závislosti energie v prostoru vytváří potenciálovou bariéru o výšce  $E_{p0}$  a tloušťce  $L$ . Elektron o celkové energii  $E$  se přibližuje k bariéře zleva. (b) Hustota pravděpodobnosti  $|\psi|^2$  de Broglieho vlny reprezentující elektron ukazuje tunelování elektronu bariérou. Vlevo od bariéry dostaneme stojatou vlnu v důsledku superpozice dopadající a odražené de Broglieho vlny.



# Rastrovací tunelový mikroskop (STM)



**Obr. 39.14** Kontury povrchu grafitu zobrazené v rastrovacím tunelovém mikroskopu. Zřetelně vidíme atomy uhlíku tvořící šestiúhelníkovou strukturu.

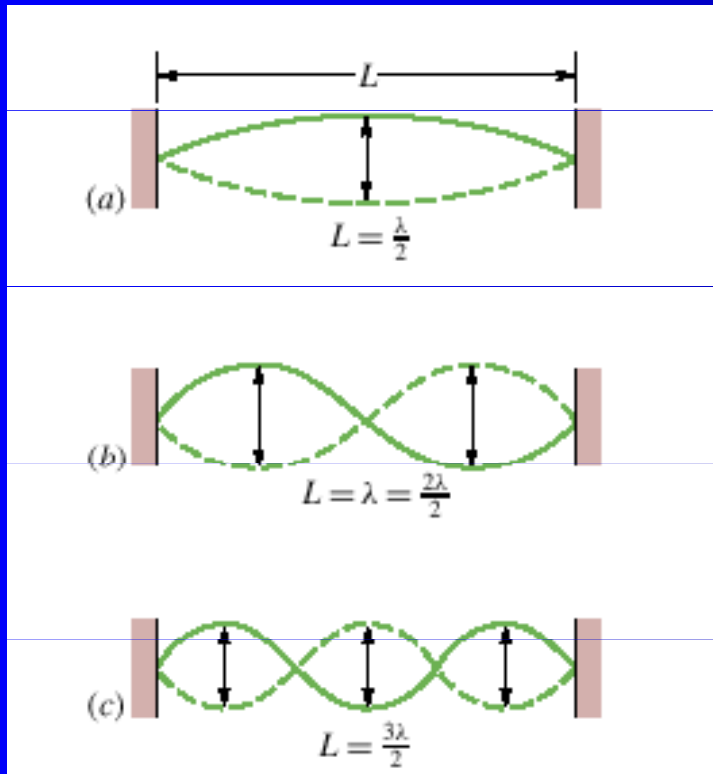


**Obr. 39.15** Princip rastrovacího tunelového mikroskopu (STM). Tři křemenné tyče vedou ostrý vodivý hrot těsně nad studovaným povrchem tak, že při rastrování udržují konstantní vzdálenost mezi hrotem a povrchem. Hrot tedy sleduje konturu povrchu. Záznam jeho pohybu vytvoří zobrazení jako je obr. 39.14.



# Zachycení mikročástice: jednorozměrná past

+ Analogie se stojatou vlnou na struně



$$L = \frac{n\lambda}{2}$$

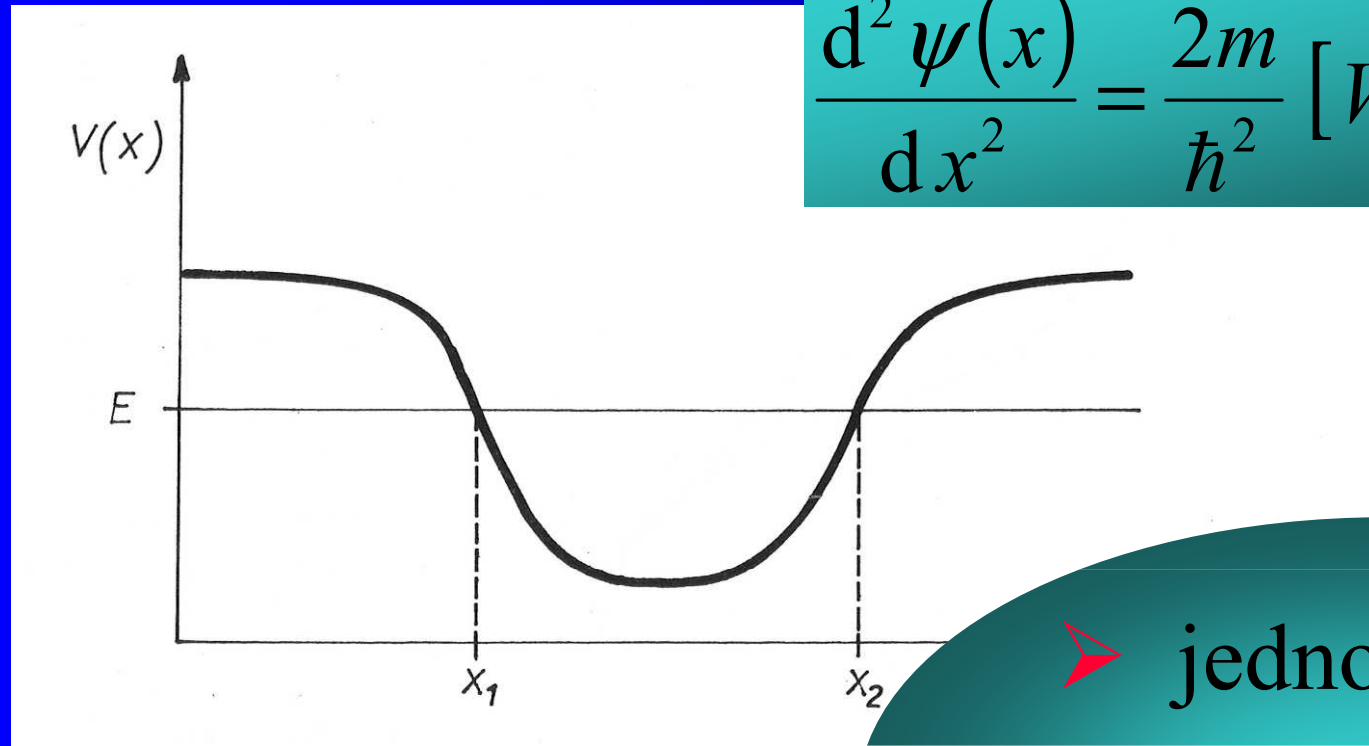
$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$E_n = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2$$

# Zachycení mikročástice: mikročástice v potenciálové jámě

+ Kvalitativní analýza řešení Schrödingerovy rovnice

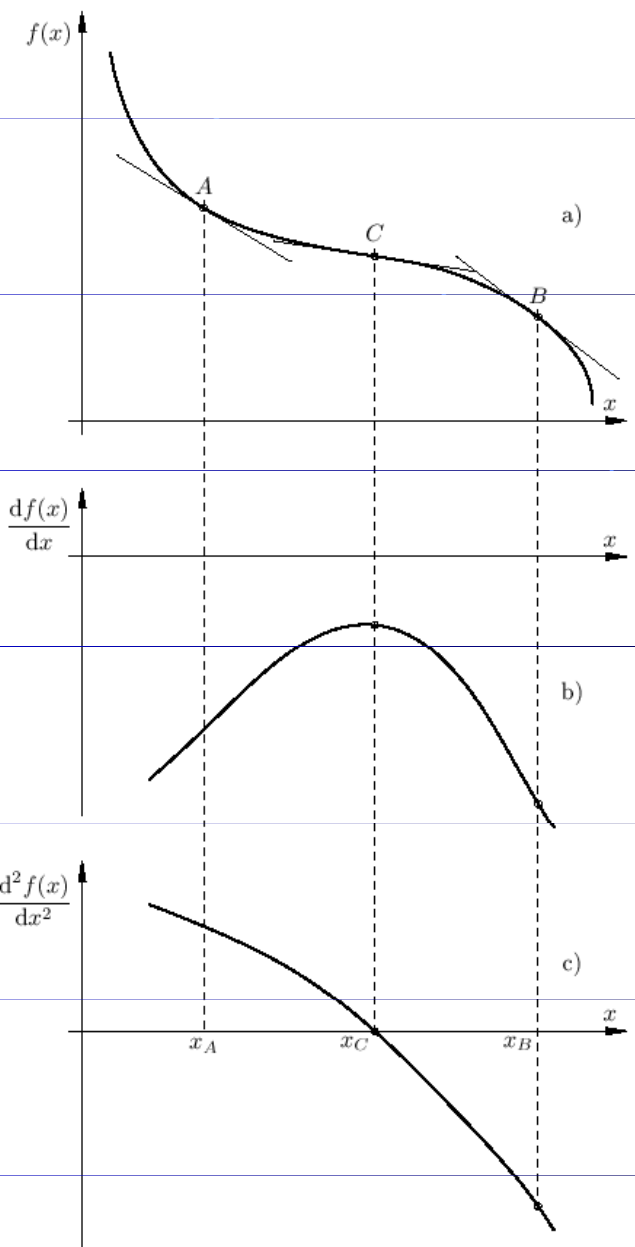


$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi(x)$$

$\psi(x)$  musí být

- jednoznačná
- hladká
- normovatelná

# Co znamená druhá derivace?



Obr. 3.15  
Průběh funkce  $f(x)$  (a), její první (b)  
a druhé derivace (c).

První derivace funkce určuje směrnici tečny ke grafu funkce (tj. sklon funkce).

Druhá derivace funkce určuje směrnici tečny ke grafu první derivace (tj. sklon první derivace).

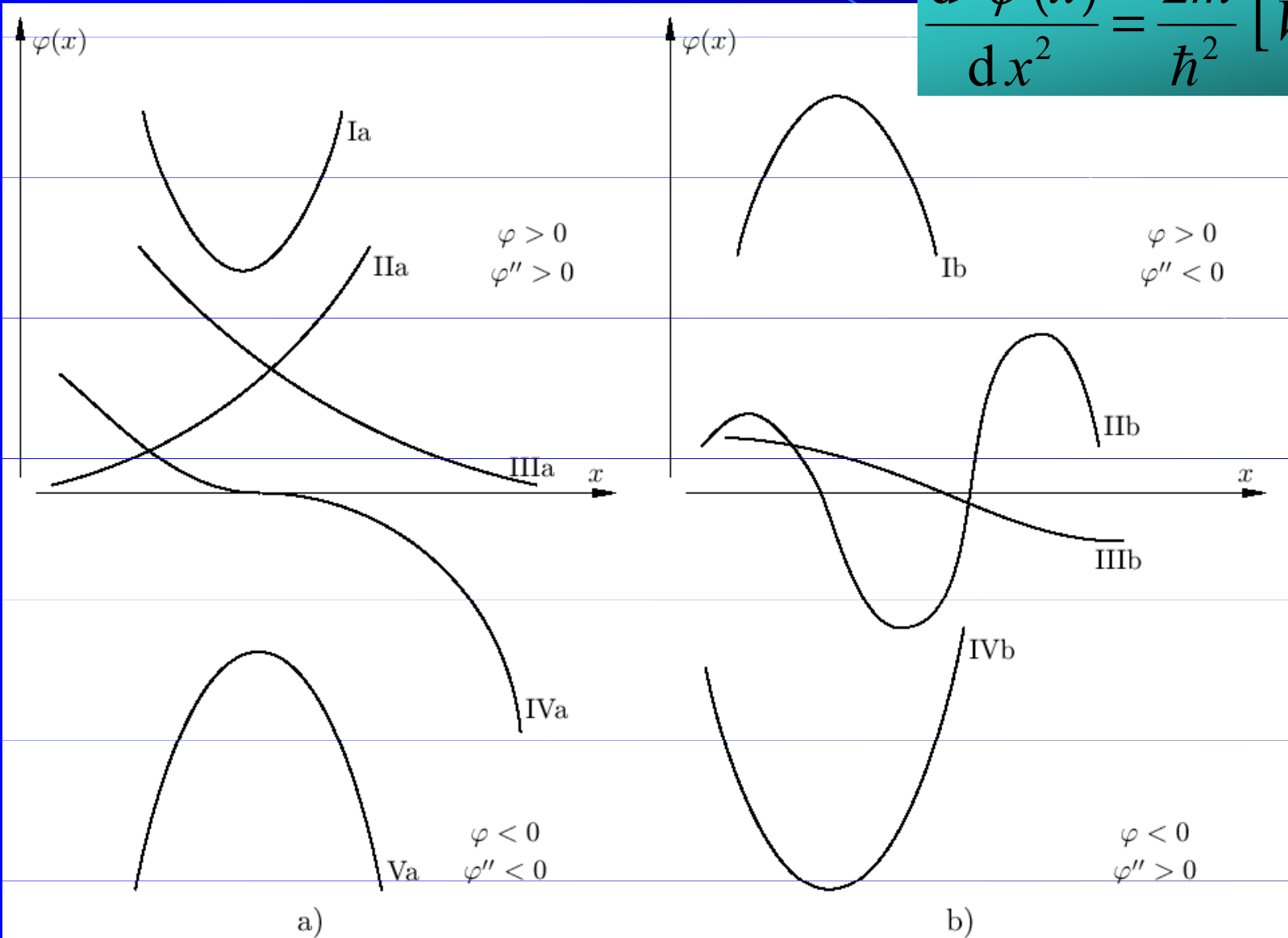
V bodě  $A$ , kde  $d^2f/dx^2 > 0$ , graf funkce leží nad tečnou.

V bodě  $B$ , kde  $d^2f/dx^2 < 0$ , graf funkce leží pod tečnou.

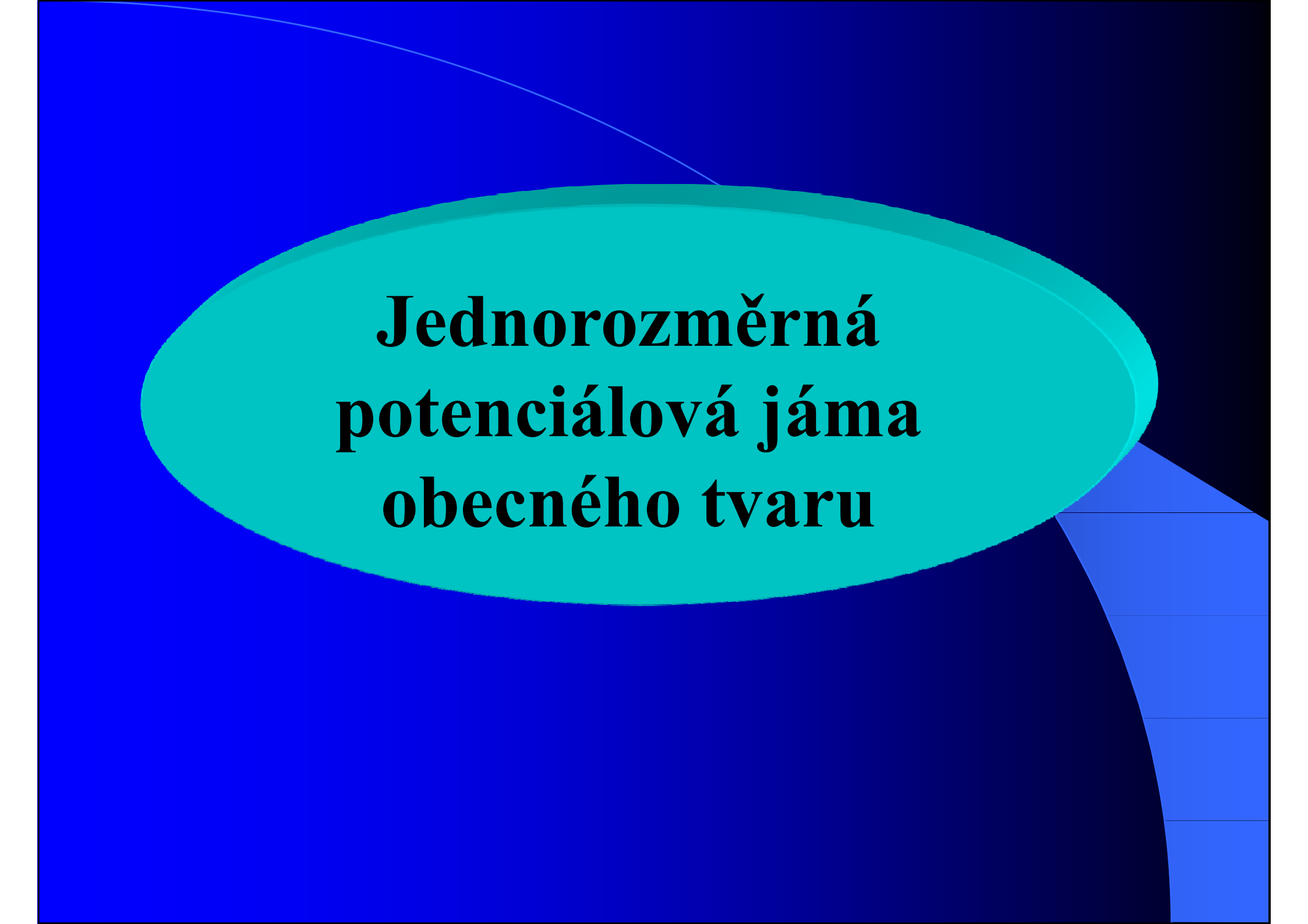
V inflexním bodě  $C$ , kde  $d^2f/dx^2 = 0$ , přechází funkce nad tečnou (nalevo od  $C$ ) ve funkci pod tečnou (napravo od  $C$ ).

# Možný průběh vlnové funkce

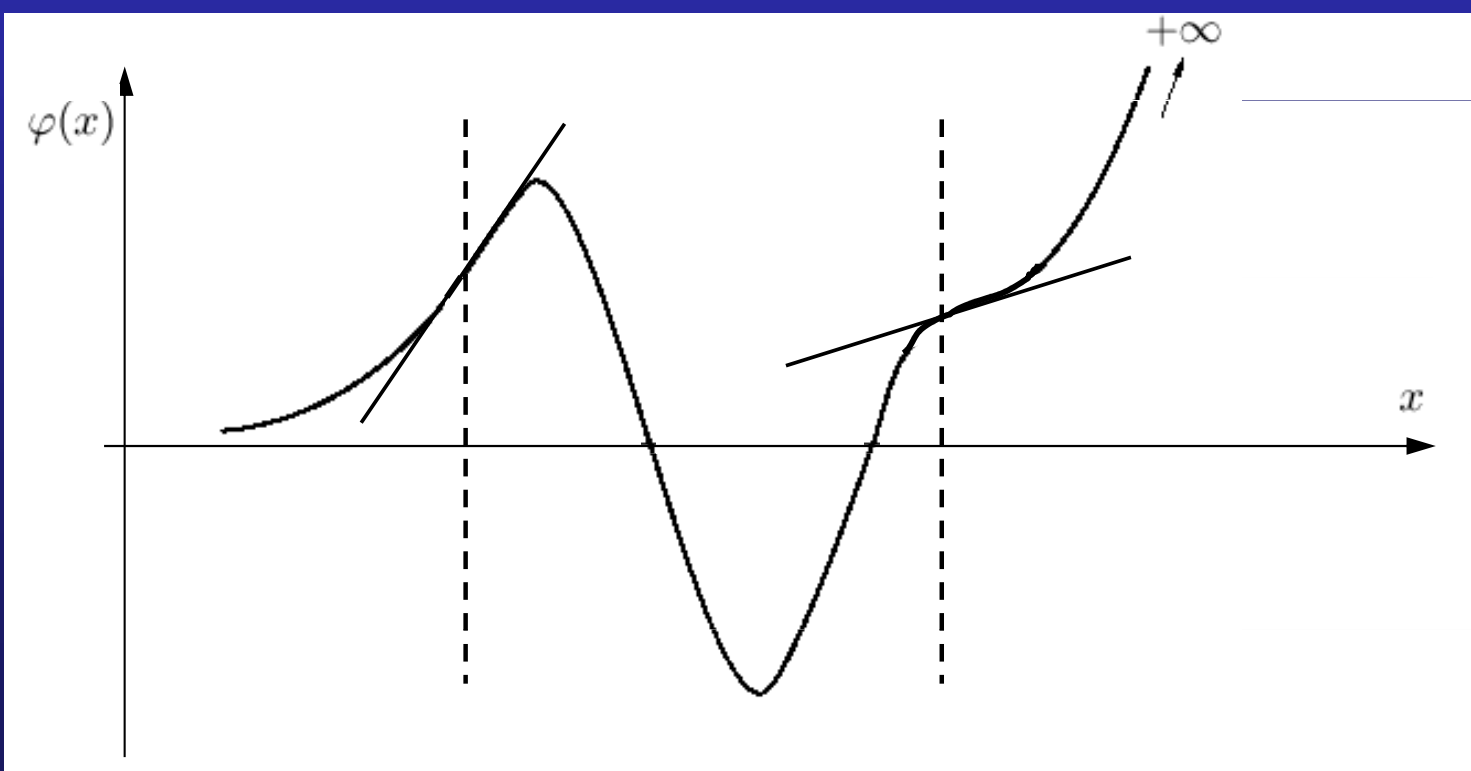
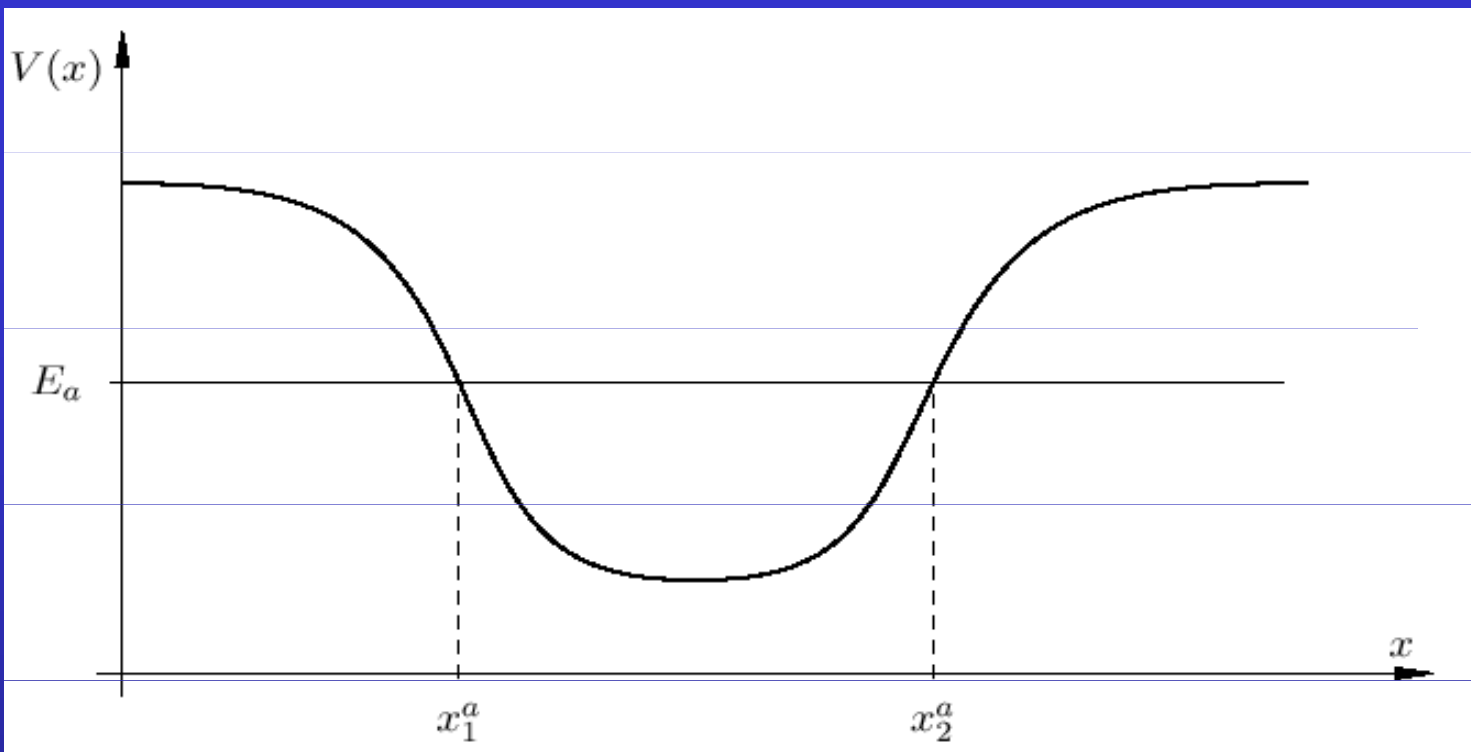
$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi(x)$$

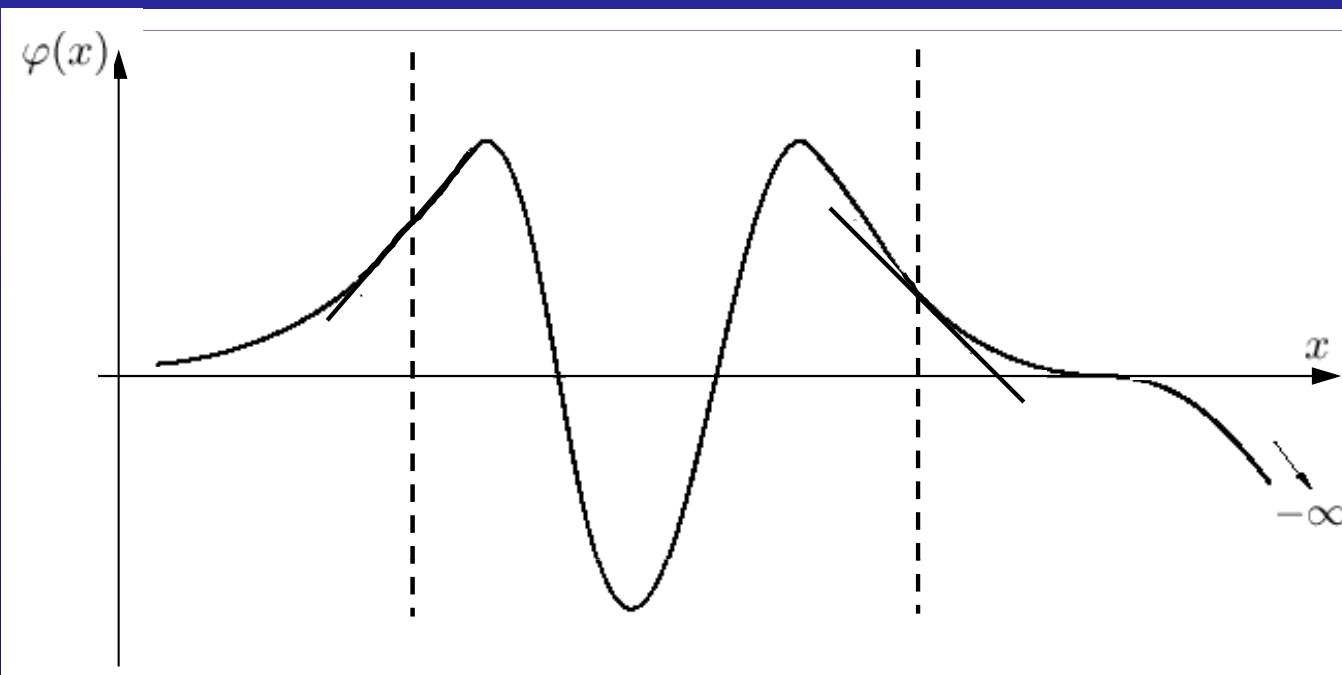
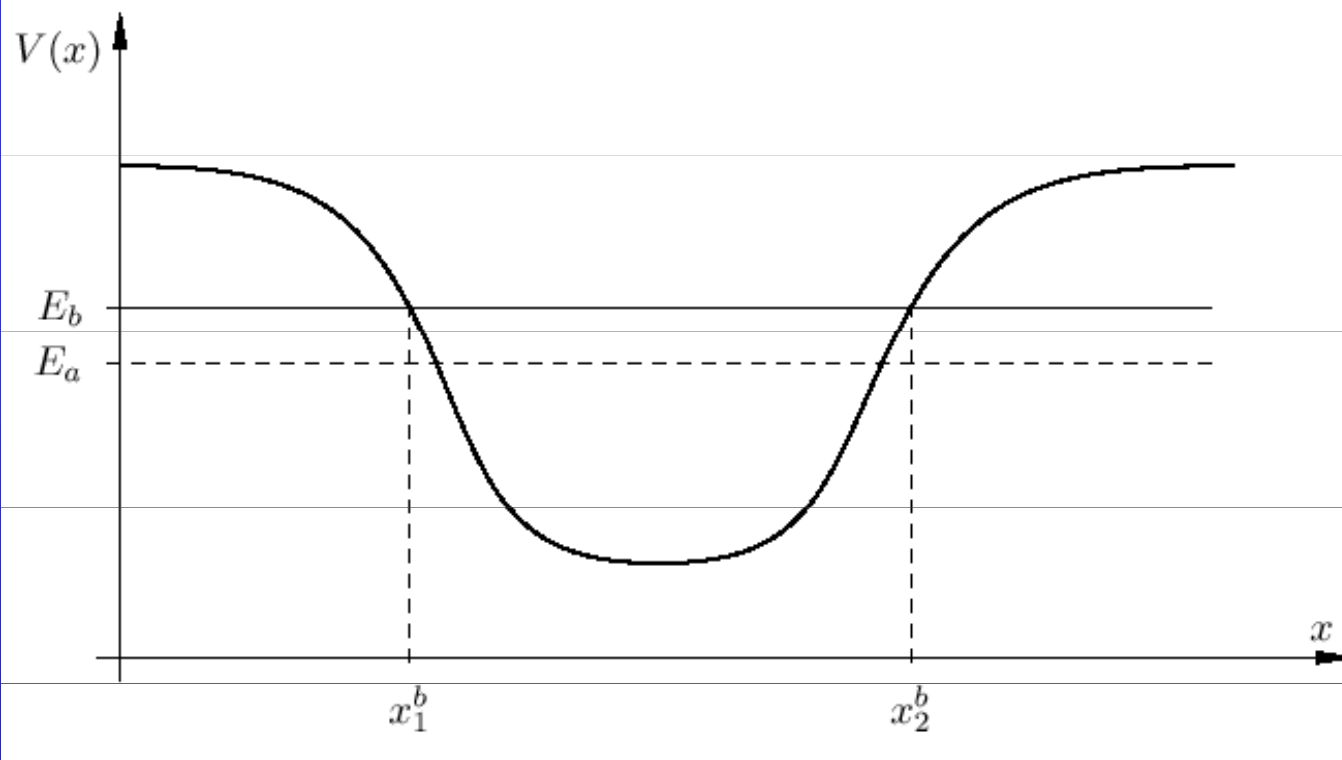


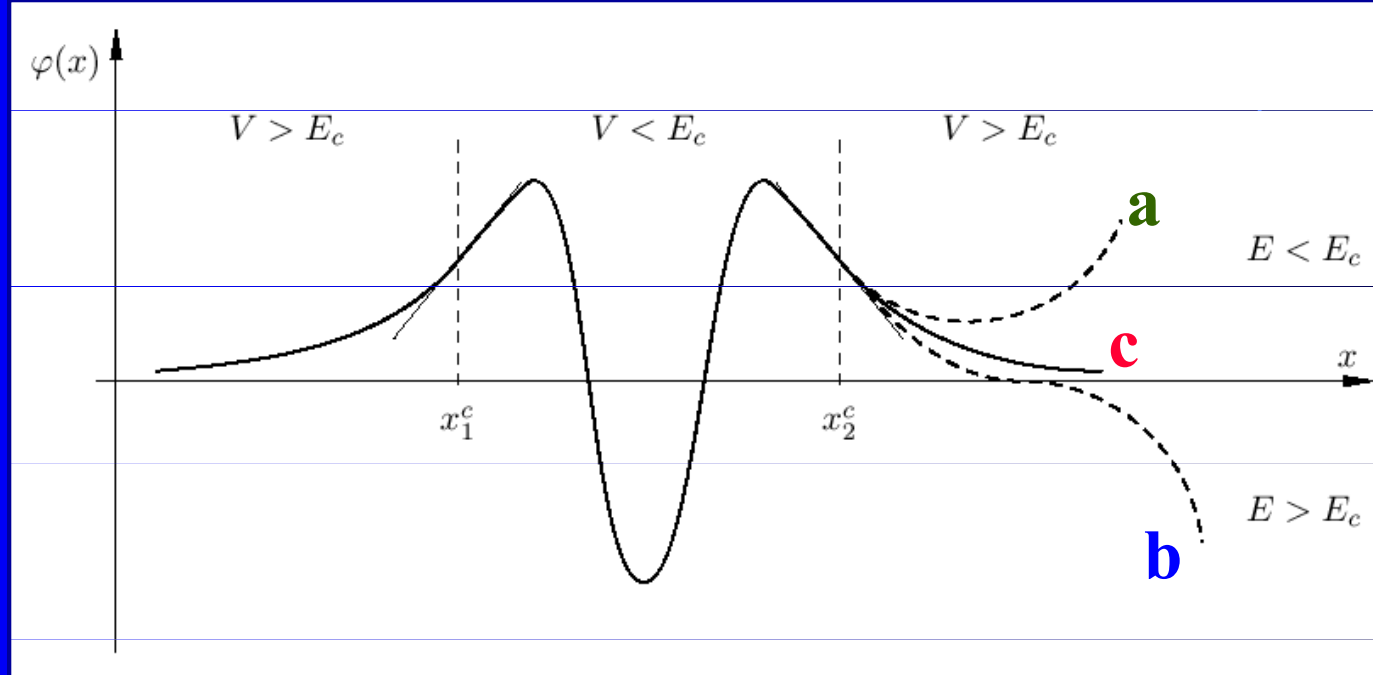
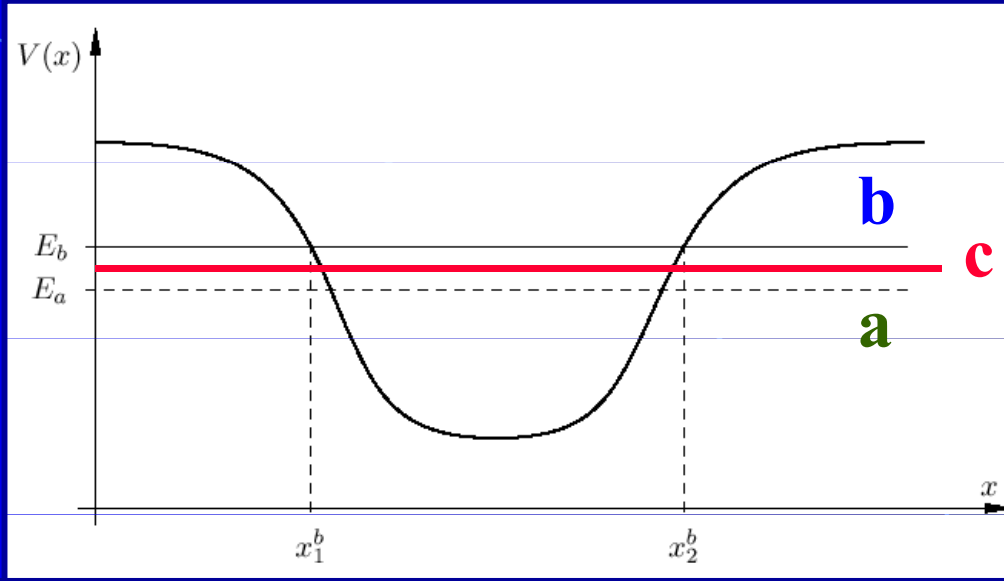
Obr. 3.16 Možný průběh vlnové funkce  $\varphi(x)$  při  $V > E$  (a) a  $V < E$  (b)



**Jednorozměrná  
potenciálová jáma  
obecného tvaru**

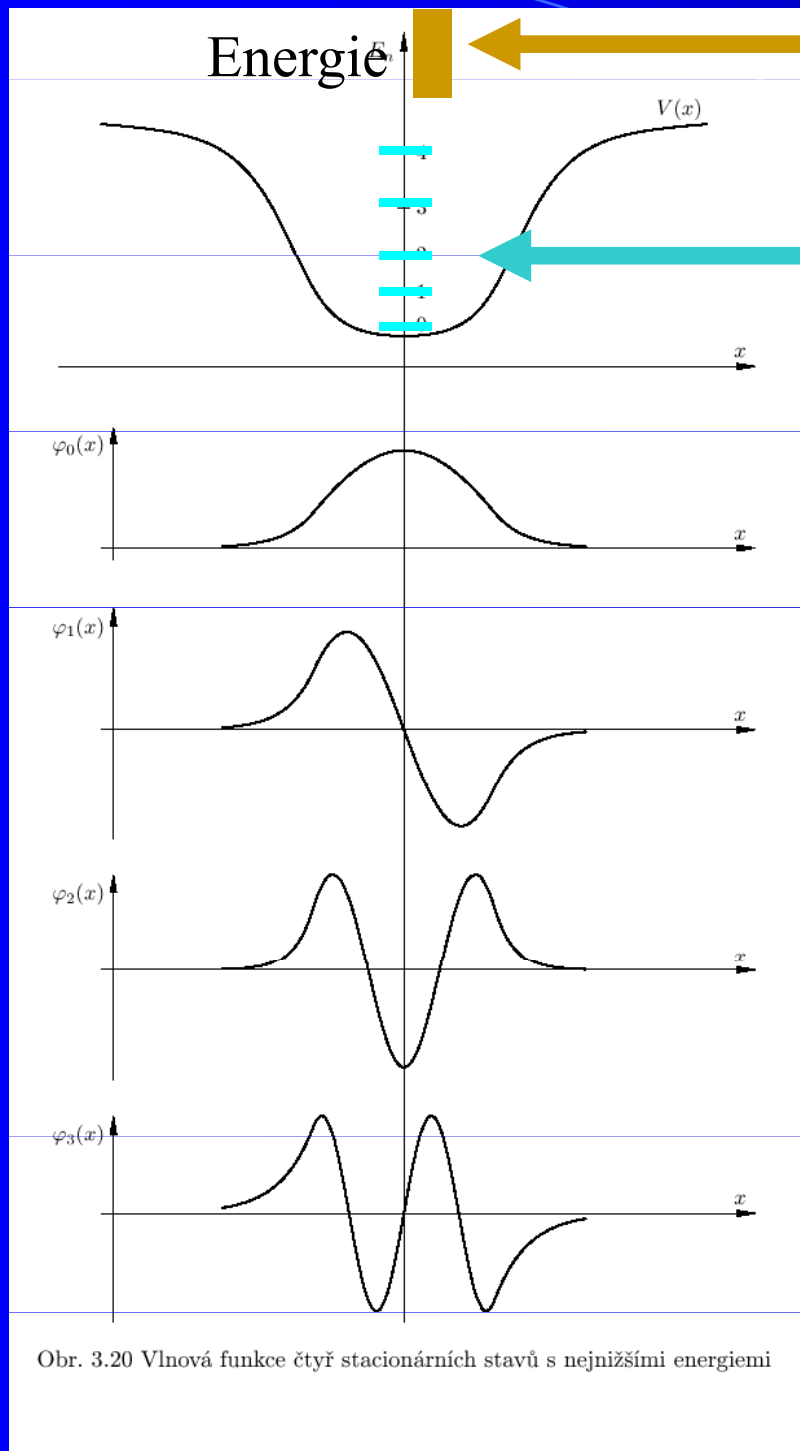






Existuje taková hodnota energie  $E_c$ , pro níž odpovídající řešení  $\psi(x)$  vyhovuje všem požadavkům kladeným na vlnovou funkci. Toto řešení je **výjimečné**.





Obr. 3.20 Vlnová funkce čtyř stacionárních stavů s nejnižšími energiemi

spojité energiové spektrum

diskrétní energiové spektrum

vázané stavy

Kvantování energie

# Zachycení mikročástice: mikročástice v potenciálové jámě

+ Analytické řešení Schrödingerovy rovnice

## Pravoúhlé potenciálové jámy

- Nekonečně hluboká jáma
- Jáma konečné hloubky



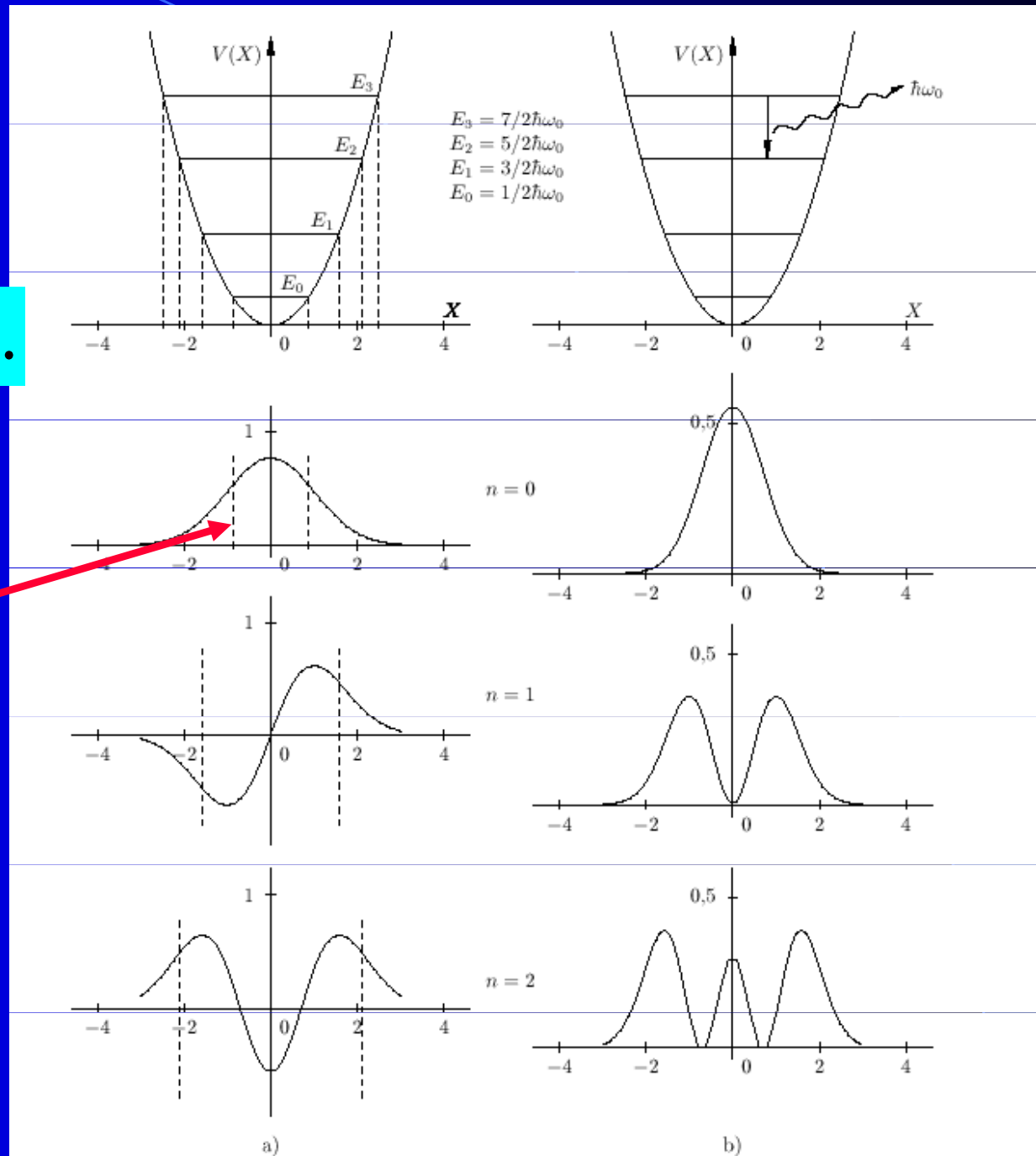
**Parabolická potenciálová jáma:**  
*harmonický oscilátor*

# Harmonický oscilátor

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

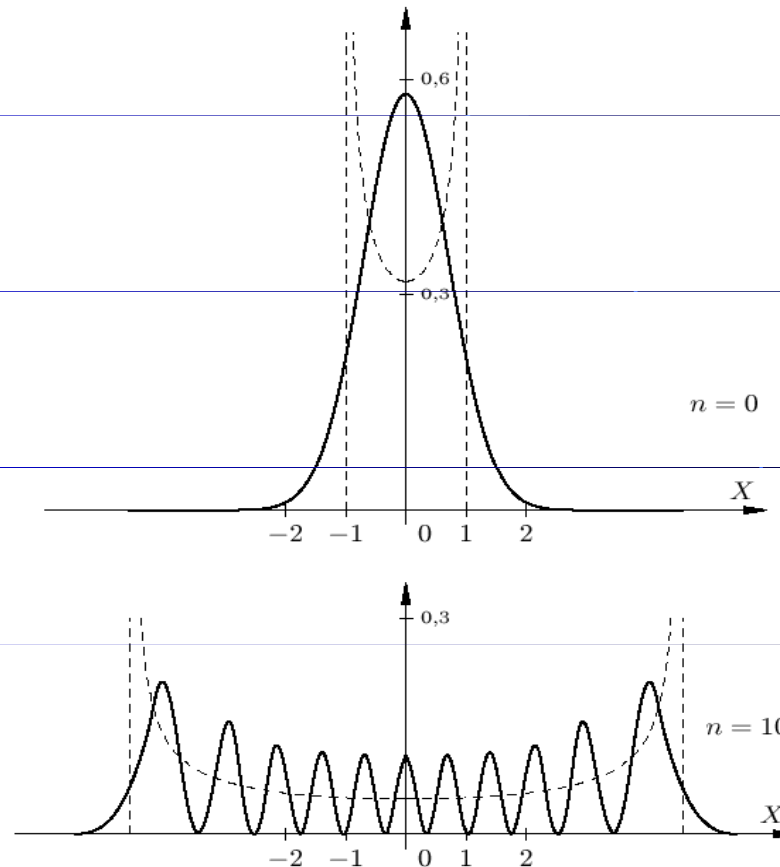
$$n = 0, 1, 2, \dots$$

prosakování



# Harmonický oscilátor

Hustota pravděpodobnosti  
v základním a desátém excitovaném stavu



**$n$  velké**

Princip korespondence

# Superpozice stacionárních stavů

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1 \psi_1(\mathbf{r}) e^{-i(E_1/\hbar)t} + c_2 \psi_2(\mathbf{r}) e^{-i(E_2/\hbar)t}$$

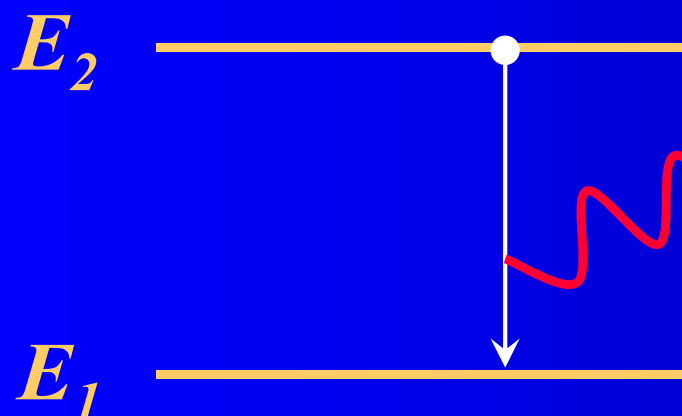
$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2} |\psi_2(\mathbf{r})|^2 +$$
$$\frac{1}{2} \left( \underbrace{\psi_1(\mathbf{r})}_{\text{1}} \underbrace{\psi_2^*(\mathbf{r})}_{\text{2}} e^{i \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t} + \underbrace{\psi_1^*(\mathbf{r})}_{\text{1}} \underbrace{\psi_2(\mathbf{r})}_{\text{2}} e^{-i \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t} \right)$$

The diagram shows two red circles labeled '1' and '2' with arrows pointing from '1' to '2' and from '2' to '1', indicating the interaction between the two states in the cross terms.

$$\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$$

# Kvantové přechody

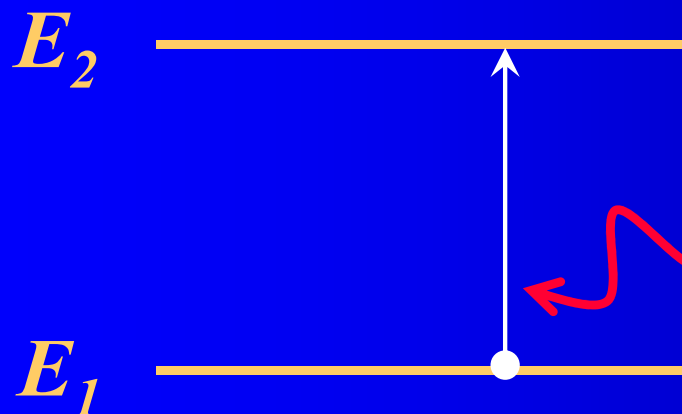
$$\hbar\omega = E_2 - E_1$$



$\hbar\omega$

emise

Pravidlo podobnosti přechodu

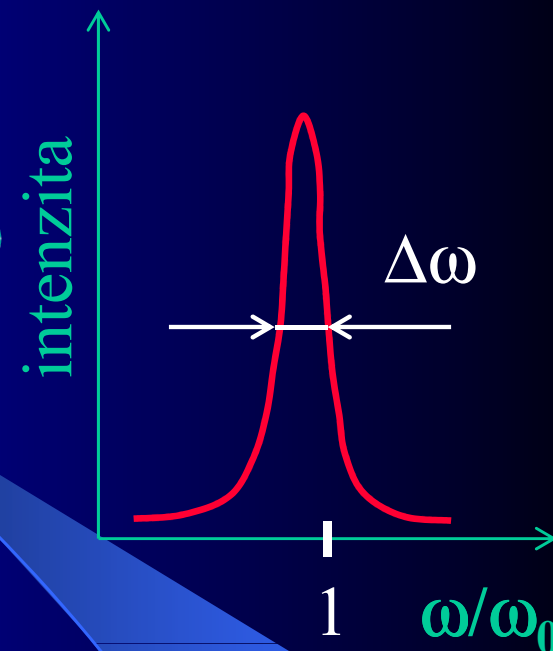


$\hbar\omega$

absorpce

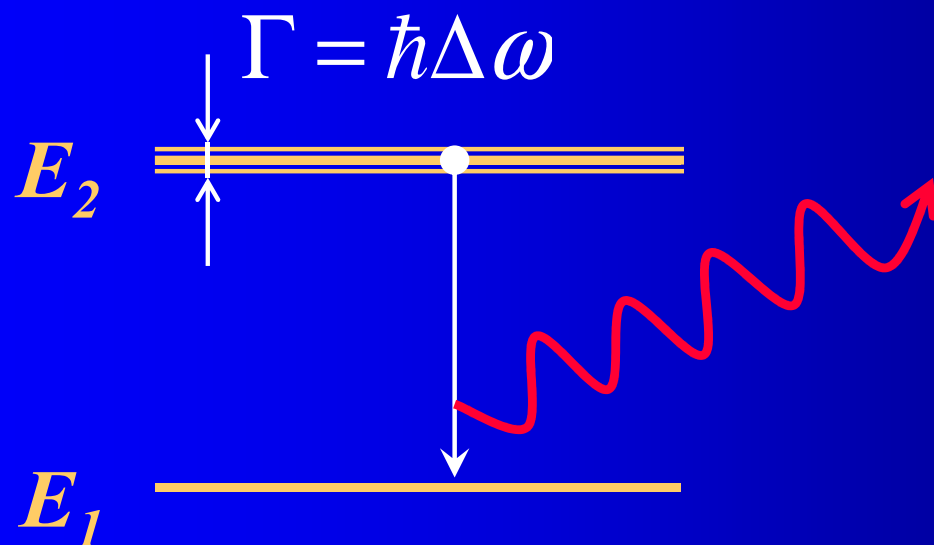
# Kvantové přechody

šířka spektrální čáry



$$\Delta E \Delta t \approx \hbar$$

$\tau$  doba života



# Elektronové pasti ve dvou a třech rozměrech

Kvantová hradba: pravoúhlá, kruhová

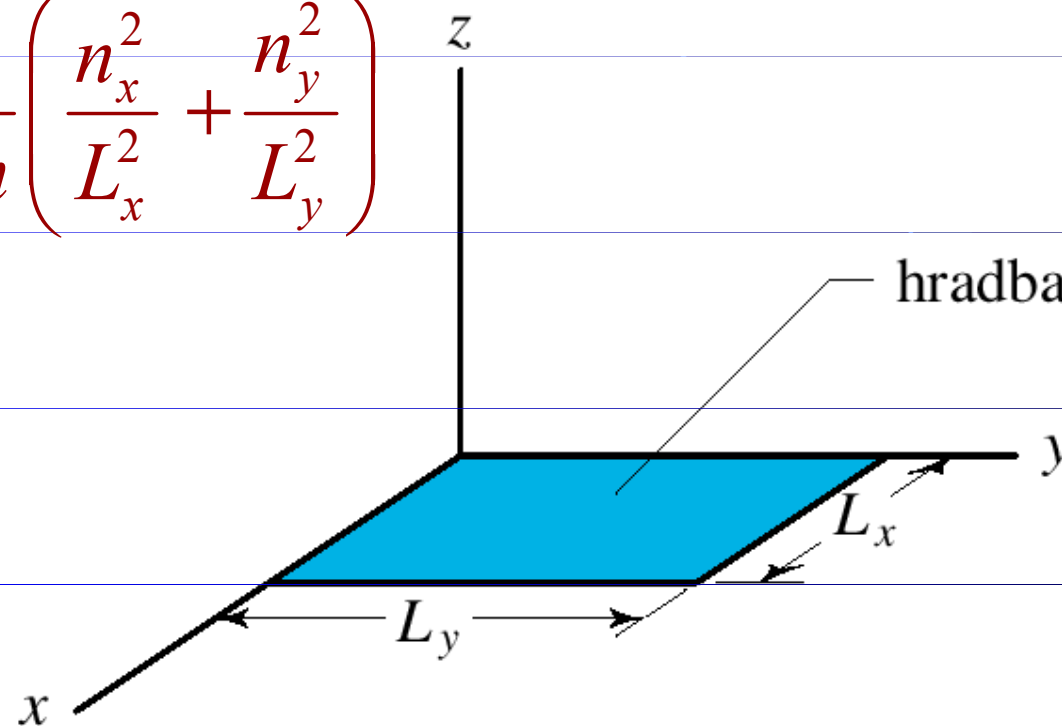
Trojrozměrná potenciálová jáma:

- pravoúhlá krabice
- atom vodíku



# Pravoúhlá hradba

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2}{8m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

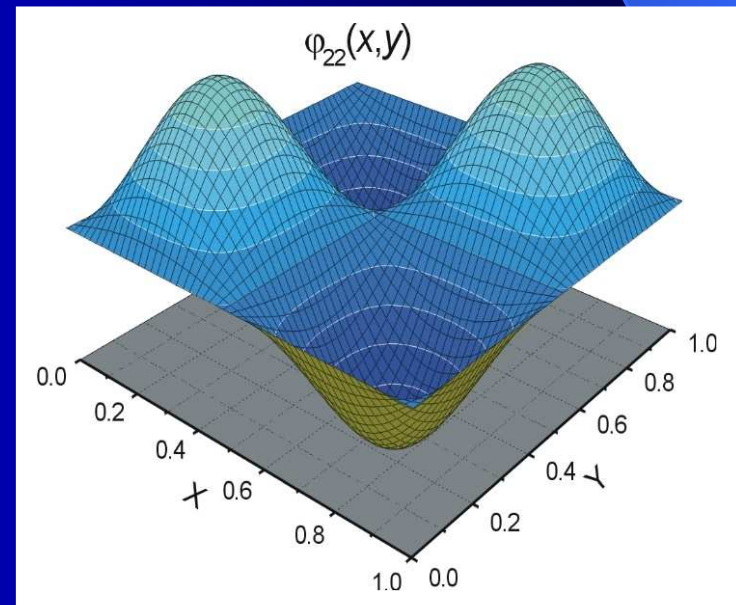
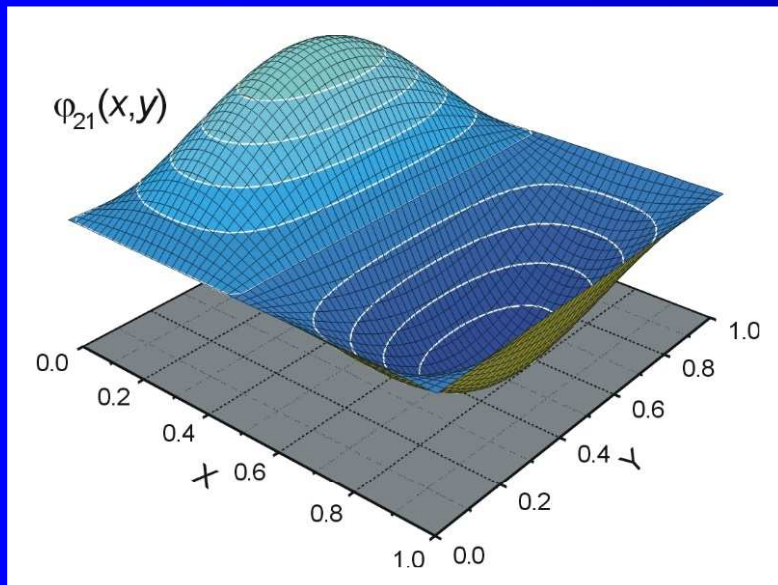
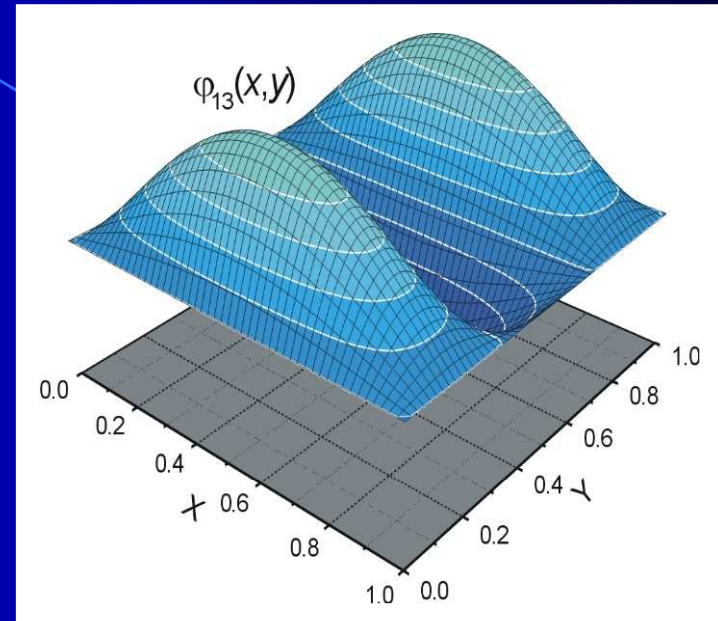
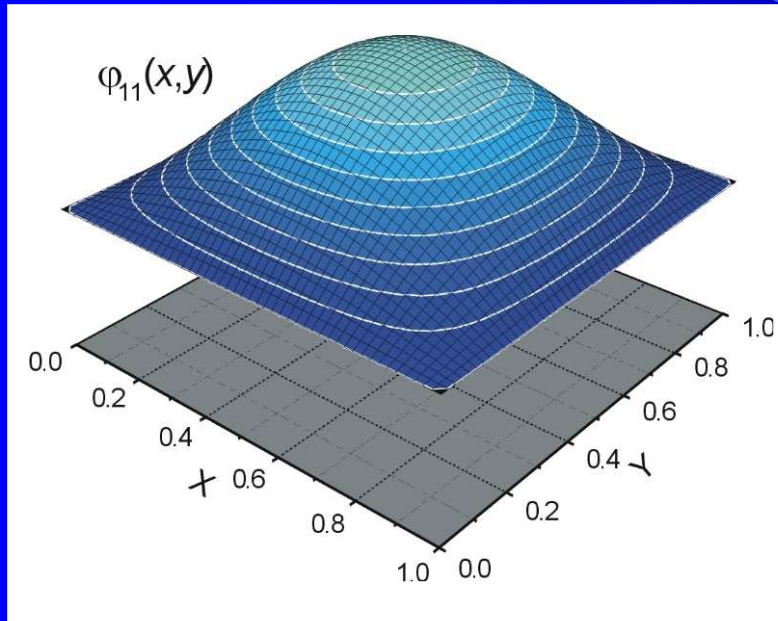


**Obr. 40.10** Pravoúhlá kvantová hradba o rozměrech  $L_x$  a  $L_y$  je dvojrozměrnou verzí jednorozměrné jámy z obr. 40.2.

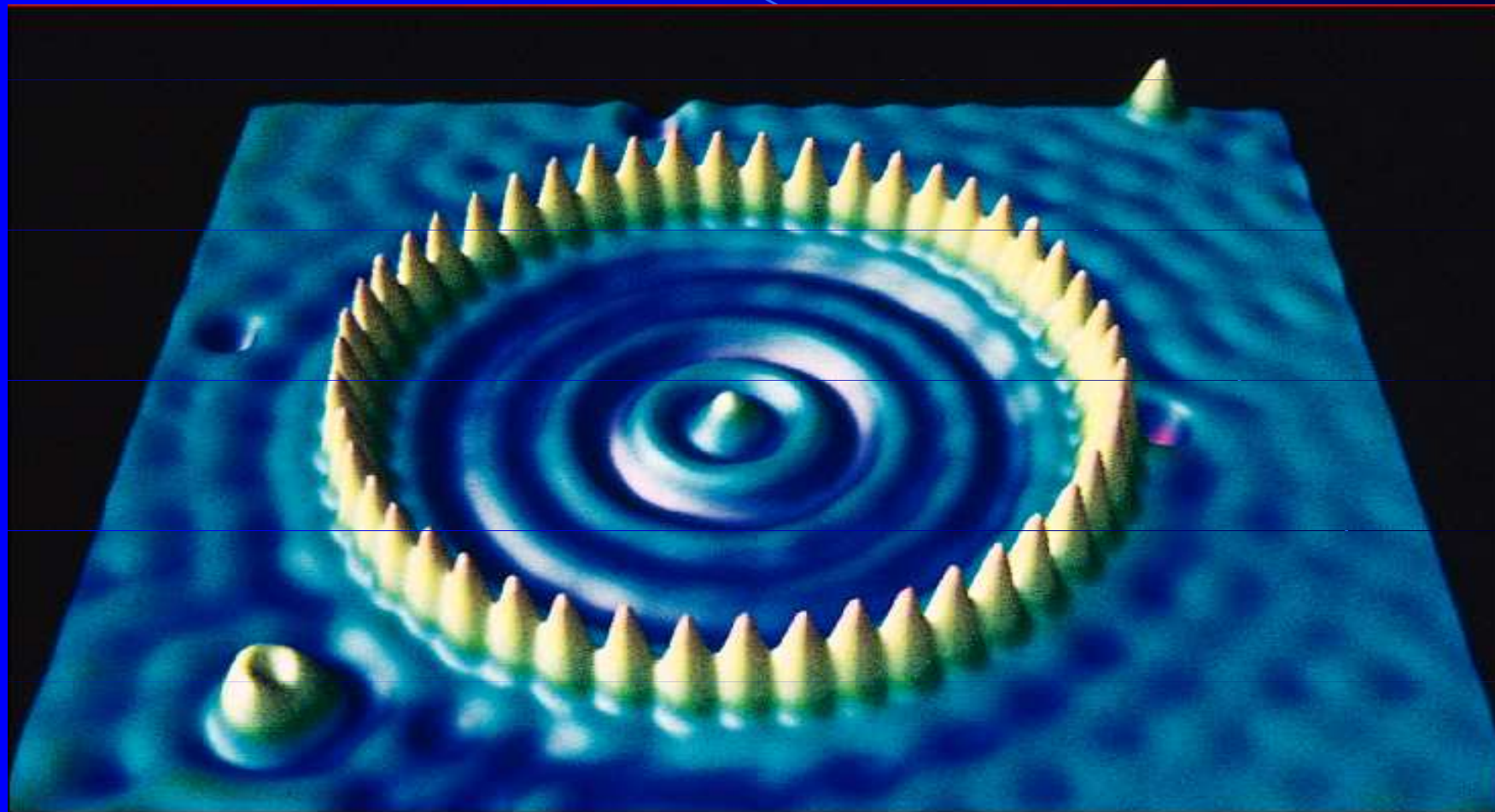
$$L_x = L_y$$

degenerace

# Příklady vlnových funkcí



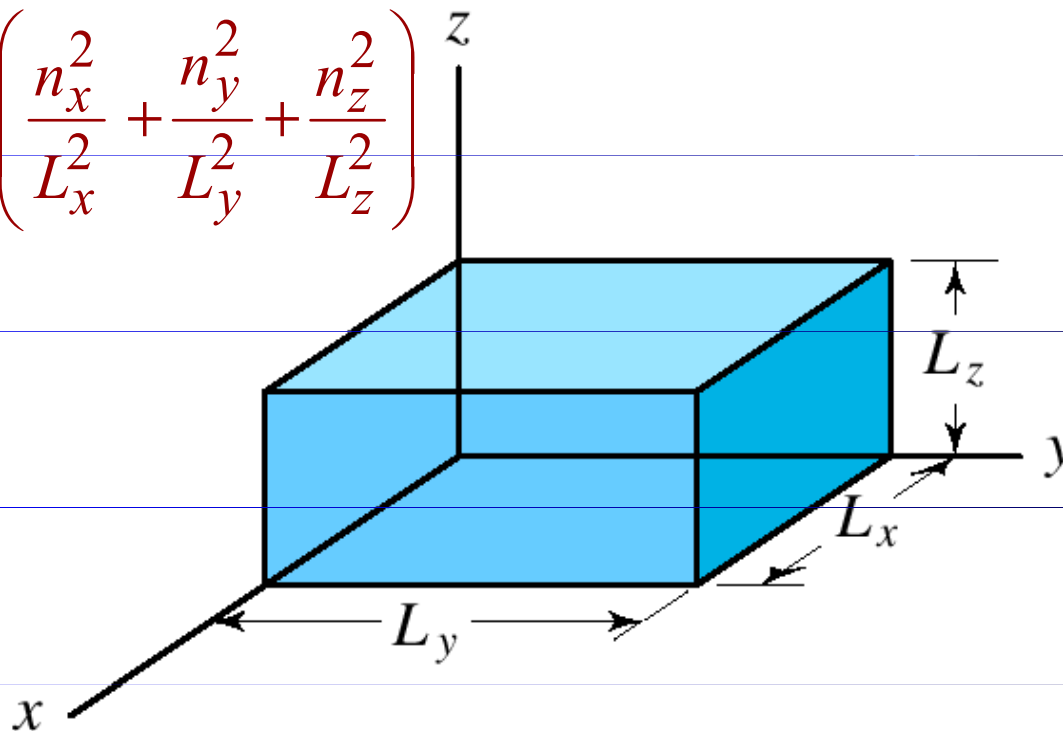
# Kruhová hradba



*Tento pozoruhodný počítačový obraz byl pořízený v roce 1993 ve výzkumném středisku firmy IBM v Almadenu v Kalifornii. Každý ze 48 píků na obvodu kruhu představuje polohu jednotlivých atomů železa na speciálně připraveném povrchu tvořeném atomy mědi. Tento kruh o průměru přibližně 14 nm se nazývá kvantová hradba. Jak byly tyto atomy uspořádány do kruhu? Co znamenají vlnky viditelné uvnitř hradby?*

# Trojrozměrná potenciálová jáma: *pravoúhlá krabice*

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{8m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$



**Obr. 40.11** Pravoúhlá krabice o rozměrech  $L_x$ ,  $L_y$  a  $L_z$  je trojrozměrnou verzí jednorozměrné jámy z obr. 40.2.

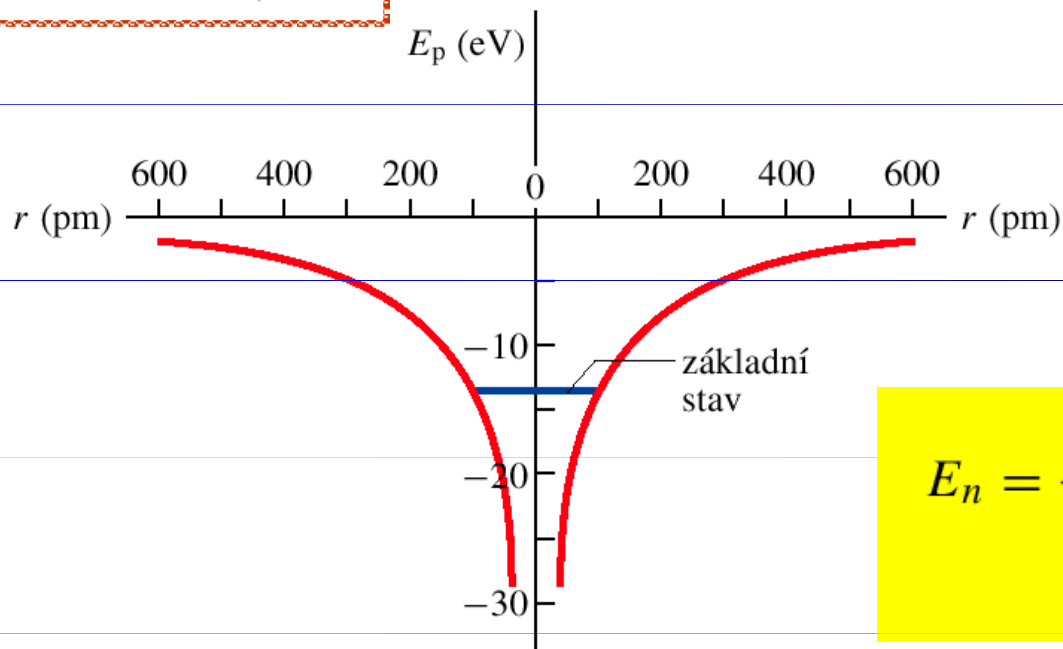
**Kvantové tečky**



# Trojrozměrná potenciálová jáma:

## *atom vodíku*

$$E_p = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(e)(-e)}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

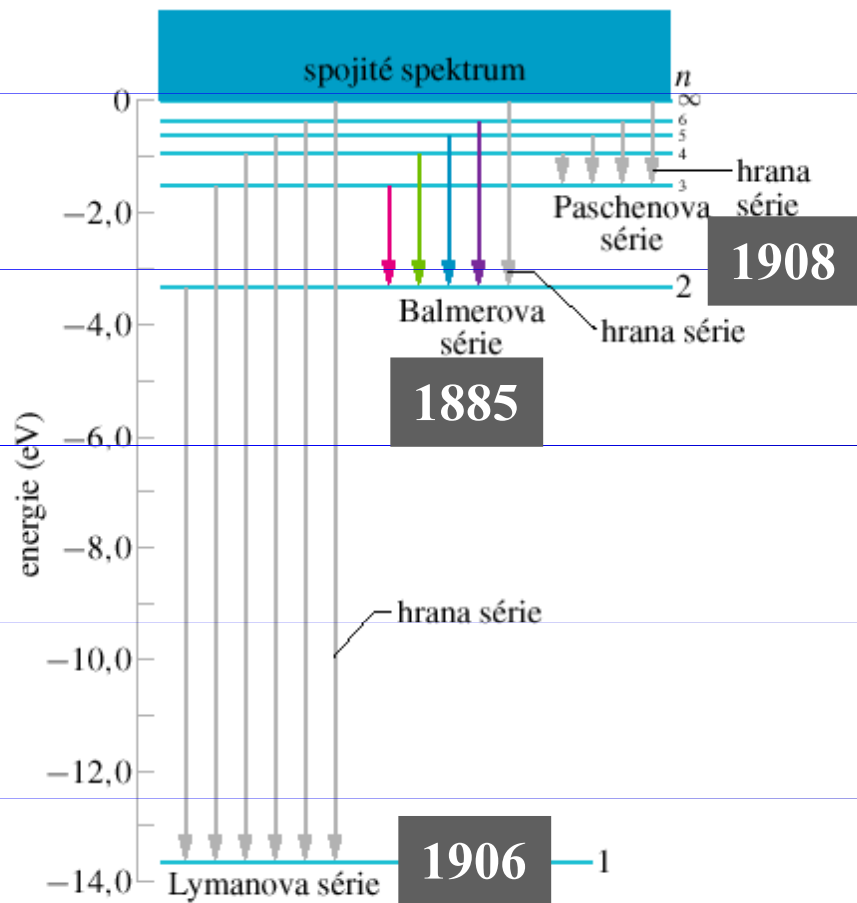


$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

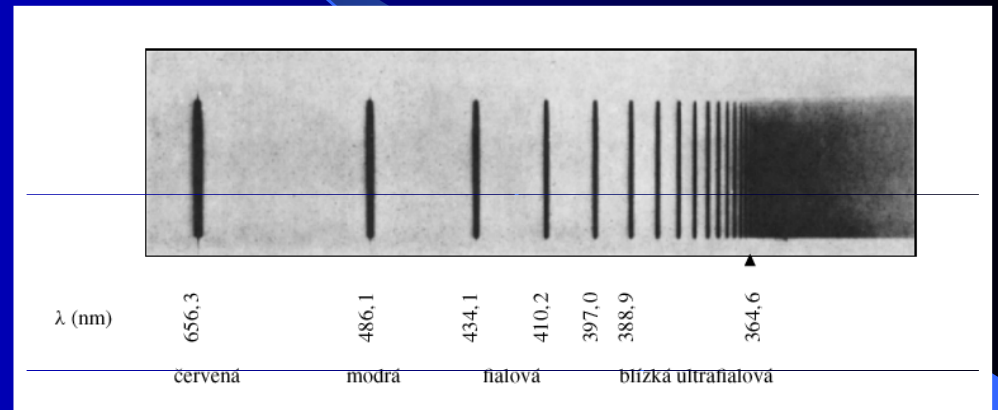
pro  $n = 1, 2, 3, \dots$

**Obr. 40.13** Závislost potenciální energie  $E_p$  atomu vodíku na vzdálenosti  $r$  mezi elektronem a jádrem umístěným v počátku souřadnic. Závislost je vynesena napravo i nalevo, aby byla naznačena trojrozměrná sféricky symetrická jáma, ve které je elektron „uvězněn“.

# spektrum atomu je čárové



**Obr. 40.14** Energiové hladiny atomu vodíku (rov. (40.18)) a přechody z vyšších do nižších energií, při kterých atom emituje světlo. Přechody jsou sdruženy do sérií, které jsou pojmenovány po vědci, který se studiem příslušné série zabýval.



**Obr. 40.15** Spektrální čáry

Balmerovy série atomu vodíku. Zatímco v obr. 40.14 jsou znázorněny čtyři přechody v rámci této série spolu s hranou série, zde je vidět asi tucet čar série; povšimněte si, že spektrální čáry jsou si tím bližší, čím více se blíží k hraně série, označené trojúhelníkem.

# Vlnová funkce elektronu v atomu vodíku

$$\psi(r, \theta, \varphi)$$

=

$$\psi_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Zachovává se:

- energie
- moment hybnosti

Pohyb v centrálním poli

## Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku

Normovaná vlnová funkce základního stavu atomu vodíku, získaná řešením trojrozměrné Schrödingerovy rovnice, má tvar

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad (40.19)$$

kde  $a$  je konstanta, tzv. *Bohrův poloměr*, s rozměrem *délky*; může sloužit jako „efektivní“ poloměr atomu vodíku. Ukazuje se, že je rovněž vhodnou jednotkou délky i v jiných případech ve světě atomů. Jeho hodnota je

$$a = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 52,9 \text{ pm}. \quad (40.20)$$

Podobně jako je tomu i u ostatních vlnových funkcí, nemá funkce  $\psi(r)$  v rov. (40.19) zřejmý fyzikální význam; funkce  $\psi^2(r)$  jej již má. Výraz  $\psi^2(r) dV$  odpovídá pravděpodobnosti, že se elektron bude nacházet v daném infinitezimálním objemovém elementu  $dV$ . Poněvadž  $\psi^2(r)$  závisí pouze na  $r$ , má smysl zvolit za element  $dV$  objem mezi dvěma soustřednými kulovými plochami, jejichž poloměry jsou  $r$  a  $r + dr$ . Objemový element lze vyjádřit ve tvaru

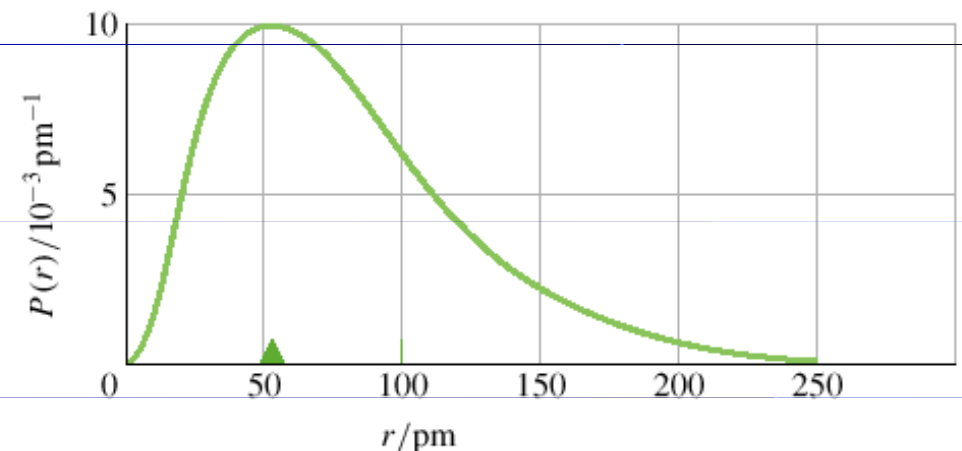
$$dV = (4\pi r^2) dr, \quad (40.21)$$

kde  $4\pi r^2$  je obsah vnitřní kulové plochy a  $dr$  je radiální vzdálenost mezi oběma plochami. Pak

$$\psi^2(r) dV = \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr. \quad (40.22)$$

Nyní definujme **radiální hustotu pravděpodobnosti**  $P(r)$  tak, aby výraz  $P(r) dr$  udával pravděpodobnost, že se elektron nachází v objemovém elementu, definovaném rov. (40.21). Jinými slovy, definujeme  $P(r)$  tak, aby  $P(r) dr = \psi^2(r) dV$ . Pak z rov. (40.22) dostaneme

$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} \quad (\text{radiální hustota pravděpodobnosti pro základní stav atomu vodíku}). \quad (40.23)$$



**Obr. 40.16** Závislost radiální hustoty pravděpodobnosti  $P(r)$  základního stavu atomu vodíku na vzdálenosti  $r$  od jádra. Trojúhelníková značka je umístěna ve vzdálenosti jednoho Bohrova poloměru od počátku, který odpovídá středu atomu.



# K mikrosvětlu patří

- vlna – částice  
*dualismus*  
*komplementarita*
- pravděpodobnost
- kvantování
- relace neurčitosti
- anihilace / křeace (*relativita*)
- princip korespondence

М  
Ш  
Д  
Р  
Т  
М  
Н  
З  
Н  
Н