

Fyzika pro chemiky II

elektromagnetické vlny a optika základy moderní fyziky

Václav Holý

*Katedra fyziky elektronových struktur MFF UK Praha,
Ústav fyziky kondenzovaných látek PŘF MU Brno*

holy@physics.muni.cz, www.physics.muni.cz/~holy

I. Elektromagnetické vlny a optika

- I.1. Elektromagnetické vlny
- I.2. Polarizace vlnění
- I.3. Odraz a lom světla
- I.4. Optické zobrazení – zrcadla
- I.5. Optické zobrazení – čočky
- I.6. Soustavy dvou čoček
- I.7. Základy fyzikální optiky – interference vlnění
- I.8. Interference vln na tenké vrstvě
- I.9. Difrakce na otvoru
- I.10. Difrakce na mřížce

II. Elementy kvantové fyziky

- II.1. Kvantový popis světla
- II.2. Bohrov model atomu
- II.3. De Broglieho vlny
- II.4. Základy kvantové mechaniky v 1 dimenzi
- II.5. Základy formální kvantové teorie
- II.6. Základy kvantové mechaniky ve 3 dimenzích
- II.7. Atomy

III. Základy fyziky tuhých látek

III.1. Vazby v tuhých látkách

III.2. Elektrony v kovu

III.3. Pásová teorie

III.4. Polovodičové prvky

III.5. Magnetické vlastnosti tuhých látek

III.6. Supravodivost

Literatura

D. Halliday, R. Resnik, J. Walker, Fyzika, VUTIUM Brno, 2000.

R. A. Serway, C. J. Moses, C. A. Moyer, Modern Physics, Thomson Learning 1997

C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, J. Wiley, New York 1996 (existuje i český překlad)

I. ELEKTROMAGNETICKÉ VLNY A OPTIKA

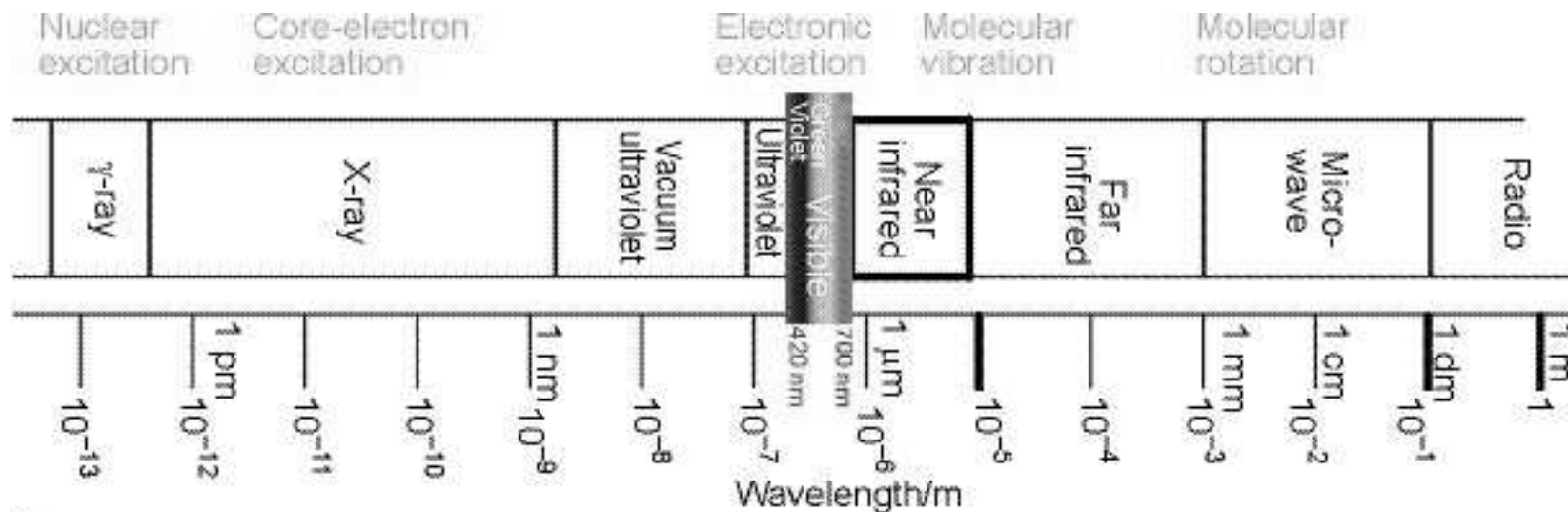
I.1. Elektromagnetické vlny

Historie: Teorie elektromagnetismu ((J.C. Maxwell 1865-1873) – světlo je elektromagnetické vlnění, elektromagnetické vlnění má vlastnosti analogické světlu – odraz elektromagnetického vlnění, lom na rozhraní atd.

Experimentální ověření existence elektromagnetických vln, jejich odrazu a lomu – Heinrich Hertz (1857-1894)

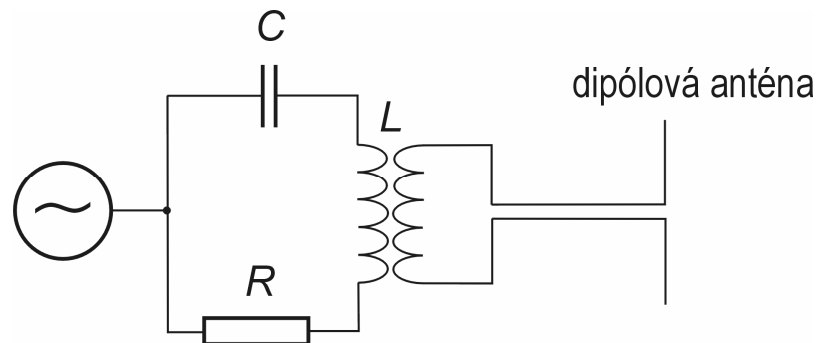


James Clerk Maxwell 1831-1879



Postupná elektromagnetická vlna

Elektromagnetická vlna vzniká nerovnoměrným pohybem nabitých částic – např. elektronů v anténě



Elektrické a magnetické pole se šíří současně; změna elektrického pole vyvolává pole magnetické a naopak.

Maxwellovy rovnice:

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \text{ rot } \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}, \\ \text{div } \mathbf{D} &= \rho, \text{ div } \mathbf{B} = 0 \end{aligned} \quad (1.1)$$

Materiálové vztahy:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.2)$$

Důležité vlastnosti elektromagnetického pole ve vakuu (platí přibližně i ve většině materiálů)

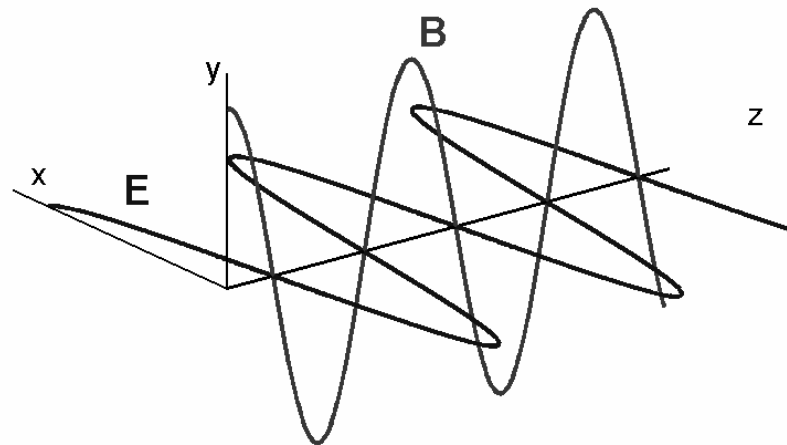
- elektromagnetické vlnění je příčné, tj. vektory \mathbf{E} a \mathbf{B} jsou kolmé na směr šíření vlny
- Vektory \mathbf{E} a \mathbf{B} jsou na sebe kolmé
- V případě monochromatického (harmonického) vlnění mají vlny \mathbf{E} a \mathbf{B} stejnou frekvenci a jsou ve fázi

Předpokládejme například, že vlnění se šíří podél osy z a vlna \mathbf{E} je polarizována v rovině xz :

$$\mathbf{E} = E_0 \operatorname{Re}\left[e^{-i(\omega t - kz)}\right], \quad \mathbf{E}_0 = (E_0, 0, 0) \quad (1.3)$$

Vlna \mathbf{B} je potom

$$\mathbf{B} = B_0 \operatorname{Re}\left[e^{-i(\omega t - kz)}\right], \quad \mathbf{B}_0 = (0, E_0 \sqrt{\mu_0 \epsilon_0}, 0) \quad (1.4)$$



Fáze postupného monochromatického vlnění je $\varphi = \omega t - kz$

Místo konstantní fáze se pohybuje fázovou rychlostí

$$v = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} \quad (1.5)$$

Vlnoplocha je geometrické místo konstantní fáze. Vlnoplocha postupné vlny se posouvá fázovou rychlostí v . Rovinná vlna má rovinnou vlnoplochu kolmou na vlnový vektor k . Rovnice rovinné vlny je

$$\mathbf{E} = E_0 \operatorname{Re} \left[e^{-i(\omega t - k \cdot r)} \right] \quad (1.6)$$

skalární součin $k \cdot r$

Elektromagnetická vlna je příčná, proto $\mathbf{E} \cdot \mathbf{k} = 0$

Kulová vlna má kulovou vlnoplochu, jejíž poloměr se zvětšuje rychlostí v . Rovnice kulové vlny šířící se z bodového zdroje v počátku souřadnic je

$$\mathbf{E} = \frac{A}{r} \operatorname{Re} \left[e^{-i(\omega t - kr)} \right] \quad (1.7)$$

součin velikostí $k \cdot r$

V dalším vynecháme symbol Re . Intenzita vlnění je pak dána vztahem

$$I = \left| \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* \right| \quad (1.8)$$

Z Maxwellových rovnic pro vakuum ($\mathbf{j} = 0$, $\rho = 0$) plyne **vlnová rovnice** pro elektromagnetické vlnění

$$\Delta \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.9)$$

Fázová rychlost elektromagnetického vlnění ve vakuu je fundamentální fyzikální konstanta:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \approx 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad (1.10)$$

Postupná elektromagnetická vlna přenáší energii. Hustoty toku energie (tj. přenesený výkon jednotkovou plochou kolmo na směr šíření vlnění) je dán Poyntingovým vektorem

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (1.11)$$

jehož směr určuje směr šíření vlnění

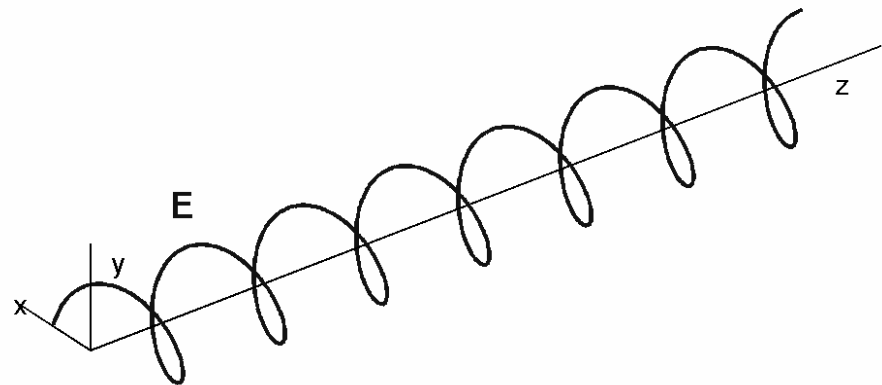
1.2. Polarizace vlnění

Polarizační rovina je určena vektory \mathbf{E} a \mathbf{k} .

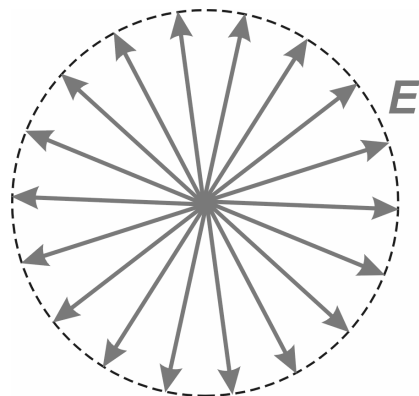
Lineárně polarizované elektromagnetické vlnění

– směr polarizační roviny se nemění v prostoru ani v čase (lasery)

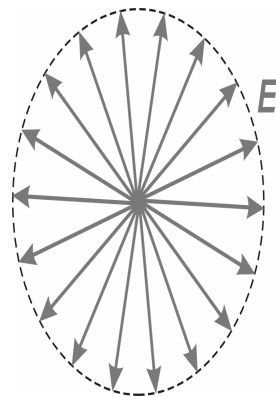
Kruhově polarizované vlnění – polarizační rovina se stáčí v prostoru i v čase:



Nepolarizované vlnění – orientace polarizační roviny je náhodná a všechny orientace jsou stejně pravděpodobné (většina zdrojů světla – žárovka, slunce) – nezaměňovat s kruhově polarizovaným vlněním!!



Částečně polarizované vlnění – některý směr polarizační roviny je pravděpodobnější než ostatní (nezaměňovat s elipticky polarizovaným vlněním!!)



Polarizační filtry – látky s dlouhými lineárními molekulami – v ideálním případě propouštějí jen jeden směr polarizace dopadajícího světla.

Propustnost polarizačního filtru pro lineárně polarizované světlo je funkcí úhlu Θ mezi polarizační rovinou a směrem propouštěné polarizace

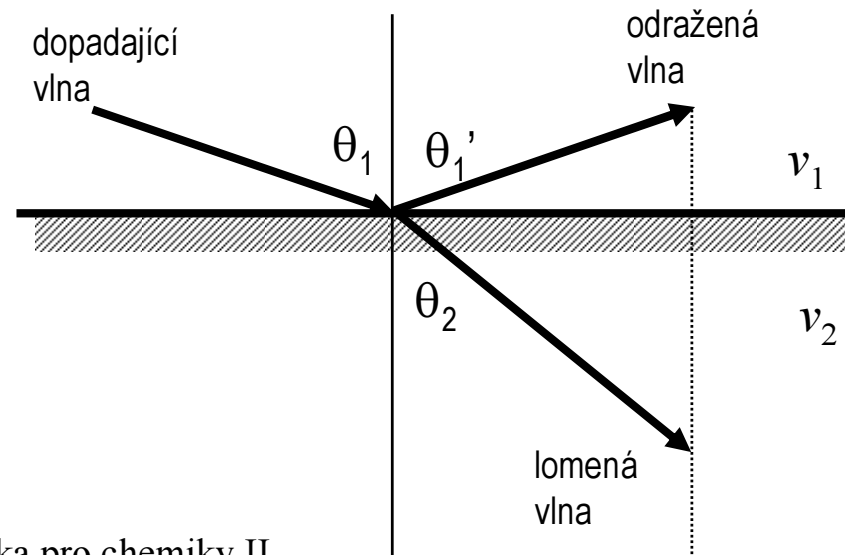
$$I = I_0 \cos(\Theta) \quad (1.12)$$

V anizotropním prostředí je fázová rychlost světla závislá na polarizaci – **dvojlom světla**. Dvojlom se pozoruje ve všech monokrystalech (propustných pro světlo) kromě kubických

1.3. Odraz a lom světla

V této a následujících kapitolách použijeme **aproximaci geometrické optiky**. V této aproximaci se světlo v homogenním prostředí šíří po přímce – zanedbáme ohyb světla.

Průchod světla rozhraním dvou prostředí:



Při průchodu rozhraním se zachovává frekvence vlnění a tečná složka vlnového vektoru. Odtud lze odvodit:

Zákon odrazu $\theta_1 = \theta_1'$ (I.13)

Zákon lomu (Snellův zákon) $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$ (I.14)

kde $n = \frac{c}{v} = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \approx \sqrt{\epsilon_r}$ (I.15)

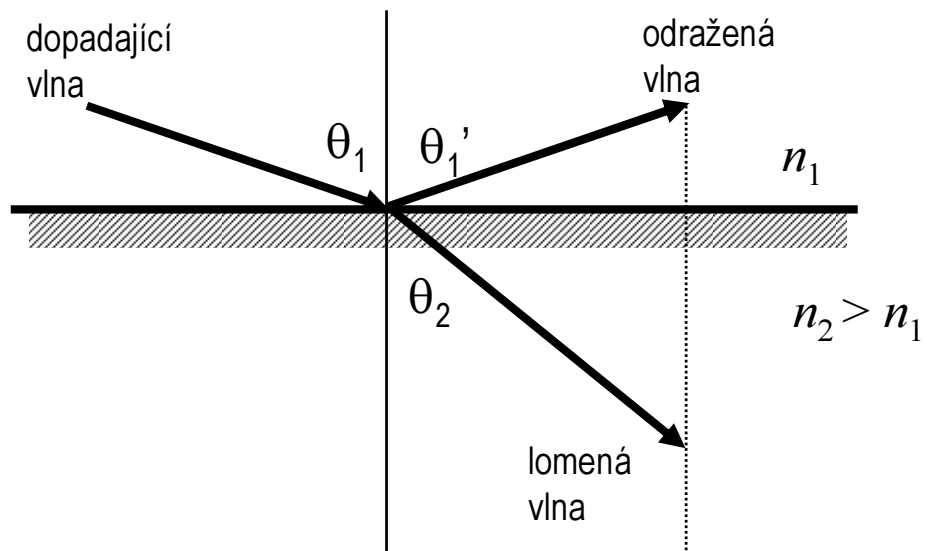
je **index lomu** prostředí, ϵ_r a μ_r jsou relativní permitivita a relativní permeabilita prostředí

Délka vlnového vektoru v materiálu je $k = k_0 n$, kde k_0 je délka vlnového vektoru ve vakuu

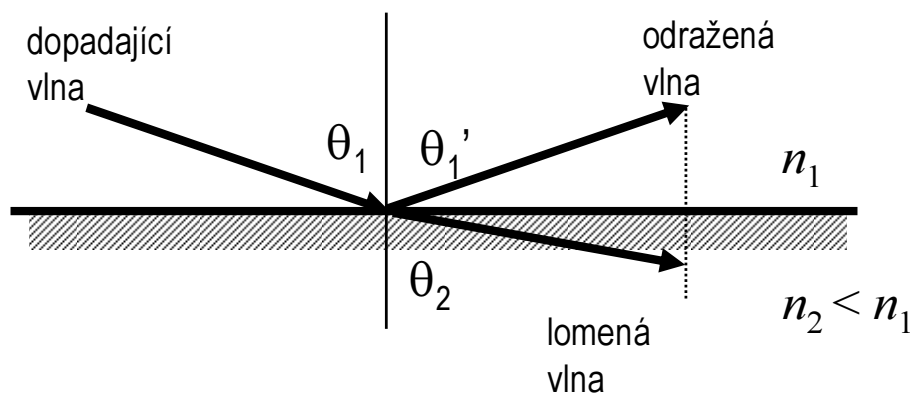
Typické hodnoty indexu lomu pro $\lambda = 589 \text{ nm}$

materiál	vakuum	vzduch	voda	etanol	roztok cukru 30 %	roztok cukru 80 %	sklo	diamant
n	1	1,00029	1,33	1,36	1,38	1,49	1,46 – 1,89	2,42

Světlo prochází z prostředí opticky řidšího do prostředí opticky hustšího

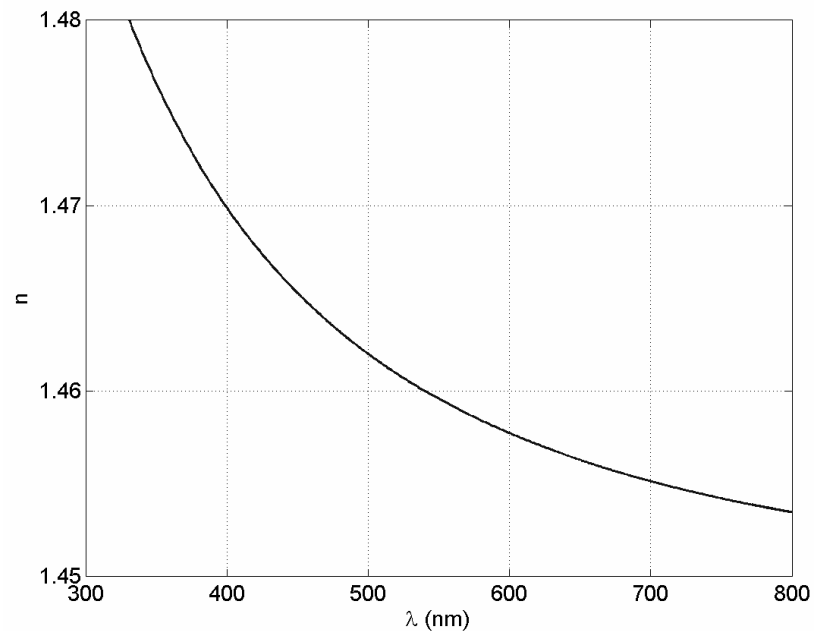


Světlo prochází z prostředí opticky hustšího do prostředí opticky řidšího



Chromatická disperse – závislost indexu lomu světla na vlnové délce

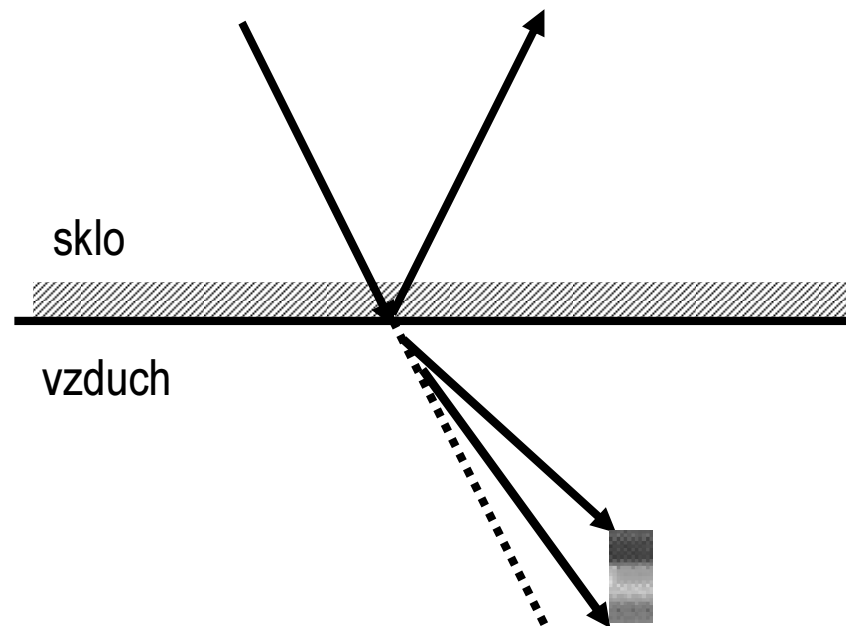
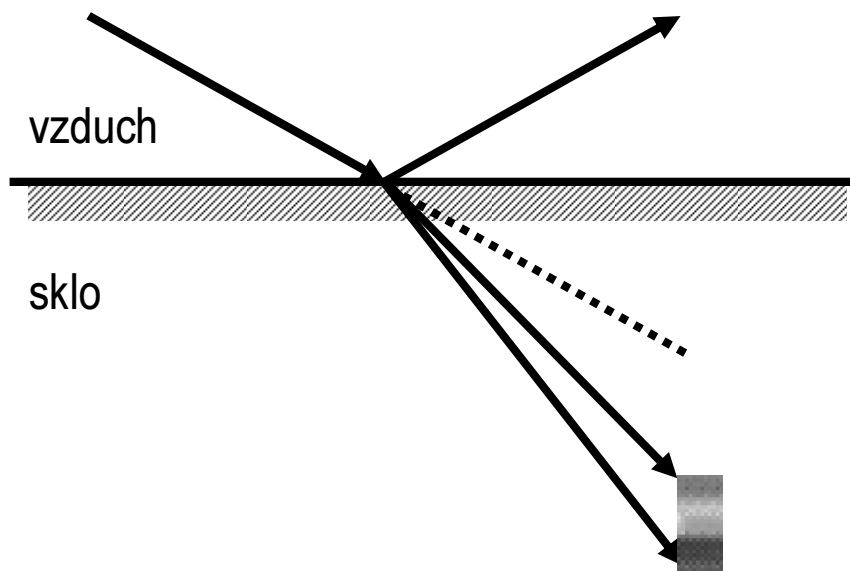
Závislost indexu lomu taveného křemene na vlnové délce světla



Chromatickou dispersi lze ve většině případů aproximovat vztahem

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} + \dots \quad (I.16)$$

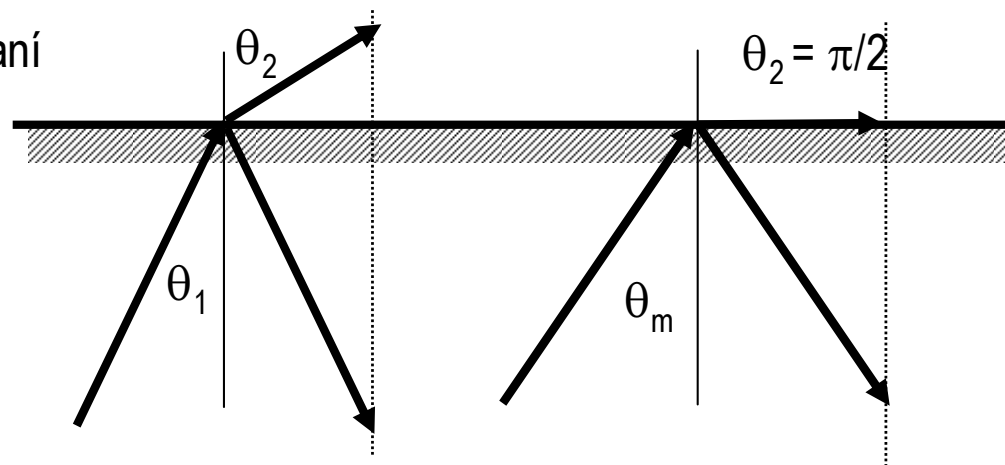
Rozklad bílého světla lomem



Úplný (totální) odraz světla na rozhraní

$$\theta_m = \arcsin\left(\frac{1}{n}\right) \quad (1.17)$$

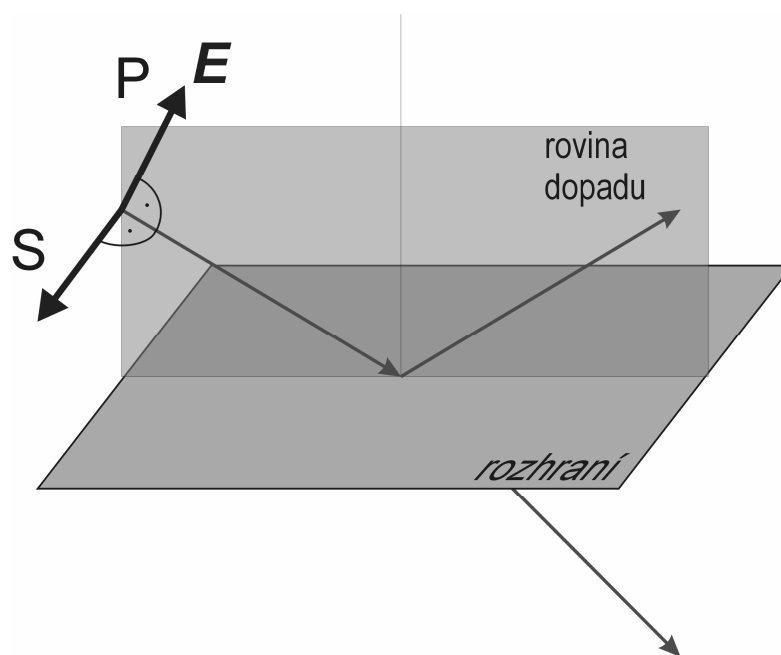
$n = \frac{n_2}{n_1}$ je index lomu rozhraní



K totálnímu odrazu světla dochází při průchodu rozhraním z prostředí opticky hustšího do opticky řidšího pro úhel dopadu větší než θ_m . Vlna v opticky řidším prostředí se exponenciálně tlumí (evanescentní vlna).

Polarizace světla odrazem

S- a P-polarizované světlo:



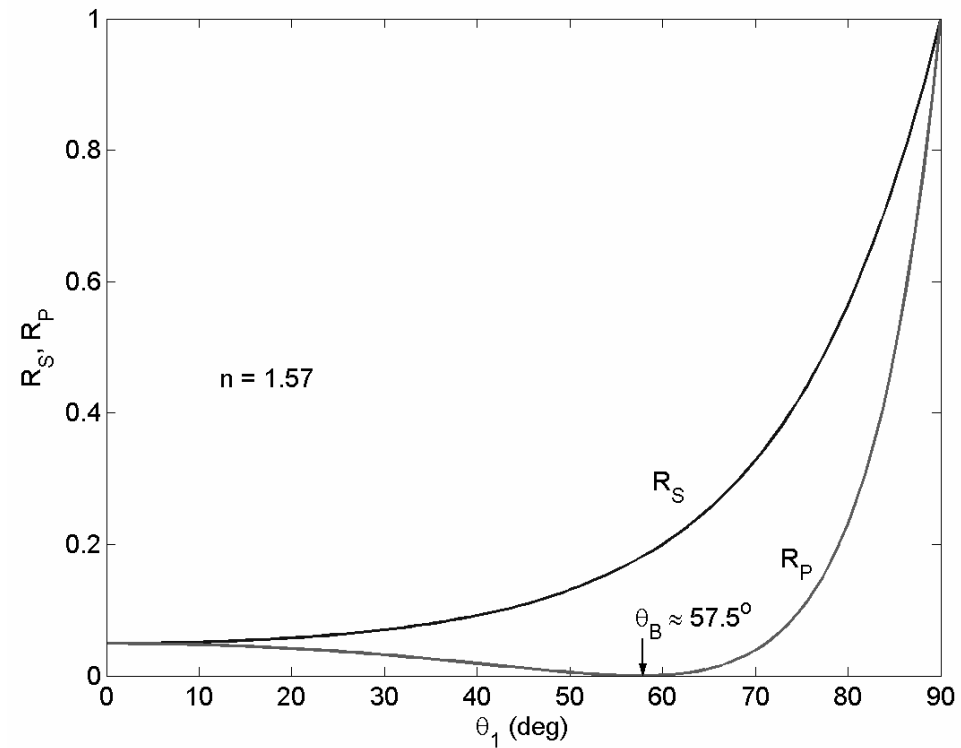
Je-li úhel dopadu θ_1 roven Brewsterovu úhlu θ_B , P-polarizované světlo se neodráží. Dá se ukázat, že platí

$$\theta_B = \arctan(n) \quad (1.18)$$

Odrazivost rozhraní – poměr intenzit odraženého a dopadajícího světla

$$R = \frac{I_{\text{refl}}}{I_{\text{inc}}} = \frac{|E_{\text{refl}}|^2}{|E_{\text{inc}}|^2} \quad (1.19)$$

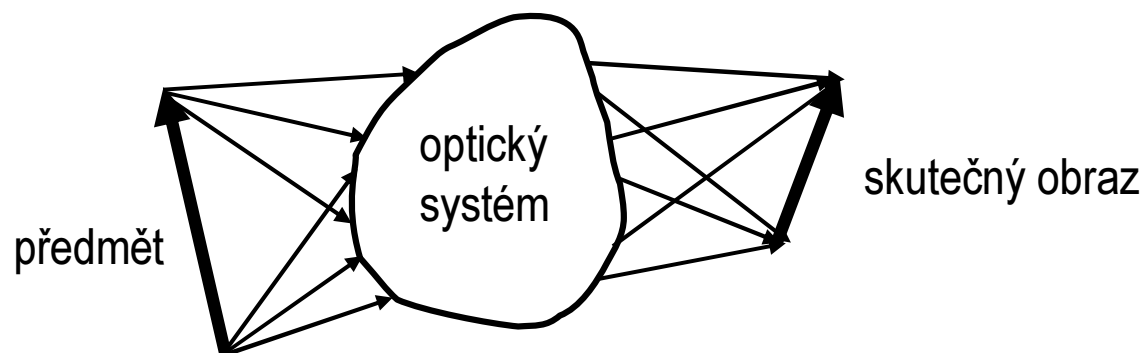
Odrazivost rozhraní
vzduch – sklo:



I.4. Optické zobrazení - zrcadla

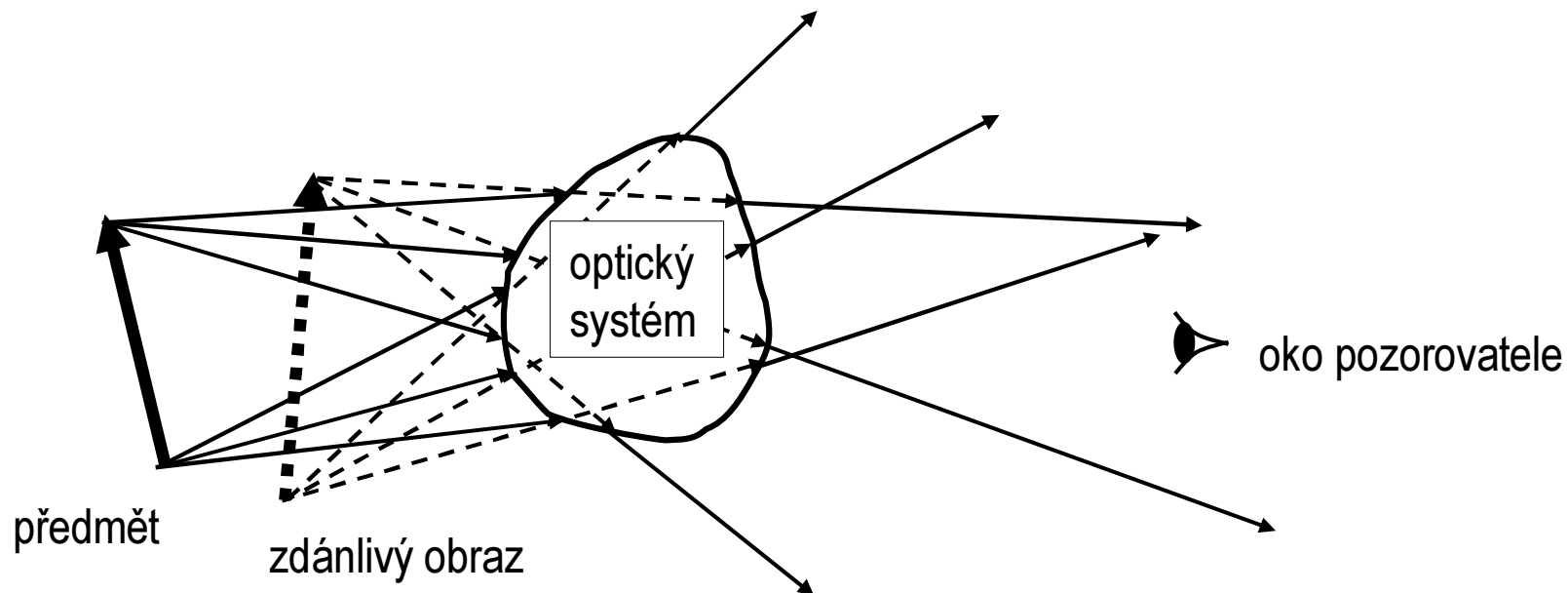
Přiblížení geometrické optiky – šíření světla se modeluje paprsky, světlo se šíří přímočaře, pokud neprochází rozhraním. Ohyb světla se zanedbá.

Definice optického zobrazení



paprsky vycházející z téhož bodu předmětu se po průchodu optickým systémem protínají v tomtéž bodě skutečného obrazu.

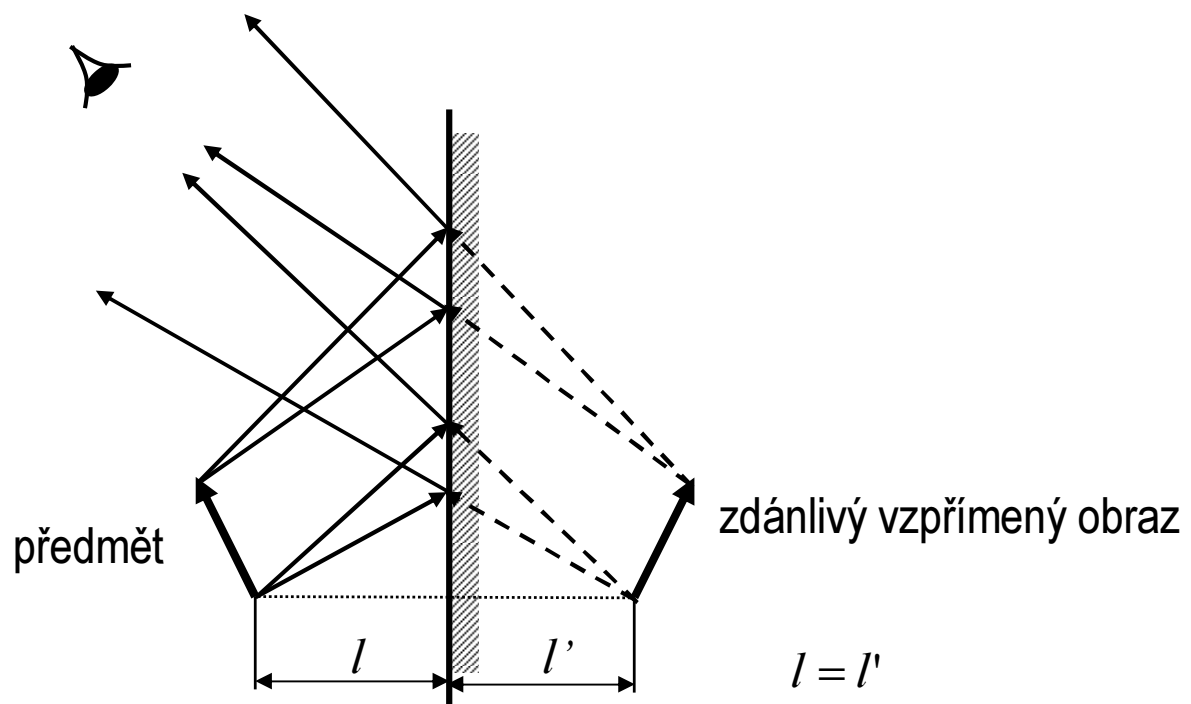
Skutečný obraz je možno pozorovat na stínítku



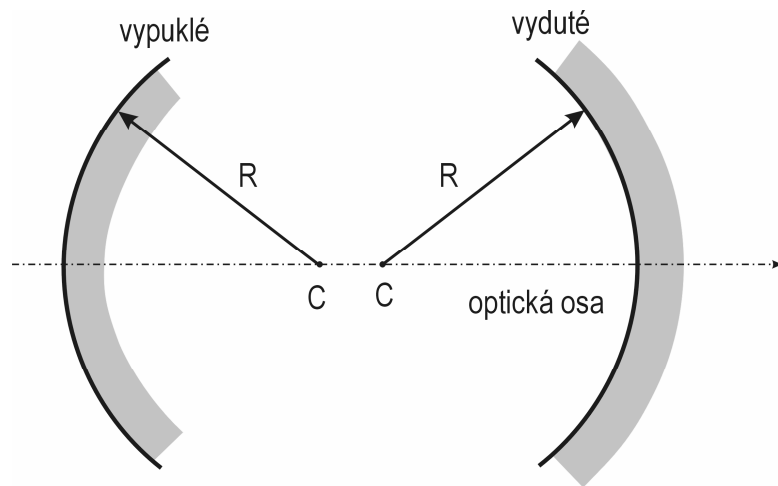
prodloužené paprsky prošlé optickým systémem se protínají v tomtéž bodě zdánlivého obrazu.
Zdánlivý obraz není možné zachytit na stínítku

Oko pozorovatele (jakožto optický systém) převádí zdánlivý obraz na skutečný obraz na sítnici

Rovinné zrcadlo



Kulové zrcadlo

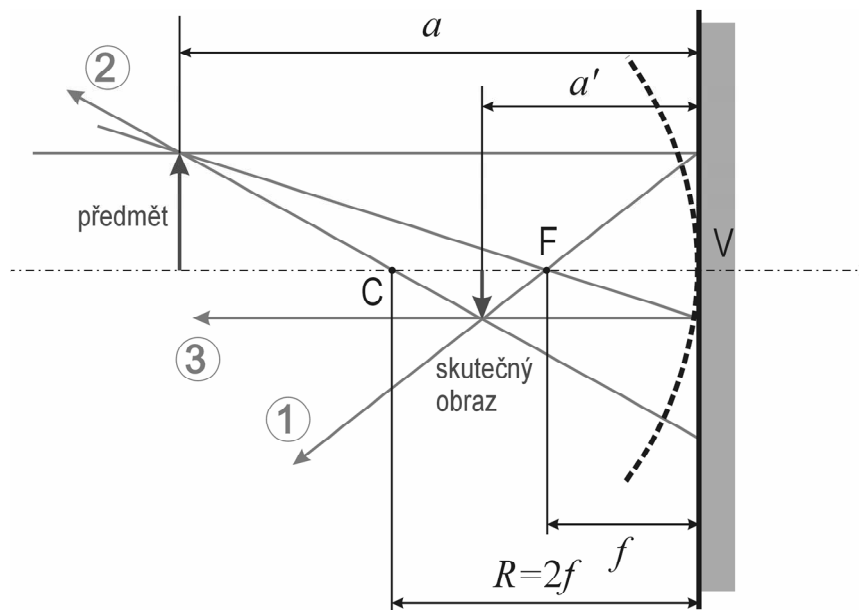


C je střed křivosti zrcadla, R je poloměr křivosti

Paraxiální přiblížení:

- vzdálenost paprsků rovnoběžných s optickou osou je mnohem menší než poloměr křivosti
- úhel paprsků s optickou osou je velmi malý

Chod paprsků vydutým zrcadlem (paraxiální přiblížení)



F je ohnisko zrcadla,

$$f = R/2$$

(I.20)

je **ohnisková vzdálenost**

- 1..paprsek rovnoběžný s ohniskovou osou se odráží do ohniska
- 2..paprsek procházející středem zrcadla se odráží do středu zrcadla
- 3..paprsek procházející ohniskem je po odrazu rovnoběžný s optickou osou

U parabolického zrcadla je popsáný chod paprsků dodržen i mimo paraxiální přiblížení

Zobrazení kulovým zrcadlem

Zobrazovací rovnice kulového zrcadla

$$\boxed{\frac{1}{a} + \frac{1}{a'} = \frac{1}{f}} \quad (1.21)$$

Příčné zvětšení obrazu – poměr výšek obrazu a předmětu

$$m = \frac{h'}{h} = -\frac{a'}{a} \quad (1.22)$$

V případě vypuklého kulového zrcadla je $f > 0$.

Je-li $a > 2f$, je $f < a' < 2f$, obraz je reálný, převrácený, zmenšený ($-1 < m < 0$)

Je-li $a = 2f$, je $a' = 2f$, obraz je reálný, převrácený, $m = 1$

Je-li $f < a < 2f$, je $a' > 2f$, obraz je reálný, převrácený, zvětšený ($m < -1$)

Je-li $a < f$, je $a' < 0$, obraz je zdánlivý, přímý ($m > 0$)

V případě vydutého zrcadla je $f < 0$. Vždy vzniká vzpřímený ($m > 0$) a zdánlivý obraz za zrcadlem ($a' < 0$)

I.5. Optické zobrazení - čočky

Začneme popisem jedné lámavé plochy – zakřivené rozhraní dvou prostředí

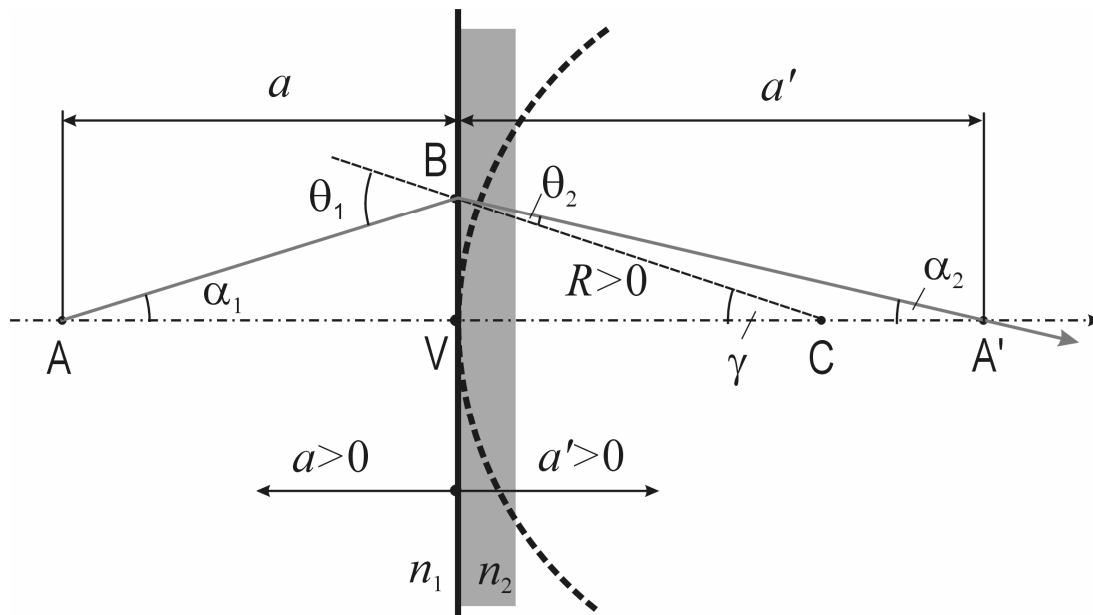
Paraxiální přiblížení

Snellův zákon v paraxiálním přiblížení $n_1\theta_1 = n_2\theta_2$

Platí přitom

$$\theta_1 = \alpha_1 + \gamma, \theta_2 = \gamma - \alpha_2,$$

$$\alpha_1 \approx \frac{BV}{a}, \alpha_2 \approx \frac{BV}{a'}, \gamma \approx \frac{BV}{R}$$



Odtud plyne zobrazovací rovnice lámavé plochy (pozor na znaménka a a a')

$$\boxed{\frac{n_1}{a} + \frac{n_2}{a'} = \frac{n_2 - n_1}{R}}$$

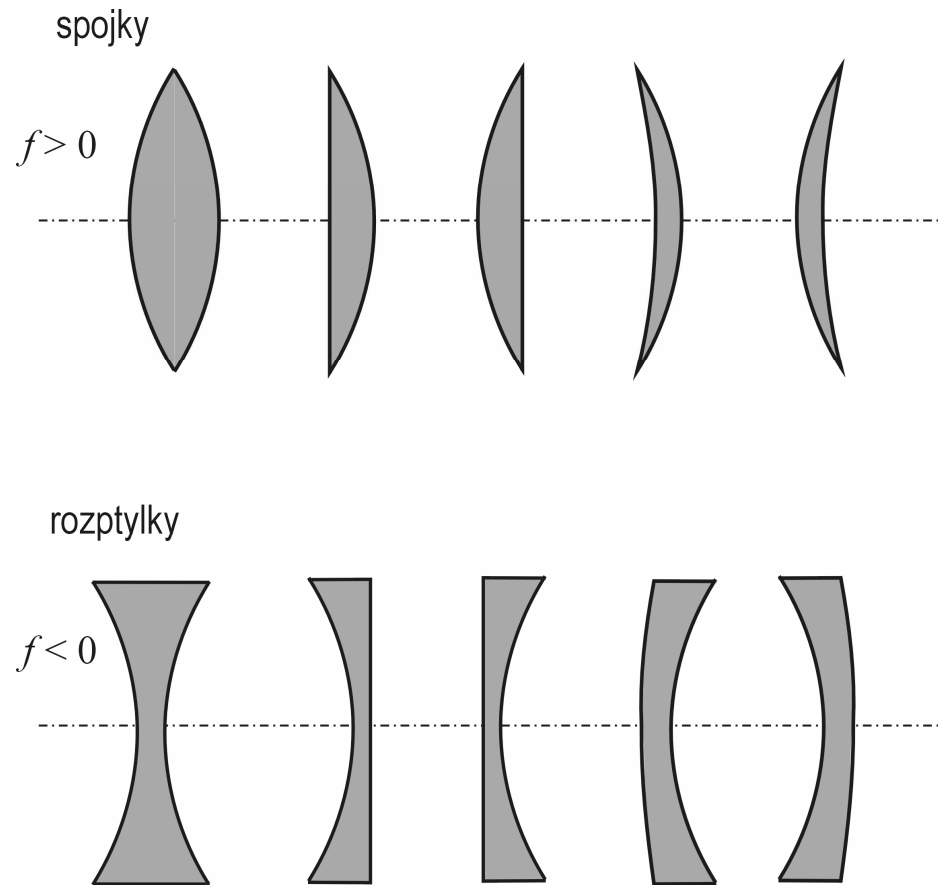
(I.23)

V případě vyduté lámavé plochy je $R < 0$.

Tenké čočky

Předpokládejme, že index lomu materiálu čočky n je větší než 1, index lomu okolí je 1

Tenká čočka – její tloušťka na optické ose je mnohem menší než její průměr a poloměry lámavých ploch $R_{1,2}$



Tenká čočka se popisuje jako soustava dvou lámavých ploch s poloměry $R_{1,2}$. Zobrazovací rovnice první plochy (zleva) je

$$\frac{1}{a} + \frac{n}{a''} = \frac{n-1}{R_1} \quad (1.24)$$

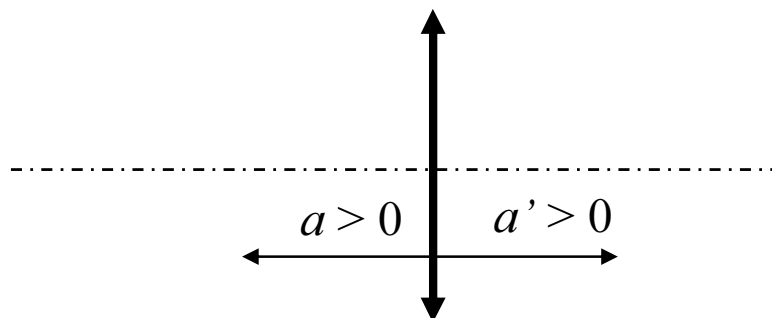
Zobrazovací rovnice druhé plochy je

$$-\frac{n}{a''} + \frac{1}{a'} = \frac{1-n}{R_2} \quad (1.25)$$

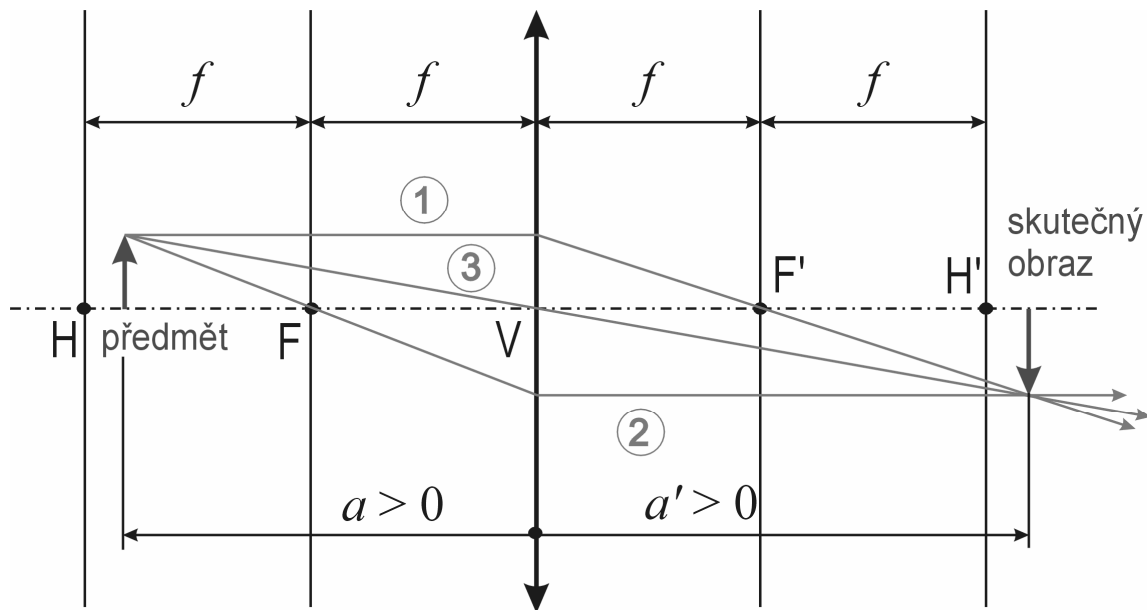
Odtud plyne zobrazovací rovnice tenké čočky

$$\boxed{\frac{1}{a} + \frac{1}{a'} = \frac{1}{f}, \quad \frac{1}{f} = (n-1) \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right)} \quad (1.26)$$

Přitom se použila znaménková konvence



Chod paprsků tenkou spojkou ($f > 0$)



H a H' jsou předmětový a obrazový hlavní bod,
F a F' jsou předmětové a obrazové ohnisko čočky
V je vrchol čočky
1..paprsek rovnoběžný s optickou osou prochází po průchodu čočkou obrazovým ohniskem
2..paprsek procházející předmětovým ohniskem je po průchodu čočkou rovnoběžný s optickou osou
3..paprsek procházející vrcholem čočky zachovává směr

Je-li $a > 2f$, je $f < a' < 2f$, obraz je reálný, převrácený, zmenšený ($-1 < m < 0$)

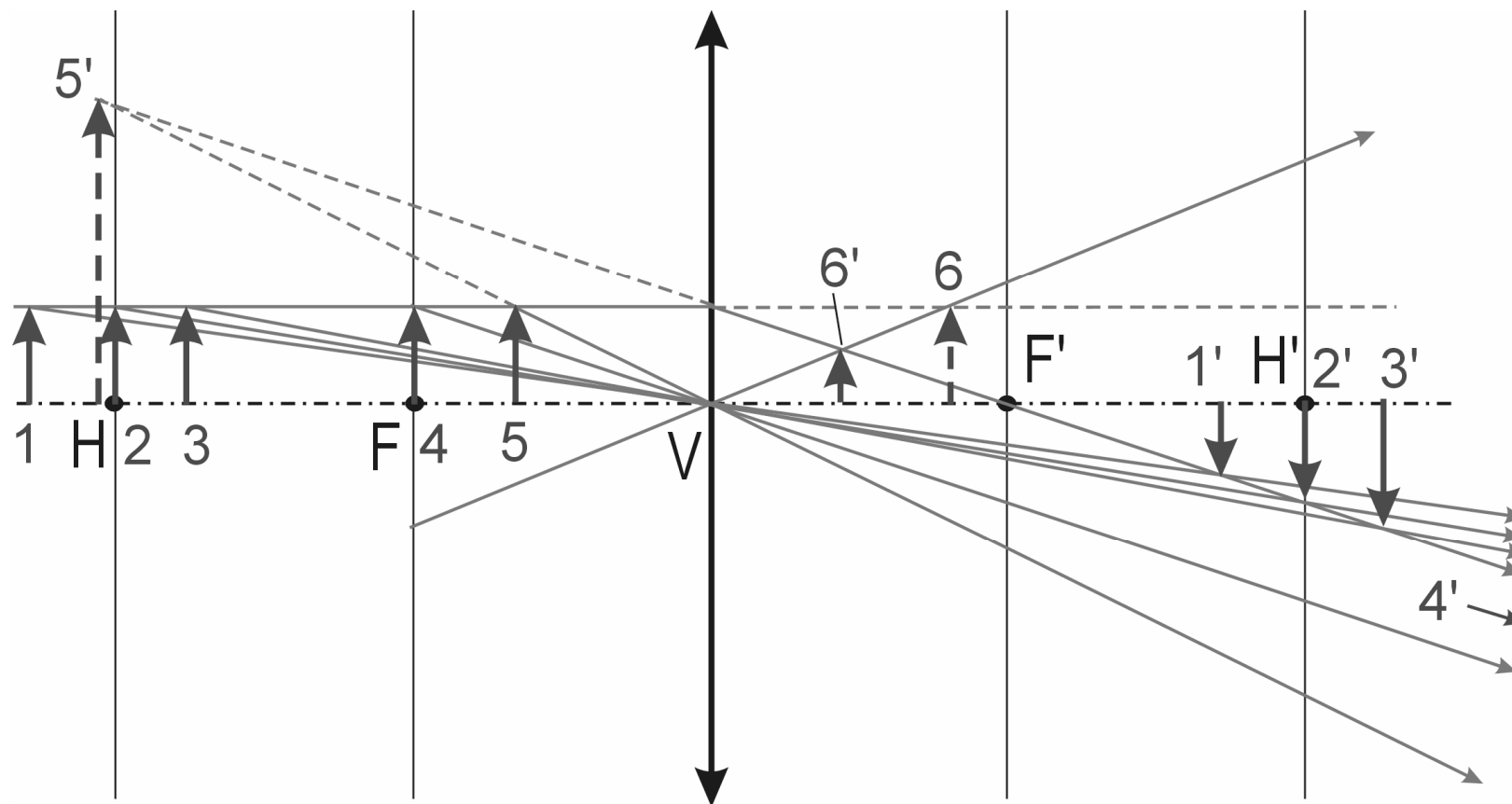
Je-li $a = 2f$, je $a' = 2f$, obraz je reálný, převrácený, $m = 1$

Je-li $f < a < 2f$, je $a' > 2f$, obraz je reálný, převrácený, zvětšený ($m < -1$)

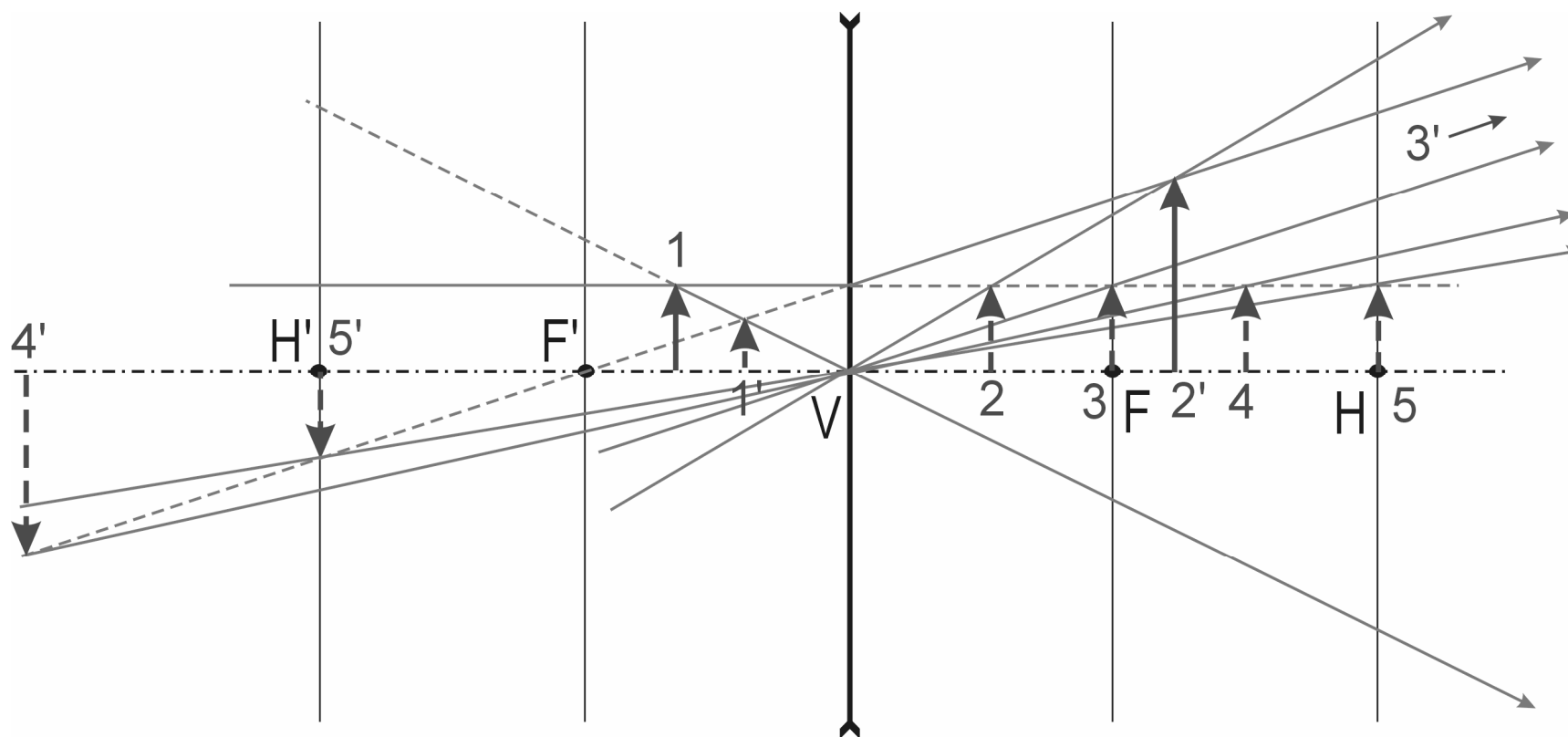
Je-li $a = f$, je $a' \rightarrow \infty$

Je-li $a < f$, je $a' < -f$, obraz je zdánlivý, přímý, zvětšený ($m > 1$)

Vzájemné polohy předmětu a obrazu spojky. 6 je **zdánlivý předmět** ($a < 0$), jemuž odpovídá skutečný obraz 6'.



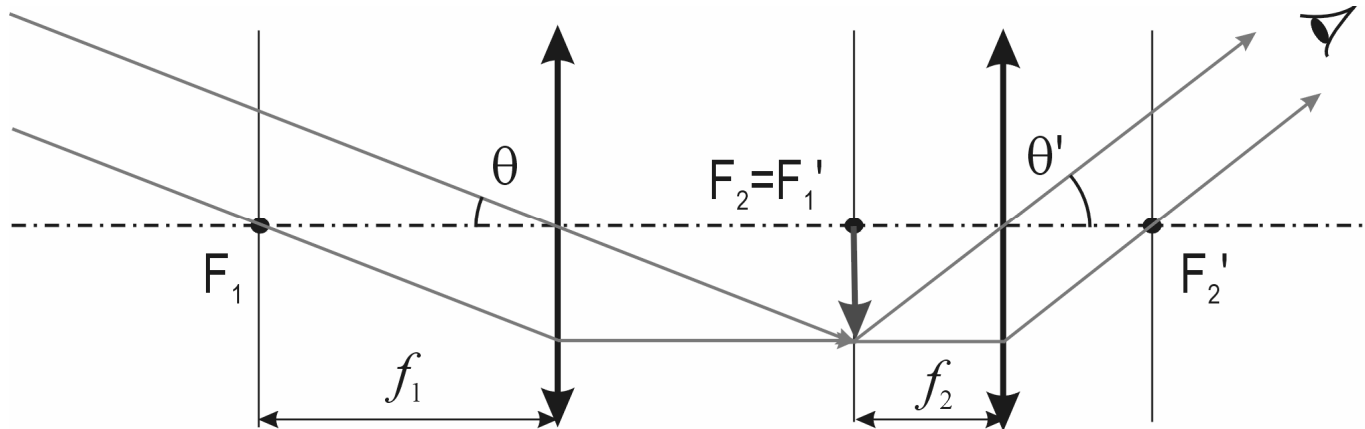
Vzájemná poloha předmětu a obrazu rozptylky. 2-5 jsou zdánlivé předměty ($a < 0$)



Simulace chodu paprsků soustavami čoček: <http://physics.bu.edu/~duffy/java>

I.6. Soustavy dvou čoček

Dvě spojky – Keplerův dalekohled



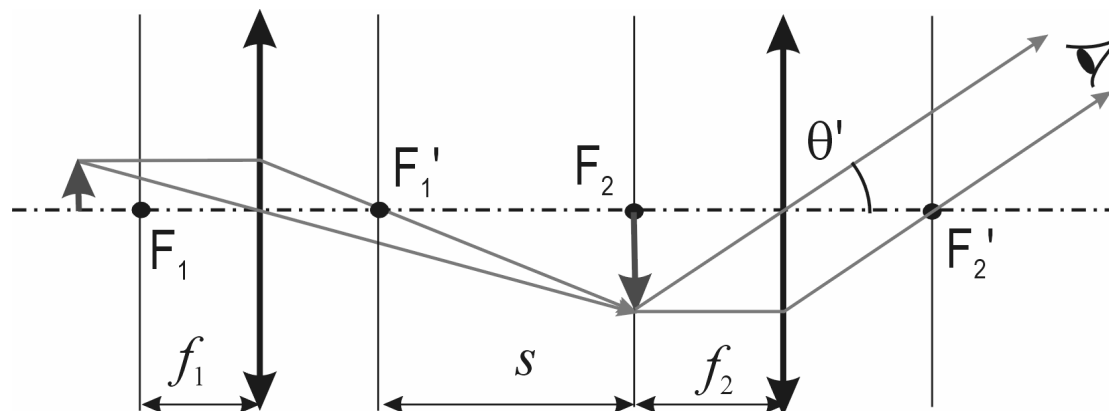
Obrazové ohnisko 1. čočky splývá s předmětovým ohniskem 2. čočky

Vzdálený předmět ($a \rightarrow \infty$) se zobrazí do obrazového ohniska F_1 1. čočky (objektivu). Tento obraz je předmětem pro 2. čočku (okulár). Obraz se vytvoří v nekonečnu ($a' \rightarrow \infty$), oční čočkou se zobrazí na sítnici oka.

Úhlové zvětšení dalekohledu je

$$m_\theta = \frac{\theta'}{\theta} = -\frac{f_1}{f_2} \quad (1.27)$$

Dvě spojky - mikroskop

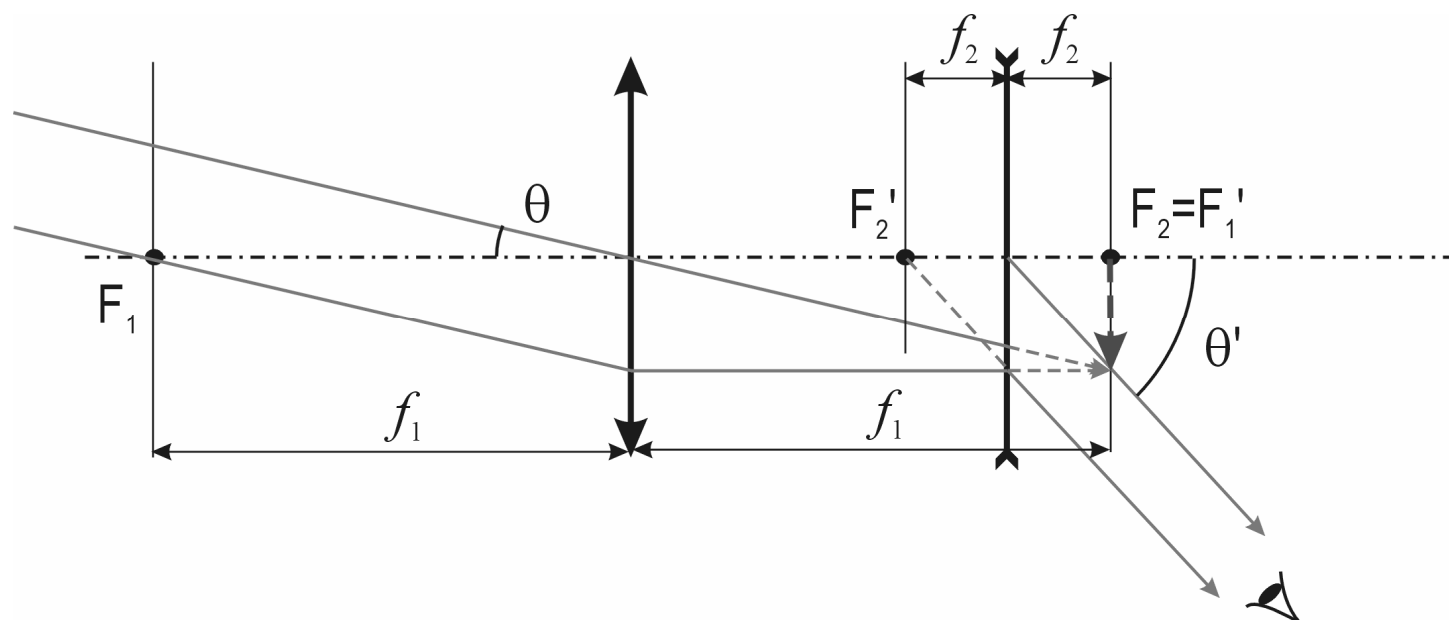


První čočka (objektiv) vytvoří obraz blízkého předmětu v předmětovém ohnisku druhé čočky (okuláru). Okulár vytvoří obraz v nekonečnu, oční čočkou se převede na sítnici oka. Úhlové zvětšení předmětu je

$$m_{\theta} = \frac{\theta'}{\theta} = \frac{sl_0}{f_1 f_2} \quad (1.28)$$

θ je úhel pod kterým je vidět předmět v konvenční zrakové vzdálenosti $l_0 = 25 \text{ cm}$, s je vzdálenost mezi obrazovým ohniskem objektivu a předmětovým ohniskem okuláru

Spojka a rozptylka – Galileiho dalekohled



Obrazové ohnisko 1. čočky splývá s předměťovým ohniskem 2. čočky

Vzdálený předmět ($a \rightarrow \infty$) se zobrazí do obrazového ohniska F_1 1. čočky (objektivu). Tento obraz je zdánlivým předmětem pro 2. čočku (okulár). Obraz se vytvoří v nekonečnu ($a' \rightarrow \infty$), oční čočkou se zobrazí na sítnici oka.

Úhlové zvětšení dalekohledu je

$$m_\theta = \frac{\theta'}{\theta} = \frac{f_1}{f_2} \tag{1.29}$$

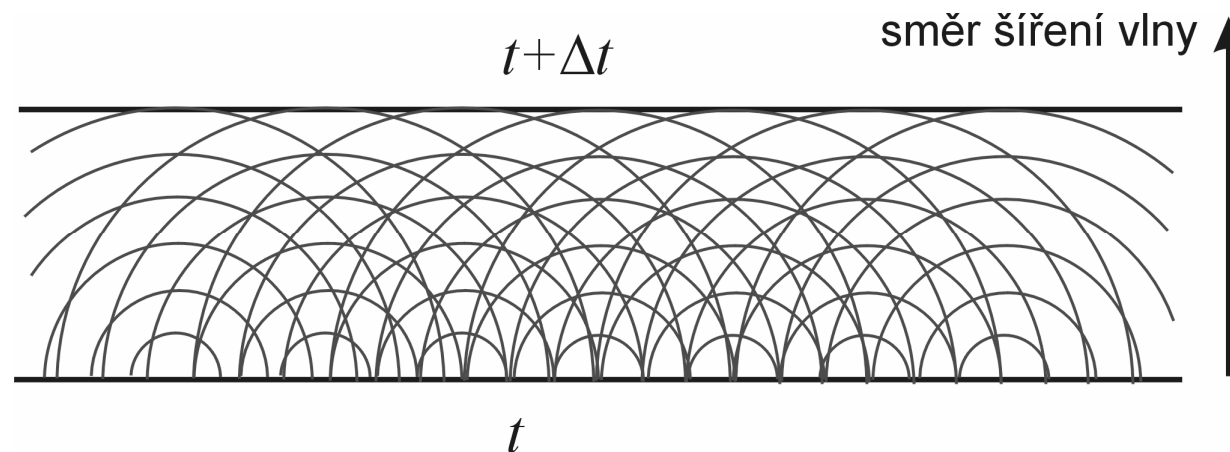
I.7. Základy fyzikální optiky – interference vlnění

Doposud jsme šíření světla popisovali v geometrické aproximaci – zanedbali jsme ohyb a interferenci vlnění, předpokládali jsme, že v homogenní prostředí se světlo šíří přímočaře.

V této kapitole uvážíme vlnovou povahu světla, která vysvětlí interferenci a ohyb vlnění.

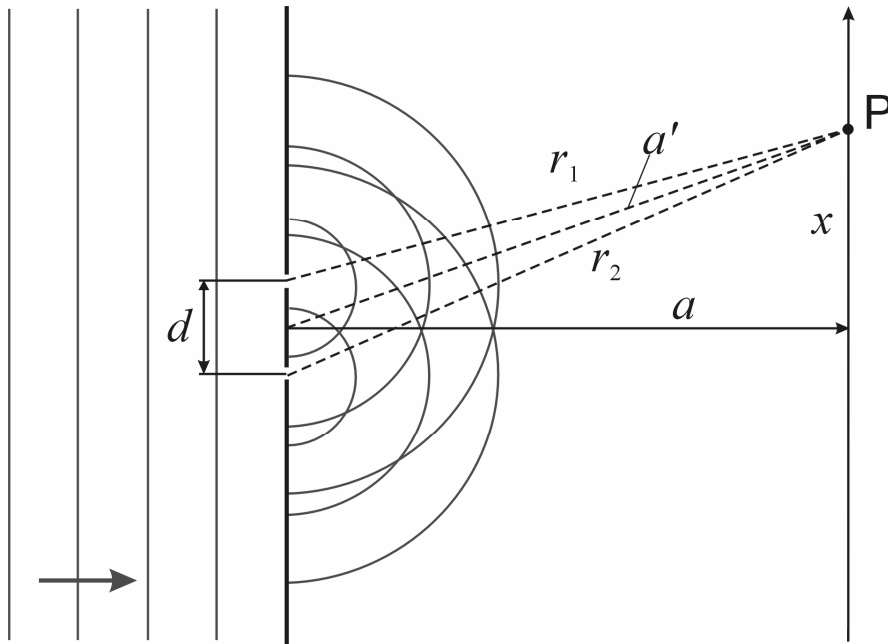
Z Maxwellových rovnic lze odvodit **Huygensův-Fresnelův princip**:

Všechny body na vlnoploše v čase t jsou zdrojem sekundárních kulových vln, jejichž superpozicí vzniká další vlnoplocha v čase $t+\Delta t$



Experimentální ověření vlnové povahy světla – Youngův pokus (1801)

Monochromatické světlo prochází dvěma blízkými malými otvory. Tyto otvory jsou podle HF principu zdroji sekundárních kulových vln. Na stínítku ve vzdálenosti a se pozoruje výsledek skládání (interference) těchto sekundárních vln



Elektrické pole v místě pozorovatele P je součtem elektrických polí dvou sekundárních kulových vln (zanedbáme polarizaci vlnění):

$$E = E_1 + E_2 = \frac{A}{r_1} e^{-i(\omega t - kr_1)} + \frac{A}{r_2} e^{-i(\omega t - kr_2)} \quad (1.30)$$

Fraunhoferova aproximace: vzdálenost otvorů d je mnohem menší než a , přesněji:

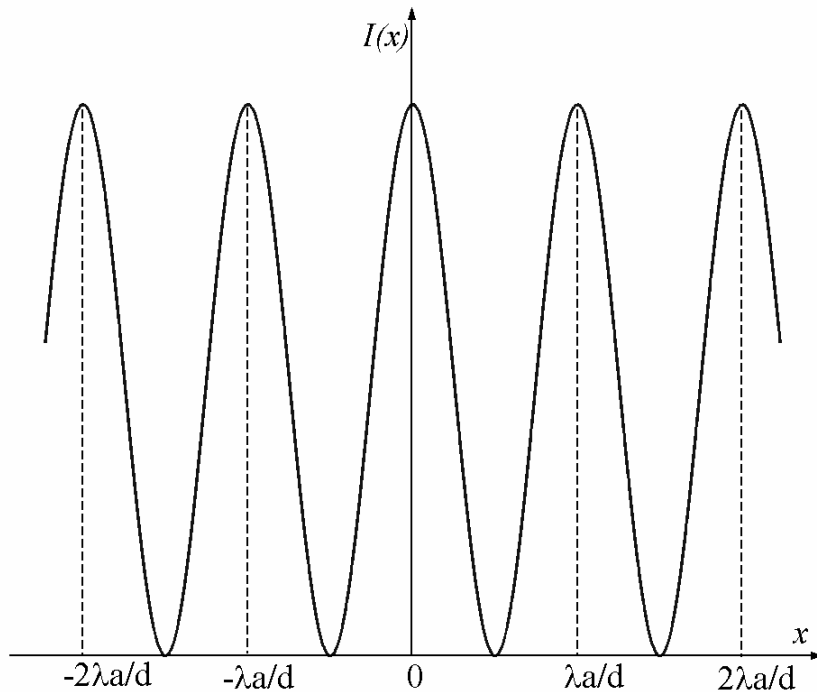
$$d \ll \sqrt{a\lambda} \quad (1.31)$$

Po úpravě vyjde:

$$E(x) \approx \frac{A}{a'} 2 \cos\left(\frac{kxd}{2a'}\right) e^{-i(\omega t - ka')} \quad (1.32)$$

Omezíme-li se na případ $|x| \ll a$, bude $a' \approx a$ a intenzita vlnění v místě pozorovatele je

$$I(x) \approx I_{\max} \cos^2\left(\frac{\pi xd}{a\lambda}\right) \quad (1.33)$$



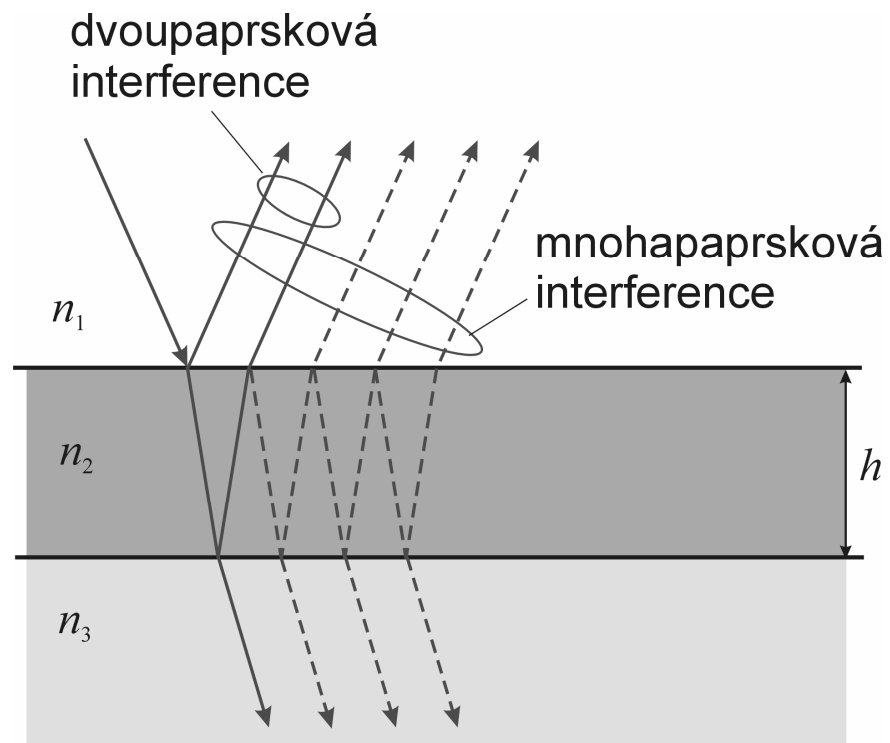
Pozorují se ekvidistantně rozložená maxima intenzity. K maximu intenzity dojde, liší-li se vzdálenosti r_1, r_2 o celistvý počet vlnových délek λ . Souřadnice m -tého maxima je

$$x_m = m \cdot \frac{\lambda a}{d}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.34)$$

Java-simulace je na <http://webphysics.ph.msstate.edu/jc/library/24-3b/index.html>

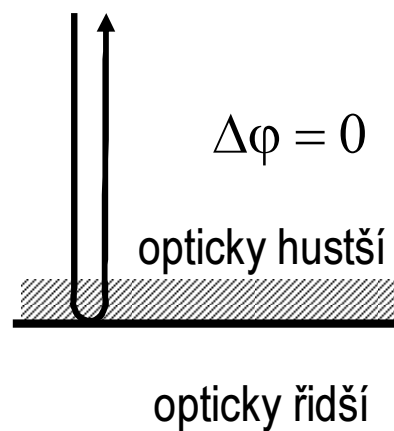
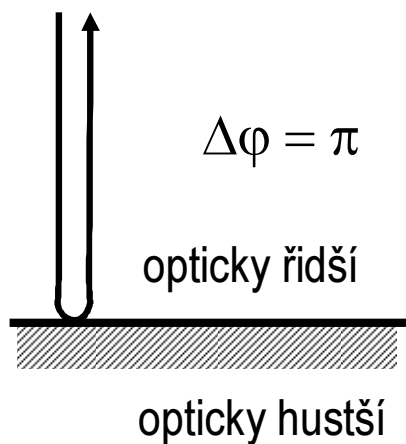
I.8. Interference vln na tenké vrstvě

Skládání vlnění odražených na dvou rozhraních tenké vrstvy

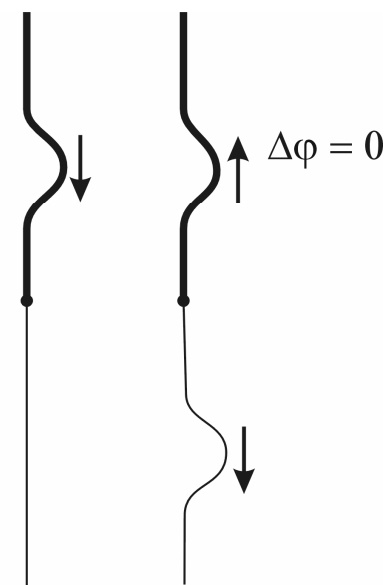
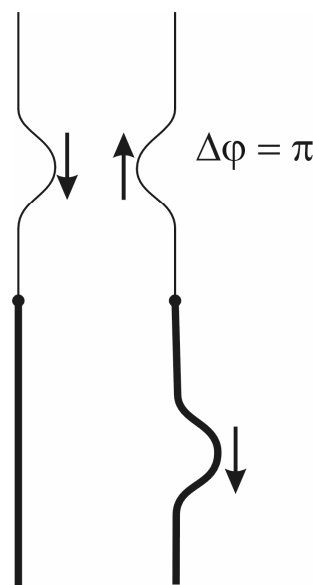


V dalším pro jednoduchost uvážíme pouze kolmý dopad světla

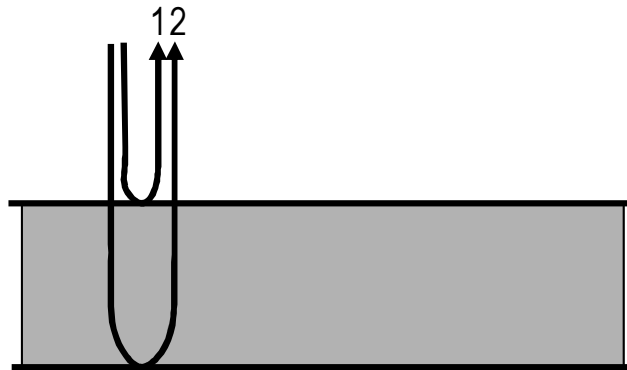
Jak se mění fáze při odrazu světla na rozhraní?



Analogie s mechanickým vlněním šířícím se uzlem spojujícím tenké a tlusté lano:



Tenká vrstva s indexem lomu n a tloušťkou h , z obou stran vzduch ($n=1$)



$$\Delta\varphi = \pi + 2hkn = \pi \left(1 + \frac{4hn}{\lambda} \right) \quad (I.35)$$

↑
fázový posuv při odrazu paprsku 1
(fázový posuv při odrazu paprsku 2 je nulový)

Podmínka interferenčního maxima

$$\Delta\varphi = \pi \left(1 + \frac{4hn}{\lambda} \right) = 2m\pi, \quad m = 1, 2, \dots \Rightarrow h = \left(m - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda}{2n} \quad (I.36)$$

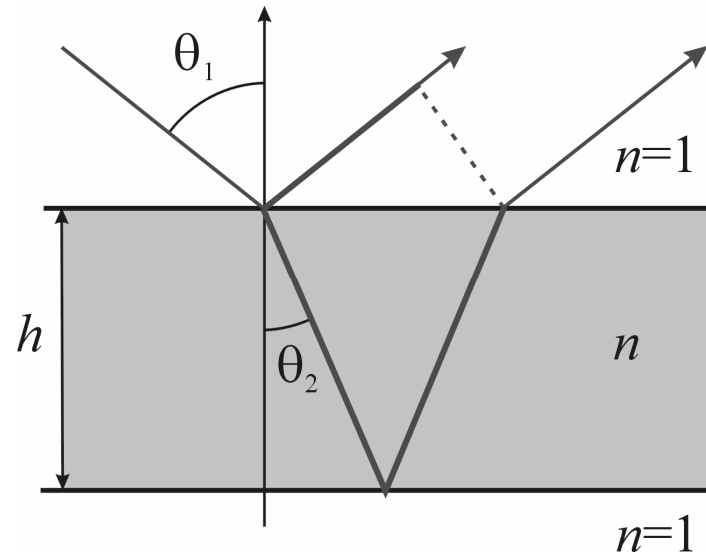
Tenká vrstva s indexem lomu n_2 a tloušťkou h , nad ní vzduch ($n_1=1$), na podložce s indexem lomu $n_3 > n_2 > n_1$

$$\Delta\varphi = 2hkn_2 = \frac{4hn_2\pi}{\lambda} \quad (I.37)$$

Podmínka interferenčního maxima

$$h = m \frac{\lambda}{2n_2} \quad (I.38)$$

Šikmý dopad světla:



fázový posuv mezi paprsky:

$$\Delta\varphi = \pi + 2h \left(\frac{kn}{\cos \theta_2} - k \tan \theta_2 \sin \theta_1 \right) = \pi + 2hkn \cos \theta_2$$

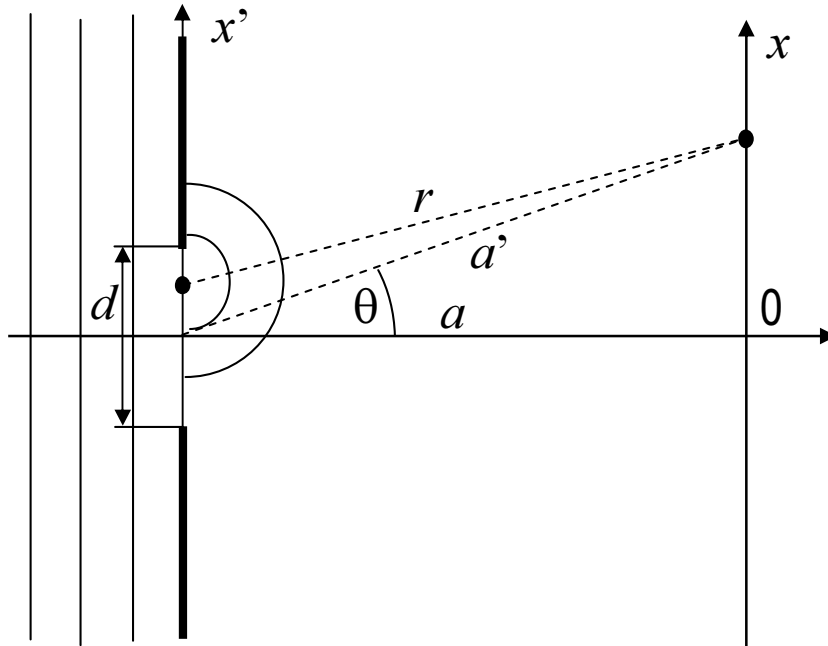
Podmínka interferenčního maxima:

$$\Delta\varphi = 2m\pi$$

⇒ Proužky stejné tloušťky, proužky stejného sklonu

I.9. Difrakce na otvoru

Štěrbina



Body v otvoru štěrby emitují sekundární vlnění. Interference sekundárních vln se pozoruje na stínítku.

Intenzita elektrického pole v bodě x na stínítku je

$$E(x) = \int_{-d/2}^{d/2} dx' \frac{A}{r} e^{-i(\omega t - kr)} \quad (1.39)$$

Fraunhoferova aproximace ($d \ll \sqrt{a\lambda}$)

$$kr \approx k\left(a' - \frac{xx'}{a'}\right), \quad \frac{1}{r} \approx \frac{1}{a'} \quad (1.40)$$

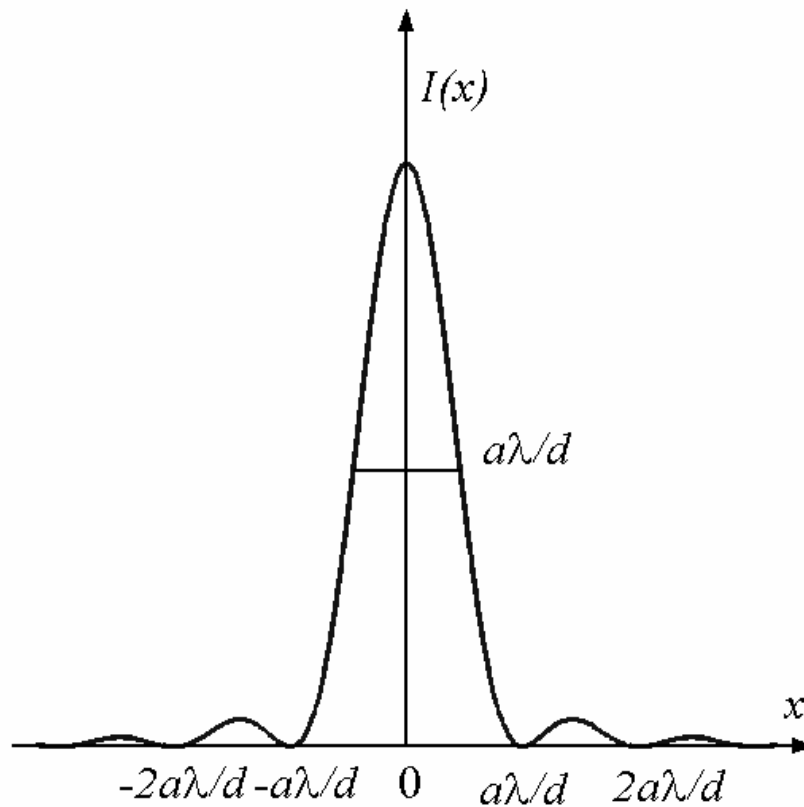
Nakonec vyjde

$$E(x) = \frac{A}{a'} e^{-i\omega t} d \operatorname{sinc}\left(\frac{kxd}{2a'}\right) \equiv \frac{A}{a'} e^{-i\omega t} d \operatorname{sinc}\left(\frac{kd}{2} \sin \theta\right) \quad (1.41)$$

$$\text{kde } \operatorname{sinc}(x) = \begin{cases} \frac{\sin(x)}{x} & \text{pro } x \neq 0 \\ 1 & \text{pro } x = 0 \end{cases} \quad (1.42)$$

Omezíme-li se na případ $|x| \ll a$, bude $a' \approx a$ a intenzita vlnění v místě x je

$$I(x) = I_{\max} \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi x d}{\lambda a}\right) \quad (1.43)$$



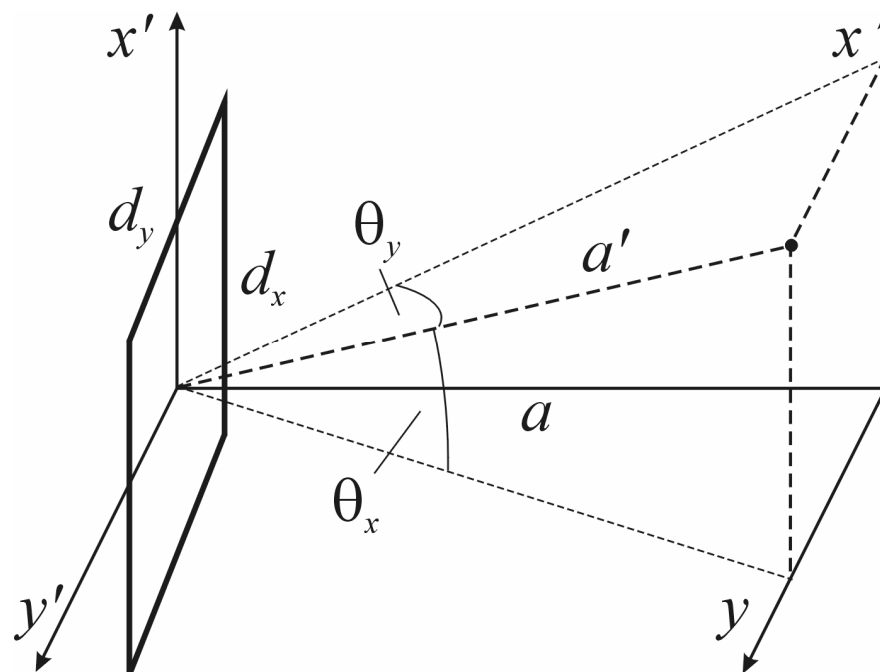
Minima intenzity jsou v bodech

$$m \frac{a\lambda}{d}, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Šířka hlavního maxima v poloviční výšce je přibližně

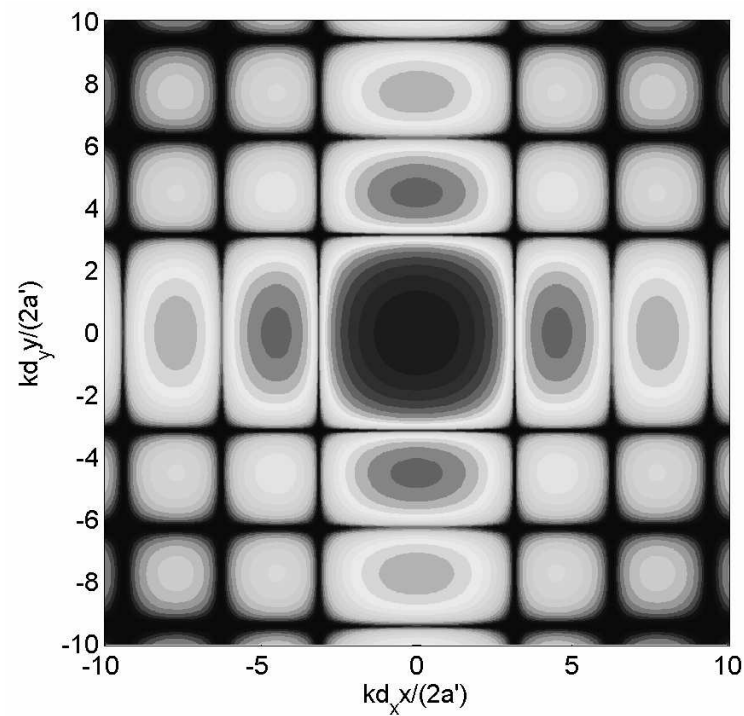
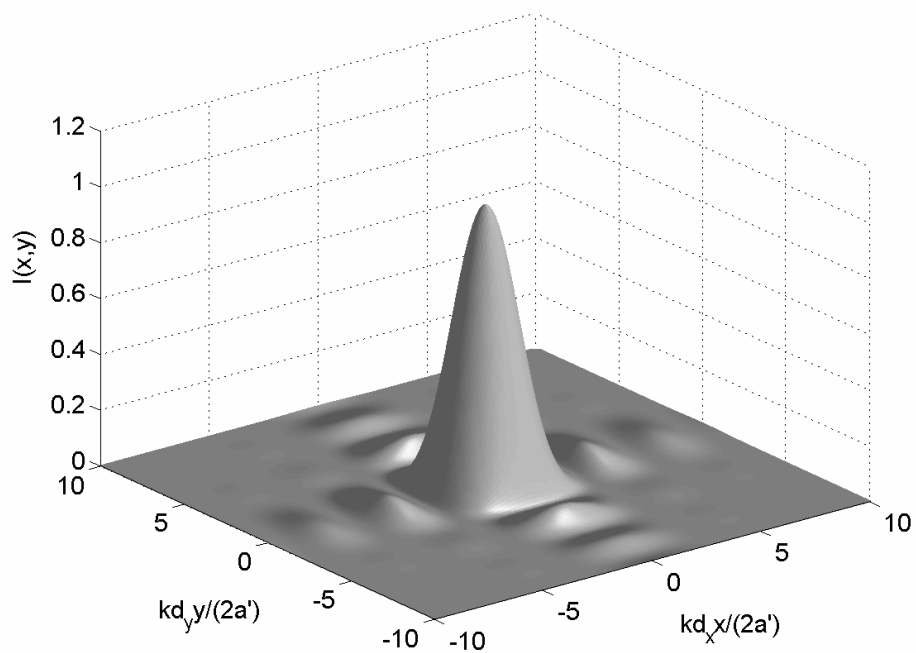
$$\Delta x = \frac{a\lambda}{d}$$

Difrakce na obdélníkovém otvoru



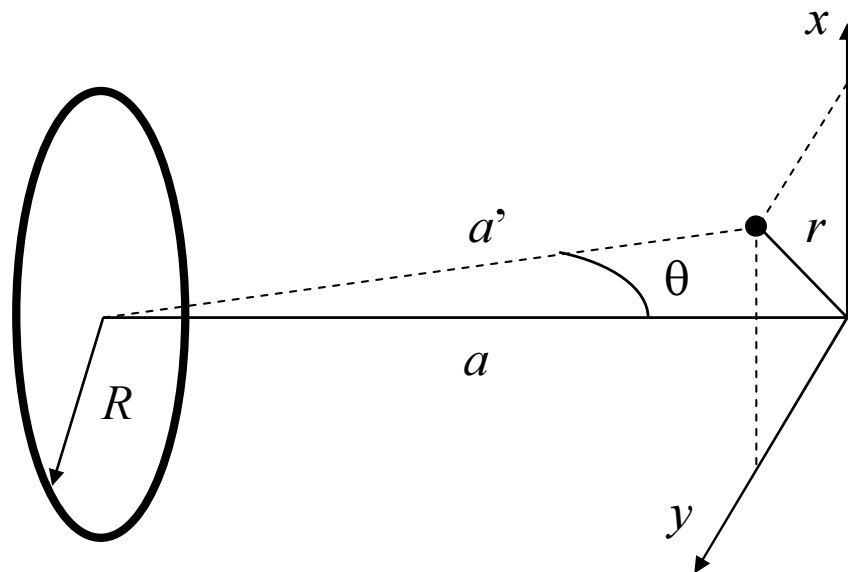
Difraktovaná intenzita je

$$I(x, y) = I_{\max} \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi x d_x}{\lambda a'}\right) \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi y d_y}{\lambda a'}\right) \equiv I_{\max} \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi d_x}{\lambda} \sin \theta_x\right) \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi d_y}{\lambda} \sin \theta_y\right) \quad (1.44)$$



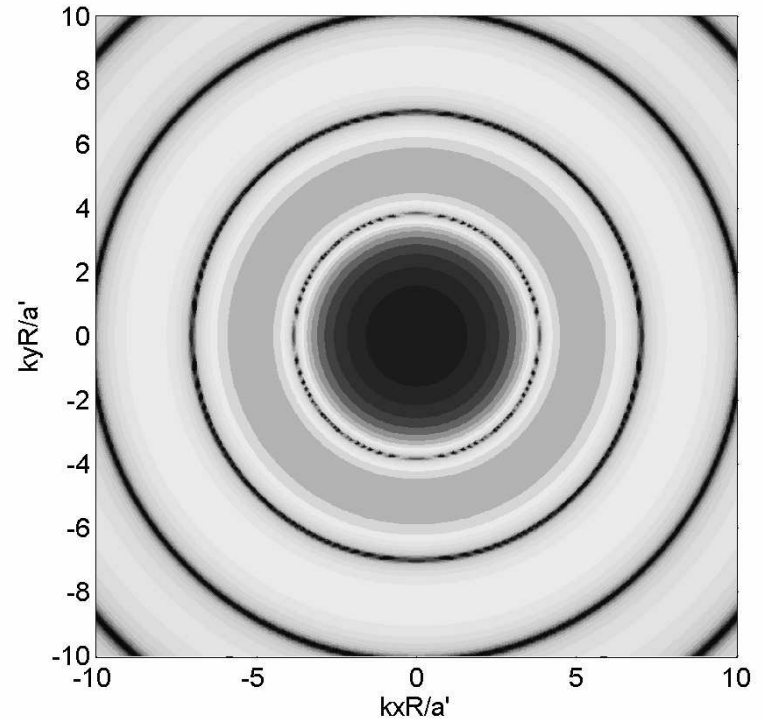
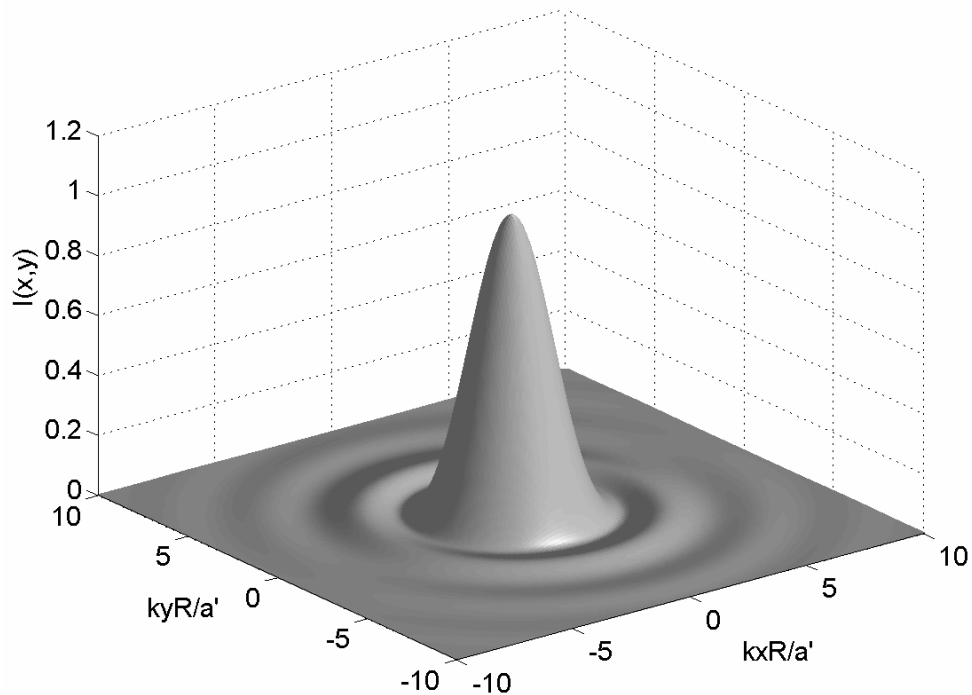
Rozložení difraktované intenzity na stínítku

Difrakce na kruhovém otvoru



Difraktovaná intenzita je

$$I(r) = I_{\max} \left(\frac{2J_1(krR/a')}{krR/a'} \right)^2 \equiv I_{\max} \left(\frac{2J_1(kR \sin \theta)}{kR \sin \theta} \right)^2 \quad (1.45)$$



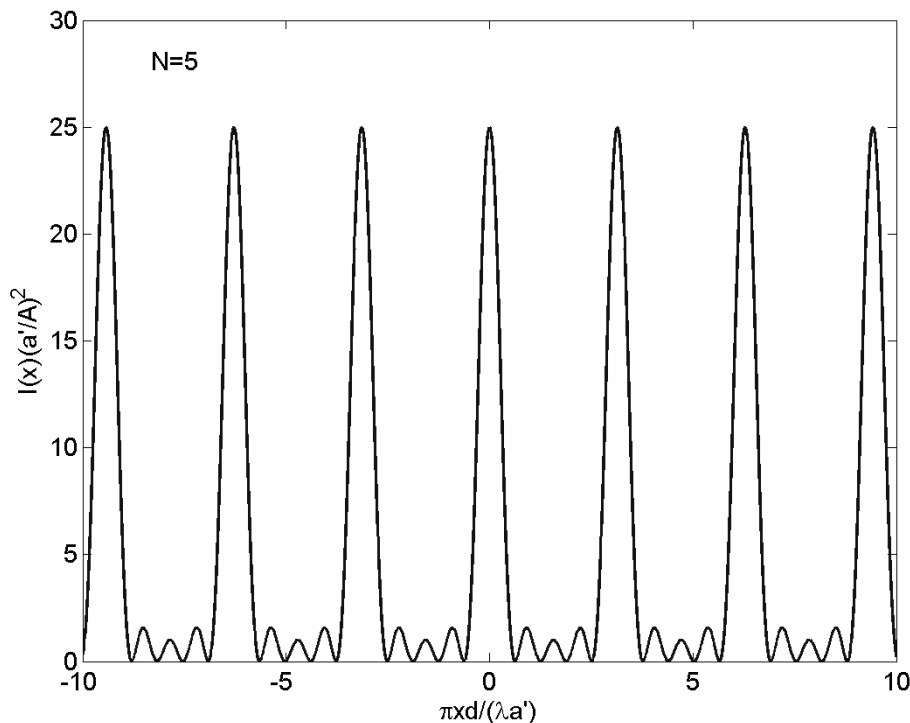
První minimum difrakční intenzity vznikne pro

$$\sin \theta \approx 1.22 \frac{\lambda}{2R} \quad (1.46)$$

Toto rozložení intenzity se pozoruje v zadní ohniskové rovině spojky. Dva předměty se rozliší, je-li jejich úhlová vzdálenost větší než

$$\Delta\theta_{\min} = 1.22 \frac{\lambda}{d} \quad (1.47)$$

kde d je průměr spojky (Raleighovo kritérium rozlišení)



Hlavní difrakční maxima jsou v bodech

$$\sin \theta \equiv \frac{x}{a'} = m \frac{\lambda}{d}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.51)$$

Intenzita v difrakčním maximu je

$$I_{\max} = N^2 \left| \frac{A}{a'} \right|^2 \quad (1.52)$$

Mezi sousedními hlavními difrakčními maximy je $N - 1$ nulových bodů intenzity tj. $N - 2$ vedlejších maxim

Šířka hlavního maxima je přibližně rovna vzdálenosti mezi sousedními minimy:

$$\Delta \sin \theta \equiv \cos \theta \Delta \theta = \frac{\lambda}{Nd} \quad (1.53)$$

Použití difrakční mřížky: mřížkový spektrograf

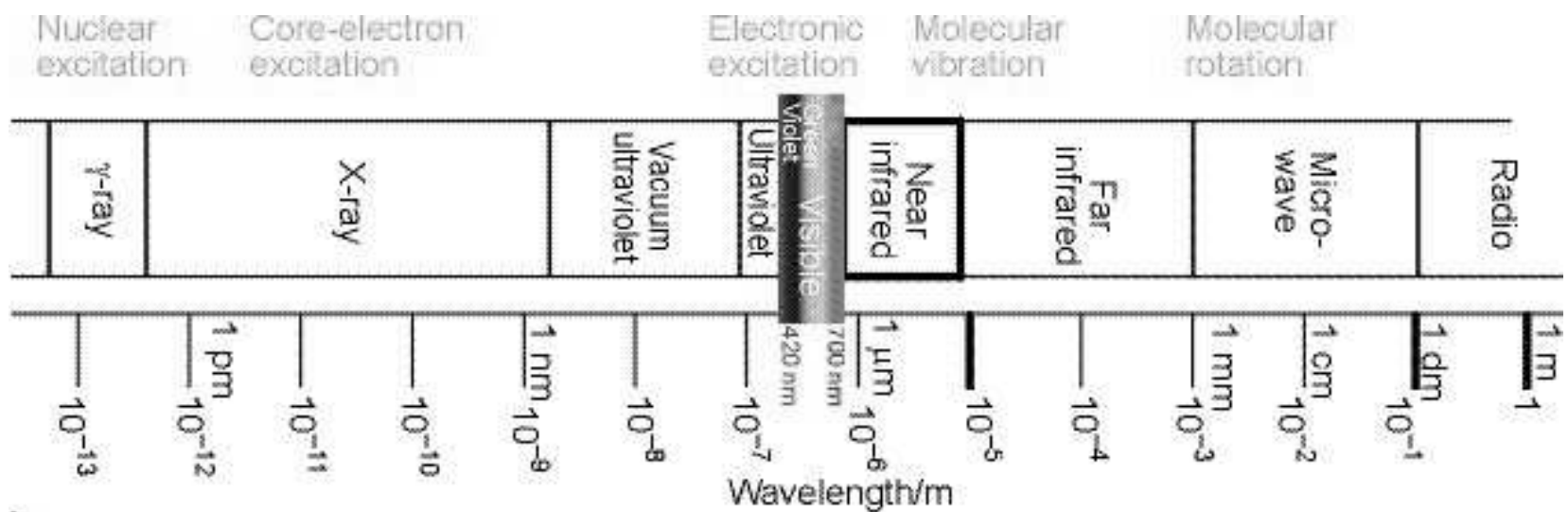
Konečná velikost štěrbin ovlivní výšku difrakčních maxim, jejich poloha a šířka zůstanou nezměněny.

II. ELEMENTY KVANTOVÉ FYZIKY

II.1. Kvantový popis světla

Historie: Teorie elektromagnetismu (James Clerk Maxwell 1865-1873) – světlo je elektromagnetické vlnění, elektromagnetické vlnění má vlastnosti analogické světlu – odraz elektromagnetického vlnění, lom na rozhraní atd.

Experimentální ověření existence elektromagnetických vln, jejich odrazu a lomu – Heinrich Hertz (1857-1894)



Záření černého tělesa

Každý objekt zahřátý na dostatečně vysokou teplotu emituje světlo. Jaké je spektrální složení tohoto světla?

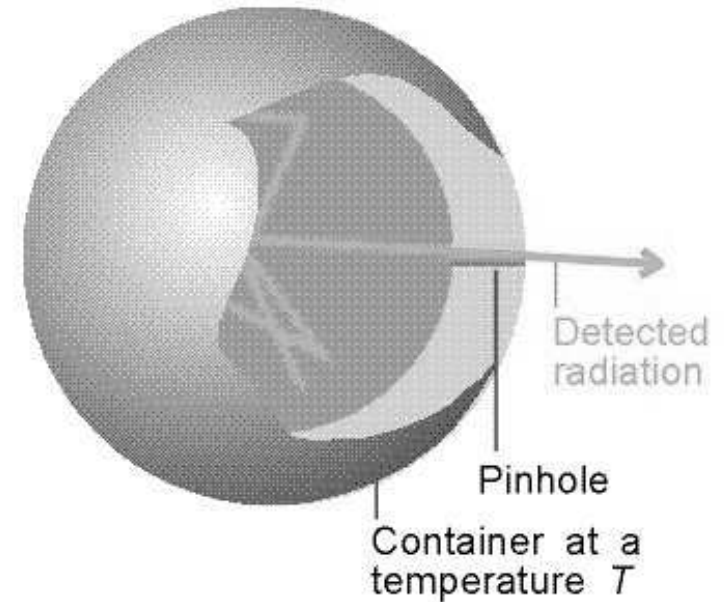
J. Stefan (1879) ukázal experimentálně, že celkový výkon emitovaný jednotkovou plochou horkého tělesa na všech frekvencích dohromady je úměrný 4. mocnině jeho absolutní teploty

$$e_{\text{total}} = a\sigma T^4 \quad (\text{II.1})$$

$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ je Stefan-Boltzmannova konstanta, konstanta a závisí na „barvě“ tělesa, $a = 1$ je pro ideálně černé těleso.

Zavedme spektrální hustotu záření – energie v jednotkovém objemu dutiny v horkém tělese v jednotkovém intervalu vlnových délek $u(f, T)$. Hledal se univerzální tvar této funkce. Wien (1893) na základě experimentů předpokládal tvar (Wienův exponenciální zákon)

$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) \quad (\text{II.2})$$



Ukázalo se však experimentálně, že pro dlouhé vlnové délky vztah neplatí.

Raleigh a Jeans předpokládali, že elektromagnetické vlnění v dutině je v termodynamické rovnováze okolními stěnami. Stojatou elektromagnetickou vlnu uvažovali jako harmonický oscilátor a předpokládali jeho střední energii ve tvaru $k_B T$. Vlnění v dutině je superpozicí velkého počtu stojatých vln (harmonických oscilátorů). Nakonec jim vyšlo

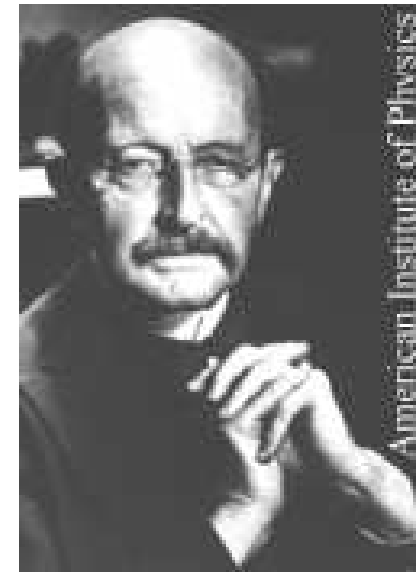
$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T \quad (11.3)$$

Tento vztah dobře vyhovoval pro dlouhé vlny, selhával pro krátké vlny, kde lépe platil Wienův zákon.

Max Planck vyřešil rozpor předpokladem, že energie elementárního harmonického oscilátoru, tj. stojaté elektromagnetické vlny v dutině černého tělesa, je celistvým násobkem hf , kde h je Planckova konstanta

$$h \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

Max Planck (1858-1947)



Odvodil vztah pro spektrální hustotu záření

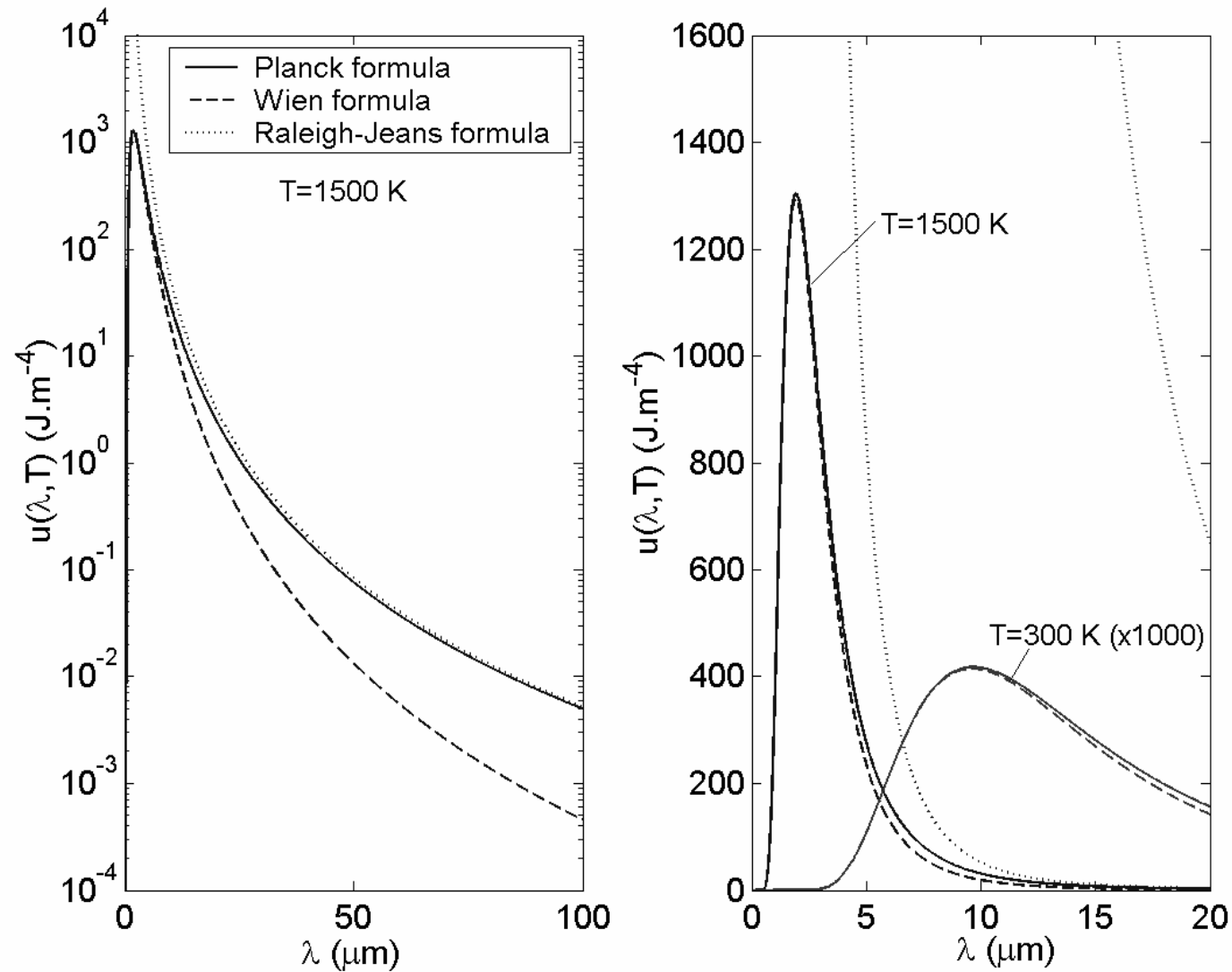
$$u(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \quad (11.4)$$

Limita Planckova zákona pro $hc / (\lambda k_B T) \gg 1$ je Wienův vzorec, pro $hc / (\lambda k_B T) \ll 1$ vyjde Raleighův-Jeansův zákon

Elektromagnetické vlnění existuje v nespojitých energetických kvantech o energii

$$E = hf = \hbar\omega, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s} \approx 6.582 \times 10^{-16} \text{ eV.s} \quad (11.5)$$

Srovnání spektrálních hustot podle Wienova zákona, Raleigh-Jeansova zákona a Planckova zákona



Vnější fotoelektrický jev

H. Hertz: čisté kovové povrchy emitují nabitě částice, jsou-li ozářeny UV světlem

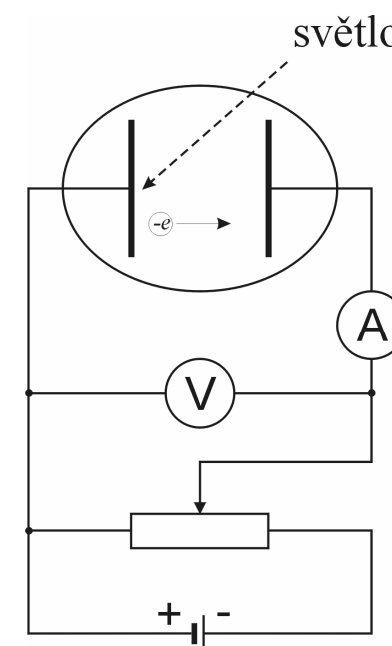
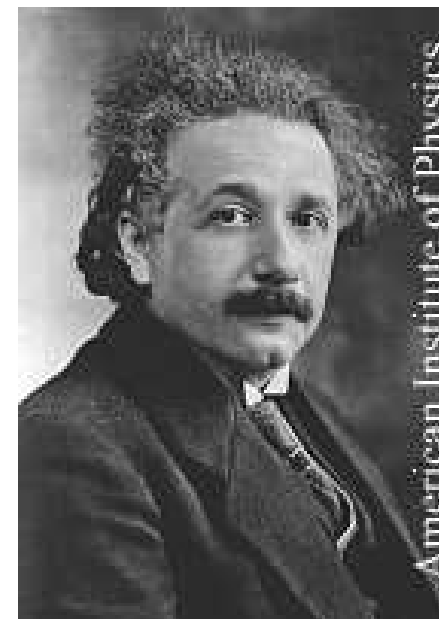
Albert Einstein (1877-1955)

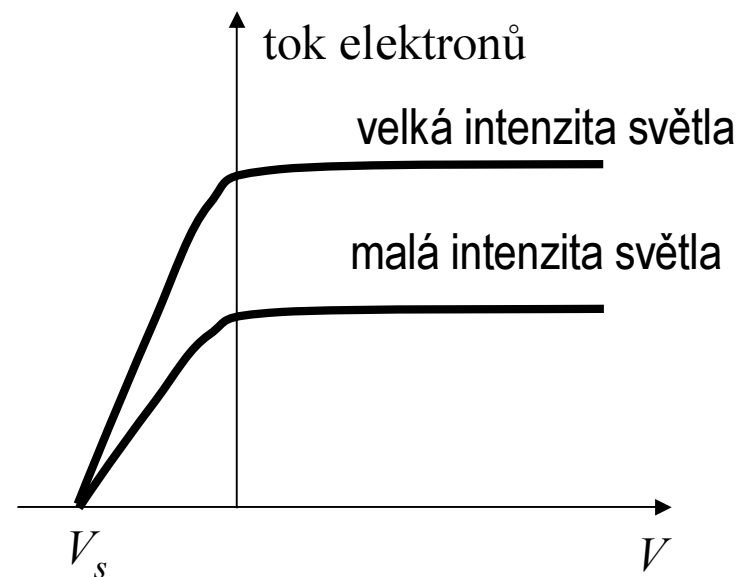
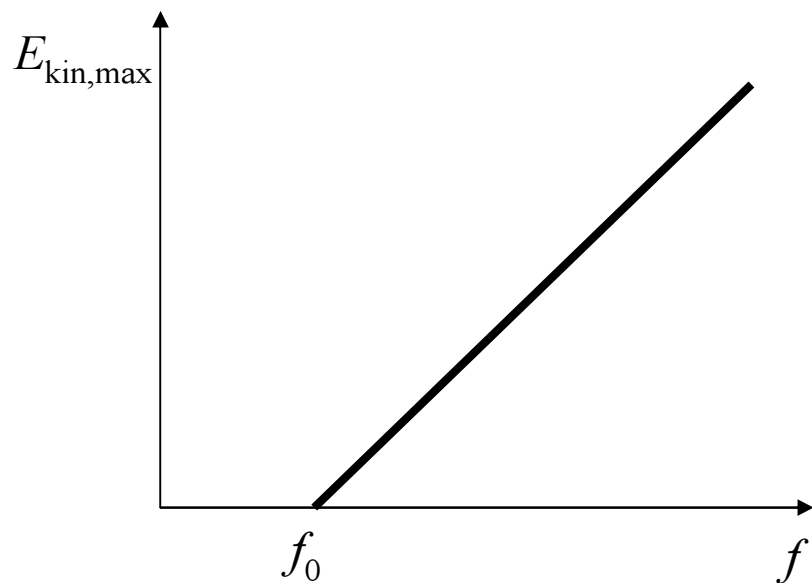
Hallwachs (1888): tyto náboje jsou záporné

J. J. Thomson (1899): kovové povrchy emitují **elektrony**

P. Lennard (1902): maximální kinetická energie emitovaných elektronů nezávisí na intenzitě světla, zvětšuje se s frekvencí světla. Tok emitovaných elektronů je úměrný intenzitě světla.
Měření maximální kinetické energie elektronů:

$$E_{\text{kin,max}} = eV_s \quad (\text{II.6})$$





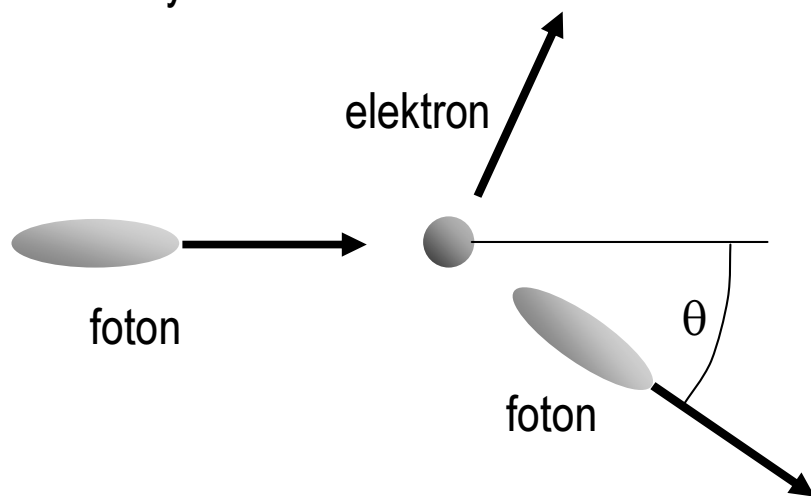
A. Einstein (1902): $E_{\text{kin,max}} = hf - \varphi$ φ .. výstupní práce elektronu v kovu (II.7)

Světelné kvantum (**foton**) se absorbuje v kovu. Jeho energie se spotřebuje na výstupní práci a urychlení elektronu

Comptonův jev

A. H. Compton (1922) ukázal, že fotony se chovají jako částice s hybností $p = hf/c$

Fotony rtg záření se rozptylují na volných elektronech. Tento rozptyl nelze vysvětlit klasickou elektrodynamikou



Rozptylem fotonu na elektronu se část energie fotonu přemění na kinetickou energii elektronu (zpětný ráz), celková hybnost a energie soustavy se zachovávají

$$hf^{(1)} = hf^{(2)} + \Delta E_{\text{kin,el}}$$
$$\mathbf{p}_{\text{fot}}^{(1)} = \mathbf{p}_{\text{fot}}^{(2)} + \Delta \mathbf{p}_{\text{el}} \quad (\text{II.8})$$

Odtud:

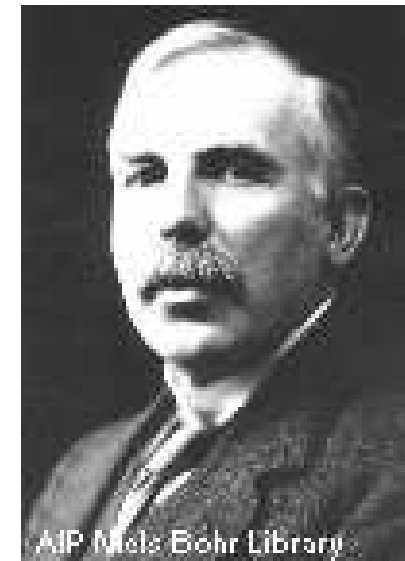
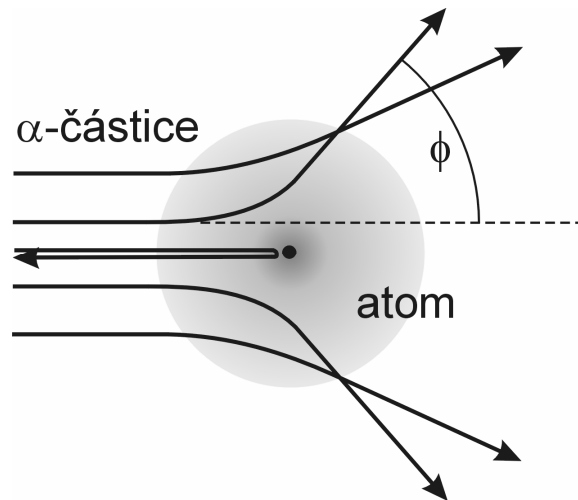
$$\lambda^{(2)} - \lambda^{(1)} = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta), \quad \frac{h}{mc} \approx 0.00234 \text{ nm} \quad (\text{II.9})$$

II.2. Bohrov model atomu

Základní experimenty:

- **Objev elektrolýzy** (M. Faraday – 1833) – hmotnost vyloučené látky na elektrodě je přímo úměrná přenesenému náboji a nepřímo úměrná mocnosti vylučované látky
- **Objev elektronu** a změření jeho specifického náboje e/m (J. J. Thomson – 1897) – elektrický proud se přenáší v kvantech
- **Přesné měření elektrického náboje e** (R. Millikan – 1909)
- **Objev atomového jádra** (E. Rutherford, H. Geiger, E. Marsden – 1913) rozptylem α -částic na tenké kovové folii

Rutherfordův rozptyl α -částic na atomových jádrech



Ernest Rutherford (1871-1937)

Mezi kladně nabitou α -částicí a kladně nabitým atomovým jádrem s Z protony působí odpudivá elektrostatická síla. Při rozptylu se zachovává mechanická energie a celková hybnost soustavy
Tok rozptýlených částic závisí na úhlu rozptylu ϕ jako

$$I(\phi) = \text{const.} \cdot Z \cdot [\sin(\phi / 2)]^{-4} \quad (\text{II.10})$$

Velikost jádra lze odhadnout z minimální vzdálenosti mezi α -částicí a jádrem, kterou částice dosáhne při $\phi = \pi$, vyjde řádově 10^{-15} m.

V době objevu nebylo jasné:

- (i) co drží protony v jádře a překonává odpudivé elektrostatické síly mezi protony
- (ii) proč je hmotnost atomu větší než hmotnost Z protonů
- (iii) proč se elektrony pohybují po stabilních drahách kolem jádra a nevyzařují při tomto pohybu elektromagnetické vlnění

Problém (i) byl vyřešen mnohem později objevem silné interakce.

Problém (ii) byl vyřešen objevem neutronu (J. Chadwick – 1921).

Problém (iii) byl vyřešen v rámci Bohrova modelu atomu (N. Bohr – 1913).

Bohrův model atomu (1913)

Niels Bohr (1885-1962)



Postuláty:

- elektrony se pohybují po kruhových drahách kolem jádra
- kruhové dráhy jsou stabilní
- přechází-li elektron z jedné kruhové dráhy na jinou emituje nebo absorbuje foton

$$E_i - E_f = \pm hf \quad (II.11)$$

- poloměry stabilních kruhových drah plynou z kvantovací podmínky

$$mvr_n = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (II.12)$$

Pohybová rovnice elektronu na stabilní dráze kolem protonu (atom vodíku):

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (II.13)$$

Z (II.12) a (II.13) plyne $r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} \cdot n^2$ $r_n = a_0 n^2$ (II.14)

$a_0 \approx 0.0529$ nm je Bohrův poloměr

Energie elektronu na n -té dráze (orbitě):

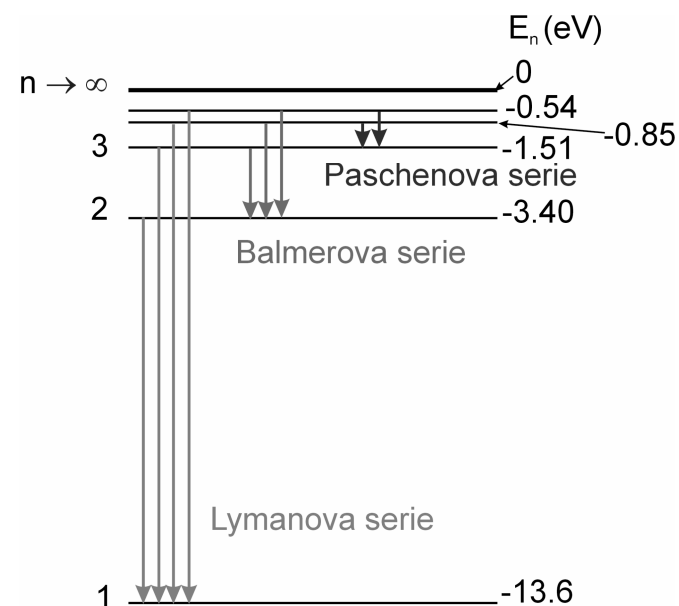
$$E_n = E_{\text{kin},n} + E_{\text{pot},n} = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \boxed{E_n = -\mathcal{R} \frac{1}{n^2}, \quad \mathcal{R} \approx 13.6 \text{ eV}} \quad (\text{II.15})$$

\mathcal{R} je Rydbergova konstanta, n je **kvantové číslo**, E_n jsou ionizační energie orbitů

Energie emitovaných fotonů:

$$hf = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (\text{II.16})$$

Spektrální série atomu vodíku:



Princip korespondence:

Pro klasické objekty musí kvantověmechanické výsledky souhlasit s klasickou mechanikou. V případě atomu vodíku musí pro $n \rightarrow \infty$ vyjít klasický výsledek.

II.3. De Broglieho vlny

Doposud jsme studovali částicovou podstatu hmoty. Experimentálně se ukázalo, že některé vlastnosti částic lze popsat pomocí jejich vlnové povahy (Difrakce elektronů – C. J. Davisson a L. H. Germer, 1927).

Bohrova atomární teorie měla řadu nedostatků:

- Neumožnila předpovědět intenzitu spektrálních čar,
- selhávala u atomů s více elektrony

Louis Victor de Broglie (1892-1987)



Nová mechanika byla založena na myšlence částicově-vlnového dualismu (L. V. de Broglie – 1923). Předpokládala částicové a současně vlnové vlastnosti všech částic, podobně jako u fotonů. Vlnová délka de Broglieho vln (matter waves) spojených s pohybujícím se objektem je

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (II.17)$$

a frekvence těchto vln

$$f = \frac{E}{h}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (II.18)$$

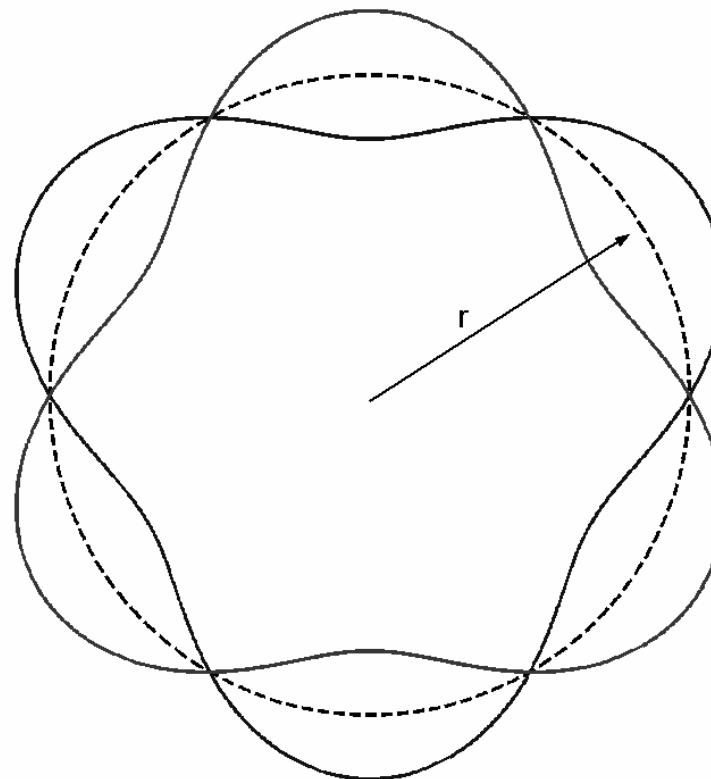
Tato teorie umožnila vyložit kvantování v Bohrově modelu atomu:

Délka orbity je rovna celistvému násobku vlnových délek de Broglieho vlny elektronu:

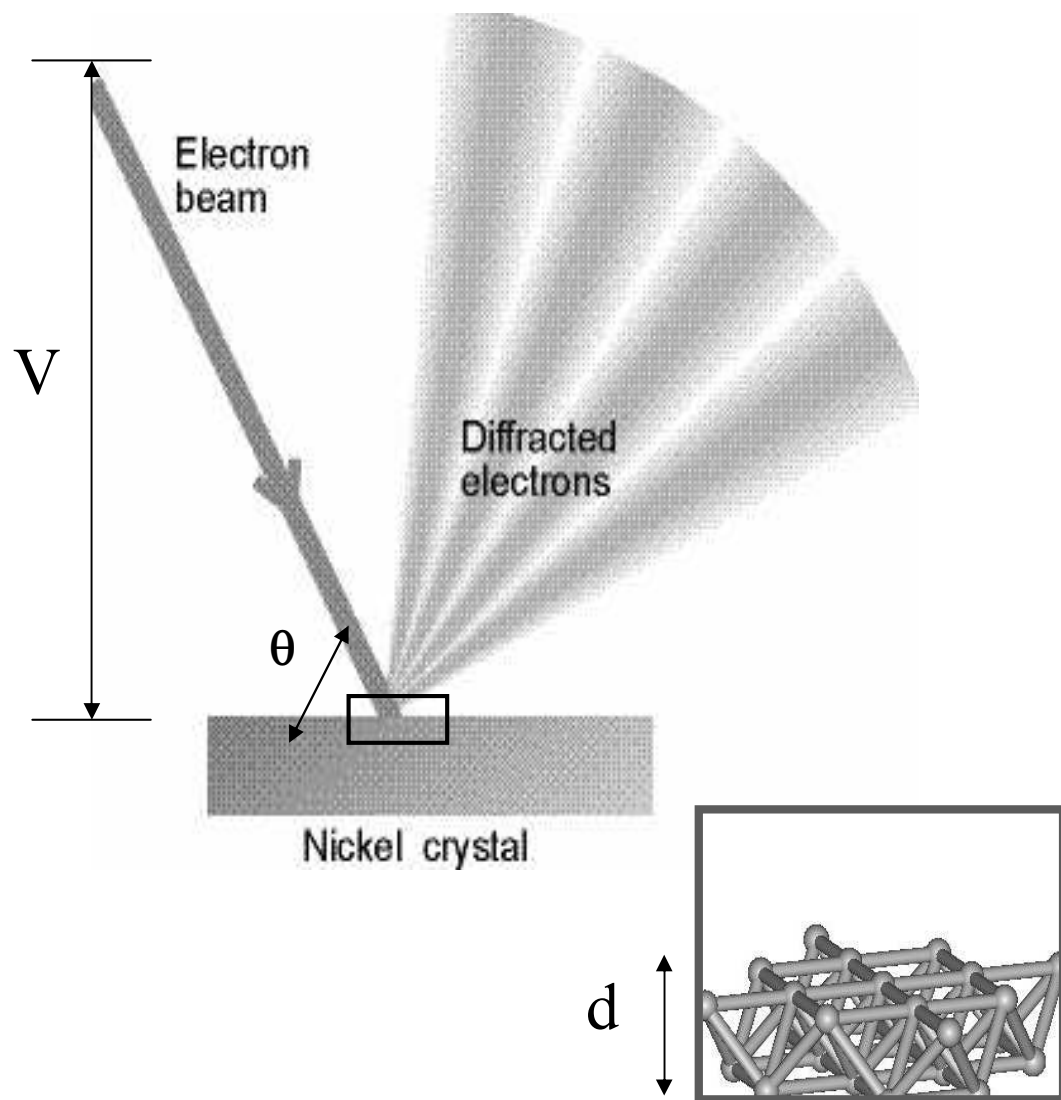
$$n\lambda = 2\pi r \Rightarrow mvr = n\hbar$$

(II.19)

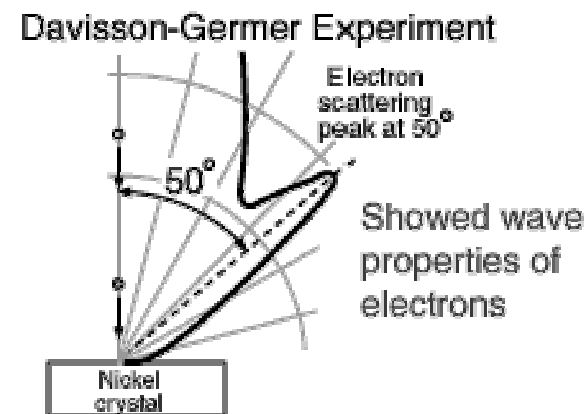
příklad de Broglieho vlny pro $n = 3$



Davissonův-Germerův experiment – difrakce elektronů na krystalové mřížce (1927)



Clinton Davisson (1881-1958)

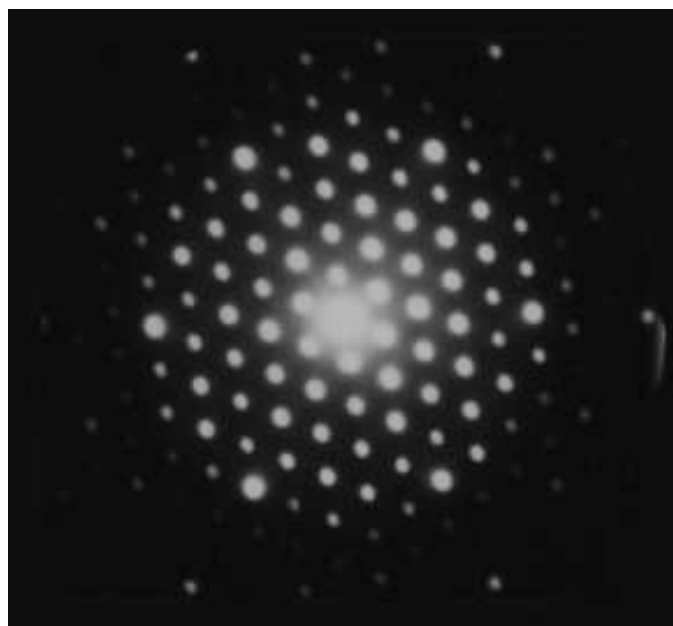


Elektrony jsou urychleny napětím V , jejich vlnová délka je

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2eVm}} \quad (\text{II.20})$$

V původním experimentu se použilo $V = 54\text{V}$, tedy $\lambda = 1.67\text{\AA}$. Tyto elektrony difraktují na krystalové mřížce Ni, difrakční podmínka

$$2d \sin \vartheta = n\lambda \quad (\text{II.21})$$



Vlnová klubka

Pohybující se lokalizovaná částice nemůže být popsána postupnou monochromatickou vlnou. Lokalizaci získáme superpozicí mnoha postupných vln s různými frekvencemi

Monochromatická postupná vlna:

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} \quad (\text{II.22})$$

Vlnové klubko:

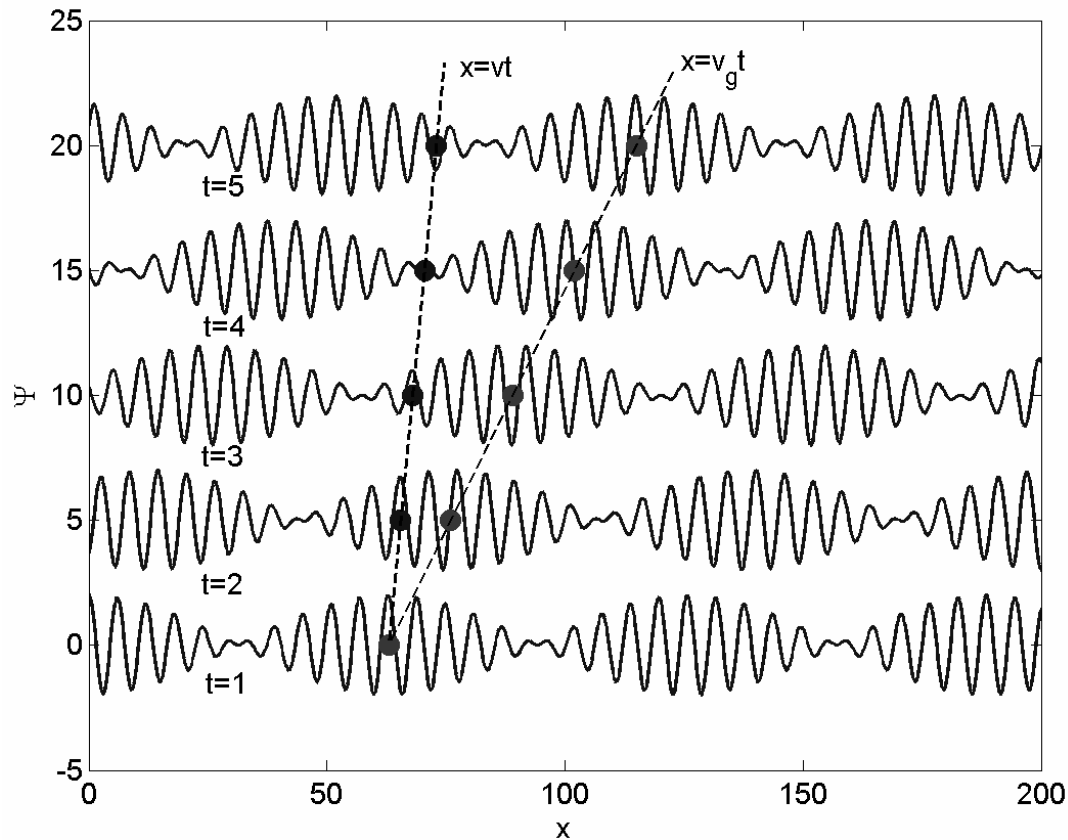
$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{-i(\omega(k)t - kx)} \quad (\text{II.23})$$

Disperze: $\omega = \omega(k)$

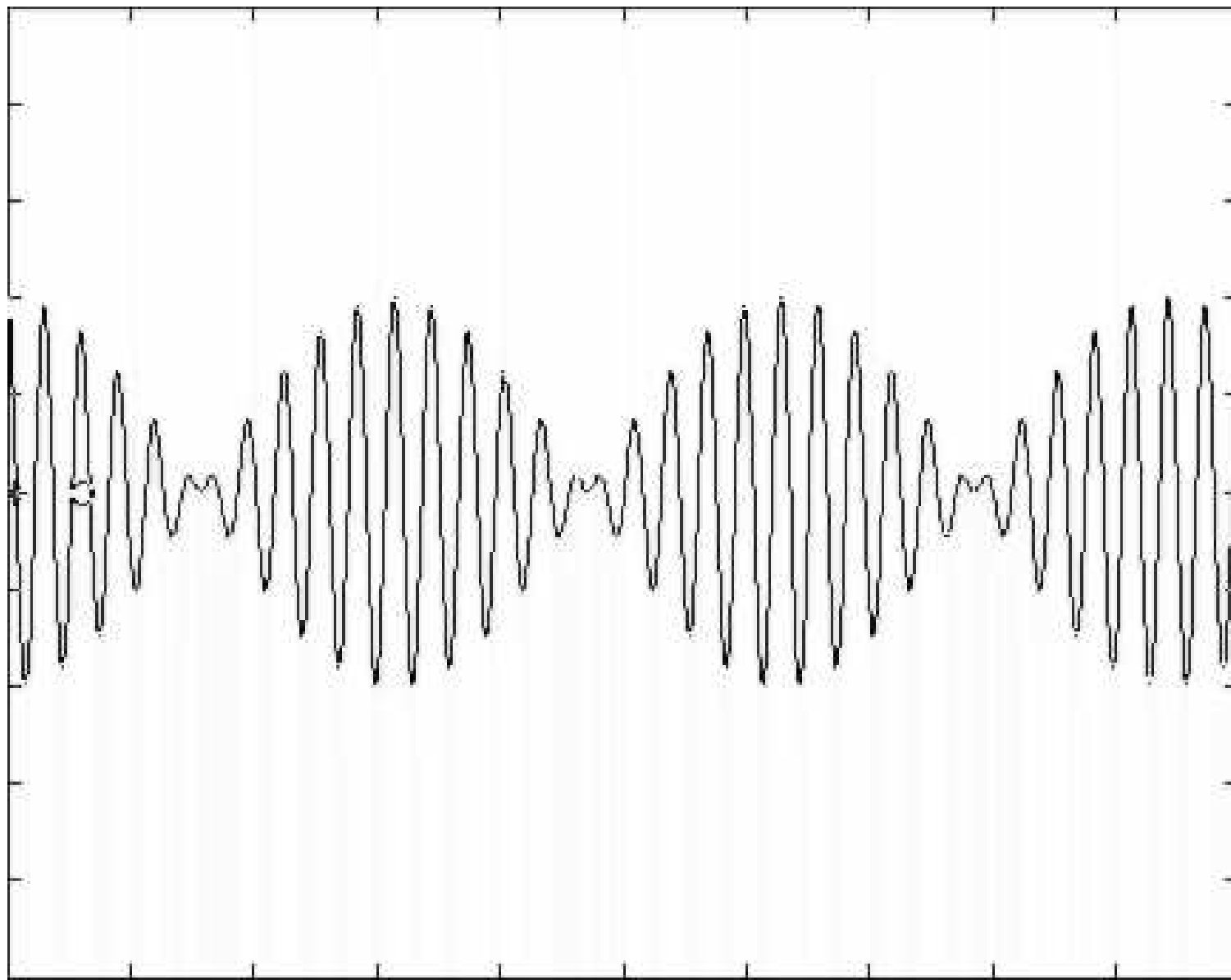
$$\text{Fázová rychlost: } v(k_0) = \frac{\omega(k_0)}{k_0} \quad \text{grupová rychlost: } v_g(k_0) = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (\text{II.24})$$

Superpozice dvou monochromatických postupných vln s týmiž amplitudami, s vlnovými vektory $k_1=1$, $k_2=1.1$ a fázovými rychlostmi $v_1=2$ a $v_2=3$ (v libovolných jednotkách).
 Výsledné vlnové klubko má fázovou a grupovou rychlost

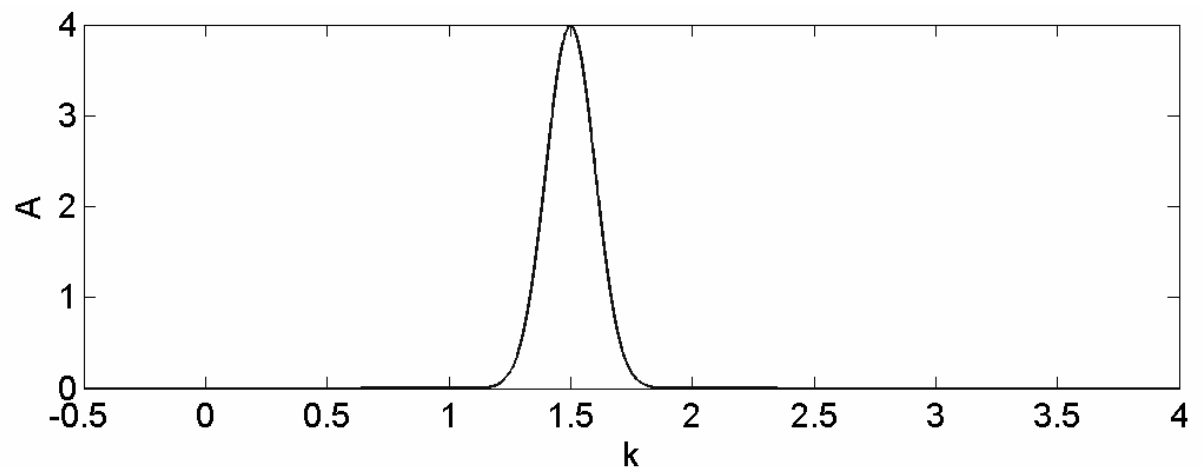
$$v \approx \frac{v_1 + v_2}{2} = 2.5, \quad v_g = v + k \frac{dv}{dk} \approx \frac{v_1 + v_2}{2} + \frac{k_1 + k_2}{2} \frac{v_2 - v_1}{k_2 - k_1} = 13$$



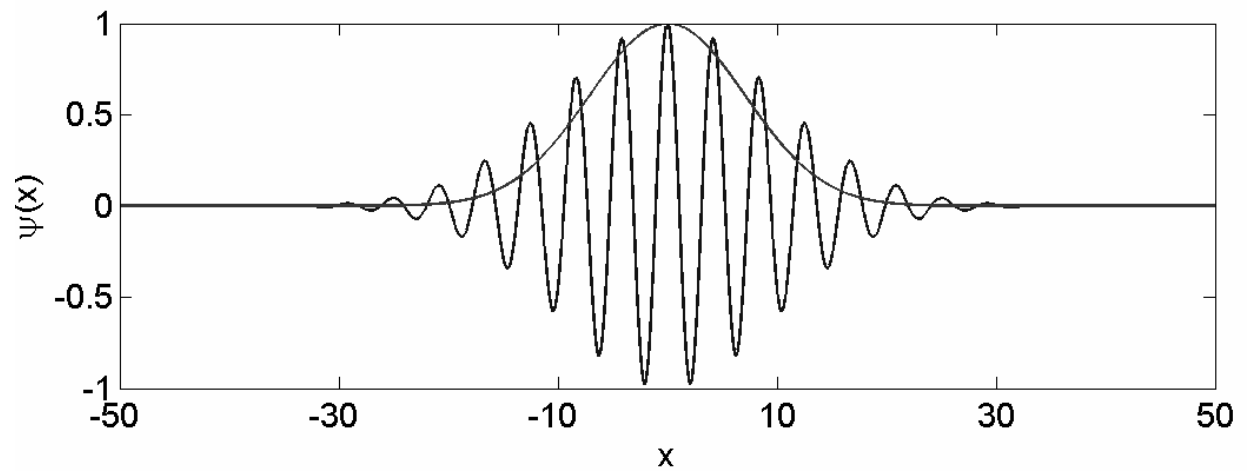
Fáze se posouvá rychlostí v ,
 maximum amplitudy klubka se posouvá
 rychlostí v_g .



Vlnové klubko složené z mnoha monochromatických vln. Závislost amplitudy na vlnovém vektoru:

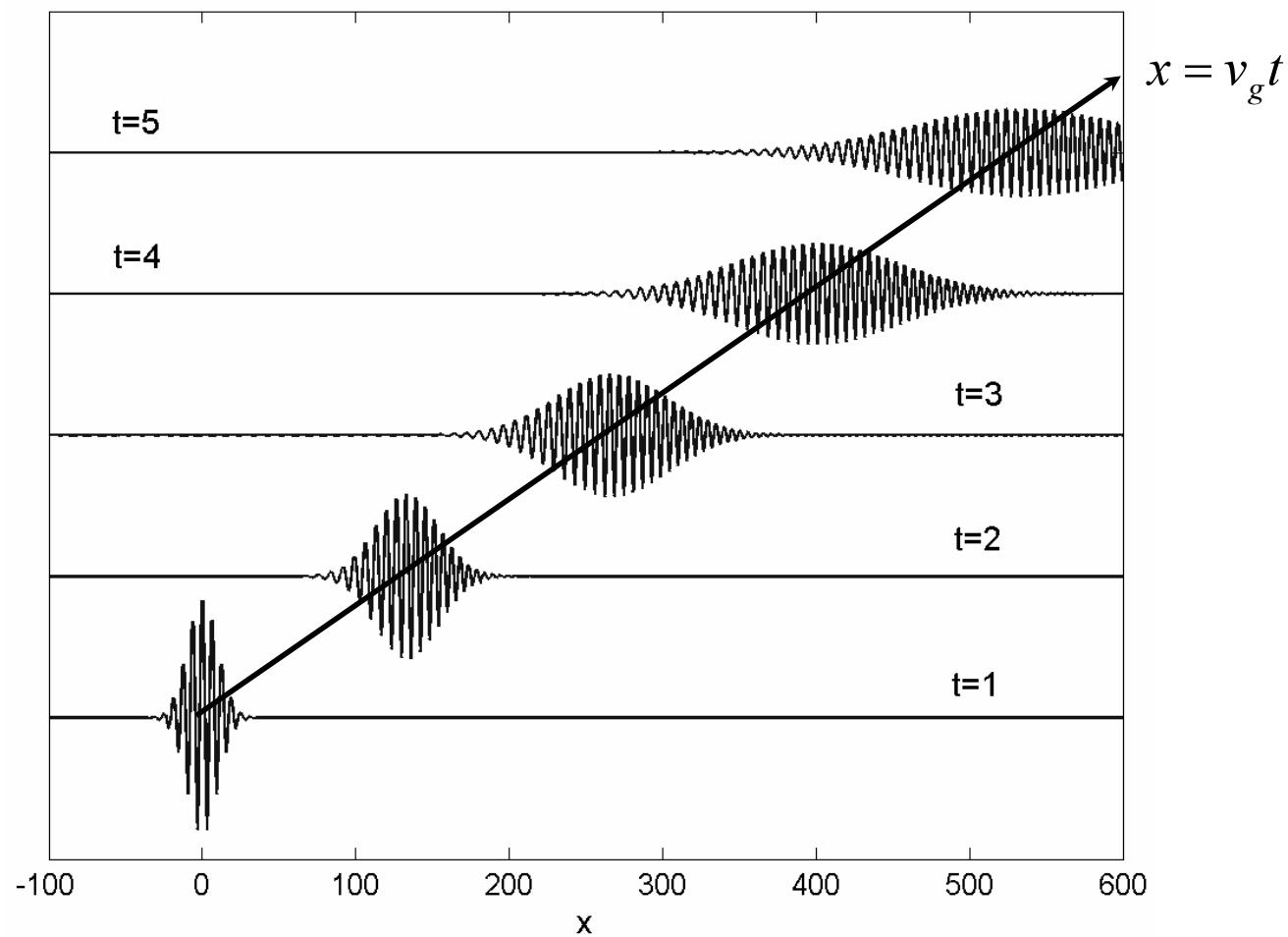


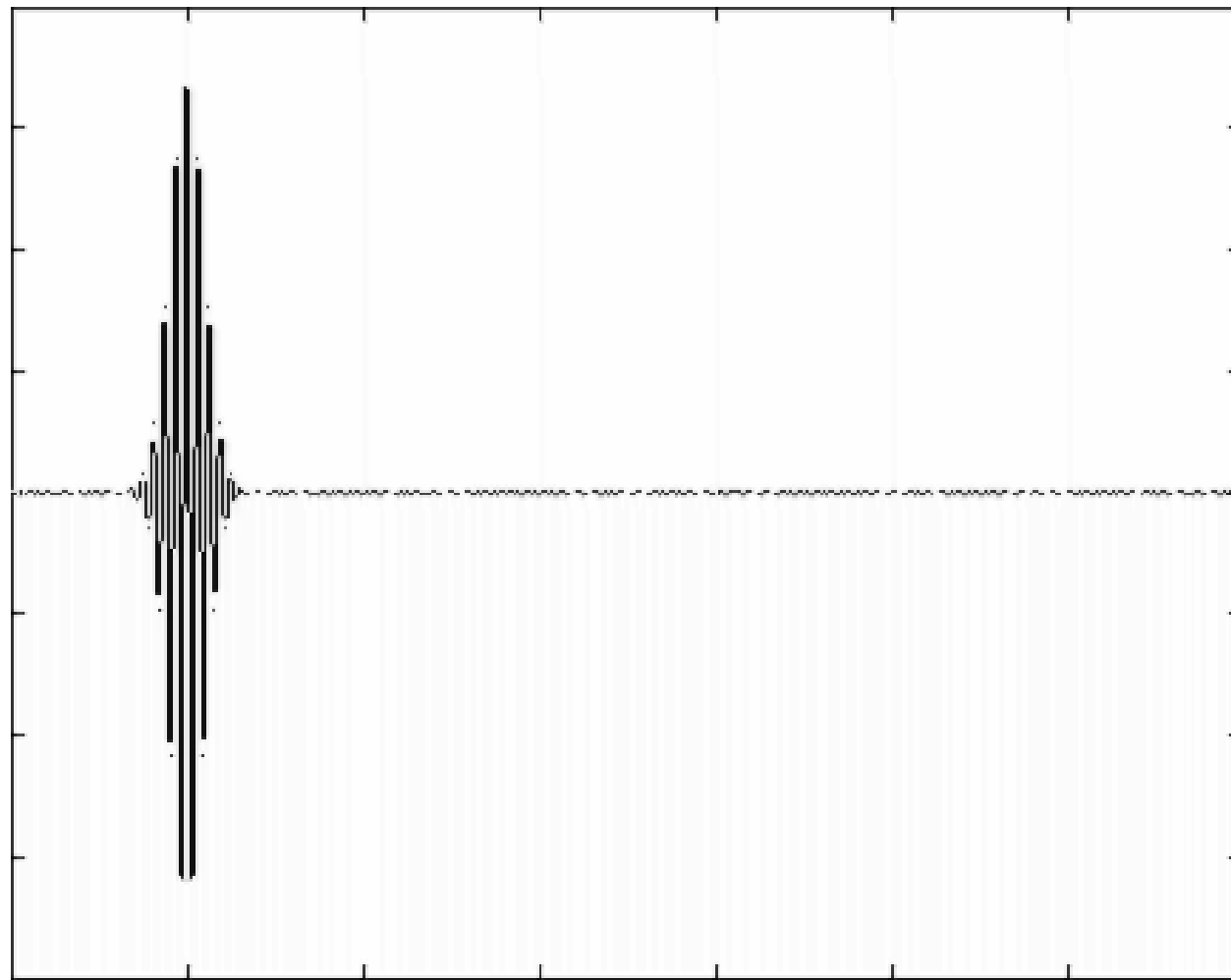
Rozložení výchylky v daném časovém okamžiku:



Časový vývoj tvaru vlnového klubka při nenulové disperzi (libovolné jednotky):

$$\frac{dv}{dk} = \frac{1}{k} \left(\frac{d\omega}{dk} - \frac{\omega}{k} \right) > 0$$





Heisenbergův princip neurčitosti (1924)

Šířka vlnového klubka v prostoru je nepřímo úměrná šířce oboru vlnových vektorů zastoupených ve vlnovém klubku:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

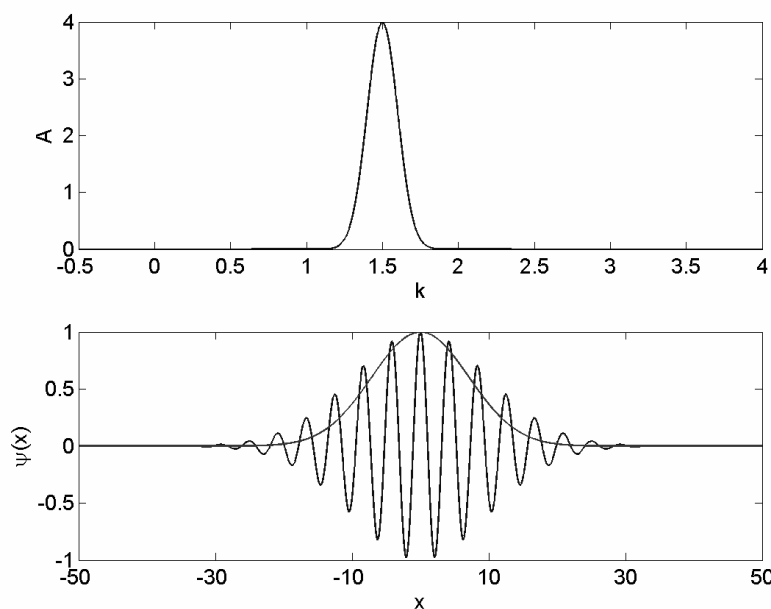
Werner Heisenberg (1901-1976)



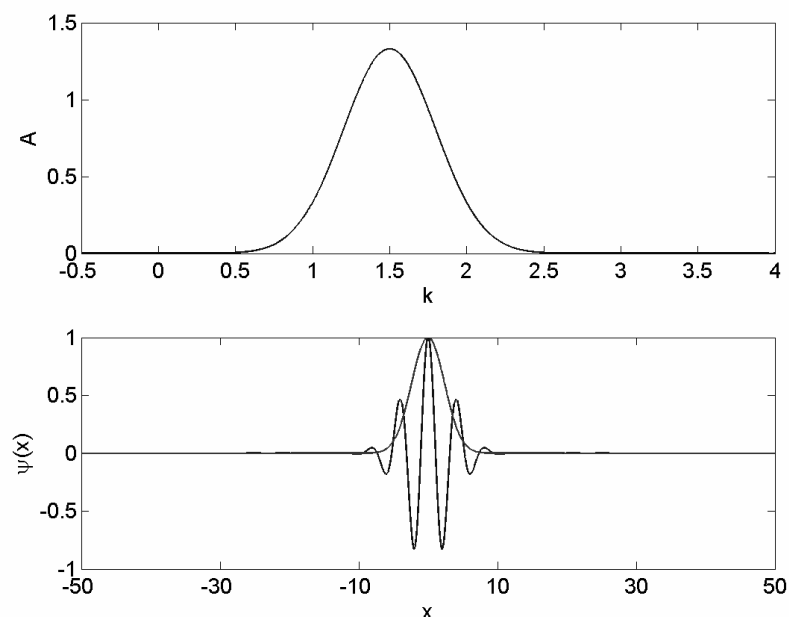
pro hybnosti:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (II.25)$$

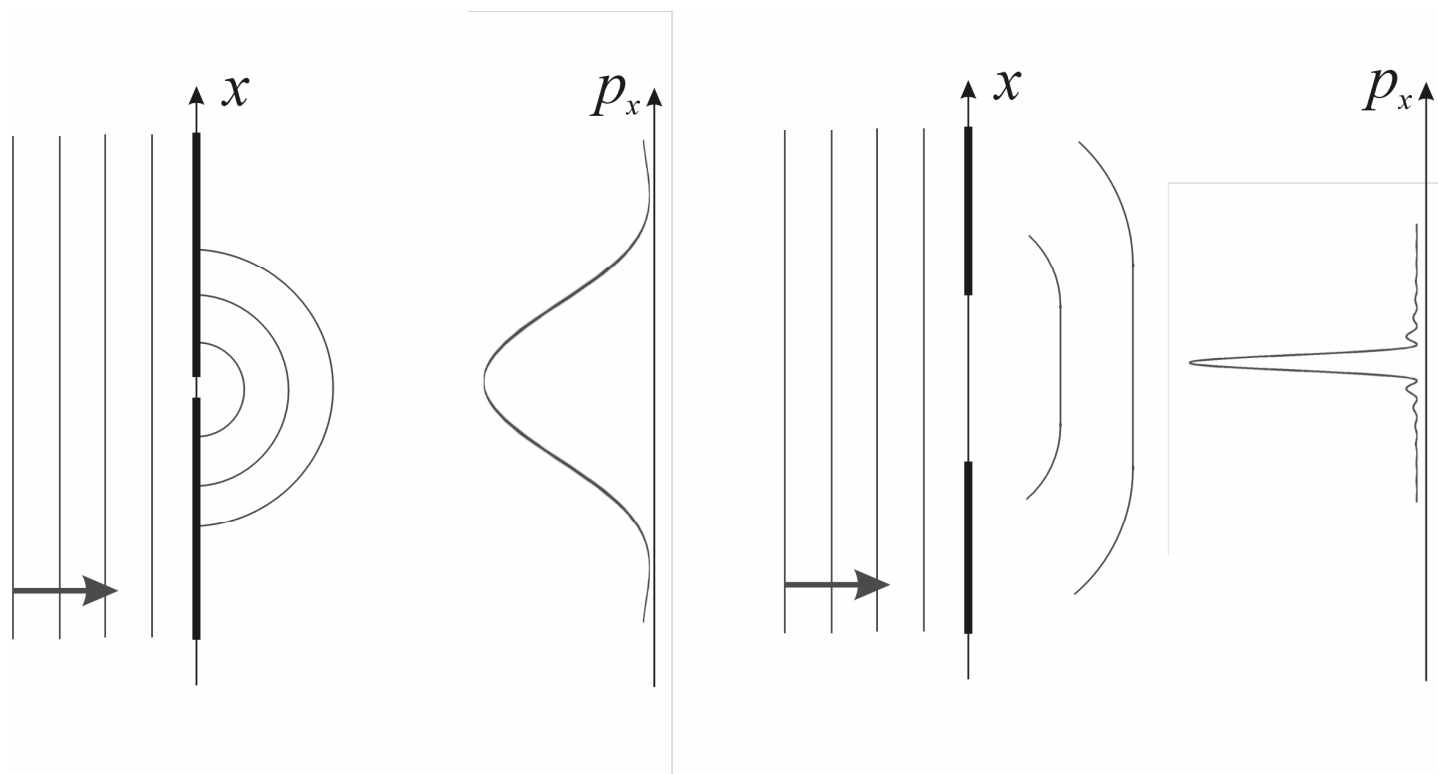
široké klubko



úzké klubko



Heisenbergův princip neurčitosti lze ilustrovat Fraunhoferovou difrací světla na štěrbině:

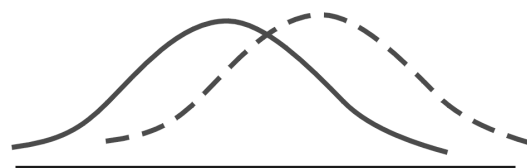
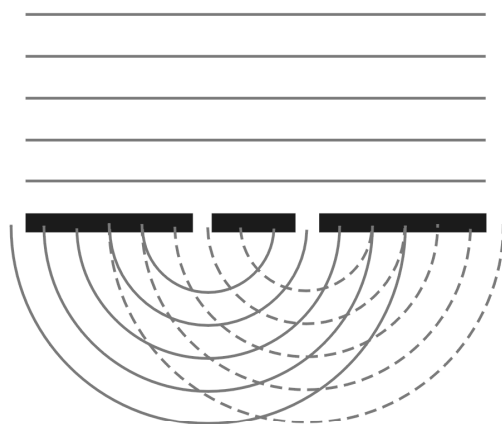


úzká štěrbina – malé Δx , velké Δp_x

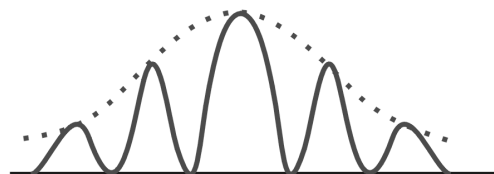
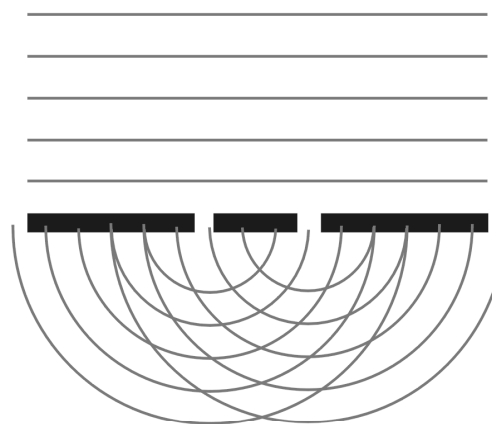
široká štěrbina – velké Δx , malé Δp_x

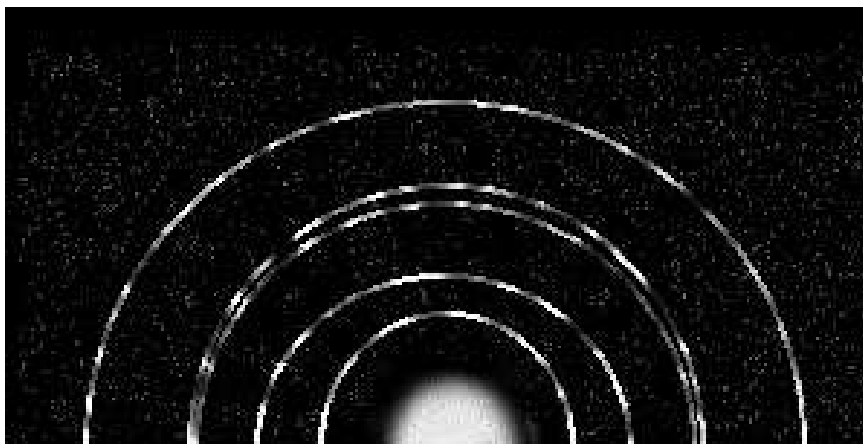
Difrakci částic můžeme popsat jako difrakci de Broglieho vln

jen jeden otvor otevřen



oba otvory otevřeny
současně





rtg difrakce na kovové folii



difrakce elektronů na téže
kovové folii, tatáž vlnová délka

II.4. Základy kvantové mechaniky v 1 dimenzi

Vlnová funkce $\Psi(x, t)$ nese všechny informace o objektu.

Pravděpodobnost nalezení částice v elementárním intervalu dx je

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (\text{II.26})$$

$P(x, t)$ je **hustota pravděpodobnosti** nalezení částice v místě x .

Je jisté, že se částice nachází někde na ose x , proto

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad (\text{II.27})$$

\Rightarrow normovací podmínka pro vlnovou funkci

Vlnová funkce volné částice

Na volnou částici nepůsobí žádná síla a její kinetická energie je konstantní. Z (II.18) plyne

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (\text{II.28})$$



Max Born (1882-1970)

Vlnová funkce

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-i(Et/\hbar - px/\hbar)} \quad (II.29)$$

⇒ postupná monochromatická vlna. Stav částice je úplně určen vlnovým vektorem k (**kvantové číslo**).

Normalizace: částice se určitě nachází v intervalu $\langle a, b \rangle$:

$$\int_a^b dx |\Psi_k(x, t)|^2 = |A|^2 (b - a) = 1 \quad (II.30)$$

Částice v silovém poli

Schrödingerova rovnice – jeden z postulátů kvantové mechaniky

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (II.31)$$

rovnice popisuje časový vývoj vlnové funkce částice v silovém poli s potenciální energií $U(x)$. Počáteční podmínka je dána funkcí

$$\Psi(x, t = 0)$$



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Řešme rovnici separací proměnných. Předpokládejme

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$$

Dosazením vyjde

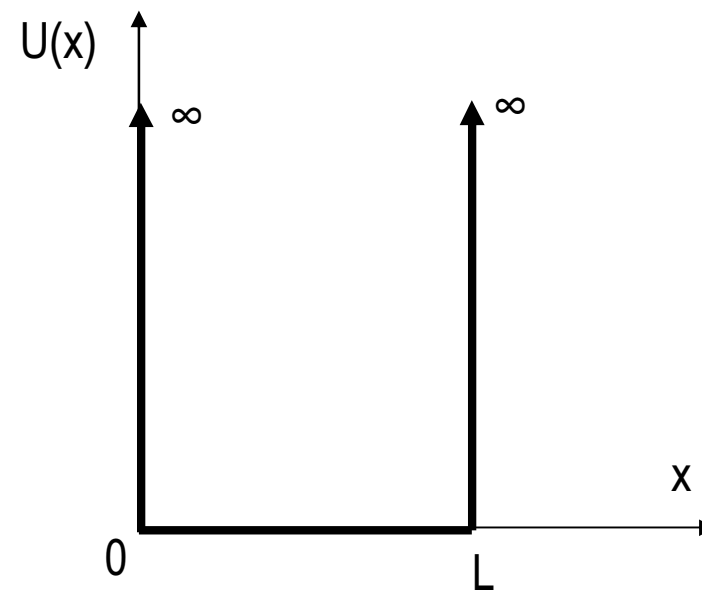
$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) &= E\psi(x); \\ i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} &= E\varphi(t) \Rightarrow \varphi(t) = A \exp(-iEt/\hbar) \end{aligned}$$

(II.31)

časově nezávislá Schrödingerova rovnice

Jednorozměrná nekonečně hluboká kvantová jáma

Předpokládejme profil potenciální energie:



Uvnitř jámy:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (\text{II.32})$$

obecné řešení:
$$\psi_k(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad x \in \langle 0, L \rangle, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{II.33})$$

Částice se určitě nachází uvnitř jámy, mimo jámu se určitě nenachází, tj. $\psi(x) = 0$ vně jámy

Vlnová funkce $\psi(x)$ musí být všude spojitá, její derivace $d\psi/dx$ musí být všude spojitá s výjimkou bodů, v nichž je $U(x) \rightarrow \infty$. Platí proto

$$\psi_k(0) = \psi_k(L) = 0 \quad (\text{II.34})$$

Řešíme rovnici (II.32) s okrajovými podmínkami (II.34) – okrajový problém. Z podmínky (II.34) plyne $A = 0$ a možné hodnoty kvantového čísla k :

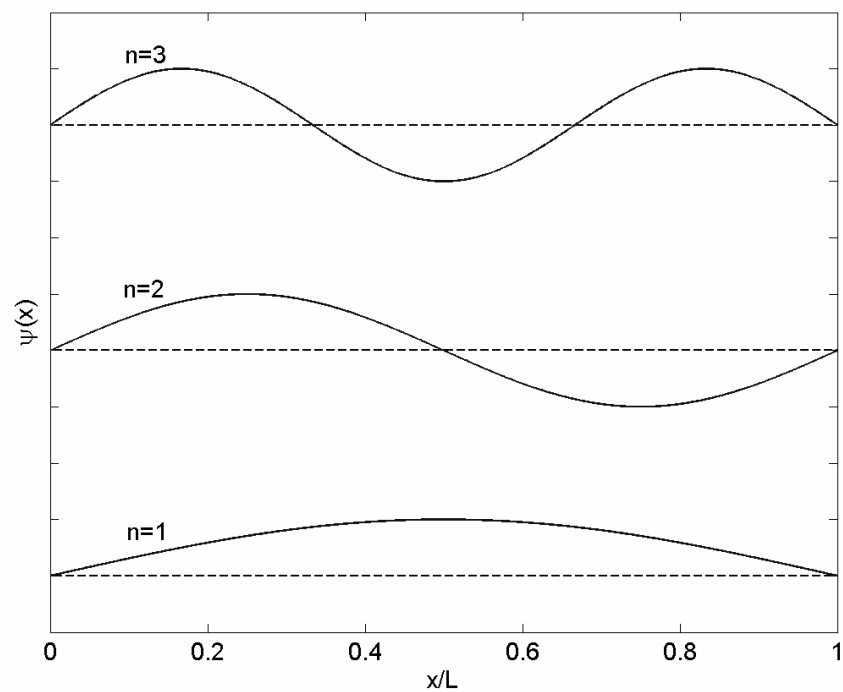
$$\boxed{k = n\pi / L, \quad n = 1, 2, \dots} \quad (\text{II.35})$$

Energie částice v potenciálové jámě jsou **kvantovány**

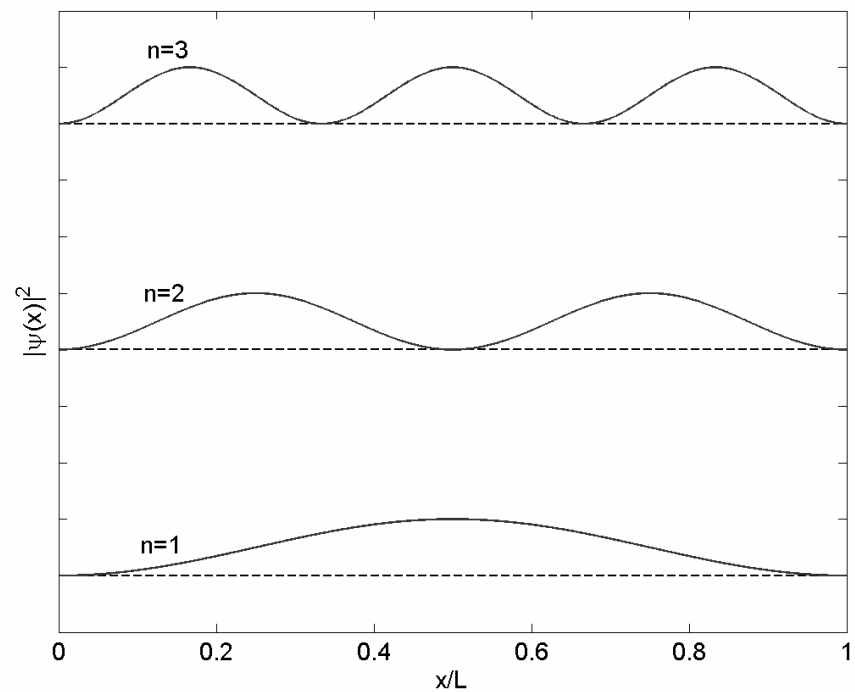
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \propto n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{II.36})$$

Obecné řešení rovnice (II.32) je lineární kombinace řešení (II.33) s různými hodnotami kvantového čísla n

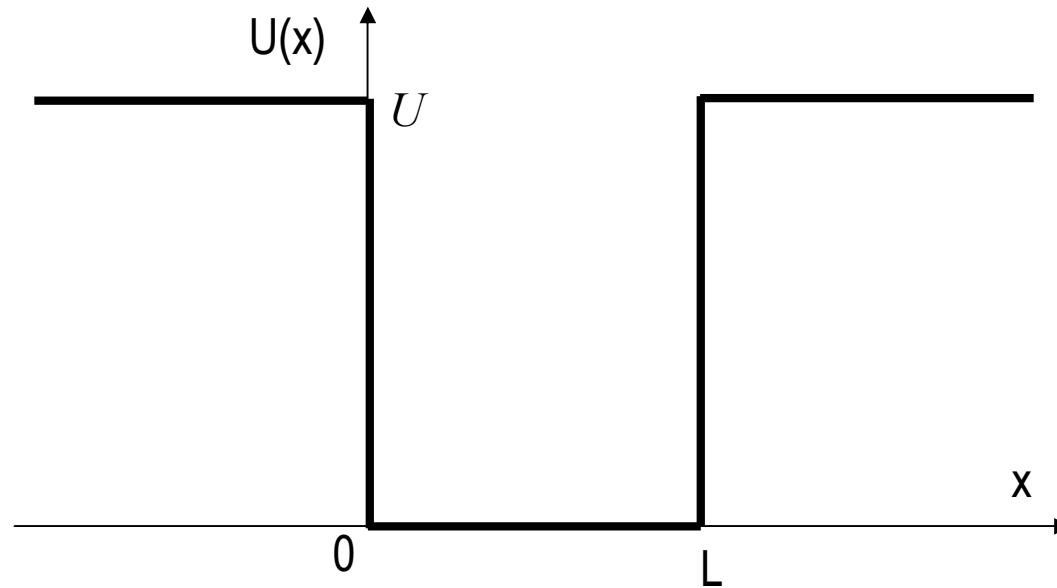
vlnová funkce



hustota pravděpodobnosti



Jednorozměrná konečně hluboká kvantová jáma



Schrödingerova rovnice částice uvnitř jámy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, x \in \langle 0, L \rangle \quad (\text{II.37})$$

v bariérách

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - U)\psi, x \notin \langle 0, L \rangle \quad (\text{II.38})$$

Okrajové podmínky – spojitost $\psi(x)$ a její 1. derivace v bodech $x = 0$ a $x = L$.

Uvažme případ $E < U$, tj. částice je vázána v jámě. Řešení rovnice (II.37) má tvar (II.33), rovnice (II.38) má řešení

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ce^{\alpha x} \text{ pro } x < 0, \psi(x) = De^{-\alpha x} \text{ pro } x > L, \\ \alpha &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} \end{aligned} \tag{II.38}$$

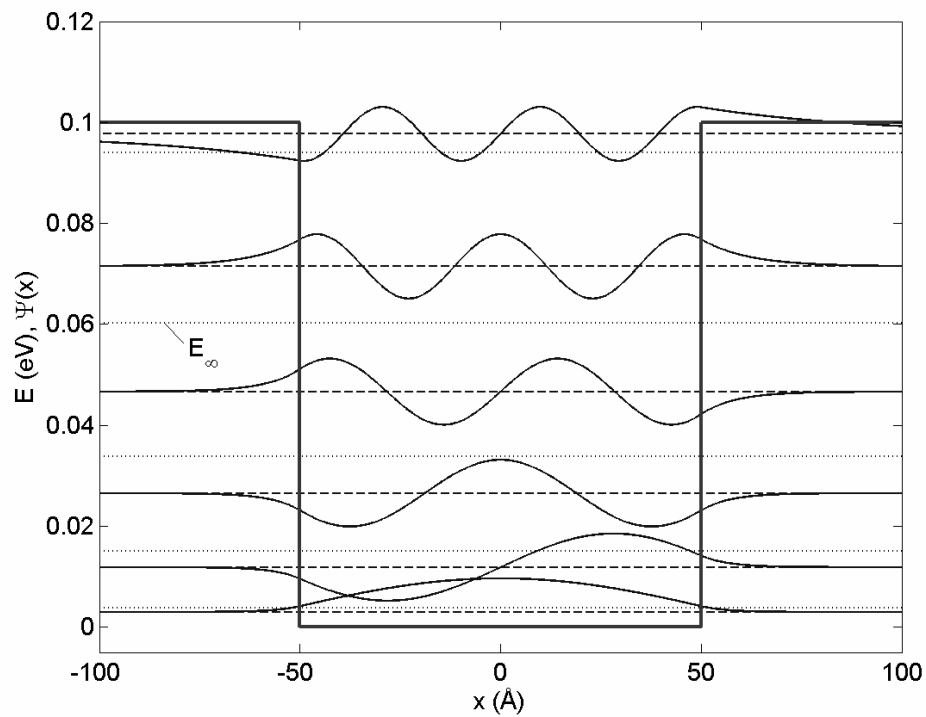
Použili jsme přitom podmínku $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$ Koeficienty A, B, C, D určíme z okrajových podmínek

Tyto podmínky lze napsat jakou soustavu 4 lineárních homogenních rovnic pro A, B, C, D . Podmínka existence netriviálního řešení této soustavy je, že determinant její matice je nulový:

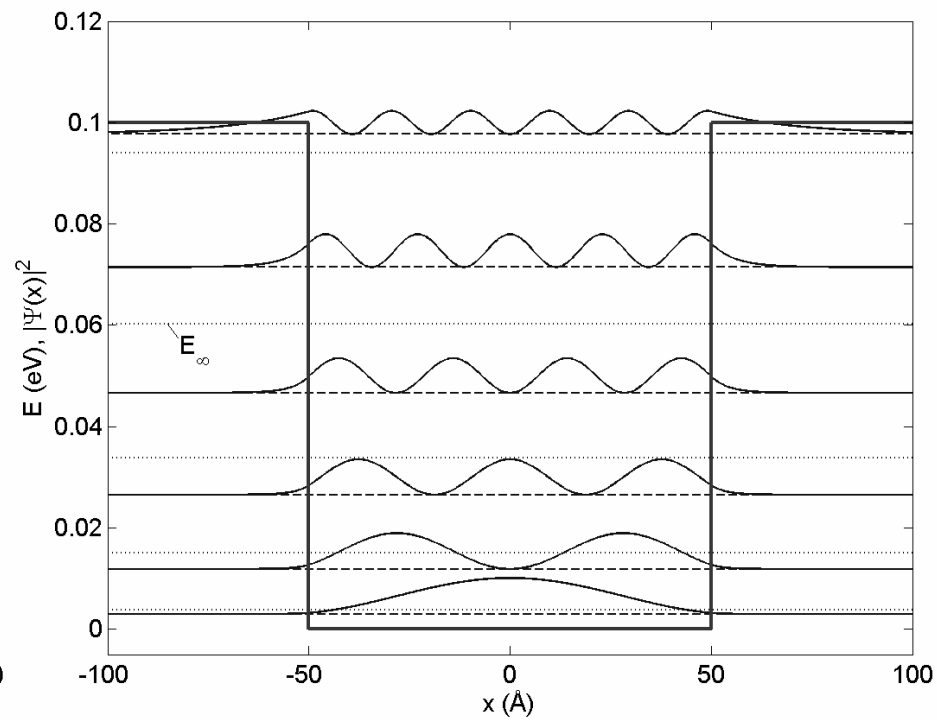
$$\det = e^{-\alpha L} [k^2 \sin(kL) - 2\alpha k \cos(kL) - \alpha^2 \sin(kL)] = 0 \tag{II.39}$$

Tento výraz představuje transcendentní rovnici pro E , která má konečně mnoho řešení E_n pro $E < U$

$$\tan(kL) = \frac{2\alpha k}{k^2 - \alpha^2} \tag{II.40}$$



vlnová funkce



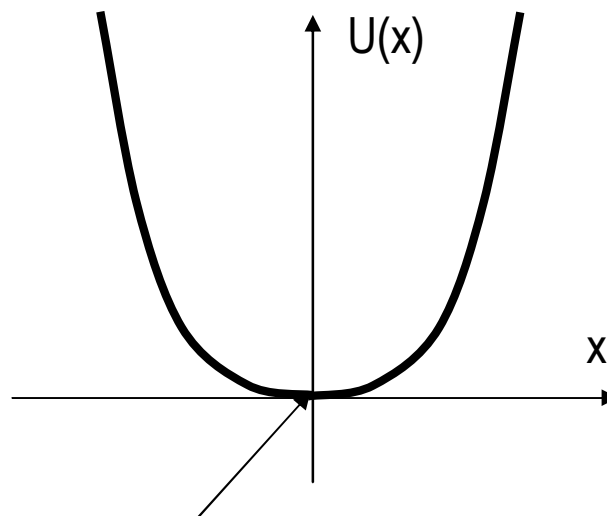
hustota pravděpodobnosti

Existuje nenulová pravděpodobnost nalezení částice v bariéře. Částice pronikají do bariéry s efektivní hloubkou vniku

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U - E)}} \quad (\text{II.41})$$

Jednorozměrný kvantový harmonický oscilátor

Částice se pohybuje v silovém poli s parabolickým rozložením potenciální energie



minimum potenciální energie – stabilní rovnovážná poloha

Potenciální energie $U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ (II.42)

K je tuhost vazby, ω je vlastní frekvence harmonického oscilátoru. Schrödingerova rovnice je

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - E \right) \psi(x) \quad (II.43)$$

Tato rovnice má spočetně mnoho řešení

$$\psi_n(x) = \left(n! 2^n \sqrt{\pi} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} \right) H_n(\xi), \quad \xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (II.44)$$

kde

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2} \right) \quad (II.45)$$

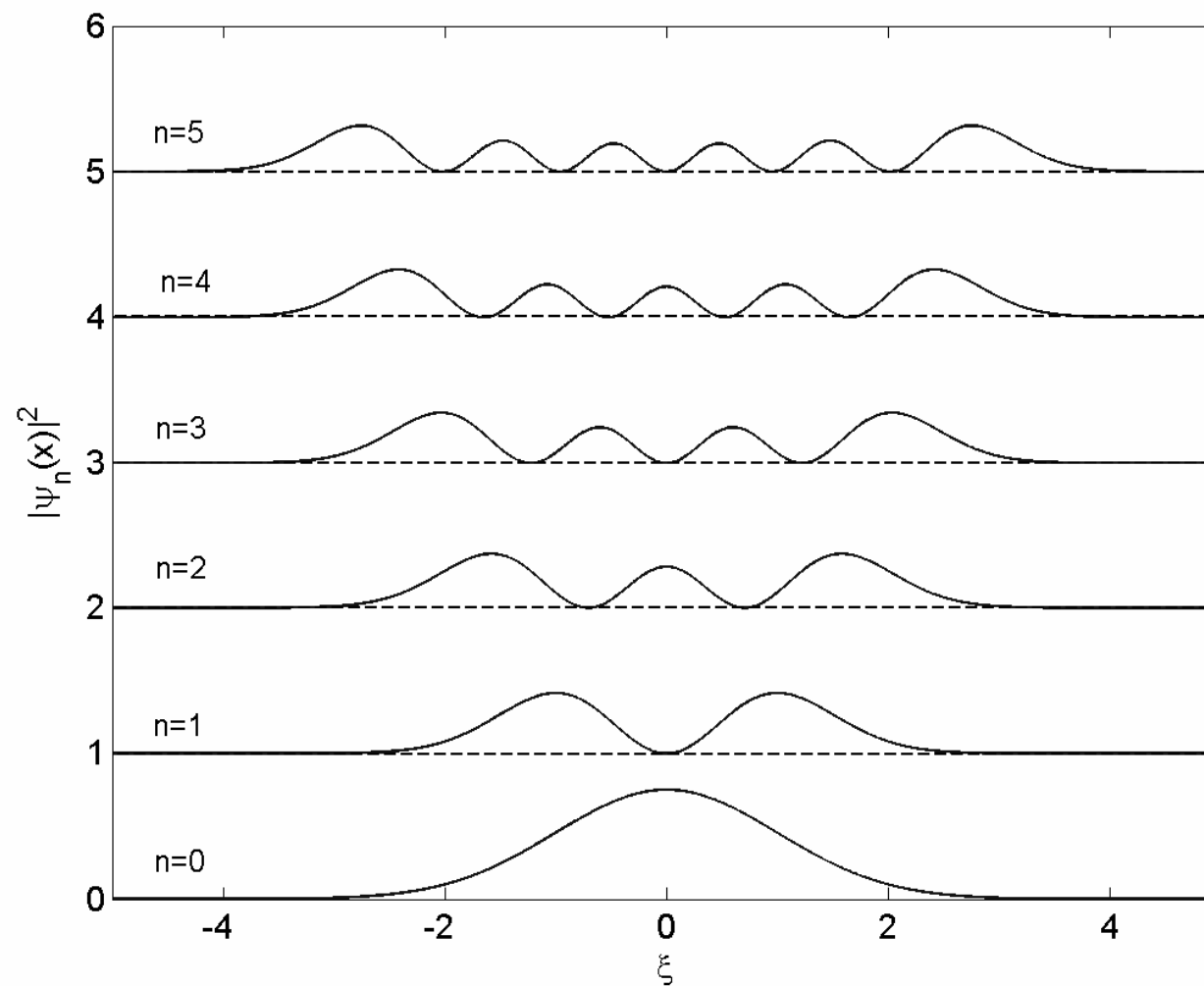
je Hermiteův polynom stupně n .

Vlnové funkce (II.44) jsou normovány $\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_n(\xi) \psi_m(\xi) = \delta_{nm}$ (II.46)

Rovnice (II.43) má netriviální řešení pouze pro diskrétní spektrum energií (kvantování energie):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (II.47)$$

Hustota pravděpodobnosti několika stavů kvantového harmonického oscilátoru



Základní stav pro $n = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} \exp(-\xi^2 / 2) \quad (\text{II.48})$$

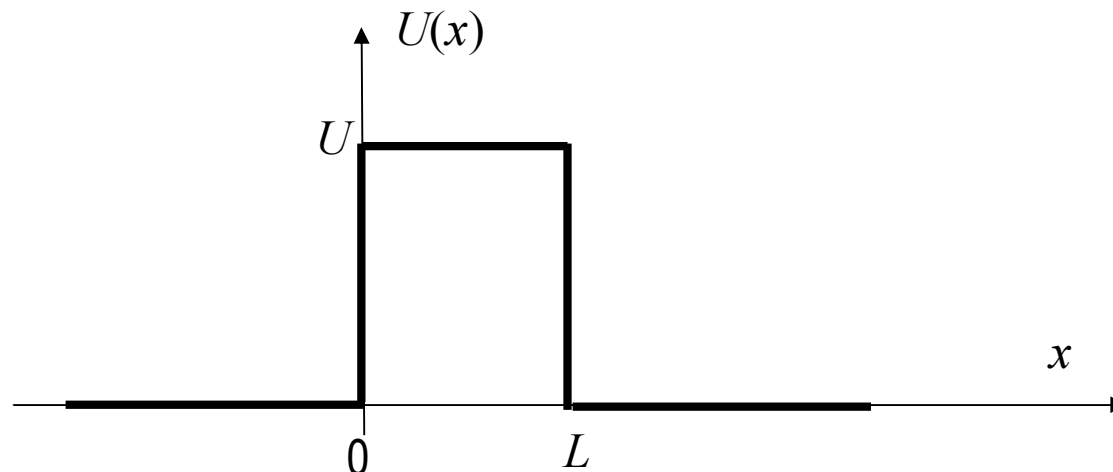
V základním stavu nemůže být $E_0 = 0$, odporovalo by to Heisenbergovu principu neurčitosti

Srovnání s klasickým oscilátorem:

	klasický:	kvantový:
energie:	spojité spektrum: $E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$	diskrétní spektrum: $E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$
hustota pravděpodobnosti:	$P(x) = \begin{cases} (A^2 - x^2)^{-1/2} / \pi \text{ pro } x < A \\ 0 \text{ pro } x > A \end{cases}$	$P_n(x) = \left \left(n! 2^n \sqrt{\pi} \right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi) \right ^2$
kvantové číslo:	$A \geq 0$, spojité spektrum	$n = 0, 1, 2, \dots$, diskrétní spektrum
základní stav:	$A = 0, E_0 = 0$	$n = 0, E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$

Tok částic potenciálovou bariérou – tunelování

Uvažme částici v silovém poli s profilem potenciální energie



Uvažme nejprve klasickou částici, dopadající na bariéru zleva a mající kinetickou energii $E < U$. Taková částice bariéru nepřekoná a od bariéry se odrazí. Hustota pravděpodobnosti jejího výskytu v bariéře je nulová.

Kvantová částice má nenulovou hustotu pravděpodobnosti výskytu v libovolném bodě x , v němž je $U(x)$ konečné. Její vlnová funkce nalevo od bariéry ($x < 0$)

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)} \quad (11.49)$$

částice se pohybuje zleva doprava
(dopadající částice)

částice se pohybuje zprava doleva
(odražená částice)

Vlnová funkce částice napravo od bariéry ($x > L$)

$$\Psi(x, t) = Fe^{-i(\omega t - kx)} + Ge^{-i(\omega t + kx)} \quad (II.50)$$

Předpoklad: napravo od bariéry nejsou částice, které by se pohybovaly zprava doleva, tj. $G = 0$

Vlnová funkce částice uvnitř bariéry $0 < x < L$ (předpokládáme $E < U$ – viz (II.38))

$$\Psi(x, t) = Ce^{-i\omega t - \alpha x} + De^{-i\omega t + \alpha x} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} \quad (II.51)$$

Okrajové podmínky – spojitost $\Psi(x, t)$ a její 1. derivace podle x v bodech $x = 0$ a $x = L$.

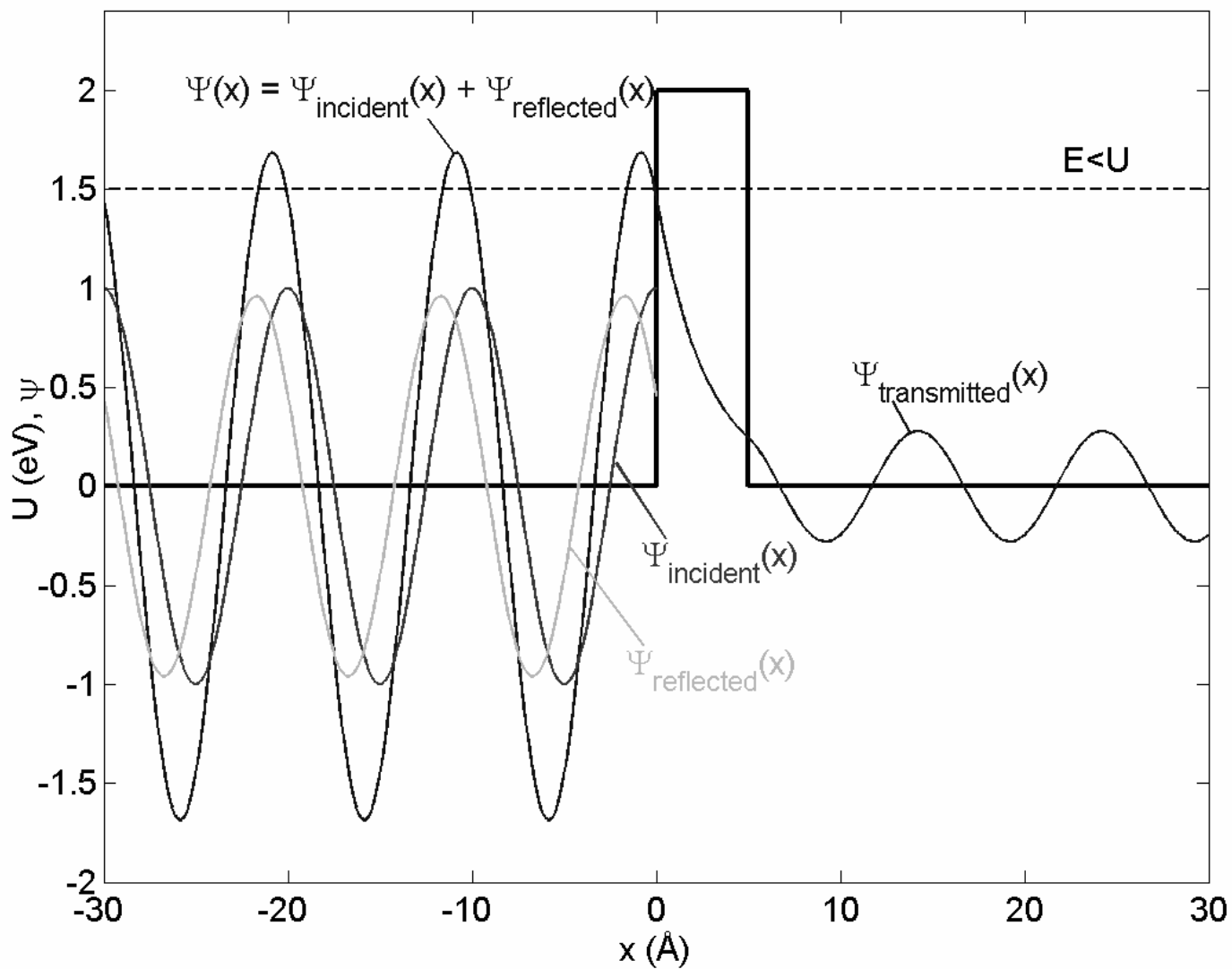
Zavedme odrazivost R a propustnost T bariéry jako podíly hustot pravděpodobnosti:

$$R = \frac{|\Psi(x, t)|_{\text{reflected}}^2}{|\Psi(x, t)|_{\text{incident}}^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|\Psi(x, t)|_{\text{transmitted}}^2}{|\Psi(x, t)|_{\text{incident}}^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad (II.52)$$

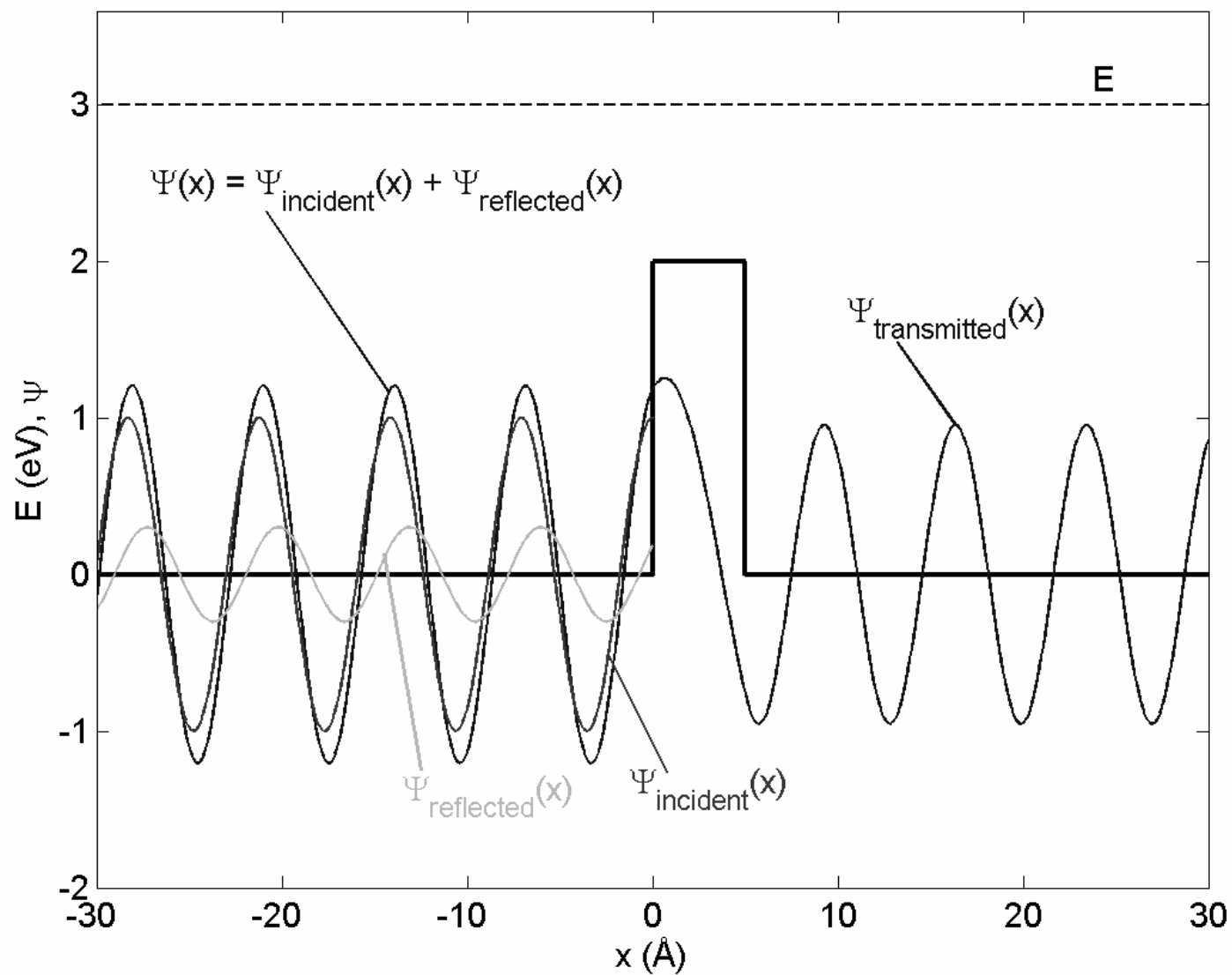
a položme pro jednoduchost $A = 1$. Z okrajových podmínek dostaneme 4 lineární nehomogenní rovnice pro neznámé B, C, D, F . Tato soustava rovnic má vždy právě jedno řešení pro každou energii E dopadajících částic (i pro $E > U$). Pro propustnost vyjde přibližný vztah (platí pro libovolný tvar bariéry):

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \int_{U(x) > E} dx \sqrt{U(x) - E}\right) \quad (II.53)$$

Příklad výpočtu pro $E < U$:



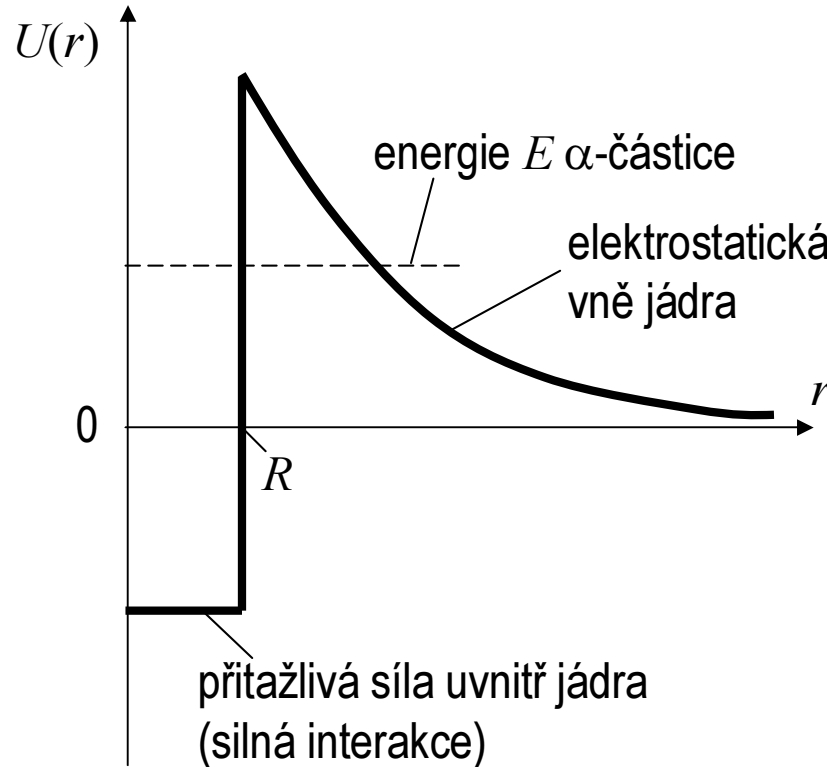
Příklad výpočtu pro $E > U$:



java simulace je na <http://webphysics.ph.msstate.edu/jc/library/28-8/index.html>

Aplikace: α -rozpad radioaktivních jader

α -částice se nachází v silovém poli s potenciální energií



$$U(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

částice překoná potenciální bariéru tunelováním, propustnost lze získat ze vztahu (II.53)

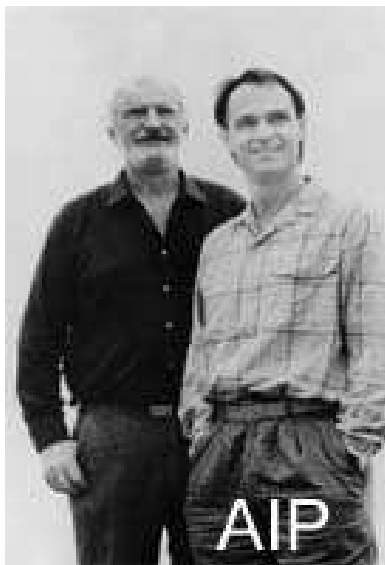
$$T(E) = \exp\left[-4\pi Z \sqrt{\frac{E_0}{E}} + 8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}}\right],$$

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_\alpha e^2} \approx 7.25 \times 10^{-6} \text{ nm},$$

$$E_0 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} \approx 0.099 \text{ MeV}$$

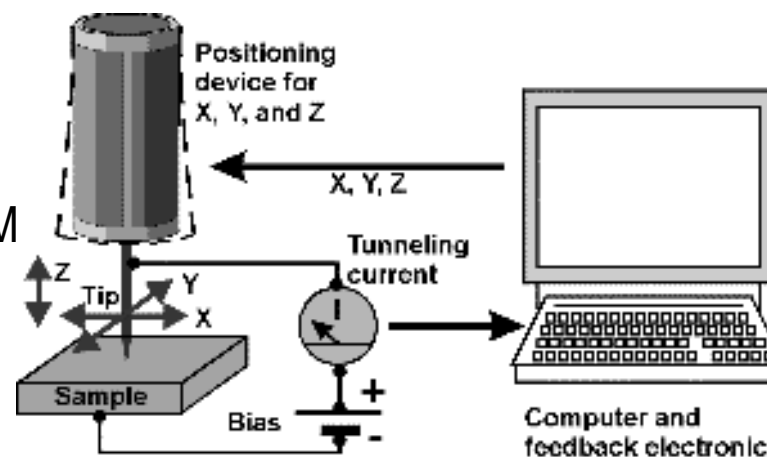
Další aplikace: emise elektronů studenou katodou

Aplikace: tunelovací mikroskopie (STM)

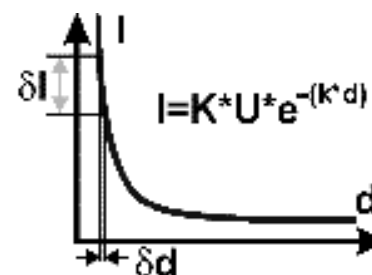
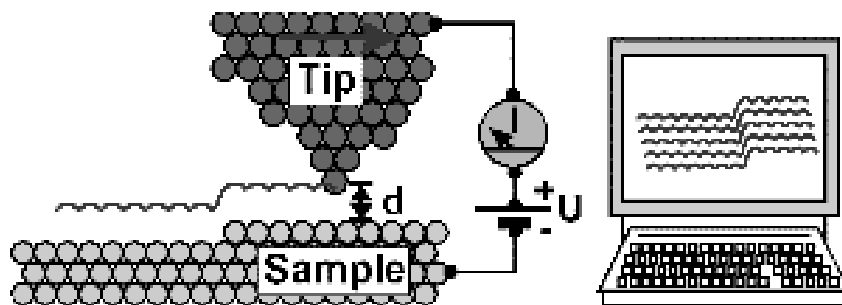


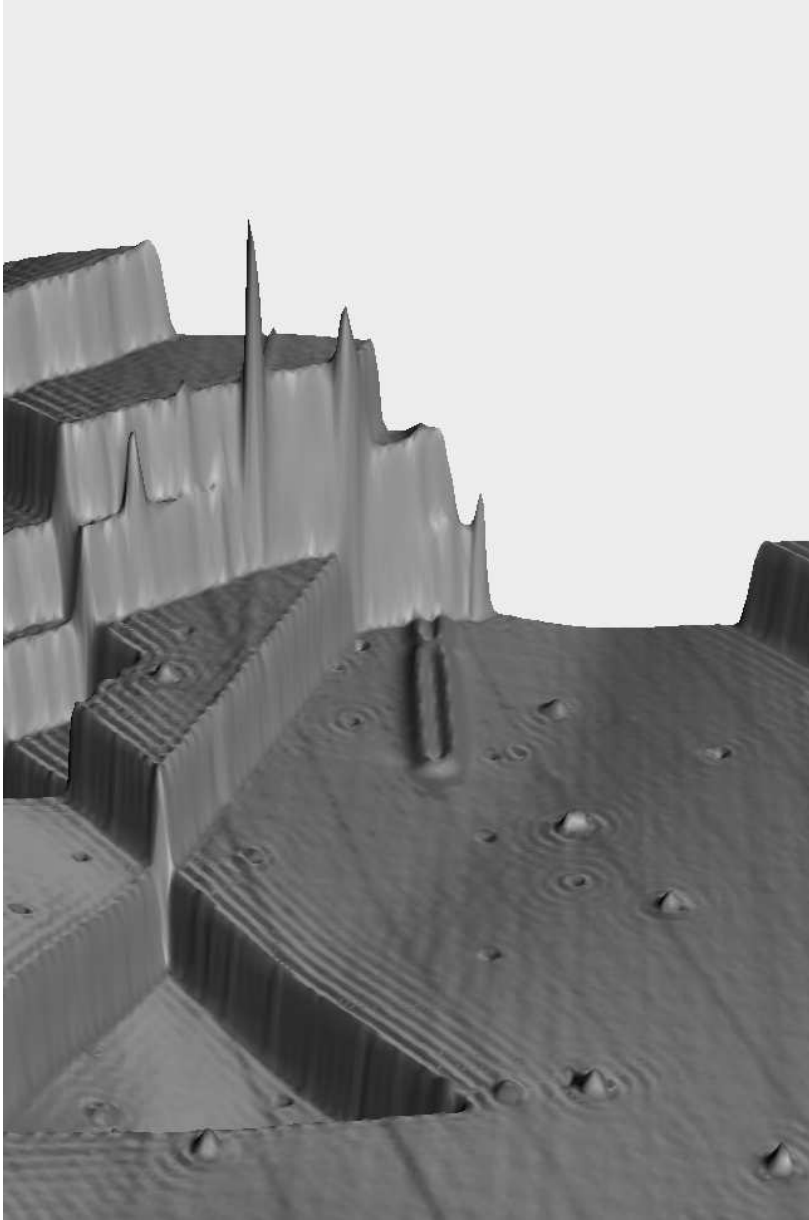
Gerd Binnig (vpravo), Heinrich Rohrer, Nobelova cena 1981

náčrtek principu STM

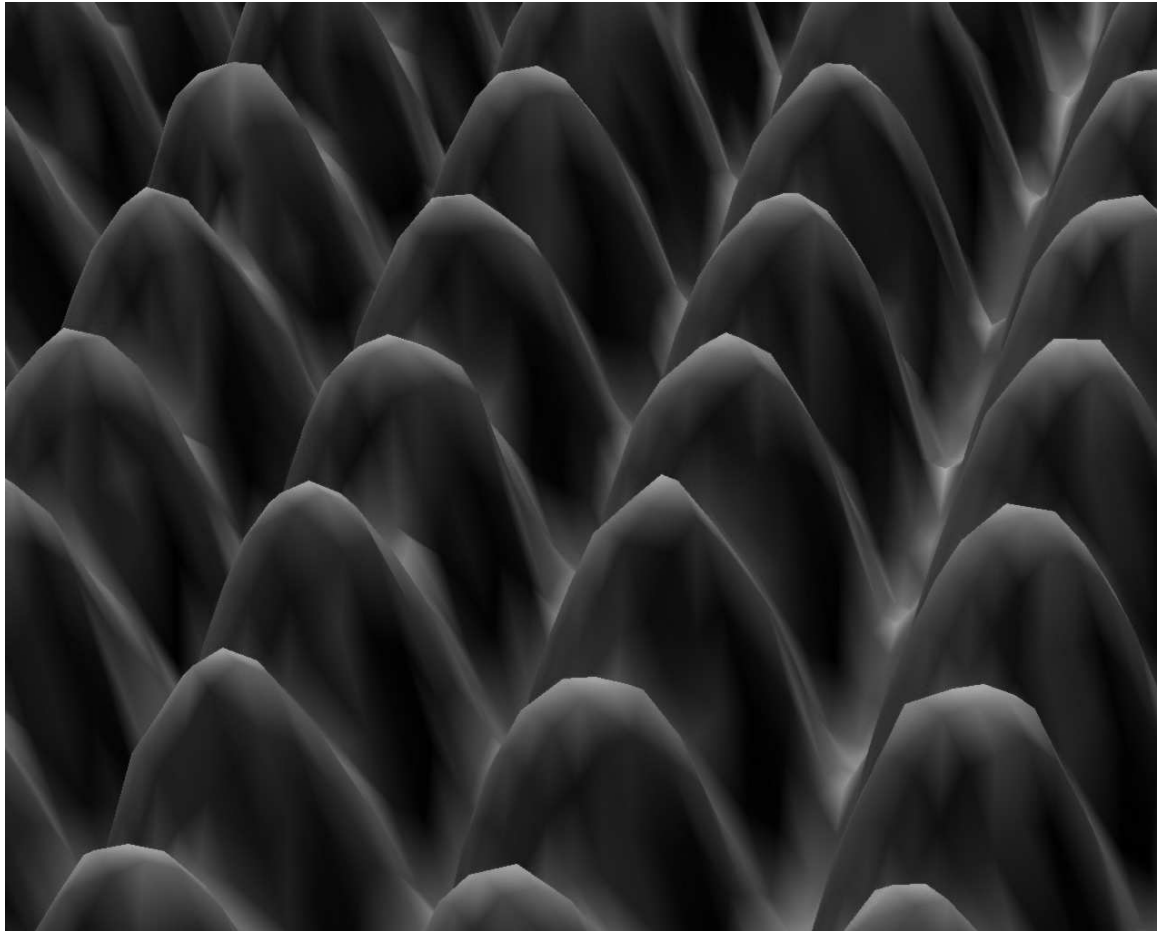


měření tunelovacího proudu

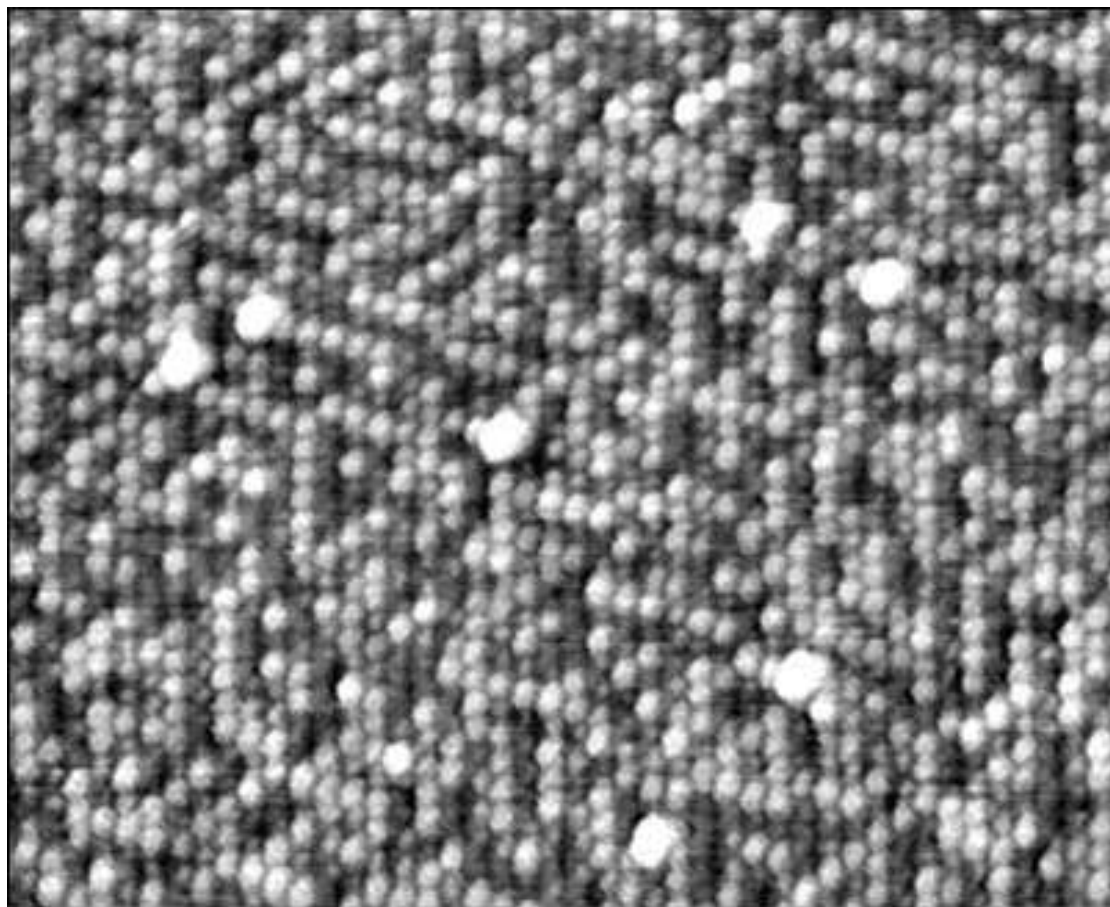




povrch monokrystalu Cu

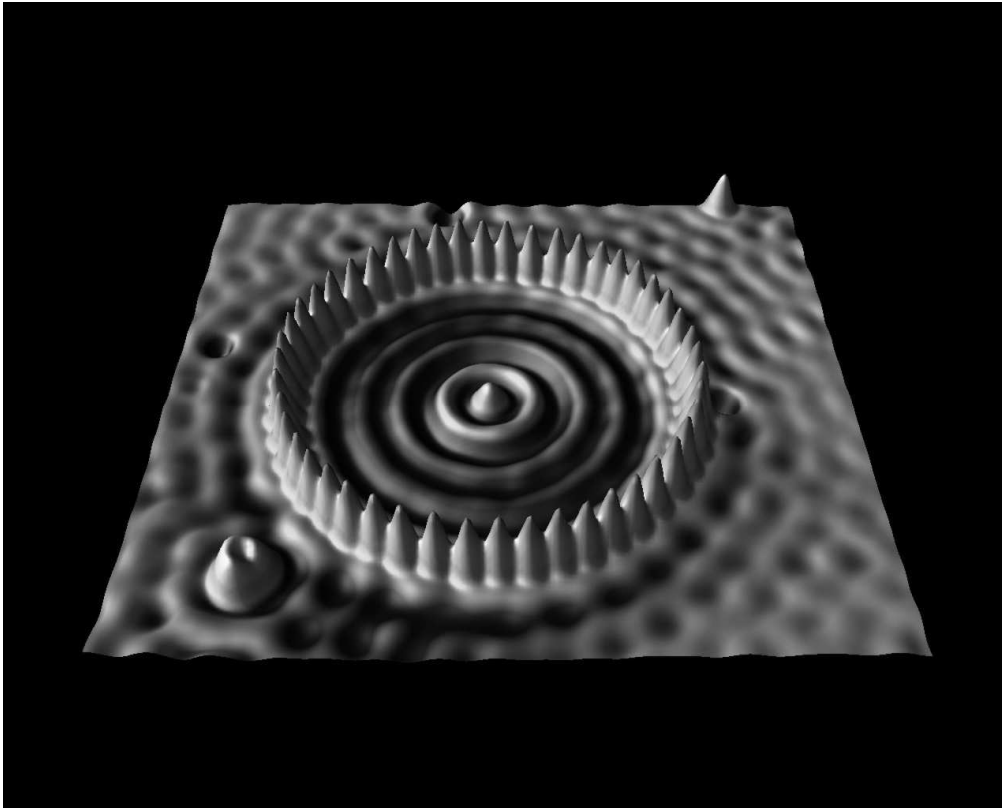


povrch monokrystalu Ni, jednotlivé atomy jsou rozlišeny

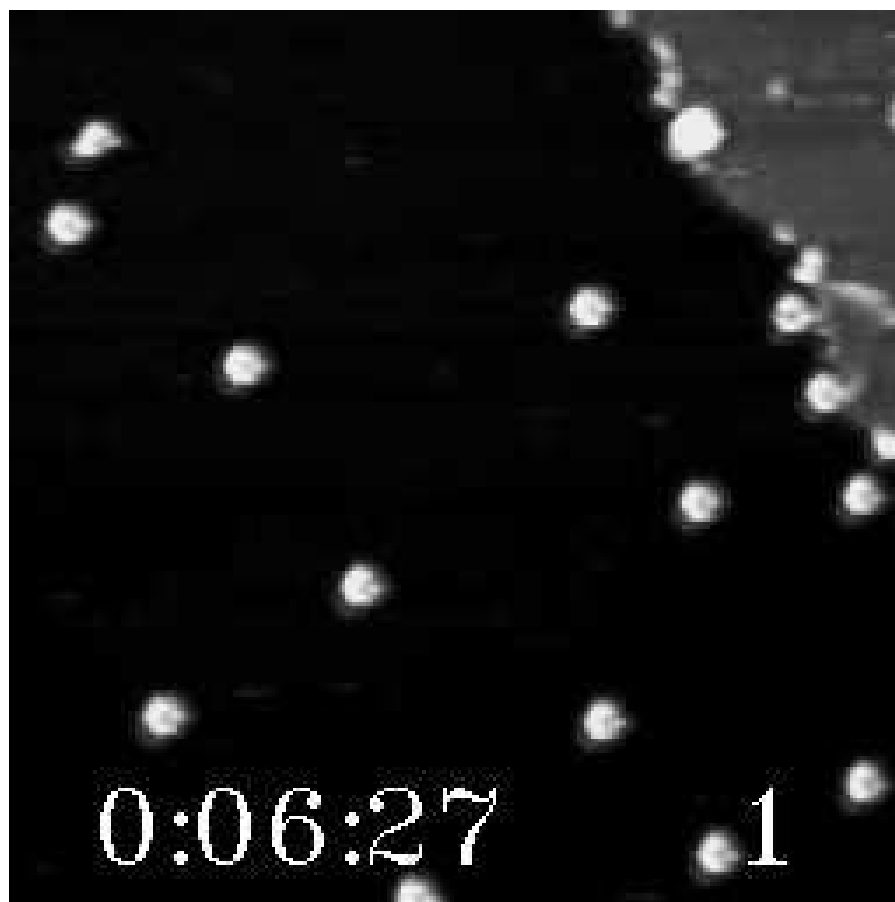


Institut für Allgemeine Physik, TU Wien

povrch monokrystalu slitiny Cu-Pt, lze rozlišit typy atomů



kvantové korále – řetízek atomů Fe na povrchu krystalu Cu



Difúze jednotlivých HtBDC molekul na Cu(110), velikost obrázku je 50x50 nm²
HtBDC je hexa-tert-butyl-decacyclene (C₆₀H₆₆)

II. 5. Základy formální kvantové teorie

Postulát: Fyzikální veličiny jsou reprezentovány **operátory**, působící na vlnové funkce.

Příklad: Operátor energie částice v jednorozměrném potenciálovém poli (hamiltonián)

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad (\text{II.54})$$

Schrödingerova rovnice (II.31) má pak tvar

$$\hat{\mathcal{H}} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (\text{II.55})$$

Nečasová Schrödingerova rovnice je

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II.56})$$

Její řešení $\psi(x)$ je tedy vlastní funkcí operátoru $\hat{\mathcal{H}}$, jemuž odpovídá vlastní hodnota E .
Obdobně například hybnost je popsána vektorovým operátorem

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (\text{II.57})$$

Souřadnice x je popsána operátorem

$$\hat{x} = x \quad (\text{II.58})$$

Hamiltonián (II.54) lze vyjádřit pomocí složky operátoru hybnosti

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x) \quad (\text{II.59})$$

Platí tedy princip korespondence: vztahy mezi fyzikálními veličinami (vyjádřenými operátory) odpovídají klasickým výrazům

Nečasová vlnová funkce volné částice

$$\psi_k(x, t) = A e^{i k x} \quad (\text{II.60})$$

je vlastní funkcí hamiltoniánu volné částice $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ s vlastní hodnotou $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Tato funkce je i vlastní funkcí operátoru hybnosti (II.57) s vlastní hodnotou $p = \hbar k$. Mezi vlastními hodnotami hamiltoniánu i operátoru hybnosti platí tedy klasický vztah $E = \frac{p^2}{2m}$

Např. vlastní funkce (II.43) hamiltoniánu částice v parabolickém potenciálovém poli (harmonický oscilátor) není vlastní funkcí operátoru hybnosti.

Postulát:

Měření fyzikální veličiny Q je statistický proces a výsledkem měření Q jsou rovny vlastním hodnotám operátoru \hat{Q} této veličiny. V případě částice na přímce s vlnovou funkcí $\Psi(x,t)$ je střední hodnota této veličiny rovna

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x,t) \hat{Q} \Psi(x,t) \quad (\text{II.61})$$

Stav systému po měření fyzikální veličiny s výsledkem Q je popsán vlastní funkcí operátoru \hat{Q} s vlastní hodnotou Q

Tak například střední hodnota energie částice popsané rovinnou vlnou (II.60) je

$$\langle E \rangle = \int_a^b dx A^* e^{-ikx} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) A e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |A|^2 (b-a) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II.62})$$

Přitom jsme předpokládali, že částice se nachází v intervalu $x \in \langle a, b \rangle$ a použili jsme normovací podmínku (II.30). Střední hodnoty hybnosti této částice je $\langle p \rangle = \hbar k$.

Střední hodnota souřadnice této částice je $(a+b)/2$.

Vlnová funkce (II.60) je vlastní funkcí operátorů \hat{H} a \hat{p}_x , je to stav s ostrou hodnotou energie a hybnosti.

Vlnová funkce (II.44) popisuje stav s ostrou hodnotou energie, střední hodnota energie v tomto stavu je vlastní hodnotou (II.47) hamiltoniánu harmonického oscilátoru. Tato funkce není vlastní funkcí operátoru hybnosti. Střední hodnota hybnosti v tomto stavu je

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_n(x) = 0 \quad (\text{II.63})$$

Tato funkce není také vlastní funkcí operátoru souřadnice. Střední hodnota souřadnice x v tomto stavu je

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) x \psi_n(x) = 0 \quad (\text{II.64})$$

Střední kvadratická odchylka hodnoty veličiny Q se definuje jako

$$\Delta Q = \sqrt{\langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (\text{II.65})$$

S použitím (II.61) vyjde

$$\boxed{(\Delta Q)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) (\hat{Q})^2 \Psi(x, t) - \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \hat{Q} \Psi(x, t) \right)^2} \quad (\text{II.66})$$

Je-li $\Psi(x, t)$ vlastní funkcí operátoru \hat{Q} , platí

$$\hat{Q}\Psi = Q\Psi, (\hat{Q})^2\Psi = Q^2\Psi \quad (\text{II.67})$$

a tedy střední kvadratická odchylka je

$$\Delta Q = Q^2 \left(\langle \Psi | \Psi \rangle - \langle \Psi | \Psi \rangle^2 \right) = 0, \langle \Psi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) \quad (\text{II.68})$$

přičemž jsme použili normovací podmínku $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

Takže: vlastní stavy operátoru \hat{Q} jsou stavy s ostrou hodnotou veličiny Q

Příklad:

Pro stav popsany vlnovou funkcí (II.60) platí

$$\langle p^2 \rangle = \int_a^b dx A^* e^{-ikx} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 A e^{ikx} = \hbar^2 k^2 = \langle p \rangle^2 \Rightarrow \Delta p = 0 \quad (\text{II.69})$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_a^b dx A^* e^{-ikx} x^2 A e^{ikx} = \frac{1}{3}(a^2 + ab + b^2), \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4}(a+b)^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta x = \frac{b-a}{\sqrt{12}}$$

Částice má tedy ostrou hodnotu hybnosti a neostrou (rozmazanou) hodnotu souřadnice. To souhlasí s Heisenbergovým principem neurčitosti (II.25).

II.6. Základy kvantové mechaniky ve 3 dimenzích

Schrödingerova rovnice pro vlnovou rovnici částice v 3 dimenzích

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}} \quad (\text{II.70})$$

Laplaceův operátor (laplacián): $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Analogicky jednorozměrnému případu separujeme prostorové proměnné a čas:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t), \quad \varphi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \quad (\text{II.71})$$

a obdržíme nečasovou trojrozměrnou Schrödingerovu rovnici

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})} \quad (\text{II.72})$$

Částice v trojrozměrné pravoúhlé kvantové jámě

Uvažme částici nacházející se v krabici $x, y, z \in \langle 0, L \rangle$, v níž je potenciální energie $U(\mathbf{r})$ nulová, mimo ni je $U(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$. Hledejme řešení rovnice (II.67) ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

Dosazením do (II.72) separujeme proměnné a dostaneme trojici rovnic

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) = E_1 \psi_1(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \psi_2(y) = E_2 \psi_2(y), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi_3(z) = E_3 \psi_3(z) \quad (\text{II.73})$$

přičemž $E = E_1 + E_2 + E_3$. Každá z trojice rovnic popisuje částici v jednorozměrné kvantové jámě ((II.33) až (II.36)). Rovnice (II.73) řešíme s okrajovou podmínkou

$$\psi_j(x_j) \Big|_{x_j=0,L} = 0, \quad j = 1, 2, 3, \quad x_j = x, y, z$$

Řešení se popisuje trojicí kvantových čísel n_1, n_2, n_3

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(\mathbf{r}) = B \sin(k_{n_1} x) \sin(k_{n_2} y) \sin(k_{n_3} z) \quad (\text{II.74})$$

kde

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots \quad (\text{II.75})$$

Obecné řešení je lineární kombinací těchto řešení s různými hodnotami kvantových čísel n_1, n_2, n_3

Konstantu B v (II.74) můžeme určit z normovací podmínky

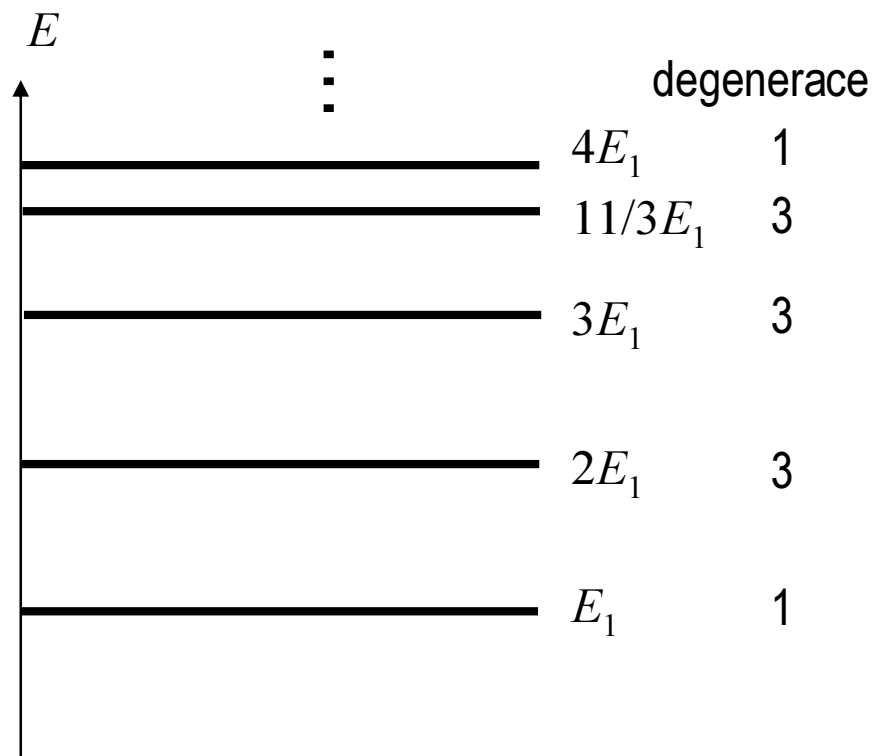
$$\int_{\text{krabice}} d^3 \mathbf{r} |\Psi_{n_1, n_2, n_3}(\mathbf{r})|^2 = 1 \Rightarrow B = \left(\frac{2}{L} \right)^{3/2} \quad (\text{II.76})$$

vyjadřující to, že částice ve stavu n_1, n_2, n_3 se v krabici určitě vyskytuje.

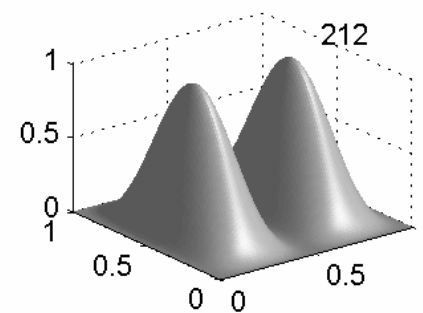
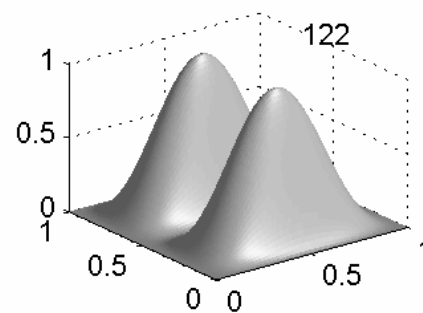
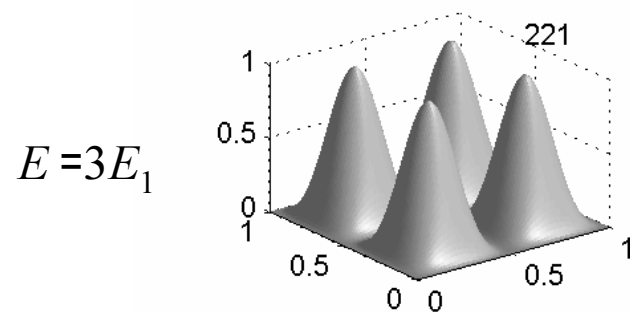
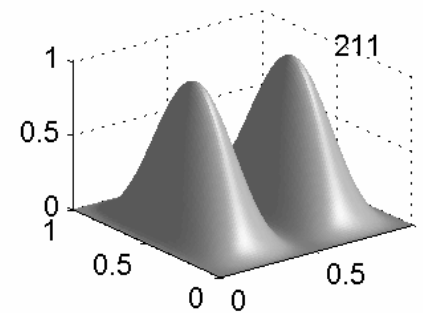
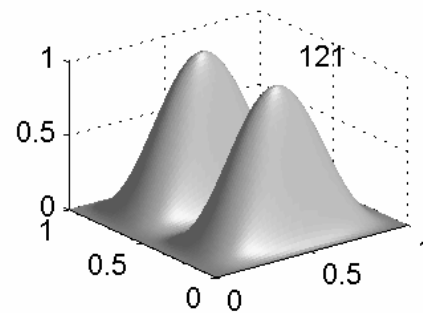
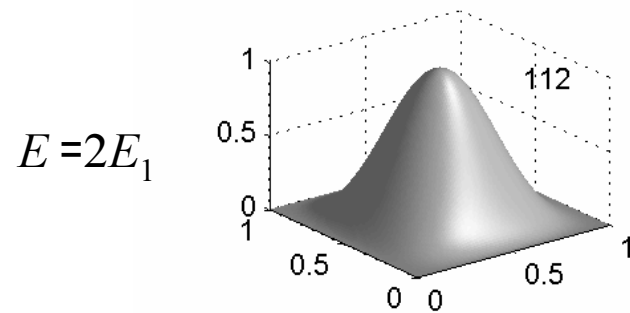
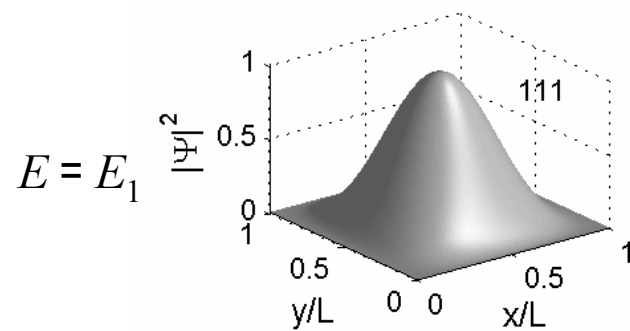
Tabulka energiových hladin částice v krabici

n_1	n_2	n_3	$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$	degenerace
1	1	1	3	1
1	1	2	6	3
1	2	1	6	
2	1	1	6	
2	2	1	9	3
2	1	2	9	
1	2	2	9	
1	1	3	11	3
1	3	1	11	
3	1	1	11	
2	2	2	12	1
...

Schéma energiových hladin



Hustoty pravděpodobnosti několika prvních stavů v rovině $z = \text{const.}$



Částice v centrálním silovém poli (atom vodíku)

Řešme nečasovou Schrödingerovu rovnici (II.72) pro elektron nacházejícím se v centrálním silovém poli

$$U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|) = U(r) \quad (\text{II.77})$$

Výsledek pak použijeme pro elektron v elektrostatickém poli protonu (atom vodíku)

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{II.78})$$

Z klasické mechaniky plyne, že při pohybu částice v centrálním poli se zachovává moment hybnosti částice

$$\mathbf{L} = \mathbf{p} \times \mathbf{r} \quad (\text{II.79})$$

Heisenbergův princip neurčitosti ovšem neumožňuje, aby všechny 3 souřadnice \mathbf{L} byly ostré. Kdyby byl směr \mathbf{L} přesně znám, částice by se pohybovala v orbitální rovině kolmé na \mathbf{L} , tedy její souřadnice a hybnost ve směru kolmém na tuto orbitální rovinu byly současně ostré a rovny 0. To je v rozporu s (II.25). Je-li jedna souřadnice \mathbf{L} ostrá, ostatní dvě musí být neostré. Zvolme ostrou souřadnici L_z . Stav částice lze pak popsat trojicí kvantových čísel odpovídající trojici veličin, které jsou současně ostré, a to E , $|\mathbf{L}|$ a L_z .

Nečasovou Schrödingerovu rovnici (II.72) lze řešit separací sférických proměnných r , ϑ a φ

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) \quad (\text{II.80})$$

Uvažme nejprve funkce úhlových proměnných. Převodem Schrödingerovy rovnice (II.72) do sférických souřadnic a separací úhlových proměnných vyjde

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m_l^2\Phi(\varphi) \quad (\text{II.81})$$

$$\frac{d^2\Theta(\vartheta)}{d\vartheta^2} + \cotg\vartheta \frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta} - m_l^2 \frac{\Theta(\vartheta)}{\sin^2\vartheta} + l(l+1)\Theta(\vartheta) = 0$$

kde $l = 0, 1, 2, \dots$ je **orbitální kvantové číslo** a $m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$ je **magnetické kvantové číslo**.

Tato kvantové čísla určují vlastní hodnoty operátorů velikosti momentu hybnosti $|\hat{\mathcal{L}}|$ a z-ové souřadnice momentu hybnosti $\hat{\mathcal{L}}_z$

$$|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad L_z = m_l\hbar \quad (\text{II.82})$$

Řešení rovnic (II.81) jsou kulové funkce

$$Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi) = P_l^{m_l}(\cos\vartheta)e^{im_l\varphi} \quad (\text{II.83})$$

kde $P_l^{m_l}(\xi)$ jsou přidružené Legendreovy funkce

Některé kulové funkce:

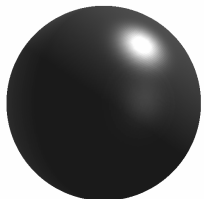
$Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)$	$m_l = 0$	$m_l = \pm 1$	$m_l = \pm 2$
$l = 0$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$		
$l = 1$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos(\vartheta)$	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\vartheta)e^{\pm i\varphi}$	
$l = 2$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2(\vartheta)-1)$	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin(\vartheta)\cos(\vartheta)e^{\pm i\varphi}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2(\vartheta)e^{\pm 2i\varphi}$

Kulové funkce jsou normovány vztahem

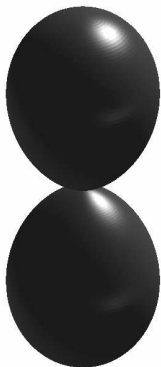
$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta |Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)|^2 = 1 \quad (\text{II.84})$$

Grafy funkcí $|Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)|^2$
 $m_l = 0$

$l = 0$



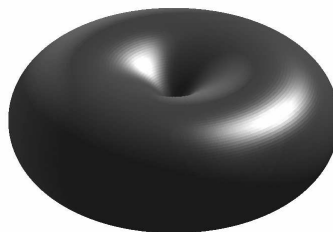
$l = 1$



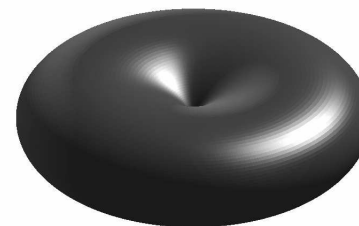
$l = 2$



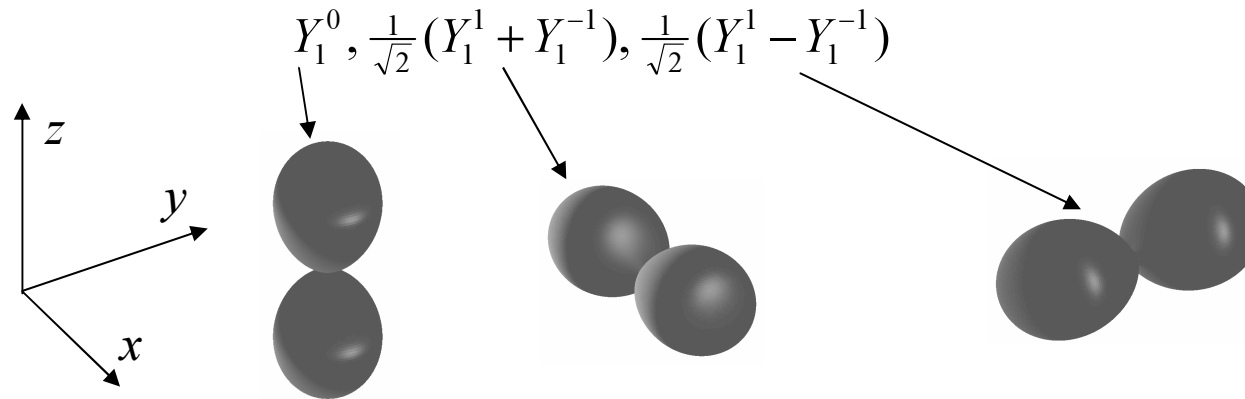
$m_l = 1$



$m_l = 2$

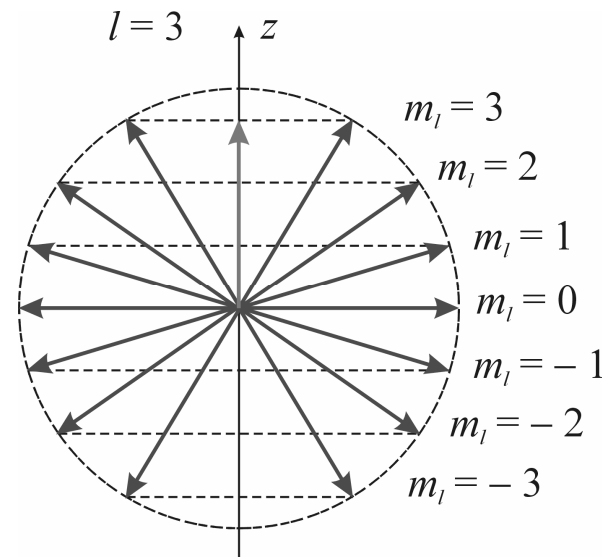


Místo uvedených kulových funkcí lze použít i jejich lineární kombinace. Například pro $l = 1$ lze místo trojice funkcí Y_1^{-1} , Y_1^0 a Y_1^1 použít funkce



odpovídající stavům, kdy je elektron soustředěn podél os z , x a y

Kvantová čísla l a m_l určují úhel mezi vektorem \mathbf{L} a osou z . Neurčují však úplně směr vektoru \mathbf{L} , protože složky L_{xy} jsou neostré



Úhlová část vlnové funkce částice v centrálním poli nezávisí na tvaru pole a je dána vždy kulovými funkcemi (II.83). Radiální část vlnové funkce je řešením rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + U_{\text{eff}}(r)rR = ErR, U_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \quad (\text{II.85})$$

Rovnice je formálně totožná se Schrödingerovou rovnicí částice na přímce, na niž působí efektivní silové pole $U_{\text{eff}}(r)$ obsahující i příspěvek „odstředivé síly“ k silovému poli, který odpovídá rotaci této přímky s úhlovou frekvencí $|\mathbf{L}|/(mr^2) = \hbar\sqrt{l(l+1)}/(mr^2)$

Uvažme nyní speciální případ centrálního pole – elektrostatické pole protonu (jádra) podle (II.78). Lze ukázat, že rovnice (II.85) má řešení pro hodnoty E dané vztahem (II.15) plynoucím z Bohrova modelu atomu

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, \dots \quad (\text{II.86})$$

n je hlavní kvantové číslo. Hodnoty energie nezávisí na orbitálním kvantovém čísle l , i když se toto číslo v (II.85) vyskytuje. Orbitální kvantové číslo může nabýt hodnot

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (\text{II.87})$$

Energiová hladina E_n je tedy $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ krát degenerovaná (zatím neuvažujeme spin)

Tato degenerace se snímá v atomech s více elektrony, tím vzniká z jedné energiové hladiny (slupky) E_n n podslupek. Slupky a podslupky se značí písmeny takto:

n	symbol slupky	l	symbol podslupky
1	K	0	s
2	L	1	p
3	M	2	d
4	N	3	f
5	O	4	g
...

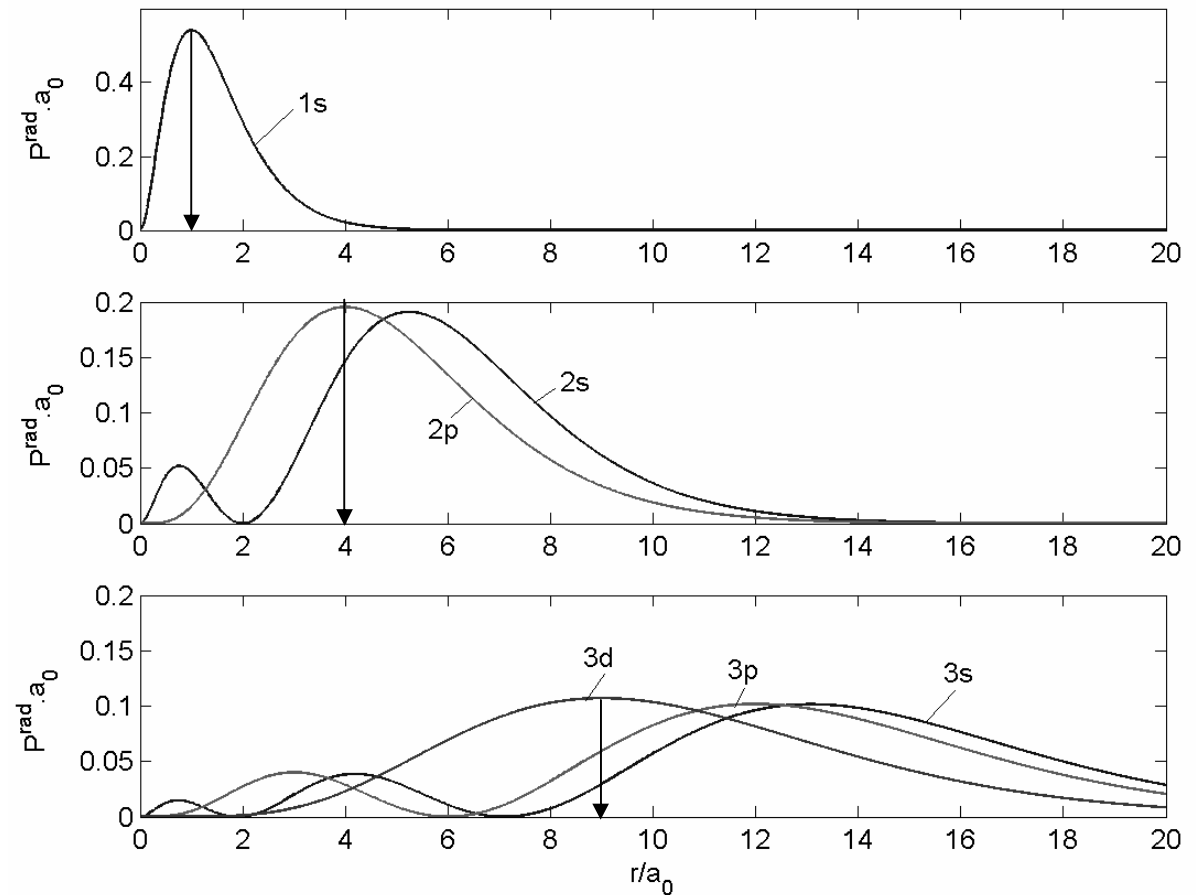
Řešení rovnice (II.85) $R_{nl}(r)$ lze vyjádřit pomocí Laguerrových polynomů. Radiální funkce v několika nejnižších stavech jsou

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}, R_{20}(r) = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} (2 - r/a_0) e^{-r/2a_0}, R_{21}(r) = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} r / (\sqrt{3}a_0) e^{-r/2a_0} \quad (\text{II.88})$$

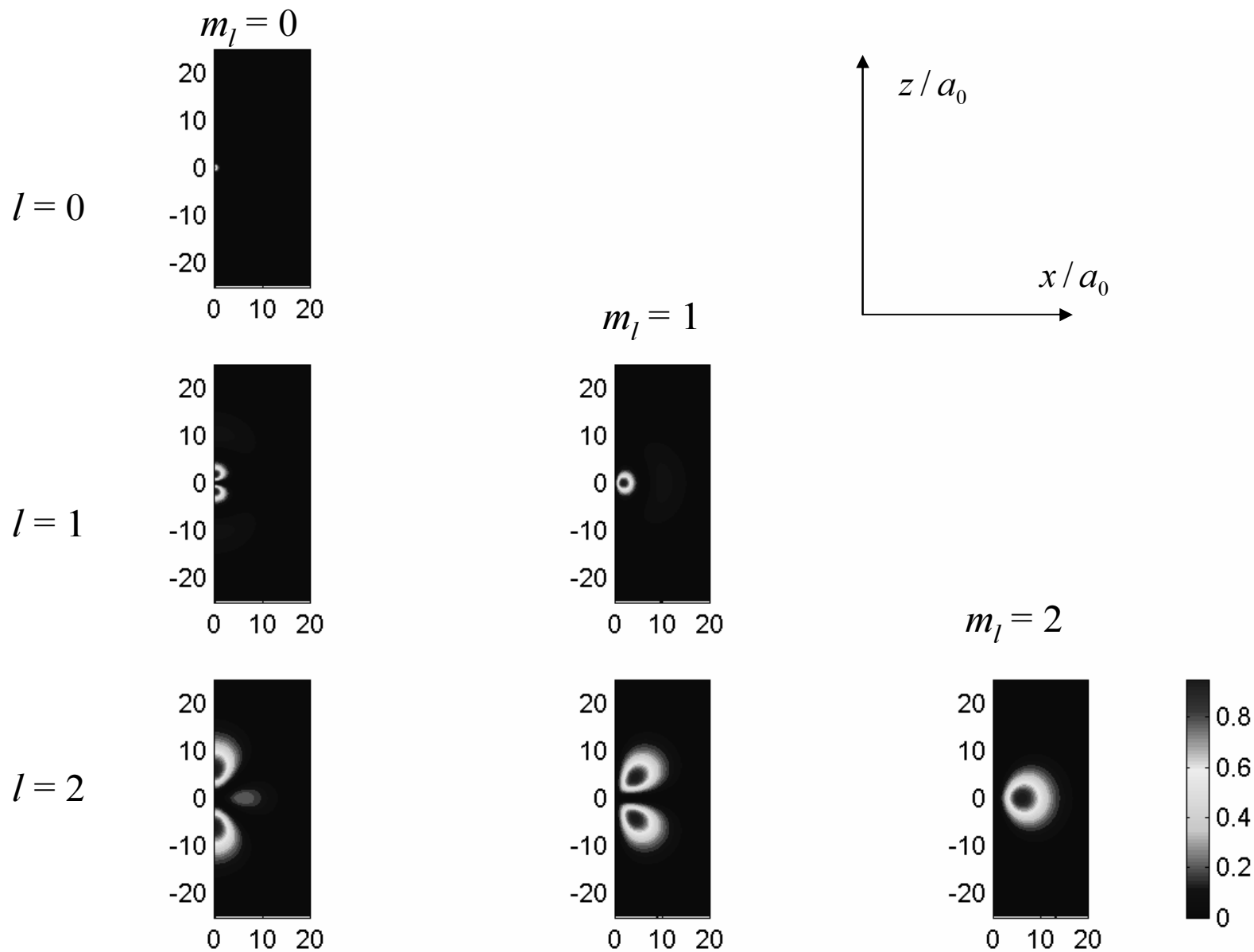
VypočtĚme radiální rozložení hustoty pravděpodobnosti nalezení elektronu v obalu atomu vodíku jako integrál hustoty pravděpodobnosti přes úhlové promĚnné

$$P_{nl}^{\text{rad}}(r) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta r^2 |R_{nl}(r) Y_l^{m_l}(\vartheta, \varphi)|^2 = r^2 |R_{nl}(r)|^2 \quad (\text{II.89})$$

Radiální hustoty pravděpodobnosti pro několik stavů svislé šipky odpovídají poloměrům Bohrových orbitalů (II.14)



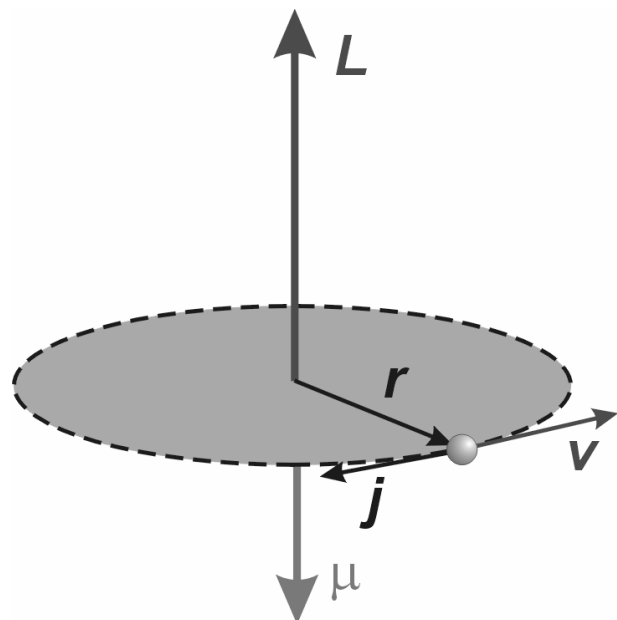
Řezy elektronovým oblakem podél roviny xz pro $n = 3$



II.7. Atomy

Magnetický moment vyvolaný orbitálním mechanickým momentem elektronu

Analogie s magnetickým momentem proudové smyčky



Klasická elektrodynamika: $|\boldsymbol{\mu}| = jA$, $j = |e|/T$

Mechanický orbitální moment: $|\mathbf{L}| = 2m \frac{A}{T}$

Odtud: $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L} = \frac{e}{2m} \mathbf{L}$ (II.90)

kde $\gamma = \frac{e}{2m}$ je gyromagnetický poměr

$e < 0$ je náboj elektronu

Definujeme

$$\mu_B = \frac{|e| \hbar}{2m} \approx 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

Bohrův magneton

z-ová složka magnetického momentu $\boldsymbol{\mu}$ se kvantuje do osy z podobně jako L_z : $\mu_z = -\mu_B m_l$ (II.91)

Atom vodíku ve vnějším magnetickém poli:

Vektor μ vykonává precesní pohyb kolem vektoru B (**Larmorova precese**) s úhlovou frekvencí

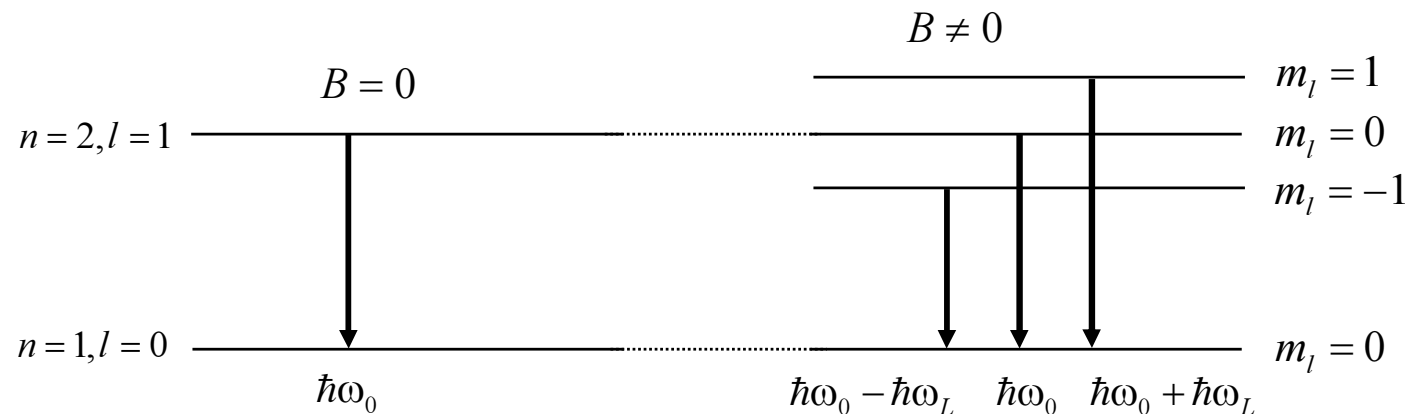
$$\omega_L = B \frac{|e| \hbar}{2m} \quad (II.92)$$

Potenciální energie magnetického momentu ve vnějším magnetickém poli je

$$U = -\mu \cdot B = \hbar \omega_L m_l \quad (II.93)$$

Tyto vztahy lze snadno odvodit v rámci klasické elektrodynamiky

Energiová hladina elektronu v elektrickém poli protonu je bez vnějšího pole $2l+1$ krát degenerovaná. Tato degenerace se snímá ve vnějším magnetickém poli



normální Zeemanův jev

Výběrová pravidla (vyplývají ze zákona zachování momentu hybnosti soustavy atom + foton):

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = -1, 0, 1$$

Spinový moment elektronu a s ním spojený magnetický moment

Klasická elektrodynamika: rotující nabitě těleso má magnetický moment

$$\mu_s = g \frac{e}{2m} \mathbf{S} \quad (\text{II.94})$$

\mathbf{S} je mechanický moment rotace (spinový moment), g je tzv. g-faktor závisící na rozložení náboje uvnitř tělesa

Stern-Gerlachův pokus: štěpení toku neutrálních atomů v nehomogenním magnetickém poli

Zjistilo se, že proud atomů se štěpí do dvou složek, tedy $2s+1=2$ a $s=1/2$

Z-ová (tj. ostrá) složka mechanického spinového momentu elektronu je

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \quad (\text{II.95})$$

Velikost spinového mechanického momentu je

$$|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad (\text{II.96})$$

Magnetický spinový moment je dán vztahem (II.94), g-faktor elektronu je

$$g = 2.00232 \approx 2$$

Tato hodnota vyplývá z relativistické kvantové teorie (P.A.M. Dirac) a z kvantové elektrodynamiky (R. Feynman)

Celkový magnetický moment elektronu je tedy

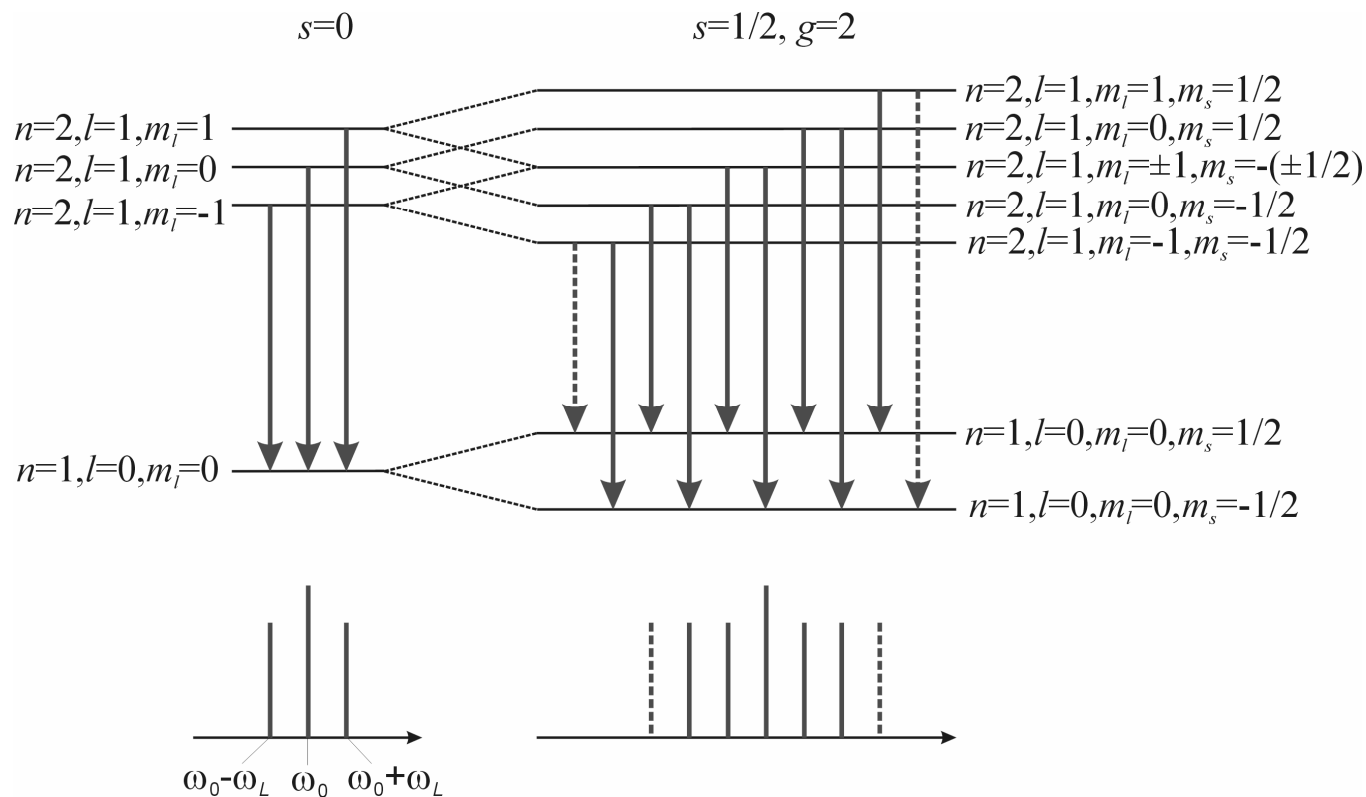
$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \quad (\text{II.97})$$

celkový mechanický moment je přitom

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (\text{II.98})$$

Protože je g různé od 1, nejsou celkový mechanický a magnetický moment rovnoběžné. Složka celkového magnetického momentu rovnoběžná s \mathbf{J} se nazývá efektivní magnetický moment

(Normální) Zeemanův jev se započtením spinu (Paschen-Backův jev)



výběrová pravidla $\Delta l = \pm 1, \Delta(m_l + m_s) = 0, \pm 1$ (II.99)

Tento jev se experimentálně pozoruje jen při velmi silných magnetických polích

Spin-orbitální interakce

Orbitální magnetický moment elektronu vyvolává magnetické pole, které interaguje s magnetickým spinovým momentem elektronu. To vyvolá rozštěpení energiové hladiny pro $m_s=1/2$ a $m_s=-1/2$ i bez vnějšího magnetického pole.

Spin-orbitální interakce způsobí, že orbitální moment \mathbf{L} a spinový moment \mathbf{S} se odděleně nezachovávají. Stacionární stav elektronu v poli protonu není tedy popsán kvantovými čísly m_s a m_l . Zachovává se celkový mechanický moment $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

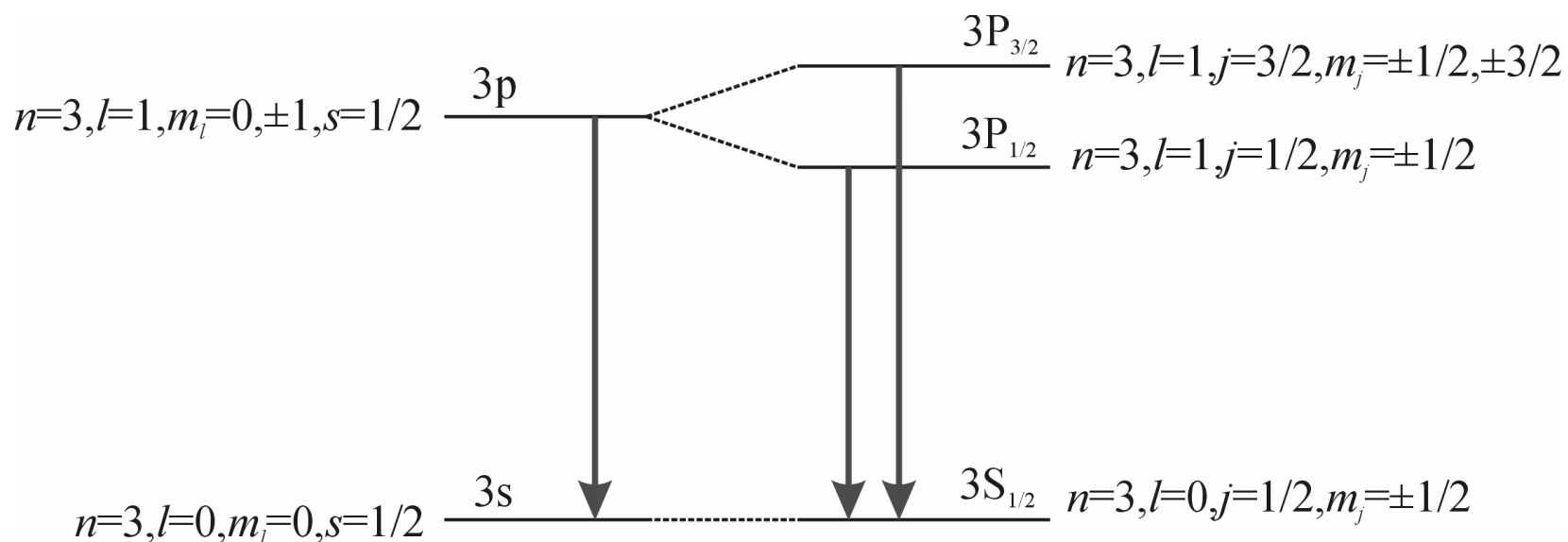
Celkový mechanický moment:

$$\begin{aligned} |\mathbf{J}| &= \sqrt{j(j+1)}\hbar, & j &= |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s \\ J_z &= m_j\hbar, & m_j &= -j, -j+1, \dots, j \end{aligned} \tag{II.100}$$

Kvantová čísla popisující stacionární stav elektronu (se započtením spin-orbitální interakce) jsou

$$n, l, j, m_j$$

Štěpení spektrální čáry Na bez vnějšího magnetického pole (sodíkový dublet):



$$\Delta E = 2.13 \times 10^{-3} \text{ eV} \quad \text{tomu odpovídá} \quad \Delta \lambda = 0.597 \text{ nm}$$

Pozn. značení energiových hladin (termů):

$$n^{(2s+1)}X_j, \quad X = S, P, D, F, \dots$$

Atom se spin-orbitální interakcí v magnetickém poli \Rightarrow **anomální Zeemanův jev**

Pauliho vylučovací princip

Atomy s více elektrony – kolik elektronů může být současně ve stejném stavu popsaném kvantovými čísly n, l, m_l, m_s (nebo n, l, j, m_j)?

Pauliho vylučovací princip: v daném stavu může být **nanejvýš jeden elektron**. Toto plyne z principu, že nelze principiálně rozlišit dva elektrony
Uvažme vlnovou funkci dvojice elektronů



Wolfgang Pauli (1900-1958)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

která popisuje stav, že 1. elektron je ve stavu \mathbf{r}_1 a 2. elektron ve stavu \mathbf{r}_2 . Na základě Pauliho principu platí

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 \quad (\text{II.101})$$

Pro částice s poločíselným spinem (**fermiony**) platí

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (\text{II.102})$$

Pro částice s celočíselným (**bosony**) spinem platí

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (\text{II.103})$$

Hundovo pravidlo

Jaká je konfigurace elektronů v základním stavu atomu?

Elektrony se snaží v základním stavu zaujmout stavy s různými kvantovými čísly m_l a stejnými orientacemi spinů

	1s	2s	2p				ionizační energie (eV)
Li $1s^2 2s^1$	↑ ↓	↑				$1^1S_0 2^2S_{1/2}$	5.39
Be $1s^2 2s^2$	↑ ↓	↑ ↓				$1^1S_0 2^1S_0$	9.32
B $1s^2 2s^2 2p^1$	↑ ↓	↑ ↓	↑			$1^1S_0 2^1S_0 2^2P_{3/2}$	8.29
C $1s^2 2s^2 2p^2$	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑		$1^1S_0 2^1S_0 2^3P_2$	11.26
N $1s^2 2s^2 2p^3$	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑	↑	$1^1S_0 2^1S_0 2^4S_{3/2}$	14.55
O $1s^2 2s^2 2p^4$	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑	$1^1S_0 2^1S_0 2^3P_0$	13.61
F $1s^2 2s^2 2p^5$	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑	$1^1S_0 2^1S_0 2^2P_{1/2}$	17.42
Ne $1s^2 2s^2 2p^6$	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	↑ ↓	$1^1S_0 2^1S_0 2^1S_0$	21.56

Moseleyho zákon

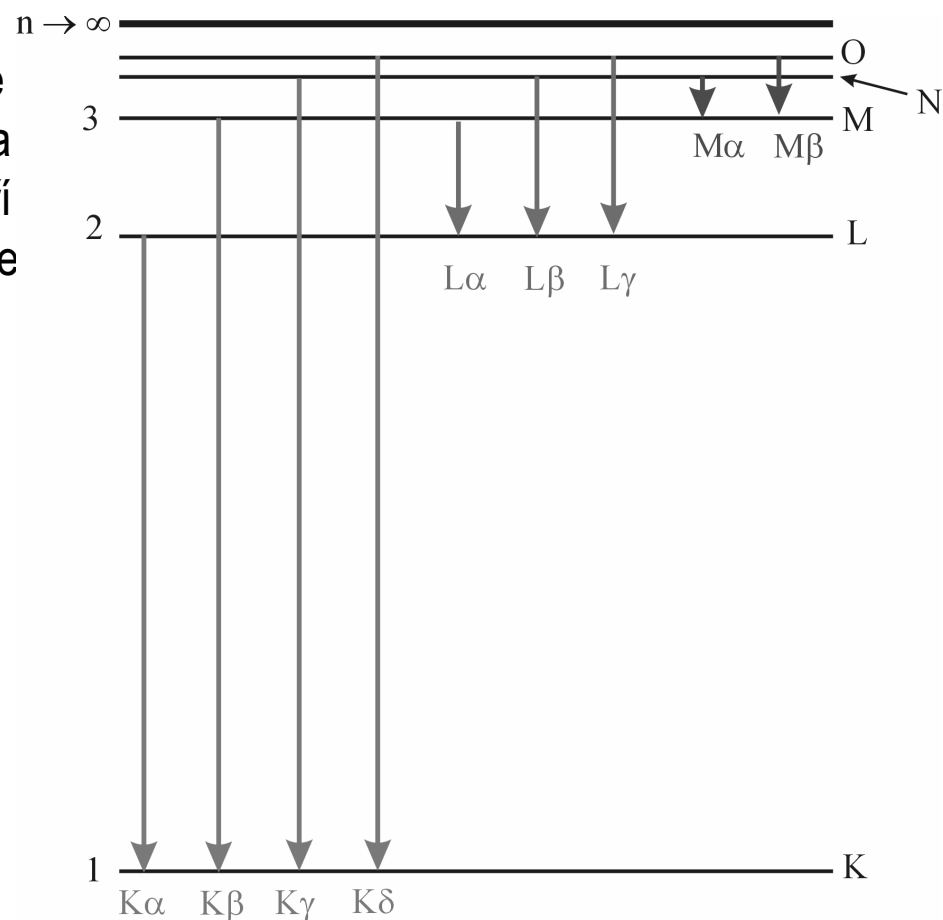
Zanedbáme-li jemnou strukturu, je ionizační energie slupky (II.15), (II.86)

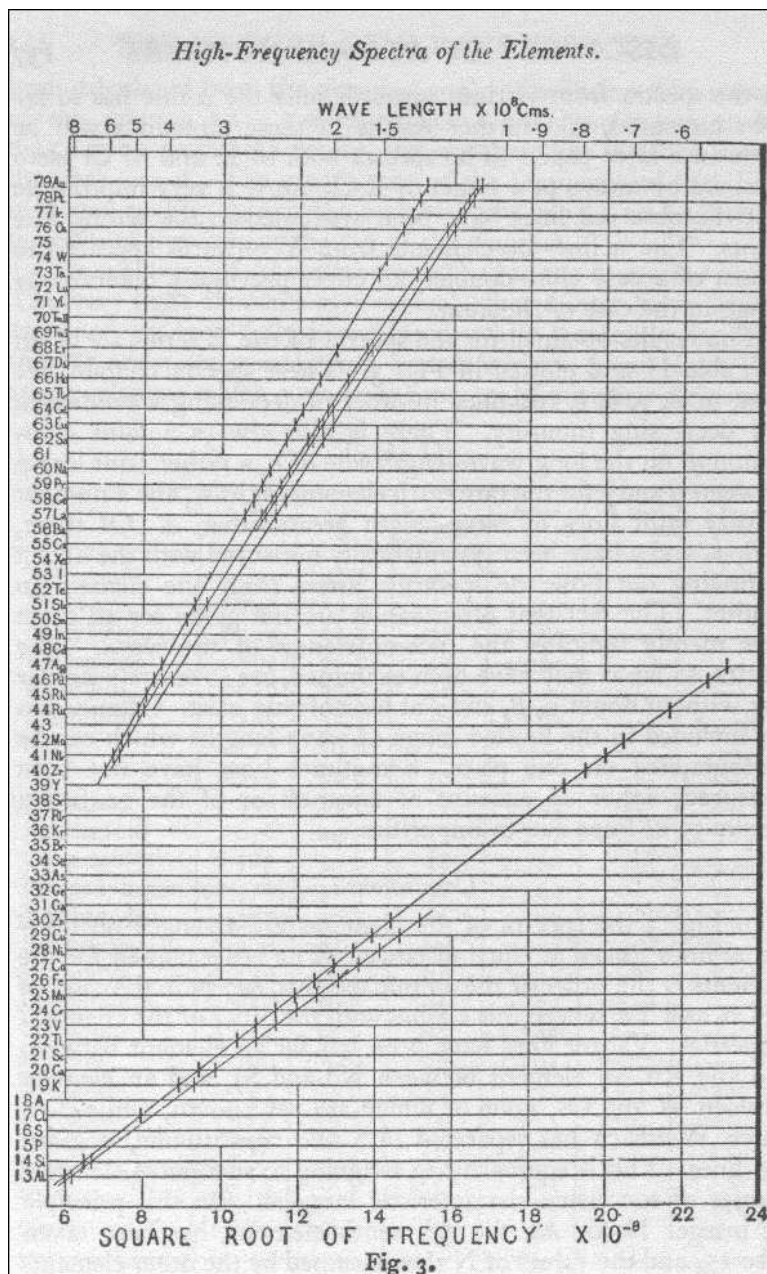
$$E_n = -\mathcal{R} \frac{Z^2}{n^2}$$

Dopadem elektronu s kinetickou energií větší než je ionizační energie slupky se tato slupka ionizuje a na prázdné místo přejde elektron z vyšší slupky. Vyzáří se foton rtg záření. Energie vzniklé spektrální čáry je lineární funkcí Z^2



H.G.J. Moseley (1887-1915)





$$\sqrt{E} \propto \sqrt{\omega} \propto Z$$

1914 – objev charakteristického rtg záření
 (H. G. J. Moseley, Phil. Mag., 1914, p. 703)
 – první experimentální potvrzení Bohrova modelu atomu

Co by teď mělo následovat:

vazba atomů v molekulách, molekulární spektra, ...
 (viz speciální přednášky)

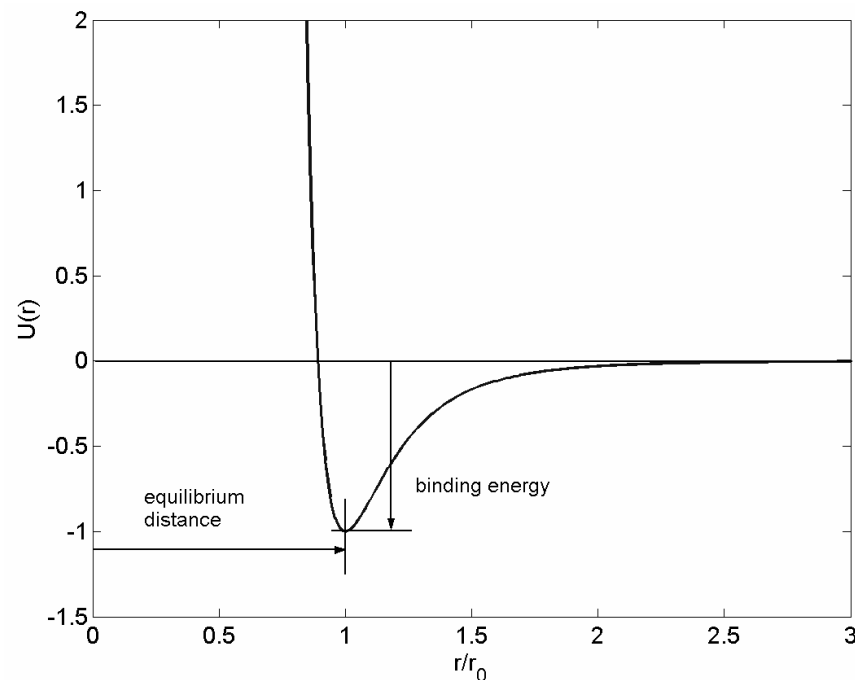
III. ZÁKLADY FYZIKY TUHÝCH LÁTEK

III.1. Vazby v tuhých látkách

Vazby mezi atomy jsou způsobeny elektrostatickými silami. Závislost potenciální energie dvojice atomů na jejich vzdálenosti se často aproximuje fenomenologickým výrazem

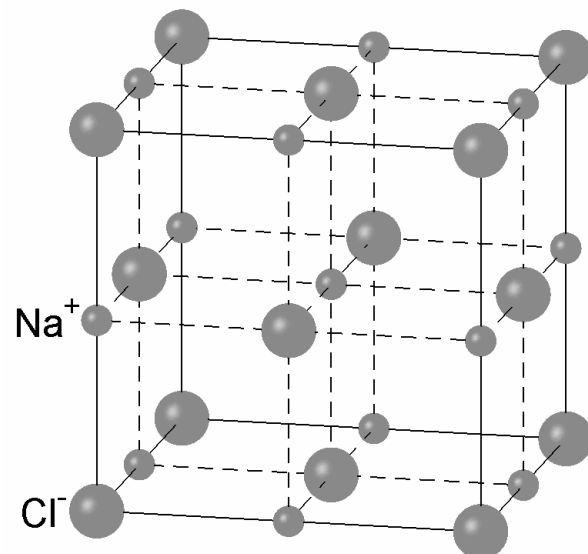
$$U(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m} \quad (\text{III.1})$$

$n = 6, m = 12:$



Iontová vazba

Příklad: krystal NaCl



Uvažme iont Na^+ . Tento iont je elektrostaticky přitahován k 6 sousedním iontům Cl^- , odpuzován od 12 iontů Na^+ v druhé koordináční sféře, atd. Celková potenciální energie iontu Na^+ je záporná a je rovna

$$U(r) = -\frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (\text{III.2})$$

kde r je vzdálenost iontů Na^+ a Cl^- , α je Madelungova konstanta, jejíž hodnota pro NaCl je

$$\alpha \approx 1.7476$$

Díky Pauliho vylučovacímu principu jsou sousední atomy odpuzovány, překrývají-li se vlnové funkce jejich elektronů.

Celková potenciální energie iontu v krystalu je

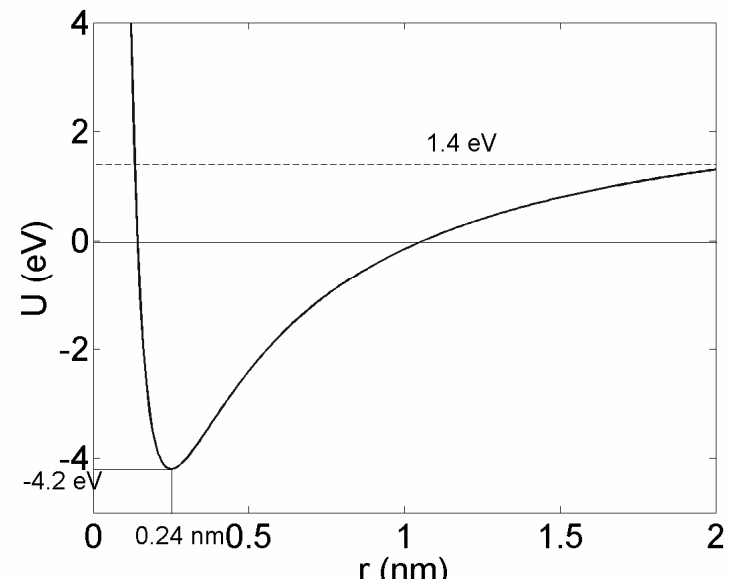
$$U(r) = -\frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{B}{r^m}, \quad m \approx 10 \quad (\text{III.3})$$

Poloha potenciálního minima odpovídá rovnovážné vzdálenosti r_0 sousedních iontů. Hloubka tohoto minima (iontová kohezní energie) je energie na jeden iont potřebná k rozložení tuhého tělesa na nekonečně vzdálené jednotlivé ionty:

$$U_0 = -\frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{m}\right) \quad (\text{III.4})$$

Odbočka: iontová vazba v molekule NaCl

Ion Cl^- je stabilnější než neutrální atom Cl. Připojením elektronu k atomu Cl se uvolní energie 3.7 eV (elektronová afinita). Energie potřebná k odtržení elektronu od neutrálního atomu Na a ke vzniku iontu Na^+ je 5.1 eV. Energi potřebná ke vzniku páru izolovaných iontů Na^+ a Cl^- je tedy 1.4 eV. Přiblížíme-li ionty k sobě, jejich energie klesá díky elektrostatické přitažlivé síle. Je-li vzdálenost iontů dostatečně malá, je celková energie molekuly Na^+Cl^- záporná a vzniká iontová vazba.



Iontová kohezní energie krystalu NaCl na jeden pár $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ je 7.8 eV, atomová kohezní energie na pár neutrálních atomů Na Cl je $7.8 - 5.1 + 3.6 \text{ eV} = +6.3 \text{ eV}$

Čím je větší atomová kohezní energie, tím je rovnovážná vzdálenost iontů menší a teplota tání vyšší.

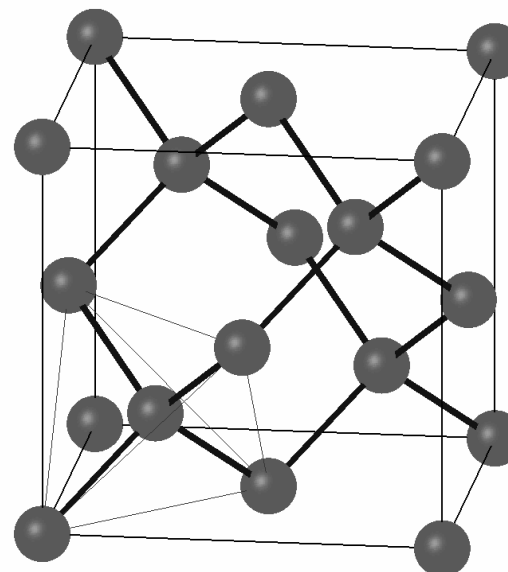
Vlastnosti iontových krystalů:

- stabilní a tvrdé krystaly
- dielektrika
- vysoké teploty tání a varu
- průhledné ve viditelné oblasti spektra, absorbují v IR (absorpce na fononech)
- rozpustné v polárních kapalinách (ve vodě)

Kovalentní vazba

Příklad: diamant, křemík, germanium (prvky 4. grupy)

Elementární buňka C (diamant), Si nebo Ge
(kubická diamantová mřížka)



Kovalentní vazba – sdílení elektronů sousedními atomy (více v kvantové chemii)

V diamantové struktuře je každý atom kovalentně vázán ke čtyřem sousedům, ležícím ve vrcholech pravidelného čtyřstěnu. Tím se u diamantu úplně zaplní slupka 2p.

Kohezní energie na dvojici atomů C v diamantu je asi 14.7 eV. Čím je větší kohezní energie, tím je vyšší bod tání krystalu.

Vlastnosti kovalentních krystalů:

tvrdost, dielektrika nebo polovodiče, propustné pro viditelné světlo (diamant) nebo pro IR světlo (křemík)

Kovová vazba

Kovová vazba je slabší než iontová nebo kovalentní vazba. V kovu se valenční elektrony od atomů uvolní a vytvoří „elektronový plyn“. Kovová vazba je způsobena elektrostatickým přitahováním kladných iontů k elektronovému plynu. Kohezní energie na atom je v rozmezí 1 – 4 eV (Fe má kohezní energii asi 4.3 eV, Pb má 2.04 eV).

Světlo silně interaguje s elektronovým plynem, což způsobuje silnou odrazivost kovu v IR a viditelné oblasti.

Molekulové krystaly

Molekulová vazba není zprostředkována volnými nebo sdílenými elektrony, uplatňuje se tedy u atomů s úplně zaplněnými slupkami (inertní plyny). Van der Waalsovy síly mezi těmito atomy jsou způsobeny přitažlivou interakcí mezi elektrickými dipóly.

Molekuly vody mají značný dipólový moment a vytvářejí vodíkovou vazbu. V ledu například je kohezní energie na molekulu asi 0.5 eV. I atomy, které nemají permanentní dipólový moment, jsou touto vazbou svázány; vazba působí mezi fluktuacemi elektronové hustoty. Kohezní energie této vazby je velmi slabá (CH_4 má kohezní energii 0.1 eV na molekulu a tuhý Ar asi 0.078 eV).

III.2. Klasický model volných elektronů v kovu

Drudeho model elektronového plynu. Základní předpoklady:

- každý atom kovu „věnuje“ do elektronového plynu Z elektronů (Z je valence atomu)
- elektrony jsou volné (tj. nepůsobí na ně žádná síla)
- elektrony jsou nezávislé (tj. nepůsobí na sebe navzájem)
- rychlosti elektronu jsou náhodné a řídí se Maxwell-Boltzmannovou statistikou
- elektrony se srážejí (s čím??); rychlost elektronu po srážce nezávisí na jeho rychlosti před srážkou

Hustota elektronů v plynu:

$$n = Zn_{\text{atom}} = Z \frac{N_A \rho}{M} \quad (\text{III.5})$$

N_A je Avogadrova konstanta, ρ je hustota kovu a M je jeho molární hmotnost. Hustota elektronů v plynu je řádově $10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Ideální plyn za normálních podmínek má hustotou částic asi 1000x menší.

Elektrická vodivost klasického elektronového plynu

Bez vnějšího elektrického pole je rozdělení rychlostí elektronů náhodné se střední hodnotou

$$\langle \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (\text{III.6})$$

Střední kvadratická rychlost elektronů závisí na teplotě vztahem

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m} \quad (\text{III.7})$$

$k_B \approx 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \approx 8.6 \text{ eV/K}$ je Boltzmannova konstanta, m je hmotnost elektronu.

Z (III.7) plyne střední kvadratická rychlost elektronového plynu za pokojové teploty asi 60 km/s.

Protože je střední rychlost elektronů nulová, nedochází bez vnějšího elektrického pole k makroskopickému přenosu elektrického náboje

Ve vnějším elektrickém poli působí na elektrony elektrostatická síla a mezi srážkami se elektrony pohybují rovnoměrně zrychleně.

Označme τ střední dobu mezi dvěma následujícími srážkami elektronu (relaxační doba). Srážkou elektron získanou rychlost ztratí a jeho rychlostní rozdělení je zase dáno Maxwell-Boltzmannovou statistikou.

Driftová rychlost v_D je střední rychlost elektronů v plynu v elektrickém poli

$$v_D = \frac{eE\tau}{m} \quad (\text{III.8})$$

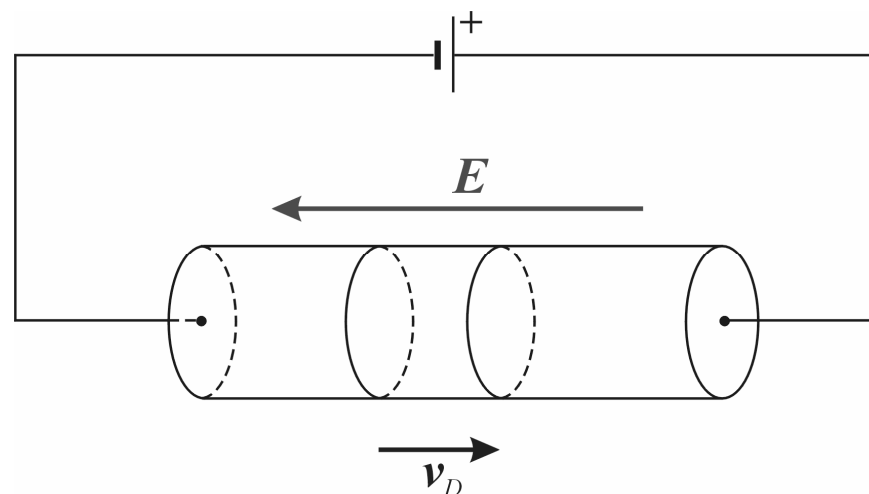
Díky této rychlosti dochází k makroskopickému přenosu elektrického náboje

Hustota elektrického proudu

$$\mathbf{j} = nev_D = \sigma \mathbf{E} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} \quad (\text{III.9})$$

kde

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (\text{III.10})$$



je **specifická elektrická vodivost** elektronového plynu. (III.9) je **Ohmův zákon** v diferenciálním tvaru

Z naměřených hodnot σ a vypočtených hodnot n vyplývá relaxační doba elektronu řádově 10^{-15} s.

Definujme střední volnou dráhu elektronu

$$L = \tau \sqrt{\langle v^2 \rangle} \quad (\text{III.11})$$

Dosazením číselných hodnot vyjde L řádově 10^{-10} m, tj. vzdálenost mezi sousedními atomy v krystalu. Z toho vyplývá, že ke srážkám elektronů dochází s ionty. Tento závěr je **nesprávný**. Ve skutečnosti je L řádově 100x delší a tedy i střední kvadratická rychlost elektronů 100x větší. Důvod – klasická Maxwell-Boltzmannova statistika se nedá pro elektronový plyn použít.

Číselně: Cu: $\tau = 2.5 \times 10^{-14}$ s, $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 1.17 \times 10^5$ m/s, $L = 2.6 \times 10^{-10}$ m $\approx a$

Optické vlastnosti klasického elektronového plynu

Volné elektrony vykonávají nucené harmonické kmity v periodickém vnějším elektrickém poli. Výchyly elektronů vedou k polarizaci elektronového plynu (**elektronová polarizace**)

Vlastní kmity elektronového plynu:

$$\text{Vratná síla } \mathbf{F} = -\mathbf{x} \frac{ne^2}{\epsilon_0} \quad (\text{III.12})$$

$$\text{Pohybová rovnice } m\ddot{x} + \frac{ne^2}{\epsilon_0} x = 0 \quad (\text{III.13})$$

Rezonanční frekvence – plazmová frekvence

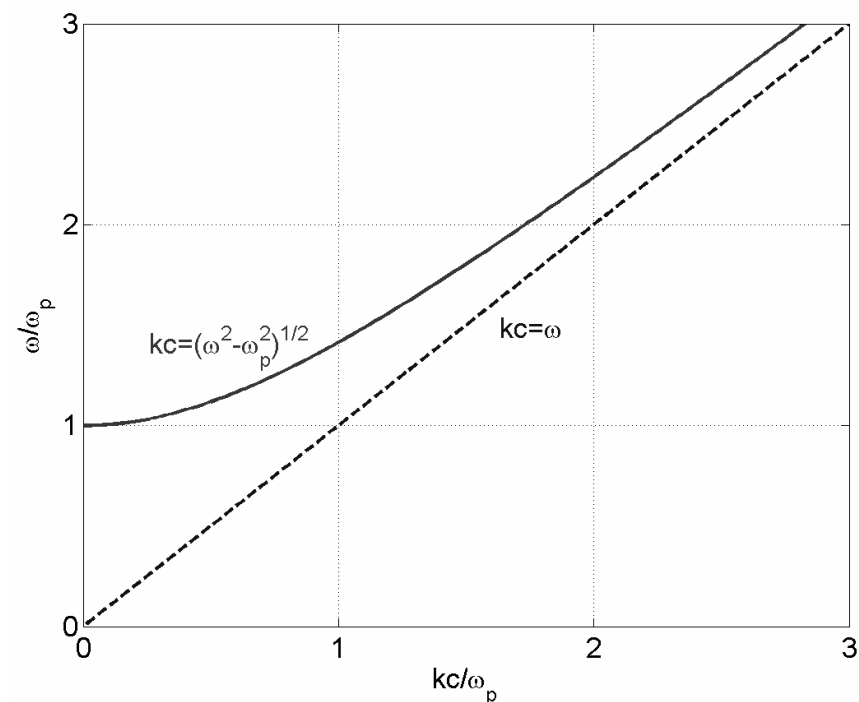
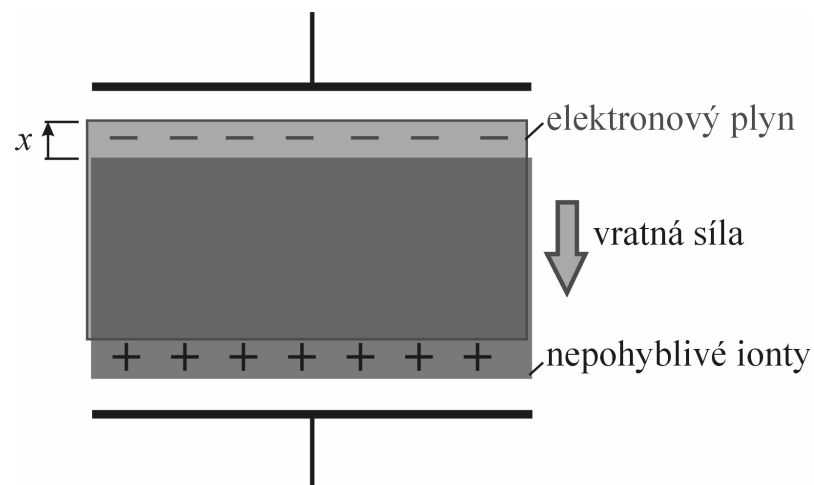
$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}} \Rightarrow \omega_p \propto \sqrt{n} \quad (\text{III.14})$$

Z Maxwellových rovnic plyne závislost mezi vlnovým vektorem a frekvencí elektromagnetické vlny šířící se elektronovým plynem

$$c^2 k^2 = \omega^2 - \omega_p^2 \quad (\text{III.15})$$

Elektronovým plynem se nemůže šířit elektromagnetická vlna s frekvencí $\omega < \omega_p$

Elektromagnetické vlnění s touto frekvencí se od rozhraní elektronový plyn-vakuum **totálně odráží** i při kolmém dopadu



Vynucené kmity volného elektronu ve vnějším periodickém elektrickém poli:

$$m\ddot{x} + m\dot{x}/\tau = eEe^{-i\omega t}$$

Výchylka kmitů je
$$x = -\frac{eE}{m} \frac{\tau}{\omega^2\tau + i\omega} e^{-i\omega t}$$

Polarizace elektronového plynu
$$P = nex = -\frac{ne^2 E}{m} \frac{\tau}{\omega^2\tau + i\omega} \equiv \varepsilon_0(\varepsilon - 1)E$$

Odtud relativní permitivita elektronového plynu

$$\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'', \quad \varepsilon' = 1 - \frac{(\omega_p\tau)^2}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad \varepsilon'' = \frac{\omega_p^2\tau}{\omega(1 + (\omega\tau)^2)}$$

Odrazivost se blíží k jedné pro $\omega < \omega_p$

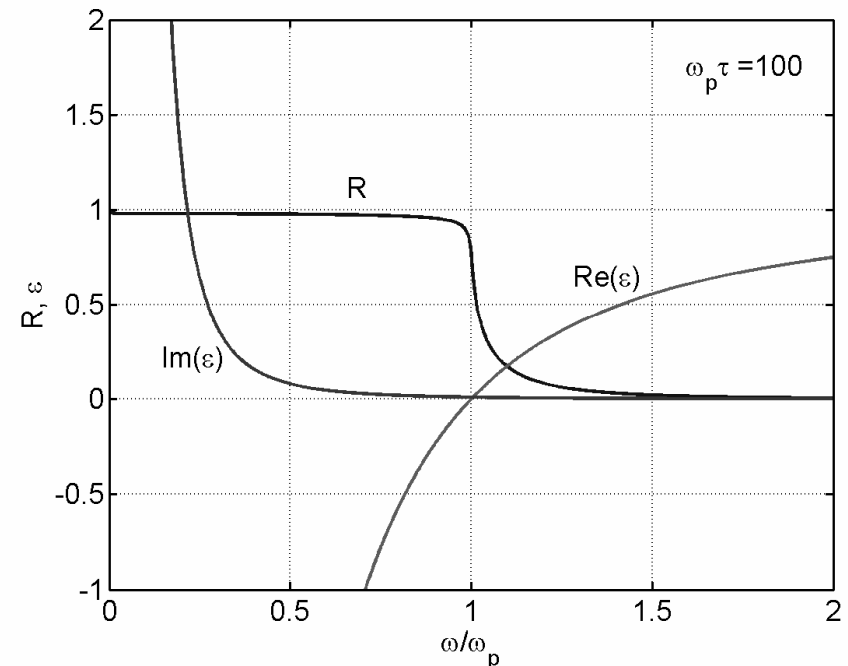
Plazmová frekvence sodíku:

$$\omega_p \approx 8.97 \times 10^{15} \text{ rad/s} \approx 5.9 \text{ eV}$$

$$\lambda_p \approx 210 \text{ nm}$$

blízká UV oblast

Sodík je lesklý ve viditelné oblasti spektra



III.3. Kvantový model volných elektronů v kovu

Pauliho vylučovací princip: V témže jednoelektronovém stavu mohou být nanejvýš dva elektrony s opačným spinem. Maxwell-Boltzmannova statistika tomuto principu nevyhovuje.

MB statistika: při nulové teplotě jsou všechny elektrony v témže stavu s nulovou rychlostí a nulovou kinetickou energií.

Fermi-Diracova statistika: Při nulové teplotě jsou obsazeny dvěma elektrony všechny stavy s energiemi menšími nebo rovny Fermiho energii

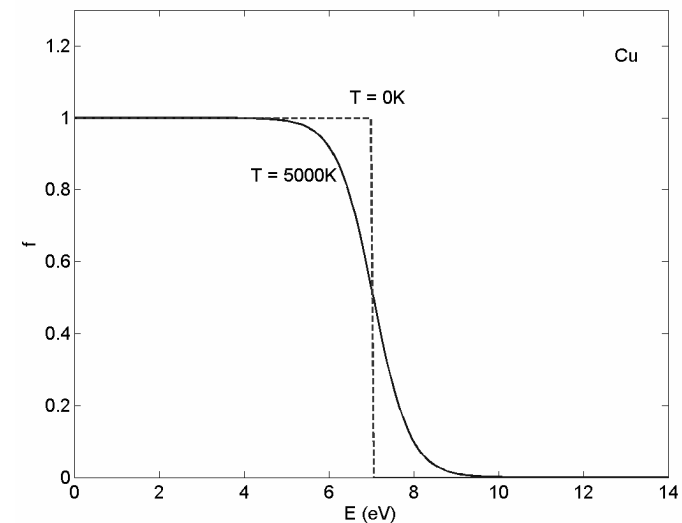
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (\text{III.16})$$

Pauliho princip: není možné daný stav obsadit více než dvěma elektrony

Za vyšších teplot jsou některé stavy s energií menší než E_F volné a některé stavy nad E_F obsazené

Pravděpodobnost nalezení obsazeného stavu

Při vysokých teplotách přechází Fermi-Diracova statistika v klasickou Maxwell-Boltzmannovu statistiku



Elektrická vodivost elektronového plynu – kvantový popis

V nulovém vnějším poli a při nulové teplotě jsou v rychlostním prostoru obsazeny všechny stavy s rychlostmi

$$\frac{1}{2} m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \leq E_F \quad (\text{III.17})$$

Maximální rychlost neuspořádaného pohybu – Fermiho rychlost $v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}}$ (III.18)

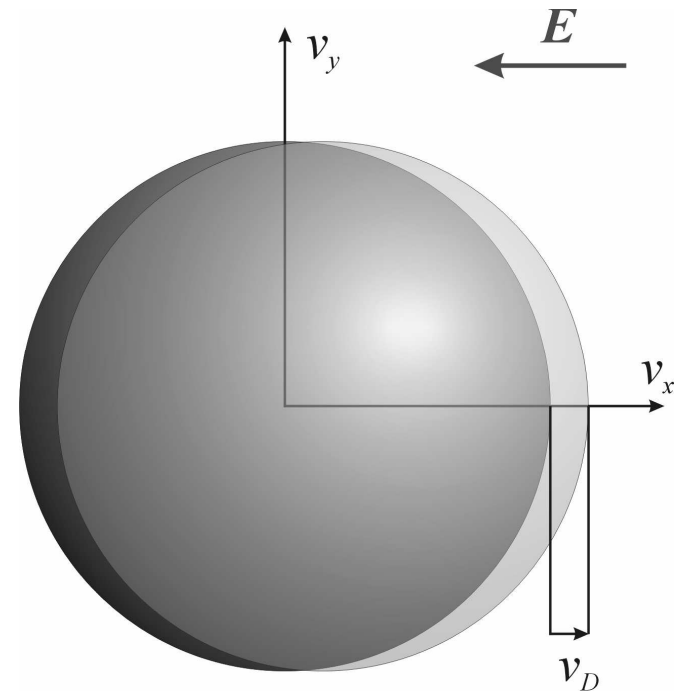
Cu: $E_F = 7.05 \text{ eV}$, $v_F = 1.57 \times 10^6 \text{ m/s}$

Ve vnějším elektrickém poli získanou elektrony driftovou rychlost v_D (rychlost uspořádaného pohybu).
Číselně: Cu: $v_D = 4.4 \text{ mm/s} \ll v_F$

Koule obsazených stavů v rychlostním prostoru se vlivem vnějšího elektrického pole jen velmi málo posune, na přenosu náboje se podílejí jen elektrony s rychlostí v_F .
Střední volná dráha elektronů je tedy

$$L = \tau v_F \quad (\text{III.19})$$

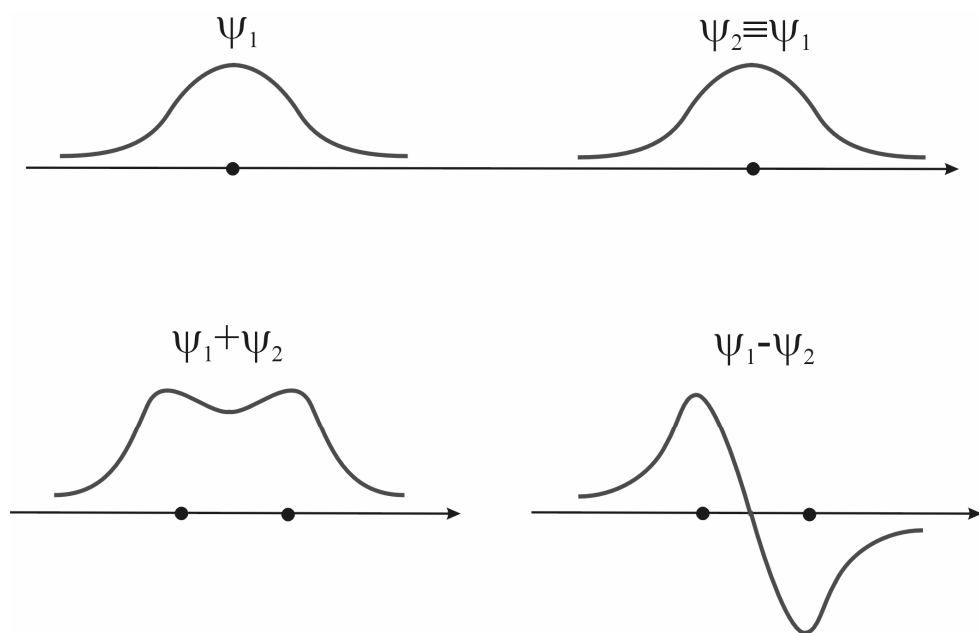
Číselně: Cu: $L = 3.9 \times 10^{-8} \text{ m} \gg a$



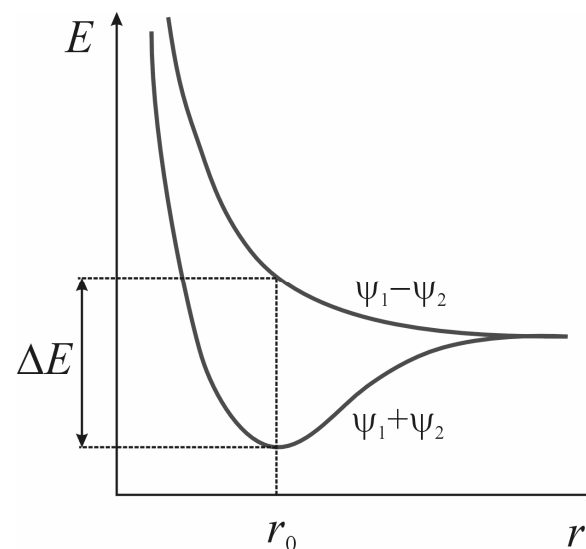
III.4. Pásová teorie elektronů v tuhé látce

„Sestavme“ krystal tuhé látky postupným přibližováním izolovaných N identických atomů. Jsou-li atomy velmi vzdáleny, energiové hladiny jejich elektronových obalů jsou $N \times$ degenerovány. Díky interakci mezi atomy (překryv vlnových funkcí elektronů v různých atomech) se tato degenerace snímá a vznikají **energiové pásy**

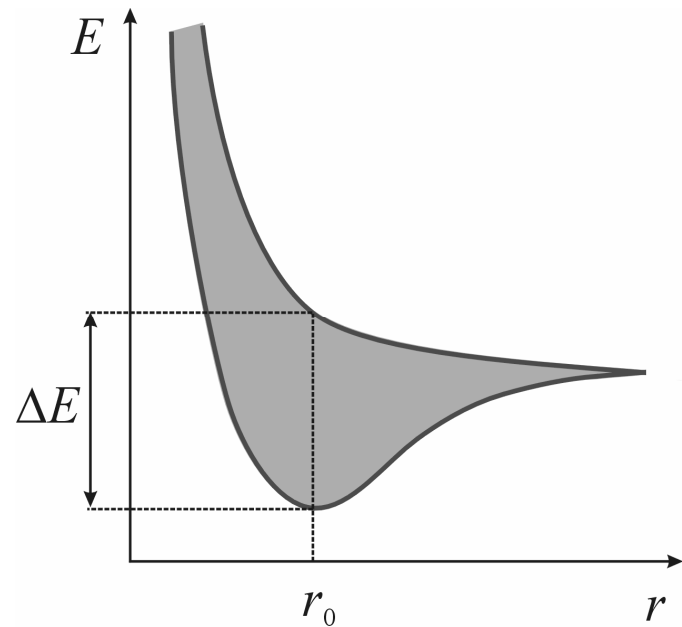
Případ dvou atomů, každý s 1 elektronem v s stavu:



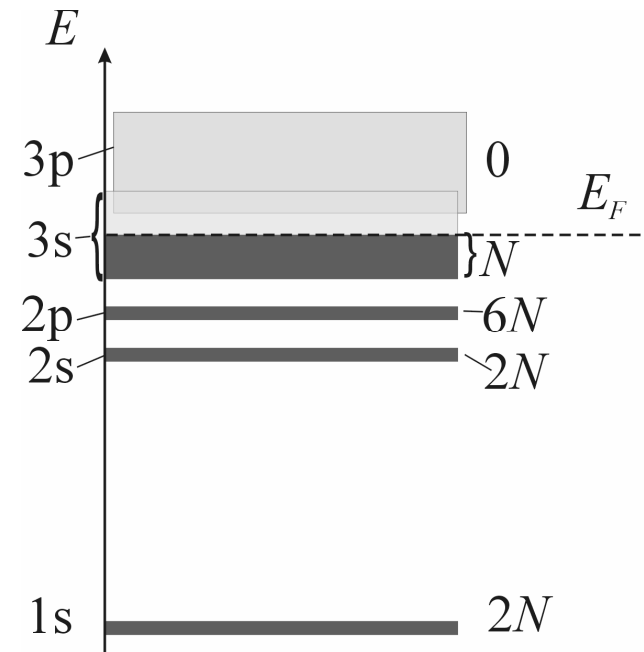
Rozštěpení energiových hladin:



N atomů



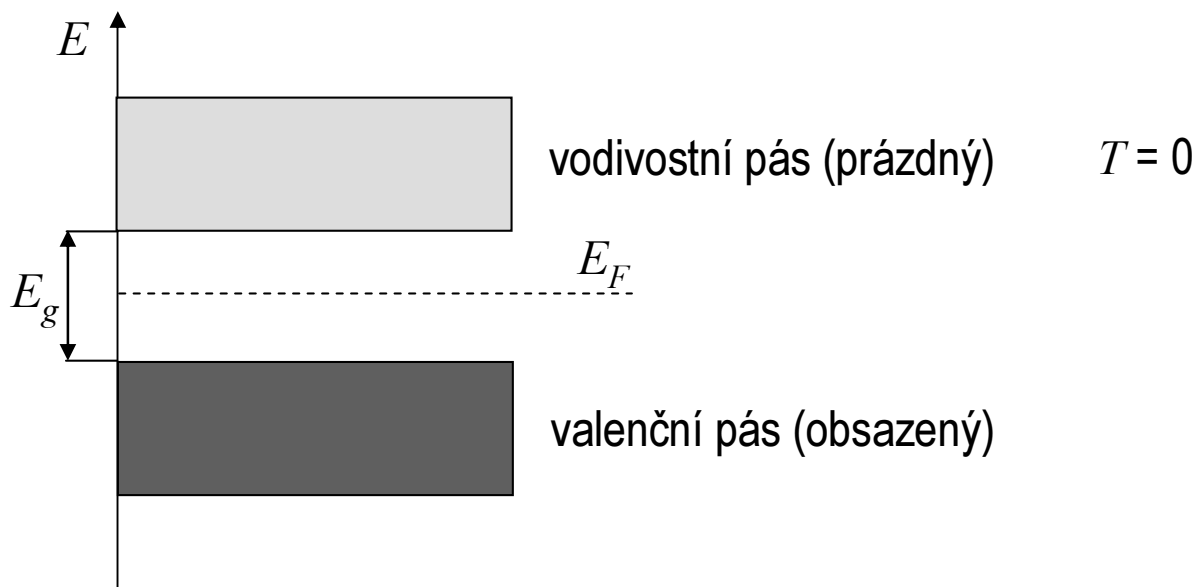
Příklad: pásové schéma Na
($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = 11$ elektronů)



každý energiový pás může obsahovat
nanejvýš $2(2l+1)$ elektronů

Kovy: energiový pás je částečně zaplněn (Na). Působením vnějšího elektrického pole může elektron získat kinetickou energii driftového pohybu \Rightarrow vedení elektrického proudu

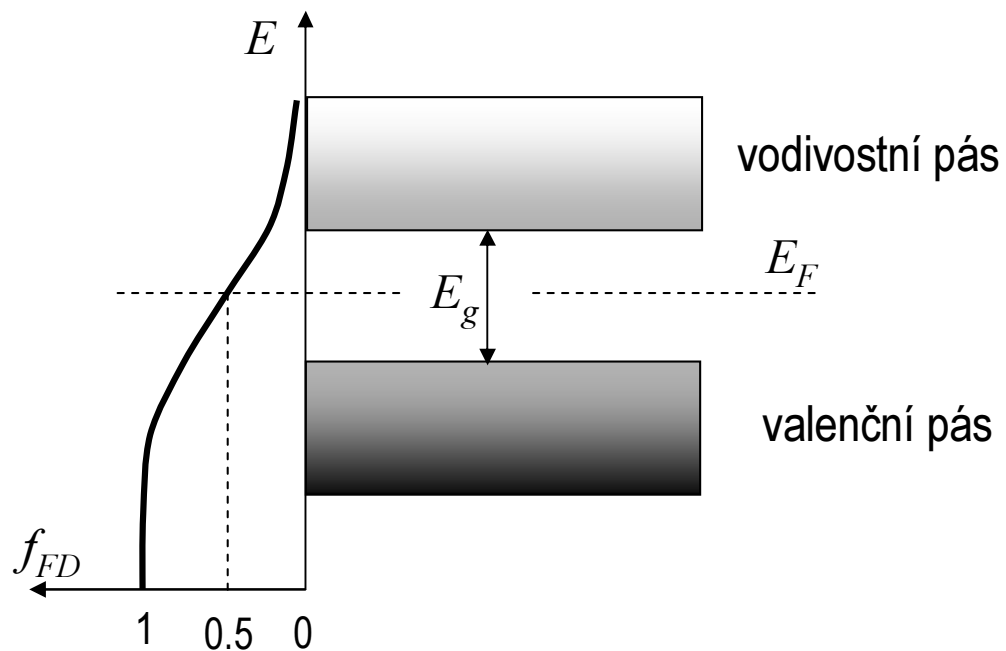
Izolanty: energiový pás (valenční pás) je zcela zaplněn, další energiový pás (vodivostní pás) je volný. Šířka zakázaného pásu (energy gap E_g) je mnohem větší než $k_B T$ (0.025 eV při pokojové teplotě)



Polovodiče: zakázaný pás má šířku 1-2 eV nebo menší. Při $T=0$ je vodivostní pás volný a materiál nevede elektrický proud. S rostoucí teplotou roste hustota n elektronů ve vodivostním pásu a roste specifická vodivost

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (\text{III.20}) \quad (\tau \text{ klesá s teplotou, ale pomaleji, než } n \text{ roste})$$

Pásové schéma polovodiče při $T > 0$

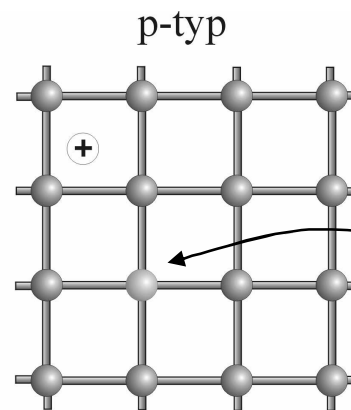
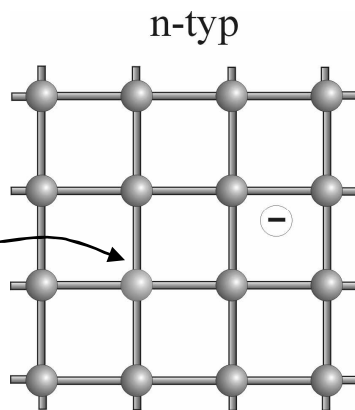


Šířky zakázaných pásů některých polovodičů

polovodič	E_g (eV) (300K)
Si	1.14
Ge	0.67
GaAs	1.43
GaP	2.26
InP	1.35

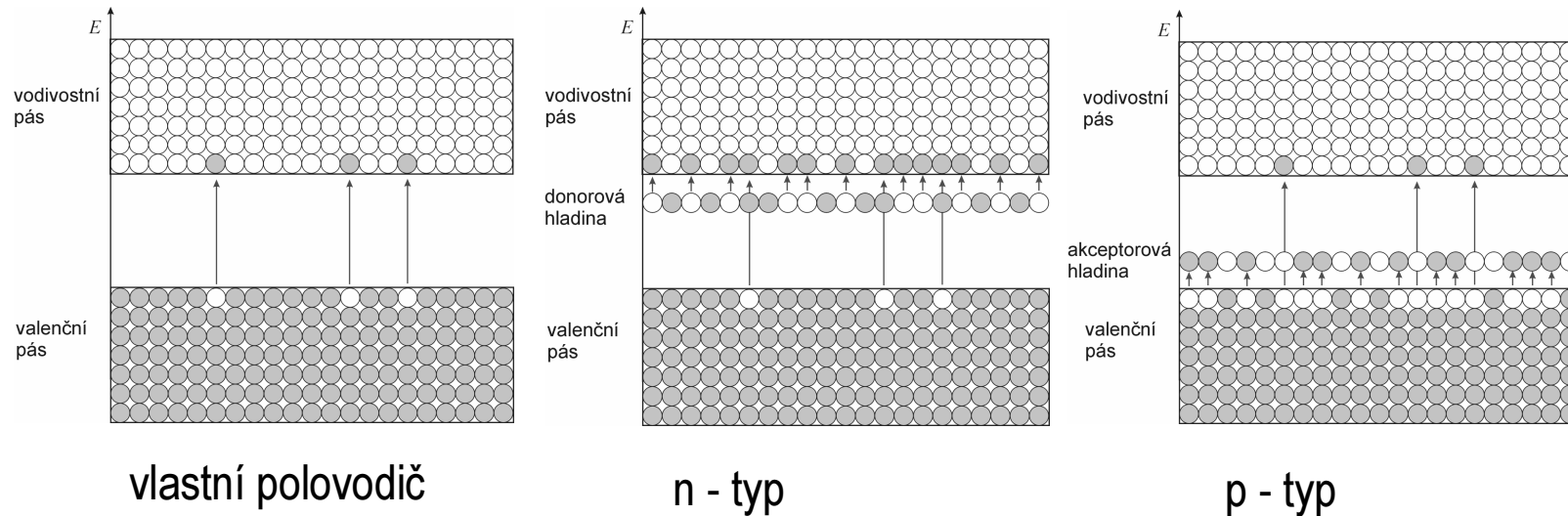
Příměsový polovodič:

příměsový atom z V. grupy



příměsový atom z III. grupy

Přechody elektronů z valenčního do vodivostního pásu při $T > 0$



Vlastní polovodič: hustota volných elektronů je rovna hustotě volných děr $n = p$

Polovodič typu n: hustota volných elektronů je větší než hustota volných děr $n > p$

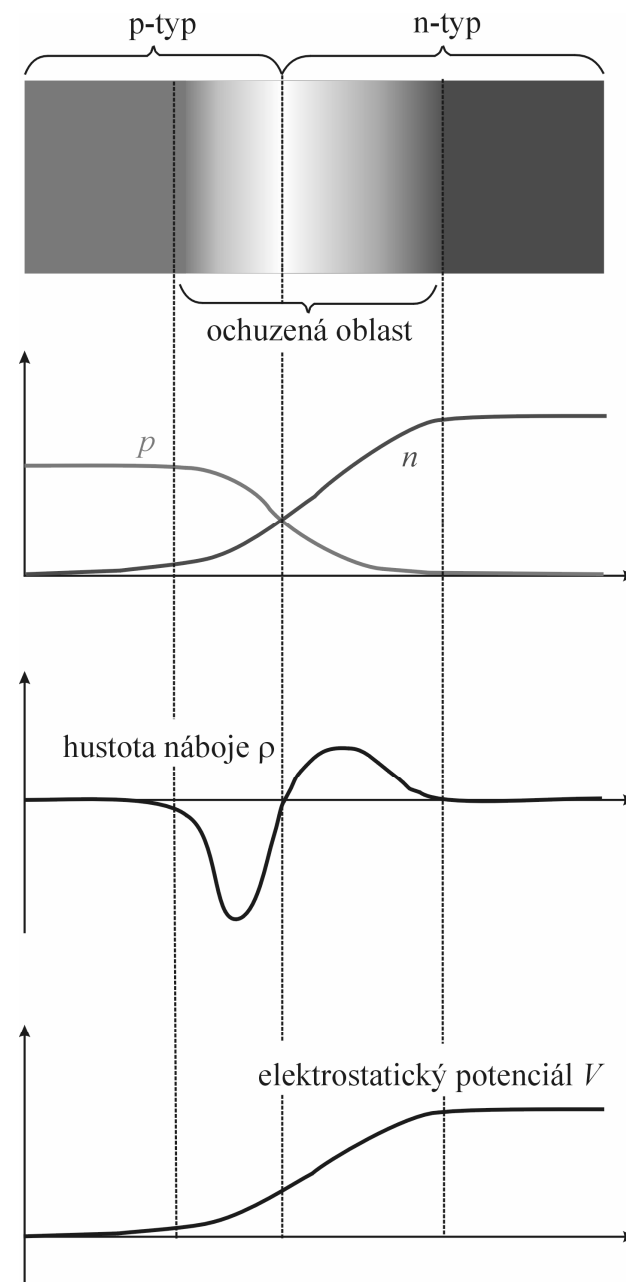
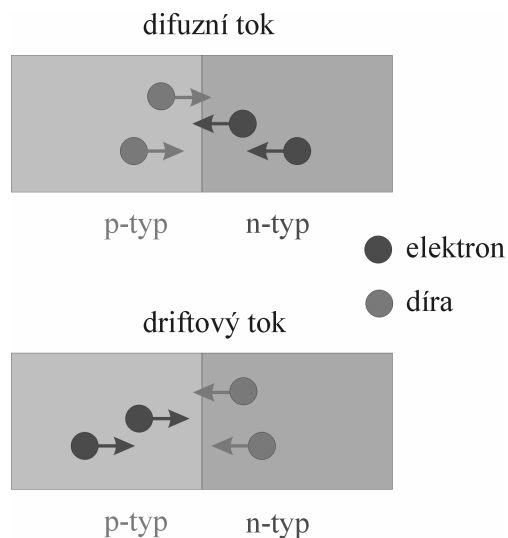
Polovodič typu p: hustota volných elektronů je menší než hustota volných děr $n < p$

III. 5. Polovodičové součástky

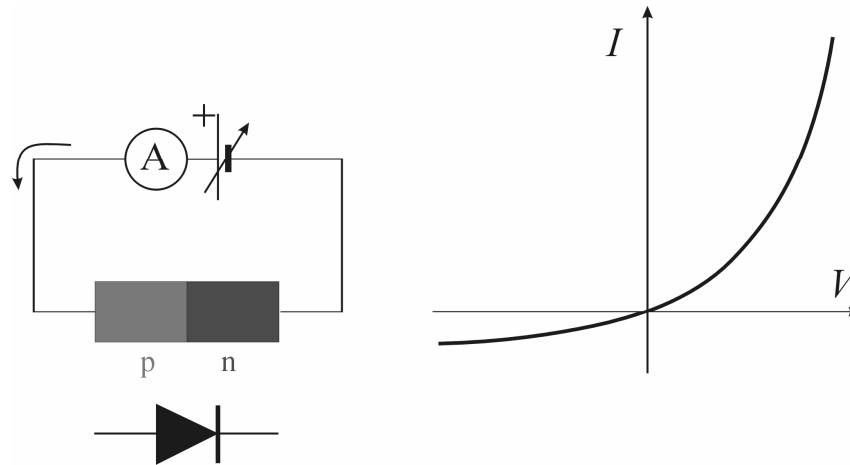
p-n přechod

polovodič typu p je spojen s polovodičem typu n tak, aby nositelé náboje mohli volně procházet:

Rovnovážný stav – difúzní tok elektronů (děr) se právě kompenzuje driftovým tokem vyvolaným rozdílem potenciálů n-typu a p-typu (kontaktním potenciálem)



Polovodičová dioda



Voltampérová charakteristika

$$I = I_0 \left(e^{e|V|/k_B T} - 1 \right) \quad (\text{III.21})$$

Usměrňovací efekt: dioda v propustném směru: + na p, – na n
dioda v závěrném směru: – na p, + na n

Bipolární tranzistor

John Bardeen, Walter Brattain,
William Shockley – prosinec 1947, (Nobelova cena 1956)



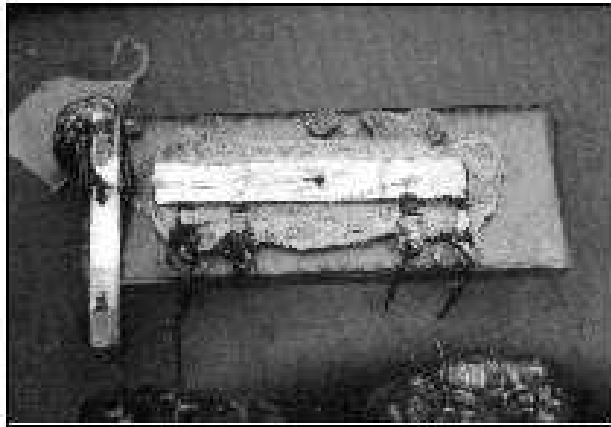
První (hrotový) tranzistor (1947)



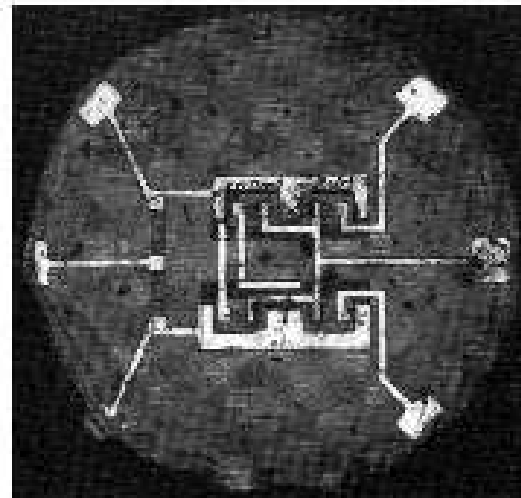
První slitinový tranzistor (1950)



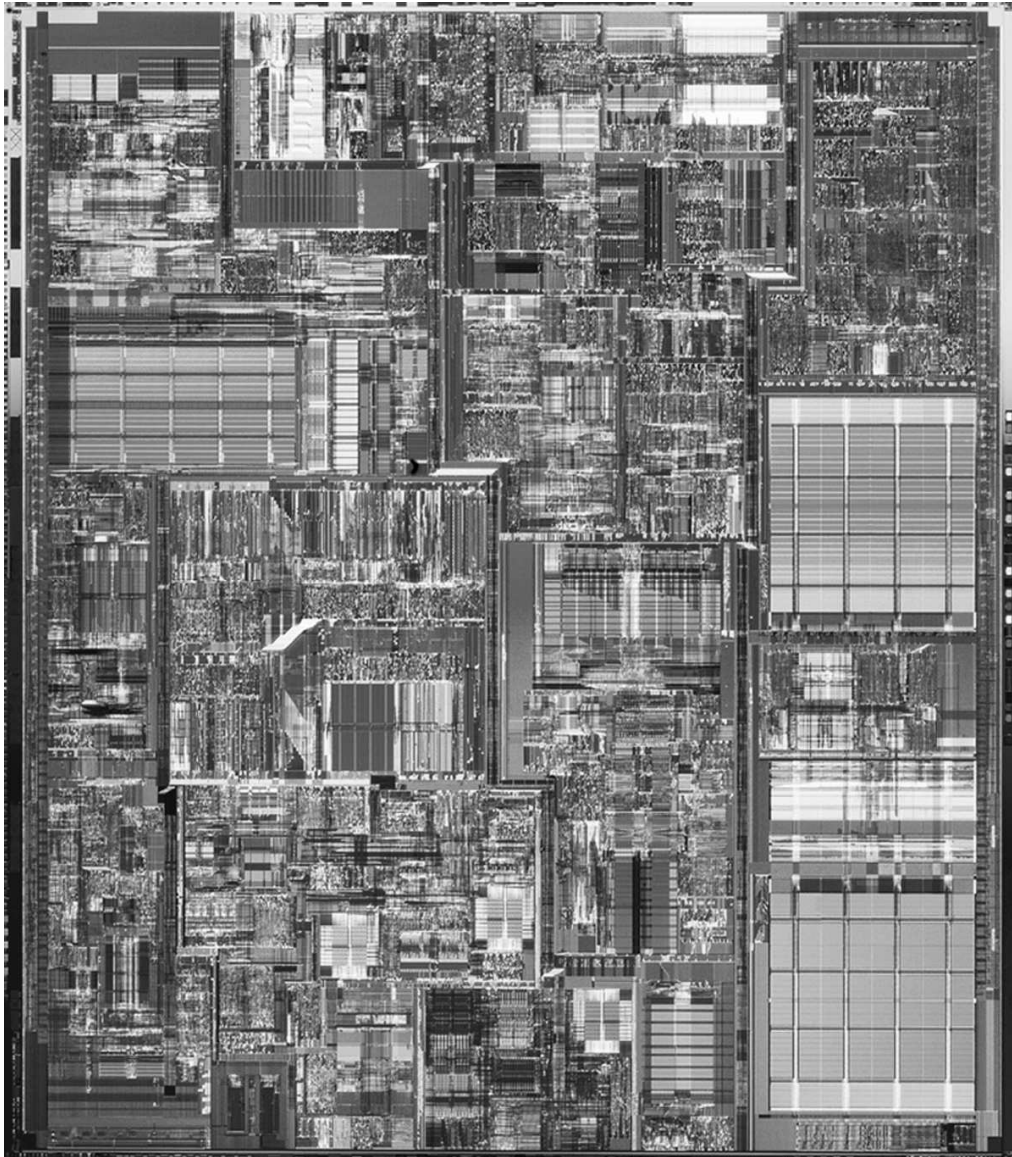
První integrované obvody



Kilby's wire-bonded IC - 1958



Fairchild RTL IC - 1961



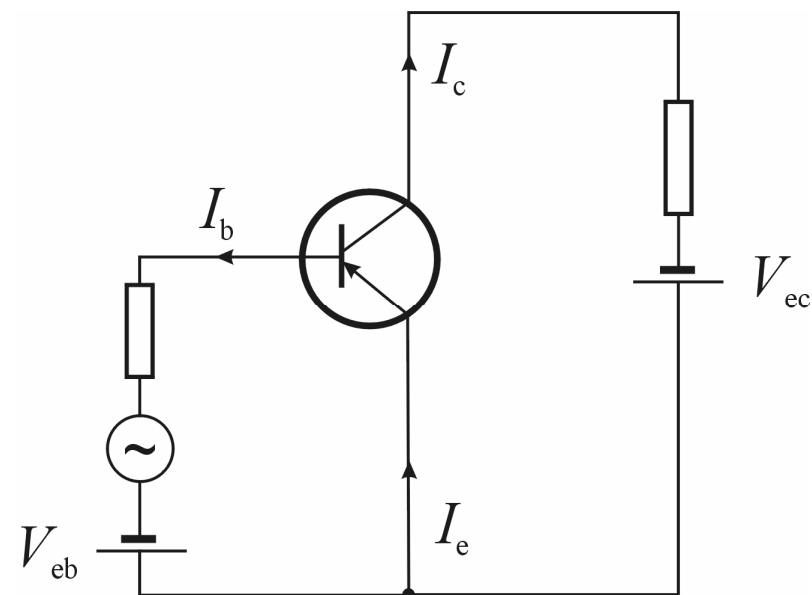
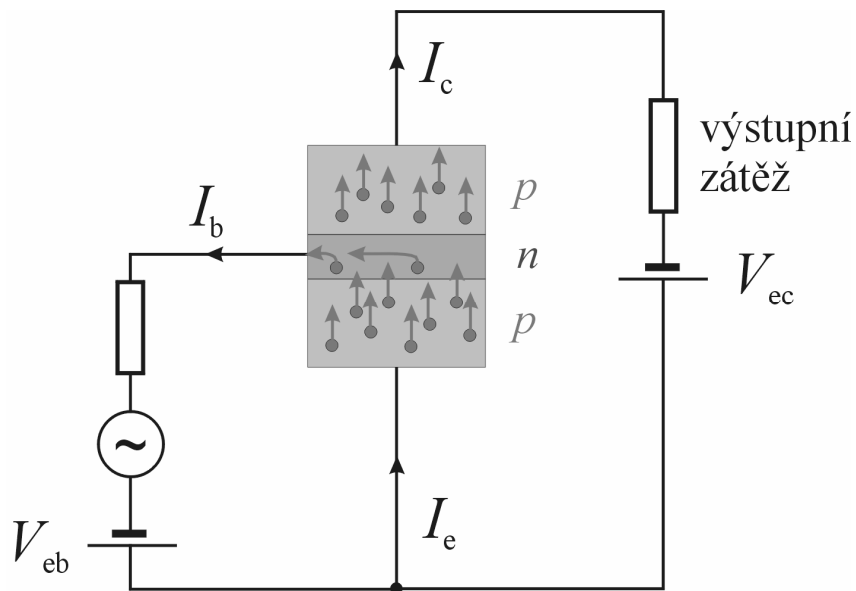
Procesor Intel Pentium 4, $42 \cdot 10^6$ tranzistorů,
kmitočet 1,5GHz (2000)



Wolfgang Pauli (1900-1958)

“Man sollte sich mit Halbleitern nicht beschäftigen, das sind Dreckeffekte – wer weiß, ob sie wirklich existieren” (1931)

(„Neměli bychom se zabývat polovodiči, ty jevy jsou způsobené nečistotami – kdo ví, zda polovodiče vůbec existují“)



Princip činnosti tranzistoru:

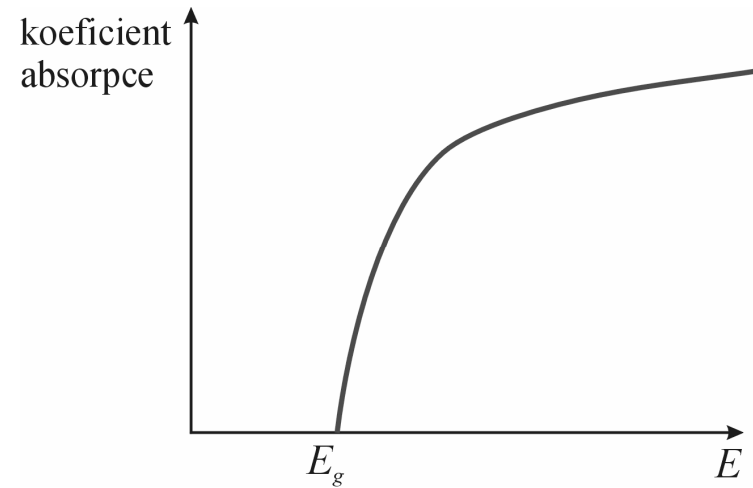
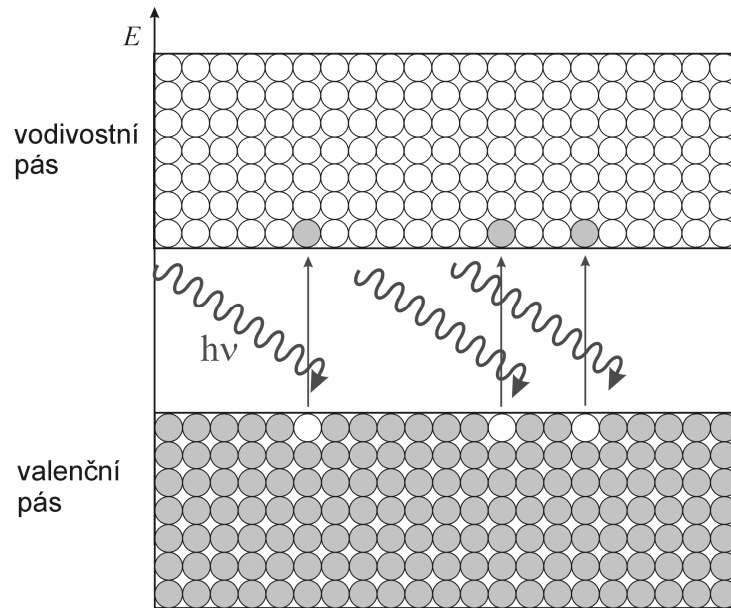
Přechod emitor-báze je polarizován v propustném směru, přechod báze-kolektor v závěrném směru. Emitorový proud je tvořen děrami driftujícími do báze. V bázi jsou díry minoritními nositeli proudu a rekombinují s volnými elektrony. Protože je báze velmi tenká, velká část těchto děr nerekombinuje a difúzí pronikne do kolektoru. Tato difúze je urychlována napětím mezi bázi a kolektorem. Část děr v bázi je odváděna z báze. Proud báze I_b ovlivňuje kolektorový proud

$$I_c = \beta I_b \quad (\text{III.22})$$

Zesilovací činitel $\beta \approx 10 \div 100$

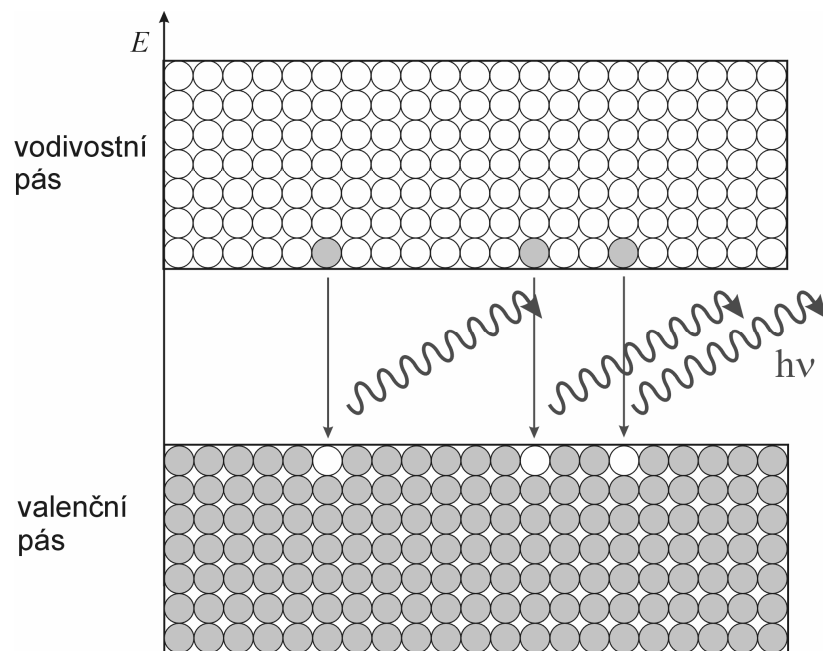
Světelná dioda – LED

Absorpce světla vlastním polovodičem



Např. GaAs absorbuje světlo s energiemi nad 1.43 eV, tj. s vlnovými délkami pod 868 nm (IR světlo)

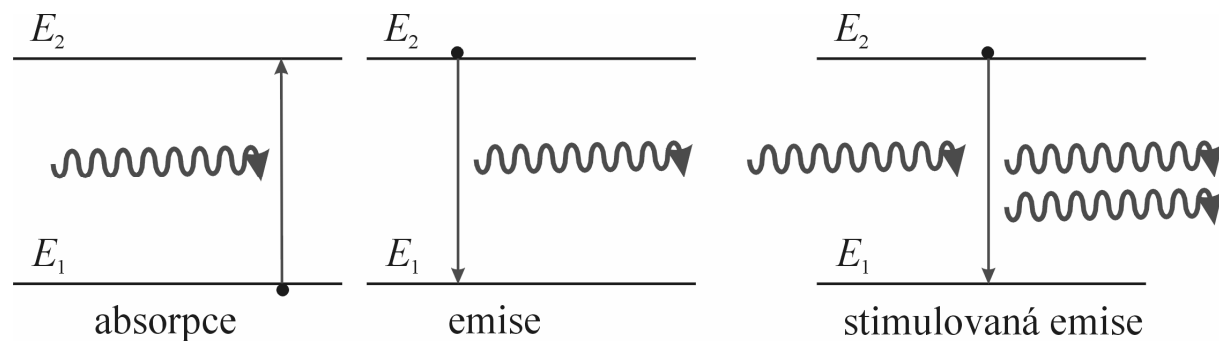
Emise světla vlastním polovodičem



Elektrony se do vodivostního pásu dostanou driftem přes p-n přechod, pak rekombinují s děrami ve vodivostním pásu

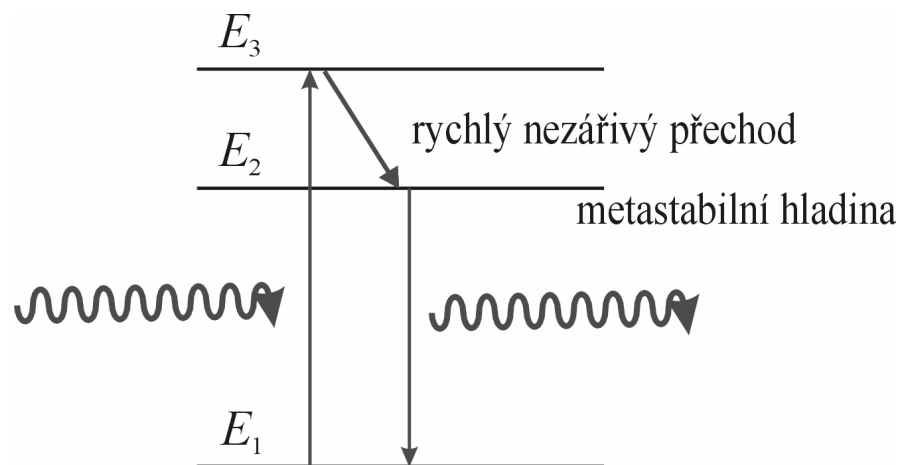
Polovodičové lasery

Spontánní a stimulovaná emise



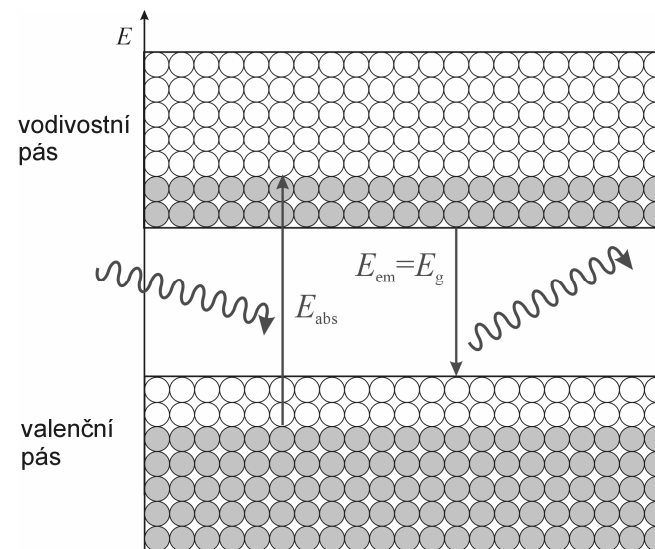
Podmínka existence stimulované emise – počet částic N_2 na vyšší energiové hladině E_2 musí být větší než počet částic N_1 na nižší energiové hladině E_1

Tříhladinový systém:



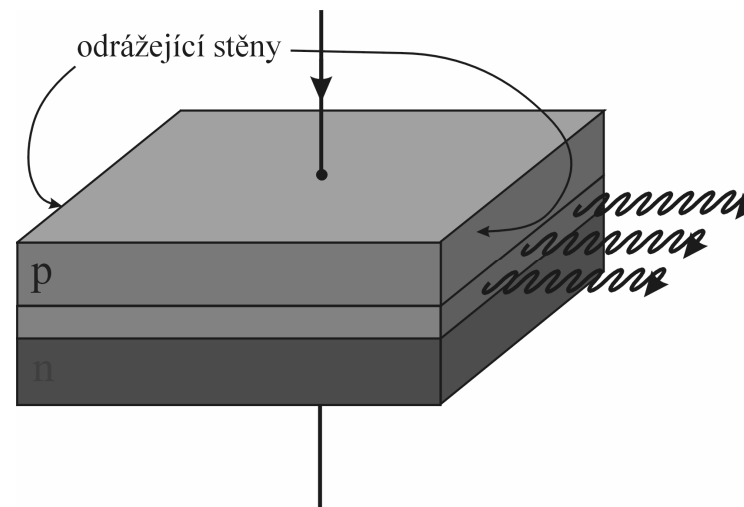
Stimulovaná světelná emise v polovodiči

$$E_{\text{abs}} > E_{\text{em}} = E_g$$



Schematický řez polovodičovým laserem

Odrážející stěny vytvářejí optický rezonátor, v němž vzniká stojatá světelná vlna



III.6. Magnetické vlastnosti tuhých látek

Magnetický moment atomů má orbitální a spinovou složku. Magnetický moment atomu je násobek Bohrova magnetonu

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m} \approx 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$$

Magnetizace – magnetický moment objemové jednotky látky.

V mnoha látkách (diamagnetické a paramagnetické látky) je magnetizace úměrná intenzitě magnetického pole od vnějších zdrojů (vnějšího elektrického proudu)

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \tag{III.23}$$

χ je magnetická susceptibilita, souvisící s permeabilitou vztahem

$$\mu = \mu_0 (1 + \chi) \tag{III.24}$$

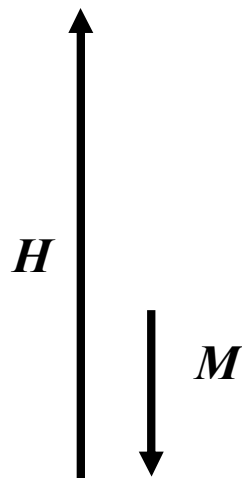
Souvislost s magnetickou indukcí $\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})$ (III.25)

Magnetické susceptibility některých látek

paramagnetická látka	$\chi \times 10^5$	diamagnetická látka	$\chi \times 10^5$
Al	2.3	Bi	-1.66
Ca	1.9	Cu	-0.98
Cr	27	C (diamant)	-2.2
Li	2.1	Au	-3.6
Mg	1.2	Pb	-1.7
Nb	26	Hg	-2.9
O	0.21	N	-0.0005
Pt	29	Ag	-2.6
W	6.8	Si	-0.42

Diamagnetické látky

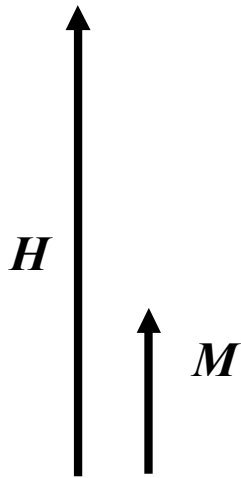
Atomy diamagnetických látek nemají magnetický moment. Ve vnějším magnetickém poli se v nich indukuje magnetický moment orientován opačně k vnějšímu poli. Tento magnetický moment vykonává Larmorovu precesi.



V nehomogenním magnetickém poli jsou diamagnetické látky slabě vypuzovány ven z magnetického pole bez ohledu na jeho orientaci – na diamagnetikum působí síla ve směru záporného gradientu magnetického pole

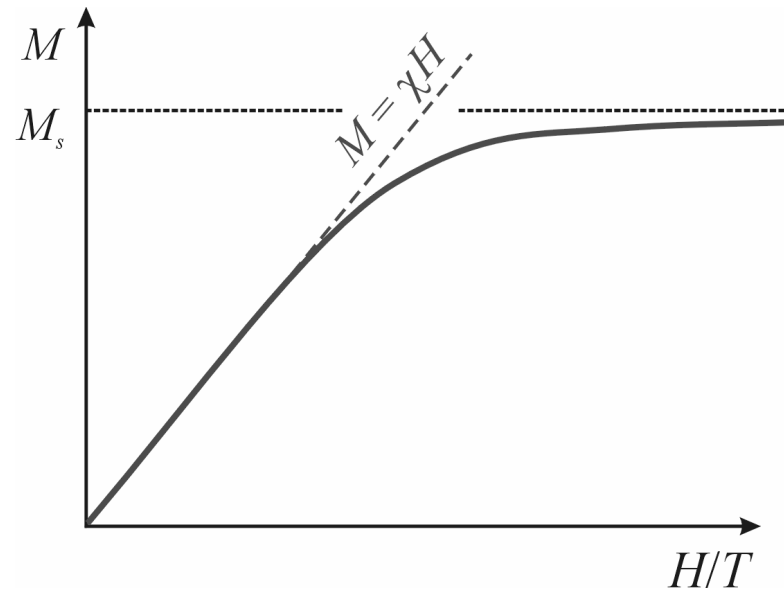
Paramagnetické látky

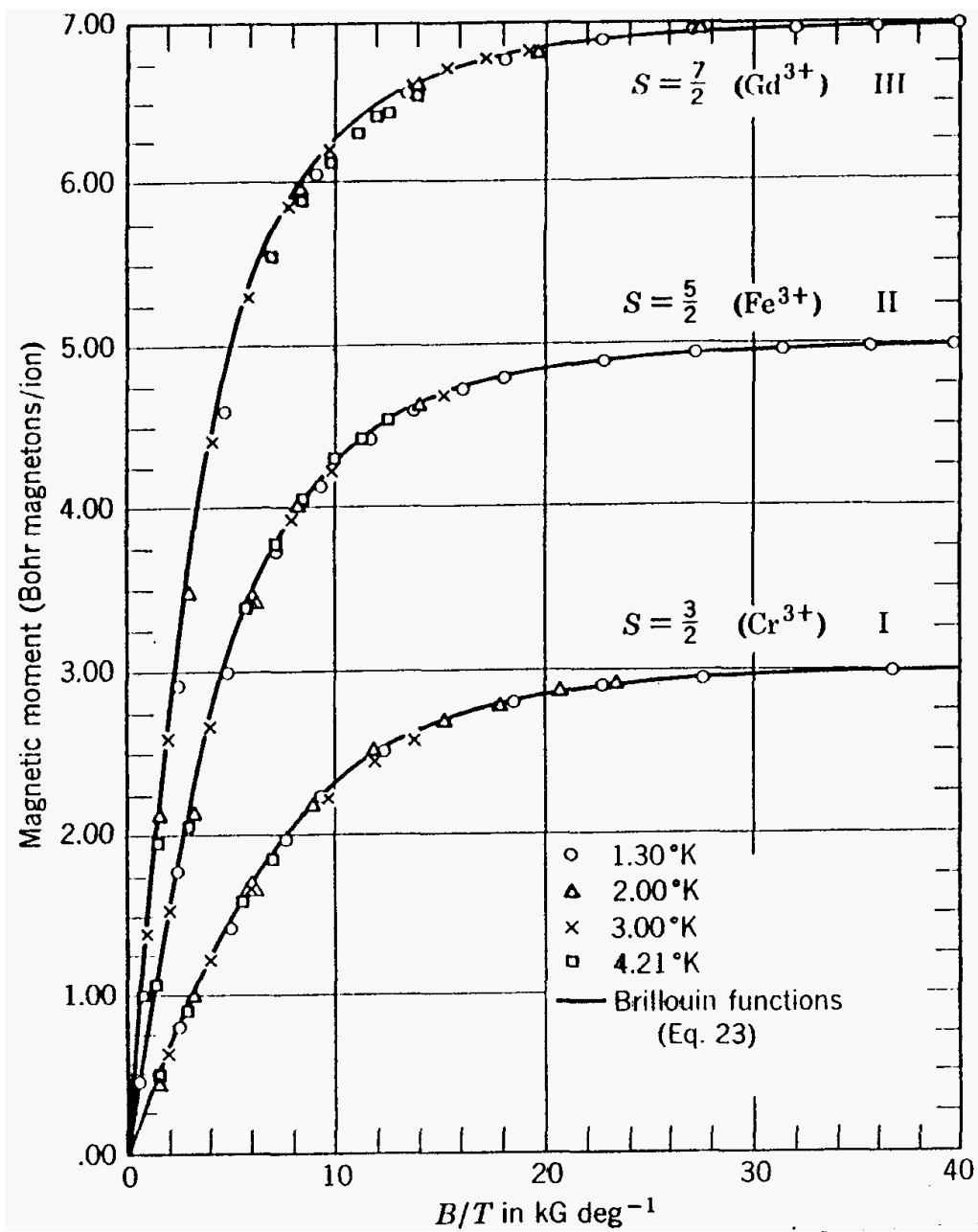
Atomy paramagnetických látek mají permanentní magnetické momenty. Tyto momenty na sebe jen málo působí. Bez vnějšího magnetického pole jsou magnetické momenty náhodně orientovány a výsledná magnetizace je nulová. Působením vnějšího magnetického pole se magnetické momenty atomů orientují a vzniká nenulová magnetizace rovnoběžná s vnějším magnetickým polem



Souhlasná orientace magnetických momentů je narušována tepelným pohybem.

Závislost magnetizace na intenzitě vnějšího pole a na teplotě





Pro slabá pole a/nebo vysoké teploty platí

$$M \approx \chi H$$

a magnetická susceptibilita závisí na teplotě

$$\chi = \frac{C}{T}$$

(III.26)

– Curieho zákon

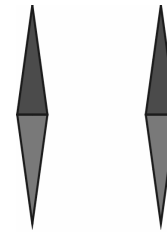
(P. Curie, 1859-1906)

V nehomogenním magnetickém poli jsou paramagnetické látky slabě vtahovány dovnitř pole

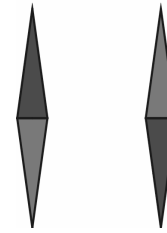
Magneticky uspořádané látky

Atomy těchto látek mají permanentní magnetické momenty. Tyto momenty na sebe silně působí a tím dochází ke spontánnímu uspořádání magnetických momentů

Jak na sebe působí dva magnetické momenty?

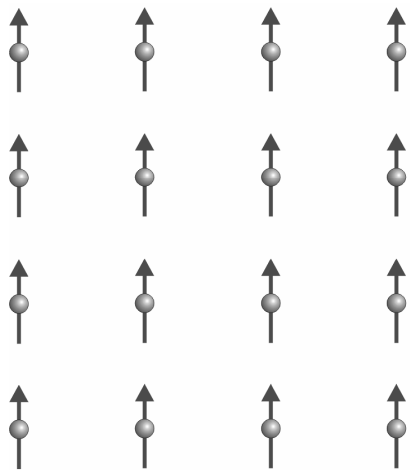


výměnná interakce (překryv orbitalů)

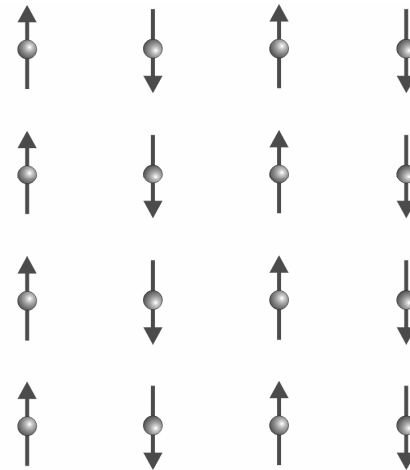


magnetická dipólová interakce

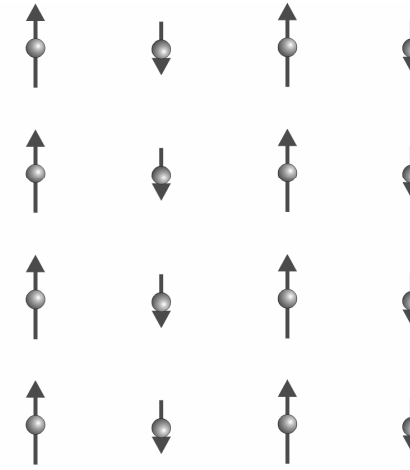
Typy magnetických uspořádání (převažuje výměnná interakce)



feromagnetikum



antiferomagnetikum



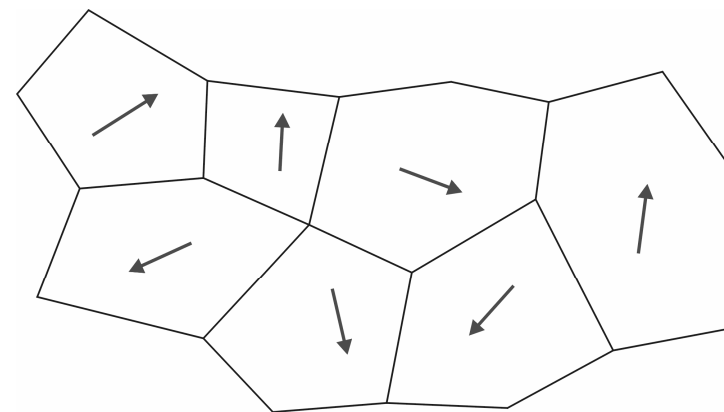
ferimagnetikum

Ve feromagnetiku se výměnná interakce snaží orientovat momenty souhlasným směrem a dipólová interakce opačným směrem.

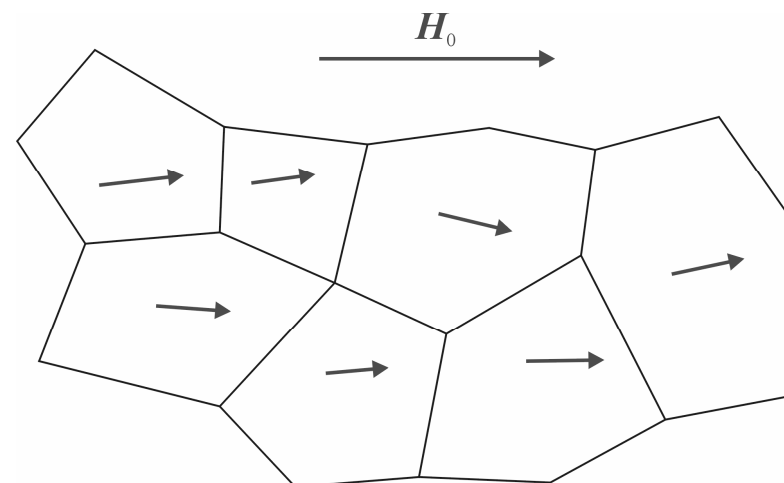
Výměnná interakce je krátkodosahová, energie interakce klesá exponenciálně se vzdáleností, dipólová interakce je dalekodosahová, její energie klesá se 3. mocninou vzdálenosti.

Důsledkem obou interakcí je doménová struktura magneticky uspořádané látky.

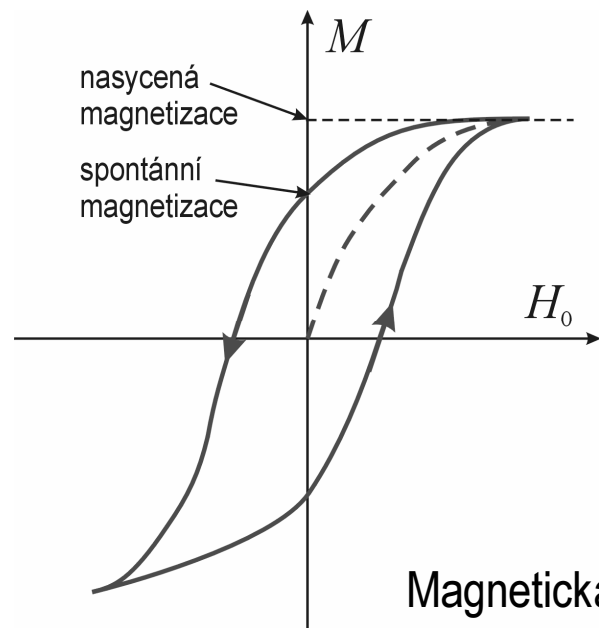
V nulovém vnějším poli může být makroskopická magnetizace nulová



Ve vnějším poli se magnetizace v jednotlivých doménách orientují a výsledná magnetizace je nenulová

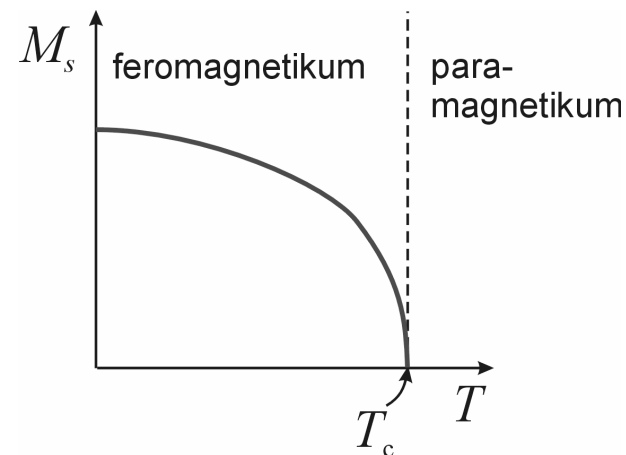


Magnetizační křivka



Magnetická hystereze

Závislost spontánní magnetizace na teplotě



Teplotní závislost susceptibility feromagnetika v paramagnetické fázi

$$\chi = \frac{C}{T - T_c}$$

pro $T > T_c$ – Curieho-Weissův zákon

(III.27)

T_c je Curieho teplota (např. pro Fe je $T_c = 1043$ K)