

Fyzika II

Kvantová mechanika

- Intenzita vyzařování vyjádřena ze zářivého toku $M^e = \frac{d\Phi^e}{dA} \quad (\text{Wm}^{-2})$

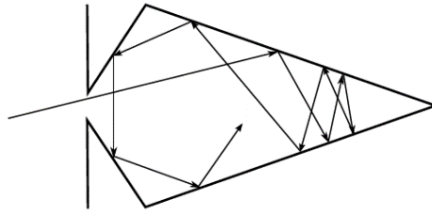
- Spektrální hustota vyzařování $M_\lambda = \frac{dM^e}{d\lambda} \quad M^e = \int_0^\infty M_\lambda d\lambda$

$$M_\nu = \frac{dM^e}{d\nu} \quad M^e = \int_0^\infty M_\nu d\nu$$

- Pohltivost povrchu α / Odrazivost povrchu $R \quad R + \alpha = 1$

- Absolutně černé těleso $\alpha = \alpha_\nu = \alpha_\lambda = 1 \quad (R = 0)$

- Realizace AČT



- Kirchhoffův zákon vyzařování

- Poměr intenzity vyzařování k pohltivosti závisí jen na TD teplotě těles.
- Podíl funkcí je tedy nezávislý na vlastnostech tělesa (materiál, úprava povrchu)

$$\frac{M^e}{\alpha} = f(T)$$

- Pro AČT platí

$$M^{e0} = f(T)$$

- Kirchhoffův zákon pro spektrální hustotu vyzařování

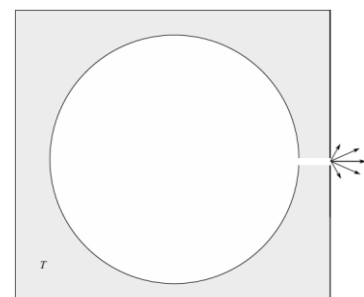
$$\frac{M_\nu}{\alpha_\nu} = F(T, \nu) \quad \frac{M_\lambda}{\alpha_\lambda} = G(T, \lambda)$$

- Pro AČT platí

$$M_\nu^0 = F(T, \nu) \quad M_\lambda^0 = G(T, \lambda)$$

- Lambertovský (kosinový) plošný zářič (= otvor dutiny)

- Záření uvnitř je v TD rovnováze se stěnami dutiny
- Otvor představuje selektivní zářič
 - Vyzařuje na různých vlnových délkách podle teploty



- Emisivita $\varepsilon = \frac{M^e}{M^{e0}}$

- Spektrální emisivita $\varepsilon_\nu = \frac{M_\nu}{M_\nu^0} \quad \varepsilon_\lambda = \frac{M_\lambda}{M_\lambda^0}$

- Z toho platí, že objekt je tak dokonalým zářičem, jak dovede záření pohlcovat. $\frac{M^e}{M^{e0}} = \alpha \quad \alpha = \varepsilon$

- Intenzita vyzařování vyjádřena z hustoty energie $w(T)$ $M^e = \frac{d\Phi_e}{dS} = \frac{c_0 w}{4}$

- Spektrální hustota vyzařování vyjádřena spektrální hustotou energie

$$M_\nu = \frac{c_0 w_\nu}{4} \quad M_\lambda = \frac{c_0 w_\lambda}{4}$$

- Planckův vyzařovací zákon

$$w_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c_0^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

$$w_\lambda(\lambda, T) = \frac{8\pi h c_0}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc_0}{k_B T \lambda}} - 1}$$

- Spektrální hustota energie záření vyjádřena střední hodnotou energie

$$w_\nu = g_V(\nu) \langle E \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c_0^3} \langle E \rangle \quad w_\lambda = g_V(\lambda) \langle E \rangle = \frac{8\pi}{\lambda^4} \langle E \rangle$$

- Rayleighův-Jeansův vyzařovací zákon

$$w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c_0^3} k_B T \quad w_\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T$$

- Wienův vyzařovací zákon $w_\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c_0^3} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}$

- Wienův posunovací zákon $\nu_{\max} = C_\nu T$

$$C_\nu = k_B x_{\max} / h = 5,8762 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

- Umožňuje určovat teplotu těles, jejichž vyzařování je detekováno

- Wienův posunovací zákon pro vlnové délky $\lambda_{\max} = \frac{C_\lambda}{T}$

$$C_\lambda = 2,8977 \cdot 10^{-3} \text{ m K}$$

- Stefanův-Boltzmannův zákon $M^e = \varepsilon \sigma T^4$

- Pro absolutně černé těleso $M^{e0} = \sigma T^4$

- Stefanova-Boltzmannova konstanta $\sigma \simeq 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$

- Maximální kinetická energie emitovaných elektronů $E_{k\max} = E_a - \phi$

kde E_a je absorbovaná energie (energie pohlcená elektronem) a ϕ je výstupní práce elektronu z povrchu kovu, což odpovídá práci, kterou elektron musí vykonat, aby mohl opustit kov (elektron je touto energií vázán v povrchových atomech kovu).

- Absorbovaná energie $E_a = C I \sigma t$

k emisi elektronu dojde, když je splněna relace $C I \sigma t > \phi$

- Maximální kinetická energie vyjádřená mezním kmitočtem $E_{k\max} = h\nu - h\nu_m = h(\nu - \nu_m)$

- Energie fotonu $E = h\nu = \hbar\omega$

- Redukovaná Planckova konstanta $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

- Hybnost fotonu $p = \frac{h\nu}{c} = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k$ $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$

- Hmotnost fotonu $m = \frac{E}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2}$

- Amplituda intenzity elektrického pole $E_0 = \sqrt{\frac{2\dot{N}h\nu}{\varepsilon_0 c}}$

- Intenzita světla vyjádřena hustotou toku fotonů $I = \dot{N}h\nu$ $\dot{N} = \frac{dN}{dt}$

- Comptonova rovnice $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\theta}{2}$

- Comptonova vlnová délka $\lambda_e = \frac{h}{m_0 c}$ $\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c}$

- Kmitočet u povrchu Země $\nu' = \nu \left(1 + \frac{gH}{c^2} \right)$

- Gravitační rudý posun
 - Foton se z viditelné části spektra posunuje k jeho červenému konci

$$\nu' < \nu \quad \nu' = \nu \left(1 - \frac{\kappa M}{c^2 R_s} \right)$$

- Černé díry $\kappa M / (c^2 R_s) > 1$
- Planetární (Rutherfordův) model atomu

Rutherford na základě výsledku provedeného experimentu odvodil nový model atomu, ve kterém je kladná hmota koncentrována do malého objemu, která tvoří kladně nabitě jádro atomu, přičemž kolem tohoto jádra obíhají po kružnicích záporně nabitě elektrony tvořící elektronový obal atomu. Rutherford dospěl k závěru, že obíhající elektrony kolem jádra připomínají planety obíhající kolem Slunce. Odtud vznikl pojem planetární model atomu. V planetárním modelu atomu je gravitační síla nahrazena silou Coulombovou, viz obr. 19.18.

Avšak planetární model má jeden významný nedostatek. Z Maxwellových rovnic vyplývá, že každá nabitá částice, na kterou působí nenulová výsledná síla, tj. pohybuje se se zrychlením, musí emitovat elektromagnetické záření. Vzhledem k tomu, že elektron v planetárním modelu se pohybuje s dostředivým zrychlením, čímž by tedy měl elektromagnetické záření, a tedy by měl ztrácet svoji energii a poloměr jeho oběhu kolem jádra by se měl postupně zmenšovat, až by došlo k jeho dopadu na jádro, viz obrázek 19.19. To znamená, že atomy by byly v tomto smyslu nestabilní, což v reálu nepozorujeme.

- Kinetická energie $E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$
- K dopadu elektronu na jádro by podle toho modelu došlo za 15 ps
 - Použití toho modelu je tudíž neobhájitelné
- Bohrov model atomu
 - Bohrova podmínka $2\pi r m v = n h$
 - Dráha, na níž elektron nevyzažuje
 - Bohrov poloměr $a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \approx 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
 - Energie
 - Určuje diskrétní energetické hladiny atomu vodíku příslušející jednotlivým stabilním drahám (orbitům)

$$E_n = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0 n^2} = -\frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

- Hlavní kvantové číslo n

- Elektron v základním stavu $n = 1$
- Elektron v excitovaném stavu $n \geq 2$

- Vlnová délka $\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = Ry \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$

- Rydbergova konstanta $Ry \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

- Redukovaná hmotnost $m_r = \frac{mM}{M+m}$

- Energie pro atomy vodíkového typu $E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$

- Princip korespondence $\lim_{n \rightarrow \infty} [\text{kvantová fyzika}] = [\text{klasická fyzika}]$

- De Broglieova vlna $\lambda = \frac{h}{p} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$

- Bohrova podmínka by Broglie $2\pi r = n \frac{h}{p} = n\lambda$

- Braggova podmínka $d \sin \varphi = n\lambda, \quad n = 1, 2, \dots$

- Grupová rychlost materiálových vln

$$v_g = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \frac{pc^2}{\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}} =$$

$$\frac{pc^2}{E} = \frac{m(v)vc^2}{E} = \frac{\overbrace{m(v)c^2}^{=E}}{E} v = \frac{E}{E} v = v$$

- Fázová rychlost materiálových vln

$$v_F = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{E}{m(v)v} = \frac{c^2 E}{m(v)c^2 v} = \frac{c^2}{v}$$

- Schrödingerova rovnice

- 1D stacionární rovnice
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + U(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

- 1D nestacionární rovnice
$$j\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t)\psi(x, t)$$

- 3D stacionární rovnice
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$

- 3D nestacionární rovnice
$$j\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$$

- Vlnová funkce volné částice
$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{\frac{j}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}$$

- Normalizační podmínka
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

$$\iiint |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1$$

- Pravděpodobnost, že se částice nachází v čase t v objemu V okolo bodu \mathbf{r}

$$\iiint_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

- Vlnová funkce, která je řešením Schrödingerovy rovnice, musí splňovat

$$\iiint |\phi(\mathbf{r})|^2 dV = 1$$

O vlnové funkci tedy **předpokládáme**, že je

1. vyhovuje Schrödingerově rovnici,
2. normalizovatelná,
3. jednoznačná,
4. spojitá a konečná,
5. má spojitě a konečně první derivace, tj. parciální derivace $\partial\psi/\partial x$, $\partial\psi/\partial y$, $\partial\psi/\partial z$, při konečných změnách potenciálu.

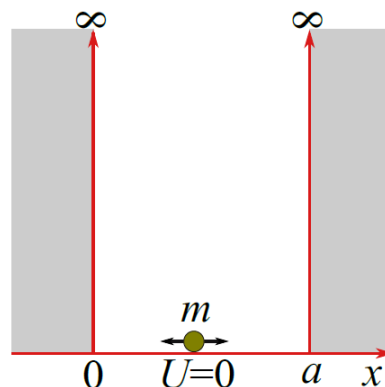
- Parsevalův teorém
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |q(k)|^2 dk$$

- Heisenbergova relace neurčitosti
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Heisenbergova neurčitost $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

- Elektron v nekonečně hluboké 1D potenciálové jámě

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{kdekoliv jinde} \end{cases}$$



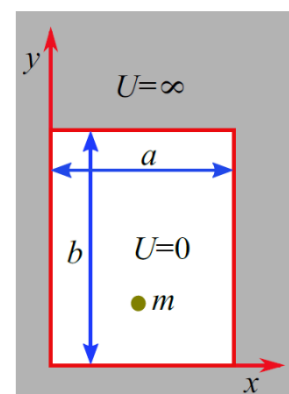
- Energetické hladiny $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

- Vlnová funkce $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$

$$\psi_n(x, t) = \phi_n(x) e^{-\frac{j}{\hbar} E_n t} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) e^{-j \frac{\hbar \pi^2 n^2}{2ma^2} t}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Částice ve 2D nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě

$$U(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{pro } 0 \leq x \leq a; \quad 0 \leq y \leq b \\ \infty & \text{kdekoliv jinde} \end{cases}$$



- Normovaná vlnová funkce

$$\phi_{n_x, n_y} = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right), \quad n_x = 1, 2, 3, \dots; \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

- Energetické hladiny

$$E_{n_x, n_y} = \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}, \quad n_x = 1, 2, 3, \dots; \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

Může se stát, že pro dvě různé kombinace kvantových čísel (n_x, n_y) dostaneme stejnou hodnotu energie E_{n_x, n_y} . Např. pro $a = b$ dvěma konfiguracím $(n_x = 7, n_y = 1)$ a $(n_x = 5, n_y = 5)$ přísluší stejná energie $E_{7,1} = E_{5,5}$, ačkoliv se jejich vlnové funkce výrazně liší, viz obrázek 19.35. Takovým stavům s rozdílnými vlnovými funkcemi, ale stejnou energií se říká **degenerované stavy**.

- 1D pravoúhlá potenciálová jáma konečné hloubky

- Oblast I, oblast II, oblast III

- Více info viz skripta (str. 215–219)

- Koeficient průchodu (transmise)

$$T = \frac{(\phi(x)\phi^*(x))_{\text{prošlá}}}{(\phi(x)\phi^*(x))_{\text{dopadající}}} = \frac{FF^*}{AA^*} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} \sin^2(ka)} + \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}$$

- Koeficient odrazu (reflexe)

$$R = \frac{(\phi(x)\phi^*(x))_{\text{odražená}}}{(\phi(x)\phi^*(x))_{\text{dopadající}}} = \frac{BB^*}{AA^*} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$R = 1 - T = \frac{\frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} \sin^2(ka)}{1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4\kappa^2 k^2} \sin^2(ka)}$$

Tedy koeficient odrazu R představuje poměr odražené hustoty pravděpodobnosti ku hustotě pravděpodobnosti dopadající a koeficient průchodu T je poměr hustoty pravděpodobnosti prošlé ku hustotě pravděpodobnosti dopadající, přičemž mezi koeficienty platí následující vztah

$$\boxed{R + T = 1}.$$

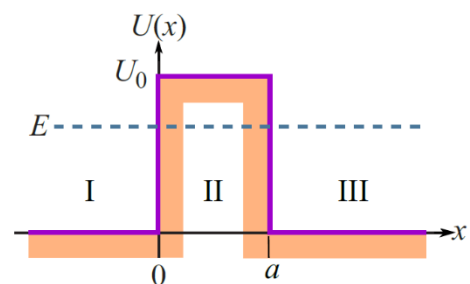
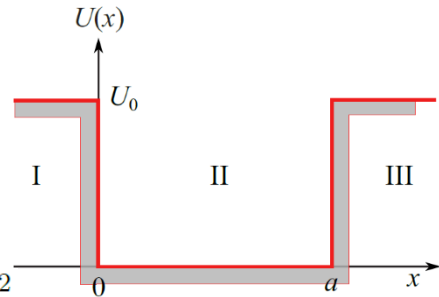
- Tunelový jev

- Koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(\kappa^2 + \kappa^2)^2}{4\kappa^2 \kappa^2} \sinh^2(\kappa a)}$$

- Koeficient odrazu

$$R = 1 - T = \frac{\frac{(\kappa^2 + \kappa^2)^2}{4\kappa^2 \kappa^2} \sinh^2(\kappa a)}{1 + \frac{(\kappa^2 + \kappa^2)^2}{4\kappa^2 \kappa^2} \sinh^2(\kappa a)}$$



- Operátory

Máme-li operátory \hat{A} a \hat{B} , pak jejich **komutátorem** je operátor $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ a je značen $[\hat{A}, \hat{B}]$.

Operátor \hat{A} s nazývá **lineárním**, jestliže pro libovolné dvě funkce f_1 a f_2 platí

$$\hat{A}(f_1 + f_2) = \hat{A}f_1 + \hat{A}f_2.$$

Operátory, pro něž tento vztah neplatí se nazývají **nelineárními**.

Je-li řešení rovnice $\hat{A}\psi = \lambda\psi$ jednoznačnou, spojitou a ohraničenou funkcí při všech hodnotách proměnných (např. x, y, z, t), nazýváme tato řešení **vlastní (charakteristickou) funkcí operátoru \hat{A}** a veličinu λ **vlastní (charakteristickou) hodnotou tohoto operátoru**.

Soubor vlastních hodnot operátoru se obvykle nazývá **spektrum** daného operátoru. Mohou-li vlastní hodnoty nabývat jakýchkoliv hodnot, tj. mohou se měnit spojitě, mluvíme o **spojitém** spektru. V opačném případě, kdy vlastní hodnoty operátoru jsou odděleny od sebe jistými konečnými skoky, mluvíme nespojitěm, resp. **diskrétním** spektru operátoru.

$$\int \psi^* (\hat{A}\psi) dx = \int \psi (\hat{A}\psi)^* dx$$

$$\int g^* (\hat{A}f) dx = \int f (\hat{A}g)^* dx$$

- Vlastní ortonormální funkce hermitovského operátoru

$$\lambda_m = \int \psi_m^* (\hat{A}\psi_m) dx$$

- Operace s hermitovskými operátory

1. Nechť operátory \hat{A} a \hat{B} jsou hermitovské. Potom operátor $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ je rovněž hermitovský.
2. Nechť \hat{A} je hermitovský operátor a c je reálné číslo. Pak operátor $\hat{B} = c\hat{A}$ je hermitovský.
3. Nechť \hat{A} a \hat{B} jsou dva hermitovské operátory, jež komutují, tj. $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Potom operátor $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ je rovněž hermitovský.

- Vyjádření libovolné funkce ψ ve tvaru řady tvořené vlastními funkcemi ψ_m

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

▪ Koeficienty rozvoje $c_n = \int \psi(x) \psi_n^* dx$

$$\int \psi^* \psi dx = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

- Společné vlastní funkce dvou operátorů

Dospěli jsme k následujícímu výsledku: *Mají-li dva operátory \hat{A} a \hat{B} společné vlastní funkce, pak tyto dva operátory jsou nutně komutativní.*

Snadno je možné dokázat i obrácenou poučku: *Jsou-li operátory \hat{A} a \hat{B} komutativní, pak mají společné vlastní funkce.*

- Hilbertův prostor

Matematické objekty jako funkce nebo operátory jsou definovány na určitém prostoru. Prostor je v matematice definován jako množina prvků, s kterými je možné provádět jisté operace. Proto v kvantové mechanice pracujeme s prvky, které jsou definovány na tzv. **Hilbertově prostoru**. *Hilbertův prostor \mathcal{H} je úplný komplexní lineární vektorový prostor se skalárním součinem.*

(komplexní) lineární vektorový prostor (LVP) je libovolná množina \mathcal{V} , na které jsou definovány operace sčítání ($+$: $\mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$) a násobení (komplexním) číslem (\cdot : $\mathcal{C} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$) splňující jisté axiomy (které zde nebudeme připomínat). Prvky LVP nazýváme vektory.

Pod skalárním součinem na LVP \mathcal{V} rozumíme zobrazení $\mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{C}$, které libovolné dvojici vektorů z \mathcal{V} přiřazuje (komplexní) číslo

$$\langle f|g \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx .$$

- Soustava axiomů, které vektory splňují

1. $\langle f|g \rangle = \langle f|g \rangle^*$,
2. $\langle f|g + \alpha h \rangle = \langle f|g \rangle + \alpha \langle f|h \rangle$,
3. $||f||^2 = \langle f|f \rangle \geq 0$, $||f||^2 = 0$, jen tehdy, jestliže $f = 0$.

- Příkladem Hilbertova prostoru jsou komplexní kvadraticky integrovatelné funkce

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

V kvantové mechanice vlnové funkce „žijí“ v Hilbertově prostoru.

Říkáme, že funkce \hat{f} je normalizovaná, když platí:

$$\langle f|f \rangle = 1 .$$

Říkáme, že dvě funkce f a g jsou ortogonální, když

$$\langle f|g \rangle = 0 .$$

Množina funkcí $\{f_n\}$ je ortonormální, jestliže funkce této množiny jsou normalizované a vzájemně ortogonální, tj.

$$\langle f_m|f_n \rangle = \delta_{mn} .$$

Pomocí nově zavedeného značení skalárního součinu lze vyjádřit vztahy a (19.407), které musí splňovat hermitovský operátor

$$\langle \psi|\hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}\psi|\psi \rangle ,$$

$$\langle g|\hat{A}f \rangle = \langle \hat{A}g|f \rangle .$$

○ Postuláty kvantové mechaniky

1. Postulát o vlnové funkci

Veškeré informace o stavu kvantověmechanickém systému (nejčasteji částici) jsou popsány vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$.

2. Postulát o operátorech

Každé fyzikální veličině, kterou můžeme pro danou částici naměřit, je přiřazen operátor, který působí na příslušnou vlnovou funkci.

$$\hat{x}\psi = x\psi$$

$$\hat{y}\psi = y\psi$$

$$\hat{p}_x\psi = -j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y\psi = -j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z\psi = -j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

$$\hat{z}\psi = z\psi$$

$$\hat{\mathbf{r}}\psi = \mathbf{r}\psi$$

$$\hat{\mathbf{p}}\psi = -j\hbar \nabla \psi$$

3. Postulát o kvantování

Jediné hodnoty, které může měřitelná veličina A nabývat při jednotlivých měřeních, jsou vlastní čísla A_n odpovídajícího operátoru \hat{A} .

4. Postulát o střední hodnotě

Je-li kvantověmechanický systém popsán v okamžiku měření normovanou vlnovou funkcí ψ , pak výsledkem měření na odpovídajícím kvantověmechanickém souboru je střední hodnota veličiny A dána vztahem

$$\overline{A} = \langle \psi|\hat{A}\psi \rangle . \quad (19.458)$$

- Pravděpodobnost naměření hodnoty A_n $p_n = |c_n|^2$

5. Postulát o redukci vlnové funkce

Měření fyzikální veličiny A s výsledkem měření A_n , kde A_n je vlastní číslo odpovídajícího operátoru \hat{A} , převádí měřený systém do stavu s vlnovou funkcí ψ_n , která je vlastní funkcí operátoru \hat{A} a s vlastním číslem A_n .

$$\hat{A}\psi(t) \xrightarrow{\text{měření}} A_n\psi_n.$$

6. Postulát o současném měření více fyzikálních veličin

Současné měření více fyzikálních veličin A, B, C, \dots na systému ve stavu charakterizovaném vlnovou funkcí ψ_n lze jen tehdy, když je tato vlnová funkce vlastní funkcí všech operátorů $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$, které odpovídají měřeným veličinám.

7. Postulát o časové Schrödingerově rovnici

Je-li v čase $t = t_0$ systém ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$, pak je jeho následný vývoj dán následující časovou Schrödingerovou rovnicí:

$$j\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t), \quad (19.473)$$

kde \hat{H} Hamiltonův operátor (19.447).

- Operátory hybnosti

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

- Operátor kvadrátu hybnosti komutuje s jednotlivými operátory složek hybnosti

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

- Operátory složek hybnosti mezi sebou nekomutují

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = j\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = j\hbar \hat{L}_y, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = j\hbar \hat{L}_x$$

- Operátor L_z

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Odtud můžeme vidět, že průmět momentu hybnosti do určitého směru může tedy nabývat pouze celistvých násobků redukované Planckovy konstanty \hbar a je tedy kvantován.

- Operátor L^2

Vlastní hodnoty operátoru kvadrátu velikosti momentu hybnosti jsou tedy rovněž kvantovány a s ohledem na vztahy (19.516) a (19.517) dostaneme

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

- Kulové (sférické) funkce

$$Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = N_{lm_l} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) e^{jm_l \varphi}$$

N_{lm_l} je normalizační konstanta pro danou kombinaci čísel l a m_l .

$$\hat{L}_z Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = L_z Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = L^2 Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$$

- Hladiny energie reprezentující vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

- Vlnová funkce $\phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$

- Vlastní funkce hermitovského Hamiltonova operátoru

$$\hat{H} \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = E_n \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$$

- Operátory kvadrátu velikosti momentu hybnosti & z-tové složky vektoru momentu hybnosti

$$\hat{L}_z \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = L_z \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = L^2 \phi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$$

- Operátory mají společné vlastní funkce -> musí vzájemně komutovat

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

- Kvantová čísla

Pojmenování	Značka	Nabývá hodnot
Hlavní kvantové číslo	n	1,2,3,...
Vedlejší (orbitální) kvantové číslo	l	0,1,2,..., n-1
Magnetické kvantové číslo	m_l	$-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

- Popis stavu v podslupce atomu nl^i

kde n je hlavní kvantové číslo, l je vedlejší kvantové číslo, za které se ale dosazuje z tabulky 19.3 a i označuje počet elektronů v dané podslupce. Např. $3d^2$ znamená, že v podslupce s $n = 3$, $l = 2$ se nachází 2 elektrony.

- Spektroskopická notace

n	Symbol pro slupku	l	Symbol pro podslupku
1	K	0	s
2	L	1	p
3	M	2	d
4	N	3	f
5	O	4	g
6	P	5	h

- Selekční pravidlo (z kterého vyplývá, že jsou některé energetické přechody zakázány)

$$|l_f - l_i| = 1 \quad \text{neboli} \quad \Delta l = \pm 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta m_l = 0, \pm 1$$

- Magnetický dipólový moment

$$\mu = -\frac{eL}{2m_e} = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = -\mu_B \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

- Bohrov magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

- Z-tová složka $\mu_z = \gamma L_z = -\frac{e}{2m_e} L_z$

$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_l = -\mu_B m_l, \quad m_l = -l, -1, 1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

- Gyromagnetický poměr $\gamma = -\frac{e}{2m_e}$

- Spin elektronu

- vlastní mechanický moment hybnosti např. s projekcí do směru osy z $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$
- Vlastní magnetický moment $\mu_s = 2\gamma \mathbf{S}$

- Operátor spinu

- Pauliho spinové matice

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Vlastní vektory matice $\tilde{\chi}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\chi}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

- Operátory reprezentující složky vlastního momentu hybnosti (spinu) musí splňovat komutační relace

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

- Velikost spinu a velikost z-tové složky spinu

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2, \quad \text{kde } s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s \hbar, \quad \text{kde } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

kde $s = 1/2$ nazýváme **spinové kvantové číslo** a $m_s = -1/2, 1/2$ nazýváme **magnetické spinové číslo**.

- Spinové kvantové číslo $s = \frac{\text{celé číslo}}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

- Bosony = částice s celočíselným spinovým kvantovým číslem
- Fermiony = částice s neceločíselným spinovým kvantovým číslem (kvarky)

- Vlnová funkce elektronu $\psi = \psi(\mathbf{r}, S_z, t) \quad \psi(\mathbf{r}, S_z; t) = \psi(\mathbf{r}, t)\chi(S_z)$

- Dvoukomponentní vlnová funkce popisující stav elektronu

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, S_z, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{2}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{2}, t) \end{pmatrix} = \psi_+\left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{2}, t\right) \tilde{\chi}_+ + \psi_-\left(\mathbf{r}, -\frac{\hbar}{2}, t\right) \tilde{\chi}_-$$

- Spin nahoru / spin dolů

$$\chi\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = a \quad (\text{spin nahoru}); \quad \chi\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = b \quad (\text{spin dolu})$$

- Diracova 1D rovnice pro lepší popis částic

- Nahradila Schrödingerovu rovnici $j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-j\hbar c \alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + \beta m_0 c^2 \right) \psi$

- Celkový moment hybnosti elektronu $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$

- Velikost momentu hybnosti $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$

- j je kvantové číslo nabývající hodnot $j = l + s$ nebo $|l - s|$

- Projekce vektoru do směru osy z

$$J_z = m_j \hbar, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

- Vlnová funkce soustavy stejných částic

Tedy odtud vidíme, že vlnová funkce soustavy stejných částic musí být při záměně dvou libovolných částic buď

1. zůstat nezměněna, tj.

$$\psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N, t) = +\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N, t)$$

a takováto vlnová funkce se nazývá **symetrická** (s), nebo

2. změnit jen znaménko:

$$\psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_i, \dots, q_N, t) = -\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_k, \dots, q_N, t)$$

a takováto vlnová funkce se nazývá **antisymetrická** (a).

- Můžeme konstatovat, že stejné částice jsou nerozlišitelné a vlnová funkce soustavy nerozlišitelných částic je buď symetrická, nebo antisymetrická vzhledem k záměně libovolné dvojice částic této soustavy.
- Pauliho vylučovací princip
 - V soustavách stejných fermionů nelze při měření nalézt dvě částice, jež mají současně stejný soubor kvantových čísel (n, l, m_l, m_s).

- Symetrizace a antisymetrizace dvou fermionů

$$\phi^{(s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi^{(s)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

$$\phi^{(a)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\phi^{(a)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

- Dvě základní pravidla elektronové struktury atomů s více elektrony
 1. Soustava částic (elektronů) je stabilní, jestliže je její celková energie minimální.
 2. V každém jednotlivém kvantovém stavu může v atomu existovat jen jeden elektron (Pauliho vylučovací princip).

- Slupka atomu

Všechny elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem n mají zhruba stejnou energii a jejich střední vzdálenost od jádra stíněného elektrony s nižšími hodnotami n je přibližně stejná. Proto se skupina elektronů, která má stejné n se nazývá **slupka**.

- Podslupka atomu

V dané slupce roste obecně energie elektronu s rostoucím vedlejším kvantovým číslem l , současně s tím se zvětšuje jeho střední vzdálenost od jádra a od elektronů s nižšími n a pochopitelně s tím klesá jeho vazbová energie. Elektrony se stejným l tvoří tzv. **podslupku**.

Výsledný počet elektronů ve slupce N_n (s přihlédnutím k Pauliho vylučovacímu principu) je dán vztahem

$$N_n = 2n^2 .$$

Pro podslupku je počet elektronů N_l určen vztahem

$$N_l = 2(2l + 1) .$$

Slupka nebo podslupka, ve které jsou všechny stavy obsazeny elektrony, se nazývá uzavřená.

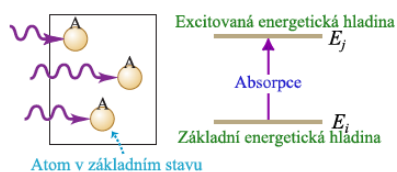
- Možné stavy elektronů obsahující první tři slupky
- Základní schéma elektronových konfigurací

Perioda	Konfigurace
<i>K</i>	$1s$
<i>L</i>	$2s\ 2p$
<i>M</i>	$3s\ 3p$
<i>N</i>	$4s\ 3d\ 4p$
<i>O</i>	$5s\ 4d\ 5p$
<i>P</i>	$6s\ 4f\ 5d\ 6p$
<i>Q</i>	$7s\ 5f\ 6d\ 7p\ \dots$

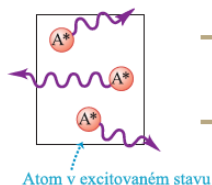
n	l	m_l	N_l	Konfigurace	Slupka
1	0	0	2	$1s^2$	K
2	0	0	2	$2s^2$	L
2	1	-1	6	$2p^6$	
2	1	0			
2	1	1			
3	0	0	2	$3s^2$	M
3	1	-1	6	$3p^6$	
3	1	0			
3	1	1			
3	2	-2	10	$3d^{10}$	
3	2	-1			
3	2	0			
3	2	1			
3	2	2			

- Dvě energetické hladiny daného atomu, mezi kterými může dojít ke třem přechodům
 - Absorpce
 - Stimulovaná emise
 - Spontánní emise

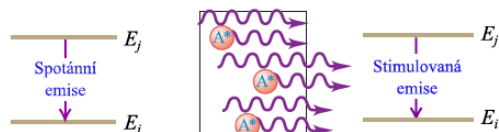
(a) Absorpce



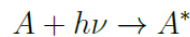
(b) Spontánní emise



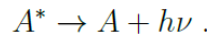
(c) Stimulovaná emise



Přechod z nižšího energetického stavu na vyšší energetický stav ($E_i \rightarrow E_j$) nazýváme (stimulovanou) absorpcí a schematicky ji lze znázornit jako



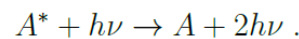
Tedy A_{ji} představuje pravděpodobnost vztaženou na jeden atom a jednotku času tzv. spontánní emise (viz obrázek 20.2(b)), která může být schematicky popsána jako



Předpokládejme rovněž, že světlo o kmitočtu ν ozařující atom ve vyšším stavu nějak pomáhá indukovat (stimulovat) jeho přechod do nižšího stavu. Při spektrální hustotě energie $w(\nu)$ je pravděpodobnost vztažená na jeden atom a jednotku času tzv. stimulované emise

$$B_{ji}w(\nu) ,$$

kde B_{ji} , stejně jako B_{ij} a A_{ij} závisí na detailních vlastnostech stavů E_i a E_j . Schematicky lze stimulovanou emisi vyjádřit jako



- Koeficienty

Koeficienty A_{ji} , B_{ij} a B_{ji} jsou tzv. Einsteinovy koeficienty.

- Aby byl splněn Planckův vyzařovací zákon, musí platit

$$B_{ij} = B_{ji} \quad \frac{A_{ji}}{B_{ji}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad w(\nu) = \frac{\frac{A_{ji}}{B_{ji}}}{\frac{B_{ij}}{B_{ji}} e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

- Inverzní populace (více info str. 279)

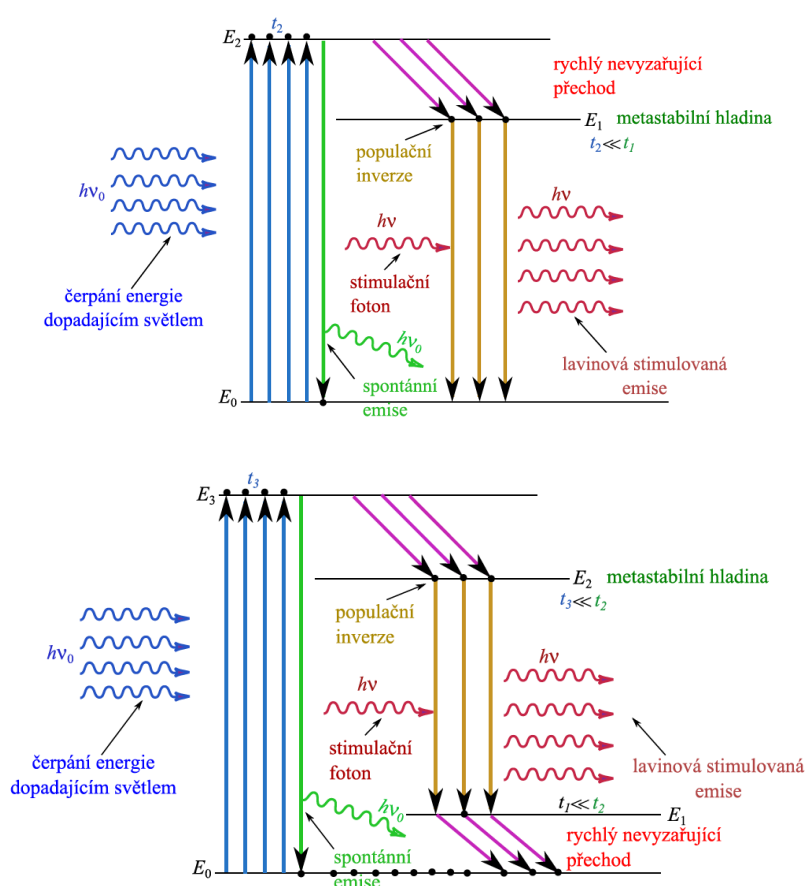
- Vede k zesílení dopadajícího elektromagnetického záření (světla)
- Stav, kdy je na vyšší energetické hladině větší počet atomů $N_j > N_i$
- Látka, ve které dosáhneme inverzní populace, je považována za aktivní prostředí

- Laser (= light amplification by stimulated emission of radiation)

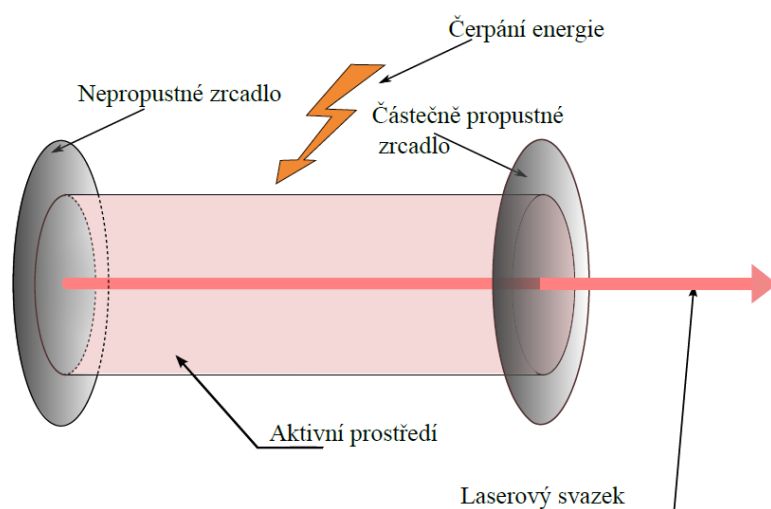
- Zařízení je tvořeno 3 základními částmi

1. Aktivní prostředí - pevná látka (sklo, krystal nebo polovodič), plyn anebo směs plynů,
2. Optický rezonátor (dvě či více zrcadel, alespoň jedno ze zrcadel je částečně propustné a slouží k odvodu světla z rezonátoru),
3. Zdroj budící energie - výbojka, elektrický výboj v plynu, chemická reakce, atd.

- Tříhladinový / čtyřhladinový laser



- Laserový zdroj světla



- Pásový model elektronové struktury pevných látek
 - Krystal – pevná látka, v níž jsou stavební prvky pravidelně uspořádány v opakujícím se vzoru, který se zachovává na velké vzdálenosti
 - Krystalová mřížka – množina určitých myšlených abstraktních bodů, pomocí nichž se popisuje struktura krystalu neboli vzájemná poloha částic v krystalu
 - Elementární buňka – nejmenší část krystalické struktury
- Řešení Schrödingerovy rovnice pro elektrony vystavené působení periodického potenciálu
 - Elektrony jsou vystaveny vlivu jednorozměrného periodického potenciálu
 - Potenciální energie bude jednorozměrnou periodickou funkcí s periodou krystalické mřížky $U(x + a) = U(x)$
 - Blochův teorém

Blochův teorém nám říká, že pro periodický potenciál $U(x + a) = U(x)$ řešení Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\phi(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + U(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

má následující tvar

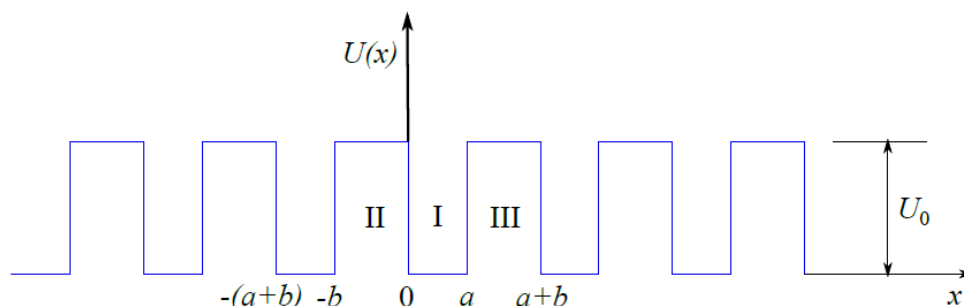
$$\phi(x) = u(x)e^{jkx},$$

kde $u(x)$ má periodu krystalové mřížky a a splňuje vztah

$$u(x) = u(x + a).$$

- Blochova funkce $\phi(x) = u(x)e^{jkx}$
- Periodicky se opakující Blochova funkce $|\phi(x + a)|^2 = |\phi(x)|^2$
 $\phi(x + a) = e^{jka}\phi(x)$

- Kronigův-Penneyův model
 - Založen na uvažování periodické potenciální energie



$$\frac{Q^2 - K^2}{2QK} \sinh(Qb) \sin(Ka) + \cosh(Qb) \cos(Ka) = \cos[k(a+b)]$$

$$b \rightarrow 0 \quad \frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$$

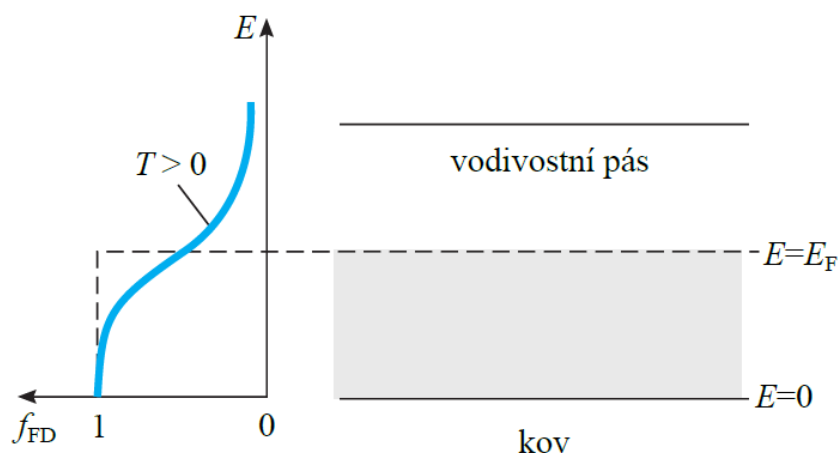
- Pro jisté hodnoty K budou existovat zakázané pásy energií, které budou oddělovat dovolené pásy energií

- Fermiho-Diracovo rozdělení $f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1}$

- E_F – Fermiho energie

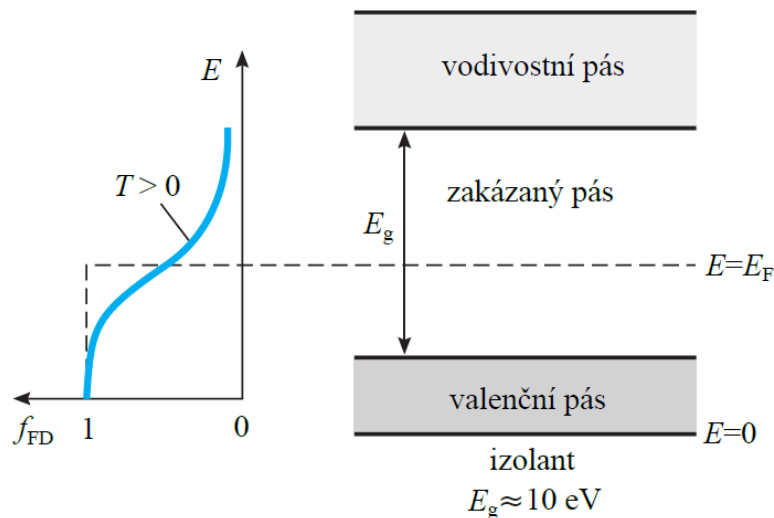
- Vodiče

- Při teplotě $T = 0$ je zaplněna přesně polovina vodivostního pásu
- Jakmile je teplota vyšší $T > 0$, tak na základě Fermiho-Diracova rozdělení existuje nenulová pravděpodobnost, že elektrony obsadí i hladiny energie nacházející se nad středem vodivostního pásu (nad Fermiho energií E_F)
- Některé elektrony jsou tepelně excitovány na úrovně energií ležící nad Fermiho energií E_F
- Přesto zůstává velké množství hladin energie ne E_F volných
- Jestliže na kovový vzorek přiložíme napětí, tak může vzorkem protékat elektrický proud, protože je v něm velmi mnoho prázdných hladin o vyšších energiích, na které elektrony mohou přecházet
- Odtud je také zřejmé, že pro vyšší teploty se zhoršuje vodivost kovů, jelikož je vyšší pravděpodobnost obsazení hladin energie nad Fermiho hladinou, a tudíž takto obsazené hladiny energie nemohou být využity k vedení elektrického proudu



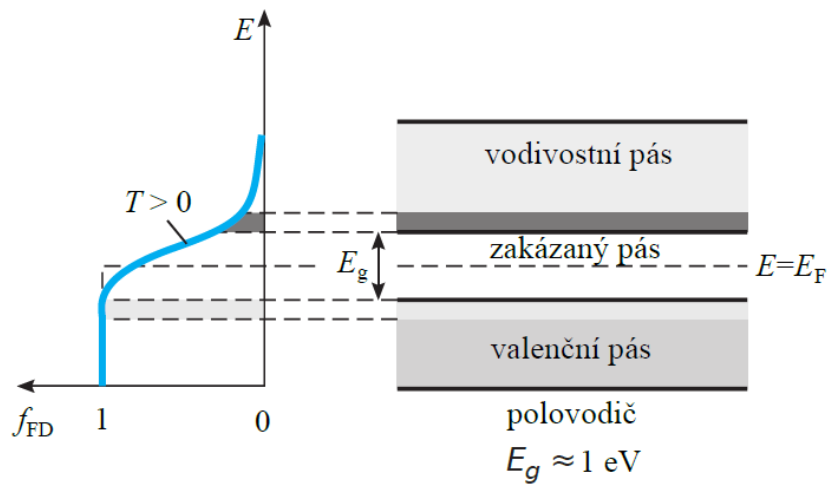
- Nevodiče

- Mezi valenčním pásem a prázdným vodivostním pásem se nachází poměrně široký zakázaný pás, jehož šířka je zhruba $E_g \approx 10$ eV
- Na základě Fermiho-Diracova rozdělení můžeme konstatovat, že při běžných teplotách je jen velmi malá pravděpodobnost, že by tepelně excitovaný elektron dosáhl vodivostního pásu a v něm se podílel na vedení elektrického proudu
- Takže tento typ krystalů vykazuje extrémně malou elektrickou vodivost
- Elektrony z plně obsazeného energetického pásu (valenční pás) tedy nemají volné místo, kam by se mohly přesunout po přiložení elektrického napětí
- Běžná elektrická napětí nedodají elektronům potřebnou energii, aby překročily zakázaný pás

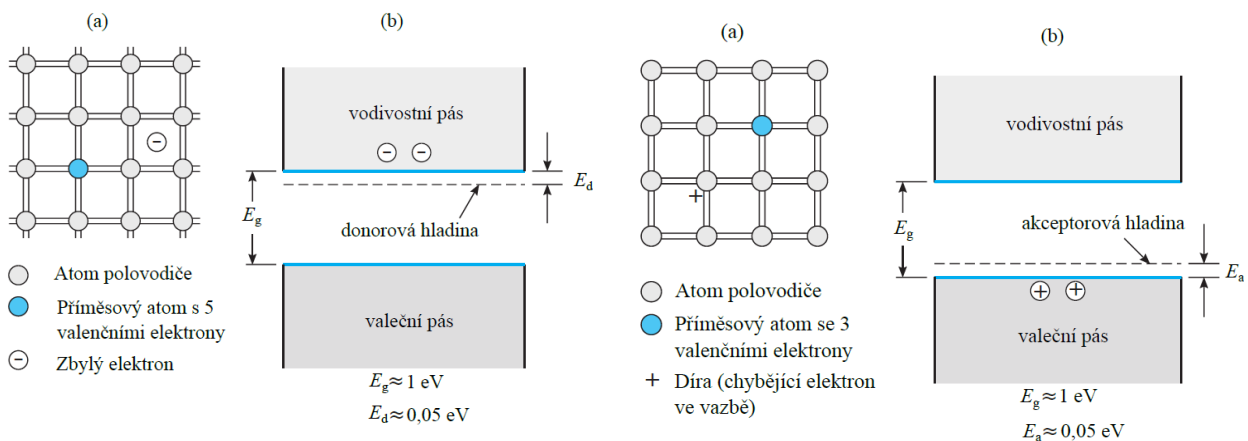


- Polovodiče

- Polovodiče jsou krystaly, které jsou svojí strukturou energetických pásů podobné izolantům s tím rozdílem, že šířka energetického pásu je přibližně 10x užší, než je tomu u izolantů
- Stejně jak u izolantů je při teplotě $T = 0$ se žádný elektron nenachází ve vodivostním pásu
- Avšak při normálních teplotách (~ 300 K) je situace výrazně odlišná
- Vlivem Fermiho-Diracově rozdělení, že se již z relativně významnou pravděpodobností mohou nacházet elektrony ve vodivostním pásu (díky poměrně úzkému zakázanému pásu)
- Díky tomu přijatelné množství tepelně excitovaných elektronů se nachází při běžných teplotách ve vodivostním pásu, kde se mohou podílet na vedení elektrického proudu
- Na rozdíl od vodičů však vodivost roste s rostoucí teplotou, protože se s rostoucí teplotou roste i počet tepelně excitovaných elektronů ve vodivostním pásu
- Mezi polovodiče patří např. Ge, Si, GaAs, GaP



- Vlastní polovodiče
 - Počet elektronů ve vodivostním pásu je shodný s počtem děr ve valenčním pásu
- Nevlastní (příměsové) polovodiče
 - Vytvářené vhodně zvolenými příměsí do původně vlastního (bezpříměsového) polovodiče
 - Polovodič typu n (více info str. 296)
 - Obsahuje více elektronů ve vodivostním pásu, než je jeho počet děr
 - Donor = prvek příměsí, který má o jeden elektron více
 - Volné elektrony atomu donoru zprostředkovávají svým pohybem záporných (negativních) nábojů elektronovou vodivost



- Polovodič typu p (více info str. 297)
 - Obsahuje více děr ve valenčním pásu, než je elektronů ve vodivostním pásu
 - Akceptor = prvek příměsí, který má o jeden elektron méně
 - Díry se chovají jako kladné (pozitivní) nosiče náboje