

FYZIKA PO KAPITOLÁCH

Kvantové javy

Ivan Červeň, Peter Bokes

Slovenská technická univerzita v Bratislave

2023

Druhé, upravené a doplnené vydanie publikácie bolo realizované
s podporou KEGA v rámci projektu 006STU-4/2022
„Digitálna podpora predmetov fyzikálneho inžinierstva“

© Ivan Červeň, Peter Bokes

Recenzenti:

prof. Ing. Július Cirák, CSc.
doc. Ing. Ján Vajda, CSc.

ISBN 978-80-227-5355-5

OBSAH

13.1	Časticové vlastnosti elektromagnetického žiarenia	
	13.1.1 Fotón	6
	13.1.2 Fotoelektrický jav	8
	13.1.3 Žiarenie absolútne čierneho telesa	11
	13.1.4 Planckov zákon žiarenia	14
	13.1.5 Bohrov model atómu	17
	13.1.6 Tlak vyvolaný dopadajúcim svetlom	22
13.2	Vlnové vlastnosti častíc	
	13.2.1 Hypotéza de Broglieho a jej potvrdenie	25
	13.2.2 Vlna de Broglieho	28
	13.2.3 Heisenbergov princíp neurčitosti	30
13.3	Schrödingerova rovnica a niektoré jej aplikácie	
	13.3.1 Vlnová funkcia	32
	13.3.2 Schrödingerova rovnica	34
	13.3.3 Častica v potenciálovej jame	37
	13.3.4 Princíp superpozície	42
	13.3.5 Meranie v kvantovej mechanike	45
	13.3.6 Qubit	46
	13.3.7 Časový vývoj dvojhladinovej sústavy	47
13.4	Ďalšie aplikácie Schrödingerovej rovnice	
	13.4.1 Tunelový jav	50
	13.4.2 Harmonický oscilátor	52
	13.4.3 Atóm vodíka	53
	13.4.4 Sústavy troch a viac častíc	56
DODATKY		
	D1 Dôkaz vzťahu medzi veličinami w a M	58
	D2 Počet oscilátorov v dutine	59
	D3 Stredná hodnota energie oscilátorov	61
SÚHRN VZŤAHOV		64
SLOVNÍK		66
ÚLOHY		68
LITERATÚRA		73

13 Kvantové javy

Ku koncu 19. storočia sa dostali do pozornosti fyzikov javy, ktorých vysvetlenie vyžadovalo akceptovať predpoklad, že príslušné fyzikálne veličiny nemôžu nadobúdať ľubovoľné, ale len určité diskkrétne hodnoty. Išlo napríklad o elektromagnetickú energiu vyžarovanú zohriatymi telesami, alebo o energiu prinášanú svetlom. Ukázalo sa, že v týchto prípadoch energia môže byť vyžarovaná alebo prijímaná len v určitých konečných množstvách, tzv. kvantách. Bol to fenomén, s akým sa dovtedajšia fyzika nestretla. Navyše sa zistilo, že frekvencie žiarenia vysielaného izolovanými atómami majú len určité presné hodnoty. S nespojitou množinou hodnôt veličín sa dovtedy neuvažovalo, i keď bolo známe, že struna či píšťalka vydávajú tóny iba diskrétnych frekvencií. Moderná fyzika však priniesla výsledky, podľa ktorých sa nespojito mení napríklad aj elektrický náboj, či magnetický moment telies. Pozoruhodné je, že takáto vlastnosť – kvantovanie – sa týka nielen telies, ale aj elektromagnetického poľa.

O svetle, ako súčasti elektromagnetického žiarenia, sa viac než storočie viedli spory, či má charakter vlnenia, alebo ide o prúd častíc, ako si to predstavoval Isaac Newton. V prospech vlnového charakteru svetla svedčí jeho interferencia, ohyb a polarizácia, javy známe už z minulosti, ale javy svedčiace v prospech časticových (korpuskulárnych) vlastností svetla sa dostali do pozornosti až ku koncu 19. storočia.

Prvým javom, ktorý bol vysvetlený hypotézou o jeho kvantovom charaktere, bolo žiarenie absolútne čierneho telesa. V roku 1900 Max Planck publikoval prácu, v ktorej vysvetlil závislosť intenzity vyžarovania¹ takéhoto telesa od jeho teploty a od vlnovej dĺžky žiarenia. Vyslovil hypotézu, podľa ktorej zmeny energie ΔE elektromagnetického poľa nemôžu byť ľubovoľne malé, že sa môžu diať iba po konečných množstvách, vyjadrených súčinom frekvencie f elektromagnetickej vlny a konštanty, ktorú označil písmenom h : $E = hf$, ktorá bola neskôr po ňom pomenovaná. Predstavy o spojitých (ľubovoľne malých) zmenách nie iba energie elektromagnetického poľa, ale aj iných fyzikálnych veličín začali strácať na opodstatnení a začalo sa obdobie, v ktorom získavala stále silnejšiu pozíciu tzv. „kvantová fyzika“.

Ako druhý bol v roku 1905 Albertom Einsteinom vysvetlený fotoelektrický jav, predpokladom o kvantách svetelnej energie. Podľa Einsteina sa pri dopade svetla na kov časť energie kvanta využije na uvoľnenie elektrónu z kovu, zvyšok na kinetickú energiu uvoľneného elektrónu.

Planckova hypotéza, aj Einsteinovo vysvetlenie boli závršením dlhotrvajúcej práce, na ktorej sa podieľali mnohí významní vedci, odmenení aj Nobelovými cenami.

¹ Pod intenzitou vyžarovania sa rozumie energia vyžiarená za jednotku času z plochy s jednotkovou veľkosťou.

V roku 1913 Niels Bohr vyslovil predpoklad, že elektrón v atóme vodíka obiehajúci okolo jeho jadra sa môže nachádzať len na určitých hladinách energie. V súlade s Planckovou hypotézou, pri preskoku na nižšiu energiu sa vyžiari rozdiel týchto energií vo forme kvanta, ktorému chápajú ho ako vlnu, zodpovedá presne určená vlnová dĺžka, resp. frekvencia; tým sa konečne podarilo vysvetliť diskretný charakter spektra atómu vodíka, čo metódami klasickej fyziky nebolo možné.

Chápanie elektromagnetického žiarenia ako prúdu fotónov, teda že ide o prúd častíc, znamenalo akceptovať dvojaký charakter elektromagnetického žiarenia – vlnový aj časticový. Táto skutočnosť priviedla francúzskeho fyzika Louis de Broglieho k myšlienke, že naopak, častice by mohli prejavovať aj vlnové vlastnosti. Túto myšlienku vyslovil v roku 1924, a jeho hypotéza *vlnovo-časticovej duality* bola v roku 1927 experimentálne overená, keď Davisson a Germer pozorovali difrakciu zväzku elektrónov na povrchu kryštálu niklu.

Vysvetlenie experimentálnych skutočností predpokladom o nespojitom charaktere možných hodnôt energie, ako aj predpoklad o vlnových vlastnostiach častíc, viedli v 20-tych rokoch 20. storočia k vzniku kvantovej mechaniky. Je to významná teoretická disciplína, pomocou ktorej sa dodnes podarilo vysvetliť celý rad javov týkajúcich sa atomárneho a subatomárneho sveta, vrátane teórií elementárnych častíc. Zásahu na vzniku tejto teórie majú Werner Heisenberg (maticová formulácia teórie, 1925) a Erwin Schrödinger (1926), ktorý sformuloval diferenciálnu rovnicu poskytujúcu matematický základ na vysvetľovanie kvantových javov.

Nasledujúce časti textu sú venované opisu spomenutých javov; budú opísané nielen kvalitatívne, ale opis bude podložený matematicky.

Potrebné vedomosti

Kapitola nadväzuje na predchádzajúce kapitoly súboru *Fyzika po kapitolách*, to znamená, že treba poznať základné pojmy z mechaniky, kmitavého pohybu, vlnenia, ale aj elektriny a magnetizmu. Kapitola nie je matematicky veľmi náročná, ale základy matematickej analýzy sú potrebné.

13.1 Časticové vlastnosti elektromagnetického žiarenia

Kľúčové slová

Fotón, kvantum energie, Planckova konštanta, fotoelektrický jav, výstupná práca, prahová frekvencia, žiarenie čierneho telesa, intenzita vyžarovania, spektrálna intenzita vyžarovania, Stefanov-Boltzmannov zákon, Wienov zákon, Planckov zákon žiarenia

13.1.1 Fotón

Experimentálne výsledky pozorované pri žiarení zohriatych telies, pri fotoelektrickom jave, i pri iných javoch, možno vysvetliť predstavou o minimálnom energetickom kvante prenášanom elektromagnetickým žiarením, pre ktoré sa zaužívalo pomenovanie **fotón**. Fotón má celý rad vlastností typických pre elementárne častice, preto je považovaný za jednu z nich.

Fotónu súvisiacemu s elektromagnetickou vlnou, ktorá má frekvenciu f , sa pripisuje **energia**

$$E = hf \left(= \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar\omega \right), \quad (13.1.1.1)$$

kde $h = 6,625 \times 10^{-34}$ J·s je Planckova konštanta, $\hbar$ Planckova konštanta delená číslom 2π a ω uhlová frekvencia elektromagnetickej vlny. Podľa klasickej teórie je energia elektromagnetických vln v oblasti priestoru s objemom V určená vzťahom

$$E_{\text{em,klas}} = \iiint \left(\frac{1}{2} \varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{2} \frac{B^2}{\mu_0} \right) dV, \quad (13.1.1.1b)$$

kde E je intenzita elektrického poľa a B indukcia magnetického poľa. Pretože tieto dve veličiny sa môžu podľa klasickej teórie spojiť meniť, nadobúda aj energia poľa v danej oblasti V ľubovoľnú spojitú hodnotu. V rámci kvantovej teórie posledné tvrdenie neplatí, energia vlny je daná celočíselným násobkom počtu kvánt fotónov,

$$E_{\text{em,kvant}} = \sum_f n_f hf, \quad (13.1.1.1c)$$

Kde n_f je počet prítomných fotónov danej frekvencie a pri výpočte energie spočítavame cez všetky prípustné frekvencie.

Podľa špeciálnej teórie relativity, platí pre voľnú časticu vzťah

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}, \quad (13.1.1.2a)$$

kde m_0 je **pokojuv hmotnosť** častice a p jej hybnosť. **Fotón** sa nemôže zastaviť, vždy sa pohybuje rýchlosťou svetla. Na druhej strane, v rámci špeciálnej teórie relativity sa

ukazuje, že častice s nenulovou pokojovou hmotnosťou rýchlosť svetla nemôžu dosiahnuť. Preto musí mať fotón nulovú pokojovú hmotnosť. Porovnaním rovníc (13.1.1.1) a (13.1.1.2a) dostaneme pre hybnosť fotónu vzťah:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}, \quad (13.1.1.4)$$

kde λ je vlnová dĺžka príslušnej svetelnej vlny, pre ktorú platí $c = f \cdot \lambda$.

Pozorovania ukazujú (napr. zákonitosti optických spektier), že fotónu treba pripísať aj **moment hybnosti**, ktorého veľkosť L_f sa rovná

$$L_f = \frac{h}{2\pi} = \hbar. \quad (13.1.1.6)$$

Vo všetkých uvedených veličinách vystupuje Planckova konštanta, ktorá má veľmi malú hodnotu. Preto zmena energie sústavy (a ďalších veličín) pri vyžiarení alebo pohltení jedného fotónu je z makroskopického hľadiska nepatrná, priam nepozorovateľná. To je dôvod, prečo sa zmeny energie bežne javia ako spojité a nie ako diskrétné.

Príklad 13.1.1.1 Aká je energia fotónu zodpovedajúcemu červenej farbe a fotónu zodpovedajúcemu fialovej farbe viditeľného spektra? Vlnová dĺžka svetla červenej farby je 750 nm, fialovej 400 nm, Planckova konštanta má hodnotu $6,625 \times 10^{-34}$ Js. Energie vyjadrite v jouloch a v elektrónvoltoch.

Riešenie: Fotón zodpovedajúci červenej farbe prenáša energiu:

$$\begin{aligned} E_f &= hf = hc/\lambda = 6,625 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} / (750 \times 10^{-9} \text{ m}) = \\ &= 2,65 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,654 \text{ eV}. \end{aligned}$$

Fotón zodpovedajúci fialovej farbe má energiu $E_f = 3,1 \text{ eV}$.

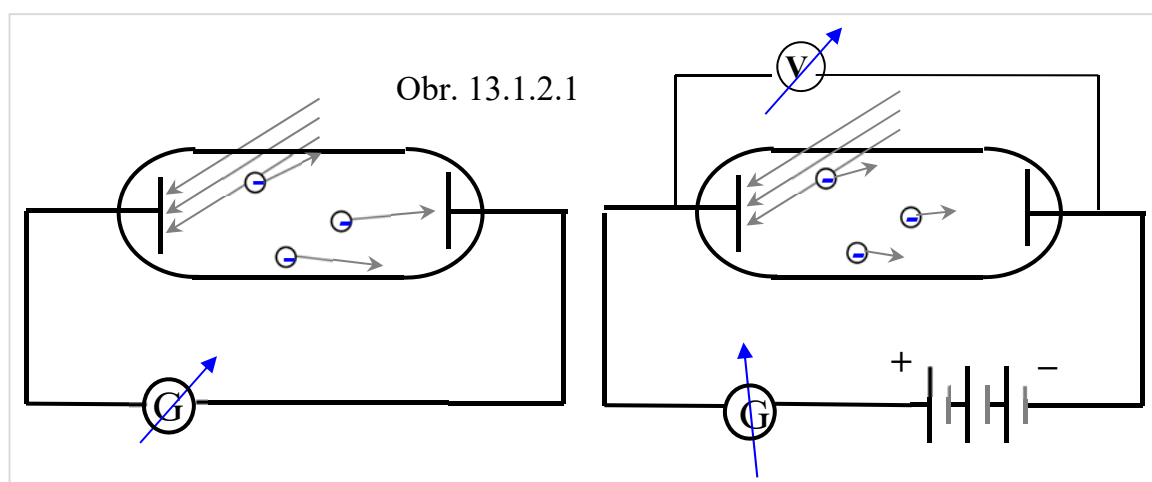
Kontrolné otázky

1. Akým vzťahom sa vyjadruje energia fotónu?
2. Akým vzťahom sa vyjadruje hybnosť fotónu?
3. Aký vzťah vyjadruje súvis energie a hybnosti fotónu?
4. Akú veľkú energiu, vyjadrenú v elektrónvoltoch, majú fotóny viditeľného svetla?
5. Má fotón moment hybnosti?

13.1.2 Fotoelektrický jav

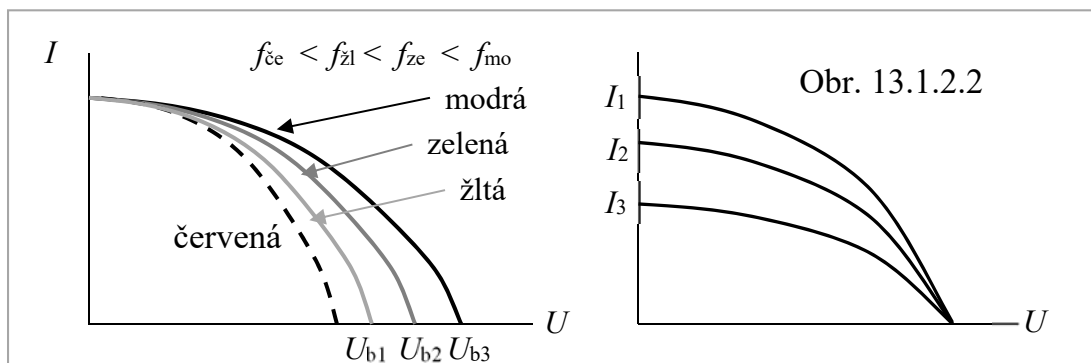
Ide o uvoľňovanie elektrónov z povrchu kovu, keď na kov dopadá svetlo, alebo ultrafialové žiarenie. Týmto javom sa zaoberali viacerí vedci už koncom 19. storočia, dokonca ešte pred objavením elektrónu (Hertz, Halwachs, Stoletov, i bratislavský rodák P. Lenard, ktorý za tieto práce dostal Nobelovu cenu). Keďže elektróny pri tomto jave kov opúšťajú, používa sa aj názov **vonkajší fotoelektrický jav**.

Experimentálne usporiadanie je na obrázku 13.1.2.1. V sklenej banke, z ktorej je vyčerpaný vzduch, sú umiestnené dve kovové elektródy. Keď na jednu z nich, ktorú nazveme katóda začne dopadať svetlo (ľavá časť obrázku), začnú sa z nej uvoľňovať elektróny (**fotoelektróny**) a galvanometer zaregistruje, že elektrickým obvodom prechádza elektrický prúd (**fotoprúd**).



Fotoprúd možno zmenšiť, alebo zastaviť vložení elektrického napätia medzi elektródy, pričom na katódu, z ktorej sa elektróny uvoľňujú, treba priložiť kladný pól a na druhú elektródu záporný pól vonkajšieho zdroja elektrického napätia. Meraním veľkosti fotoprúdu v závislosti od veľkosti priloženého napätia dostaneme krivku, ktorá pri istom napätí (**brzdné napätie**) dosahuje nulovú hodnotu (Obr. 13.1.2.2). Mnohonásobným meraním, pri osvetľovaní kovu svetlom rôznych vlnových dĺžok a rôznej intenzity, bolo zistených niekoľko skutočností, ktoré sú pre fotoelektrický jav typické:

- fotoprúd vzniká okamžite po osvetlení kovu,
- brzdné napätie závisí od frekvencie (vlnovej dĺžky) použitého svetla; čím vyššia je frekvencia, tým je brzdné napätie väčšie (ľavá časť Obr. 13.1.2.2),
- aby bol fotoprúd pozorovateľný, frekvencia svetla musí dosiahnuť istú minimálnu hodnotu,
- od intenzity osvetlenia kovu závisí veľkosť fotoprúdu, ale nie brzdné napätie (pravá časť Obr. 13.1.2.2),
- brzdné napätie pri danej frekvencii svetla závisí od konkrétneho kovu.



Získané závislosti nebolo možné vysvetliť na základe klasických predstáv o svetle ako o elektromagnetickom vlnení. Merateľný fotoprúd vzniká už pri príkone približne 10^{-6} W/m^2 . Pri typickej vzdialenosti medzi atómami kovu $3 \times 10^{-10} \text{ m}$, na štvorcový meter povrchu pripadá rádovo 10^{19} atómov. To znamená príkon svetelnej energie rádovo 10^{-25} W na atóm, alebo vo vhodnejších jednotkách 10^{-6} eV/s na každý atóm. Na uvoľnenie elektrónu z atómu treba dodať energiu približne 1 eV ($\approx 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$). To znamená, že na nahromadenie postačujúcej energie by bolo potrebných až 10^6 sekúnd, čo je približne 100 dní. Ale fotoprúd sa pozoruje ihneď po osvetlení. To znamená, že svetelná energia sa nerozdeľuje na atómy rovnomerne, vo veľmi malých množstvách, ale absorbuje sa len niektorými atómami a to v množstvách (kvantách), ktoré postačujú na uvoľnenie elektrónu z atómu. V príklade 13.1.1.1 je vypočítaná energia fotónov viditeľnej časti spektra elektromagnetického žiarenia. Z výsledku vidno, že ak atóm absorbuje čo len jeden fotón, získa tým energiu postačujúcu na uvoľnenie elektrónu. Táto skutočnosť jednoznačne podporuje Planckovu hypotézu o minimálnych kvantách energie, ktoré elektromagnetické pole môže prijímať alebo odovzdávať.

Vysvetlenie fotoelektrického javu pochádza z roku 1905 od Alberta Einsteina (dostal zaň Nobelovu cenu). Z dopadajúcej svetelnej vlny kov absorbuje energiu po kvantách (jednotlivých fotónoch), pričom sa predpokladá, že fotón pri dopade na atóm zanikne. Energia fotónu hf sa spotrebuje čiastočne na vytrhnutie elektrónu z atómu, molekuly či tuhej látky, na tzv. výstupnú prácu W , pričom zvyšok sa premení na kinetickú energiu uvoľneného elektrónu. Túto energetickú bilanciu vyjadruje Einsteinova rovnica:

$$hf = W + \frac{1}{2}mv^2, \quad (13.1.2.1)$$

kde m je hmotnosť a v rýchlosť uvoľneného elektrónu. Rovnica vysvetľuje všetky pozorované skutočnosti uvedené vyššie pod bodmi a) až e). Čím vyššia je frekvencia dopadajúceho žiarenia, tým väčšia časť energie fotónu sa premení na kinetickú energiu

uvoľneného elektrónu, lebo výstupná práca závisí iba od druhu osvetľovaného kovu. Čím väčšia je kinetická energia uvoľneného elektrónu, tým silnejšie musí byť elektrické pole, ktorým ho treba brzdiť, aby nedoletel až na druhú elektródu. To znamená, že treba zväčšiť brzdné napätie (bod b). Keď frekvencia žiarenia je natoľko malá, že energia fotónov nepostačuje ani na odtrhnutie elektrónu od atómu, t. j. na prekonanie výstupnej práce, fotoelektrický jav nenastane (bod c). Zvýšenie intenzity osvetlenia predstavuje zväčšenie počtu fotónov dopadajúcich na kov za sekundu, čím sa zvýši počet fotoelektrónov a tým aj fotoprúd. Energia jednotlivých fotónov sa zvýšením osvetlenia nezmení, preto sa nezmení ani brzdné napätie (bod d). Závislosť brzdného napätia od druhu kovu je dôsledkom veľkosti výstupnej práce, závisiacej od pevnosti väzby elektrónov v konkrétnom kove (bod e).

Einstein pri vysvetlení fotoelektrického javu využil Planckovu hypotézu a významne ju tým podporil. Nebola totiž medzi fyzikmi prijímaná jednoznačne, dokonca aj Max Planck ju spočiatku považoval iba za úspešný matematický obrat, ale nie za fyzikálnu realitu.

Príklad 13.1.2.1 Akým brzdným napätím dokážeme zastaviť fotoelektróny uvoľnené zo sodíka (výstupná práca $W = 1,5 \text{ eV}$), keď tento alkalický kov osvetľujeme modrým svetlom (vlnová dĺžka $\lambda = 400 \text{ nm}$).

Riešenie: Brzdné napätie U_b vynásobené nábojom elektrónu e predstavuje potenciálnu energiu, ktorú dokáže prekonať (vyrovnať) elektrón získanou kinetickou energiou pri fotoelektrickom jave. Získaná kinetická energia sa rovná rozdielu energie fotónu $hf = hc/\lambda$ a výstupnej práce W : $U_b = (hf - W)/e = 0,998 \text{ V}$.

Kontrolné otázky

- a) Čo je to fotoelektrický jav?
- b) Čo rozumieme pod fotoelektrónmi a fotoprúdom?
- c) Čo rozumieme pod brzdým napätím?
- d) Ako závisí brzdné napätie od vlnovej dĺžky svetla?
- e) Čo rozumieme pod výstupnou prácou?
- f) Závisí brzdné napätie od intenzity osvetlenia?
- g) Viete napísať Einsteinovu rovnicu opisujúcu fotoelektrický jav?
- h) Prečo sa fotoelektrický jav musí vysvetľovať kvantovou hypotézou a nie klasicky?

13.1.3 Žiarenie absolútne čierneho telesa

Je to historicky prvý jav vysvetlený na základe kvantovej hypotézy. Zohriate telesá vyžarujú elektromagnetické žiarenie, ktoré bolo predmetom záujmu vedcov koncom XIX. storočia. Zistili, že spektrum tohto žiarenia závisí predovšetkým od teploty telesa, ale aj od jeho zloženia, úpravy povrchu a pod. Vyžarované spektrum je ovplyvnené schopnosťou telesa absorbovať konkrétne vlnové dĺžky žiarenia. Túto vlastnosť sformuloval Kirchhoff už v 19. storočí a zistil, že v tepelnej rovnováhe (keď sa teplota telesa už nemení) čím viac energie pri istej vlnovej dĺžke teleso pohlcuje, tým viac na tejto vlnovej dĺžke aj vyžaruje. Aby sa výsledky experimentov rôznych laboratórií dali objektivizovať a navzájom porovnávať, bolo potrebné zvoliť štandardné teleso, nazvané **absolútne čierne teleso**. Má výnimočnú vlastnosť dokonale absorbovať všetky vlnové dĺžky elektromagnetického žiarenia, čo znamená, že má aj maximálne možnú schopnosť ich vyžarovať. Reálne telesá sú viac-menej **sivé**, čo znamená, že nedokážu absorbovať všetku dopadajúcu elektromagnetickú energiu. Model absolútne čierneho telesa sa v metrologických laboratóriách konštruje v tvare dutiny s malým otvorom, cez ktorý keď vnikne elektromagnetická vlna, už sa fakticky nedostane von. Preto otvor takéhoto telesa predstavuje absolútne čierne teleso. Zohrievaním telesa s dutinou a meraním parametrov žiarenia vychádzajúceho cez otvor, možno získať informácie o spektre žiarenia (absolútne čierneho telesa) zodpovedajúceho príslušnej teplote.

Na kvantitatívny opis takéhoto žiarenia treba zaviesť niektoré nové veličiny. Treba predovšetkým zaviesť veličinu vyjadrujúcu koľko žiarivej energie ΔE vychádza z plošky s jednotkovým obsahom za jednotku času. Je to **intenzita vyžarovania** (M), ktorá je definovaná vzťahom

$$M = \frac{\Delta E}{\Delta S \Delta t}, \quad (13.1.3.1)$$

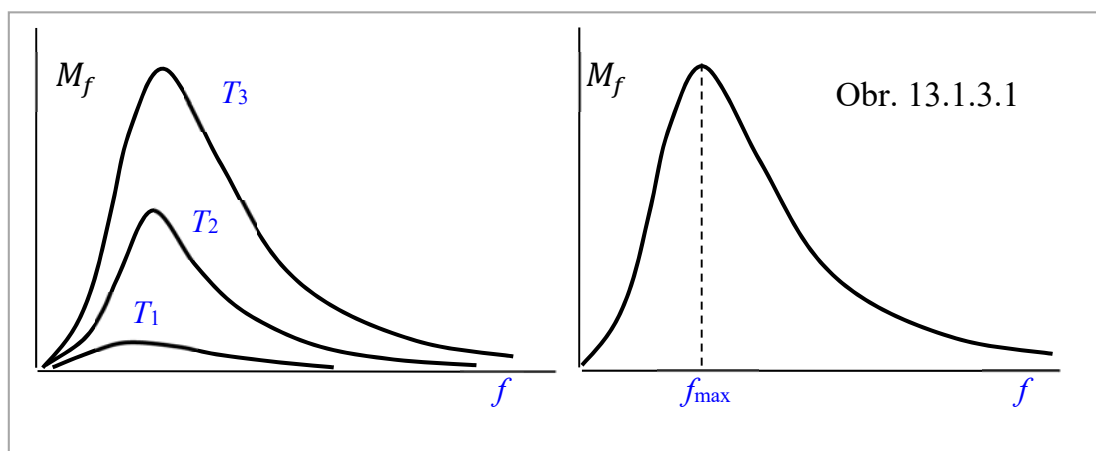
a meria sa v jednotkách $J/(m^2s) = (J/s)/m^2 = W/m^2$. Touto veličinou sa vyjadruje úhrnná vyžarovaná energia na všetkých vlnových dĺžkach (frekvenciách). Na opis vyžarovaného spektra treba zaviesť ďalšiu veličinu, ktorá je definovaná podielom

$$M_f = \lim_{\Delta f \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta f} = \frac{dM}{df}, \quad (13.1.3.2)$$

a nazveme ju **spektrálna intenzita vyžarovania**. Jednotkou tejto významnej veličiny je Ws/m^2 . Na základe vzťahu (13.1.3.2) môžeme medzi veličinami M a M_f napísať aj opačný vzťah

$$M = \int_0^\infty M_f df. \quad (13.1.3.3)$$

Mnohé experimenty vykonané ešte v 19. storočí viedli k získaniu závislostí veličiny M_f jednak od frekvencie (vlnovej dĺžky), jednak od teploty. Schematicky sú tieto krivky znázornené pre tri teploty $T_1 < T_2 < T_3$, na ľavej časti nasledujúceho obrázku.



Okrem nameraných kriviek boli ku koncu 19. storočia známe aj ich dve významné vlastnosti. W. Wien objavil v roku 1893 vzťah medzi termodynamickou teplotou T absolútne čierneho telesa a vlnovou dĺžkou zodpovedajúcou maximu kriviek vyžarovania. Často sa namerané závislosti vynášajú ako funkcie vlnovej dĺžky, pričom sa spektrálna intenzita vyžarovania prepočítava na jednotkový interval vlnovej dĺžky a nie frekvencie. Vtedy možno priamo napísať vzťah

$$T \cdot \lambda_{max} = b, \quad (13.1.3.4)$$

čo je **Wienov zákon** a $b = 2,898 \times 10^{-3} \text{ K} \cdot \text{m}$ je **Wienova konštanta**.

Jednoduchým výpočtom získame z Wienovho zákona informáciu o vlnovej dĺžke zodpovedajúcej maximu vyžarovania pri rôznych teplotách. Pri teplote 5000 K (približne teplota povrchu Slnka) absolútne čierne teleso najviac energie vyžaruje v okolí vlnovej dĺžky 577 nm, čo zodpovedá žltozelenej farbe. Na tieto vlnové dĺžky je ľudské oko najcitlivejšie. Pri teplote nad 7000 K maximum leží v ultrafialovej oblasti. Pri teplote 3000 K, ktorú dosahuje wolfrámové vlákno žiarovky, maximum leží pri 960 nm, čo je v infračervenej oblasti. Žiarovka s wolfrámovým vláknom viac zohrieva než svieti, lebo do viditeľnej oblasti vyžaruje menej než 10 % z dodávanej elektrickej energie. Dnes sú známe údaje aj o reliktovej žiare (pozostatku po začiatkovej fáze Vesmíru,) ktoré má vlnovú dĺžku približne 1 mm, čo patrí do oblasti mikrovln (žiarenie objavili Penzias a Wilson v roku 1965, Nobelova cena). Tomu zodpovedá teplota 2,7 K, teda teplota blízko absolútnej nuly.

Viedenský vedec J. Stefan v roku 1879 empiricky zistil ďalšiu zákonitosť, ktorú L. Boltzmann neskôr teoreticky zdôvodnil. Zistili, že veľkosti plôch pod krivkami spektrálnej intenzity vyžarovania sú úmerné štvrtéj mocnine termodynamickej teploty. Táto závislosť je známa ako **Stefanov – Boltzmannov zákon** a vyjadruje sa vzťahom

$$M = \int_0^\infty M_f df = \sigma T^4. \quad (13.1.3.5)$$

Vo vzťahu vystupujúca **Stefanova – Boltzmannova konštanta**, má experimentálne určenú hodnotu $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}^4)$. Pomocou tohto zákona možno napríklad vypočítať, že Slnko z jedného štvorcového centimetra vyžaruje 7 kW, wolfrámové vlákno pri 2450 K iba 50 W.

Príklad 13.1.3.1 Pri ktorej vlnovej dĺžke by maximálne vyžarovalo absolútne čierne teleso, keby malo teplotu ľudského tela?

Riešenie: Teplotu ľudského tela 37 °C treba najprv vyjadriť v termodynamickej teplotnej stupnici, t. j. $T = 310 \text{ K}$. Dosadením do Wienovho zákona pre vlnovú dĺžku maxima dostaneme $\lambda_{max} = b/T = 2,898 \times 10^{-3} / 310 = 9,35 \times 10^{-6} \text{ m}$. To je hlboko v infračervenej oblasti.

Príklad 13.1.3.2 Koľko energie by vyžiarilo ľudské telo za hodinu, keby sme ho mohli považovať za absolútne čierne teleso? Povrch tela má asi 2 m².

Riešenie: Podľa Stefanovho-Boltzmannovho zákona energia vyžiarená za jednu sekundu z jedného štvorcového metra, t. j. vyžarovaný výkon je $M = \sigma T^4 = 5,67 \times 10^{-8} \times (310)^4 = 524 \text{ W}$. Za jednu hodinu z plochy 2 m² sa vyžiari energia $E = 524 \times 2 \times 3600 = 3,8 \text{ MJ} = 1,05 \text{ kWh}$.

Poznámka: Telo prijíma energiu aj z okolia, je chránené odevom, a nie je absolútne čiernym telesom, takže skutočná strata energie je oveľa menšia.

Kontrolné otázky

1. Čo rozumieme pod absolútne čiernym telesom?
2. Ako sa laboratórne realizuje absolútne čierne teleso?
3. Definujte veličinu intenzita vyžarovania.
4. Definujte spektrálnu intenzitu vyžarovania.
5. Napíšte Wienov zákon.
6. Napíšte a slovne vyjadrite Stefanov-Boltzmannov zákon.
7. V ktorej oblasti vlnových dĺžok vyžaruje Slnko najviac?
8. V ktorej oblasti je ťažisko vyžarovania wolfrámového vlákna žiarovky?

13.1.4 Planckov zákon žiarenia

Laboratórny model čierneho telesa – dutina s malým otvorom – bol použitý aj pri overovaní teoretických návrhov vysvetliť závislosť kriviek spektrálnej intenzity vyžarovania od teploty. Z dutiny môže vychádzať iba to čo v nej je, preto jestvuje úzka súvislosť medzi energiou pripadajúcou na jednotku objemu w v dutine a intenzitou vyžarovania M cez otvor. Dá sa dokázať (pozri dodatok D1), že medzi nimi platí vzťah (c je rýchlosť svetla):

$$M = \frac{c}{4} w . \quad (13.1.4.1)$$

Výpočty sa potom týkali energie nahromadenej v dutine pri teplote T . Výpočty – klasické i Planckov – sa opierali o myšlienku, že v dutine absolútne čierneho telesa sa nachádzajú stojaté elektromagnetické vlny, ktoré na jej elektricky vodivých stenách musia mať uzly. Preto v dutine môžu existovať iba niektoré frekvencie a ich celočíselné násobky. Stojatá vlna neprenáša energiu, môže sa chápať ako harmonický oscilátor (podobne ako kmitajúca struna), ktorý má svoju energiu a frekvenciu. Išlo v podstate o určenie počtu takýchto hypotetických oscilátorov v dutine, ale hlavne o ich strednú energiu. Pre počet oscilátorov kmitajúcich s frekvenciami z intervalu f až $f + df$ a ktoré sa nachádzajú v dutine s objemom V , bol ešte v rámci klasickej fyziky odvodený vzťah (pozri dodatok D2)

$$dN = \frac{8\pi f^2}{c^3} V df , \quad (13.1.4.2)$$

v ktorom c je rýchlosť svetla. Na jednotku objemu v dutine tak pripadá počet oscilátorov

$$dn = \frac{dN}{V} = \frac{8\pi f^2}{c^3} df . \quad (13.1.4.3)$$

Tento vzťah použil aj Planck. Rozdiel medzi Planckovým a klasickým prístupom vznikol pri výpočte strednej energie $\langle E \rangle$ oscilátorov, ktoré sa pri termodynamickej teplote T nachádzajú v tepelnej rovnováhe s okolím. Podľa klasickej teórie platí vzťah

$$\langle E \rangle = kT , \quad (13.1.4.4)$$

kde k je Boltzmannova konštanta. Vzťahy (13.1.4.3) a (13.1.4.4) použijeme na výpočet energie v jednotke objemu dutiny, pripadajúcej na interval frekvencií f až $f + df$:

$$w_f df = \langle E \rangle dn = kT \frac{8\pi f^2}{c^3} df , \quad (13.1.4.5)$$

kde w_f je energia pripadajúca na jednotkový interval frekvencie, t. j. spektrálna objemová hustota energie. Pre spektrálnu intenzitu vyžarovania pomocou vzťahu (13.1.4.1) získame výsledok

$$M_f = kT \frac{2\pi f^2}{c^2}. \quad (13.1.4.6)$$

Integráciou cez všetky frekvencie by sme mali dostať celkovú intenzitu vyžarovania. Integrál však diverguje, čo by znamenalo, že čierne teleso by malo vyžarovať nekonečne veľa energie. Tento neúspešný postup pochádza od **Rayleigha a Jeansa**. Závislosť ktorú získali, sa zhoduje s experimentálnymi krivkami spektrálnej intenzity vyžarovania iba pri nízkych frekvenciách, zodpovedajúcich infračervenému žiareniu. Ich funkcia M_f rastie s druhou mocninou frekvencie, a pri frekvenciách ultrafialového žiarenia sa prejavuje už značný nesúlad s experimentálnymi krivkami. Z tohto dôvodu sa v súvislosti s Rayleighovým a Jeansovým pokusom vysvetliť experimentálne krivky hovorí o **ultrafialovej katastrofe**.

Max Planck predpokladal, že oscilátory s frekvenciou f môžu mať iba diskkrétne energie $E_0 = 0, E_1 = hf, E_2 = 2hf, E_3 = 3hf, \dots$ kde h je Planckova konštanta. Z množstva oscilátorov v dutine, kmitajúcich touto frekvenciou, sa najviac nachádza v stave s najnižšou energiou E_0 , pričom oscilátorov s násobkami tejto energie s rastúcou energiou ubúda. Relatívne zastúpenie oscilátorov s rôznymi energiami Planck vyjadril pomocou vzťahu pochádzajúceho od L. Boltzmann, podľa ktorého pokles počtu oscilátorov s rastúcou energiou má exponenciálny charakter:

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{\exp(-E_1/kT)}{\exp(-E_2/kT)}. \quad (13.1.4.7)$$

Pre strednú energiu oscilátorov kmitajúcich s frekvenciou f takouto cestou získal vzťah (pozri dodatok D3)

$$\langle E \rangle = \frac{hf}{\exp(hf/kT) - 1}. \quad (13.1.4.8)$$

Keď týmto výsledkom nahradíme vo vzťahu (13.1.4.6) klasickú strednú hodnotu energie oscilátora kT , tak pre spektrálnu intenzitu vyžarovania dostaneme výsledok:

$$M_f = \frac{hf}{\exp(hf/kT) - 1} \frac{2\pi f^2}{c^2} = \frac{2\pi}{c^2} \frac{hf^3}{\exp(hf/kT) - 1}, \quad (13.1.4.9)$$

čo je **Planckov zákon žiarenia**.

Závislosť spektrálnej intenzity vyžarovania od frekvencie a teploty, vyjadrená vzťahom (13.1.4.9), je v dokonalej zhode s experimentálne získanými krivkami. To bola prvá významná skutočnosť podporujúca oprávnenosť Planckovej hypotézy.

Extrém tejto funkcie zodpovedá maximum vyžarovania, čo znamená že ho možno nájsť pomocou prvej derivácie podľa frekvencie. Tak možno získať Wienov zákon o posune maxima vyžarovania. Integráciou vzťahu (13.1.4.9) cez všetky možné frekvencie, t. j. od nuly až po nekonečno, dostaneme celkovú intenzitu vyžarovania, pre ktorú z výpočtu vyplýva, že je úmerná štvrtéj mocnine termodynamickej teploty T^4 . Preto aj Stefanov – Boltzmannov zákon možno odvodiť z Planckovho zákona žiarenia. To znamená, že Planckova hypotéza o existencii minimálnych energetických kvánt pri vyžarovaní a absorpcii elektromagnetickej energie bola plne oprávnená.

Na záver je dôležité uviesť, že limita strednej energie (13.1.4.8) pre $h \rightarrow 0$ sa rovná klasickej hodnote strednej energie oscilátora kT , t. j.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{hf}{\exp(hf/kT) - 1} = kT, \quad (13.1.4.10)$$

o čom sa možno presvedčiť použitím L'Hospitalovho pravidla. To znamená, že klasický vzťah vyjadrujúci strednú energiu oscilátora je limitným prípadom kvantového vzťahu. Poukazuje to aj na súvis medzi kvantovou a klasickou fyzikou.

Kontrolné otázky

1. Z akých predpokladov vychádza výpočet objemovej hustoty elektromagnetickej energie v dutine?
2. K akému výsledku viedol Rayleighov a Jeansov výpočet intenzity vyžarovania?
3. Akú hypotézu využil Planck pri výpočte spektrálnej intenzity vyžarovania?
4. Aký je vzťah medzi strednou energiou oscilátora vypočítanou klasicky a podľa Planckovej hypotézy?

13.1.5 Bohrov model atómu vodíka

Bohrov model poskytol vysvetlenie čiarového charakteru spektier izolovaných atómov. Aj v tomto prípade poslúžila Planckova kvantová hypotéza.

Experimentálne skutočnosti, ktoré viedli k vzniku kvantovej mechaniky, mali v podstate svoj pôvod v skúmaní optických spektier. Tie sa začali dôkladne študovať v prvej polovici 19. storočia, lebo vtedy sa už prišlo na to, ako priradiť jednotlivým farbám viditeľného spektra príslušné vlnové dĺžky, resp. frekvencie. Takto boli opísané spektrá žiarenia Slnka, rozžeravených telies, pričom spektrá žiarenia vysielaného atómami sa skúmali pri elektrických výbojoch v zriedených plynch. Tam sa atómy nachádzajú prakticky v izolovanom stave, a pri výboji sa vzájomnými zrážkami dostávajú do vzбудeného (excitovaného) stavu. Pri prechode do stavu s nižšou energiou vyžarujú svoje charakteristické elektromagnetické žiarenie s príslušnými frekvenciami, resp. vlnovými dĺžkami.

Optické spektrá izolovaných atómov sa vyznačujú tým, že na rozdiel od spektra slnečného svetla sa v nich vyskytuje svetlo len s niekoľkými presne vymedzenými vlnovými dĺžkami. Slnečné spektrum je spojité, obsahuje zložky s ľubovoľnou vlnovou dĺžkou, ale o spektrách atómov sa hovorí, že sú čiarové, pričom každej objavenej sa spektrálnej čiary² je priradená určitá konkrétna vlnová dĺžka (frekvencia). Napríklad spektrum atómu vodíka, ktoré zohralo významnú úlohu pri vzniku kvantovej mechaniky, obsahuje vo viditeľnej časti 4 spektrálne čiary, ktorých vlnové dĺžky (v nanometroch) sú uvedené v nasledujúcej tabuľke.

Farba	červená	zelená	modrá	fialová
Vlnová dĺžka (nm)	656	486	434	410

Uvedené štyri spektrálne čiary patria do tzv. Balmerovej série (objavená 1885), patrí však do nej aj niekoľko čiar z ultrafialovej oblasti. Neskôr boli pozorované aj ďalšie spektrálne série vodíka, v ultrafialovej oblasti Lymanova (1906 – 1914) a v infračervenej oblasti Paschenova (1908), Bracketova (1922) aj Pfundova (1924). Na výpočet vlnových dĺžok λ spektrálnych čiar Balmerovej série našiel R. Rydberg v roku 1888 formulu, pomocou ktorej sa dajú veľmi presne určiť. Formula má tvar:

2 Termín *spektrálna čiara* pochádza z optickej spektroskopie, pri ktorej sa na matnicu spektroskopu premieta obraz úzkej štrbiny, cez ktorú do spektroskopu vstupuje skúmané svetlo. V spektroskope sa svetlo rozkladá hranolom na zložky podľa ich vlnovej dĺžky, takže zložky s rozličnými vlnovými dĺžkami sa premietajú na rôzne miesta matnice vo forme úsečiek.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (13.1.5.1)$$

kde R je Rydbergova konštanta a $n < m$ sú prirodzené čísla. Hodnota konštanty $R = 1,09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ bola určená na základe vlnových dĺžok získaných pri meraní spektier. Formula platí aj pre ostatné série spektrálnych čiar vodíka. Pri Lymanovej sérii $n = 1$, pri Balmerovej $n = 2$, pri Paschenovej $n = 3$, Bracketovej $n = 4$, Pfundovej $n = 5$. Pri štyroch vyššie uvedených čiarach Balmerovej série za číslo m treba dosadiť hodnoty uvedené v nasledujúcej tabuľke:

Farba	červená	zelená	modrá	fialová
Vlnová dĺžka (nm)	656	486	434	410
Číslo m	3	4	5	6

Rydbergova formula vystihuje nespojitosť (diskrétnosť) vodíkového spektra, ale neobjasňuje príčinu tohto javu. Klasická „spojitá“ fyzika príčinu nedokázala určiť. Na kvantovú podstatu javu poukázal v roku 1913 Niels Bohr, keď v časopise *Philosophical Magazine* uverejnil poloklasický model atómu vodíka. Predpokladal, že elektrón obieha okolo jadra, pričom v snahe vysvetliť čiarový charakter spektra sa opieral o nasledujúce predpoklady.

1. Energia pri pohybe elektrónu nie je vyžarovaná permanentne, ako predpokladá elektrodynamika, ale len počas prechodu sústavy medzi dvoma „stacionárnymi“ stavmi.

2. Dynamická rovnováha sústavy v stacionárnych stavoch vyhovuje normálnym zákonom mechaniky, ale tieto zákony neplatia pri prechode sústavy medzi týmito stavmi.

3. Žiarenie emitované pri prechodoch sústavy medzi stavmi je homogénne, pričom medzi frekvenciou f a vyžiarenou energiou E platí vzťah $E = hf$, kde h je Planckova konštanta.

4. Rozdielne stacionárne stavy jednoduchšej sústavy skladajúcej sa z elektrónu obiehajúceho okolo kladného jadra sú určené podmienkou, že pomer medzi celkovou energiou emitovanou počas formovania konfigurácie a frekvenciou obiehania elektrónu je celočíselným násobkom hodnoty $h/2$. Za predpokladu, že elektrón obieha po kružnici, je tento predpoklad zhodný s predpokladom, že moment hybnosti elektrónu obiehajúceho okolo jadra je celočíselným násobkom hodnoty $h/2\pi$.

V piatom bode Bohr vyslovil predpoklad o momente hybnosti elektrónov v sústavách s viacerými elektrónmi, čo sa však netýka atómu vodíka.

Bohrove predpoklady, tzv. *Bohrove postuláty*, môžeme stručnejšie vyjadriť takto:

- elektrón sa môže pohybovať po kruhových dráhach len s určitým polomerom, pričom – v protiklade s klasickou fyzikou – nestráca (nevyžaruje) pritom energiu,
- pri takomto pohybe môže moment hybnosti elektrónu nadobúdať len celočíselné násobky Planckovej konštanty vydelenej číslom 2π , teda je kvantovaný,
- elektrón tak môže nadobúdať len určité hodnoty energie, pričom pri prechode na hladinu s nižšou energiou sa rozdiel energií ΔE vyžiari vo forme kvanta, ktorému podľa Planckovej hypotézy prislúcha frekvencia $f = \Delta E/h$, kde h je Planckova konštanta.

Na základe uvedených predpokladov možno vypočítať dovolené hodnoty polomerov r dráh, ale aj rýchlostí v a energií E na týchto dráhach. Dostredivá sila pôsobiaca na obiehajúci elektrón s hmotnosťou m a nábojom e je realizovaná elektrostatickou príťažlivou silou, takže platí rovnosť

$$mr\omega^2 = m \frac{v^2}{r} = k \frac{e^2}{r^2}, \quad (13.1.5.2)$$

kde k je konštanta z Coulombovho zákona; v sústave SI má tvar $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$.

Potenciálna energia sústavy elektrón – jadro vodíka je vyjadrená vzťahom

$$E_p = -k \frac{e^2}{r}, \quad (13.1.5.3)$$

a kinetická energia elektrónu, ako vyplýva zo vzťahu (13.1.5.2)

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}k \frac{e^2}{r}. \quad (13.1.5.4)$$

Celková energia sústavy je tak vyjadrená vzťahom:

$$E = -\left(\frac{1}{2}\right)k \frac{e^2}{r} = -\left(\frac{1}{2}\right)mv^2. \quad (13.1.5.5)$$

Podľa Bohrovho postulátu pre moment hybnosti platí vzťah

$$L = mvr = mr^2\omega = n(h/2\pi),$$

a využitím vzťahu (13.1.5.2) dostaneme

$$mr^3\omega^2 = ke^2,$$

odkiaľ pre rýchlosť elektrónu na n -tej kvantovej dráhe vychádza

$$v = r\omega = k \frac{2\pi e^2}{nh} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} \frac{1}{n}. \quad (13.1.5.6)$$

Pre energiu sústavy s elektrónom na n -tej kvantovej dráhe, teda pre n -tý kvantový stav, po krátkej úprave dostávame výsledok:

$$E_n = -\left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}\right). \quad (13.1.5.7)$$

Pre energiu vyžiarení pri prechode sústavy z m -tého do n -tého kvantového stavu platí vzťah $hf = -(E_n - E_m)$, t. j.

$$hf = E_m - E_n = -\left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{m^2}\right) + \left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}\right) = \left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^2}\right) \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right). \quad (13.1.5.8)$$

Tento vzťah upravíme tak, že využijeme rovnosť $hf = hc/\lambda$, kde c je rýchlosť svetla a λ vlnová dĺžka vyžiarenej vlny. Na ľavej strane ponecháme len $1/\lambda$, a tak získame vzťah zhodný s Rydbergovou formulou:

$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^3 c}\right) \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right). \quad (13.1.5.8)$$

z ktorého vidieť súvislosť Rydbergovej konštanty s inými významnými konštantami. Takto vypočítaná Rydbergova konštanta má hodnotu:

$$R = (e^4 m)/(8\varepsilon^2 h^3 c) = 10\,973\,731,2 \text{ m}^{-1},$$

čo sa len málo líši od hodnoty $1,09677 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ vypočítanej zo spektrálnych údajov.

Pre polomery dovolených kružníc v atóme vodíka vychádza vzťah

$$r_n = \frac{\varepsilon h^2}{\pi e^2 m} n^2, \quad (13.1.5.9)$$

a z neho pre prvú kvantovú dráhu hodnota $r_1 = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$. Pre frekvenciu obiehanie na tejto dráhe vychádza $1/T = 6,58 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$.

Obiehajúci elektrón vytvára elektrický prúd v uzavretej slučke a tým vzniká magnetický moment, pričom pre n -tú kvantovú dráhu platí vzťah:

$$m_M = \frac{eh}{4\pi m} n$$

Kvantovanie energie atómov bolo experimentálne overené v roku 1914 J. Franckom a G. Hertzom, teda len rok po Bohrovom uverejnení kvantového modelu atómu. V ich pokuse elektróny letiace cez riedke ortuťové pary strácali pri nepružných zrážkach s atómami ortuti vždy len určitú hodnotu kinetickej energie – takú, ktorá bola potrebná na prechod atómu do vyššieho kvantového stavu.

V Bohrovom modeli vystupuje jediné kvantové číslo, nazývané hlavné. A. Sommerfeld zaviedol pri opise atómu vodíka ďalšie dve – orbitálne, ktorým sa kvantuje moment hybnosti a magnetické, v súvislosti so sklonom roviny dráhy vzhľadom na vonkajšie magnetické pole. Štvrté kvantové číslo pribudlo po objavení spinu, t. j. vlastného momentu hybnosti elektrónu, ktoré nesúvisí s obehom okolo jadra, ale s vlastným magnetickým momentom elektrónu.

Bohrovým modelom sa situácia s opisom kvantových stavov atómov nedoriešila, lebo Bohr kvantovanie postuloval, ale neodvodil z hlbšieho fyzikálneho princípu. Tento problém vyriešil o desať rokov neskôr E. Schrödinger, čomu je venovaná tretia časť tohto zošitka. Bohrov model atómu nedokázal vysvetliť ani intenzitu spektrálnych čiar, čo tiež zvládla až kvantová mechanika, výpočtom pravdepodobnosti kvantových prechodov elektrónov medzi diskretnými hladinami energie.

13.1.5 Tlak vyvolaný svetlom

Ide o jav, ktorý sa dá vysvetliť vlnovými, aj korpuskulárnymi (kvantovými) vlastnosťami svetla. Je všeobecne známe, že chvosty komét neležia v trajektórii ktorú kométa prešla, ale že sú čiastočne odchýlené tým smerom, ktorým sa slnečné lúče vzdďaľujú od kométy. Vysvetľuje sa to tlakom slnečného svetla, pôsobiacim na malé prachové častice, ktoré sa uvoľňujú z kométy pri jej prechode v relatívnej blízkosti Slnka. Tlak je zjavne veľmi malý, lebo v rádovo rovnakej vzdialenosti od Slnka sa nachádza aj naša planéta Zem, ale na svojom tele tlak slnečných lúčov nepociťujeme. Navyše človek má v porovnaní s malými prachovými časticami celkom iný pomer plošného obsahu povrchu a objemu (teda v podstate hmotnosti). Tento pomer sa zväčšuje so zmeňšovaním rozmeru objektu. Ak by išlo o teleso s tvarom gule, potom pomer jeho plošného obsahu povrchu S a objemu V sa vypočíta jednoducho:

$$\frac{S}{V} = \frac{4\pi R^2}{(4/3)\pi R^3} = \frac{3}{R}.$$

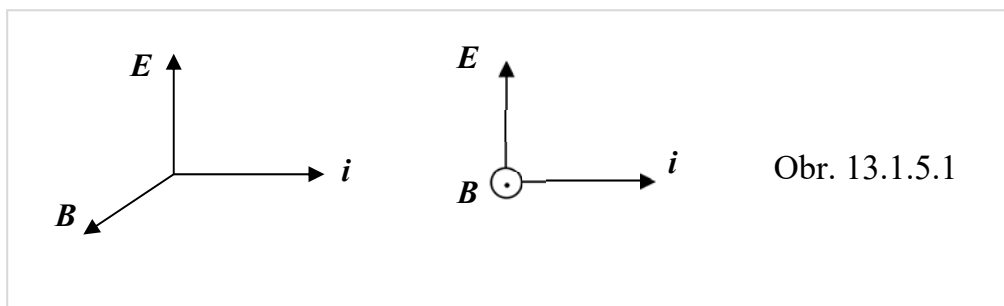
Z výsledku jednoznačne vyplýva, že pri zmeňšovaní polomeru gule, sa povrch zmeňšuje pomalšie než objem. Pri pôsobení svetla na malé častice sa preto jeho tlakový účinok prejaví výraznejším spôsobom, menšie častice v porovnaní s väčšími nadobúdajú väčšie zrýchlenie.

Pôsobenie svetla na častice sa dá vysvetliť jednak pomocou predstáv o svetle ako o elektromagnetickom vlnení, jednak pomocou predstavy o prúde fotónov prenášajúcich nie iba energiu, ale aj hybnosť.

Častice sa skladajú z atómov a teda z elektrónov nesúcich záporný elektrický náboj a kladne nabitých atómových jadier. Elektrická zložka elektromagnetickej vlny, teda intenzita elektrického poľa $\mathbf{E}$, pôsobí na nabitú časticu silou, udeľuje im zrýchlenie, pričom ľahké elektróny nadobúdajú podstatne väčšie zrýchlenie, než ťažké atómové jadrá, ktoré si v ďalších úvahách nebudeme všímať. Svetelná elektromagnetická vlna má vysokú frekvenciu, pričom počas jednej periódy sa vystriedajú zrýchlenia opačnými smermi. Výsledkom sú oscilácie elektrónov. Urýchlený elektrón získava aj hybnosť, ktorá vzhľadom na viazaný stav elektrónu v atóme predstavuje nárast hybnosti celého atómu a s ním aj celej prachovej častice. Rýchle striedanie smeru zrýchlenia elektrónov, a teda aj zrýchlenia prachovej častice vplyvom elektrickej zložky vlny, má za následok, že časová stredná hodnota zrýchlenia prachovej častice je nulová. Ale elektromagnetická vlna má aj magnetickú zložku, reprezentovanú vektorom magnetickej indukcie $\mathbf{B}$. Vzájomný smer vektorov $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ a jednotkového vektora $\mathbf{i}$, ktorý má smer šírenia (rovinnej) elektromagnetickej vlny, je znázornený na obrázku. Intenzita elektrického poľa tejto vlny urýchľuje elektróny v smere $-\mathbf{E}$, čím získavajú rýchlosť v tom istom smere. Vtedy v dôsledku prítomnosti magnetickej zložky vlny začne pôsobiť na pohybujúci sa elektrón magnetická sila

$$\mathbf{F}_m = e\mathbf{v} \times \mathbf{B},$$

ktorá má smer vektora $\mathbf{i}$, lebo náboj elektrónu je záporný. Preto elektrón získava zložku hybnosti v smere šírenia elektromagnetickej vlny, ktorú pri náraze na atóm



odovzdá prachovej častici. Rozdiel pôsobenia magnetickej sily v porovnaní s elektrickou silou je v tom, že v nasledujúcej polperióde, keď sa zmení smer vektora $\mathbf{E}$, smer magnetickej sily sa nezmení, lebo smer zmenia obidva vektory – vektor $\mathbf{E}$, aj $\mathbf{B}$. Takto vzniká stála sila pôsobiaca na prachovú časticu, ktorá sa preto začne pohybovať v smere šírenia svetelnej vlny. Hybnosť odovzdanú častici za jednotku času by bolo možné touto cestou vyjadriť aj kvantitatívne, na to by však bolo potrebné poznať – okrem intenzity elektromagnetickej vlny – aj hodnoty parametrov charakterizujúcich samotnú časticu, napríklad jej konduktivitu.

Svetelný tlak sa dá vysvetliť aj pomocou predstavy o svetle ako o prúde fotónov, ktoré prenášajú energiu a hybnosť. V článku 13.1.1 sú uvedené základné fyzikálne charakteristiky fotónu elektromagnetickej vlny s frekvenciou f , a to energia

$$W_1 = hf \text{ a hybnosť } p_1 = h/\lambda = W_1/c.$$

Veľkosť sily, ktorou svetlo pôsobí na terčik (na ktorý dopadá), závisí aj od toho, či sa svetlo v terčiku absorbuje, alebo sa od neho odráža. Ak sa fotón v terčiku pohltí, odovzdá terčiku celú svoju energiu W_1 , ale aj celú hybnosť p_1 . Potom n – fotónov odovzdá energiu $W = nW_1$ a hybnosť $p = np_1 = (1/c)nW_1 = W/c$. Ak fotón dopadne kolmo na povrch terčika a odrazí sa od neho smerom nazad (bez straty energie), odovzdá terčiku hybnosť $2p_1$. Pri n fotónoch to predstavuje odovzdanú hybnosť $p^* = 2W/c$, kde W je energia ktorú fotóny priniesli k terčiku.

V obidvoch prípadoch sa sila pôsobiaca na terčik rovná derivácii hybnosti podľa času, inými slovami, podielu odovzdanej hybnosti a príslušného časového intervalu. Pri pohltení fotónov:

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{1}{c} \frac{dW}{dt}, \quad (13.1.5.1)$$

pri dokonalom odraze fotónov

$$F = \frac{2}{c} \frac{dW}{dt}, \quad (13.1.5.2)$$

kde dW/dt vyjadruje energiu prinášajú elektromagnetickou vlnou na terčik za jednotku času.

Tlak svetla v laboratórnych podmienkach overil v roku 1899 P. N. Lebedev.

Na záver možno konštatovať, že hoci sa tlak svetla dá vysvetliť pomocou elektromagnetickej teórie, vysvetlenie pomocou nárazov fotónov je jednoduchšie a priamočiarejšie.

Príklad 13.1.5.1 Na absorbujúci terčik dopadá kolmo svetelná vlna vyžarovaná laserom, pričom intenzita elektrického poľa v tejto vlne má amplitúdu $E_0 = 200 \text{ V/m}$. Vypočítajte intenzitu tejto svetelnej vlny I a tlak p_s , ktorým pôsobí na terčik.

Riešenie: Intenzita svetelnej vlny, t. j. energia ktorú za sekundu prenáša plochou s jednotkovým plošným obsahom, sa počíta podľa vzťahu (11.3.5.4): $(1/2)(\epsilon_0 c)E_0^2$, z ktorého po dosadení zadaných hodnôt dostaneme $I = 13,3 \text{ W/m}^2$. Sila pôsobiaca na terčik sa vypočíta na základe vzťahu (13.1.5.1), pričom si uvedomíme, že ak namiesto dopadajúcej energie za jednotku času dosadíme intenzitu vlny, dostaneme priamo tlak svetelnej vlny:

$$p_s = (1/c) (dW/dt)/S = (1/c)I = 4,4 \cdot 10^{-8} \text{ Pa} .$$

Kontrolné otázky

1. Vysvetlite tlak svetla pomocou vlastností elektromagnetickej vlny.
2. Vysvetlite tlak svetla na základe predstavy, že svetlo je prúd fotónov.

13.2 Vlnové vlastnosti častíc

Kľúčové slová

de Broglieho hypotéza, vlnová funkcia, vlnový balík, Heisenbergov princíp neurčitosti

13.2.1 Hypotéza de Broglieho

Skutočnosti uvedené v podkapitole 13.1 svedčia o tom, že elektromagnetické žiarenie sa v istých situáciách prejavuje tak, ako by išlo o zväzok (prúd) častíc. Ide najmä o vyžarovanie a absorpciu žiarenia (fotoelektrický jav, žiarenie čierneho telesa). V iných situáciách sa elektromagnetické žiarenie prejavuje vlnovými vlastnosťami (interferencia, ohyb, polarizácia). To znamená, že elektromagnetické žiarenie sa prejavuje jednak vlnovými vlastnosťami, jednak vlastnosťami typickými pre častice.

Na druhej strane typické častice – elektrón, či protón – ako keby takúto symetriu vlastností neprejavovali. Vnímame ich ako častice, ale s takými ich prejavmi, ktorým treba pripísať vlnový charakter, sa (bežne) nestretávame. Túto nesymetriu prírody sa pokúsil odstrániť v roku 1923 francúzsky fyzik Louis de Broglie. Vyslovil hypotézu, podľa ktorej pohybujúcej sa častici, ktorá má istú hmotnosť a rýchlosť, môžeme priradiť vlnovú dĺžku a frekvenciu. V podstate otočil Planckovu hypotézu. Max Planck priradil fotónu elektromagnetickej vlny s frekvenciou f a vlnovou dĺžkou λ

$$\text{energiu } E = hf \quad \text{a hybnosť } p = h/\lambda.$$

L. de Broglie priradil pohybujúcej sa častici s energiou E a hybnosťou $p = mv$ frekvenciu

$$f = \frac{E}{h} = \frac{1}{2} \frac{mv^2}{h} \quad (13.2.1.1)$$

a vlnovú dĺžku

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (13.2.1.2)$$

Z posledného vzťahu vyplýva, že s rastúcou rýchlosťou častice sa zmenšuje vlnová dĺžka priradená častici.

Súčin vlnovej dĺžky s frekvenciou v prípade harmonických vln poskytuje ich fázovú rýchlosť. V tomto prípade však použitím vzťahov (13.2.1.1) a (13.2.1.2) dostaneme výsledok

$$\lambda \cdot f = \frac{h}{p} \cdot \frac{E}{h} = \frac{(1/2)mv^2}{mv} = \frac{v}{2}, \quad (13.2.1.3)$$

ktorý nás nemôže uspokojiť, lebo poskytuje polovičnú hodnotu rýchlosti, ktorou sa častica skutočne pohybuje.

Zhoda s reálnou hodnotou rýchlosti sa však dosiahne, ak počítame nie fázovú, ale grupovú rýchlosť. Podľa vzťahu (6.2.5.6) z kapitoly o vlnení, na výpočet grupovej rýchlosti slúži vzťah

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad (13.2.1.4)$$

v ktorom $\omega = 2\pi f$ je uhlová frekvencia a $k = 2\pi/\lambda$ uhlové vlnové číslo, pričom uhlová frekvencia ω musí byť vyjadrená ako funkcia uhlového vlnového čísla. To využijeme v ďalších úvahách, keď tieto veličiny vyjadríme pomocou de Broglieho vzťahov.

Prv než vypočítame grupovú rýchlosť (13.2.1.4), upravíme niektoré vzťahy, aby výpočet bol zrozumiteľnejší:

$$E = hf = \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar\omega, \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k. \quad (13.2.1.5)$$

Ďalej si uvedomíme, že spojením klasických vzťahov vyjadrujúcich kinetickú energiu $E = (1/2)mv^2$ a hybnosť $p = mv$ častice dostaneme vzťah $E = p^2/(2m)$. Potom už možno vypočítať grupovú rýchlosť priradenú častici:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} = v.$$

To znamená, že grupová rýchlosť počítaná na základe de Broglieho vzťahov, sa zhoduje s rýchlosťou častice.

V čase uverejnenia de Broglieho hypotézy išlo iba o špekulatívne úvahy. Približne o tri roky neskôr (1925) Davisson a Germer urobili významný experiment (difrakciu zväzku elektrónov na kryštáli niklu), jednoznačne potvrdzujúci nielen vlnové prejavy letiacich elektrónov. Experiment potvrdil aj zhodu nameranej vlnovej dĺžky so vzťahom (13.2.1.2), ktorý navrhol L. de Broglie. V súčasnosti sa vlnové prejavy elektrónov, ale aj iných častíc (protónov, neutrónov...) nielen pozorujú, ale aj laboratórne využívajú na skúmanie štruktúry rôznych materiálov. Vlnové prejavy zväzku elektrónov sa používajú v elektrónových mikroskopoch, difrakcia neutrónov na určovanie usporiadania atómov v masívnych materiáloch. To znamená, že nie iba elektromagnetické žiarenie preukazuje dvojaké vlastnosti – vlnové a korpuskulárne, ale že takýto dualizmus je vlastný aj časticiam.

Príklad 13.2.1.1 Vypočítajte vlnovú dĺžku priradenú elektrónu, ktorý bol urýchlenný napätím $U = 3 \text{ V}$. (náboj $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ A} \cdot \text{s}$, hmotnosť $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$)

Riešenie: Najprv treba vypočítať rýchlosť elektrónu po jeho urýchlenní pomocou rovnice $eU = (1/2)mv^2$, potom rýchlosť dosadiť do de Broglieho vzťahu na výpočet vlnovej dĺžky. Tak dostaneme výsledok $\lambda = (h/\sqrt{2m_e eU}) \cong 7,1 \times 10^{-10} \text{ m}$.

Príklad 13.2.1.2 Vypočítajte vlnovú dĺžku priradenú lopte s hmotnosťou $m = 0,1 \text{ kg}$, letiacej rýchlosťou $v = 20 \text{ m/s}$.

Riešenie: V tomto prípade môžeme zadané hodnoty dosadiť priamo do vzťahu: $\lambda = h/(mv) \cong 3,3 \times 10^{-34} \text{ m}$.

Z uvedených príkladov vyplýva, že vlnová dĺžka priradená urýchlenému elektrónu (rýchlosť elektrónu v príklade má veľkosť približne 10^6 m/s) je na úrovni medziatómových vzdialeností v tuhých látkach a preto ju experimentálne možno overiť napríklad difrakciou zväzku elektrónov na kryštáloch, ako to urobili Davisson a Germer. Takáto vlnová dĺžka súvisí predovšetkým s malou hmotnosťou elektrónu, ktorá vystupuje v menovateli de Broglieho vzťahu. Vlnová dĺžka priradená letiacej lopte, alebo inému telesu makroskopickej veľkosti je však taká malá, že ju nedokážeme vnímať, a to nielen priamo zmyslami, ale ani prístrojmi. Preto vlnové vlastnosti častíc dlho unikali našej pozornosti. Umožňujú to až moderné experimentálne zariadenia, aj to len v prípade mikročastíc, nie pri makrotelesách. (Na porovnanie – viditeľnému svetlu zodpovedajú vlnové dĺžky okolo $0,5 \times 10^{-6} \text{ m}$.)

Kontrolné otázky

1. Napíšte vzťah, ktorým de Broglie priradil vlnovú dĺžku pohybujúcej sa častici.
2. Čomu sa rovná fázová rýchlosť častice vypočítaná na základe de Broglieho vzťahov?
3. Čomu sa rovná grupová rýchlosť častice vypočítaná na základe de Broglieho vzťahov?
4. Prečo sa vlnové vlastnosti častíc nepozorovali skôr?
5. Aké sú veľkosti vlnových dĺžok priradovaných elementárnym časticiam a aké makroskopickým telesám?

13.2.2 Vlna de Broglieho

V predošlom článku boli uvedené vzťahy, ktorými sa častice s hmotnosťou m a pohybujúcou sa rýchlosťou v priraduje vlnová dĺžka a frekvencia. Otvorenou pritom zostáva otázka, ako vyzerá funkcia opisujúca časticu s takýmito vlastnosťami ako vlnu, teda tzv. **de Broglieho vlna** (vlnová funkcia). Nie je zatiaľ jasné ani to, aký význam, či fyzikálny rozmer by mala amplitúda takejto vlny. Pri konštruovaní takejto funkcie si pomôžeme vlnovou funkciou harmonickej vlny, postupujúcej pozdĺž osi x (kap. o vlnení vzťah 4.2.1.7)

$$u(x, t) = A \sin(\omega t - kx) .$$

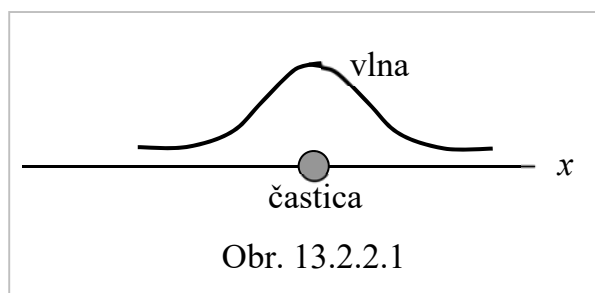
Túto rovnicu zapíšeme v často používanom exponenciálnom tvare (pozri dodatok D4):

$$u(x, t) = A \exp[-i(\omega t - kx)] . \quad (13.2.2.1)$$

Túto funkciu pomocou de Broglieho vzťahov upravíme tak, aby v nej vystupovali parametre typické pre pohybujúcu sa časticu, teda kinetická energia E a hybnosť p . Využijeme pritom vzťahy (13.2.1.5), pričom namiesto $u(x, t)$ použijeme symbol $\Phi(x, t)$ a namiesto amplitúdy A symbol Φ_0 , so zatiaľ neznámym fyzikálnym významom:

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= \Phi_0 \exp[-i(\omega t - kx)] = \Phi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hbar\omega t - \hbar kx)\right] = \\ &= \Phi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] . \end{aligned} \quad (13.2.2.2)$$

Posledný výraz je de Broglieho vlna. Takáto funkcia má však nenulové hodnoty v ľubovoľnom mieste na osi x , navyše v ľubovoľnom časovom okamihu. Od vlny priradenej častici, teda od vlnovej funkcie očakávame, že bude mať nenulové hodnoty iba v mieste v ktorom sa častica nachádza, nanajvýš v jeho blízkom okolí. Naša intuitívna predstava sa dá zobraziť asi tak, ako je na obrázku.



Obr. 13.2.2.1

Monofrekvenčná vlna v tvare (13.2.2.2) takúto vlastnosť nemá. Východiskom z tejto situácie je opis častice tzv. vlnovým balíkom, čo je súčet, presnejšie integrál celej skupiny vln, ktorých frekvencie, resp. vlnové dĺžky pokrývajú istý konečný interval:

$$\Phi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) \exp\{-i[\omega(k)t - kx]\} dk . \quad (13.2.2.3)$$

Pri tomto zápise sa predpokladá, že poznáme závislosť $\omega(k)$, t. j. závislosť uhlovej frekvencie priradenej častici de Broglieho vzťahom, od uhlového vlnového čísla, teda

v podstate od vlnovej dĺžky (v prípade voľnej častice platia vzťahy (13.2.1.5)). Integruje sa okolo hodnoty k_0 uhlového vlnového čísla, ktoré zodpovedá de Broglieho vzťahom pre časticu s kinetickou energiou E a hybnosťou p . V porovnaní s veľkosťou k_0 volíme interval Δk malý, t. j. $\Delta k \ll k_0$. Pre uhlovú frekvenciu môžeme použiť Taylorov rozvoj $\omega(k) \approx \omega_0 + v_g(k - k_0)$, ak budeme uvažovať čas $t \ll (v_g \Delta k)^{-1}$, kde v_g je grupová rýchlosť (13.2.1.4). Integráciu si zjednodušíme predpokladom $A(k) = A_0$, teda že amplitúda jednotlivých skladaných vln je rovnaká. Potom:

$$\begin{aligned}\Phi(x, t) &= \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A_0 \exp\{i(kx - \omega(k)t)\} dk \\ &= A_0 \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) \times \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} \exp\{ik'x_t\} dk'\end{aligned}$$

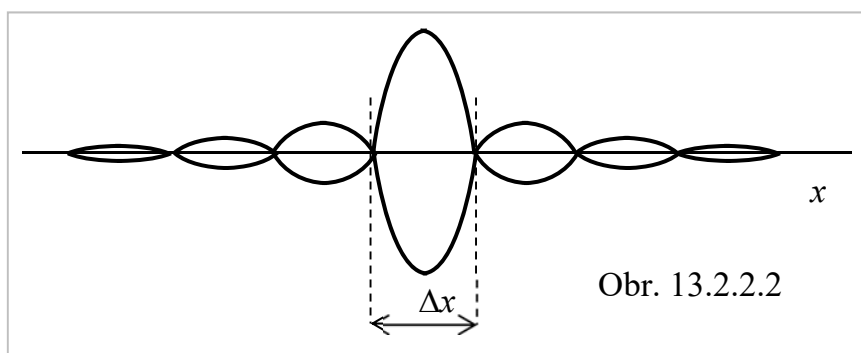
kde sme zaviedli označenie $x_t = x - v_g t$. Po ďalšej úprave dostaneme výsledok

$$\Phi(x, t) = 2A_0 \Delta k \exp\{i(k_0 x - \omega_0 t)\} \frac{\sin(x_t \Delta k)}{x_t \Delta k}.$$

V kvantovej teórii má význam komplexný tvar vlnovej funkcie, no pre jednoduchosť sa zameriame len na reálnu zložku výsledného vzťahu:

$$\text{Re}\{\Phi(x, t)\} = 2A_0 \Delta k \cos(k_0 x - \omega_0 t) \frac{\sin(x_t \Delta k)}{x_t \Delta k}. \quad (13.2.2.4)$$

Takáto vlnová funkcia, reprezentujúca **vlnový balík**, už vystihuje umiestnenie častice v priestore, na pozícii $x = v_g t$. Grupová rýchlosť teda naozaj zodpovedá rýchlosti posúvania vlnového balíku v čase, ako bolo uvedené pri jej zavedení v časti 13.2.1. Lokalizáciu vlnového balíka dokumentuje aj obrázok 13.2.2.2, na ktorom je však zachytená len funkcia $\pm(\sin x \Delta k)/(x \Delta k)$ tvoriaca obálku funkcie $\cos(k_0 x)$.



Funkcia $\cos(k_0 x)$ má podstatne vyššiu frekvenciu, je na osi x podstatne hustejšia, lebo $\Delta k \ll k_0$, a preto nie je na obrázku zachytená. Útvar zobrazený na obrázku sa posúva pozdĺž osi x grupovou rýchlosťou, teda rovnakou ako častica, ale postupne sa rozplýva. Pri výpočte (13.2.2.4) sme uvažovali len čas ohraničený podmienkou $t \ll$

$(v_g \Delta k)^{-1}$, a len preto mal balík nemennú šírku. Rozplývavie vlnového balíka je podmienené tým, že skladajúcim sa vlnám z intervalu uhlových vlnových čísel $(k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k)$ zodpovedajú podľa vzťahu (13.2.1.2) rôzne hybnosti a tým aj rôzne rýchlosti. Čím väčší interval Δk pri integrácii zvolíme, tým rýchlejšie sa vlnový balík rozplynie, ale na druhej strane spočiatku lepšie lokalizuje časticu na osi x . Podstatné na vlnovom balíku však je, že jeho grupová rýchlosť sa rovná rýchlosti častice, ako to vyplýva zo vzťahu (13.2.1.4).

Kontrolné otázky

1. Vyjadrite de Broglieho vlnu opisujúcu voľne sa pohybujúcu časticu.
2. Prečo monofrekvenčná vlna nie je vhodná na opis pohybujúcej sa častice?
3. Čo rozumieme pod vlnovým balíkom?
4. Čomu sa rovná grupová rýchlosť vlnového balíka?

13.2.3 Heisenbergov princíp neurčitosti

Zo vzťahu (13.2.2.4) vyplývajú významné dôsledky. Šírka hlavného maxima vlnového balíka na osi x (na obrázku 13.2.2.2 označená ako Δx) závisí od intervalu Δk zvoleného pri integrácii v rovnici (13.2.2.3). Vo výsledku integrácie (13.2.2.4) vystupuje funkcia $g(x) = (\sin x \Delta k) / (x \Delta k)$, ktorej limita pre $x \rightarrow 0$ sa rovná číslu 1. Hlavné maximum na osi x je ohraničené bodmi x_1 a x_2 , pre ktoré platí $x_1 \Delta k = -\pi$, $x_2 \Delta k = +\pi$. Šírka maxima sa rovná rozdielu týchto súradníc, čiže

$$\Delta x = x_2 - x_1 = \frac{2\pi}{\Delta k} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta k = 2\pi. \quad (13.2.3.1)$$

Z výsledku vyplýva, že čím širší interval Δk pri integrácii vlnového balíka zvolíme, tým menší je interval Δx , ktorým je častica v priestore (na osi x) lokalizovaná. Funkcia $g(x)$ sa rozprestiera aj za prvé nulové body, za hlavným maximom vytvára ďalšie maximá, i keď podstatne slabšie. Preto ak hovoríme o lokalizácii častice, a pod Δx chápeme nie vzdialenosť nulových bodov hlavného maxima, ale interval v ktorom sa môže nachádzať častica, treba vo vzťahu (13.2.3.1) nahradiť znamienko rovnosti znamienkom nerovnosti a písať:

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi.$$

Ak tento vzťah vynásobíme konštantou $\hbar = h/2\pi$, dostaneme $\Delta x \cdot \hbar \Delta k \geq h$, a keďže súčin $\hbar k$ sa rovná hybnosti častice p , nakoniec dostaneme

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h, \quad (13.2.3.2)$$

čo je Heisenbergov **vzt'ah neurčitosti**. Slovné vyjadrenie tohto vzťahu je známe ako **Heisenbergov princíp neurčitosti** a vyjadruje skutočnosť, že **súčasné určenie polohy častice a jej hybnosti nemožno vykonať s neobmedzenou presnosťou**. Nemecký fyzik Werner Heisenberg ho sformuloval v roku 1927.

Tento princíp má pomerne jednoduché vysvetlenie. Ak chceme presne určiť polohu častice, musíme na to použiť aspoň jeden fotón, ktorý sa od častice odrazí. Náraz fotónu do častice nepredvídateľne zmení jej polohu. Čím presnejšie chceme lokalizovať časticu, tým kratšiu vlnovú dĺžku musíme použiť. Kratšia vlnová dĺžka zodpovedajúca fotónu však znamená jeho väčšiu hybnosť, a teda aj väčší vplyv na polohu častice pri zrážke s ňou. Naopak, väčšia vlnová dĺžka znamená menší vplyv na časticu pri zrážke, ale súčasne väčšiu neurčitosť v stanovení jej polohy.

Príklad 13.2.3.1 Vypočítajte, s akou neurčitosťou treba počítať pri stanovení rýchlosti elektrónu v atóme vodíka? (Planckova konštanta $h = 6,6 \times 10^{-34}$ Js, hmotnosť elektrónu $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg).

Riešenie: Atóm vodíka má veľkosť rádovo 10^{-10} m, čo použijeme ako vstupný údaj do vzťahu neurčitosti. Ten upravíme: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta(mv) \geq h \Rightarrow \Delta v \geq h/(m\Delta x)$, a po dosadení číselných hodnôt $\Delta v \geq 6,6 \times 10^6$ m/s, čo sa rádovo zhoduje s veľkosťou obežnej rýchlosti elektrónu v Bohrovom modeli atómu vodíka.

Príklad 13.2.3.2 Vypočítajte neurčitosť pri stanovení polohy telesa s hmotnosťou $m = 1$ kg, keď sa pohybuje rýchlosťou $v = 10$ m/s.

Riešenie: $\Delta x \geq h / (mv)$, číselne $\Delta x \geq 6,6 \times 10^{-35}$ m.

Uvedené príklady naznačujú, že pri makroskopických telesách sú neurčitosti pri súčasnom stanovení polohy a hybnosti extrémne malé. Princíp neurčitosti má však významnú úlohu v oblasti mikročastíc, kde podstatným spôsobom ovplyvňuje merania.

Kontrolné otázky

1. Ktoré veličiny vystupujú vo vzťahoch neurčitosti?
2. Slovné vyjadrite Heisenbergov princíp neurčitosti.
3. Ako ovplyvní polohu častice dopad jedného fotónu?
4. Vhodným príkladom objasnite vzťah neurčitosti.
5. Zdôvodnite, prečo sa vzťah neurčitosti neuplatňuje pri makroskopických telesách.

13.3 Schrödingerova rovnica a niektoré jej aplikácie

Kľúčové slová

Vlnová funkcia, Schrödingerova rovnica, kvantovanie energie, tunelový jav, Pauliho princíp

13.3.1 Vlnová funkcia

V článku 13.2.2 bol uvedený vzťah, ktorým L. de Broglie priradil vlnu častici s energiou E a hybnosťou p , pohybujúcej sa pozdĺž osi x (vzťah 13.2.2.2):

$$\Phi(x, t) = \Phi_0 \exp[-i(\omega t - kx)] \quad \Rightarrow \quad \Phi(x, t) = \Phi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right]. \quad (13.3.1.1)$$

Táto formula je známa pod menom de Broglieho vlna, alebo **vlnová funkcia**. Reprezentuje vlnu priradenú častici, ale jej fyzikálny význam nie je na prvý pohľad zrejmý. Pri vlnách šíriacich sa povrchom vody, alebo pri akustickej vlne, zápis v tvare $u = A \sin(\omega t - kx)$ vyjadruje okamžitú výchylku u (a jej amplitúdu A), pričom dobre vieme, že výchylka sa meria v jednotkách dĺžky. Podobne pri elektromagnetických vlnách vyjadrujeme takýmto zápisom intenzitu elektrického poľa, alebo magnetickú indukciu, teda dobre definované veličiny so známymi jednotkami. Pri vlnovej funkcii Φ však nevieme o akú veličinu ide, akú vlastnosť častice predstavuje. Interpretácia významu vlnovej funkcie sa pripisuje Maxovi Bornovi (1926). Za východisko pri interpretácii vezmeme výsledky pokusu, ktorý je usporiadaný podobne ako Youngov pokus s dvoma štrbinami (pozri zošitok Optika), ale namiesto svetla necháme na štrbiny dopadať zväzok rovnobežne sa pohybujúcich elektrónov. Za štrbinami dochádza k ich interferencii, podobne ako pri svetle, čiže elektróny sa správajú ako vlny. Do detektorov, resp. na iné registračné zariadenie, však dopadajú vždy len celé elektróny, čím sa prejavujú aj ich časticové vlastnosti. O žiadnom z elektrónov nevieme vopred povedať, na ktoré miesto tienidla dopadne. Je však očividné, že s najväčšou pravdepodobnosťou dopadne do miesta predstavujúceho niektoré interferenčné maximum. Pritom polohy interferenčných maxím vypočítame podľa vzťahu (12.2.3.6) platného pri Youngovom pokuse, do ktorého dosadíme de Broglieho vlnovú dĺžku priradenú elektrónom. Pravdepodobnosť dopadu elektrónu na dané miesto tienidla je úmerná intenzite vlny, teda druhej mocnine jej amplitúdy – v tomto prípade modulu komplexného čísla. Preto fyzikálny význam vlnovej funkcie (de Broglieho vlny) spočíva v tom, že druhej mocnine jej amplitúdy je úmerná pravdepodobnosť výskytu elektrónu, v tomto prípade v mieste dopadu. Tento spôsob interpretácie sa akceptuje všeobecne, takže *druhá mocnina amplitúdy vlnovej funkcie predstavuje pravdepodobnosť výskytu častice v danom mieste priestoru, pripadajúcu na jednotku*

objemu. Inými slovami – predstavuje objemovú hustotu pravdepodobnosti výskytu častice ako funkciu priestorových súradníc.

To znamená, že elementárna pravdepodobnosť dP toho, že časticu nájdeme v elementárnom objeme $d\tau$, je úmerná súčinu $dP = k \Phi^2 d\tau$, kde k je konštanta úmernosti. Ak chceme vypočítať pravdepodobnosť s ktorou nájdeme časticu vo väčšom objeme V priestoru, treba cez tento objem integrovať:

$$\Delta P = \int_V k \Phi^2 d\tau, \quad (13.3.1.2)$$

Takéto chápanie vlnovej funkcie – ako funkcie s významom pravdepodobnosti však znamená, že integrál jej druhej mocniny cez celý priestor v ktorom sa častica môže potenciálne vyskytovať, sa musí rovnať jednotke:

$$\int k \Phi^2(x, y, z, t) d\tau = 1. \quad (13.3.1.3)$$

O vlnovej funkcii, ktorá spĺňa túto podmienku sa hovorí, že je **normovaná**.

Ak je vlnová funkcia vyjadrená v komplexnom tvare, ako funkcia (13.3.1.1), potom sa druhá mocnina v integráli nahradí súčinom vlnovej funkcie a jej komplexne združenej hodnoty:

$$\Phi^2 \rightarrow \Phi \Phi^*.$$

Príklad 13.3.1.1 Častica je viazaná na úsečku s dĺžkou L , ležiacou na osi x , a jej vlnová funkcia má tvar $\Psi = A \sin[(\pi/L)x]$. Akú podmienku musí spĺňať veličina A , aby funkcia bola správne normovaná?

Riešenie: Podľa podmienky normovania musí platiť

$$\int_0^L \Psi^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L A^2 \sin^2[(\pi/L)x] dx = 1 \Rightarrow A^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{2/L}.$$

Príklad 13.3.1.2 Vypočítajte pravdepodobnosť P , že časticu z príkladu 13.3.1.1 nájdete v intervale $(0, L/4)$.

Riešenie: Použijeme vzťah (13.3.1.2), pričom integrovať budeme v zadanom intervale. Aby sme získali správny výsledok, treba pri integrácii použiť normovanú funkciu:

$$P = \int_0^{L/4} \frac{2}{L} \sin^2[(\pi/L)x] dx = \frac{2}{L} \int_0^{L/4} \sin^2[(\pi/L)x] dx = \frac{2}{L} L \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{4\pi} \right) = 0,0908.$$

Poznámka: Vypočítajte pravdepodobnosti v ostatných štvrtinách úsečky, spočítajte a overte, či dostanete číslo 1.

Kontrolné otázky

1. Ako sa interpretuje fyzikálny význam vlnovej funkcie?
2. Čo znamená, keď je vlnová funkcia normovaná?
3. Dá sa normovať vlnová funkcia, ak je vyjadrená ako komplexná funkcia?

11.3.2 Schrödingerova rovnica

Akákoľvek elektromagnetická či mechanická vlna, zapísaná v podobe (13.3.1.1), je riešením parciálnej diferenciálnej rovnice, nazývanej *vlnová rovnica*. Preto sa prirodzene vynára otázka o existencii diferenciálnej rovnice, ktorej riešením by boli rôzne druhy *vlnových funkcií* priradených na základe de Broglieho hypotézy pohybujúcim sa časticiam. Rovnicu našiel E. Schrödinger, a o procese jej vzniku uverejnil v roku 1926 štyri na seba nadväzujúce články v časopise Annalen der Physik. Rovnica sa nedá získať dôsledným deduktívnym odvodením z vyšších princípov, treba ju skonštruovať. Uvedieme postup, ktorým sa podarí dospieť k jej tvaru v prípade voľnej častice, t. j. keď sa častica nenachádza v silových poliach, takže má len kinetickú energiu, nemá energiu potenciálnu. Pri takejto častici, medzi jej energiou $E = \frac{1}{2}mv^2$ a hybnosťou $p = mv$ platí vzťah $E = p^2/2m$.

Napišeme vlnovú funkciu v tvare podľa (13.3.1.1):

$$\Phi(x, t) = \Phi_0 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]$$

Jej deriváciou podľa času získame vzťah

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Phi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = E \Phi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Phi.$$

Dvojnásobnou deriváciou podľa priestorovej súradnice získame ďalší vzťah

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Phi \Rightarrow p^2 \Phi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}.$$

Spojením vzťahov získame rovnicu

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2},$$

ktorá je hľadanou diferenciálnou rovnicou. Ľahko sa dá overiť, že vlnová funkcia typu (13.3.1.1) je jej riešením.

Ak sa častica nachádza v silovom poli, má aj potenciálnu energiu U , takže vzťah medzi celkovou energiou E a hybnosťou p má tvar $E - U = p^2/2m$. Využitím tohto vzťahu získame rozšírenú diferenciálnu rovnicu platnú aj pre vlnové funkcie priradené časticiam nachádzajúcim sa v silových poliach, ktorá sa už zhoduje s rovnicou, ktorú uviedol **Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + U \Phi . \quad (13.3.2.1)$$

Vlnová funkcia Φ je vo všeobecnosti funkciou všetkých troch priestorových súradníc, takže v Schrödingerovej rovnici popri druhej derivácii podľa premennej x musia vystupovať derivácie aj podľa premenných y a z :

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right) + U \Phi . \quad (13.3.2.2)$$

Táto rovnica je základným pohybovým zákonom v kvantovej mechanike, teda vo svete mikročastíc, je analógiou Newtonových pohybových rovníc klasickej mechaniky.

Vlnovú funkciu (13.3.1.1) vyjadrenú v komplexnom tvare môžeme napísať ako súčin časti závisiacej len od času a časti závisiacej len od priestorovej súradnice

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= \Phi_o \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \Phi_o \exp \left(\frac{i}{\hbar} px \right) \Rightarrow \\ \Phi(x, t) &= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \psi(x) , \end{aligned}$$

kde $\psi(x) = \Phi_o \exp \left(\frac{i}{\hbar} px \right)$ naozaj závisí len od premennej x . Takto upravenú vlnovú funkciu derivujeme najprv podľa času, potom dvojnásobne podľa premennej x :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \psi(x) , \quad \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} .$$

Získané vzťahy dosadíme do Schrödingerovej rovnice:

$$i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \right) E \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \exp \left(-\frac{i}{\hbar} Et \right) \psi(x)$$

a ďalšou úpravou získame rovnicu nazývanú **bezčasová Schrödingerova rovnica**, alebo **stacionárny tvar Schrödingerovej rovnice**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \psi(x) = E \psi(x) . \quad (13.3.2.3)$$

Získaná bezčasová rovnica nachádza významné využitie v rôznych oblastiach opisu stacionárnych stavov mikročastíc v atómoch, molekulách, ale aj v tuhých látkach,

vrátane polovodičov, dielektrík či kovov. Po dosadení príslušnej závislosti potenciálnej energie U od priestorových súradníc do bezčasovej Schrödingerovej rovnice, jej riešenie poskytne tzv. **vlastné hodnoty energie** E_n ako aj im príslušné **vlastné vlnové funkcie** ψ_n . Takto sa dajú získať jednak dovolené hodnoty energie častíc (napr. elektrónov v polovodičoch), jednak priestorové rozdelenie hustoty pravdepodobnosti ich výskytu pomocou príslušných vlastných vlnových funkcií. Tieto výsledky sa potom využívajú pri vysvetľovaní elektrickej vodivosti, magnetických, optických aj tepelných vlastností kovov, polovodičov aj dielektrík.

Príklad 13.3.2.1 Overte si, že vlnová funkcia $\psi = A \exp(ikx)$ je riešením bezčasovej Schrödingerovej rovnice (13.3.2.3), že je riešením opisujúcim voľnú časticu, teda časticu pohybujúcu sa v priestore s nulovou potenciálnou energiou, pre ktorú platia vzťahy – pre hybnosť $p = \hbar k$, pre energiu $E = p^2/2m$.

Riešenie: Vypočítame druhú deriváciu vlnovej funkcie a dosadíme do rovnice (13.3.2.3):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} A \exp(ikx) (ik)^2 + U A \exp(ikx) = E A \exp(ikx) \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U = E \Rightarrow$$

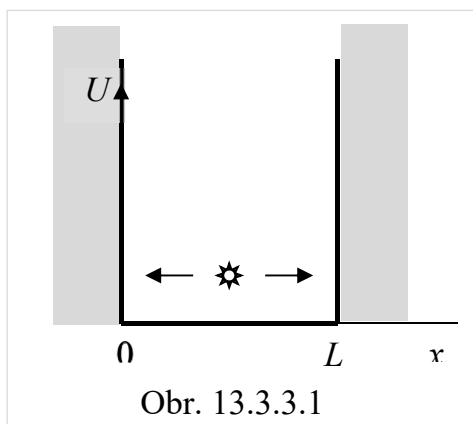
$$\Rightarrow \frac{p^2}{2m} + U = E .$$

Posledná rovnica sa splní len vtedy, keď $U = 0$.

Kontrolné otázky

1. Napište Schrödingerovu rovnicu.
2. Ktoré fyzikálne veličiny vystupujú v Schrödingerovej rovnici?
3. Aký je rozdiel medzi Schrödingerovou rovnicou a jej stacionárnym tvarom?
4. Na čo slúži bezčasová Schrödingerova rovnica?

13.3.3 Častica v jednorozmernej potenciálovej jame



Najjednoduchším príkladom použitia bezčasovej Schrödingerovej rovnice (13.3.2.3) je prípad častice (napr. elektrónu) uväznenej v potenciálovej jame, t. j. keď častica nemá dostatok energie na únik z jamy. Možno to považovať za veľmi zjednodušený model elektrónu v atóme, t. j. elektrónu viazaného na oblasť v okolí jadra. Uvážime idealizovaný prípad nekonečne hlbokoj jamy, v ktorej na časticu nepôsobia silové polia,

takže ide o voľnú časticu s nulovou potenciálnou energiou (v okolí jamy by častica mala nekonečne veľkú potenciálnu energiu). Na obrázku je znázornená jednorozmerná potenciálová jama s časticou, ktorá sa môže pohybovať len pozdĺž osi x , v intervale $(0, L)$, takže má len jeden stupeň voľnosti. Má len kinetickú energiu, preto v bezčasovej Schrödingerovej rovnici položíme $U = 0$. Keďže ide o voľnú časticu, tak riešenie Schrödingerovej rovnice – vlnovú funkciu – navrhujeme v tvare doprava alebo doľava šíriacej sa rovinnej vlny (pozri príklad 13.3.2.1):

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C \exp(ikx) + D \exp(-ikx) \\ &= (C + D) \cos(kx) + i(C - D) \sin(kx) .\end{aligned}\quad (13.3.3.1)$$

Na okrajoch jamy v miestach $x = 0$ a $x = L$, kde je už potenciálna energia nekonečne veľká, sa častica nemôže vyskytovať, čo sa zohľadňuje dvoma *okrajovými podmienkami* riešenia diferenciálnej rovnice:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0 .$$

Z prvej okrajovej podmienky vyplýva, že vlnová funkcia nemôže mať reálnu zložku obsahujúcu funkciu kosínus, lebo $\cos(kx)$ pri $x = 0$ sa nemôže rovnať nule. Preto z prvej okrajovej podmienky vyplýva, že $C + D = 0$ a vlnová funkcia (13.3.3.1) musí mať tvar

$$\psi(x) = i2C \sin(kx) .\quad (13.3.3.2)$$

Z druhej okrajovej podmienky vyplýva ďalšie obmedzenie vlnovej funkcie:

$$\psi(L) = i2C \sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi ,$$

čo je podmienka obmedzujúca hodnotu vlnového čísla³ k , ktoré môže nadobúdať len diskkrétne hodnoty (n je celé číslo)

³ Vlnové číslo $k = 2\pi/\lambda$

$$k_n = n \frac{\pi}{L} . \quad (13.3.3.3)$$

Vlnové číslo je teda kvantované, takže kvantovaná je aj vlnová dĺžka de Broglieho vlny priradenej častici v jame, lebo $k = 2\pi/\lambda$. Z toho pre vlnovú dĺžku vyplýva podmienka

$$\frac{2\pi}{\lambda_n} = n \frac{\pi}{L} \quad \Rightarrow \quad \lambda_n = \frac{2L}{n} .$$

Je to rovnaká podmienka ako pri strune s dĺžkou L , ktorá je na obidvoch koncoch upevnená ($\rightarrow$ vzťah 4.2.6.7). Nie je to teda prekvapujúci výsledok. V prípade častice v jame je však dôležité uviesť, že kvantovaná je jej veľkosť hybnosti aj energia:

$$p_n = \hbar k_n = n \frac{\hbar \pi}{L} = n \frac{h}{2L} , \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 . \quad (13.3.3.4)$$

Častica v potenciálovej jame môže teda nadobúdať len isté dovolené energie (a veľkosti hybnosti), pričom každému takémuto **kvantovému stavu**, charakterizovanému **kvantovým číslom** n , zodpovedá príslušná vlnová funkcia $\psi_n(x)$

$$\psi_n(x) = iC \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) , \quad \text{po znormovaní} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) . \quad (13.3.3.5)$$

(O normovaní vlnovej funkcie pozri príklad 13.3.1.1). Hodnoty E_n sú tzv. **vlastné hodnoty** hybnosti, resp. energie častice v potenciálovej jame a funkcie ψ_n príslušné. **vlastné funkcie**.

Dôležitou vlastnosťou vlastných funkcií zodpovedajúcim odlišným vlastným hodnotám je ich **ortogonalita**,

$$\int_0^L \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \sin\left(m \frac{\pi}{L} x\right) dx = 0, n \neq m. \quad (13.3.3.6)$$

Pojem ortogonalitý je známy aj z vektorovej algebry: dva vektory nazývame ortogonálne, ak ich skalárny súčin je nulový. V rámci funkcionálnej analýzy uvedený integrál naozaj zodpovedá skalárnemu súčinu dvoch funkcií $\psi_n(x)$ a $\psi_m(x)$ a ortogonalita vlastných funkcií pre širšiu triedu diferenciálnych rovníc sa dokazuje vrámci tzv. Sturm-Liouvilleovej úlohy.

Minimálna energia častice v jame nemôže byť nulová, lebo keby $n = 0$, bola by nulová aj príslušná vlnová funkcia ψ_n , čo by znamenalo nulovú pravdepodobnosť výskytu častice na ľubovoľnom mieste v jame. Častica by teda v jame nemohla byť.

Nenulová hodnota minimálnej energie vyplýva aj z Heisenbergovho vzťahu neurčitosti (13.2.3.2), podľa ktorého $\Delta x \cdot \Delta p > \hbar$, teda súčin neurčitostí polohy s neurčitosťou hybnosti nemôže byť menší než Planckova konštanta. V tomto prípade neurčitosť polohy častice Δx sa zhoduje s rozmerom jamy, takže pre neurčitosť

hybnosti dostávame $\Delta p > h/L$. Hybnosť teda nemôže byť nulová a tým ani energia, lebo

$$E = \frac{p^2}{2m} > \frac{h^2}{8mL^2},$$

čo je v zhode so vzťahom (13.3.3.4).

Poznámka:

Ak by sme uvažovali o dvojrozmernej jame, v ktorej má častice možnosť pohybovať sa v dvoch smeroch (napr. x, y), má teda dva stupne voľnosti, potom stav častice (hybnosť, energia) je určený dvoma kvantovými číslami. Ak je pohyb častice obmedzený na oblasť trojrozmerného priestoru, ako napríklad elektrón v atóme, tak kvantový stav častice sa vyjadruje pomocou troch kvantových čísiel.

Príklad 13.3.3.1 Porovnajme rozdiely energií elektrónu medzi druhou a prvou hladinou energie v potenciálových jamách s rozmermi a) $L_1 = 10^{-2}$ m (makroskopická jama) b) $L_2 = 10^{-10}$ m (rozmer atómu).

Riešenie:

$$\begin{aligned} \text{a) } E_2 - E_1 &= (2^2 - 1^2) \frac{h^2}{8mL^2} = 3 \frac{(6,63 \cdot 10^{-34})^2}{8 \times 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-4}} \cong 0,5 \cdot 10^{-33} \text{ J} \\ &\cong 10^{-14} \text{ eV.} \end{aligned}$$

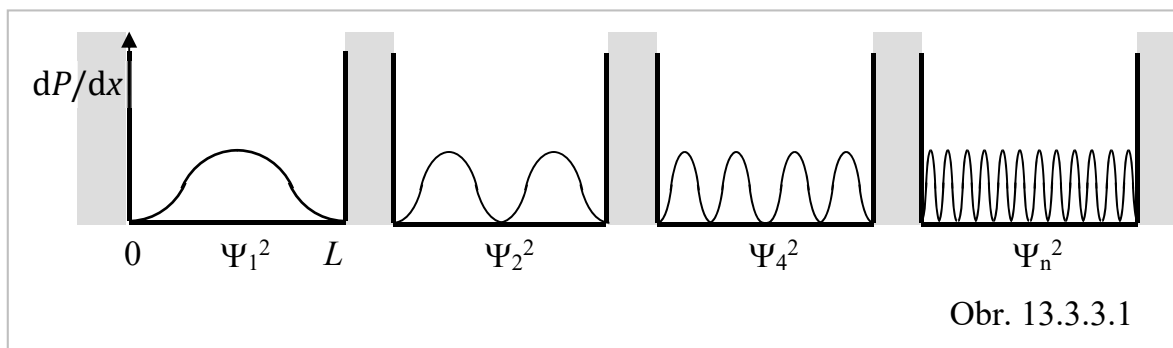
$$\text{b) } E_2 - E_1 \cong 10^{-17} \text{ J} \cong 10^2 \text{ eV.}$$

Výsledok príkladu poukazuje na skutočnosť, že kvantovanie energie elektrónu sa experimentálne dá pozorovať pri sústavách s atomárnymi rozmermi, nie však pri makroskopických sústavách. Pri zmenšovaní rozmerov a hmotnosti objektov sa od istej hranice začínajú významne prejavovať ich kvantové vlastnosti, pričom tento prechod nie je náhly. Hranicu, pri ktorej by dochádzalo k prechodu od kvantového k makroskopickému opisu javov, nemožno jednoznačne určiť.

Ak by išlo o klasický prípad guľky pohybujúcej sa od jednej steny jamy ku druhej, potom pravdepodobnosť nájsť guľku nezávisí od polohy v jame (čiže od súradnice x). V prípade sústavy s atomárnymi rozmermi je pravdepodobnosť výskytu častice v jame opísaná druhou mocninou vlnovej funkcie:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \Rightarrow \frac{dP}{dx} = \psi_n(x) \cdot \psi_n^*(x) = \frac{2}{L} \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x\right). \quad (13.3.3.6)$$

Výraz dP/dx vyjadruje pravdepodobnosť výskytu častice v danom mieste jamy (so súradnicou x) pripadajúcu na jednotku dĺžky, t. j. hustotu pravdepodobnosti jej výskytu. Na nasledujúcom obrázku 13.3.3.1 je nakreslená závislosť funkcie dP/dx pre niekoľko kvantových stavov častice v nekonečne hlbokkej jame.



Zo vzťahu (13.3.3.6), ako aj z obrázku vidno, že pri veľmi vysokej hodnote kvantového čísla n sú už jednotlivé maximá tak blízko pri sebe, že ich už prakticky nemožno rozlíšiť. S rastúcim kvantovým číslom n sa pravdepodobnosť výskytu častice približuje klasickému rozdeleniu pravdepodobnosti – teda nezávislému od polohy častice. Ukazuje sa, že aj iné kvantové javy pri zväčšovaní príslušných kvantových čísel majú limity, ktoré sa zhodujú s klasickým opisom javov. Na túto skutočnosť upozornil už začiatkom XX. storočia Niels Bohr, keď vyslovil svoj **korešpondenčný princíp**, podľa ktorého kvantová mechanika má svoje klasické limity, v ktorých sa jej opis javov zhoduje s opisom prostredníctvom klasickej mechaniky.

Príklad 13.3.3.2 Vypočítajte strednú hodnotu súradnice častice v potenciálovej jame, keď sa nachádza v prvom kvantovom stave .

Riešenie: Pri počítaní strednej hodnoty súradnice častice v jame treba zväžiť pravdepodobnosti, s ktorými sa častica na jednotlivých miestach vyskytuje. Distribúciu hustoty pravdepodobnosti dP/dx udáva vzťah (13.3.3.6), takže strednú hodnotu vypočítame integrálom

$$\langle x \rangle = \int_0^L x dP(x) = \int_0^L x \frac{dP}{dx} dx = \int_0^L x \psi^2 dx = \int_0^L x \frac{2}{L} \sin^2 \left(n \frac{\pi}{L} x \right) dx = \dots = \frac{L}{2}.$$

Výsledok príkladu je logický, lebo v symetrickej jame nájdeme časticu s rovnakou pravdepodobnosťou od stredu vľavo, ako od stredu vpravo. Treba však upozorniť, že takýmto „klasickým spôsobom“ sa v kvantovej mechanike nepočítajú stredné hodnoty

iných fyzikálnych veličín, napríklad hybnosti. Používa sa na to metóda vyplývajúca z **formalizmu kvantovej mechaniky**, ktorý však nie je predmetom tohto textu.

Elektrón v nekonečne hlbokoj jame, aj keď je hrubým modelom atómu, poskytuje základnú informáciu o kvantovaní energie. Aj vo viacelektrónových atómoch existuje sústava hladín energie, pričom na týchto hladinách sú rozmiestnené elektróny. Treba uviesť, že elektróny sa nerozmiestňujú náhodne, ale v súlade s **Pauliho vylučovacím princípom**, ktorý vyslovil na základe podrobného štúdia zákonitostí v spektrách žiarenia vysielaného atómami. Podľa tohto princípu na každej hladine energie sa môžu nachádzať najviac dva elektróny, pričom aj tie sa musia navzájom odlišovať smerom vlastného magnetického, resp. spinového momentu. Ak sa atóm nachádza v stave s minimálnou energiou, nie sú všetky elektróny sústredené na najnižšej hladine energie, ale sú porozdeľované po dvojiciach po jednotlivých hladinách, začínajúc najnižšou hladinou.

Kontrolné otázky

1. Aká je podobnosť medzi elektrónom v potenciálovej jame a atómom?
2. Kedy sú v potenciálovej jame ako riešenia Schrödingerovej rovnice vhodné funkcie typické pre voľné častice?
3. Aké okrajové podmienky sa kladú na riešenia Schrödingerovej rovnice v potenciálovej jame?
4. Aké obmedzenia riešení vznikajú použitím okrajových podmienok?
5. Vyjadrite závislosť energie častice v potenciálovej jame od jej šírky.
6. Je spektrum energií častice v jame spojité, alebo diskrétne?
7. Môže byť minimálna energia častice v jame nulová?
8. Vyslovte Bohrov korešpondenčný princíp.
9. Ako sa využíva vlnová funkcia pri výpočte strednej hodnoty súradnice častice?
10. Vyslovte Pauliho vylučovací princíp.

13.3.4 Princíp superpozície

V predchádzajúcej stati sme našli, že častica v nekonečne hlbkej potenciálovej jame sa môže nachádzať vo vlastných stacionárnych stavoch,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (13.3.4.1)$$

pričom v takomto stave má vlastnú energiu $E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$. Na základe state 13.3.2 potom riešením časovej Schrödingerovej rovnice bude vlnová funkcia

$$\Phi_n(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x) \quad (13.3.4.2)$$

Superpozíciou takýchto vlnových funkcií nazývame novú vlnovú funkciu v tvare

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x, t) \quad (13.3.4.3)$$

kde c_n sú ľubovoľné komplexné čísla. Dosadením vlnovej funkcie $\psi(x, t)$ do 13.3.2.1 sa možno presvedčiť, že aj superpozícia vlastných stavov spĺňa Schrödingerovu rovnicu, a to pre ľubovoľné čísla c_n . Každá konkrétna voľba týchto koeficientov zodpovedá určitej špecifickej počiatočnej situácii častice v potenciálovej jame. Kým v klasickej fyzike by sme v počiatočnom okamihu zadávali počiatočnú polohu a rýchlosť častice, v kvantovej mechanike špecifikujeme počiatočnú situáciu zadáním koeficientov c_n . Dá sa ukázať, že vhodná voľba koeficientov dokáže superpozíciou vyskladať prakticky ľubovoľnú vlnovú funkciu, ktorá z matematického pohľadu predstavuje tzv. počiatočnú podmienku pre časovú Schrödingerovu rovnicu. Aj superpozícia musí byť normalizovaná v zmysle interpretácie vlnovej funkcie ako amplitúdy hustoty pravdepodobnosti nájdenia častice na pozícii x . Jej normu upravíme nasledovne,

$$\begin{aligned} \int_0^L |\psi(x, t)|^2 dx &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \exp[-i(E_m - E_n)t/\hbar] \int_0^L \psi_n^*(x, t) \psi_m(x, t) dx \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2, \end{aligned}$$

kde v druhom kroku sme využili normovanie a ortogonalitu vlastných funkcií

$$\int_0^L \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (13.3.4.4)$$

Podmienka normalizácie predstavuje teda pre koeficienty podmienku

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (13.3.4.5)$$

Najjednoduchšia netriviálna superpozícia pozostáva len z dvoch funkcií, napr. zo základného stavu $n = 1$, a prvého excitovaného stavu $n = 2$,

$$\psi(x, t) = c_1 \exp(-iE_1 t/\hbar) \psi_1(x) + c_2 \exp(-iE_2 t/\hbar) \psi_2(x) \quad (13.3.4.6)$$

pričom ostatné koeficienty sú nulové, $c_n = 0$ pre $n = 3, 4, 5, \dots$. Častica je teda čiastočne v základnom a čiastočne v prvom excitovanom stave. Výsledok rovnice (13.3.4.5) v tomto prípade nadobudne tvar $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, ktorého význam je v tom, že pravdepodobnosť pozorovania častice kdekoľvek v priestore (t. j. $= 1$) je daná súčtom dvoch kladných čísiel $|c_1|^2$ a $|c_2|^2$ charakterizujúcich váhu dvoch vlastných funkcií tvoriacich stav $\psi(x, t)$. Na základe tohto môžeme intuitívne prijať nasledovné všeobecne platné tvrdenie:

Kvadrát modulu koeficienta $|c_n|^2$ má význam **pravdepodobnosti**, že časticu v stave $\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$ by sme namerali v stave opísanom n -tou vlnovou funkciou $\psi_n(x)$.

Pomocou zápisu známeho z matematickej teórie pravdepodobnosti pre podmienenú pravdepodobnosť môžeme uvedené tvrdenie napísať v jednoduchom tvare

$$P(\psi_n|\psi) = |c_n|^2.$$

Princíp superpozície môže viesť na veľmi neintuitívne až absurdné predstavy. Demonštruje to známy provokatívny myšlienkový experiment od E. Schrödingera. V krabici, dokonale izolovanej od vonkajšieho sveta, sa nachádza mačka, nádoba z jedovatým plynom a rádioaktívny atóm. Ak dôjde k rozpadu atómu, uvoľnené žiarenie otvorí nádobu a plyn mačku zabije. Kvantový opis rozpadu atómového jadra vedie na superpozíciu jeho dvoch stavov: rozpadnutého a nerozpadnutého. Tieto dve alternatívy sú následne previazané so superpozíciou nádoby s jedom v stave otvorenom a zatvorenom, ktoré sú nakoniec previazané so superpozíciou stavu mačky v stave mŕtvom a živom. Pre upokojenie čitateľa treba uviesť, že existencia takýchto superpozícií pre makroskopické sústavy je veľmi problematická. Náročnosť zabezpečenia prvého predpokladu – dokonalej izolácie sústavy od okolitého sveta – prudko narastá s počtom jej častíc.

Príklad 13.3.4.1 Uvažujte časticu v stave $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4}} \psi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{4}} \psi_2(x)$, kde $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ opisujú základný a prvý excitovaný stav častice v nekonečne hlbokéj potenciálovej jame. Overte, že takáto superpozičná vlnová funkcia je normovaná a vypočítajte príslušnú strednú energiu častice.

Riešenie:

a)

$$\left(\frac{1}{\sqrt{4}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{4}}\right)^2 = 1,$$

a teda vlnová funkcia je naozaj normovaná.

b) Vzhľadom na význam kvadrátu modulu koeficientu ako pravdepodobnosti namerania častice s n-tou vlastnou funkciou a faktu, že v stave s touto vlastnou funkciou má častica vlastnú energiu E_n bude pre strednú energiu v superpozičnom stave platiť

$$\langle E \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = \frac{1}{4} \frac{h^2}{8mL^2} 1^2 + \frac{3}{4} \frac{h^2}{8mL^2} 2^2 = \quad (13.3.4.7)$$

$$= \frac{h^2}{mL^2} \frac{5}{32}. \quad (13.3.4.8)$$

Príklad 13.3.4.2 Zhodne ako v predchádzajúcom príklade uvažujte časticu v stave $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4}} \psi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{4}} \psi_2(x)$, kde $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ opisujú základný a prvý excitovaný stav častice v nekonečne hlbkej potenciálovej jame. Vypočítajte pravdepodobnosť, že pre $t = 0$ časticu nameriame v ľavej polovici jamy, Zovšeobecnite tento výsledok aj pre $t > 0$.

Riešenie:

a)

$$\begin{aligned} P\left(0 < x < \frac{L}{2}\right) &= \int_0^{L/2} |\psi(x, t)|^2 dx = \\ &= \int_0^{L/2} \frac{1}{4} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} x\right) dx + \int_0^{L/2} \frac{3}{4} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{2\pi}{L} x\right) dx + \\ &\quad + 2 \int_0^{L/2} \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L} x\right) dx = \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{L} \frac{2L}{3\pi} = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi\sqrt{3}}. \end{aligned}$$

V uvedenom superpozičnom stave je teda väčšia pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v ľavej polovici ako v pravej polovici jamy.

b)

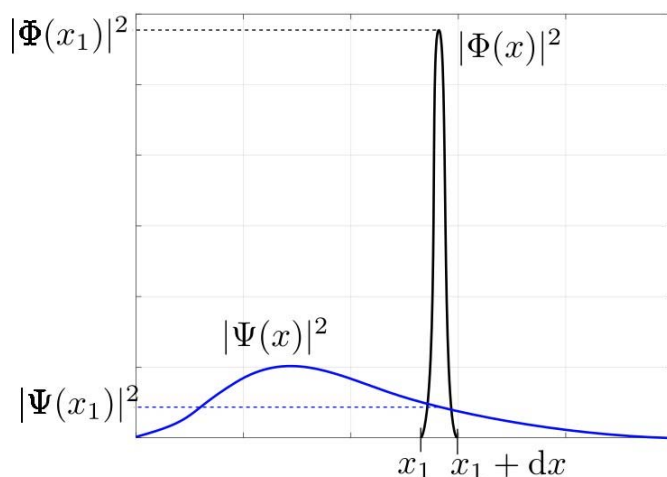
$$\begin{aligned} P(0 < x < L/2, t) &= \int_0^{L/2} |\psi(x, t)|^2 dx = \\ &= \int_0^{L/2} \frac{1}{4} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} x\right) dx + \int_0^{L/2} \frac{3}{4} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{2\pi}{L} x\right) dx + \end{aligned}$$

$$+2 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar] \int_0^{L/2} \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) dx =$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi\sqrt{3}} \cos(\omega t), \text{ kde } \omega = \frac{3h}{16\pi mL^2}$$

Pravdepodobnosť výskytu častice v ľavej (a teda aj v pravej) polovici periodicky osciluje okolo hodnoty 1/2 s periódou $T = 2\pi/\omega$. Toto správanie čiastočne pripomína klasický pohyb, pri ktorom by sa častica s nenulovou kinetickou energiou periodicky odrážala od ľavej a pravej steny potenciálovej jamy.

13.3.5 Meranie v kvantovej mechanike



Obr. 13.3.5.1 Ak $\psi(x)$ je vlnová funkcia častice pred zmeraním jej súradnice, a $|\psi(x_1)|^2$ je hustota pravdepodobnosti, že časticu nájdeme na intervale $(x_1, x_1 + dx)$, potom okamžite po nameraní jej súradnice v tomto intervale sa hustota pravdepodobnosti musí zmeniť na výrazne lokalizovanú funkciu $|\Phi(x)|^2$. Takáto okamžitá zmena vlnovej funkcie $\psi(x) \rightarrow \Phi(x)$, ako dôsledok uskutočneného merania, sa nazýva **kolaps vlnovej funkcie**.

V predchádzajúcej časti sme videli, že stredná energia častice v kvantovom stave

$$\psi(x, t) = c_1 \exp(-iE_1 t/\hbar) \psi_1(x) + c_2 \exp(-iE_2 t/\hbar) \psi_2(x) \quad (13.3.5.1)$$

má veľkosť

$$\langle E \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 \quad (13.3.5.2)$$

Keďže koeficienty c_1 a c_2 môžu byť ľubovoľné komplexné čísla spĺňajúce normalizačnú podmienku (13.3.4.5), tak aj stredná energia častice môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu medzi E_1 a E_2 . Ako potom máme rozumieť tvrdeniu, že energia je kvantovaná?

Odpoveďou je interpretácia vlnovej funkcie a s tým súvisiaci opis merania na fyzikálnej sústave. Najprv si pripomeňme štatistickú interpretáciu z hľadiska merania

polohy. Ak sa častica nachádza v kvantovom stave $\Psi(x, t)$, potom $|\Psi(x_1, t)|^2 dx$ je pravdepodobnosť, že ju nameriame na pozícii z intervalu $(x_1, x_1 + dx)$, (Obr. 13.3.5.1). Táto pravdepodobnosť je typicky číslo menšie než 1, no v okamihu keď meranie prebehlo, a na danom mieste sme časticu zaregistrovali, tak aspoň nasledujúci krátky okamih sa na tom istom mieste bude častica nachádzať takmer s určitosťou. Vlnová funkcia sa teda musí po detegovaní častice na pozícii $(x_1, x_1 + dx)$, diametrálne zmeniť z $\psi(x, t)$ na inú, povedzme $\Phi(x)$, pre ktorú bude platiť $|\Phi(x_1)|^2 dx \approx 1$ pre $x \in (x_1, x_1 + dx)$ a inde $|\Phi(x)|^2 \sim 0$. Takúto okamžitú zmenu vlnovej funkcie po meraní nazývame jej kolaps.

Situácia je podobná aj pri meraní energie častice. Hoci pravdepodobnosť, že častici nameriame energiu E_1 je číslo $|c_1|^2$ s veľkosťou medzi 0 a 1, v prípade že jej túto energiu zmeriame v konkrétnom okamihu, častica sa už nebude nachádzať v stave $\Psi(x, t)$ ale v stave $\psi_1(x)$. Nasledovné meranie by už len potvrdilo túto hodnotu jej energie. Aj v tomto prípade zmenu vlnovej funkcie z $\Psi(x, t)$ na $\psi_1(x)$ nazývame jej kolaps a táto zmena je spôsobená zrealizovaným meraním jej energie.

Kým vyššie sme diskutovali o jedinom meraní na častici v predpísanom kvantovo-mechanickom stave, vypočítaná stredná energia (13.3.5.2) nadobúda zmysel až potom, ako časticu mnohokrát pripravíme v identickom stave $\Psi(x, t)$ a mnohokrát budeme realizovať meranie jej energie. Ak počet takýchto opakovaní bude N , potom $|c_1|^2 \cdot N$ -krát nameriame energiu častice E_1 a $|c_2|^2 \cdot N$ -krát nameriame energiu častice E_2 .

Problém merania v kvantovej mechanike je oblasťou mnohých zaujímavých otázok a hľadania filozofického porozumenia vzťahu medzi kvantovým opisom fyzikálneho sveta a jeho vnímaním vedomým pozorovateľom. Zároveň ale mnohé prekvapivé a zdanlivo rozumu odporujúce prejavy kvantovej fyziky nachádzajú svoje využitie pri technologickom pokroku ako napr. v polovodičových technológiách v mikroelektronike, pri objave a využití lasera a supravodičov alebo aktuálne aj pri návrhoch algoritmov pre kvantové počítače budúcnosti alebo v kvantovej kryptografii.

13.3.6 Qubit

Kvantová informatika je pomerne nová rozvíjajúca sa vedecká disciplína. V tradičnej informatike bit predstavuje základnú jednotku informácie a to obsah premennej s odpoveďou na otázku typu áno/nie alebo „0“ či „1“. Bit môže byť realizovaný ako klasická dvojstavová sústava: tranzistor v priepustnom alebo závernom stave alebo napätie na úrovni 5 V alebo 0 V.

Qubit predstavuje základnú jednotku kvantovej informácie a možno ho taktiež realizovať viacerými spôsobmi. V tejto stati si qubit zavedieme pomocou kvantových stavov častice v nekonečne hlbokéj potenciálovej jame, o ktorých už máme určitú predstavu.

Nech stav „0“ zodpovedá situácii, keď sa častica nachádza v základnom stave $\psi_1(x)$ a stav „1“ situácii častice v excitovanom stave $\psi_2(x)$. Na rozdiel od klasického bitu, qubit môže byť aj v ľubovoľnej superpozícii týchto stavov:

$$\Psi(x, t = 0) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x). \quad (13.3.6.1)$$

Koeficienty c_1 a c_2 môžeme považovať za prvky (súradnice) stĺpcového vektora

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (13.3.6.2)$$

Pri takomto zápise zodpovedajú logická nula a logická jednotka „jednotkovým vektorom“

$$\mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (13.3.6.3)$$

Superpozícia umožňuje uvažovať s dvomi alternatívami súčasne, ako je to napríklad v stave

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (13.3.6.4)$$

v ktorom je 50% pravdepodobnosť, že časticu nameriame v stave $\psi_1(x)$ a lebo aj v stave $\psi_2(x)$, ako sa presvedčíme jednoduchým výpočtom

$$P(\psi_1|+) = |c_1|^2 = \frac{1}{2}, \quad P(\psi_2|+) = |c_2|^2 = \frac{1}{2}. \quad (13.3.6.5)$$

Využívaním takýchto stavov v kvantových algoritmoch dochádza k dramatickému zníženiu výpočtovej náročnosti niektorých úloh oproti ich klasickým implementáciám.

Podobne ako klasický počítač, aj kvantový počítač sa musí skladať z viacerých qubitov, nad ktorými sa uskutočňujú algebrické operácie. Viacero qubitov možno realizovať viacerými interagujúcimi časticami, nachádzajúcimi sa v blízkych potenciálových jamách, no opis takýchto úloh ide za rámec tohto úvodného kurzu. V nasledujúcej časti ukážeme ako možno fyzikálne realizovať aspoň najjednoduchšie kvantové operácie na jedinom qubite.

13.3.7 Časový vývoj dvojhladinovej sústavy

Uvažujme časticu v potenciálovej jame, na ktorú určitú dobu $t \in (t_a, t_b)$ pôsobí dodatočná sila prostredníctvom zmeny potenciálnej energie $V(x, t)$. Fyzikálne si môžeme predstaviť, že v čase od $t = t_a$ po čas $t = t_b$ bude na časticu v jame pôsobiť elektrické pole $E(x, t)\vec{l}$. Jemu zodpovedajúcu potenciálnu energiu zapíšeme v tvare

$$V(x, t) = -q \int_0^x E(x, t) dx, \quad (13.3.7.1)$$

kde q je elektrický náboj častice. Schrödingerova rovnica pre takúto úlohu má tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) \quad (13.3.7.2)$$

Rovnicu nebudeme riešiť presne ale budeme predpokladať že výsledok možno napísať v tvare superpozície (13.3.4.6) dvoch stavov $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ s časovo-premennými koeficientmi $c_1(t)$ a $c_2(t)$. Dosadením do rovnice (13.3.7.2) nachádzame

$$i\hbar[\dot{c}_1\psi_1(x) + \dot{c}_2\psi_2(x)] = E_1c_1\psi_1(x) + E_2c_2\psi_2(x) + V(x, t)[c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)], \quad (13.3.7.3)$$

kde bodka nad koeficientmi znamená časovú deriváciu $\dot{c} = (\partial c / \partial t)$ a využili sme, že stavu $\psi_1(x)$ prislúcha vlastná energia E_1 a stavu $\psi_2(x)$ vlastná energia E_2 . Ak následne vynásobíme nájdenu rovnici vlnovou funkciou $\psi_1^*(x)$, preintegrujeme ju od 0 po L a využijeme vzťahy ortogonalít a normovania, tak nájdeme prvú rovnicu

$$i\hbar\dot{c}_1 = E_1c_1 + V_{11}c_1 + V_{12}c_2, \quad (13.3.7.4)$$

kde

$$V_{1j} = -\int_0^L \psi_1^*(x) V(x, t) \psi_j(x) dx, \quad j = 1, 2 \quad (13.3.7.5)$$

Podobne, ak rovnicu (13.3.7.3) vynásobíme $\psi_2^*(x)$, a preintegrujeme, nájdeme rovnicu aj pre časový vývoj druhého koeficientu

$$i\hbar\dot{c}_2 = E_2c_2 + V_{21}c_1 + V_{22}c_2, \quad (13.3.7.6)$$

Nájdene dve rovnice predstavujú sústavu dvoch obyčajných lineárnych diferenciálnych rovníc, ktoré možno zapísať aj v maticovom tvare

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (13.3.7.7)$$

Na jej riešenie sú z matematiky známe analytické, alebo v prípade od času závislých potenciálov numerické metódy, ktorých výsledkom je unitárna **matica propagátora** s označením $U(t_b, t_a)$. Pomocou propagátora možno vyjadriť koeficienty v koncovom čase t_b pomocou ich hodnôt v začiatočnom čase t_a :

$$\begin{pmatrix} c_1(t_b) \\ c_2(t_b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11}(t_b, t_a) & U_{12}(t_b, t_a) \\ U_{21}(t_b, t_a) & U_{22}(t_b, t_a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t_a) \\ c_2(t_a) \end{pmatrix} \quad (13.3.7.8)$$

V prípade, že potenciál $V(x, t)$ je nulový, je aj $V_{ij} = 0$, a vtedy priamym integrovaním rovníc (13.3.7.8) možno nájsť propagátor v tvare

$$U(t_b, t_a) = \begin{pmatrix} \exp\{-iE_1(t_b - t_a)/\hbar\} & 0 \\ 0 & \exp\{-iE_2(t_b - t_a)/\hbar\} \end{pmatrix}, \quad (13.3.7.9)$$

v súhlase so vzťahom (13.3.5.1). Takýto propagátor určuje zmenu koeficientov c_i , ak na sústave nebol aplikovaný žiaden dodatočný potenciál, len sme počkali konečnú dobu $t_b - t_a$. Nájsť výsledný propagátor pre nenulový potenciál je náročnejšie a pre časovo-závislý potenciál je to často aj analyticky nemožné. Podstatné ale je, že pre zvolený potenciál existuje určitá matica propagátora, pomocou ktorej môžeme študovať jeho

pôsobenie na stav qubitu, teda na zmenu koeficientov c_1 a c_2 . Takéto postupné pôsobenie rôznych propagátorov na qubit predstavuje jednoduchý kvantový algoritmus.

Príklad 13.3.7.3

Ukážte, že propagátor NOT

$$U_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13.3.7.10)$$

zmení stav $\Psi(x) = \psi_1(x)$ ($c_1 = 1$; $c_2 = 0$) na $\Psi(x) = \psi_2(x)$ ($c_1 = 0$; $c_2 = 1$).

Riešenie: Maticovým násobením pôvodných stavov propagátorom nájdeme

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (13.3.7.11)$$

NOT teda podobne, ako pri klasických počítačoch, zmení stav reprezentujúci logickú jednotku „1“ na stav „0“ a naopak, robí teda jeho logickú negáciu.

Príklad 13.3.7.4

Pri vytváraní kvantových algoritmov je veľmi užitočný propagátor, ktorý sa nazýva **Hadamardovo hradlo**

$$U_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (13.3.7.12)$$

Ukážte, že jeho pôsobením, na vlastný stav častice $\psi_1(x)$ vytvorí sa stav „+“, pri ktorom existuje 50% pravdepodobnosť, že by sme časticu namerali v stave $\psi_1(x)$ a 50% pravdepodobnosť, že by sme ju namerali v stave $\psi_2(x)$.

Riešenie: Opäť sa presvedčíme jednoduchým výpočtom:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = c \quad (13.3.7.13)$$

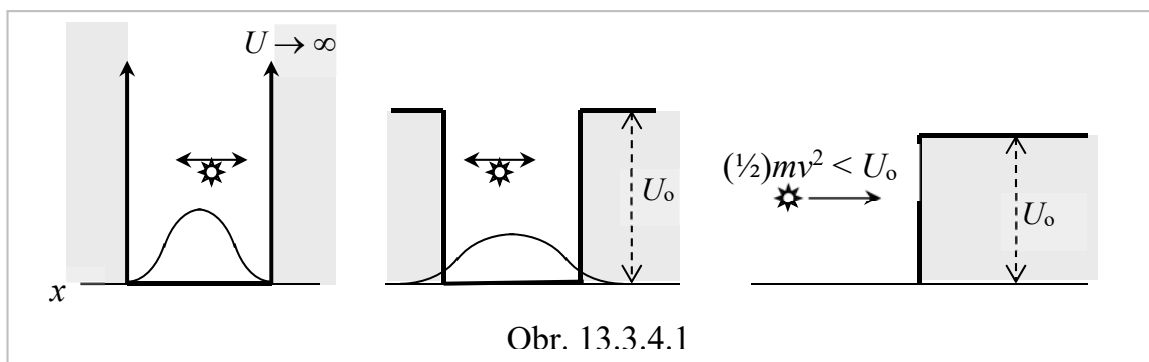
Prirodzene, Hadamardovo hradlo nemá analógiu pri klasických počítačoch, klasický bit nemôže byť zároveň v stave logickej jednotky aj nuly.

13.4 Ďalšie aplikácie Schrödingerovej rovnice

Podrobný opis riešenia Schrödingerovej rovnice v prípade častice v nekonečne hlbkej potenciálovej jame bol ukážkou jej použitia. Nie je cieľom tohto textu podrobne uvádzať riešenia ďalších aplikácií tejto rovnice, lebo matematicky sú pomerne náročné. Možno ich nájsť v špecializovaných učebniciach kvantovej mechaniky⁴. V nasledujúcom texte len poukážeme na niektoré zaujímavé prípady, napíšeme príslušnú Schrödingerovu rovnicu a uvedieme výsledok jej riešenia.

13.4.1 Tunelový jav

V predošlom článku 13.3.3 bol opísaný prípad častice uväznenej v nekonečne hlbkej potenciálovej jame. Cez nekonečne vysoké steny sa častica nemohla dostať do priestoru mimo jamy. Ak by jama mala konečnú hĺbku (U_0), potom z riešenia Schrödingerovej rovnice vyplýva pozoruhodný výsledok – častica by mala istú malú pravdepodobnosť preniknúť mimo jamy aj v prípade, keby jej energia E bola menšia než energia U_0 potrebná na únik z jamy (Obr. 13.3.4.1). Podobná situácia nastáva, keď častica prilieta k potenciálovej bariére (schodu) s kinetickou energiou nepostačujúcou na jej prekonanie, t. j. keď $(1/2)mv^2 < U_0$, kde U_0 je „výška“ schodu. Z klasického pohľadu častica nemôže preniknúť do oblasti za schodom, kde je potenciálna energia vyššia než jej kinetická energia, musí sa od potenciálového schodu odraziť. Ale



v mikrosвете, kde sa výrazne prejavujú vlnové vlastnosti častíc, to vyzerá inak. Jestvuje istá nenulová pravdepodobnosť, že časticu nájdeme aj za schodom, pričom táto pravdepodobnosť rastie, keď sa veľkosť energie častice približuje k výške schodu U_0 .

Tento významný výsledok sa dá získať riešením bezčasovej Schrödingerovej rovnice, ktorý uvedieme bez uvádzania detailov riešenia. Pravdepodobnosť, že častica prenikne do vzdialenosti x za schod, je vyjadrená vzťahom

$$P \sim \exp \left\{ -\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}. \quad (13.3.4.1)$$

⁴ Napríklad skriptá P. Markoš: Moderná fyzika, Spektrum STU 2012

Ak ku schodu prichádza nie jedna, ale mnoho častíc s rovnakou kinetickou energiou, potom časť z nich sa od schodu odrazí, ale časť prenikne kúsok do oblasti s vyššou potenciálnou energiou.

Ak schod má konečnú dĺžku d , ide o potenciálovú bariéru. Dosadením dĺžky (hrúbky) bariéry do tohto vzťahu, získame pravdepodobnosť prechodu častice cez bariéru – ide o **tunelový jav**. Tunelový preto, lebo častica nemá dostatok energie na „preskočenie“ bariéry, ale prechádza cez ňu akoby tunelom. Riešenie Schrödingerovej rovnice, po zohľadnení normovania vlnových funkcií, poskytuje pre pravdepodobnosť prechodu častice potenciálovou bariérou vzťah:

$$P = \frac{4}{1 + [(U_0 - E)/2E]^2} \exp \left\{ -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}, \quad (13.3.4.2)$$

podľa ktorého pravdepodobnosť exponenciálne klesá s rastúcou hrúbkou bariéry.

Tunelový jav sa uplatňuje vo viacerých prírodných procesoch, napríklad pri rádioaktívnych premenách jadier atómov, keď z jadra uniká častica alfa, alebo v tzv. tunelových diódach.

Príklad 13.4.1.1 Vypočítajte s akou pravdepodobnosťou prenikne elektrón (hmotnosť $m \cong 10^{-30}$ kg) cez potenciálovú bariéru, ktorej hrúbka sa rovná bežnej medziatómovej vzdialenosti 3×10^{-10} m, keď jeho energia je o 1 eV menšia než výška bariéry.

Výsledok: $P \cong 0,1$.

Poznámka: Ide teda o jav s pomerne veľkou hodnotou pravdepodobnosti realizácie.

Kontrolné otázky

1. Čo rozumieme pod názvom tunelový jav?
2. Aké veličiny vstupujú do vzťahu vyjadrujúceho pravdepodobnosť prechodu častice cez potenciálovú bariéru?
3. Uveďte príklad výskytu tunelového javu v prírode.
4. Môže sa tunelový jav uplatniť pri makroskopických telesách?

14.4.2 Harmonický oscilátor

Kmitanie atómov v tuhých látkach sa dá v istom priblížení opísať akoby išlo o kmitanie harmonických oscilátorov. Tie podľa kvantovej mechaniky môžu nadobúdať len určité frekvencie, ktoré sa dajú získať riešením Schrödingerovej rovnice. Energia kmitania oscilátorov v tuhých látkach je súčasťou ich vnútornej energie a kvantová mechanika využitím tohto modelu dokázala správne vysvetliť závislosť ich tepelnej kapacity od teploty.

V prípade častice v potenciálovej jame sme vychádzali z predpokladu, že potenciálna energia častice je nulová, čo výrazne zjednodušilo Schrödingerovu rovnicu. Pri harmonickom oscilátore však závisí od výchylky z rovnovážnej polohy. Takto vyjadrenú energiu treba dosadiť do Schrödingerovej rovnice, ktorej riešením získame vlastné hodnoty energie oscilátora, aj s príslušnými vlastnými funkciami.

Potenciálna energia harmonického oscilátora je v jednorozmernom prípade vyjadrená vzťahom (vzťah $\rightarrow$ 3.2.2.10)

$$U = \frac{1}{2} kx^2$$

takže bezčasová Schrödingerova rovnica (13.3.2.3) nadobudne tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\psi = E\psi \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} kx^2 \right) \psi = 0.$$

Jej riešením, ktoré nie je celkom jednoduché, sú vlastné hodnoty energie harmonického oscilátora:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (13.3.4.3)$$

kde ω je jeho vlastná uhlová frekvencia a n kvantové číslo, ktoré môže nadobúdať hodnoty 0, 1, 2, ...

Na výsledku je najzaujímavejšia skutočnosť, že energia oscilátora nie je nulová ani pri nulovej hodnote kvantového čísla. To má za následok, že atómy v látkach (chápané ako oscilátory) neprestávajú kmitať ani v najnižšom (základnom) kvantovom stave, ktorý je typický pre teploty v blízkosti absolútnej nuly. Výsledok sa týka aj častice v potenciálovej jame, kde sme videli, že to súvisí s Heisenbergovým princípom neurčitosti.

Vlastné funkcie harmonického oscilátora sú zložitejšie než v prípade jednoduchej potenciálovej jamy, ide o tzv. Hermitove polynómy, ktoré tu neuvádzame.

Aj harmonický oscilátor môže mať dva či tri stupne voľnosti, čo má rovnaký dôsledok ako pri častici v potenciálovej jame.

13.4.3 Atóm vodíka

Atóm vodíka predstavuje trojrozmerný útvar s guľovou symetriou (tri stupne voľnosti), takže očakávame, že stav elektrónu v atóme bude opísaný tromi kvantovými číslami. Tie sú súčasťou riešenia príslušnej Schrödingerovej rovnice.

Potenciálna energia elektrónu v elektrostatickom poli protónu závisí od ich vzájomnej vzdialenosti, a je vyjadrená vzťahom ($\rightarrow$ 8.1.4.4)

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r},$$

pričom vzdialenosť r sa v karteziánskej sústave vyjadruje pomocou súradníc x, y, z . Bezčasová Schrödingerova rovnica v takomto prípade má tvar parciálnej diferenciálnej rovnice troch premenných

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0,$$

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

Guľová symetria prípadu však nabáda na použitie sférickej súradnicovej sústavy s premennými r, ϑ, φ , pričom karteziánske a sférické súradnice sú viazané vzťahmi

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta.$$

Pomocou nich môžeme Schrödingerovu rovnicu prepísať, čím nadobudne tvar

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} (r^2 \sin^2 \vartheta) \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0. \end{aligned}$$

Táto komplikovaná rovnica sa dá našťastie postupne rozdeliť (separovať) na tri rovnice tak, že vlnová funkcia Ψ , ktorá je funkciou troch premenných, sa vyjadří ako súčin troch funkcií, pričom každá z nich je funkciou len jednej premennej:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

Takýmto postupom z pôvodnej parciálnej diferenciálnej rovnice vzniknú tri obyčajné diferenciálne rovnice, ktorých riešenie je už jednoduchšie. Rovnice, ani ich riešenia, tu nebudeme uvádzať, sú dostupné v bohatej literatúre o kvantovej mechanike⁵. Riešenie troch diferenciálnych rovníc vedie na kvantovanie troch veličín – energie,

⁵ V slovenčine napríklad Pišút, Gomolčák, Černý : Úvod do kvantovej mechaniky (1983), Markoš: Moderná fyzika (2012)

momentu hybnosti a priemetu vektora momentu hybnosti do smeru pôsobiaceho vonkajšieho poľa. Stav atómu vodíka sa preto opisuje tromi kvantovými číslami⁶:

hlavným n , orbitálnym l a magnetickým m_l ,

Z riešenia rovníc vyplýva, že môžu nadobúdať len tieto hodnoty

$$\begin{aligned} n &\rightarrow 1, 2, 3, \dots \\ l &\rightarrow 0, 1, 2, \dots, (n-1) \\ m_l &\rightarrow 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \quad (13.3.4.4)$$

Hlavné kvantové číslo n vystupuje vo vzťahu vyjadrujúcom energiu atómu vodíka (sústavy protón – elektrón), keď sa elektrón nachádza na n -tej hladine energie:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right).$$

Pre energiu atómu vodíka v základnom stave ($n = 1$) z tohto vzťahu vyplýva hodnota

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}.$$

Orbitálne kvantové číslo l súvisí s kvantovaním momentu hybnosti L elektrónu, pričom z riešenia rovníc vyplýva výsledok

$$L_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar.$$

Súvisí to so skutočnosťou, že pri obiehaní okolo protónu elektrón môže mať pri rovnakej energii rôzne momenty hybnosti (klasicky sa to prejavuje rôznou excentricitou elipsy, po ktorej obieha, t. j. rôznym tvarom orbity).

Tretie kvantové číslo m_l súvisí s kvantovaním priemetu vektora momentu hybnosti do zvoleného smeru⁷. Veľkosť tejto polohovej energie závisí od veľkosti uhla medzi vektorom orbitálneho magnetického momentu a vektorom magnetickej indukcie magnetického poľa. Keďže vektor magnetického momentu je rovnobežný s vektorom $\vec{L}$ momentu hybnosti, tak nakoniec je kvantovaná veľkosť priemetu L_z tohto vektora do smeru vonkajšieho magnetického poľa:

$$L_z = m_l\hbar.$$

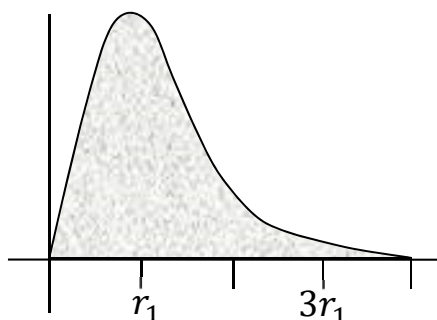
Hustota pravdepodobnosti dP/dr výskytu elektrónu v okolí jadra atómu vodíka na prvej kvantovej dráhe je na nasledujúcom obrázku, kde r_1 je polomer prvej Bohrovej

⁶ Úplný opis stavu obsahuje aj kvantové číslo vyjadrujúce spin elektrónu, čo však v tomto zjednodušenom opise nebudeme brať do úvahy

⁷ Ide o magnetický moment vytvorený obiehaním elektrónu okolo protónu. Elektrón má však aj vlastný magnetický moment, súvisiaci so spinom, ktorého sa týka osobitné, polčíselné kvantovanie. Problematikou spinu sa však tento text nezaobrá, je opísaná v učebniciach kvantovej mechaniky.

kružnice ($\rightarrow$ vzťah 13.1.5.9). Veľkosť polomeru vychádza rovnaká aj z riešenia Schrödingerovej rovnice.

V základnom kvantovom stave, keď hlavné kvantové číslo $n = 1$, tak orbitálne kvantové číslo musí byť nulové ($\rightarrow$ 13.3.4.4), takže nulový je aj moment hybnosti elektrónu. To znamená, že elektrón si nemožno predstaviť ako obiehajúci okolo jadra po kružnici, či elipse. Tým sa výsledok kvantovej mechaniky zásadne odlišuje od Bohrovho modelu. Vlnová funkcia prislúchajúca tomuto stavu závisí len od vzdialenosti elektrónu od jadra, takže hustota pravdepodobnosti výskytu elektrónu je guľovo symetrická, pričom maximum nadobúda práve v „Bohrovej“ vzdialenosti r_1 .



Kvantová mechanika, na rozdiel od Bohrovho modelu, dokáže vysvetliť aj intenzitu spektrálnych čiar, lebo sa pomocou nej dajú vypočítať pravdepodobnosti prechodu sústavy medzi jednotlivými hladinami energie.

Katión atómu hélia He^+ predstavuje podobnú sústavu ako atóm vodíka, lebo opäť ide o jadro a jeden elektrón. Jadro atómu hélia⁸ sa skladá z dvoch protónov a dvoch neutrónov, takže v porovnaní s jadrom vodíka pôsobí na elektrón dvojnásobnou silou. Sila pôsobiaca medzi jadrom a elektrónom je úmerná súčinu veľkostí ich nábojov, v prípade vodíkoveho atómu súčinu $e \cdot e = e^2$, v katióne hélia súčinu $2e \cdot e = 2e^2$. To má vplyv aj na závislosť potenciálnej energie elektrónu od vzdialenosti od jadra, a teda aj na člen potenciálnej energie v Schrödingerovej rovnici. Výsledkom je podobná sústava hladín energie ako v atóme vodíka, ale posunutá. Energia základného stavu, v porovnaní s energiou základného stavu atómu vodíka je v absolútnej hodnote štvornásobná, predstavuje $-54,4$ eV. Treba ešte poznamenať, že jadro hélia, ktoré je zložitejšie, má vplyv na tzv. jemnú štruktúru hladín energie.

⁸ Ide o jadro najčastejšie sa vyskytujúceho izotopu hélia.

13.4.4 Sústavy troch a viacerých častíc.

Katión hélia je ešte prípadom sústavy dvoch častíc, ktorá sa dá klasicky, ale aj v kvantovej mechanike riešiť exaktne. Ale atóm hélia už predstavuje problém troch častíc (jadro + dva elektróny)⁹, vodíková molekula problém štyroch častíc. Riešenie Schrödingerovej rovnice pri takýchto sústavách sa preto opiera o aproximatívne metódy, tzv. poruchovú metódu, alebo o variačnú metódu.

Metodicky dôležitou sústavou troch častíc je **ión molekuly vodíka** H_2^+ . Klasická predstava takejto sústavy predpokladá dva protóny navzájom separované vzdialenosťou cca 10^{-10}m , s elektrónom obiehajúcim okolo nich po dráhe s tvarom osmičky, s priesečníkom v strede medzi protónmi. Pohybujúci elektrón má svojim záporným nábojom (častejšie sa nachádzajúcim medzi protónmi) kompenzovať odpudivú silu pôsobiacu medzi kladne nabitými protónmi, čím sa má vytvoriť stabilná konfigurácia.

V Schrödingerovej rovnici v takomto prípade vystupuje potenciálna energia, v ktorej sa zohľadňuje príťažlivé pôsobenie medzi elektrónom a dvoma protónmi, ako aj odpudivá sila medzi protónmi. V zjednodušenom výpočte sa však polohy protónov považujú za fixné, takže s ich vzájomnou potenciálnou energiou sa pri výpočte neuvažuje. Táto možnosť vyplýva zo skutočnosti, že jadrá sú podstatne ťažšie než elektrón, takže sa pohybujú podstatne pomalšie. Člen vyjadrujúci potenciálnu energiu bez vzájomného pôsobenia protónov, má tak tvar

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right),$$

kde r_a a r_b predstavujú vzdialenosti elektrónu od jadra a , resp. jadra b .

Riešenie Schrödingerovej rovnice poskytuje dve vlastné funkcie, nazývané *párna* a *nepárna* označované ako Ψ_g resp. Ψ_u , ktorým prislúchajú mierne odlišné hodnoty vlastnej energie elektrónu E_g resp. E_u . Z výpočtu vyplýva, že rozdiel týchto energií závisí od vzdialenosti R medzi protónmi, pričom s rastúcou vzdialenosťou sa exponenciálne znižuje. Pravdepodobnosť výskytu elektrónu je pritom väčšia v strede medzi protónmi pre párnú vlastnú funkciu, čo sprostredkúva ich vzájomnú viazanosť.

Tento výsledok má dva významné aspekty. Predovšetkým sa ukázalo, že hustota pravdepodobnosti výskytu elektrónu je najväčšia medzi jadrami (protónmi), čím sa vysvetlila podstata kovalentnej chemickej väzby. Heitler a London v roku 1927 svojím výpočtom ukázali, že to platí aj v molekule vodíka H_2 .

Druhým významným aspektom je rozštiepenie pôvodnej hladiny energie atómu vodíka na dve hladiny. Ako ukazujú náročné výpočty, v prípade pravidelného periodického usporiadania n – atómov (napríklad v kryštáli polovodiča), hladina sa štiepi na n hladín nachádzajúcich sa tesne pri sebe – vytvára sa interval energií,

⁹ Pokiaľ jadro hélia považujeme za jednu časticu.

nazývaný aj ako *pásmo energií*, alebo často ako *pás energií*. Keďže medzi hladinami v izolovaných atómoch sú medzery, tieto sa do určitej miery zachovávajú aj v kryštáloch a tak tam vznikajú intervaly (pásma) dovolených a zakázaných energií. Na tejto skutočnosti je založená napríklad teória elektrickej vodivosti kovov, polovodičov, ale aj „nevodivosti“ dielektrík.

Problematika riešená metódami kvantovej mechaniky je však matematicky veľmi náročná, vyžaduje si osobitný opis, presahujúci možnosti základného kurzu fyziky. V zozname literatúry sú uvedené knihy, vhodné na štúdium kvantovej mechaniky.

DODATKY

D1

Dôkaz vzťahu medzi objemovou hustotou energie w v dutine a intenzitou vyžarovania stien M

Ak by zo steny dutiny žiarenie prúdilo len v smere na stenu kolmom, vzťah medzi M a w by bol jednoduchý: $M = cw$, kde c je rýchlosť ktorou sa žiarivá energia šíri, t. j. rýchlosť svetla. Vzťah sa dá odvodiť nasledujúcou úvahou. Intenzita vyžarovania je definovaná podielom

$$M = \frac{\Delta E}{\Delta S \Delta t}, \quad (a)$$

teda ako energia vyžiarená z plochy s jednotkovým obsahom za jednotku času. Ak sa v priestore nachádza energia s objemovou hustotou w a táto sa šíri rýchlosťou c jediným smerom (napríklad potrubím), cez plochu s obsahom ΔS prejde za časový interval Δt energia

$$\Delta E = wc\Delta t\Delta S. \quad (b)$$

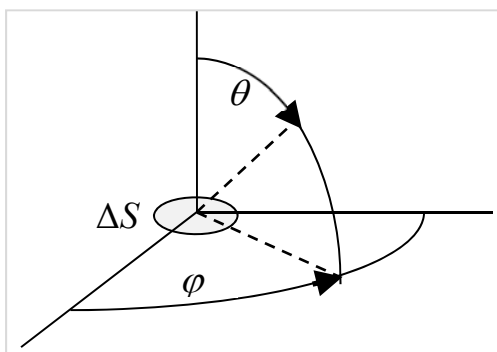
Porovnaním vzťahov (a) a (b) získame výsledok

$$M = cw.$$

V dutine však prúdi žiarenie všetkými smermi rovnako, izotropne, takže môžeme predpokladať, že na jednotkový priestorový uhol pripadá hustota toku energie

$$L_e = \frac{cw}{4\pi},$$

kde číslo 4π predstavuje plný priestorový uhol, t. j. 4π sr (steradiánov). Na elementárny priestorový uhol $d\Omega$ tak pripadá časť $L_e d\Omega$. (Elementárny priestorový uhol sa vo sférickej súradnicovej sústave vyjadruje v tvare $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \rightarrow$ obrázok.) Na malú plošku ΔS steny dutiny dopadá žiarivá energia zo všetkých strán, takže celkový príkon energie na túto plošku vypočítame integráciou cez celý polpriestor nad ploškou, čiže integráciou cez priestorový uhol 2π sr. Ploška ΔS sa však javí v plnej veľkosti iba pri pohľade v smere jej normály, pri pohľade zo smeru odchýleného od normály o uhol θ vidno iba jej priemet $\Delta S' = \Delta S \cos \theta$. To treba pri počítaní energie dopadajúcej na plošku zohľadniť.



Preto budeme počítat výraz

$$d\Phi = \Delta S \cos \theta L_e d\Omega,$$

resp. jeho integrál (príkion energie na plôšku ΔS)

$$\begin{aligned}\Phi &= \Delta S \int_{2\pi} \cos \theta L_e d\Omega = \Delta S \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \theta \frac{cW}{4\pi} \sin \theta d\theta d\varphi = \\ &= \Delta S \frac{cW}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi.\end{aligned}$$

Ako sa možno ľahko presvedčiť, integrál má hodnotu π , takže dostaneme výsledok

$$\Phi = \Delta S \frac{cW}{4}. \quad (c)$$

V ustálenom stave musí za jednotku času rovnaké množstvo energie plôšku opúšťať, čo sa rovná výrazu

$$\Phi = M\Delta S. \quad (d)$$

Porovnaním výrazov (c) a (d) dostávame vzťah medzi intenzitou vyžarovania stien dutiny a objemovou hustotou žiarivej energie v dutine

$$M = \frac{cW}{4}.$$

D2

Počet oscilátorov v dutine

Počet oscilátorov v dutine, ktoré spadajú do intervalu frekvencií $(f, f + df)$, bol pôvodne vypočítaný na základe predstáv klasickej fyziky (pomocou stojatých vln), ale matematický postup pri odvodzovaní tohto počtu sa zjednoduší, ak sa použijú aj predstavy o fotónoch.

Kovová dutina nech má tvar kocky s hranou dĺžky L , čiže má objem $V = L^3$. Z uzavretej dutiny elektromagnetická energia neuniká, ani do nej neprichádza, preto elektromagnetické žiarenie v dutine musí byť vo forme stojatého vlnenia. Na kovových stenách dutiny majú stojaté elektromagnetické vlny uzly, podobne ako struny hudobných nástrojov na svojich koncoch, kde sú uchytené. Ak sa v dutine s tvarom kocky medzi jej protiľahlými stenami nachádza stojatá vlna, potom musí platiť rovnosť

$$n \frac{\lambda}{2} = L, \quad (a)$$

kde n je celé číslo a λ vlnová dĺžka. Ak má stojatá vlna v dutine všeobecnú polohu, jej priemety do smerov zodpovedajúcich hranám kocky, musia spĺňať rovnakú podmienku, t. j. musí platiť

$$n \frac{\lambda}{2} \cos \alpha = L, \quad n \frac{\lambda}{2} \cos \beta = L, \quad n \frac{\lambda}{2} \cos \gamma = L, \quad (b)$$

kde α , β , γ sú uhly, ktoré s hranami kocky zvierajú vektory rýchlosti protismerne sa šíriacich vln, vytvárajúcich stojatú vlnu. Ak použijeme označenie

$$n \cos \alpha = n_x, \quad n \cos \beta = n_y, \quad n \cos \gamma = n_z,$$

d'alšou úpravou prvého zo vzťahov (b) dostaneme

$$n_x = \frac{2L}{\lambda}, \quad (c)$$

pričom číslo n_x , rovnako ako aj n_y a n_z , musí byť celé a nezáporné, aby uzly boli na stenách dutiny. To pravda kladie isté požiadavky na súvislosti medzi uhlami α , β , γ a vlnovou dĺžkou λ , o ktorých však nebudeme ďalej uvažovať. V ďalšej časti už využijeme vlastnosti fotónov, nachádzajúcich sa v dutine. Rovnicu (c) vynásobíme Planckovou konštantou h :

$$hn_x = 2L \frac{h}{\lambda} = 2Lp_x, \quad (d)$$

kde $p_x = h/\lambda$ je podľa vzťahu (13.1.1.4) hybnosť fotónu, v tomto prípade veľkosť jeho zložky v smere osi x . Keď z rovnice (d) osamostatníme práve túto veličinu, a analogickú úpravu urobíme pre ďalšie dva smery v dutine, dostaneme rovnice

$$p_x = \frac{h}{2L} n_x, \quad p_y = \frac{h}{2L} n_y, \quad p_z = \frac{h}{2L} n_z. \quad (e)$$

Sčítaním ich druhých mocnín dostaneme druhú mocninu veľkosti hybnosti fotónu:

$$p^2 = \left(\frac{h}{2L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (f)$$

Trojica celých čísel n_x , n_y , n_z reprezentuje konkrétnu stojatú vlnu v dutine. Zmena čo len jedného z nich znamená prechod k inej vlne, ktorej prislúchajú fotóny s inou hybnosťou a teda inou vlnovou dĺžkou.

Z rovníc (e) vyplýva, že odlišnosť veľkosti hybností fotónov súvisiacich s dvoma rôznymi stojatými vlnami nemôže byť ľubovoľne malá, ale že minimálna zmena veľkosti pre jednu zložku je

$$(\Delta p_x)_{min} = \frac{h}{2L}. \quad (g)$$

V abstraktnom trojrozmernom priestore hybností, ktorého súradnicové osi predstavujú súradnice vektorov hybností (t. j. p_x , p_y , p_z), potom jestvuje (minimálny) objem s veľkosťou

$$\left(\frac{h}{2L}\right)^3 \quad (h)$$

pripadajúci na jednu stojatú vlnu. V trojrozmernom priestore hybností pripadá na interval veľkosti hybností $(p, p + dp)$ elementárny objem s tvarom guľovej škrupiny, ktorého veľkosť je

$$d\tau = \left(\frac{1}{8}\right) 4\pi p^2 dp, \quad (i)$$

pričom zlomok $(1/8)$ vyjadruje skutočnosť, že z celého priestoru hybností uvažujeme iba prvý oktant, čím zohľadňujeme okolnosť, že čísla n_x, n_y, n_z vystupujúce v rovniciach (e) sú iba kladné. Keďže na jednu stojatú vlnu pripadá objem vyjadrený vzťahom (h), počet stojatých vln pripadajúci na objem $d\tau$ sa rovná podielu výrazov (i) a (h):

$$dN' = \left[\left(\frac{1}{8}\right) 4\pi p^2 dp \right] / \left(\frac{h}{2L} \right)^3. \quad (j)$$

Takto určený počet sa navyše násobí číslom 2, čím sa zohľadní dvojaká možná lineárna polarizácia každej stojatej elektromagnetickej vlny v dutine. Ak ešte vyjadríme hybnosť fotónu vzťahom (13.1.1.4), t. j. $p = hf/c$, tak dostaneme

$$dN = 2dN' = \left[\left(\frac{2}{8}\right) 4\pi p^2 dp \right] / \left(\frac{h}{2L} \right)^3 = \frac{8\pi L^3}{h^3} p^2 dp = \frac{8\pi L^3}{c^3} f^2 df.$$

Po vydelení objemom dutiny L^3 dostaneme počet oscilátorov (stojatých vln) v jednotkovom objeme, pripadajúcich na frekvenčný interval f až $f + df$:

$$dn = \frac{dN}{V} = \frac{8\pi f^2}{c^3} df.$$

D3

Stredná hodnota energie oscilátorov

Stredná hodnota energie (alebo inej fyzikálnej veličiny) predstavuje aritmetický priemer hodnôt energie, ktorými sa vyznačujú častice (objekty) tvoriace zvyčajne súbor obsahujúci veľký počet častíc. V klasickej fyzike sa považovalo za samozrejmé, že objekty môžu nadobúdať ľubovoľné hodnoty energie, že spektrum dovolených hodnôt energie je spojité. Ak sa však objekty súboru vyznačujú iba diskretnými hodnotami energie (t. j. môžu nadobúdať iba isté, nie ľubovoľné energie), stredná hodnota energie $\langle E \rangle$ sa vypočíta ako aritmetický priemer ich energií:

$$\langle E \rangle = (E_1 + E_2 + E_3 + \dots) / N,$$

kde N je celkový počet objektov (častíc).

Niektoré z diskretných hodnôt energie sa môžu vyskytovať pri viacerých objektoch, vtedy sa stredná hodnota energie vypočíta pomocou vzťahu

$$\langle E \rangle = \frac{\sum N_n E_i}{\sum N_n} = \frac{\sum N_n E_n}{N}. \quad (a)$$

Planckov výpočet vychádzal z predpokladu existencie diskretných hodnôt energie oscilátorov (stojatých vln) v dutine, ktoré mali tvoriť celočíselné násobky hodnoty hf , kde h je Planckova konštanta a f frekvencia príslušnej stojatej vlny. Ak sa teda v dutine nachádza množina stojatých vln s frekvenciou f , môžu nadobúdať energie iba z možných hodnôt

$$E_0 = 0, E_1 = hf, E_2 = 2hf, E_3 = 3hf, \quad \text{atď.}$$

Z množiny oscilátorov s touto frekvenciou má väčšina nulovú energiu $E_0 = 0$ (ich počet nech je N_0), počet oscilátorov s vyššou energiou klesá s jej narastajúcou veľkosťou. Túto závislosť Planck vyjadril pomocou vzťahu pochádzajúceho od Boltzmannna

$$N_n = N_0 \exp(-nhf/kT), \quad (b)$$

kde N_n je počet oscilátorov s energiou nhf , $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K je Boltzmannova konštanta a T termodynamická teplota. Strednú energiu týchto oscilátorov vypočítame podľa (a),

$$\langle E \rangle = \frac{\sum N_0 \exp(-\beta nhf) nhf}{\sum N_0 \exp(-\beta nhf)} = \frac{\sum \exp(-\beta nhf) nhf}{\sum \exp(-\beta nhf)}. \quad (c)$$

Podobné výrazy pre strednú hodnotu rôznych veličín sú v štatistickej mechanike veľmi časté a na ich vyčíslenie sa používa pomocná veličina – partičná funkcia

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta nhf) \quad (d)$$

kde $\beta = 1/(kT)$ je premenná partičnej funkcie, závisiaca od teploty. Priamym výpočtom sa presvedčíme, že derivovaním logaritmu partičnej funkcie dokážeme vyjadriť potrebnú strednú energiu,

$$-\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta) = -\frac{1}{Z(\beta)} \frac{d}{d\beta} Z(\beta) = \frac{\sum \exp(-\beta nhf) nhf}{\sum \exp(-\beta nhf)} = \langle E \rangle \quad (e)$$

Samotná partičná funkcia (d) predstavuje súčet nekonečného geometrického radu s kvocientom

$$x = \exp(-\beta hf). \quad (f)$$

Jeho súčet je

$$Z(\beta) = \frac{1}{1-x} = \frac{1}{1-\exp(-\beta hf)}. \quad (g)$$

Po dosadení partičnej funkcie $z(g)$ do prvého výrazu v rovnici (e) a jeho derivovaní dostaneme konečný výsledok

$$\langle E \rangle = \frac{d}{d\beta} \ln[1 - \exp(-\beta hf)] = \frac{hf}{\exp(+hf/kT) - 1} . \quad (f)$$

SÚHRN VZŤAHOV

energia fotónu	$E = hf$
hybnosť fotónu	$p = \frac{E}{c} = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$
Einsteinova rovnica fotoelektrického javu	$hf = W + (1/2)mv^2$
intenzita vyžarovania	$M = \frac{\Delta E}{\Delta S \Delta t}$
Stefanov-Boltzmannov zákon a Wienov zákon	$M = \int_0^\infty M_f df = \sigma T^4 \quad T \cdot \lambda_{\max} = b$
stredná hodnota energie oscilátorov	$\langle E \rangle = \frac{hf}{\exp(hf/kT) - 1}$
Planckov zákon žiarenia	$M_f = \frac{2\pi}{c^3} \frac{hf^3}{\exp(hf/kT) - 1}$
sila vyvolaná dopadajúcou elektromagnetickou vlnou	$F = \frac{dp}{dt} = \frac{1}{c} \frac{dW}{dt}$
energia na n-tej hladine atómu vodíka podľa Bohra	$E_n = -\left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}\right)$
polomery Bohrových kružníc	$r_n = \frac{\varepsilon h^2}{\pi e^2 m} n^2$
vlnová dĺžka spektrálnych čiar vodíka	$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^3 c}\right) \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$
Rydbergova konštanta	$R = \frac{e^4 m}{8\varepsilon^2 h^3 c}$
vlnová dĺžka priradená častici	$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$
vlnová funkcia priradená častici	$\Phi(x, t) = \Phi_0 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right]$

vlnový balík	$\Phi(x, 0) = 2A_0\Delta k \cos(k_0x) \frac{\sin(x\Delta k)}{x\Delta k}$
Heisenbergov vzťah neurčitosti	$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$
Schrödingerova rovnica	$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + U\Phi$
Schrödingerova bezčasová rovnica	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi(x) = E\psi(x)$
energie častice v potenciálovej jame	$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$
pravdepodobnosť prechodu častice bariérou	$P = K \exp \left\{ -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}$

SLOVNÍK

absolútne čierne teleso – ideálne teleso, ktoré pohlcuje všetko dopadajúce elektromagnetické žiarenie

de Broglieho hypotéza – hypotéza, podľa ktorej aj hmotné častice majú vlnové vlastnosti, prejavujúce sa napríklad interferenciou, alebo ohybom šíriacich sa zväzkov

fotoelektrický jav – jav, pri ktorom sa z látok uvoľňujú elektróny pôsobením dopadajúceho svetla, resp. elektromagnetického žiarenia

fotoelektróny – elektróny uvoľnené z povrchu látok pri fotoelektrickom jave

fotón – elementárne kvantum elektromagnetického poľa, pohybujúce sa rýchlosťou svetla, prenášajúce energiu $E = hf$ a hybnosť $p = h/\lambda$.

Heisenbergov princíp neurčitosti – princíp, podľa ktorého určité dvojice fyzikálnych veličín (napr. súradnica a príslušná zložka hybnosti) nemožno v jednom stave častice určiť s ľubovoľnou presnosťou – spresňovanie jednej z nich má za následok zväčšovanie neurčitosti nameranej hodnoty druhej veličiny

intenzita vyžarovania (M) – veličina charakterizujúca zohriate teleso emitujúce elektromagnetické žiarenie, zavedená ako energia vyžiarená za jednotku času z plochy s jednotkovým obsahom; jednotka: $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$.

kvantová mechanika – fyzikálna teória na opis pohybu a stavov mikročastíc, vychádzajúca z de Broglieho hypotézy, zahrňujúca Heisenbergov princíp neurčitosti. Jej základnou rovnicou je Schrödingerova rovnica poskytujúca vysvetlenie kvantovania energie mikročastíc a ich sústav

kvantový stav – fyzikálny stav mikročastice (alebo ich súboru) prípustný z hľadiska kvantovej mechaniky; charakterizovaný je určitým počtom kvantových čísiel

pásmo energií – ohraničený interval energií, ktoré môžu elektróny v tuhých látkach nadobúdať (dovolené pásma energií, – valenčné pásmo, vodivostné pásmo), alebo naopak ktoré nemôžu nadobúdať (zakázané pásmo)

Pauliho vylučovací princíp – princíp, podľa ktorého každá hladina v sústave navzájom interagujúcich mikročastíc môže byť obsadená len jedným, nanajvýš dvoma elektrónmi, ktoré však musia mať opačne orientované spinové momenty

Planckova konštanta (h) – univerzálna (fundamentálna) fyzikálna konštanta uplatňujúca sa v zákonoch kvantovej teórie; $h = 6,626\cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$.

Planckov zákon žiarenia – vyjadrenie spektrálnej intenzity vyžarovania čierneho telesa ako funkcie jeho termodynamickej teploty a frekvencie emitovaného žiarenia

prahová frekvencia – minimálna frekvencia elektromagnetického žiarenia, pri ktorej ešte nastáva fotoelektrický jav; závisí od druhu ožarovaného materiálu

Schrödingerova rovnica – základná (parciálna diferenciálna) rovnica kvantovej mechaniky umožňujúca získať vlnové funkcie opisujúce stav mikročastíc v daných podmienkach, vrátane jeho zmeny. Bezčasová Schrödingerova rovnica umožňuje určiť kvantové stavy, príslušné vlnové funkcie a energie mikročastíc

spektrálna intenzita vyžarovania (M_f, M_λ) – intenzita vyžarovania pripadajúca na jednotkový interval frekvencie, resp. vlnovej dĺžky.

Stefanova – Boltzmannova konštanta (σ) – konštanta vystupujúca v Stefanovom-Boltzmannovom zákone; $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$.

Stefanov-Boltzmannov zákon – zákon, podľa ktorého intenzita vyžarovania absolútne čierneho telesa rastie so štvrtou mocninou termodynamickej teploty

tunelový jav – schopnosť častice prejsť oblasťou konečných rozmerov v prípade, keď by potenciálna energia častice v tejto oblasti presahovala jej celkovú energiu

vlnová funkcia – funkcia priestorových súradníc prípadne aj času, charakterizujúca stav mikročastíc. Vo všeobecnosti je komplexná, získa sa riešením Schrödingerovej rovnice. Umožňuje vypočítať stredné hodnoty fyzikálnych veličín mikročastíc a pravdepodobnosti ich výskytu

vlnový balík – superpozícia skupiny de Broglieho vln blízkyh vlnových dĺžok, a to taká, že výsledná amplitúda je významná iba v ohraničenej oblasti priestoru; inde je zanedbateľná

výstupná práca (W) – minimálna energia potrebná na uvoľnenie elektrónu z látky

vzťah neurčitosti – vzťah konkretizujúci Heisenbergov princíp neurčitosti pre určité dve veličiny, podľa ktorého súčin neurčitostí merania týchto dvoch veličín (napr. súradnice a hybnosti) nemôže byť menší než Planckova konštanta

Wienov zákon – zákon, podľa ktorého sa maximum krivky spektrálnej intenzity vyžarovania s rastúcou teplotou posúva k menším vlnovým dĺžkam

žiarenie absolútne čierneho telesa – elektromagnetické žiarenie emitované absolútne čiernym telesom; jeho spektrálne zloženie (spektrálna intenzita vyžarovania) je opísané Planckovým zákonom žiarenia, spĺňa Stefanov-Boltzmannov zákon a Wienov zákon

ÚLOHY

Hodnoty konštánt

Planckova konštanta	$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
Boltzmannova konštanta	$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
náboj elektrónu	$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ A} \cdot \text{s}$
hmotnosť elektrónu	$m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Stefanova-Boltzmannova konštanta	$\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
Wienova konštanta	$b = 2,898 \times 10^{-3} \text{ K} \cdot \text{m}$
elektrónvolt	$1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$

Fotóny, fotoelektrický jav, svetelný tlak

1. Vypočítajte energie fotónov E_1 a E_2 svetla červenej farby ($\lambda_1 = 750 \text{ nm}$) a svetla fialovej farby ($\lambda_2 = 400 \text{ nm}$). Pri akých teplotách t_1 resp. t_2 sa stredná kinetická energia molekúl jednoatómového plynu rovná energiám týchto fotónov?

Výsledok: $T_1 = 2hc/(3k_B \lambda_1)$, $t_1 = (T_1 - 273,15)^\circ\text{C}$

2. Vypočítajte maximálnu vlnovú dĺžku svetelnej vlny, ktorá ešte môže vyvolať fotoelektrický jav v platine, keď výstupná práca elektrónov z platiny $W = 6,3 \text{ eV}$.

Výsledok: $\lambda = hc/W$.

3. Monochromatický svetelný zväzok s vlnovou dĺžkou $\lambda = 600 \text{ nm}$ prenáša výkon $P = 60 \text{ mW}$, dopadá kolmo na stenu a absorbuje sa v nej. Koľko fotónov (N) dopadá na stenu za sekundu? Akým tlakom p_f pôsobí toto svetlo na stenu, ak rovnomerne osvetľuje plošku s obsahom $S = 2 \text{ cm}^2$?

Výsledok: $N = P\lambda/(hc)$, $p_f = P/(cS)$

4. Keď bol povrch kovu ožiarený svetlom s frekvenciou $f_1 = 2,2 \times 10^{15} \text{ Hz}$, tak na zamedzenie fotoprúdu bolo potrebné brzdné napätie $U_1 = 6,6 \text{ V}$. Pri použití svetla s frekvenciou $f_2 = 4,6 \times 10^{15} \text{ Hz}$, bolo brzdné napätie $U_2 = 16,5 \text{ V}$. Na základe uvedených údajov vypočítajte Planckovu konštantu h a výstupnú prácu W . Náboj elektrónu $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ A} \cdot \text{s}$.

Výsledok: $h = e \frac{U_2 - U_1}{f_2 - f_1}$, $W = e \left(f_1 \frac{U_2 - U_1}{f_2 - f_1} - U_1 \right)$

5. Zdroj monochromatického svetla vyžaruje na vlnovej dĺžke $\lambda = 550 \text{ nm}$ výkon $P = 1 \text{ W}$, pričom svieti do celého polpriestoru (nad zdrojom) izotropne. Vypočítajte počet fotónov (N), ktoré dopadnú za 1 s na plošku s veľkosťou $S = 3 \text{ cm}^2$ umiestnenú vo vzdialenosti $R = 100 \text{ m}$ od zdroja a kolmú na smer šírenia lúčov v danom mieste.

Výsledok:
$$N = \frac{S}{2\pi R^2} \frac{P\lambda}{hc}.$$

6. Vlnová dĺžka pri ktorej sa začína pozorovať emisia fotoelektrónov z wolfrámu, je $\lambda_1 = 230 \text{ nm}$. Aká musí byť vlnová dĺžka λ_2 použitého svetla, aby fotoelektróny nadobúdali kinetickú energiu $E_2 = 1,5 \text{ eV}$?

Výsledok:
$$\lambda_2 = \frac{\lambda_1 hc}{hc + \lambda_1 E_2}$$

7. Zo Slnka k nám prichádza energia, pričom na 1 cm^2 horných vrstiev atmosféry za 1 minútu dopadá $8,127 \text{ J}$. Vypočítajte príkon P_S slnečnej energie v jednotkách kW/m^2 a tlak p_s , ktorým by slnečné lúče pôsobili na dokonale absorbujúcu plochu postavenú kolmo na smer dopadajúcich lúčov.

Výsledok:
$$P_S = 1,354 \text{ kW/m}^2, \quad p_s = (1/c)P_S.$$

Žiarenie čierneho telesa

8. Zo Slnka na vrchné vrstvy atmosféry Zeme dopadá približne $P_S = 1,35 \text{ kW/m}^2$ energie. Akú teplotu T_1 má povrch Slnka, ak ho považujeme za absolútne čierne teleso? Koľko energie M vyžaruje Slnko za sekundu z jedného štvorcového metra? Priemer Slnka $d_S = 1,4 \times 10^6 \text{ km}$, vzdialenosť od Zeme $l = 150 \times 10^6 \text{ km}$.

Výsledok:
$$M = \left(\frac{2l}{d}\right)^2 \cdot P_S, \quad T_1 = \sqrt[4]{\frac{M}{\sigma}}.$$

9. Vypočítajte strednú teplotu T povrchu Zeme, za predpokladu, že žiari ako absolútne čierne teleso, a ak vyžarovанú energiu čerpá len z energie dodávanej slnkom ($P_S = 1,4 \text{ kW/m}^2$, polomer Zeme $R = 6400 \text{ km}$).

Výsledok:
$$T = \sqrt[4]{\frac{P_S}{4\sigma}}.$$

10. Na dokonale čiernu platničku dopadá kolmo slnečné žiarenie, ktoré prenáša energiu $P_S = 1,4 \text{ kW/m}^2$. Na akú teplotu sa vo vákuu platnička zohreje? Predpokladáme, že energia z nej odchádza iba žiarením.

Výsledok:
$$T = \sqrt[4]{\frac{P_S}{4\sigma}}$$

11. Absolútne čierne teleso s tepelnou kapacitou $C = 300 \text{ J/K}$ a plošným obsahom povrchu $S = 500 \text{ cm}^2$ má začiatočnú teplotu $T_1 = 700 \text{ K}$. Vo vákuu ho necháme chladnúť, a predpokladáme, že žiadna energia sa telesu nedodáva, ani žiarením od okolia. Za akú dobu Δt poklesne jeho teplota na $T_2 = 350 \text{ K}$?

Výsledok: $\Delta t = \frac{c}{35\sigma} \left(\frac{1}{T_2^3} - \frac{1}{T_1^3} \right).$

12. Absolútne čierne teleso maximálne vyžaruje na vlnovej dĺžke $\lambda_{max} = 800 \text{ nm}$. Plošný obsah jeho povrchu $S = 100 \text{ cm}^2$. Aký príkon P_1 by sa telesu musel privádzať, keby sa telesu z okolia energia nevracala? Aký príkon P_2 postačuje, ak sa z okolia s teplotou $T_2 = 300 \text{ K}$ vracia telesu energia žiarením?

Výsledok: $P_1 = S\sigma \left(\frac{b}{\lambda_{max}} \right)^4, \quad P_2 = P_1 - S\sigma T_2^4$

13. Aká je teplota T_1 elektrického ohrievača s povrchom veľkosti $S = 350 \text{ cm}^2$, ak sa do neho privádza elektrický príkon $P = 1,5 \text{ kW}$? Povrch ohrievacieho telesa považujeme za absolútne čierne teleso. Uvažujte aj s návratom žiarivej energie z okolia, ktoré má teplotu $t_2 = 20^\circ\text{C}$.

Výsledok: $T_1 = \sqrt[4]{(t_2 + 273)^4 + P/(\sigma S)}$

14. Na akej hodnote t_1 sa ustáli teplota kovového drôtika (polomer $r = 0,05 \text{ mm}$), ktorého konduktivita $\gamma = 10^8 \Omega^{-1}\text{m}^{-1}$, keď cez drôtik tečie prúd $I = 2 \text{ A}$? Straty a návrat žiarivej energie z okolia neuvažujte.

Výsledok: $t_1 = T_1 - 273,15, \quad T_1 = \sqrt[4]{\frac{I^2}{2\pi^2 r^3 \gamma \sigma}}$

15. Aký je pomer spektrálnych intenzít vyžarovania pri dvoch rôznych vlnových dĺžkach ($\lambda_1 = 900 \text{ nm}, \lambda_2 = 150 \text{ nm}$) wolfrámovým vláknom zahriatym na teplotu 3000 K ?

Výsledok: $\frac{M_{f1}}{M_{f2}} = \left(\frac{f_1^3}{f_2^3} \right) \cdot \frac{\exp\left(\frac{hf_2}{k_B T}\right) - 1}{\exp\left(\frac{hf_1}{k_B T}\right) - 1}.$

Vlnové vlastnosti častíc

16. Elektrón urýchlíme napätím $U = 500 \text{ V}$. Aká vlnová dĺžka bude prislúchať urýchlenému elektrónu?

Výsledok: $\lambda = h/\sqrt{2meU}$

17. Elektrón aj fotón majú rovnakú vlnovú dĺžku $\lambda = 0,2 \text{ nm}$. Porovnajme ich hybnosti a energie.

Výsledok: $p_{el} = p_{fot} = 3,3 \times 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}, \quad E_{fot} = 6187 \text{ eV}, \quad E_{el} = 37,8 \text{ eV}$

18. Fotón aj elektrón majú energiu 2 eV . Aké sú ich vlnové dĺžky?

Výsledok: $\lambda_{el} = 0,867 \text{ nm}, \quad \lambda_{fot} = 620 \text{ nm}.$

19. Vypočítajte vlnovú dĺžku λ_α priradenú častici alfa, ktorá sa pohybuje rýchlosťou $v = 5 \times 10^3 \text{ km/s}$, a porovnajte ju s vlnovou dĺžkou λ_N priradenou molekule dusíka na základe rýchlosti, ktorou sa pohybuje pri teplote 20°C . Hmotnosť častice alfa $m_\alpha = 6,4 \times 10^{-27} \text{ kg}$, molekuly dusíka $m_N = 45 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Výsledok: $\lambda_N = \frac{h}{\sqrt{3m_N k_B T}}$.

20. Elektrón vletel rýchlosťou $v_o = 6000 \text{ km/s}$ do elektrostatického poľa s intenzitou $E = 5000 \text{ V/m}$ tak, že ho pole ešte urýchlilo v smere jeho pôvodnej rýchlosti. Akú vzdialenosť l elektrón preletel týmto poľom, keď sa jeho vlnová dĺžka zmenila na $\lambda_2 = 10^{-10} \text{ m}$?

Výsledok: $W_o = \frac{1}{2}mv_o^2$, $p_o = \sqrt{2mW_o}$, $l = \frac{h^2 - \lambda^2 p_o^2}{\lambda^2 - 2meE}$.

21. Akým elektrickým napätím U treba urýchliť elektrón, aby mu zodpovedala vlnová dĺžka $\lambda = 600 \text{ nm}$?

Výsledok: $U = \frac{h^2}{2\lambda^2 me}$.

22. Elektrónový mikroskop pracuje s elektrónmi, ktoré sú urýchľované elektrickým napätím $U = 40 \text{ kV}$. Vypočítajte rozlišovaciu schopnosť mikroskopu, ktorej veľkosť považujeme za zhodujúcu sa s vlnovou dĺžkou λ priradenou elektrónu. Kinetickú energiu elektrónu počítajte pomocou klasického vzťahu.

Výsledok: $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$.

23. Akú kinetickú energiu W_k má protón, keď experimentálne zistená vlnová dĺžka, v súlade s de Broglieho vzťahom, je $\lambda = 9 \times 10^{-13} \text{ m}$? Hmotnosť protónu je $m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Výsledok: $W_k = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$.

24. Ak vlnová dĺžka prislúchajúca protónu je $0,1 \text{ nm}$, aká je jeho rýchlosť v a akým veľkým napätím U musel byť urýchlený?

Výsledok: $v = 3964 \text{ m/s}$, $U = 8,2 \times 10^{-2} \text{ V}$.

25. Pohyb elektrónu, ktorý má kinetickú energiu $W_k = 10 \text{ eV}$, je obmedzený na priestor guľového tvaru s polomerom $r = 0,1 \text{ mm}$. Vychádzajúc z Heisenbergovho princípu neurčitosti zistite relatívnu neurčitosť rýchlosti elektrónu.

Výsledok: $\frac{\Delta v}{v} \geq \frac{h}{r\sqrt{2mW_k}}$.

26. Elektrón sa nachádza v nekonečne hlbkej jame, ktorá má šírku 1 nm . Akú frekvenciu f a vlnovú dĺžku λ musí mať fotón, aby jeho energia postačovala na prechod elektrónu zo základnej kvantovej hladiny (kvantové číslo $n = 1$) na tretiu kvantovú hladinu ($n = 3$)?

Výsledok: $f = 7,27 \times 10^{14} \text{ Hz}$, $\lambda = 412 \text{ nm}$. (Fotón patrí do viditeľnej oblasti.)

27. Aká je pravdepodobnosť P , že nájdeme elektrón v blízkosti stredu nekonečne hlbkej potenciálovej jamy so šírkou L , v intervale $x : (0,4L, 0,6L)$? Elektrón sa nachádza v základnom kvantovom stave.

Výsledok: $P = 0,387$.

28. Overte si, že pravdepodobnosť nájsť elektrón pohybujúci sa v nekonečne hlbkej potenciálovej jame, v ľavej polovici jamy, sa rovná $P = 0,5$.

29. Na potenciálovú bariéru s výškou $U_0 = 3 \text{ eV}$ a šírkou $d = 0,5 \text{ nm}$ dopadá zväzok elektrónov, ktoré majú kinetickú energiu $E_k = 2 \text{ eV}$. Aká je pravdepodobnosť P prechodu elektrónov cez bariéru? Ak za sekundu dopadá na bariéru 10^6 elektrónov, aký je stredný časový interval Δt medzi prechodom dvoch elektrónov za sebou? Viete vypočítať elektrický prúd tečúci cez bariéru?

Výsledok: $P = 1,91 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 5,24 \times 10^{-5} \text{ s}$.

Zoznam použitej literatúry

Učebnice

- Beiser A.: Úvod do moderní fyziky, Academia, Praha 1975
- Halliday D., Resnick R., Walker J.: Fundamentals of Physics, John Wiley, New York 2013
- The Feynman Lectures on Physics, Addison-Wesley Publ. Comp. London 1964, dostupné online: https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_toc.html
- Pišút J., Gomolčák L., Černý V.: Úvod do kvantovej mechaniky, ALFA Bratislava 1983, dostupné online: https://zona.fmph.uniba.sk/fileadmin/fmfi/sluzby/elektronicke_studijne_materialy/uvod_kvantova_mechanika.pdf
- Markoš P.: Moderná fyzika, SPEKTRUM, Bratislava 2012
- Griffiths D. J.: Introduction to Quantum Mechanics. Upper Saddle River: Prentice Hall Inc., 1995
- Saveljev I. V.: Kurs obščej fyziki III, Nauka, Moskva 1977, 1988
- Dobrinski-Krakau-Vogel: Physik fuer Ingenieure, Teubner Verl., Stuttgart 1993
- Vanovič J.: Atómová fyzika, ALFA Bratislava 1980

Zbierky príkladov

- Sacharov D. I., Kosminkov I. S.: Sbornik zadač po fizike, Učpedgiz, Moskva 1952
- Hajko V. a kol.: Fyzika v príkladoch, 4. vydanie, ALFA, Bratislava 1971
- Lindner H.: Riešené úlohy z fyziky, ALFA, Bratislava 1973
- Saveljev I. V.: Sbornik voprosov i zadač po obščej fizike, Nauka, Moskva 1982
- Krempaský a kol.: Fyzika - Príklady a úlohy, STU, Bratislava 1989, 2000

Ivan Červeň, Peter Bokes

Fyzika po kapitolách, časť 13.
Kvantové javy

Vydala Slovenská technická univerzita v Bratislave
vo vydavateľstve STU v roku 2023

Rozsah 73 strán, 12 obrázkov, 4 tabuľky,
3,896 AH, 4,035 VH

85 – 228 – 23

ISBN 978-80-227-5355-5