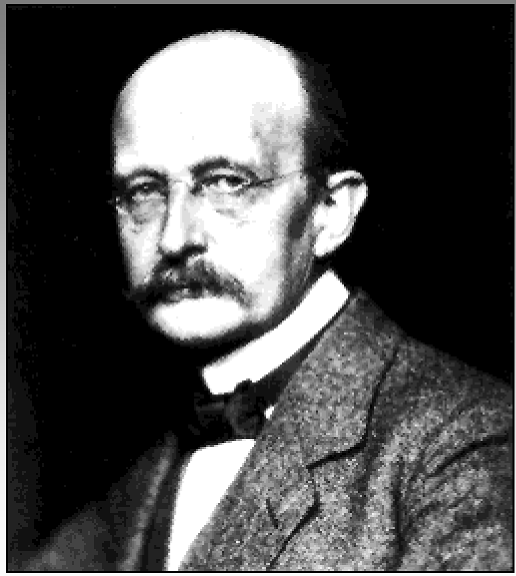
KVANTOVÁ MECHANIKA

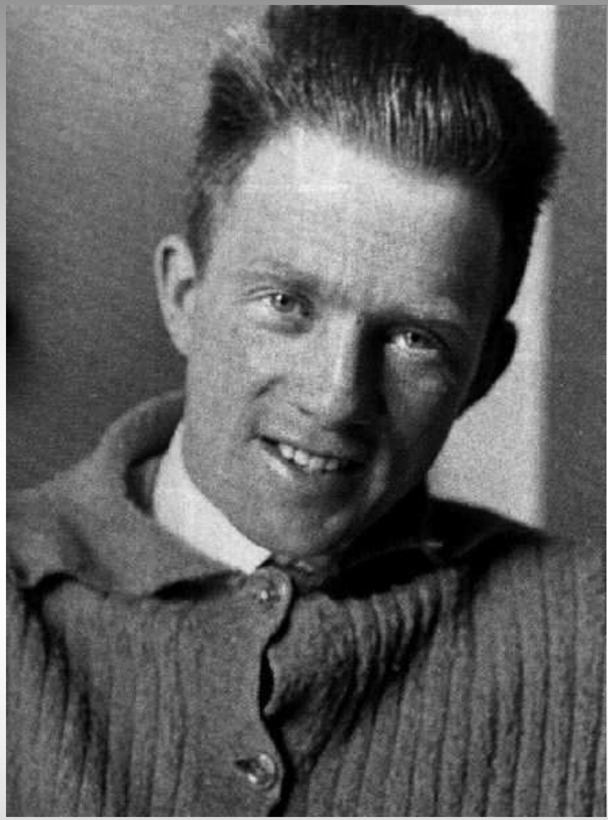


PLANCK 1858-1947

EINSTEIN 1879-1955

BOHR 1885-1962

de BROGLIE 1892-1987



HEISENBERG 1901-1976

SCHRÖDINGER 1887-1961

BORN 1882-1970

JORDAN 1902-1980

PAULI 1900-1958

DIRAC 1902-1984

VŠECHNO JSOU PODIVNÉ ČÁSTICE

PROJEVUJÍCÍ SE LOKÁLNÍMI STOPAMI,

JEJICHŽ VÝSKYT JE POPSÁN VLNOVOU FUNKCÍ,

JIMŽ NELZE PŘIPSAT OSTROU TRAJEKTORII

A KTERÉ SE ZA STEJNÝCH OKOLNOSTÍ CHOVAJÍ RŮZNĚ.

VOLNÉ ČÁSTICE JSOU POPSÁNY POSTUPNÝMI ROVINNÝMI VLNAMI

$$\Psi(\mathbf{r},t) = A.\exp(i/\hbar.(\mathbf{p}.\mathbf{r} - Et))$$

KDE $E = \hbar\omega$ A $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \hbar 2\pi/\lambda\,\mathbf{n}$

JSOU VZTAHY MEZI ENERGIÍ A FREKVENCÍ A HYBNOSTÍ A VLNOVÝM VEKTOREM

VLNOVÉ CHOVÁNÍ SE PROJEVÍ, POKUD JE VLNOVÁ DÉLKA DOSTATEČNĚ DLOUHÁ,
DELŠÍ NEŽ TYPICKÉ ROZMĚRY VE ZKOUMANÉM PŘÍPADĚ

TYPICKÉ HODNOTY : $\lambda = 2\pi\hbar/mv = 2\pi\hbar/\sqrt{(2mE)}$

ELEKTRON : $m \approx 10^{-30}$ **kg,** $E \approx 1$ **eV -** $\lambda \approx 1$ **nm**

PROTON : $m \approx 1.7 \times 10^{-27}$ **kg,** $E \approx 1$ **MeV -** $\lambda \approx 28$ **fm**

ČLOVĚK : $m \approx 80$ **kg,** $v \approx 2$ **m/s -** $\lambda \approx 4 \times 10^{-36}$ **m**


ODTUD : SVĚTLO JE
PROUD FOTONŮ

DŮSLEDKY VZTAHU ENERGIE-FREKVENCE PRO SVĚTLO:

DLOUHÉ VLNY JSOU NA LECCOS KRÁTKÉ.

PODMÍNKA : ENERGIE FOTONU $\hbar\omega = 2\pi \hbar c/\lambda \geq$ POTŘEBNÁ ENERGIE

TAK PRO EXCITACI A IONIZACI ATOMŮ A MOLEKUL NEBO PRO DISOCIACI MOLEKUL

PRO FOTOEFEKT (UVOLNĚNÍ ELEKTRONŮ Z LÁTKY)
JE POTŘEBNÁ ENERGIE $A + ½\, mv^2$
(VÝSTUPNÍ PRÁCE + KINETICKÁ ENERGIE ELEKTRONU)

ELEKTRONY SE CHOVAJÍ JAKO VLNY $\Rightarrow$ ELEKTRONOVÝ MIKROSKOP

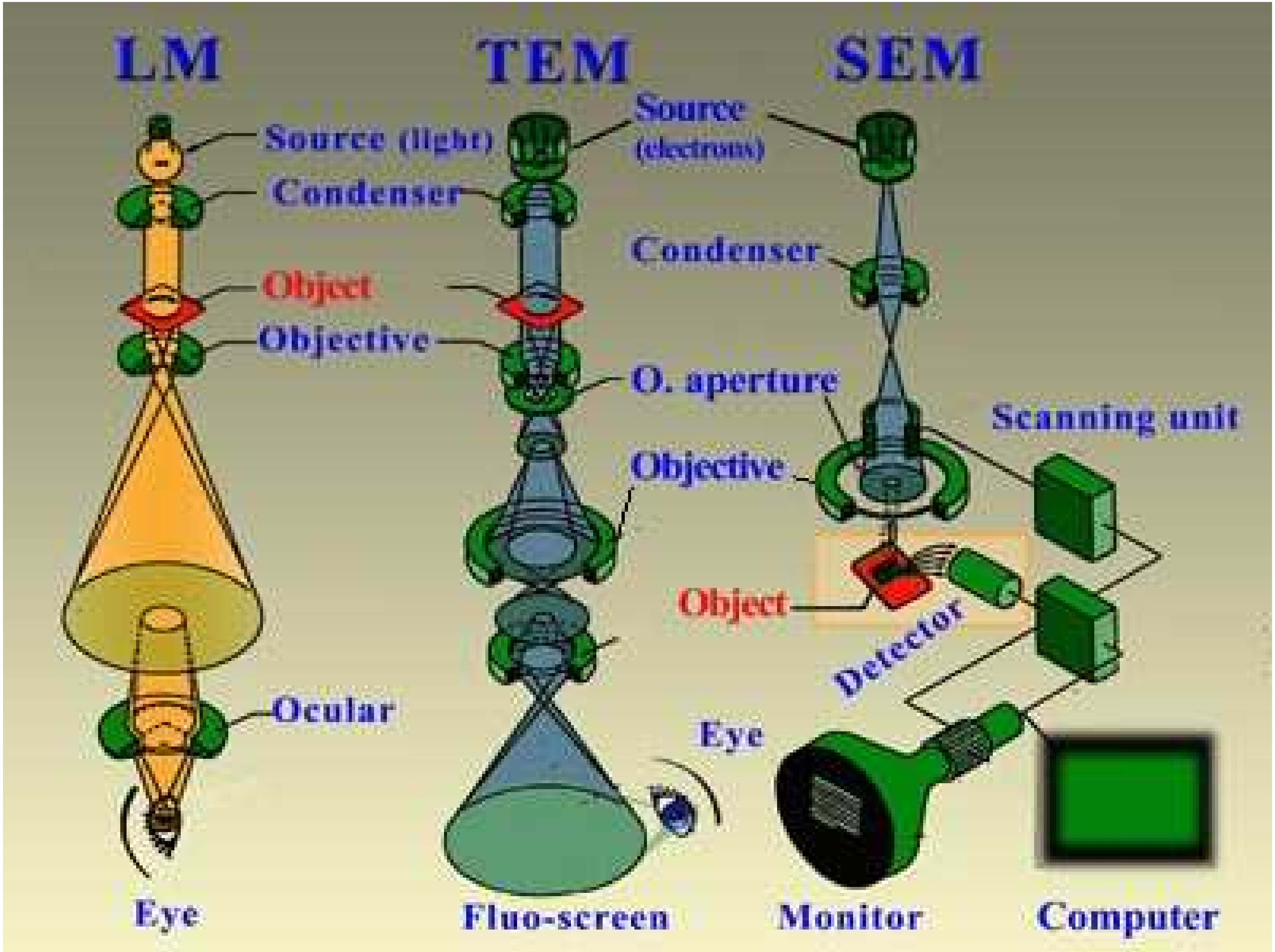
VLNOVÁ DÉLKA $\lambda = 2\pi\hbar/p = 2\pi\hbar/\sqrt{(2meU)}$

$= 1.227\ \mathrm{nm}/\sqrt{(U[\mathrm{V}])}$

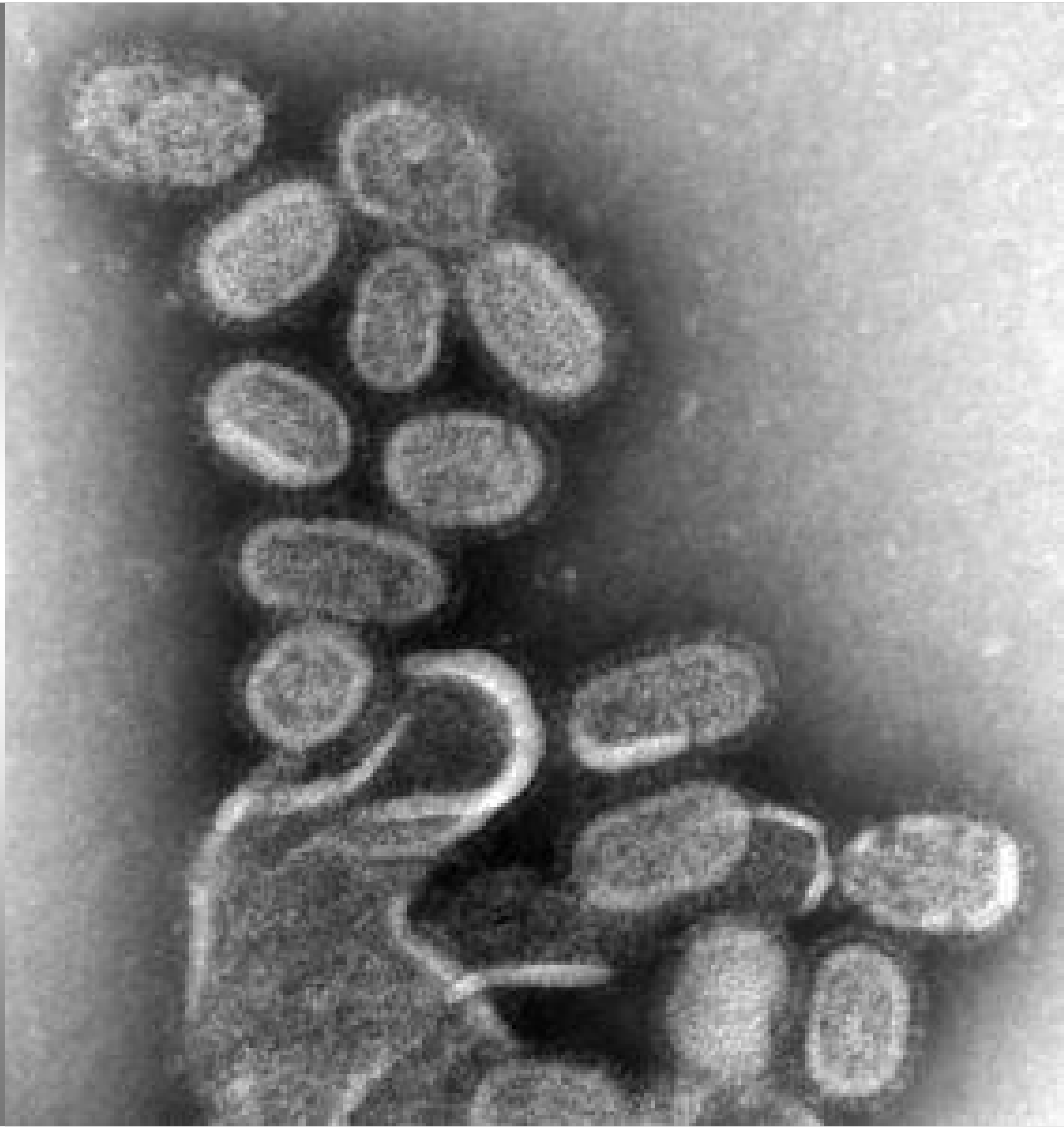
JSOU 2 TYPŮ

TRANSMISNÍ (PROZAŘOVACÍ) – TENKÉ VZORKY, URYCHLENÍ 100-300 kV, VYSOKÉ VAKUUM, ROZLIŠENÍ AŽ 0.1 nm

SKANOVACÍ (ŘÁDKOVACÍ) – VZORKY LIBOVOLNÉ, URYCHLENÍ 0.2-30 kV, VYSOKÉ VAKUUM, ROZLIŠENÍ cca 1 nm



LM
TEM
SEM
Source (light)
Source
(electrons)
Condenser
Condenser
Object
Objective
O. aperture
Scanning unit
Objective
Object
Detector
Ocular
Eye
Eye
Fluo-screen
Monitor
Computer



A
-
H
1
N
1

V OBECNÉM PŘÍPADĚ,
KDY ČÁSTICE NENÍ VOLNÁ,
JE TVAR VLNOVÉ FUNKCE SLOŽITĚJŠÍ

JE-LI V SYSTÉMU VÍCE ČÁSTIC,
PAK MAJÍ JEDNU SPOLEČNOU
VLNOVOU FUNKCI

JSOU-LI ČÁSTICE NAVÍC STEJNÉ,
JE VLNOVÁ FUNKCE V ODPOVÍDAJÍCÍCH
PROMĚNNÝCH
SYMETRICKÁ (BOSONY)
RESP. ANTISYMETRICKÁ (FERMIONY)

STEJNÉ ČÁSTICE NEJDOU ROZLIŠIT !

POMOCÍ VLNOVÉ FUNKCE POČÍTÁME PRAVDĚPODOBNOSTI NAMĚŘENÝCH VÝSLEDKŮ

SPECIÁLNĚ $|\psi(x, y, z, t)|^2 dV$ JE PRAVDĚPODOBNOST NALEZENÍ ČÁSTICE V OBJEMU O VELIKOSTI dV V MÍSTĚ O SOUŘADNICÍCH x, y, z V ČASE t

FYZIKÁLNÍM VELIČINÁM ODPOVÍDAJÍ OPERÁTORY

OPERÁTOR (OZN. STŘÍŠKOU, NAPŘ. $\hat{A}$) PŘIŘAZUJE DANÉ FUNKCI ψ JINOU FUNKCI $\varphi = \hat{A}\psi$

UVAŽOVANÉ OPERÁTORY BUDOU LINEÁRNÍ

ROVNICE PRO VLASTNÍ HODNOTY :

$$\hat{A}\psi = a\,\psi \;,\; \psi \neq 0$$

HODNOTY, PRO NĚŽ EXISTUJE ŘEŠENÍ = VLASTNÍ HODNOTY, PŘÍSLUŠNÉ FUNKCE = VLASTNÍ FUNKCE OPERÁTORU

PRO TZV. HERMITOVSKÉ OPERÁTORY JSOU VLASTNÍ HODNOTY REÁLNÁ ČÍSLA

**JE-LI KVANTOVÝ SYSTÉM VE STAVU,
KTERÝ JE POPSÁN VLNOVOU FUNKCÍ,
KTERÁ JE VLASTNÍ FUNKCÍ OPERÁTORU
NĚJAKÉ FYZIKÁLNÍ VELIČINY,
PAK PŘI MĚŘENÍ TÉTO VELIČINY NA
TOMTO SYSTÉMU ZJISTÍME HODNOTU
ODPOVÍDAJÍCÍ PŘÍSLUŠNÉ VLASTNÍ
HODNOTĚ**

ZÁKLADNÍ OPERÁTORY KVANTOVÉ MECHANIKY

OPERÁTOR POLOHY $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, KDE PRO *x*-SLOŽKU PLATÍ $\hat{x}\Psi = x\Psi$ A OBDOBNĚ PRO DALŠÍ SLOŽKY

OPERÁTOR HYBNOSTI $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, TJ. NAPŘ. PRO *x*-SLOŽKU PLATÍ $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$.

TYTO OPERÁTORY NEKOMUTUJÍ.

PLATÍ : $\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i = i\hbar\delta_{ij}$

NEKOMUTUJÍCÍ OPERÁTORY NEMOHOU
SDÍLET VLASTNÍ FUNKCE.
(KOMUTUJÍCÍ MOHOU VŽDY.)

SYSTÉMU PROTO NELZE PŘIŘADIT „OSTRÉ“
HODNOTY NEKOMUTUJÍCÍCH VELIČIN
A OVŠEM ANI TAKOVÉ VELIČINY ZMĚŘIT.

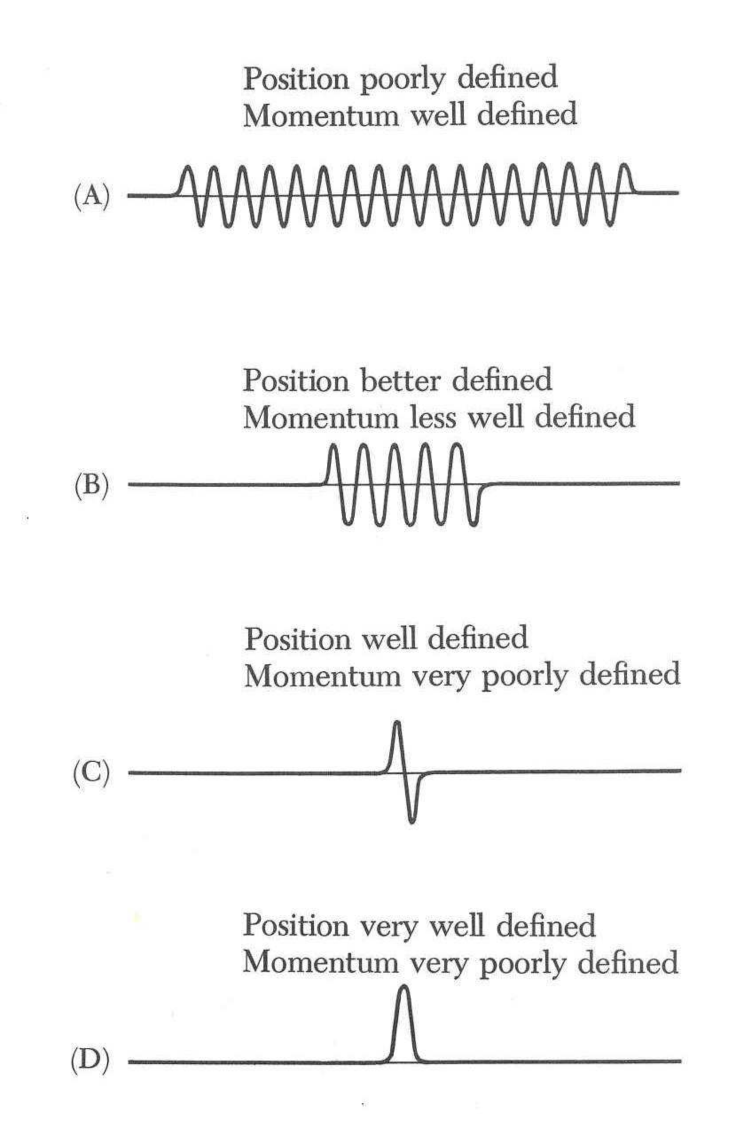
ČÍM PŘESNÉJI URČÍME JEDNU Z NEKOMUTUJÍCÍCH
VELIČIN, TÍM NEPŘESNĚJI URČÍME DRUHOU,
A NAOPAK.

PRO NEURČITOST POLOHY Δx
A HYBNOSTI Δp_x PLATÍ

$$\Delta x . \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$$

HEISENBERG 1927

OBDOBNĚ PRO *y*- a *z*-SLOŽKY.



ODŮVODNĚNÍ

$\Delta x \sim L$

$k \sim 1/\lambda \sim n/L$

$\Delta k \sim 1/L$

$\Delta x .\ \Delta k \sim 1$

ODTUD PRO NEURČITOST POLOHY A RYCHLOSTI :

ELEKTRON (PRAVÁ STRANA $\approx 6 \times 10^{-5}$ m^2/s) :
V ATOMU : $\Delta x \approx 0.1$ nm $\Rightarrow \Delta v \approx 600$ km/s ,
STAČÍ-LI $\Delta x \approx 1$ μm JE $\Delta v \approx 60$ m/s

PRACH ($\phi \approx 0.1$ mm, $m \approx 1$ μg, PRAVÁ STRANA $\approx$
5×10^{-24} m^2/s) :
LZE VOLIT I $\Delta x \approx$ 1 pm A $\Delta v \approx$ 1 pm/s

OPERÁTOR ENERGIE - HAMILTONIÁN

KLASICKY
ENERGIE = KINETICKÁ ENERGIE + POTENCIÁLNÍ ENERGIE,

TJ. $E = \frac{1}{2} m v^2 + V(r) = p^2/2m + V(r)$

KVANTOVĚ $$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2 / 2m + V(\hat{\mathbf{r}})$$

OBVYKLE

ČASOVÝ VÝVOJ
SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$$

OPERÁTOR ENERGIE = HAMILTONIÁN POPISUJE VÝVOJ VLNOVÉ FUNKCE SYSTÉMU

DETERMINISTICKY SE MĚNÍ VLNOVÁ FUNKCE URČUJÍCÍ PRAVDĚPODOBNOSTI VÝSLEDKŮ MĚŘENÍ !

VLASTNÍ STAVY OPERÁTORU ENERGIE = ENERGETICÉ STAVY JSOU STACIONÁRNÍ.

PROTOŽE

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathrm{E}} = \hat{\mathrm{H}}\Psi_{\mathrm{E}} = \mathrm{E}\Psi_{\mathrm{E}} ,$$

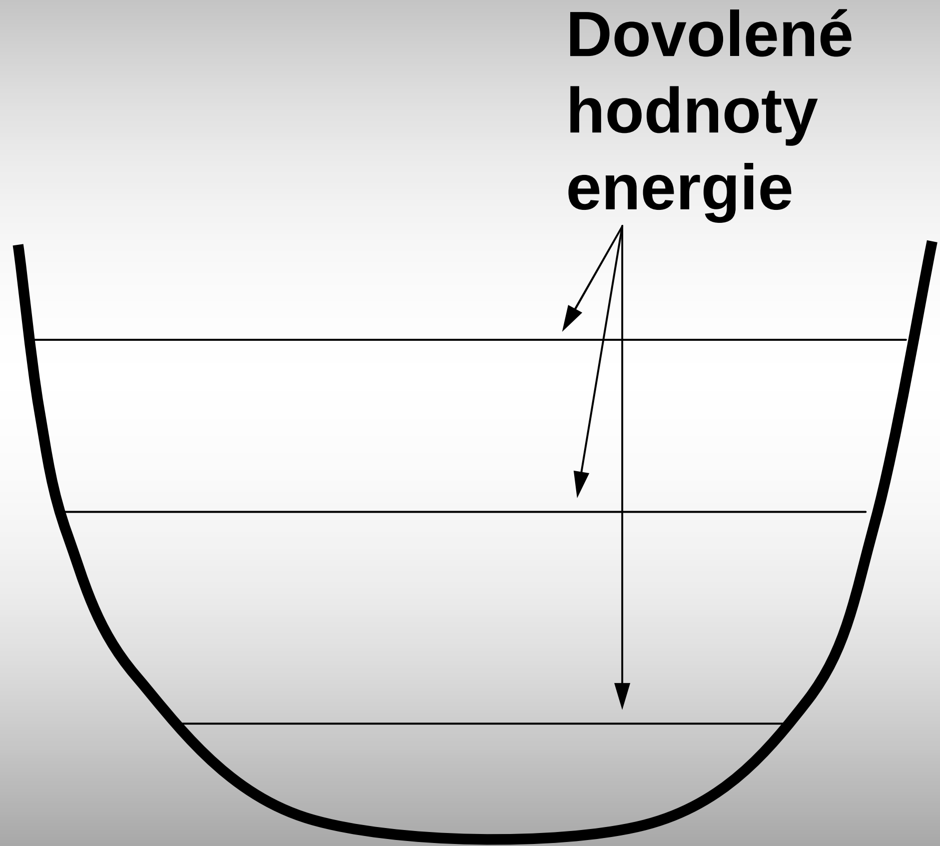
JE

$$\Psi_{\mathrm{E}} = \psi(\mathbf{r}).\exp(-\tfrac{i}{\hbar}\mathrm{E}.t)$$

A ČASOVÝ FAKTOR U VÝRAZŮ PRO PRAVDĚPODOBNOST VYPADNE. (KVADRÁT AMPLITUDY)

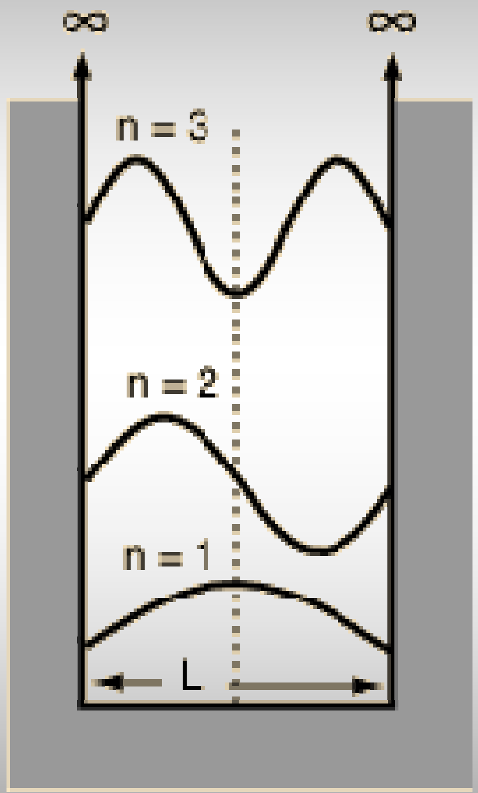
A NAOPAK.

VÁZANÉ STAVY MAJÍ DISKRÉTNÍ HODNOTY ENERGIE



POTENCIÁLOVÁ JÁMA

NEKONEČNÁ HRANATÁ JÁMA



x = 0 at left wall of box.

VZTAH HYBNOST – VLNOVÁ DÉLKA

$$\boldsymbol{p} = 2\pi\hbar/\lambda$$

PODMÍNKA PŘÍPUSTNOSTI

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{n}.\lambda/2$$

ODTUD DISKRÉTNÍ ENERGIE

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{p}^2/2\boldsymbol{m} = 4\pi^2\hbar^2/2\boldsymbol{m}\lambda^2 =$$

$$= \boldsymbol{n}^2\,\pi^2\hbar^2/2\boldsymbol{m}\boldsymbol{L}^2$$

PŘÍSLUŠNÉ ŘEŠENÍ

$$\psi(x) = A\sin(p/\hbar.x) = A\sin(n\pi x/L)$$

PARABOLICKÁ JÁMA = HARMONICKÝ OSCILÁTOR

POTENCIÁLNÍ ENERGIE $V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

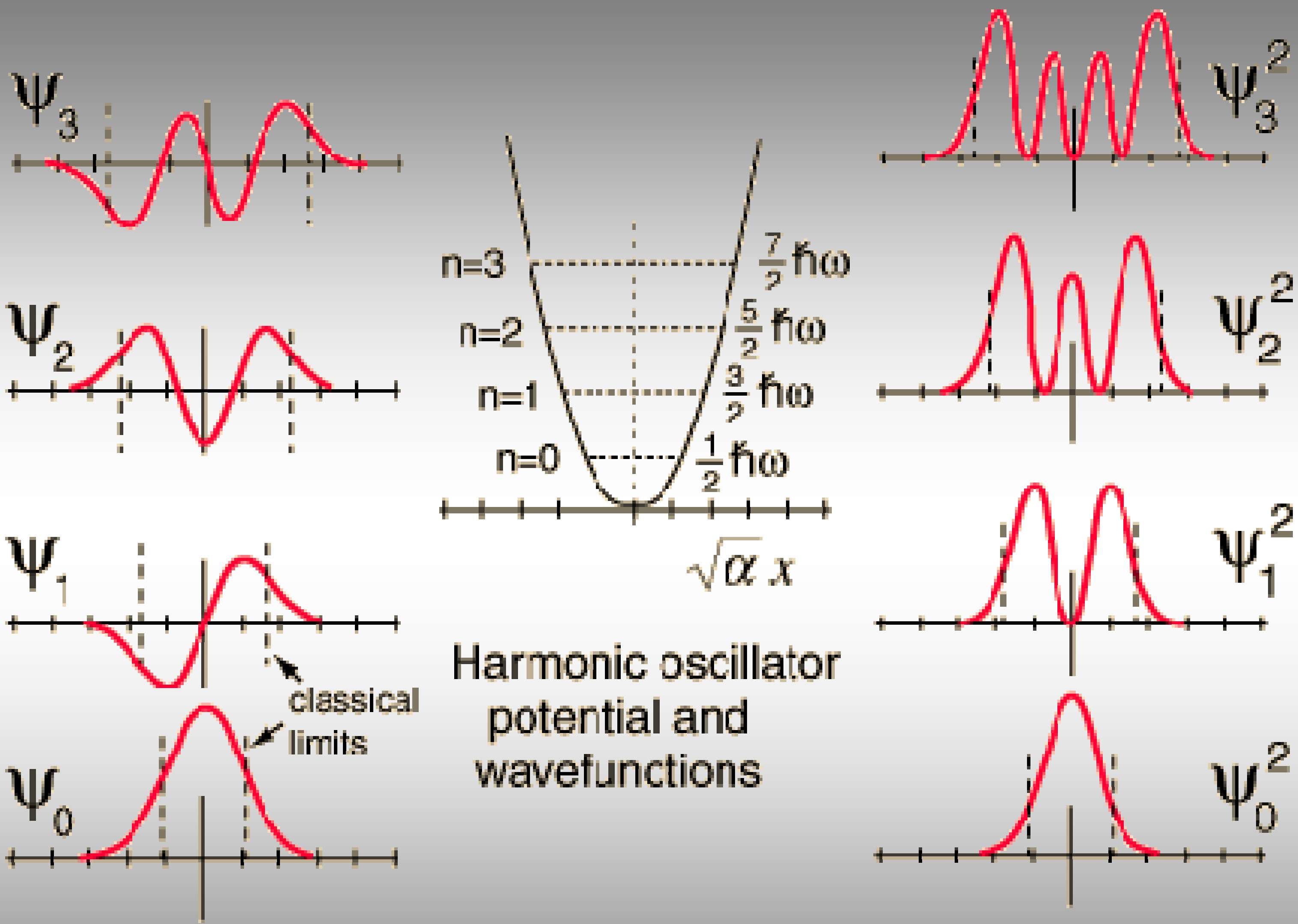
DOVOLENÉ ENERGIE : $E_n = \hbar\omega\,(n + \frac{1}{2})$

TYPICKÁ DÉLKA *l* : Z $m\omega^2 l^2 = \hbar\omega$, DÁ $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

VOLME $x = \xi . l$, PAK ŘEŠENÍ MAJÍ TVAR

$$\psi = H_n(\xi).\exp(-\tfrac{1}{2}\xi^2),$$

KDE $H_n(\xi)$ JSOU HERMITOVY POLYNOMY.



$$H_0(y) = 1,\ H_1(y) = y,\ H_2(y) = 4y^2 - 2,\ H_3(y) = 8y^3 - 12y$$

APLIKACE

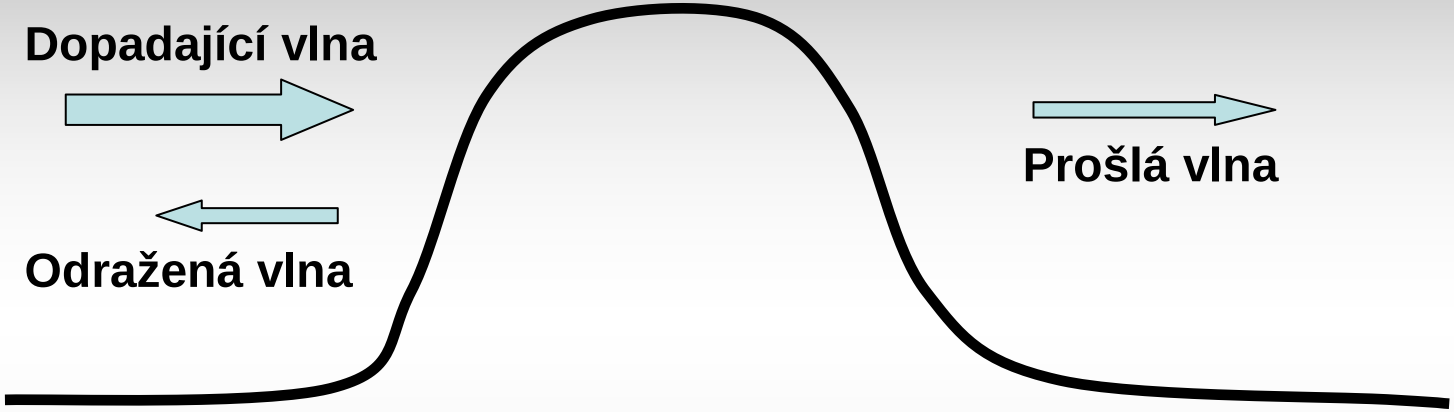
STRUKTURA ATOMU

STRUKTURA MOLEKULY

STRUKTURA JÁDRA

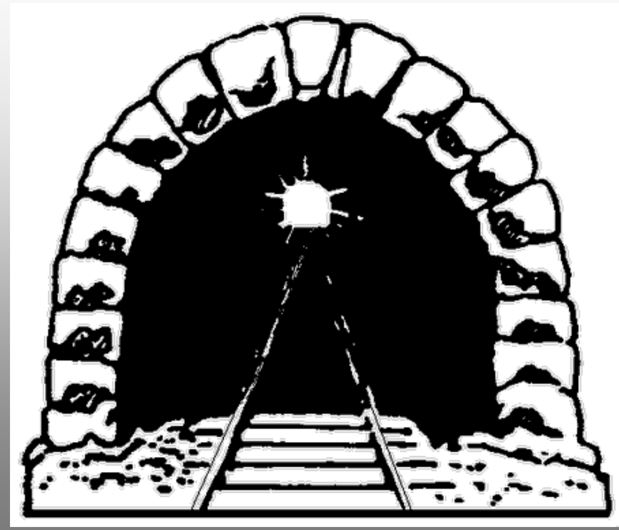
NÍŽE

POTENCIÁLOVÁ BARIÉRA

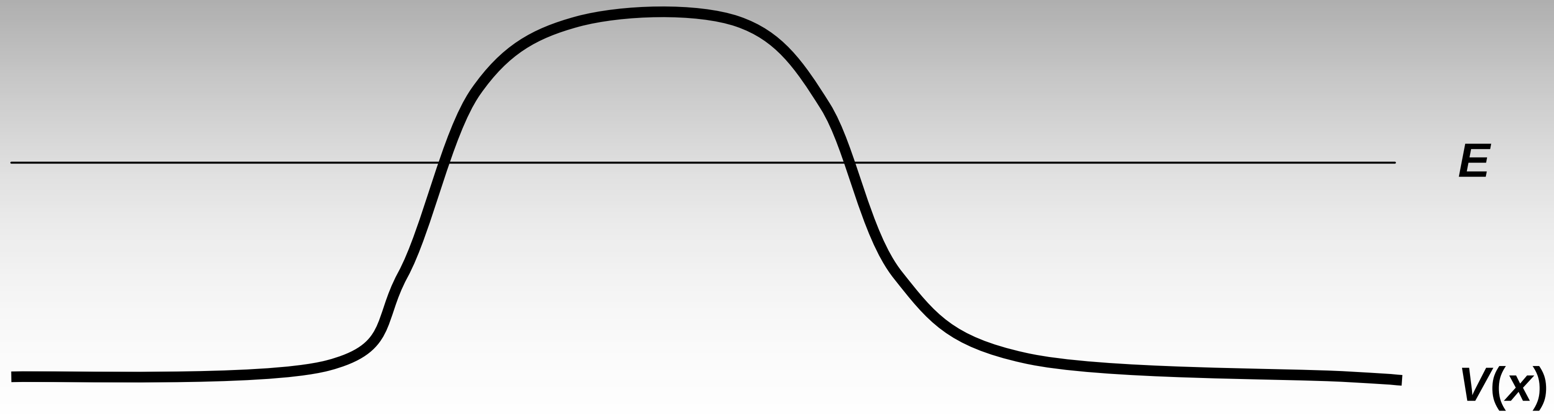


ČÁSTICE MŮŽE „PROJÍT“
I PŘI NEDOSTATEČNÉ ENERGII.

TUNELOVÝ JEV



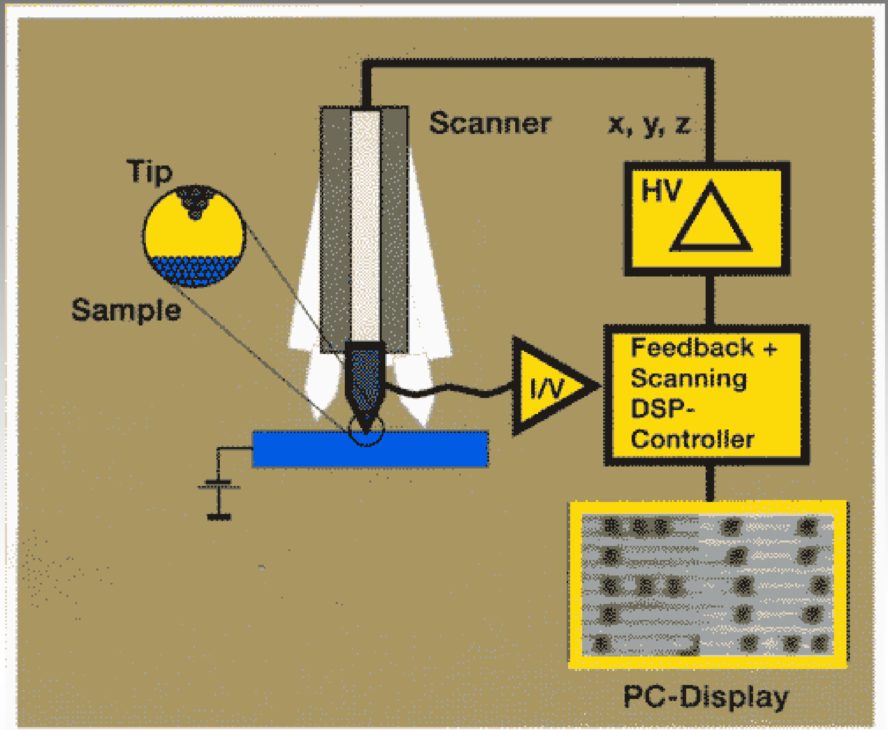
KOEFICIENT PRŮCHODU



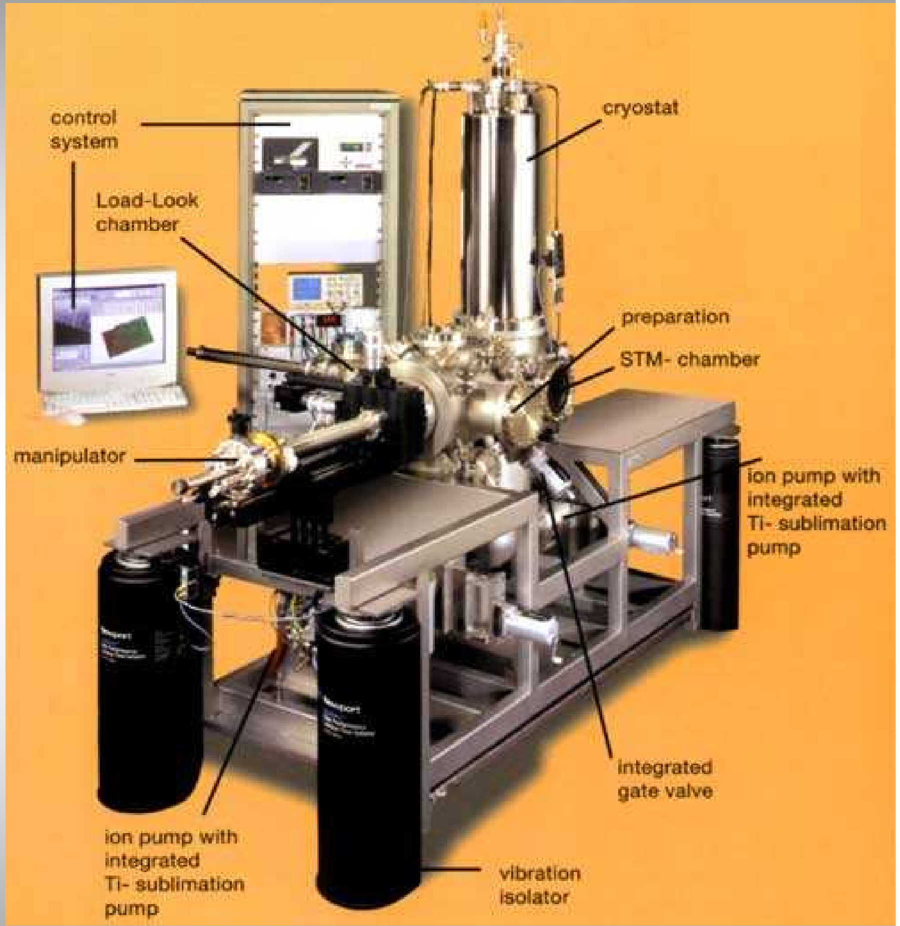
VLNA TVARU $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p.dx\right)$ **, KDE** $p=\sqrt{2m(E-V)}$
I V OBLASTI, KDE HODNOTA *p* JE IMAGINÁRNÍ,

DÁ FAKTOR $\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int\sqrt{2m(V-E)}dx\right)$,
PRAVDĚPODOBNOST PRŮCHODU JE KVADRÁT

$$D\approx\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int\sqrt{2m(V-E)}dx\right)$$



STM

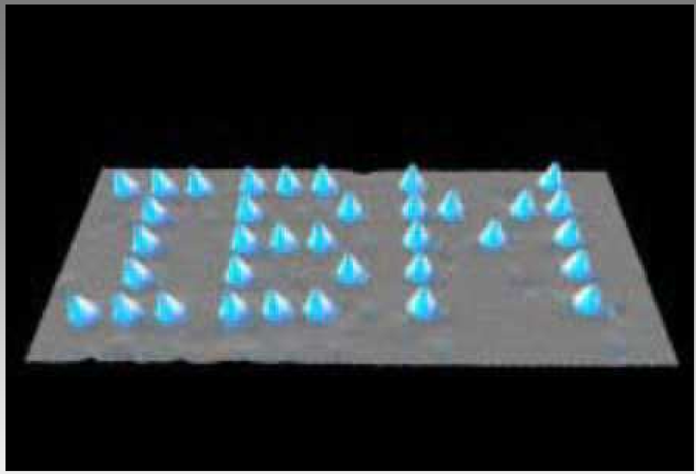


$$I \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}.\sqrt{2m\Phi}.s\right)$$

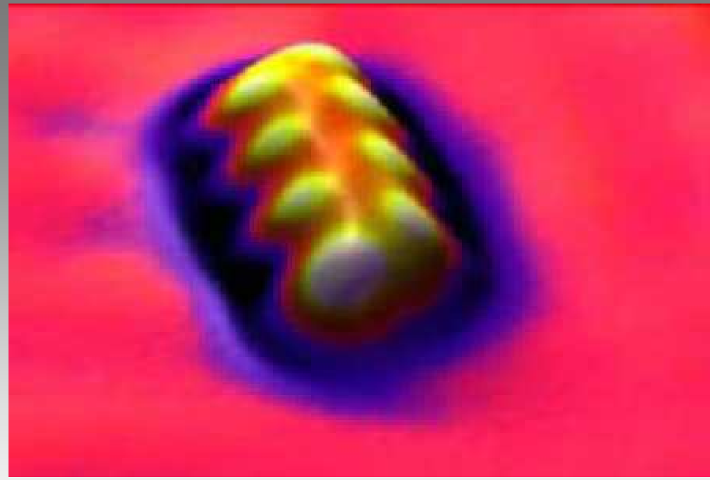
I = PROUD, Φ = STŘEDNÍ VÝŠKA BARIÉRY, *s* = VZDÁLENOST

PROFIL ZE ZÁVISLOSTI *I* = f(s) NEBO ZPĚTNOU VAZBOU NA *I* = konst.

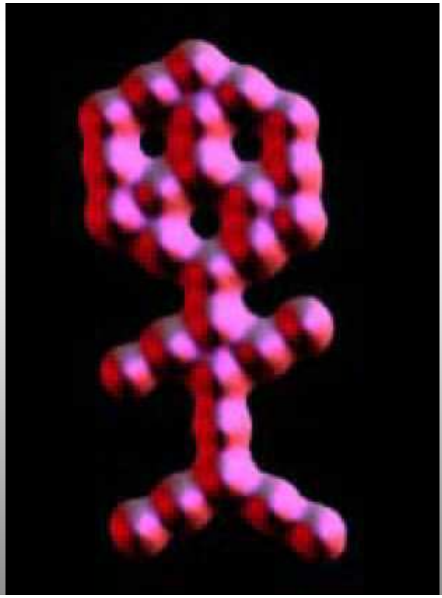
ROZLIŠENÍ DESETINY nm



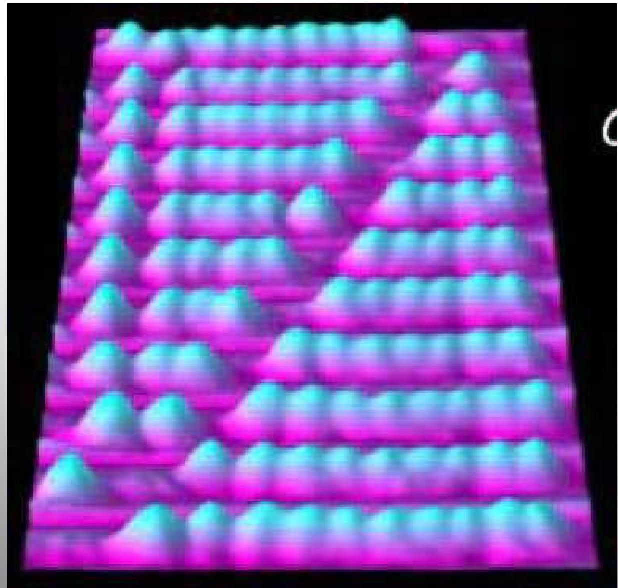
Xe na Ni (110)



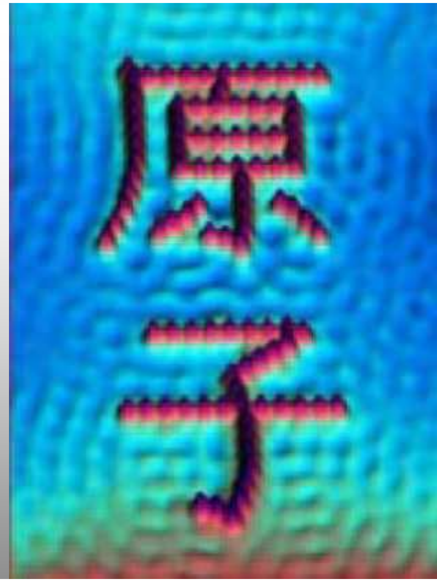
Cs a I na Cu (111)



CO na Pt (111)



C_{60} na Cu



Fe na Cu (111)

ORBITÁLNÍ MOMENT HYBNOSTI

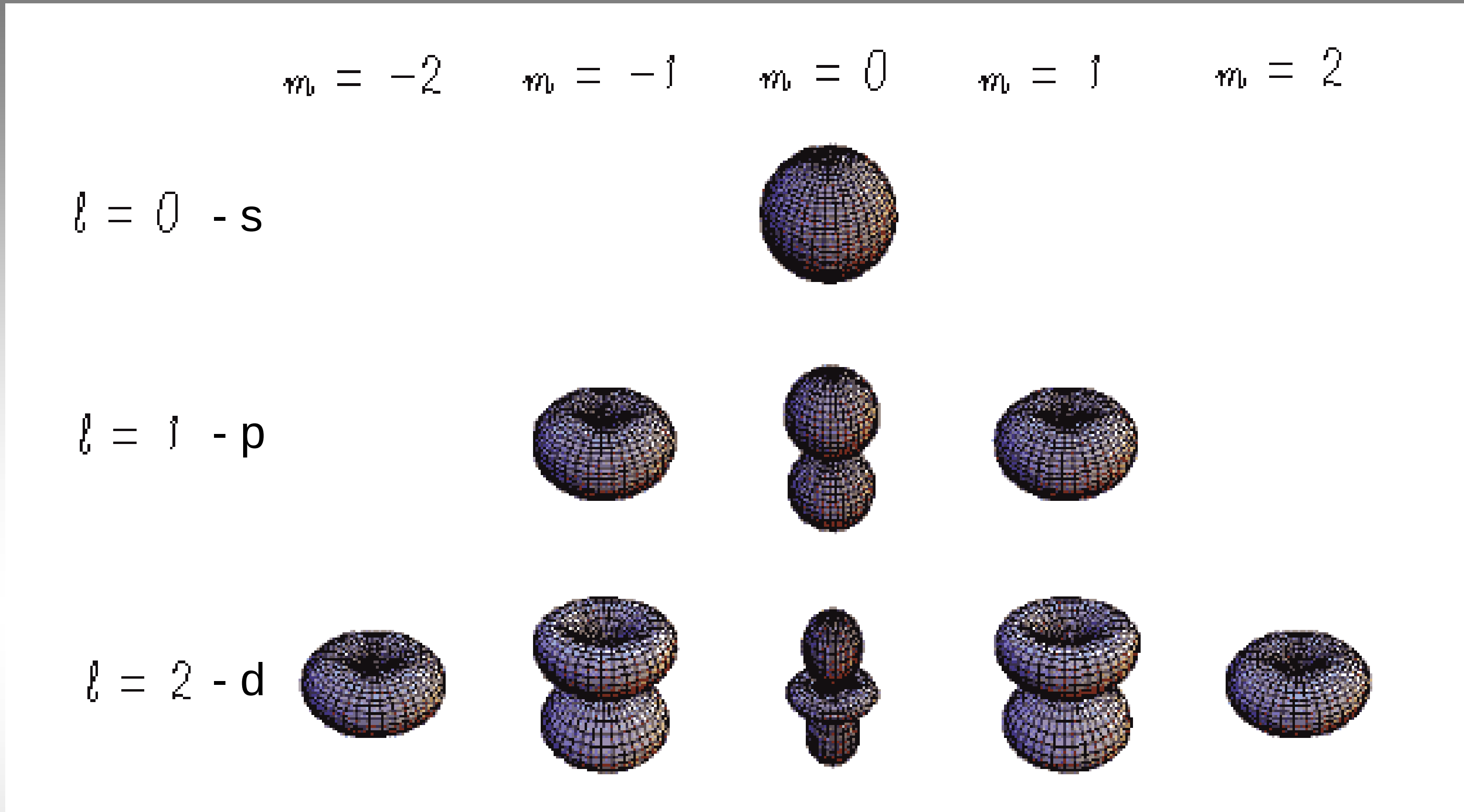
DEFINICE ANALOGICKÁ KLASICKÉ FYZICE

$$\hat{\mathrm{L}} = \hat{\mathrm{r}} \times \hat{\mathrm{p}}$$

SOUČASNĚ LZE MĚŘIT KVADRÁT VELIKOSTI MOMENTU A JEDNU SLOŽKU (OBVYKLE z)

PLATÍ : $\hat{\mathrm{L}}^2\, \mathrm{Y}_{lm} = \boldsymbol{l}.(\boldsymbol{l}+1)\, \hbar^2\, \mathrm{Y}_{lm}$ **A** $\hat{L}_z \mathrm{Y}_{lm} = \boldsymbol{m}\hbar\, \mathrm{Y}_{lm}$

KDE *l* A *m* JSOU CELÁ ČÍSLA, I*m*I $\leq$ *l*
(K DANÉMU *l* MÁME (2*l* + 1) HODNOT *m*),
A Y_{lm} KULOVÉ FUNKCE



$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, $Y_{10} = -\sqrt{3/4\pi} \cos\theta$, $Y_{11} = \sqrt{3/8\pi} \sin\theta\, e^{i\varphi}$,

$Y_{20} = \sqrt{5/16\pi}\,(3\cos^2\theta - 1)$, $Y_{21} = \sqrt{15/8\pi} \sin\theta \cos\theta\, e^{i\varphi}$,

$Y_{22} = \sqrt{15/32\pi} \sin^2\theta\, e^{2i\varphi}$

$Y_{l-m} = Y^*_{lm}$

VLASTNÍ MOMENT HYBNOSTI = SPIN

MÁ ŘADA ČÁSTIC – NEJJEDNODUŠŠÍ SPIN ½ - např. ELEKTRON

STAVY : $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, **OBECNÝ** $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$

PAULIHO PRINCIP ZAKAZUJE DVĚMA FERMIONŮM BÝT VE STEJNÉM STAVU

DÍKY SPINU MOHOU STEJNOU ENERGII MÍT DVA ELEKTRONY

MÁ-LI NABITÁ ČÁSTICE ORBITÁLNÍ MOMENT HYBNOSTI, PAK MÁ MAGNETICKÝ MOMENT :

Př. : ELEKTRON V ATOMU

MAGNETICKÝ MOMENT μ = I.S (proud $\times$ plocha) = $-e/T.\pi R^2 = -e/2.2\pi/T.R^2 = -e/2m.m\omega R.R = -e/2m.L$

VÝSLEDNÝ VZTAH $\mu = -e/2m.L$ JE UNIVERZÁLNÍ.

MAGNETICKÉ MOMENTY ELEKTRONŮ JSOU NÁSOBKEM BOHROVA MAGNETONU $\mu_B = e\hbar/2m_e = 9.274 \times 10^{-24}$ A m^2

I SPINU ODPOVÍDÁ MAGNETICKÝ MOMENT

$$\mu_e = -1.0012\,\mu_B = -1.0012\, e\hbar / 2m_e$$ **ELEKTRON**

$$\mu_p = 2.793\,\mu_N = 2.793\, e\hbar / 2m_p$$ **PROTON**

$$\mu_n = -1.913\,\mu_N = -1.913\, e\hbar / 2m_p$$ **NEUTRON**

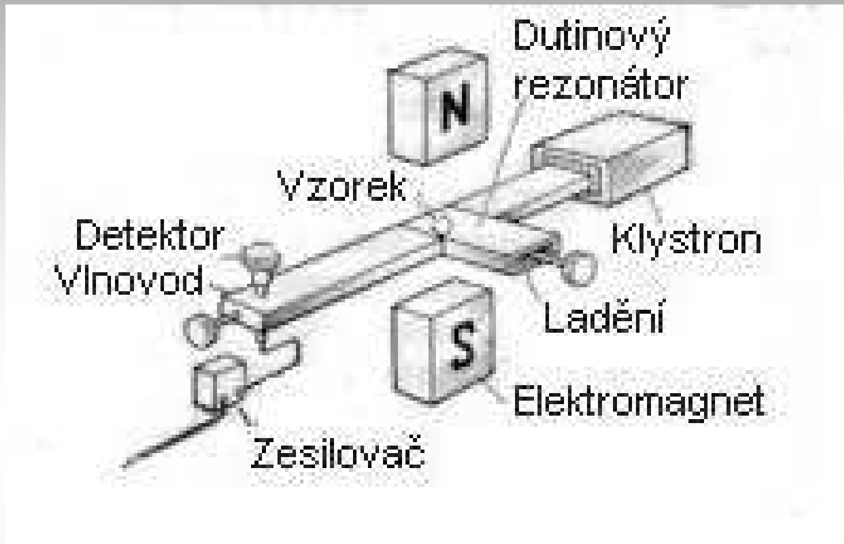
ENERGIE MAGNETICKÉHO MOMENTU
V MAGNETICKÉM POLI

$$E = -\boldsymbol{\mu}.\mathbf{B}$$

PODMÍNKA REZONANČNÍ ABSORPCE
ELEKTROMAGNETICKÉHO ZÁŘENÍ :

VZDÁLENOST HLADIN = 2 μB = ENERGIE FOTONU $\hbar\omega$

MAGNETICKÁ REZONANCE

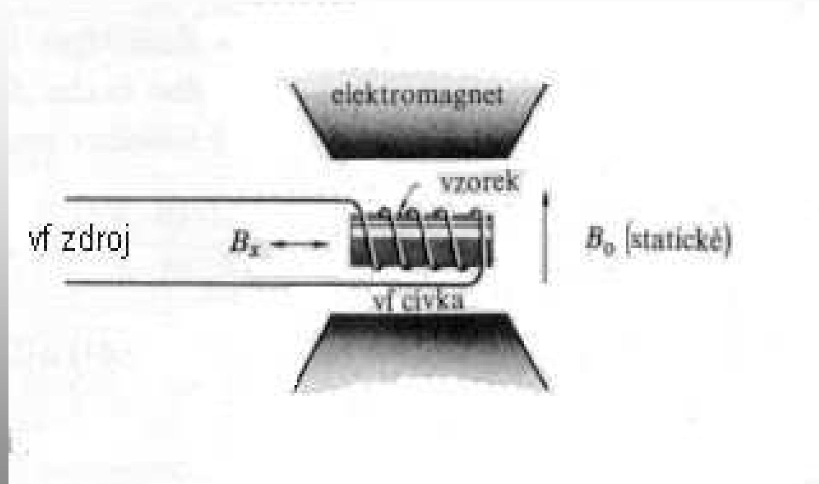


EPR

28 B GHz
RADIKÁLY, PŘENOS NÁBOJE

NMR

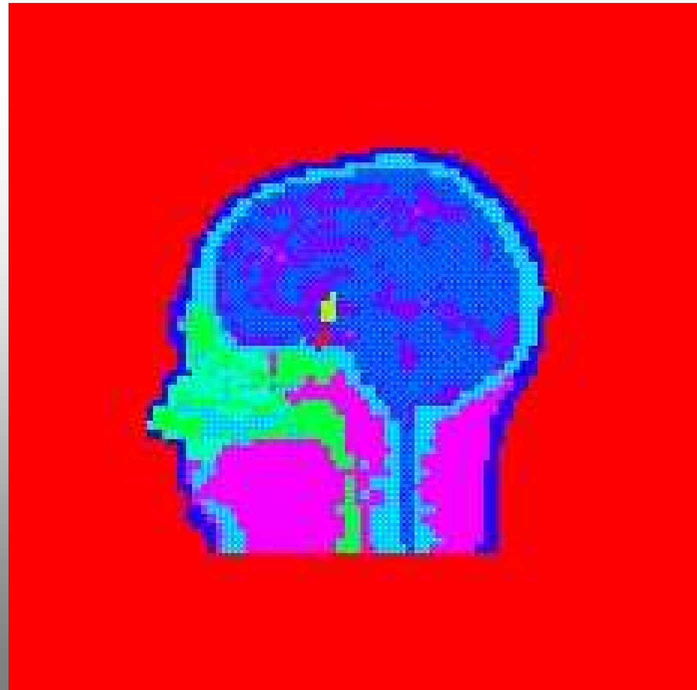
42.5 B MHz
CHEMIE, STRUKTURA



ABSORPCE JE ÚMĚRNÁ KONCENTRACI JADER.

„OČÍSLUJEME-LI“ NĚJAK BODY VZORKU, MŮŽEME ZJISTIT KOLIK DANÝCH JADER JE V DANÉM MÍSTĚ.

METODA ČÍSLOVÁNÍ : LINEÁRNÉ ROSTOUCÍ MAGNETICKÉ POLE + SKANOVÁNÍ + MATEMATIKA + POČÍTAČ = ZOBRAZOVÁNÍ POMOCÍ MAGNETICKÉ REZONANCE (MRI)



STRUKTURA KVANTOVÉ TEORIE
(SOUHRN)

STAV :

VLNOVÁ FUNKCE SYSTÉMU,
V BOSONECH SYMETRICKÁ,
V FERMIONECH ANTISYMETRICKÁ

POZOROVATELNÉ
(MĚŘENÉ VELIČINY) :

ZOBRAZOVANÉ OPERÁTORY

VÝSLEDKY MĚŘENÍ
URČENY VLASTNÍMI HODNOTAMI OPERÁTORU PŘÍSLUŠNÉMU DANÉ VELIČINĚ

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

PRAVDĚPODOBNOSTI VÝSLEDKŮ MĚŘENÍ
URČENY VLNOVOU FUNKCÍ SYSTÉMU SPECIÁNĚ PRAVDĚPODOBNOST NALEZENÍ V OBJEMU dV JE DÁNA $|\psi(x, y, z, t)|^2 dV$

ČASOVÝ VÝVOJ

JE POPSÁN

SCHRÖDINGEROVOU ROVNICÍ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

STACIONÁRNÍ STAV

URČUJE BEZČASOVÁ

SCHRÖDINGEROVA ROVNICE

= ROVNICE PRO VLASTNÍ HODNOTY

ENERGIE

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