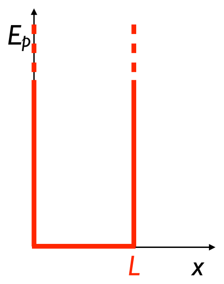
Kvantová, atómová a subatómová fyzika

Formalizmus kvantovej mechaniky

Prvá aplikácia: elektrón na úsečke

Častica v
- pravouhlej
- nekonečne hlbokej

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:

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

normalizácia:

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

Elektrón na úsečke: kvantovanie energie a vlnové funkcie

Energia je kvantovaná! $$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2}$$

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 *Ô*

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

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	Vektory bázy
$\{\psi_i(x)\}$	$\{\vec{e}_i\}$

Skalárny súčin

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x,t)\psi(x,t)dx \qquad \vec{a}\cdot\vec{b}$$

Báza je ortonormovaná

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x,t)\psi_j(x,t)dx = \delta_{ij} \qquad \vec{e}_i\cdot\vec{e}_j = \delta_{ij}$$

Rozklad stavu	Rozklad vektora
$\varphi(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i\psi_i(x,t)$	$\vec{a} = \sum_{i=1}^{n} a_i\vec{e}_i$
Komponenty stavu	**Komponenty vektora**
$a_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x,t)\varphi(x,t)dx$	$a_i = \vec{e}_i\cdot\vec{a}$

Diracov formalizmus

Definujeme ket vektor

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

Definujeme bra vektor

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

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

$$|\gamma\rangle = a_{\backslash}|\,\backslash\,\rangle + a_{/}|\,/\,\rangle$$