

Kvantová, atómová a subatómová fyzika

Formalizmus kvantovej mechaniky

Prvá aplikácia: elektrón na úsečke

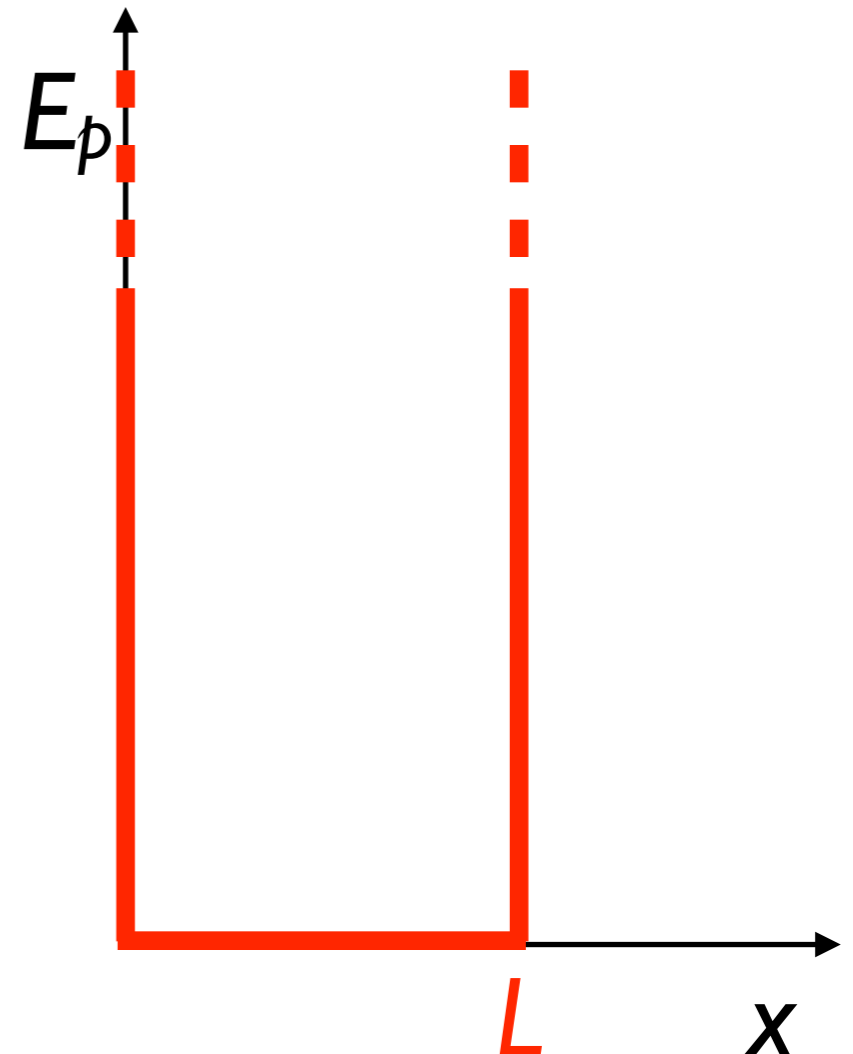
Častica v

- pravouhlej
- nekonečne hlbokoj potenciálovej jame

$$E_p(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x < 0 \text{ alebo } x > L \end{cases}$$

Schrödingerova rovnica

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



Vlnová funkcia musí byť všade spojitá

Elektrón na úsečke: riešenie SchR

Mimo jamy je vlnová funkcia rovná 0.

Rovnica vo vnútri jamy $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$

Riešenie vo vnútri jamy $\psi(x) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$

spojitosť:

$$B = 0 \quad \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi$$

normalizácia:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Elektrón na úsečke: kvantovanie energie a vlnové funkcie

Energia je kvantovaná!

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Vlnové funkcie: rôzne stacionárne stavy

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Riešenie v troch rozmeroch

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)$$

Dôsledky kvantovania a iné poznámky

Takéto systémy môžu byť realizované kvantovými bodmi

Diskrétne spektrum možných energií - čiarové spektrum vyžarovaných frekvencií svetla

Veľkosť energie je nepriamo úmerná druhej mocnine rozmeru jamy - princíp neurčitosti

Vlastnosti stacionárnych stavov

Časový vývoj

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\omega_n t} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

Hustota pravdepodobnosti: nezávisí od t

$$\rho(x, t) = \psi_n^*(x, t) \psi_n(x, t) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

Stavy sú na seba ortonormálne (kolmé a normované; ako vektory)

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

Princíp superpozície

Riešením SchR je aj vlnová funkcia

$$\varphi(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i(x, t)$$

Pre koeficienty a_i platí

$$a_i = \int_0^L \psi_i^*(x, t) \varphi(x, t) dx$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i^* a_i = 1$$

Celková pravdepodobnosť je 1

Stredné hodnoty

Stredná hodnota polohy

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

Stredná hodnota hybnosti

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (-i\hbar) \frac{d}{dx} \psi(x, t) dx$$

Stredná hodnota veličiny O popísanej operátorom \hat{O}

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{O} \psi(x, t) dx$$

Meranie energie

Stacionárny stav má presne stanovenú hodnotu energie

Stacionárny stav je vlastný stav operátora \hat{H} (hamiltoniánu)
Jeho energia je vlastnou hodnotou hamiltoniánu

V stave, ktorý je superpozíciou stacionárnych stavov, môžem pri meraní odmerať ľubovoľnú energiu spomedzi stacionárnych stavov.

Pravdepodobnosť odmerať energiu E_n je $a_n^* a_n$

Pri opakovanom meraní už vždy odmeriame rovnakú energiu, ako v predošlom meraní. (ak sa medzičasom neporušil stav)

Meranie mení stav!!!

Meranie inej veličiny

Veličine O zodpovedá operátor \hat{O}

Vlastné stavy operátora \hat{O}

$$\hat{O}\xi_i(x) = O_i\xi_i(x)$$

Skúmaný stav $\varphi(x)$ môžem písať ako superpozíciu

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} b_i \xi_i(x)$$

Pravdepodobnosť namerať hodnotu O_i je $b_i^* b_i$

Stavy v QM tvoria vektorový priestor (Hilbertov priestor)

Stacionárne stavy
 $\{\psi_i(x)\}$

Vektory bázy
 $\{\vec{e}_i\}$

Skalárny súčin

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

$$\vec{a} \cdot \vec{b}$$

Báza je ortonormovaná

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x, t) \psi_j(x, t) dx = \delta_{ij}$$

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$$

Rozklad stavu

$$\varphi(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i(x, t)$$

Rozklad vektora

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^n a_i \vec{e}_i$$

Komponenty stavu

$$a_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x, t) \varphi(x, t) dx$$

Komponenty vektora

$$a_i = \vec{e}_i \cdot \vec{a}$$

Diracov formalizmus

Definujeme ket vektor

$$\psi(x) \rightarrow |\psi\rangle$$

Definujeme bra vektor

$$\psi^*(x) \rightarrow \langle\psi|$$

Skalárny súčin

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t) \psi(x, t) dx = \langle\varphi|\psi\rangle$$

Stredná hodnota

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t) \hat{O} \psi(x, t) dx = \langle\varphi|\hat{O}|\psi\rangle$$

Sústavy s dvoma hladinami

Napríklad:

- Spin elektrónu - dva možné priemety na os z
- Polarizácia fotónu - dve možné polarizácie svetla

Označme stavy bázy (dvojrozmerného Hilbertovho priestoru)

$$|0\rangle, |1\rangle$$

Fyzikálna realizácia môže byť napr:

vodorovne polarizovaný fotón, zvislo polarizovaný fotón

$$| |\rangle, | -\rangle$$

Fotón sa môže nachádzať v superpozícii týchto stavov

$$|\gamma\rangle = a_+ | |\rangle + a_- | -\rangle$$

Môžeme však mať aj inú bázu: šikmo polarizované fotóny

$$|\gamma\rangle = a_{\setminus} | \setminus \rangle + a_{/} | / \rangle$$