Kvantová, atómová a subatómová fyzika

Vlnové vlastnosti častíc
Schrödingerova rovnica

Elektróny (a iné častice) ako vlny

Louis de Broglie (1924, Nobelova cena 1929): častice sa správajú ako vlny s vlnovou dĺžkou a frekvenciou danými hybnosťou a energiou

Louis-Victor 7e duc de Broglie

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

$$\boxed{\nu = \frac{E}{h}}$$

Popis častice s hybnosťou *p* a energiou *E*

Rovinná vlna

$$\psi(x,t) = \exp\left(2\pi i \frac{p \cdot x}{h} - 2\pi i \frac{E \cdot t}{h}\right)$$

Zavedieme:

redukovanú Planckovu konštantu

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

vlnočet

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

kruhovú frekvenciu

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

Upravená rovinná vlna

$$\psi(x,t) = e^{i(k \cdot x - \omega t)}$$

Interpretácia vlnovej funkcie

Ak z nej vypočítame druhú mocninu absolútnej hodnoty, dostaneme hustotu pravdepodobnosti

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

Pravdepodobnosť nájsť časticu v intervale (a,b) je

$$P((a,b)) = \int_a^b \rho(x,t)dx = \int_a^b \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx$$

Normalizácia hustoty pravdepodobnosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = 1$$

Ako dostať z vlnovej funkcie informáciu o hybnosti

Inšpirácia z rovinnej vlny:

$$\frac{d}{dx}e^{i(kx-\omega t)} = ike^{i(kx-\omega t)} = \frac{ip}{\hbar}e^{i(kx-\omega t)}$$

Zavedieme **operátor hybnosti**

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} \qquad\qquad \hat{p}e^{i(kx-\omega t)} = pe^{i(kx-\omega t)}$$

Operátor kinetickej energie

$$\frac{\hat{p}\hat{p}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Prirodzene zavedieme **operátor polohy**

$$\hat{x} = x$$

Veličiny získavame z vlnových funkcií pôsobením operátorov

Komutátor operátorov

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

toto znamená

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi(x) = \hat{A}\hat{B}\psi(x) - \hat{B}\hat{A}\psi(x)$$

platí

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

Operátory nemusia komutovať!

Komutátor operátorov polohy a hybnosti

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \left[x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right] = i\hbar$$

Ak operátory nekomutujú,
zodpovedajúce veličiny nie je možné určiť obe zároveň.

Lokalizácia častice

Pri rovinnej vlne vôbec nevieme **kde** je častica.
Máme len presne určenú hybnosť.

Ak chceme poznať aj polohu, musíme upustiť od presnosti pri hybnosti.

(Heisenbergov) princíp neurčitosti:
Neurčitosť v popise polohy a hybnosti častice musia spĺňať vzťah

$$\boxed{\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}}$$

Dôsledky:

- Neexistujú klasické trajektórie
- Neexistuje častica v pokoji
- Neexistuje delenie energie na potenciálnu a kinetickú

Schrödingerova rovnica

Vlnová rovnica pre vlnovú funkciu

Schematicky:

$$\hat{E}\psi(x,t) = \hat{E}_k\psi(x,t) + \hat{E}_p\psi(x,t)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,t) + E_p(x)\psi(x,t)}$$

Stacionárny stav

Je špeciálny stav, v ktorom je časový vývoj vlnovej funkcie daný ako

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

Ak tento stav dosadíme do Schrödingerovej rovnice, dostaneme

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

Tomuto sa niekedy hovorí bezčasová Schrödingerova rovnica
(aj keď je to vlastne nesprávne).