Kvantové vlastnosti nanoskopických systémov

Peter Ballo

16. februára 2016



Obsah

1	Úvo	od	9
	1.1	Poučme sa konečne z dejín	9
	1.2	Prečo potrebujeme kvantovú mechaniku	12
2	Úvo	od do kvantovej fyziky	13
	2.1	Experimenty a ich dôsledky	13
3	Kva	ntový formalizmus	19
	3.1	Pohybová rovnica vlno-častice	19
	3.2	Poloha a hybnosť kvantovo-mechanickej častice	28
4	Kva	ntové tunelovanie	39
	4.1	Interakcia vlno-častice s potenciálom	39
	4.2	Pohybujúci sa vlnový balík	50
	4.3	Kvaziklasické priblíženie - WKB aproximácia	55
	4.4	Presnejšie odvodenie WKB priblíženia	58
	4.5	Porovnanie presného a približného (WKB) riešenia	62
5	Roz	dičné reprezentácie v kvantovej mechanike	69
	5.1	Schrödingerova reprezentácia	70
	5.2	Heisenbergova reprezentácia	70
	5.3	Diracova - interakčná reprezentácia	71
	5.4	Diferenciálna rovnica operátora rozdelenia hustoty pravdepo- dobnosti \hat{a}	72
	5.5	Rozbor kvantovej sústavy.	
		ktorá obsahuje rozličné podsústavy	72
6	Mu	lty-stavové kvantové sústavy	81
	6.1	Kvantovanie vlnovej rovnice	81
	6.2	Kvantovo-mechanické kmity	86

7	Záv	er	95
		elektromagnetického poľa	90
	6.3	Pohybová rovnica operátora $\hat{\sigma}$ vztiahnutého na podsústavu	

Zoznam obrázkov

teľnej oblasti spektra sa nachádzaju čiary H_{α} (jasne červená), H_{β} (bledo modrá), H_{γ} (modrá) a H_{δ} (fialová). Spektrálne čiary na ľavo od H_{δ} sa nachádzajú v ultrafialovej oblasti a boli po- zorované neskôr.	14
Výsledky experimentálneho merania spektrálnej závislosti vy- žarovania absolútne čierneho telesa pre jednu teplotu - plná čiara. Prerušovaná čiara predstavuje teoretickú aproximáciu podľa Wiena (vľavo od maxima) a podľa Rayleigho (vpravo od maxima).	16
Dovolené prechody medzi jednotlivými hladinami v atóme vo- díku. Vlnové dĺžky jednotlivých čiar veľmi presne popisuje zo- becnený Balmerov vzťah.	21
Schématické znázornenie stojatej vlny na stacionárnom orbi- táli vodíkového atómu.	25
Tvar vlnovej funkcie (a) a hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu (b) elektrónu "uzavretého" medzi nabitými doskami, ktoré predstavujú "nekonečne hlbokú potenciálovú jamu	37
Zariadenie na "vytvorenie"potenciálu schodovitého tvaru (a). Priebeh potenciálu vytvoreného v zariadení (b)	40
Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vĺn) stav voľného elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry. Pre porovnanie je v obrázku vynesený aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara).	43
	teľnej oblasti spektra sa nachádzaju čiary H_{α} (jasne červená), H_{β} (bledo modrá), H_{γ} (modrá) a H_{δ} (fialová). Spektrálne čiary na ľavo od H_{δ} sa nachádzajú v ultrafialovej oblasti a boli po- zorované neskôr

4.3	Funkcia rozdelenia hustoty pravdepodobnosti pred barérou a za bariérou (plná čiara), ak jej výška je väčšia, ako energia E dopadajúcej rovinnej vlny. Zvlnenie funkcie $P(x)$ v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferen- cie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. V brzdnom potenciáli hustota rozdelenia pravdepodobnosti rýchlo klesá k nule. Čiar- kovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná zvislá čiara pradstavuje hranicu potenciálového ehola.	14
44	SKOKU	44
	za bariérou (plná čiara), ak jej výška je menšia, ako energia E dopadajúcej rovinnej vlny. Zvlnenie funkcie P(x) v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. Rovinná vlna prechádza do oblasti potenciálu so zmenšenou energiou. To sa prejaví, ako predĺženie vlnovej dĺzky rovinnej vlny. Čiarkovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná	
4.5	zvislá čiara pradstavuje hranicu potenciálového skoku Priebeh hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu elek- trónu pozdĺž x-ovej osi v experimentálnom zariadení. V oblasti odpudivého potenciálu sa hustota rozdelenia pravdepodobnosti	45
4.6	exponencionaine znizuje	40
1.0	lasťou brzdného potenciálu (a) idealizovaný priebeh potenciálu ako funkcie x-ovej súradnice (b).	47
4.7	Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fik- cii komplexných vĺn) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je vyššia, ako je energia prichádzajúcej častice. Elektrón je intenzívne v bariére brzdený a jeho hyb- nost klesá. Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti (plná čiara) exponenciálne klesá.	48
4.8	Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fik- cii komplexných vĺn) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je nižšia, ako je energia prichádzajúcej častice. Po spomalení elektrónu klesne jeho hybnosť a predĺži sa vlnová dĺžka. Pre porovnanie je v obrázku vynesený aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara). Interferen- cia vzniká aj vo vnútri bariéry, ako dôsledok odrazu na zadnej	
	strane bariéry	49

. .

. .

6

4.9	Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre vlnový balík vypočíta- nej podľa vzťahov (4.36) až (4.39) - plná čiara. Celkové roz- delenie $P(x)$ je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a imaginárnej zložky - bodkovaná čiara	52
4.10	Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre pohybujúci sa vlnový balík v disperznom prostredí vypočítanej podľa vzťahu (4.43) - plná čiara. Vlnový balík sa pohybuje zľava do prava. Rozširo- vanie vlnovho balíku spôsobuje disperzné prostredie - rýchlosť vlnenia závisí od frekvencie. Celkové rozdelenie $P(x)$ je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a ima- ginárnej zložky - bodkovaná čiara	53
4.11	Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou ba- rierou nekonečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vzniká, ako dôsledok interferencie prichádza- júcej a odchádzajúcej časti vlnového balka. Prerušovanou čia- rou je nakreslený vlnovy balík, ktorý sa nachádza vo vzdia- lenosti od bariery v ktorej ešte / už neinteraguje s barierou. Bariera je znázornená hrubou plnou čiarou	54
4.12	Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou ba- rierou konečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty prav- depodobnosti vzniká, (ako aj v predchádzajúcom prípade) ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej časti vl- nového balíka. Vidieť, že hodnota rozdelenia hustoty pravde- podobnosti v bariere exponenciálne klesá. S bariérou v tomto prípade interaguje menej lokalizovaný vlnový balík. Bariera je znázornená plnou čiarou, ako obdĺžnik	55
4.13	Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou ba- rierou konečnej výšky. Vidieť, že cez tenkú bariéru častica čias- točne prechádza. Bariera je znázornená plnou čiarou, ako ob- dĺžnik	56
4.14	Rozdelenie obecného potenciálu $V(x)$ do radu pravouhlých po- tenciálov podľa vzťahu (6.1). Vodorovná čiara označuje energiu a smer interagujúcej častice. Body a a b označujú body v kto- rých by sa klasická častica odrazila - hovoríme im body obratu.	57
4.15	Zariadenie na postupné urýchlovanie častice v sústave prsten- cov (a) tak aby sme aproximovali postupný nárast potenciálu U(x) (b)	58
4.16	Schématické naznačenie zmeny vlnovej dĺžky vlny (horný ob- rázok) na pomaly sa meniacom potenciáli (dolný obrázok).	59

4.17	Schématické znázornenie priebehu brzdného napätia v jedno- rozmernom zariadení, v ktorom tunelujú elektrňy. Zariadenie je rozdelené na štyri oblasti; I. oblasť pred bariérou; II. oblasť nárastu napätia; III. oblasť poklesu napätia; IV. oblasť za ba- riérou. Body -L a L označujú body obratu. Ich poloha závisí od	
	energie interagyjúcej častice	63
4.18	Priebeh Airy-ho funkcii Ai(x) a Bi(x)	64
4.19	Pravdepodobnosť tunelovania cez tenkú (1 nm) trojuholníkovú barieru. Plná čiara znázorňuje presný výpočet podľa vzťahu	
	(4.104), čiarkovaná čiara predstavuje WKB priblíženie	66
6.1	Závažie umiestnené medzi dvojicou lineárnych pružín	86

Kapitola 1

Úvod

1.1 Poučme sa konečne z dejín

Všetko, čo vieme, pochádza zo skúseností. (Immanuel Kant)

Alexandrijská knižnica, ktorá bola najväčšia a najslávnejšia staroveká inštitúcia, o ktorú sa opierala tvorba a práca učencov alexandrijského Museionu, vznikla okolo roku 305 p. n. l. v Alexandrii, hlavnom meste Egypta. Založil ju egyptský kráľ Ptolemaios I. Sotér (Sotér znamená v preklade záchranca), ktorý podporoval v Alexandrii rozvoj vedy a umenia. Demetrios z Faléru, jeden z učencov pôsobiacich na jeho dvore mu poradil založiť univerzitu a s ňou aj knižnicou. Knižnica prežila stovky rokov a jej zánik sa datuje v roku 415 n.l., keď rozzúrený dav ubil poslednú správkyňu knižnice Hypatiu, ako čarodejnicu. Dôvodom bol fakt, že inštitúcia knižnice si za 700 rokov svojej existencie nenašla postavenie v spoločnosti, tak aby ju akceptoval okolitý ľud, ako inštitúciu, ktorá prináša všeobecný pokrok a blahobyt. Neexistoval prenos poznatkov do praxe, ktorý by podporoval všeobecný pokrok. Koniec staroveku, ktorý je datovaný rokom 476 n.l., priniesol nové usporiadanie Európy, ale aj nové formy vzdelania a poslania škôl. Univerzity, ktoré začali vznikať v Európe v 12. a 13. storočí už vychovávali študentov v oblasti teológie, práva, medicíny a umení. Absolventi škôl pôsobili v rozličných oblastiach verejného života, čím šírili slávu svojej alma mater, ale aj rozširovali poznatky v Európe. Univerzity sa tak stali inštitúciami na vytváranie, zveľaďovanie a uchovávanie kultúrneho dedičstva Európy. Osvietení panovníci sa obklopovali vzdelanými absolventmi univerzít, ktorí tak ďalej šírili všeobecné poznanie. Prenos poznatkov do praxe bol však naďalej limitovaný na pomerne úzky kruh učencov. Ich poznanie a vedomosti pomerne málo ovplyvnilo technologickú podstatu európskeho života. V roku 1492, objavením Ameriky, končí stredovek a začína novovek. Objav kompasu, pušného prachu a kníhtlače umožnil ovládnutie nových území, cestovanie a rýchle šírenie myšlienok v známom svete. Postupná špecializácia učencov umožnila rýchly rozvoj prírodovedných a humanitných vied. Tým sa dosiahli predpoklady na rozvoj technických aplikácií a možnosti hlbšieho poznania sveta. Alchýmia, milujúca sestra chémie, postupne prerástla do výroby farbív. Astrológia, nevďačný príbuzný astronómie, prerástla do poznania nebeskej mechaniky. Na dvore Rudolfa II. sa začiatkom 17. storočia sklbilo nové a staré a podarilo sa vytvoriť novú kvalitu. Tento sľubný vývoj zastavila v roku 1620 bitka pri Bielej hore. V iných častiach Európy však pokračovala príprava na technologickú revolúciu dvadsiateho storočia. Rozhodujúcim krokom bol vznik technických univerzít, ktorý systematicky prebiehal od polovice 19. storočia. Práve technické univerzity bezprostredne stoja za technologickým blahobytom, ktorý dnes prežívame. Aj keď sa podstata technologického blahobytu s časom mení, na začiatku bol zameraný na vyššiu efektivitu práce a poznávania, zatiaľ čo dnes je zameraný hlavne na zábavu, nič to nemení na fakte, že za technologickým pokrokom stoja hlavne inžinieri. Výchova inžinierov je náročná a drahá, pretože si musia osvojiť poznatky z prírodných a technických vied a popri tom si zachovať fantáziu a naučiť sa inžinierskemu odhadu. Inžiniersky odhad a znalosť prírodných vied je to čo odlíši inžiniera od montéra. Fantázia je to čo umožní inžinierovi uskutočniť projekty, ktoré nás posunú ďalej. To kladie vysoké nároky na systém vzdelávania na technickej univerzite.

Slovenská technická univerzita v Bratislave vznikla pomerne neskoro vzhľadom na okolité štáty, ale od počiatku dostala do vienka povinnosť vychovávať slovenskú technickú inteligenciu. Inžinierov, ktorí budú schopní a ochotní nie len budovať priemysel na Slovensku, ale aj šíriť technologické povedomie v slovenskom národe. Túto úlohu plnila STU (SVŠT) veľmi dobre a zodpovedne mnoho rokov. Dnes sa však zdá, ako by škole dochádzal dych a vzdelávanie sa premenilo na súťaž o najlepšieho vedca na univerzite keď sa viac zameriavame na počítanie citácií v zahraničných časopisoch, ako o úspechy našich študentov v projektoch. Pri príprave účasti Fakulty elektrotechniky a informatiky na výstave ELOSYS 2012 som s úžasom zistil, koľko nesmierne zaujímavých projektov pripravujú naši študenti v spolupráci s učiteľmi na fakulte. Ich vystavenie vzbudilo na výstave veľký záujem odbornej, ale aj laickej verejnosti. O mnoho väčší, ako výpočet úspechov v citačných indexoch. Samozrejme, že nespochybňujem potrebu publikovať a uskutočňovať základný výskum, tento však nesmie byť odtrhnutý od našich študentov a potrieb priemyslu. Nikto si predsa nevyberá chirurga podľa počtu publikácií a citácií, aj keď je to dôležitá časť jeho vzdelávania. Prečo si teda myslíme, že študenti si nás vyberú na základe iba tohto ukazovateľa.

Závažným problémom je celková kvalita nášho školstva. Ignorovanie potrieb školského systému, posledných 20 rokov, doviedlo školstvo na pokraj kolapsu. Školstvo je taký zvláštny priemysel, do ktorého keď prestanete investovať, prvé roky (mnoho rokov) to ani nespozorujete. To je dôsledok veľkej zotrvačnosti školstva, ako celku, na rozdiel od technologického priemyslu, ktorý by už dávno skolaboval a vlastne na Slovensku už skolaboval. Mimochodom, dovezený technologický priemysel nám veľmi nepomôže, pretože užívateľský manuál nám presne povie čo robiť manuálne, ale nepovie nám čo robiť hlavou. Na to si dávajú dobrý pozor. Po dlhom čase zanedbávania školstva príde prudký zlom (ktorého sme teraz pravdepodobne svedkami) a dlhý čas potrebujeme investovať finančné prostriedky a námahu do systému bez viditeľných výsledkov. Cas, ktorý na to potrebujeme je porovnateľný (pravdepodobne dlhší), ako čas počas ktorého sme systém zanedbávali. Tento čas určite presahuje dĺžku volebného obdobia vlády, a preto sa politikom do takejto činnosti nechce, čo je pochopiteľné. Otázka znie, ako sa dá z toho dostať? Nuž najhoršie riešenie je problém ignorovať a jednoduchým sebauspokojovaním ho odsúvať. Rovnováha v systéme nastane v každom prípade. Pri odsúvaní problémov nastane síce neskôr, ale s bolestivejšími následkami a môže nastať doba, že nás daňový poplatník vyženie zo škôl. Rovnako zlé riešenie je zvaľovať vinu na nefunkčný školský systém, s ktorým sa nedá nič robiť. Cakať na finančné injekcie je rovnaké, ako čakať na spasenie. Navyše rýchly prílev finančných prostriedkov bez hlbokých zmien v systéme, by tento systém veľmi rýchlo destabilizoval a priviedol ku kolapsu. Hlavné poznanie je, že neexistujú jednoduché a rýchle riešenia. Treba postupovať rozvážne a postupne. Hlavne však sa musíme naučiť o probléme diskutovať a prestať podozrievať spoludiskutérov zo zlého úmyslu a to ešte pred začiatkom rozhovoru. Vytvoriť prajné prostredie pre všetkých, ktorým ide o hľadanie pravdy a napravenia pokriveného štátneho systému vzdelávania. Musíme si uvedomiť, že sme technická univerzita a ako technici to riešenie aj musíme hľadať.

Rovnako je to aj s aplikovaním poznatkov prírodných vied do techniky. Ak sa vyskytne rôznosť názorov, máme tendenciu o probléme nediskutovať a odsunúť ho na vedľajšiu kolaj. Čo je horšie, snažíme sa problémy zamaskovať zadávaním nezmyselných prác (ako akreditácia fakulty), aby zúčasnení neprišli na to, že sú dlhodobo podvádzaní. Nie len spoločensky, ale aj vedecky a pracovne. Vymýšlaním nezmyselných kritérií, ktoré vydávame za svetový štandard, vyrábame opseudo vedeckú činnosť, ktorá nemá so serióznou vedeckou prácou nič spoločné. Cielom tejto práce je vyvolať v čitateľovi potrebu nad vecami rozmýšľať a vytvárať podmienky na dialóg - dôležitú časť dialektiky.

1.2 Prečo potrebujeme kvantovú mechaniku

Na konci 19. storočia prežívala klasická fyzika tvorená newtonovou mechanikou, termodynamikou a elektrodynamikou obdobie najväčšieho rozmachu. Výsledky zobecnené v teoretickej fyzike vznikali počas dlhého obdobia pozorovania a zovšeobecňovania javov okolo nás. Autori klasickej fyziky boli patrične hrdí na výsledky získané koncom storočia a niekoľko nenápadných experimentov zameraných na objasnenie podstaty svetla a elektrického prúdu vo vákuu zo začiatku nebral nik veľmi vážne. Podrobnejším skúmaním vlastností svetla, rádioaktivity alebo novo objavenej častice elektrón fyzici narazili na vážne nedostatky do vtedy tak dokonalej klasickej fyziky.

Postupným skladaním výsledkov experimentálnych faktov z mikrosveta vzniká nový druh mechaniky pri ktorej sa energia šíri v presne určených kvantách. Práve táto fascinujúca vlastnosť "novej" fyziky dala teórii opisujúcej vlastnosti mikrosveta názov - "Kvantová mechanika". Dnes je základom teórie tuhých látok, polovodičov, dielektrík, kovov, kvapalín pri nízkych teplotách, teóriou chemickej väzby i chemických reakcií, základom teórie atómových jadier a elementárnych častíc. V súčasnosti je súčasťou teoretického základu mnohých technických disciplín, jadrovej energetiky, chémie, elektroniky, mikrovlnej techniky, optoelektroniky a laserovej techniky, nukleárnej medicíny, celej palety diagnostických metód analýzy štruktúry i chemizmu materiálov a pod. Za tým účelom bolo napísaných množstvo veľmi kvalitných učebníc vo všetkých svetových jazykoch ako aj v slovenčine. Učebný text je určený nie len študentom študentom, ale aj učiteľom ktorí budú využívať výsledky a princípy kvantovej mechaniky v technických aplikáciách. Preto som sa zameral hlavne na "priamočiary" pohyb mikroskopických častíc, a ich interferenciu s potenciálovou bariérou a správanie sa kvantových multistavových syystémov, pretože to je hlavná oblasť aplikácie kvantovej mechaniky v mikroelektronike. Verím, že myšlienky tu uvedené padnú na úrodnú pôdu a v budúcnosti ich učitelia úspešne rozvinú a použijú v ďalšom vzdelávaní.

Kapitola 2

Úvod do kvantovej fyziky

2.1 Experimenty a ich dôsledky

Anjel môže postupne opúšťať miesto, na ktorom bol skôr, delitelne a tak jeho pohyb bude súvislý. Môže zároveň opustiť celé miesto a objaviť sa naraz v celku na druhom mieste, a tak jeho pohyb bude nesúvislý. A tak anjel v jednom okamžiku môže byť na jednom mieste a v inom okamžiku na inom mieste, bez toho aby bol nejaký čas v mieste prostrednom.

(Tomáš Akvinský 1268)

Koncom 19. storočia bola väčšina prírodovedcov presvedčená, že pomocou rozvinutých disciplín klasickej fyziky, predovšetkým teoretickej mechaniky, teórie elektromagnetického poľa a termodynamiky možno opísať všetky známe fyzikálne deje. Ďalší pokrok v teoretickej fyzike videli v spresňovaní meraní a ich aplikácie do technickej praxe. Napriek tomuto presvedčeniu, už v predchádzajúcich storočiach existovali optické experimenty, ktoré nenápadne budovali cestu novej fyzike, ktorá kraľovala v 20. storočí.

Isaac Newton v roku 1666 pomocou jednoduchého skleneného hranola rozložil slnečné žiarenie do farebných plôch, ktoré nazval *spektrum*. Tieto efekty boli známe aj skôr, ale Newton ako prvý správne vysvetlil ich podstatu a položil tak základy spektroskopie. Josef Fraunhofer - génius experimentu, v roku 1823 zostrojil prvú optickú mriežku, tvorenú sklenenou doštičkou s veľkým počtom vrypov (niekoľko sto na milimeter) vyrytých pomocou jemného diamantového hrotu. Takto vytvorená optická mriežka rozkladá slnečné svetlo podobne ako sklenený hranol, avšak s možnosťou presného určenia vlnovej dĺžky jednotlivých zložiek spektra. Pozorovaním slnečného žiarenia zistil, že vzniknuté spektrum nie je spojité, ale sa skladá z veľkého počtu izolovaných čiar navzájom oddelených tmavými plochami. Fraunhofer nemal pochopiteľne predstavu o pôvode tmavých plôch medzi čiarami, a keď aj nejakú mal určite sa s ňou nepochválil, pretože vtedajšia fyzika svetla, žiadne nespojitosti v spektre slnečného žiarenia nepripúšťala. V druhej polovici 19. storočia Johann Jakob Balmer, švajčiarsky stredoškolský profesor, robil pokusy s vyžarovaním rozhorúčeného plynného vodíku. Vo viditeľnom spektre sa ukazovali štyri veľmi presne ohraničené čiary, ktoré nazval H_{α} (jasne červená), H_{β} (bledo modrá), H_{γ} (modrá) a H_{δ} (fialová). Podrobným skúmaním celého spektra sa našli ďalšie čiary v ultrafialovej (teda voľným okom nepozorovateľnej) oblasti. Poloha čiar sa zahusťuje tak, že žiadna nemá kratšiu vlnovú dĺžku ako 364,7nm. Tejto hodnote hovoríme hrana série. Polohu čiar vo viditeľnej oblasti aj ultrafialovej oblasti možno vidieť na obrázku 2.1.



Obr. 2.1: Poloha jednotlivých čiar v spektre Balmerovej série. Vo viditeľnej oblasti spektra sa nachádzaju čiary H_{α} (jasne červená), H_{β} (bledo modrá), H_{γ} (modrá) a H_{δ} (fialová). Spektrálne čiary na ľavo od H_{δ} sa nachádzajú v ultrafialovej oblasti a boli pozorované neskôr.

V roku 1885 sa Balmerovi podaril nájsť vzťah, ktorý veľmi presne popisuje polohy čiar v spektre vodíkového plynu. Podľa tohoto vzťahu sa obrátené vlnové dĺžky (vlnočty) prislúchajúce jednotlivým čiaram spektra, v Balmerovej sérii, dajú jednoducho vypočítať:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{2.1}$$

kde: n = 3, 4, 5, ...

Jasne červenej čiare H_{α} vlnovou dĺžkou $\lambda = 656,28$ nm zodpovedá n = 3, bledo modrej čiare H_{β} s vlnovou dĺžkou $\lambda = 486,13$ nm zodpovedá n = 4 a tak ďalej. Konštanta R_{∞} sa nazýva Rydbergova konštanta ktorej experimentálne zistená hodnota je 1,09737316 × 10⁷m⁻¹. Krátko po uverejnení Balmerovho vzorca na výpočet vlnových dĺžok našiel Lyman podobnú sériu

v ďalekej ultrafialovej oblasti. Ďalšie série boli objavené v infračervenej oblasti. Spoločným znakom polôh spektrálnych čiar je že zodpovedajúce vlnové dĺžky sú určené zobecneným Balmerovym vzťahom:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) \tag{2.2}$$

kde $n_2 = 1$ zodpovedá Lymanovej sérii, $n_2 = 2$ zodpovedá Balmerovej sérii (tvar pôvodne objaveného Balmeroveho vzťahu), $n_2 = 3$ zodpovedá Paschenovej sérii a $n_2 = 4$ zodpovedá Brackettovej sérii. Pre každú objavenú sériu sa n_1 pohybuje od $n_2 + 1$ (prvá čiara) až do nekonečna (hrana série). Aj keď sa tieto výsledky nedali interpretovať pomocou klasickej teórie elektromagnetického žiarenia, nevzbudili z počiatku veľkú pozornosť. Na skutočnú katastrofu si bolo treba ešte niekoľko rokov počkať. Ako všetky revolúcie, aj táto sa začala nenápadne.

Roku 1860 Gustav Robert Kirchhoff postuloval zákon, podľa ktorého pomer spektrálnej hustoty energie žiarenia nezávisí od druhu žiarenia. (Jednoducho povedané ak niektoré teleso pri teplote T viac žiarenia vyžaruje potom aj viac žiarenie pohlcuje.) Roku 1879 Josef Stefan uverejnil výsledky experimentov, podľa ktorých intenzita žiarenia z povrchu rôznych telies je úmerná štvrtej mocnine rozdielu teplôt. Roku 1884 Ludwig Boltzmann teoreticky zdôvodnil tento výsledok aj pre absolútne čierne teleso použitím klasickej Maxwellovej teórie elektromagnetického poľa. Posledný krok v klasickej teórii vyžarovania urobil Wilhelm Wien v roku 1893, keď použitím teórie rovnovážnej termodynamiky odvodil vzťah medzi teplotou T a vlnovou dĺžkou pri ktorej sa vyžaruje maximum energie. Podľa tohto vzťahu platí medzi veličinami jednoduchá relácia:

$$\lambda T = b \tag{2.3}$$

kde b je univerzálna konštanta, ktorú možno ju experimentálne určiť (b = 2,897 x 10^{-3} mK). Až sem vyzeralo všetko v úplnom poriadku čo len potvrdzovalo myšlienku skončenia pokroku vo fyzike.

Okolo roku 1890 sa podujala dvojica experimentátorov Lummer a Pringsheim v sérii veľmi presných experimentov potvrdiť správnosť klasickej fyziky v oblasti vyžarovania. Za tým účelom vyrobili absolútne čierne teleso (vyžaruje len vlastné svetlo) tak, že povrch nahradili dutinou v tmavom materiály. V širokom intervale teplôt merali spektrálnu hustotu vyžarovania energie z dutiny - teda aké množstvo energie sa vyžiari v intervale vlnových dĺžok $\langle\lambda,\lambda+\Delta\lambda\rangle$. Experimentálne údaje ukázali, že tvar vyžarovacej krivky závisí len od teploty. Na obrázku 2.2. sú nakreslené vyžarovacie krivky pre dve rôzne teploty absolútne čierneho telesa.



Obr. 2.2: Výsledky experimentálneho merania spektrálnej závislosti vyžarovania absolútne čierneho telesa pre jednu teplotu - plná čiara. Prerušovaná čiara predstavuje teoretickú aproximáciu podľa Wiena (vľavo od maxima) a podľa Rayleigho (vpravo od maxima).

Wien pokúsil vysvetliť výsledok Lummer-Pringsheimovho experimentu použitím klasickej teórie termodynamiky, v tom období veľmi všeobecného zákona fyziky. Použitím konkrétnych termodynamických predstáv sa mu podarilo odvodiť vzťah, ktorý veľmi presne aproximoval výsledky experimentu v krátkovlnnej (ultrafialovej oblasti) oblasti. V oblasti experimentálneho (konečného) maxima hustoty vyžarovania však predpovedal nekonečne veľku hustotu vyžiarenej energie. Iné vysvetlenie ponúkol John William Strutt Lord Rayleigh, ktorý predpokladal, že žiarenie čierneho telesa sa dá opísať ako stojaté vlnenie v uzavretej dutine. Použijúc takýto model určil, aký počet rôznych vĺn pripadne na interval vlnových dĺžok $<\lambda,\lambda+\Delta\lambda>$ a každej priradil podľa princípov štatistickej fyziky, vypracovanej Boltzmannom, energiu je Boltzmannova konštanta. Takto veľmi dobre aproximoval výsledky experimentu pre dlhovlnné priblíženie. Rovnako ako v predchádzajúcom modeli, v oblasti konečného maxima hustoty vyžarovania, predpovedaná hustota divergovala do nekonečna. Okolo roku 1900 sa preto fyzici začali zamýšľať, či skutočne je v klasickej teoretickej fyzike všetko v poriadku. V tejto súvislosti začali niektorí hovoriť o ultrafialovej katastrofe.

Na zasadnutí Nemeckej fyzikálnej spoločnosti, ktoré sa konalo 14. decembra 1900, (iba niekoľko dní pred koncom 19. storočia) odznela prednáška

Max Plancka na tému "Radiačné vyžarovanie čierneho telesa" na ktorej prvýkrát verejne postuloval vyžarovací zákon a vyslovil predpoklad (na tú dobu nepochybne nesmierne odvážny), že energia existuje v nespojitej forme a šíri sa vo forme izolovaných kvant energie. Na svoje tvrdenie mal však veľmi silný argument. Keď použil "kvantovanie energie" pri výpočte spektrálneho rozdelenia hustoty vyžarovania absolútne čierneho telesa, dospel k výbornej zhode s experimentom v celom vyžarovacom spektre, čo sa do tej doby nikomu nepodarilo. Zároveň ukázal, že zhodu s experimentom možno dosiahnuť, len ak "nastavíme " hodnotu jedného kvanta energie na určitú hodnotu. Tá je síce malá, ale presne určená z experimentu a po mnohých spresneniach (nie veľmi podstatných - v roku 1900 jej hodnotu Max Planck určil na $6,55 \times 10^{-27}$ erg.s = $6,55 \times 10^{-34}$ J.s) ju dnes definujeme:

$$h = 6,62606.10^{-34} Js \tag{2.4}$$

Túto konštantu voláme Planckova konštanta a tvorí fundamentálnu konštantu používanú vo fyzike.

Koncom 19. storočia Heinrich Herz objavil efekt, pri ktorom sa v dôsledku dopadu svetla na povrch kovovej doštičky emitujú elektróny. Herz tento jav nazval fotoefekt, neskôr pribudol prívlastok vonkajší fotoefekt, aby sa odlíšil od podobného javu v polovodičoch. Veľmi starostlivým premeriavaním vonkajšieho fotoefektu sa ukázalo, že existuje istá hraničná frekvencia (farba) dopadajúceho svetla, pod ktorou už efekt uvoľňovania elektrónov nenastáva. Hraničná frekvencia závisí od druhu osvetľovaného materiálu. Keď sa na osvetlenie povrchu kovovej doštičky použije svetlo vyššej frekvencie, ako je hraničná potom rozdelenie energie vyletujúcich elektrónov závisí len od vlnovej dĺžky použitého svetla a nezávisí od intenzity svetla. Podľa klasickej teórie elektromagnetického poľa (James Clerk Maxwell - 1855) svetlo interaguje so všetkými elektrónmi na povrchu ako spojitá vlna a podmienky hraničného stavu musia závisieť od intenzity a nie od frekvencie - teda v úplnom rozpore s pozorovaním. Treba poznamenať, že v iných experimentoch klasická teória elektromagnetického poľa ukazuje výbornú zhodu s experimentom.

Vysvetlenie tohto javu podal Albert Eistein v roku 1905 pomocou Planckovej hypotézy o kvantovaní energie. Podľa Einsteinovej predstavy energia dopadajúceho žiarenia je priamoúmerná frekvencii:

$$E = h\nu \tag{2.5}$$

kde h je Planckova konštanta a ν je frekvencia dopadajúceho žiarenia. Energiu vyletujúcich elektrónov treba zmenšiť o energiu A potrebnú na uvolnenie elektrónu z povrchu kovu (výstupná práca). Kinetická energia vyletujúcich elektrónov je potom rovná

$$E_k = h\nu - A \tag{2.6}$$

Ak je frekvencia dopadajúceho žiarenia menšia ako hraničná, potom je energia žiarenie menšia ako výstupná práca a elektróny nedokážu opustiť povrch kovu. Význam vysvetlenia fotoelektrického javu je v poznaní, že elektromagnetické poľe sa šíri v kvantách (fotónoch) a že tieto kvantá sú charakterizované energiou. V roku 1921 bola Albertovi Einsteinovi za toto vysvetlenie udelená Nobelova cena - nie za teóriu relativity, ako sa niekedy chybne uvádza.

V roku 1920 Arthur Holly Compton v sérii veľmi presných experimentov s rozptylom röntgenového žiarenia na kryštále zistil, že rozptýlené žiarenie je absorbované viac ako by malo byť podľa klasických predstáv. Na vysvetlenie tohto javu si Compton urobil pracovnú hypotézu, že rozptýlené žiarenie má väčšiu vlnovú dĺžku ako žiarenie dopadajúce. Táto hypotéza protirečila teórii podľa ktorej sa pri rozptyle vlnová dlžka žiarenia nemení. Compton sa neuspokojil s pracovnou hypotézou, a ani ju nemohol veľmi propagovať vzhľadom na protirečenie s teóriou. Najskôr sa pokúšal uviesť do súladu výsledky experimentu s teóriou aplikovaním Dopplerovho efektu. Jednoduchý výpočet však ukázal, že v takomto prípade bý sa museli elektróny pri rozptyle kolektívne pohybovat jedným smerom polovičnou rýchlosťou svetla. Tým by sa indukovali obrovské prúdy, ktoré by kryštál roztavili. To sa samozrejme nepozorovalo. Na základe vysvetlenia vonkajšieho fotoefektu, prišiel Compton na myšlienku, že jednotlivý fotón prichádzajúceho žiarenia interaguje práve s jedným elektrónom v rozptylujúcom kryštáli. Potom už len aplikoval zákony zachovania energie a hybnosti a dostal výbornú zhodu s experimentom. V dôsledku tejto myšlienky priradil fotónu popri energii aj hybnosť. V roku 1927 bola priekopnícka myšlienka Arthura H. Comptona ocenená Nobelovou cenou. Tak po rokoch tápania medzi vlnovou a časticovou podstatou svetla bolo uzavreté, že pravdu majú obe strany - fotón je "častica" aj "vlna" zároveň. Táto pozoruhodná vlastnosť vlno-častice v budúcnosti zkomplikuje odvodenie pohybovej rovnice a zavedie do fyziky "nenázornosť". Ale to je už iné rozprávanie.

Kapitola 3

Kvantový formalizmus

Princíp energie je záležitost zkúsenosti. Ak by teda jedného dňa mala byť jeho všeobecná platnosť zpochybnená, čo v kvantovej fyzike nie je vylúčené, potom by sa problém perpetua mobile stal náhle aktuálnym.

(Max Planck)

3.1 Pohybová rovnica vlno-častice

V roku 1897 uverejnil Joseph John Thomson výsledky experimentov z ktorých vyplývala existencia veľmi ľahkej častice nesúcej elektrický náboj. Paradoxne meno pre túto časticu už existovalo, pretože v roku 1891 Johnstone Stoney navrhol pre elementárny nosič náboja v elektrickom prúde meno **elektrón**. J.J.Thomson bol na svoj objav (za ktorý v roku 1906 dostal Nobelovu cenu) právom hrdý. V neskorších prácach sa preto pokúšal umiestniť novo objavenú časticu - elektrón do iných modelov. Veľmi úspešným bol v tom čase "jeho" model atómu, ako najmenšej stavebnej častici sveta. Podľa tohto modelu je kladný náboj rovnomerne rozdelený v objeme gule s polomerom rádovo 10⁻¹⁰m. Elektróny volne plávajú v objeme gule ako hrozienka v pudingu tak, aby celkový náboj atómu bol neutrálny. Aj keď prvotná myšlienka patrí lordovi Kelvinovi, model sa úspešným stal práve vďaka objavu elektrónu a popularite J.J.Tomsona. Dnes, možno trošku neprávom, hovoríme o Thomsonovom modeli.

V období rokov 1906 až 1908 vykonali mladí fyzici Hans Geiger a Ernest Marsden pod vedením Ernsta Rutherforda (Rutherford sa preslávil ešte raz, keď sa stal starým otcom rovnako slávnej speváčky Olivia Newton John-ovej) pokusy s rozptylom α -častíc na tenkej zlatej fólii. Cieľom pokusov bolo potvrdiť (alebo snáď aj vyvrátiť) pravdivosť Thomsonovho modelu atómu. V rámci predpokladov Thomsonovho modelu, experimentátori očakávali malé rozptylové uhly. Na veľké prekvapenie, mnohé z dopadajúcich α -častíc da odrážali späť. Po rokoch prekvapenie experimentátorov popísal Rutherford na jednej prednáške takto. "Efekt odrazenia α častice na atóme konštruovanom na základe Thomsonovho modelu bol asi tak pravdepodobný, ako že sa podarí zachytiť granát vystrelený z 15-palcového (asi 45 centimetrov) lodného dela na tenkom cigaretovom papieriku. Napriek tomu sme ten efekt pozorovali." Rutherfordovi trvalo ešte asi jeden a pol roku, aby prišiel tej záhade na koreň. Na zlatú nedelu v roku 1910 pozval Rutherford a jeho manželka na večeru niekoľko kolegov, aby im oznámil: "Teraz už viem ako vyzerá atóm." Na večeri sa dozvedeli, že výsledok experimentu možno interpretovať len v tom prípade ak je kladné, tvrdé ale veľmi malé jadro umiestné v strede atómu a elektróny sa pohybujú okolo. O kruhových dráhach sa ešte nehovorilo. Vyplýval z toho neuveriteľný záver, že hmota okolo nás je neuveriteľne prázdna.

Začiatkom roku 1913 navštívil Nielsa Bohra vo fyzikálnom ústave Kodanskej univerzity dávny priateľ zo štúdií Hans Márius Hansen. Tento chcel so svojim spolužiakom prediskutovať problém izolovaných čiar vo vyžarovacích spektrách jednotlivých látok. Od pionierskych čias Balmerových pokusov, pokročila dopredu experimentálna technika, nik však nemal ani potuchy ako tie čiary vznikajú. Niels Bohr sa po niekoľko rokov zamýšľal na tým, ako sa pohybujú atómy okolo jadra v Rutherfordovom modeli. Jeho hypotéza v ktorej predpokladal, že elektróny sa pohybujú po uzavretých dráhach bez toho, aby vyžarovali svoju energiu vo forme elektromagnetického žiarenia, narážala na nedôveru, pretože odporovala teórii elektromagnetického žiarenia. Keď Hans Márius Hansen vytiahol Balmerov vzťah, bolo Bohrovi zrazu všetko jasné. Bolo to ako keď kamienky v skladačke zapadnú na správne miesto a v hlave sa vynorí správny obraz. Jednotlivé čiary vo vyžarovacích spektrách vznikajú pri prechode elektrónov z jednej hladiny na druhú. Na obrázku 3.1. sú znázornené prechody pre jednotlivé série v prípade vodíku.

Teraz už mohol Bohr definovať svoje postuláty a pomocou nich vysvetliť podstatu čiar v emisných spektrách.

Bohrove postuláty

1.Elektróny sa pohybujú okolo kladne nabitého jadra po stabilných kruhových dráhach.

Z podmienky stability atómu musí platiť, predpoklad zachovania celkovej energie, ktorá sa rozdeľuje na kinetickú energiu K a potenciálnu energiu U:

$$H = K + U \tag{3.1}$$



Obr. 3.1: Dovolené prechody medzi jednotlivými hladinami v atóme vodíku. Vlnové dĺžky jednotlivých čiar veľmi presne popisuje zobecnený Balmerov vzťah.

kde pre kinetickú energiu pohybujúceho sa telesa hmotnosti m (v tomto prípade elektrónu) platí:

$$K = \frac{1}{2}mv \tag{3.2}$$

ak predpokladáme, že elektrón sa pohybuje v coulombickom poli kladne nabitého jadra po kružnici polomeru r, pre potenciálnu energiu dostaneme:

$$U = -k\frac{e^2}{r} \tag{3.3}$$

kde k je konštanta. Príťažlivá coulombická sila f_c medzi jadrom a elektrónom musí byť kompenzovaná odstredivou silou f_o rovnakej veľkosti:

$$f_c = f_o \tag{3.4}$$

po dosadení:

$$k\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$
(3.5)

a po úprave:

$$k\frac{e^2}{2r} = \frac{1}{2}mv^2$$
(3.6)

Teda z podmienky stability atómu dostaneme pre kinetickú energiu:

$$K = k \frac{e^2}{2r} \tag{3.7}$$

A pre celkovú (väzobnú) energiu:

$$E = -k\frac{e^2}{2r} \tag{3.8}$$

ktorá je záporná čo zaručuje stabilitu atómu a dokazuje platnosť prvého postulátu.

2. Pri pohybe elektrónu okolo jadra sú dovolené len niektoré dráhy. Mimo nich sa elektrón nemôže vyskytovať.

Každej dovolenej dráhe zodpovedá moment hybnosti L=mvr, ktorý nadobúda diskrétne (kvantované) hodnoty:

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \tag{3.9}$$

kde $n=1,2,3,\ldots,h$ je Planckova konštanta, r_n sú dovolené polomery orbitálnych dráh. Energetická "vzdialenosť" medzi dvomi dovolenými orbitálnymi dráhami je h/2 π . Keďže tento podiel Planckovej konštanty a dvojnásobku π sa bude často vyskytovať, zavedieme nové označenie:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{3.10}$$

Vo zťahu (3.9) vystupujú dve neznáme veličiny r_n a v_n , ktoré spolu súvisia. Aby sme dokázali určiť polomery dovolených dráh, musíme eliminovať rýchlosť:

$$m^2 v_n^2 r_n^2 = n^2 \hbar^2 \tag{3.11}$$

z rovnosti coulombickej a odstredivej sily (rovnica 3.4) dostaneme:

$$v_n^2 = k \frac{e^2}{r_n m} \tag{3.12}$$

Po dosadení do predposledného vzťahu dostaneme:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k e^2 m} \tag{3.13}$$

kde n=1,2,3,..... a nazývame ich hlavné kvantové čísla. Vidieť, že s rastúcim hlavným kvantovým číslom sa polomer dovolenej orbitálnej dráhy zväčšuje kvadraticky. Najmenší polomer, ktorý je v stabilnom atóme dovolený, vypočítame, ak položíme n=1 a tento polomer označíme ako a_0 :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{ke^2m} \tag{3.14}$$

Po dosadení číselných hodnôt dostaneme, že:

$$a_0 = 0.529 \times 10^{-10} m \tag{3.15}$$

tento polomer nazývame Bohrov polomer. Hodnota Bohrovho polomeru sa zdá byť veľmi malá, avšak porovnaná k polomeru atómového jadra (~10⁻¹⁵m) je obrovská. Aby sme získali predstavu o veľkosti rozdielu medzi polomerom jadra a polomerom prvej dráhy, predpokladajme "gigantický" model atómu s jadrom o polomere 1 cm. V takomto modeli by sme museli umiestniť elektrón na prvú dráhu vo vzdialenosti 100 metrov. Skutočne sa takto naplnil predpoklad Ernsta Rutherforda o prázdnosti hmoty okolo nás.

Pomerne jednoducho vyjadríme energiu elektrónu a n-tej dráhe použijúc predchádzajúce vzťahy (3.8) a (3.13):

$$E_n = -\frac{k^2 e^4 m}{2n^2 \hbar^2}$$
(3.16)

3. Pri prechode z energeticky vyššej hladiny na energeticky nižšiu hladinu sa rozdiel energie vyžiari vo forme elektromagnetického žiarenia, frekvencia ktorého je daná vzťahom:

$$h\nu = E_i - E_j \tag{3.17}$$

kde: ν je frekvencia vyžiarenej elektromagnetickej vlny, a E_i, E_j sú energie hladín. Pri prechode z energeticky nižšej hladiny na energeticky vyššiu hladinu sa rozdiel energie absorbuje vo forme elektromagnetického žiarenia zodpovedajúcej frekvencie.

Po dosadení do rovnice (3.17) z rovníc (3.16) a (3.14) dostaneme:

$$h\nu = -\frac{ke^2}{2a_0n_i^2} - \left(-\frac{ke^2}{2a_0n_j^2}\right) \tag{3.18}$$

alebo po malej úprave:

$$\nu = \frac{ke^2}{2a_0h} \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \tag{3.19}$$

Keďže poloha spektrálnych čiar sa udáva vo vlnovej dĺžke (nie vo frekvencii), posledný vzťah prepíšeme do tvaru pre vlnovú dĺžku (použili sme pri tom vzťah λ):

$$\frac{1}{\lambda} = R_H (\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2}) \tag{3.20}$$

kde sme označili:

$$R_H = \frac{ke^2}{2a_0hc} \tag{3.21}$$

Po dosadení číselných hodnôt do vzťahu (3.21) dostaneme:

$$R_H = 1097.3731m^{-1} \tag{3.22}$$

Vypočítaná konštanta R_H zodpovedá experimentálnej Rydbergovej konštante R_{∞} vystupujúcej v Balmerovom vzťahu. Zlepšenie výsledku možno dosiahnuť ak uvažujeme o atóme ako sústave dvoch hmotných telies, ktoré obiehajú okolo spoločného ťažiska. Vo vzťahu (2.14) pre výpočet Bohrovho polomeru potom namiesto hmotnosti elektrónu m bude vystupovať redukovaná hmotnosť μ :

$$\mu = \frac{mm_p}{m + m_p} \tag{3.23}$$

kde m_p je hmotnosť protónu. Zavedenie tejto malej korekcie umožnilo zlepšiť súhlas medzi teóriou a experimentom, tak že vzájomná odchýlka je v medziach experimentálnych chýb použitých konštánt a vlastného merania. Výborný súhlas experimentu s teóriou bol triumf bohrovej teórie a znamenal vstup do novej mechaniky.

Aplikácie troch postulátov Nielsa Bohra priniesli významné výsledky pre vysvetlenie vodíkových emisných spektier. Táto teória však nebola schopná vysvetliť polohu čiar v emisných spektrách héliových a zložitejších atómov. Vďaka tomu, aj napriek nepochybným úspechom, mala táto teória v rokoch 1913 - 1926 mnohých odporcov. Hlavným argumentom bol neobyčajne vysoký počet postulátov - tvrdení bez dôkazu. Hlavne prvý postulát o dovolených dráhach vyvolával pochybnosti. Zdalo sa, že tieto postuláty možno odvodiť z ešte elementárnejších princípov.

V roku 1923 mladý fyzik Louis de Broglie vyslovil revolučnú myšlienku. Ak je pravda, že elektromagnetické vlnenie sa prejavuje duálnym charakterom (teda fotón je zároveň vlna aj častica), potom podobný efekt možno predpokladať aj pre hmotné telesá. Ak teda pripustíme, že elektrón má podobné duálne vlastnosti, ako fotón, pri svojom pohybe okolo jadra sa šíri vo forme vlny, podstata ktorej de Brogiemu zostávala utajená. Na to aby nedochádzalo k interferenčným javom a následnému zániku vlno-častice, musí sa na obvod orbitálnej dráhy "zmestiť" celistvý počet vĺn, ako je to schematicky naznačené na obrázku 3.2. Nutnou podmienkou stacionárneho n-tého orbitu s polomerom r_n je:

$$2\pi r_n = n\lambda \tag{3.24}$$

kde: λ je vlnová dĺžka hypotetickej vlny, prislúchajúc
ej obiehajúcemu elektrónu.



Obr. 3.2: Schématické znázornenie stojatej vlny na stacionárnom orbitáli vodíkového atómu.

V prípade, že vlna má vlastnosti fotónu, tak energiu na stabilnom orbite možno vyjadriť nasledovne (pomocou Einsteinovej teórie vonkajšieho fotoefektu):

$$E = h\nu \tag{3.25}$$

alebo tiež použijúc závery Einsteinovej špeciálnej teórie relativity:

$$E = mc^2 \tag{3.26}$$

Spojením posledných dvoch rovníc dostaneme:

$$h\nu = mc^2 \tag{3.27}$$

Po malej úprave dostaneme:

$$\frac{c}{\nu} = \frac{h}{mc} \tag{3.28}$$

Ak uvážime, že relativistická hybnosť p=mc a $\lambda=c/f$ dostaneme fundamentálny (základný) vzťah medzi vlnovou dĺžkou a hybnosťou častice:

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{3.29}$$

Ak za λ dosadíme podmienku pre stabilnú orbitálnu dráhu (3.24), potom dostaneme:

$$m\nu r_n = \frac{nh}{2\pi} \tag{3.30}$$

čo nie je nič iné ako záhadný vzťah vystupujúci v druhom Bohrovom postuláte. Takto na základe neobyčajnej myšlienky Louse de Broglieho bolo možné vysvetliť, prečo sa elektróny pri pohybe okolo jadra pohybujú len po presne vymedzených dráhach.

"Nová mechanika" ktorá tak výborne poslúžila pri vysvetlení experimentálnych výsledkov získaných koncom 19. storočia, priniesla zároveň neprekonateľné problémy pri formulovaní pohybovej rovnice. Kvantovo-mechanická pohybová rovnica musela totiž v sebe spájať vlnové a súčastne aj korpuskulárne vlastnosti mikroskopických častíc. V roku 1923 sa Erwin Schödinger pokúsil spojiť vlnové vlastnosti (popísané vlnovou rovnicou):

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}$$
(3.31)

kde: u(x,t) je funkcia popisujúca vlnenie v jednom rozmere a čase (napríklad výchylku) a v je rýchlosť vlnenia, a pohyb korpuskulárnej častice (popísané hamiltonovou rovnicou):

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \tag{3.32}$$

kde: E je celková energia, p je hybnosť a U je potenciálna energia, do jednej univerzálnej rovnice. Z poslednej rovnice, po úprave, dostaneme pre hybnosť:

$$p = \sqrt{2m(E-U)} \tag{3.33}$$

Za predpokladu, že platí de Broglieho hypotéza o priradení vlny pohybujúcej sa častici, použijúc vzťah (3.29), možno pre zodpovedajúcu vlnovú dĺžku λ písať:

$$\lambda = h\sqrt{2m(E-U)} \tag{3.34}$$

Po malej úprave dostaneme:

$$\frac{v^2}{\lambda^2} = \frac{2mv^2(E-U)}{h^2}$$
(3.35)

Vlnovú rovnicu, pôvodne priestorovo-časovú rovnicu možno, pomocou substitúcie:

$$u(x,t) = w(x)\exp(-i\omega t) \tag{3.36}$$

(kde: $\omega = 2\pi f$ a nazýva sa kruhová frekvencia), rozdeliť na priestorovú a časovú zložku, (treba starostlivo urobiť deriváciu podľa času a dosadiť) takže dostaneme obyčajnú diferenciálnu rovnicu:

$$\frac{d^2w(x)}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2}w(x) = 0 \tag{3.37}$$

Ak v poslednej rovnici upravíme podiel ω^2/v^2 pomocou vzťahu $\omega\!=\!2\pi f\,$ a $p\!=\!h/\lambda$ dostaneme:

$$\frac{d^2w(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}w(x) = 0 \tag{3.38}$$

Po dosadení za hybnosť z rovnice (3.33) dostaneme:

$$\frac{d^2w(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2}2m(E-U)w(x) = 0$$
(3.39)

Po malej úprave a zamenením w(x) za $\varphi(x)$, pretože tak obyčajne označujeme amplitúdu hmotnej vlny dostaneme:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{3.40}$$

Výraz v zátvorke nazývame Hamiltonov operátor a označujeme \hat{H} . Rozšírenie rovnice na tri rozmery nerobí žiadne principiálne ťažkosti. V uvedenej rovnici nevystupuje čas, ktorý sme vylúčili použitím substitúcie (3.36). Riešením bezčasovej rovnice dostaneme iba stacionárne riešenia. Pohybovú rovnicu dostaneme po dosadení substitúcie a zamenením u(x,t) za $\psi(x,t)$:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t)\right)\Psi(x,t)$$
(3.41)

Táto rovnica v sebe spája vlnovú a klasickú pohybovú rovnicu a dnes ju nazývame Schrödingerova rovnica na počesť Ervina Schrödingera. Pre zachovanie historickej objektivity treba poznamenať, že nezávisle na Schrödingerovi odvodil podobnú rovnicu Werner Heisenberg.

3.2 Poloha a hybnosť kvantovo-mechanickej častice

Keď sa Ervinovi Schödingerovi podarilo odvodiť pohybovú rovnicu, ktorá dokázala spojiť vlnové a korpuskulárne vlastnosti mikročastice, odštartovala sa tým diskusia ako súvisí makrosvet, v ktorom žijeme a pozorujeme ho, s nehmatateľným a do istej miery abstraktným mikrosvetom vlno-častíc. Bolo sa treba opýtať kde je hranica medzi mikrosvetom a makrosvetom a či je vôbec možné nahliadnuť za hranice kvantového mikrosveta. V roku 1926 sa pokúsil Werner Heisenberg (vtedy len 25 ročný fyzik) na základe poznatkov z kvantovej teórie interpretovať pozorovanie mikrosveta. V myšlienkovom experimente použil nesmierne výkonný mikroskop, ktorý je schopný pozorovať jednotlivé elektróny. Na to aby to bolo možné musí pozorovateľ, v súlade s klasickou fyzikou makrosveta, poznať polohu a hybnosť pozorovaného objektu. To sa dá urobiť tak, že pozorovateľ vyšle k skúmanému objektu "sondu", ktorá sprostredkuje informáciu o pozorovanom objekte z mikrosveta. Sonda, na to aby bola schopná požadovanú informáciu sprostredkovať, musí mať podobné rozmery ako skúmaný objekt.

V prípade elektrónu treba použiť kvantum elektromagnetického žiarenia fotón, ktorý je "dostatočne zaostrený", aby pozorovateľ bol schopný určiť polohu. Nech je teda použitý fotón lokalizovaný v smere pohybu na úsečke dĺžky Δx . Takáto lokalizácia sa dá vytvoriť len pomocou vhodne skonštruovanej interferencie rovinných vĺn. To je dôvod, prečo lokalizovanej vlne hovoríme **vlnový balík**. Lokalizácia na úsečke dĺžky Δx , znamená, že amplitúda vlny (ako neskôr uvidíme ide o komplexnú vlnu) mimo úsečky je nulová. Teda interferencia musí byť taká, aby sa jednotlivé vlny mimo intervalu ($-\Delta x/2, \Delta x/2$) navzájom zrušili. Aby to bolo možné musia sa vo vlnovom balíku vyskytovať vlny s dĺžkami λ a λ takými, že sú v protifáze (rušia sa) pri okraji balíka a v strede balíka sú vo fáze (zosilujú sa). Ak teda na interval $\Delta x/2$ pripadne *n* periód s vlnovou dĺžkou λ a n+1 periód s vlnovou dĺžkou λ čo možno zapísať nasledovne:

$$\frac{\Delta x}{2} = n\lambda \tag{3.42}$$

$$\frac{\Delta x}{2} = (n+1)\lambda' \tag{3.43}$$

Odčítaním oboch rovníc a po vynásobení 4π dostaneme:

$$\Delta x \left(\frac{2\pi}{\lambda'} - \frac{2\pi}{\lambda}\right) = 2\pi \tag{3.44}$$

alebo ak uvážime, že vlnočet (počet periód na jednotku dĺžky) $k=2\pi/\lambda$ posledný vzťah možno prepísať:

$$\triangle x \triangle k = 2\pi \tag{3.45}$$

kde $\Delta k = (1/k') - (1/k)$ a označuje rozsah intervalu frekvencií rovinných vĺn, potrebných na vytvorenie požadovaného vlnového balíka lokalizovaného na intervale Δx .

Z poslednej rovnice vidno, že so skracovaním vzdialenosti Δx na ktorej je vlnový balík lokalizovaný, narastá počet potrebných frekvencií. Pozorovateľ pri pozorovaní polohy, sa bude snažiť zlepšovať meranie polohy mikroskopického objektu tak, že bude zaostrovať (teda lokalizovať) vysielaný vlnový balík. Tak môže v podstate dosiahnuť neobmedzenú presnosť v určení polohy. Ak sa pozorovateľ rozhodne zmerať aj rýchlosť častice, musí použiť dva vlnové balíky vyslané tesne za sebou aby priniesli informáciu o polohe častice v čase t a t+ Δ t. Podľa klasickej formule:

$$v = \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \tag{3.46}$$

kde v je rýchlosť častice, určí rýchlosť častice. Aby presne lokalizoval polohu v potrebných dvoch bodoch, použije veľmi zaostrené vlnové balíky. Podľa teórie Louse de Broglieho je však pohybujúca sa mikroskopická častica charakterizovaná vlnou. V procese "zrážky" vlnového balíku s časticou tieto spolu interferujú a vznikne nový "stav" mikročastice. Podľa vysvetlenia Comptonovho javu, v procese interakcie odovzdá vlnový balík časť svojej energie častici, ktorá sa v istom čase pohybuje zrýchlenie. Výraz (3.4) však predstavuje klasickú (makroskopickú) definíciu rýchlosti a uvažuje sa v ňom, že sa sledovaná častica počas časového itervalu Δt , pohybuje rovnomerne. V našom prípade, nasledujúci vlnový balík nájde časticu v stave po urýchlení, takže rýchlosť podľa (3.4) nemožno presne určiť. Tento jav možno potlačiť tak, že pozorovateľ bude skracovať čas medzi jednotlivými meraniami. Musí však použiť viac lokalizované vlnové balíky, aby tieto neinteragovali navzájom. Tým však zväčšuje ich energiu (na ich vytvorenie "použije" väčší

počet rovinných vĺn) a zároveň zväčšuje aj urýchľovací efekt. Aby potlačil urýchľovací efekt, môže použiť málo lokalizovaný vlnový balík - tvorený malým počtom rovinných vĺn. V hraničnom prípade použije len jednu rovinnú vlnu, ktorá vytvorí úplne nelokalizovaný vlnový balík. Tak bude zvyšovať presnosť určenia rýchlosti. So zvyšovaním presnosti určenia rýchlosti častice však bude klesať presnosť určenia polohy a opačne. Zostáva už len určiť či existuje nejaká optimálna kombinácia polohy a rýchlosti, pri ktorej sa dá minimalizovať vzájomná nepresnosť merania. Tu sa musíme vrátiť k samotnej podstate tvorenia vlnového balíku. Použijeme rovnicu (3.45):

$$\triangle x \triangle k = 2\pi \tag{3.47}$$

Po dosadení z de Brogieho rovnice $\lambda = h/p$ a uvážením $\Delta k = 2\pi/\Delta \lambda$ po malej úprave dostaneme:

$$\triangle x \triangle p = \frac{\hbar}{2} \tag{3.48}$$

čo je optimálny vzťah medzi presnosťou určenia polohy a hybnosti vlnočastice. Keďže v experimente nenastáva optimálny stav, poslednú rovnosť obyčajne uvádzame vo forme nerovnosti:

$$\triangle x \triangle p \ge \frac{\hbar}{2} \tag{3.49}$$

Táto nerovnosť vyjadruje slávny princíp neurčitosti formulovaný Wernerom Heisenbergom v roku 1926 a poukazuje na hranicu medzi mikro a makro svetom.

Po uverejnení princípu neurčitosti - mimochodom známom z optiky už dávnejšie - vo fyzikálnej obci sa rozpútala búrlivá diskusia. Tento princíp totiž napáda samotnú podstatu deterministického ponímania sveta. V septembri roku 1927 sa v luxusnom hoteli Métropole v Bruseli schádza vtedajší výkvet fyzikálneho sveta. Vybranú spoločnosť tvorí 28 pánov a jedna dáma. Cieľom ich stretnutia je urobiť poriadok v interpretácii výsledkov kvantovej mechaniky. Počas stretnutia sa do sporu (samozrejme vedeckého) dostali Niels Bohr, zástanca princípu neurčitosti a vlnovo-časticovej interpretácie (kodanská skupina fyzikov) a Albert Einstein, ktorý napriek tomu že, vysvetlením vonkajšieho fotoelektrického javu otvoril dvere "novej fyzike", pri interpretácii pravdepodobnostnej fyziky sa stal jej najväčším odporcom. Výsledkom týždenných diskusií bolo víťazstvo kodanskej skupiny fyzikov a formulovanie základných postulátov kvantovej mechaniky. Ich znenie (pre jednorozmerný prípad) je nasledujúce (pre lepšie pochopenie ich uvádzame spolu s príkladom elektrónu viazaného na úsečku): Postulát I: Fyzikálny stav častice je úplne popísaný komplexnou vlnovou funkciou $\Psi(\mathbf{x},t)$. Hustota rozdelenia pravdepodobnosti výskytu častice je daná ako $\mathbf{P}(\mathbf{x},t) = \Psi^*(\mathbf{x},t) \Psi(\mathbf{x},t)$, (tento súčin nazývame komplexný kvadrát).

Uvažujme jednoduchý prípad, keď je elektrón viazaný na interval dĺžky L. Ako neskôr uvidíme, to zodpovedá prípadu jednorozmernej nekonečne hlbokej potenciálovej jame. Podľa zadania vyžadujeme, aby sa elektrón vyskytoval na intervale <0,L>. Stav elektrónu (v istom okamihu) predpíšeme vlnovou funkciou:

$$\Psi(x,t) = Ax(L-x) \tag{3.50}$$

kde: čas je parameter a vo vlnovej funkcii explicitne nevystupuje. Tvar funkcie sme zvolili do istej miery od oka a v ďaľšom budeme zisťovať, aplikovaním postulátov, nakoľko je tento tvar správny.

Podľa prvého postulátu, kvadrát navrhovanej funkcie zodpovedá hustote rozdelenia pravdepodobnosti v danom okamihu. Normalizačnú konštantu A určíme z predpokladu, že elektrón sa s pravdepodobnosťou rovnej jedna vyskytuje na intervale <0,L>:

$$1 = \int_0^L \Psi^2(x, t) dx$$
 (3.51)

alebo po dosadeni zo vzťahu (3.50):

$$1 = \int_0^L \{Ax(L-x)\}^2 dx \tag{3.52}$$

po "vyriešení" integrálu a malej úprave dostaneme:

$$A = \sqrt{\frac{30}{L}} \tag{3.53}$$

Navrhovaná vlnová funkcia teda existuje aj keď to ešte nezaručuje, že je riešením zodpovedajúcej Schrödingerovej rovnice.

Postulát II: Vlnová funkcia $\Psi(\mathbf{x},t)$ ako aj jej prvá a druhá derivácia podľa súradnice musí byť spojitá a jednoznačná pre všetky hodnoty x.

Navrhnutá vlnová funkcia je spojitá včítane prvej a druhej derivácie.

Postulát III: Každá veličina, ktorú je možné fyzikálne pozorovať, je v kvantovej mechanike reprezentovaná hermitovským operátorom \hat{A} .

V klasickej mechanike potrebujeme na jednoznačné určenie pohybu hmotného bodu určiť polohu a hybnosť hmotného bodu. Keďže toto pravidlo platí aj v kvantovej mechanike (len veličiny majú iný tvar), musíme nájsť príslušné operátory polohy a hybnosti elektrónu viazaného na úsečke dĺžky L. V Schrödingerovej rovnici (pripomíname ide o pohybovú rovnicu) vystupuje poloha v potenciálnej energii, ktorá je reálna coulombovská. Operátor polohy je teda totožný s polohou:

$$\hat{x} = x \tag{3.54}$$

Hybnosť vystupuje v kinetickej energii:

$$E_k = \frac{p^2}{2m_e} \tag{3.55}$$

v kvantovomechanickej interpretácii vlno-častice je kinetická energia daná:

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \tag{3.56}$$

Porovnaním posledných dvoch rovníc pre operátor hybnosti dostaneme:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \tag{3.57}$$

Postulát IV: Stredná, alebo očakávaná hodnota $\langle A \rangle$ ľubovolnej pozorovateľnej veličiny A, ktorá je reprezentovaná operátorom Â, je daná vzťahom:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{\star}(x,t) \hat{A} \Psi(x,t) dx$$
 (3.58)

Strednú hodnotu (očakávanú hodnotu) polohy vypočítame teda nasledovne:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L \Psi^\star(x,t) x \Psi(x,t) dx \qquad (3.59)$$

po dosadení za $\Psi(x,t)$ (čas vystupuje opäť, ako parameter):

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{0}^{L} x \frac{30}{L^5} x^2 (L-x)^2 dx$$
 (3.60)

Po vyriešení posledného integrálu pre očakávanú hodnotu polohy elektrónu dostaneme:

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{L}{2} \tag{3.61}$$

To znamená, že očakávaná hodnota polohy elektrónu, teda to, čo budem merať v experimente, je práve v strede úsečky, na ktorej je lokalizovaný. V tomto prípade je tam aj najväčšia amplitúda vlnovej funkcie.

Strednú (očakávanú) hodnotu hybnosti vypočítame podobne:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \Psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x,t) dx \qquad (3.62)$$

po dosadení za $\Psi(\mathbf{x},t)$:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{0}^{L} x \frac{30}{L^5} x (L-x) \frac{\hbar}{i} \{ (L-x) - x \} dx$$
 (3.63)

Po vypočítaní posledného integrálu pre strednú hodnotu hybnosti dostaneme:

$$\langle \hat{p} \rangle = 0 \tag{3.64}$$

Tento výsledok sme očakávali, pretože viazaný elektrón sa makroskopicky nepohybuje. Na určenie nepresnosti merania potrebujeme určiť strednú kvadratickú odchylku merania (normálne štatistické spracovanie merania) polohy a hybnosti. Teda po dosadení do základných vzťahov:

$$< \Delta x >^2 = < x^2 > - < x >^2$$
 (3.65)

kde:

$$\langle x^{2} \rangle = \int_{0}^{L} \Psi^{\star} \hat{x}^{2} \Psi(x,t) dx$$
 (3.66)

Po dosadení príslušných vzťahov a vyriešení integrálu dostaneme:

$$\langle \bigtriangleup x \rangle^2 = \frac{L^2}{28} \tag{3.67}$$

Podobne pre strednú kvadratickú odchýlku merania hybnosti:

$$< \Delta p >^2 = <\hat{p}^2 > - <\hat{p} >^2$$
 (3.68)

kde:

$$<\hat{p}^{2}>=\int_{0}^{L}\Psi^{\star}(x,t)(\frac{\hbar}{i})^{2}\Psi(x,t)dx$$
 (3.69)

Znovu po dosadené a vyriešení integrálu dostaneme:

$$\langle \Delta p \rangle^2 = \frac{10\hbar^2}{L^2} \tag{3.70}$$

Súčin strednej kvadratickej odchýlky merania polohy a hybnosti nám dá celkovú neistotu merania polohy a hybnosti (pripomíname, že tieto dve veličiny potrebujeme podľa klasickej mechaniky na určenie stavu pohybujúceho sa hmotného telesa) dostaneme:

$$< \Delta x >^2 < \Delta p >^2 = \frac{10\hbar^2}{28} > \frac{\hbar^2}{4}$$
 (3.71)

Posledná nerovnosť spĺňa vzťah neurčitosti. To má nesmierny význam, pretože aplikovaním prvých štyroch postulátov možno získať vzťah neurčitosti.

Postulát V: Prípustným výsledkom merania veličiny A reprezentovanej operátorom je ktorákoľvek z vlastných hodnôt a_i operátora Â.

To že elektrón je viazaný na úsečku je čiste formálna úvaha. V reálnom experimente to znamená elektrón "umiestnený" medzi dvomi paralelnými kovovými doskami, ktoré sú nabité na vysoký záporný potenciál. Medzi doskami je potenciál nulový. Platí teda:

$$V(x) = 0 \qquad 0 \le x \le L \tag{3.72}$$

$$V(x) = \infty \qquad x > 0, x > L \tag{3.73}$$

Pre tento potenciál budeme riešiť bezčasovú Schrödingerovu rovnicu :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \ \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{3.74}$$

Riešenie hľadáme intervale x=(0,L), pretože mimo intervalu (0,L) je riešenie nulové. Ak je V(x)=0 možno poslednú rovnicu prepísať do tvaru obyčajnej diferenciálnej rovnice:

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + k^2\varphi(x) = 0 \tag{3.75}$$

kde:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{3.76}$$

Jej riešenie je lahké - spomeňte si na riešenie úlohy o harmonickom oscilátore - dostaneme ho vo forme súčtu harmonických funkcií:

$$\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \tag{3.77}$$

kde A a B sú konštanty, ktoré treba určiť z okrajových podmienok, v našom prípade:

$$\varphi(0) \equiv \varphi(L) = 0 \tag{3.78}$$

Z okrajovej podmienky v bode x=0 vyplynie, že B=0. Z druhej okrajovej podmienky (v bode x=L) dostaneme:

$$k \equiv k_n = \frac{n\pi}{L} \tag{3.79}$$

kde n je celé číslo.

Konštantu A určíme z normovacej podmienky:

$$1 = \int_0^L |A\sin(k_n x)|^2 dx$$
 (3.80)

Po vyriešení posledného integrálu dostaneme pre ľubovoľné (prípustné) k_n

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \tag{3.81}$$

Výsledný tvar "dovolenej" vlnovej funkcie $\varphi(\mathbf{x})$ dostaneme po dosadení "normovacej" konštanty A a B (B=0 len v našom prípade, vo všeobecnosti to tak nemusí byť):

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{n\pi}{L}x) \tag{3.82}$$

kvadrát tejto funkcie (vo všeobecnosti komplexný súčin $\varphi^*(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x})$) určuje hustotu rozdelenia pravdepodobnosti výskytu častice v bode x. Pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v intervale polôh $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}+\Delta \mathbf{x} \rangle$ n-tej energetickej hladine je daná:

$$P_n(x) = \int_x^{x + \Delta x} \varphi_n^{\star}(x) \varphi_n(x) dx \qquad (3.83)$$

Prípustné hodnoty energie (vlastné čísla operátora) sústavy elektrónu viazaného na úsečku dostaneme, ak aplikujeme (zamená to,že urobíme operácie uvedené v operátore) operátor celkovej energie (v kvantovomechnickom vyjadrení je energia operátor):

$$\hat{E} \equiv \hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \tag{3.84}$$

na funkciu $\varphi(\mathbf{x})$ (pozri 3.77 a 3.81):

$$\hat{E}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \tag{3.85}$$

Po starostlivom vykonaní dvojnásobnej derivácie (ukrytej v operátore hybnosti) pre dovolené energie sústavy dostaneme:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 \tag{3.86}$$

alebo po dosadení za k_n (3.79):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL} n^2 \tag{3.87}$$

Podľa posledného výrazu, sú v sústave lokalizovaného elektrónu prípustné len určité energie. "Vzdialenosť" medzi jednotlivými energetickými hladinami je nepriamo úmerná dĺžke intervalu na ktorom je elektrón lokalizovaný. Ak rozšírime interval do nekonečna dostaneme spojité spektrum energie, čo je charakteristické pre voľnu časticu. Energetický rozdiel medzi dvomi hladinami rastie kvadraticky s rastúcim n. Výsledok sa líši od závislosti odvodenej Balmerom pre energetickú vzdialenosť dvoch hladín (orbitálov) v atóme vodíku ($\Delta E \approx \frac{1}{n^2}$), pretože tam sa elektrón pohybuje v trojrozmernom coulombickom poli, čo je úplne iný problém.

Existenciu izolovaných energií (diskrétne energetické spektrum) možno pochopiť tak, že v riešení vyžadujeme nulovú hodnotu vlnovej funkcie na okrajoch intervalu, na ktorom je elektrón viazaný. Je to podobné ako keď kmitá struna, upevnená v dvoch pevných bodoch, len na určitých (dovolených) frekvenciách. Každej frekvencii prislúcha stacionárne vlnenie také, ktoré spĺňa okrajové podmienky. Na obrázku 3.3a sú zobrazené štyri prvé vlastné funkcie, ktoré môžu v stacionárnom stave existovať v nekonečne hlbokej potenciálovej jame. Hustota rozdelenia pravdepodobnosti existencie častice je nakreslená na obrázku 3.3b. Na najnižšej energetickej hladine (prvá vlnová funkcia) je hustota rozdelenia pravdepodobnosti najväčšia v strede intervalu na ktorom je elektrón (vlno častica) viazaný. Na druhej energetickej hladine je hustota rozdelenia pravdepodobnosti v strede intervalu nulová.

Je potrebné si uvedomiť, že v tomto type okrajovej úlohy sa riešenie sa *rozpadne* na množinu dovolených vlnových funkcií (3.82). Ak sa počiatočný stav približuje k niektorej z vlastných funkcií potom výsledný stav zahrňuje


Obr. 3.3: Tvar vlnovej funkcie (a) a hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu (b) elektrónu "uzavretého" medzi nabitými doskami, ktoré predstavujú "nekonečne hlbokú potenciálovú jamu.

len malý počet funkcií. V opačnom prípade sa počiatočný stav rozpadne na veľký počet vlastných funkcií s nenulovou amplitúdou. V našom prípade sme za počiatočný stav zvolili kvadratickú funkciu, ktorá nie je vlastnou funkciou. Jej priemet (realizáciu) na najnižšiu vlastnú funkciu vypočítame:

$$P = \left| \int_{0}^{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{\pi}{L}x) \{x(L-x)\} dx \right|^{2}$$
(3.88)

Po vypočítaní posledného integrálu dostaneme P=0.999. To znamená, že 99,9 % vnúteného stavu sa realizuje na najnižšej energetickej hladine. To preto, lebo funkcia f(x) = Ax(L - x) je "podobná" na intervale <0,L> prvej vlastnej funkcii funkcii $\varphi_1(x)$.

Na príklade sme videli ako pomocou postulátov prijatých v roku 1927 na stretnutí fyzikov v hoteli Métropol v Bruseli dokážeme vysvetliť intuitívne závery fyzikov v predchádzajúcich rokoch. Tu by sa dalo povedať, že fyzika opäť raz dosiahla svoje maximum a už nie je čo skúmať, pretože všetko už bolo objavené. Vyvarujme sa však podobných unáhlených záverov, ktoré koncom 19. storočia priviedli fyzikálnu obec na pokraj vedeckej priepasti. Ďalej uvidíme, že vyriešením jednej záhady sa vynoria nové a nové, ktoré je potrebné vyriešiť.

Kapitola 4

Kvantové tunelovanie

4.1 Interakcia vlno-častice s potenciálom

Predstavme si jednoduché jednorozmerné zariadenie pozostávajúce z dvoch kovových prstencov, z ktorých jeden je uzemnený a druhý má oproti prvému záporný potenciál U=-100V tak ako je nakreslené na obrázku 5.1.a. Z ľavej strany nech do experimentálneho zariadenia prichádza záporne nabitá mikroskopická častica (napríklad elektrón so záporným nábojom) s kinetickou energiou T=180eV. Pred príchodom do prvého prstenca sme jeho vlastnosti "upravili" tak, že poznáme presne jeho hybnosť. Podľa princípu neurčitosti v takomto prípade bude jeho poloha "úplne" rozmazaná a je realizovaný len jednou jedinou vlnou s frekvenciou f. Keďže druhý prstenec má záporný potenciál vzhľadom na prvý, nemôže sa ho tento priamo dotýkať a musia byť separované aj keď malou ale konečnou medzerou, ktorú označíme dx. Na obrázku 5.1.b je priebeh potenciálu na skutočnej štrbine znázornený čiarkovanou čiarou. Pri pohybe elektrónu pozdĺž štrbiny pôsobí na tento sila:

$$F = -\frac{dU(x)}{dx} \tag{4.1}$$

Pôsobením tejto sily je elektrón je spomalovaný podľa druhého Newtonovho zákona. Treba poznamenať, že pravouhlý potenciál sa nedá vyrobiť ani použiť, pretože by "vyvolával" nekonečne veľké zrýchlenie. Napriek tomu pri našom rozprávaní použijeme práve takéto priblíženie, pretože kvalitatívne výsledky sú správne. Na obrázku 6b je idealizovaný potenciál znázornený plnou čiarou. Na "riešenie" úlohy o pohybe je potrebné riešiť pohybovú rovnicu. Pre mikroskopickú časticu sa pohybová rovnica nazýva Schrödingerova rovnica (keďže opakovanie je matkou múdrosti napíšme ju znovu):



Obr. 4.1: Zariadenie na "vytvorenie" potenciálu schodovitého tvaru (a). Priebeh potenciálu vytvoreného v zariadení (b).

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{4.2}$$

kde $\varphi(x)$ je tvar vlny, ktorý popisuje správanie sa delokalizovaného elektrónu v potenciáli V(x). Ten je v prvom prstenci nulový (taký prípad sme už riešili), a v druhom nadobúda nenulovú hodnotu - v našom prípade zápornú vzhľadom na prvý prstenec. Ak umiestnime štrbinu do počiatku súradnej sústavy (vždy to ide urobiť), potom pre potenciál platí:

$$V(x) = 0eV \qquad x \le 0 \tag{4.3}$$

$$V(x) = -100eV$$
 $x > 0$ (4.4)

Riešenie rovnice (4.2) pre x < 0 ktoré označíme ako $\varphi_1(x)$ sa bude skladať z dvoch častí: vlny prichádzajúcej z ľava $\varphi_{1L}(x)$ a z vlny odrazenej na potenciáli, prichádzajúcej z prava $\varphi_{1P}(x)$ Podľa riešenia úlohy s nekonečne hlbokým potenciálom už vieme, že každá z vĺn ma dve zložky:

$$\varphi(x) = A\sin(x) + B\cos(x) \tag{4.5}$$

kde koeficienty A a B určíme z okrajových podmienok, pričom nie vždy máme také štastie, ako pri úlohe s nekonečne hlbokým potenciálom, kde sa jeden koeficient rovná nule. Aby sme nemuseli počas riešenia pamätať na množstvo koeficientov, pracu si trošku zjednodušíme (len formálne). Ak zavedieme komplexné čisla:

$$\alpha = a_r + ia_i \tag{4.6}$$

a komplexný exponent:

$$e^{ikx} \equiv \exp(ikx) = \cos(kx) + i\sin kx \tag{4.7}$$

kde k je ľubovolné reálne číslo, potom celkové riešenie $\varphi_1(x)$ (vľavo od štrbiny) možno elegantne napísať v tvare:

$$\varphi_1 = ae^{ikx} + be^{-ikx} \tag{4.8}$$

kde a a b sú komplexné čísla a:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{4.9}$$

Posledný vzťah možno overiť dosadením do rovnice (4.2). Výsledná vlna (pochopitelne komplexná funkcia $\varphi_1(x)$) bude výsledkom interferencie prichádzajúcej a odrazenej vlny. Na druhej strane štrbiny bude situácia podobná, až na to, že potenciál je nenulový a nevystupuje tam žiadna odrazená vlna - nemá sa na čom odraziť. Teda celkové riešenie vpravo od štrbiny je:

$$\varphi_2 = c e^{iqx} \tag{4.10}$$

kde c je komplexné číslo a:

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \tag{4.11}$$

kde V_0 je hodnota potenciálu oproti uzemnenému prstencu. Koeficienty *a,b* a *c* vypočítame na základe požiadavky druhého postulátu, podľa ktorého musí byť vlnová funkcia spofitá včítane svojich derivácií v celej oblasti. Teda aj na rozhraní skokovej zmeny potenciálu v bode x=0.

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \tag{4.12}$$

$$\frac{d}{dx}\varphi_1(x)\mid_0 = \frac{d}{dx}\varphi_2(x)\mid_0$$
(4.13)

kolmá čiara za funkciou znamená, že po derivácii podľa x dosadíme za premennú nulu. Po starostlivom zderivovaní a dosadení dostaneme dve rovnice:

$$a+b = c \tag{4.14}$$

$$k(a-b) = qc \tag{4.15}$$

kde vystupujú tri neznáme koeficienty. Z tejto sústavy možno vypočítať dva koeficienty, ktoré budú vystupovať ako funkcie tretieho. Obyčajne vyjadríme koeficienty b a c. Koeficient a zostáva ako parameter, pretože označuje amplitúdu prichádzajúcej vlny.

V tejto časti sa čitateľ isto opýta, čo z toho čo sme v predchádzajúcej časti vyjadrili je matematická fikcia a čo možno zmerať v experimente. Komplexnú funkciu určite nie, pretože tú sme zaviedli len na "zníženie" počtu koeficientov. V reálnom experimente možno meracím prístrojom "vidieť" intenzitu I(x), ktorá (v istom pribížení) zodpovedá hustote rozdelenia pravdepodobnosti:

$$P(x) = \varphi^{\star}(x)\varphi(x) \tag{4.16}$$

ktorá je už reálnou funkciou súradnice x. Ak nebude stáť v ceste častice žiadna prekážka vo forme potenciálového skoku, bude hustota rozdelenia pravdepodobnosti všade konštantá. Takýto prýad sme zobrazili na obrázku 4.2. Treba poznamenať, že v prýade voľnej častice nie je možné normovanie podľa predpisu:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi) d\xi \tag{4.17}$$

pretože tento integrál pre voľnú časticu diverguje. V obrázku 4.2 je normovanie na jednotku urobené umelo. Vidíme, že fáza reálnej a imaginárnej zložky je tak posunutá, aby ich komplexný kvadrát (4.16) dával konštantu.

Ak do cesty pôvodne vľnej častice postavíme prekážku vo forme potenciálového rozdielu (pozri obrázok 4.1), častica čiastočne vchádza do oblasti za potenciálovým skokom a úlne sa odráža spät, ak je potenciálový rozdiel Uväčší, ako energia častice E. Pozri obrázok 4.3. Zvlnenie na ľavej strane vzniká, ako interferencia medzi prichádzajúcou a odchádzajúcou vlnou.

 $\sigma(t)$ V prípade nižšieho potenciálového rozdielu, ako je energia častice, táto prechádza za bariéru čiastočne zabrzdená. To sa prejaví zmenou vlnovej dĺžky zložiek rozdelenia hustoty pravdepodobnosti, tak ako je to znázornené na obrázku 4.4.

V reálnom experimente sa obvykle "meria" koeficient odrazu na potenciálovom skoku. Je to reálne číslo R (zo slova reflexia) definované ako podiel kvadrátov (komplexných) amplitúd odrazenej vlny b a dopadajúcej vlny a:



Obr. 4.2: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vĺn) stav voľného elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry. Pre porovnanie je v obrázku vynesený aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara).

$$R = \frac{|b|^2}{|a|^2} \tag{4.18}$$

Podobne je definovaný koeficient prechodu T (zo slova transmisia) ako podiel kvadrátov amplitúd prejdenej vlny c a dopadajúcej vlny a:

$$T = \frac{|c|^2}{|a|^2} \tag{4.19}$$

Samozrejme medzi R a T platí vzťah:

$$1 = R + T \tag{4.20}$$

Po dosadení "experimentálnych" hodnôt kinetickej energie prichádzajúceho elektrónu (E=180eV) a výšky bariery (U= -100eV) možno jednotlivé koeficienty R a T ľahko vypočítať: ¹

 $^{^1\}mathrm{Do}$ vzťahu (4.21) treba dosadiť za potenciál Uhodnotu +100V, pretože elektrón má záporný náboj.



Obr. 4.3: Funkcia rozdelenia hustoty pravdepodobnosti pred barérou a za bariérou (plná čiara), ak jej výška je väčšia, ako energia E dopadajúcej rovinnej vlny. Zvlnenie funkcie P(x) v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. V brzdnom potenciáli hustota rozdelenia pravdepodobnosti rýchlo klesá k nule. Čiarkovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná zvislá čiara pradstavuje hranicu potenciálového skoku.

$$R = \frac{|k-q|^2}{|k+q|^2} \equiv \frac{\left(\sqrt{E} - \sqrt{E-U}\right)^2}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E-U}\right)^2} = (0.2)^2 \tag{4.21}$$

Pri zadanom experimentálnom usporiadaní sa "odrazí" zhruba 4% dopadnutých elektrónov. Zákonite vzniká otázka, ako je to s jednotlivým elektrónom. Odrazí sa len jeho jedna časť, alebo výsledok treba "chápať" v štatistickom zmysle? Nuž toto je typický príklad hranice medzi mikrosvetom, v ktorom sme danú úlohu o elektróne riešili, a makrosvetom v ktorom môžeme experiment realizovať. Je jasné že, experimentálny zmyseľ majú len reálne veličiny, komplexné veličiny sme "zaviedli" len na zníženie počtu premnenných. Ich interpretácia však musí býť "makroskopická", pretože len taká vystupuje v experimente a ako taká môže byť interpretovaná našimi zmyslami. Nemá asi zmyseľ uvažovať čo sa stane ak v experimentálnom zariadení sa pohybuje len jeden elektrón s presne zadanou hybnosťou - to je opäť naša fikcia ktorú sme prijali na uľahčenie riešenia. Vždy tam bude mnoho elek-



Obr. 4.4: Funkcia rozdelenia hustoty pravdepodobnosti pred barérou a za bariérou (plná čiara), ak jej výška je menšia, ako energia E dopadajúcej rovinnej vlny. Zvlnenie funkcie P(x) v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. Rovinná vlna prechádza do oblasti potenciálu so zmenšenou energiou. To sa prejaví, ako predĺženie vlnovej dĺzky rovinnej vlny. Čiarkovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná zvislá čiara pradstavuje hranicu potenciálového skoku.

trónov s "nepresne" zadanými hybnosťami a výsledok akéhokoľvek merania treba chápať v štatistickom zmysle.

V prípade ak použijeme urýchľujúci potenciál, koeficient reflexie R bude:

$$R = \frac{|k-q|^2}{|k+q|^2} \equiv \frac{\left(\sqrt{E} - \sqrt{E+U}\right)^2}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E+U}\right)^2} = (0.11)^2 \tag{4.22}$$

Napriek tomu že, elektrón je na bariére urýchlený, odrazí sa asi 1% dopadnutých elektrónov. Zaujímavé je sa pozrieť na výsledný tvar vlnovej funkcie z matematického pohľadu, pretože ten nám môže ozrejmiť formalizmus, ktorý pri riešení používame. Tvar vlnovej funkcie $\varphi_2(x)$ elektrónu po prechode potenciálovou bariérou je daná riešením Schrödingerovej rovnice pre nenulový potenciál (rovnica 4.10). Frekvencia tu vystupuje vo forme koeficientu q (rovnica 4.11), kde ako premenná vystupuje rozdiel energie E prichádzajúceho elektrónu a potenciálnej energie V_0 V prípade ak je $E > V_0$ ich rozdiel je kladný a vplyv odpudivého potenciálu sa prejaví zmenšením frekvencie vlnovej funkcie. Podľa Einsteinovej teórie vonkajšieho fotoelektrického javu energia fotónu súvisí s jeho frekvenciou (vzťah 3.25). Pri prechode elektrónu cez odpudivý potenciál sa podľa klasickej fyziky zmenší kinetická energia a podľa vlnovej fyziky zmenší frekvencia vlnovej funkcie, ktorá súvisí s energiou. Dostali sme pekný príklad duality korpuskulárnej a vlnovej vlastnosti mikroskopického objektu. Samozrejme podobnú úvahu možno urobiť aj pre makroskopický oblekt - napríklad prelet nabitej sklenenej guličky hmotnosti $1x10^{-3}$ kg cez odpudivé elektrické pole - nereálnosť vypočítaných vlnových dĺžok nás rýchlo presvedčí o nemožnosti odmerať kvantovo-mechanické výsledky podobného pokusu.

Možno sa opýtať, čo sa stane ak "výška" brzdného potenciálu prevyšuje energiu prichádzajúceho elektrónu. Potom rozdiel $E-V_0$, vystupujúci v rovnici 4.11 pod odmocninou, je záporný. Treba si pripomenúť, že v takomto prípade je výsledok odmocňovania imaginárne číslo. V exponente funkcie $\varphi_2(x)$ (rovnica 4.8) však už jedno existuje. Ich súčin dá reálne číslo a z komplexnej periodickej funkcie sa stáva obyčajná klesajúca exponenciálna funkcia. Na obrázku 9 je zobrazený priebeh pravdepodobnosti výskytu elektrónu pozdĺž x-ovej osi pre tento prípad. Exponenciálny pokles hustoty rozdelenia



Obr. 4.5: Priebeh hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu elektrónu pozdĺž x-ovej osi v experimentálnom zariadení. V oblasti odpudivého potenciálu sa hustota rozdelenia pravdepodobnosti exponencionálne znižuje.

pravdepodobnosti v oblasti "brzdného" potenciálu (obrázok 4.5) nás môže priviesť na myšlienku, spraviť oblasť v ktorej je elektrón brzdený na krátkej vzdialenosti, tak aby po opustení tejto oblasti bola hustota rozdelenia pravdepodobnosti nenulová. Návrh experimentálneho zariadenia a priebeh potenciálu je na obrázku 4.6.



Obr. 4.6: Schematický návrh experimentálneho zariadenia s tenkou oblasťou brzdného potenciálu (a) idealizovaný priebeh potenciálu ako funkcie x-ovej súradnice (b).

Tvar funkcie hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu elektrónu v experimentálnom zariadení, ktoré vytvára potenciálový skok vyšší, ako je energia prichádzajćej vlny, je na obrázku 4.7. Oscilácie funkcie P(x) v ľavej časti vznikajú ako dôsledok už spomínanej interferencie medzi prichádzajúcou a odrazenou vlnou. V intervale $\langle 0, \Delta x \rangle$ pozorujeme exponeciálny pokles. Po prechode bariérou je funkcia rozdelenia hustoty rozdelenia pravdepodobnosti konštantná. Pre dostatočne úzku bariéru má funkcia P(x) nenulovú hodnotu, čo znamená že elektrón prešiel cez bariéru (v štatistickom zmysle) aj keď podľa klasickej mechaniky by sa mal úplne odraziť. Koeficient odrazu R a prechodu T dostaneme rovnako ako v predchádzajúcom prípade z riešenia Schrödingerovej rovnice doplnenej o príslušné okrajové podmienky.



Obr. 4.7: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vĺn) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je vyššia, ako je energia prichádzajúcej častice. Elektrón je intenzívne v bariére brzdený a jeho hybnost klesá. Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti (plná čiara) exponenciálne klesá.

Najskôr rozdelíme použité experimentálne zariadenie na tri oblasti - na ľavo od bariéry, oblasť bariéry (tenký prstenec v strede) a na pravo od bariéry. V prvých dvoch oblastiach interferujú prichádzajúce a odchádzajúce vlny a v poslednej oblasti existuje len odchádzajúca vlna, ktorá sa nemá od čoho odraziť. Podobne ako v predchádzajúcom experimente pre jednotlivé oblasti navrhneme riešenia nasledovne:

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + ae^{-ikx} \qquad x < 0$$
(4.23)

$$\varphi_2(x) = be^{iqx} + ce^{-iqx} \qquad 0 \le x \le \Delta \tag{4.24}$$

$$\varphi_3(x) \qquad = de^{ikx} \qquad x < 0 \qquad (4.25)$$

kde:

$$k^{2} = \frac{2mE}{\hbar^{2}} \qquad q^{2} = \frac{2m(E - U_{0})}{\hbar^{2}}$$
(4.26)

Amplitúdu prichádzajúcej vlny $\varphi_1(x)$ sme položili rovnú jednej. V predchádzajúcom riešení sme videli že ostatné amplitúdy sú funkciou amplitúdy prichádzajúcej vlny. Tento "trik" nám trošku zjednoduší riešenie. Z podmienky spojitosti riešenia na hraniciach x=0 a $x=\Delta$ dostaneme dve rovnice:



Obr. 4.8: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čirara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vĺn) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je nižšia, ako je energia prichádzajúcej častice. Po spomalení elektrónu klesne jeho hybnosť a predĺži sa vlnová dĺžka. Pre porovnanie je v obrázku vynesený aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara). Interferencia vzniká aj vo vnútri bariéry, ako dôsledok odrazu na zadnej strane bariéry.

$$1 + a = b + c \qquad be^{iq\Delta} + ce^{-iq\Delta} = de^{ik\Delta} \tag{4.27}$$

a z podmienky spojitosti derivácií ďaľšie dve rovnice:

$$k(1-a) = q(b-c) \qquad q\left(be^{iq\Delta} - ce^{-iq\Delta}\right) = kde^{ik\Delta} \qquad (4.28)$$

Po troške námahy pre jednotlivé koeficienty dostaneme (odporúčame

čitateľovi vzťahy prekontrolovať):

$$a = \frac{2i\left[\left(\frac{q}{k}\right)^2 - 1\right]\sin(q\Delta)}{\left(\frac{q}{k} + 1\right)^2 e^{-iq\Delta} - \left(\frac{q}{k} - 1\right)^2 e^{iq\Delta}}$$
(4.29)

$$b = \frac{2(\frac{q}{k}+1)}{(\frac{q}{k}+1)^2 - (\frac{q}{k}-1)^2 e^{i2q\Delta}}$$
(4.30)

$$c = \frac{2(\frac{q}{k}-1)}{(\frac{q}{k}+1)^2 e^{-i2q\Delta} - (\frac{q}{k}-1)^2}$$
(4.31)

$$d = \frac{4\left(\frac{q}{k}\right)e^{-ik\Delta}}{\left(\frac{q}{k}+1\right)^2e^{-iq\Delta}-\left(\frac{q}{k}-1\right)^2e^{iq\Delta}}$$
(4.32)

Pri počítaní s amplitúdami treba mať na pamäti že ide o komplexné čísla. Po dosadení do vlnových funkcií (4.23 - 4.25), možno ľahko vypočítať potrebné priebehy funkcií - typická úloha pre počítač. Isto teraz ľahko vyjadríme koeficienty R a T podľa definície (4.18) a (4.19) - treba mať na pamäti, že sme použili iné označenie amplitúd:

$$R \equiv \frac{|a|^2}{|1|^2} = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2(q\Delta)}{4k^2 q^2 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2(q\Delta)}$$
(4.33)

$$T \equiv \frac{|d|^2}{|1|^2} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2\sin^2(q\Delta)}$$
(4.34)

Zo vzťahu 4.33 vidno, že v špeciálnom prípade:

$$q\Delta = \frac{2m(E+U)}{\hbar} \Delta \equiv n\pi \tag{4.35}$$

kde n=1,2,3,.... dostaneme R=0 čo zodpovedá úplne priezračnej bariére. Teda pre isté kombinácie šírky a výšky bariéry sa táto stáva pre prichádzajúci elektrón bezodrazová. Pre iné šírky a výšky bariéry sa elektrón "čiastočne" dostáva na druhú stranu, aj keď by sa mal podľa klasickej mechaniky odraziť. Tento jav sa nazýva tunelovanie.

4.2 Pohybujúci sa vlnový balík

Našim cieľom je skonštruovať také riešenie Schrödingerovej rovnice, ktoré bude v sebe zahrňovať časovú zložku pohybujúceho sa vlnového balíku. Najskôr však si musíme skonštruovať predpis pre lokalizovanú vlno-časticu. S pojmom lokalizácie sme sa už stretli pri vysvetlovaní princípu neurčitosti (vzťahy 3.42 - 3.45). Podľa úvah tam uvedených, potrebujeme takú sústavu rovinných vĺn (harmonické vlny šíriace sa celým priestorom) abu sa ďaleko od lokalizovanej vlno-častice interferenciou rušili a v mieste lokalizácie naopak konštruktívnou interferenciou "vytvárali" nenulovú hodnotu. Na prvý pohľad je to nesplniteľná úloha, ale ako za chvíľu uvidíme dá sa to urobiť. Jednu (delokalizovanú) rovinnú vlnu pre presne určenú hybnosť napíšme:

$$\varphi_p(x) = a_p \exp(\frac{i}{\hbar} px) \tag{4.36}$$

index p pri označení vlnovej funkcie a komplexnej amplitúdy značí v oboch prípadoch "závislosť" od hybnosti. V exponente vystupuje "len" xová zložka hybnosti p_x . Pomocou takto definovaných rovinných vĺn zostrojíme lokalizovaný vlnový balík požadovaného tvaru:

$$\varphi(x) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \exp(\frac{i}{\hbar}px)$$
(4.37)

predpokladáme, že hybnosť nadobúda diskrétne hodnoty až do nekonečna. V praktickom počítaní pochopiteľ ne rad odrežeme pri nejakom vhodnom p. Koeficienty a_p vypočítame podľa zadaného tvaru vlnového balíku f(x):

$$a_p = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi_p(x)dx \tag{4.38}$$

Hustotu rozdelenia pravdepodobnosti P(x) vypočítame podľa vzťahu (4.16):

$$P(x) = \varphi^{\star}(x)\varphi(x) \tag{4.39}$$

Na obrázku 4.9 je zobrazený priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti P(x) vypočítanej použitý vzťahov (4.36) až (4.39). Prerušované čiary označujú priebehy reálnej a imaginárnej zložky vlnového balku. Po vykonaní komplexného násobenia je P(x) reálnou a teda aj merateľnou veličinou.

Keď sa nám podarilo skonštruovať statický vlnový balík, musíme ešte vložiť do predpisu pre vlnovú funkciu časovú zložku. Na to sa musíme vrátiť späť k miestu kde sme rozdelili pôvodnú priestorovo-časovú rovnicu na priestorovú a časovú zložku. Urobili sme to pomocou substitúcie (3.36):

$$u(x,t) = w(x)\exp(-i\omega t) \tag{4.40}$$

ktorá po (formálnej) zámene premenných, na také ako obvykle používame v kvantovej mechanike, bude mať tvar:

$$\Psi(x,t) = \varphi(x) \exp(-i\omega t) \tag{4.41}$$



Obr. 4.9: Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre vlnový balík vypočítanej podľa vzťahov (4.36) až (4.39) - plná čiara. Celkové rozdelenie P(x) je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a imaginárnej zložky - bodkovaná čiara.

Po dosadení za $\varphi(\mathbf{x})$ z rovnice (4.37) a ak uvážime, že platí vzťah medzi frekvenciou a energiou vlnenia (Einsteinovo vysvetlenie vonkajšieho fotoelektrického javu):

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \tag{4.42}$$

dostaneme (po malej úprave):

$$\Psi(x,t) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \exp\{\frac{i}{\hbar} \left(px - E_p t\right)\}$$
(4.43)

kde E_p je energia prislúchajúca jednotlivej rovinnej vlne použitej v rozvoji. Ak teda poznáme počiatočný tvar hustoty rozdelenia pravdepodobnosti, hovoríme tomu, že poznáme počiatočný stav častice, potom vieme použitím rovnice (5.6) - pripomíname, že je to riešenie časovej Schrödingerovej rovnice - predpovedať v akom stave sa bude častica nachádzať v ľubovolnom neskoršom čase. To nám umožňuje zjednodušiť riešenie časovej Schrödingerovej rovnice minimálne v niektorých špeciálnych prípadoch. Skúsme sa pozrieť čo sa stane ak sa vlnový balík pohybuje v prostredí s nulovým potenciálom. Vtedy časový člen v rovnici (5.6) zabezpečí takú zmenu fáze jednotlivých rovinných vĺn, že ich výsledok (súčet) sa bude pohybovať v nezmenenej podobe pozdĺž x-ovej osi rýchlosťou, ktorá zodpovedá hybnosti vlno-častice. Keďže tento pohyb je výsledkom spolupráce veľkého počtu rovinných vĺn, hovoríme o grupovej rýchlosti. Grupová rýchlosť sa líši od rýchlosti vlny v danom prostredí. Pohyb vlnového balíka v ideálnom prostredí je na obrázku 13a.

V reálnom prostredí závisí rýchlosť pohybu vlny od jej frekvencie. Tomuto javu hovoríme disperzia. V prípade pohybu vlnového balíka sa počiatočná vyváženosť amplitúd a fáz naruší, čo sa prejaví postupným rozplývaním vlnového 10.

Po vyk

lou



Obr. 4.10: Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre pohybujúci sa vlnový balík v disperznom prostredí vypočítanej podľa vzťahu (4.43) - plná čiara. Vlnový balík sa pohybuje zľava do prava. Rozširovanie vlnovho balíku spôsobuje disperzné prostredie - rýchlosť vlnenia závisí od frekvencie. Celkové rozdelenie P(x) je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a imaginárnej zložky - bodkovaná čiara.

veličinou. Možnosť riešiť časovú Schrödingerovú rovnicu pomocou rozloženia do radu rovinných vĺn, nám dovoľuje relatívne jednoducho riešiť aj interakciu vlnového baliku s potenciálom. Necháme totiž v každom okamžiku interagovať jednotlivé rovinné vlny s predpísaným potenciálom a vypočítame prechádzajúcu a odrazenú časť spolu s príslušnými interferenciami. Na záver ich všetky s príslušnou fázou spočítame a dostaneme výsledok intekcie v každom čase. Je to trošku zdĺhavý postup, ale v dobe počítačov ľahko realizovateľný.

Na obrázku 4.11 je nakreslený výsledok interakcie pohybujúceho sa vlnového balíku s nekonečne vyskou potenciálovou barierou. V tomto prípade nemôž prejsť častica na druhú stranu potenciálu, a preto sa kompletne odráža späť. Zvlnenie vzniká, ako dôsledok interferencie medzi prichádzajúcimi a odchádzajúcimi vlnami. V tomto prípade sa vlnový balík pohybuje vysokou rýchlosťou, čo sa prejaví , ako vysoká frekvencia osciláci
pred barierou. V experimentálnom usporiadaní sa nekonečne vysoký potenciálový
 schod nedá realizovať a výslednú realizáciu je možné chápať len, ako ideali-
záciu. V prípade experimentálne realizovateľnej bariéry konečnej výšky , teda



Obr. 4.11: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou nekonečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vzniká, ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej časti vlnového balka. Prerušovanou čiarou je nakreslený vlnov y balík, ktorý sa nachádza vo vzdialenosti od bariery v ktorej ešte / už neinteraguje s barierou. Bariera je znázornená hrubou plnou čiarou.

kone+cn=eho potenciálového rozdielu medzi elektródami, možno ovcak'avať čiastočn'e preniknutie častice (vlny) do bariéry. Na obrázku 4.12 je nakreslený výsledok interakcie vlnového balíku s potenciálovou bariérou konečnej vývsky. Pri výpočte sme použili napäťový rozdiel U = 10V. To, že hodnota rozdelenia hustoty pravdepodobnosti v bariére klesá exponencionálne, nás môže priviesť na myšlienku, že v prípade dostatočne tenkej bariéry môže vlnov y balík preniknúť cez bariéru. Na obrázku 4.13 je nakreslená interakcia



Obr. 4.12: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou konečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vzniká, (ako aj v predchádzajúcom prípade) ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej časti vlnového balíka. Vidieť, že hodnota rozdelenia hustoty pravdepodobnosti v bariere exponenciálne klesá. S bariérou v tomto prípade interaguje menej lokalizovaný vlnový balík. Bariera je znázornená plnou čiarou, ako obdĺžnik.

vlnového balíku s bariérou desať krát kratšej šírky, ako v predchádzajúcom prípade. Skutočne, prechod vlnového balíku je dobre pozorovateľný.

4.3 Kvaziklasické priblíženie - WKB aproximácia

Interakcia s pravouhlým potenciálom je do istej miery idealizácia. Ako sme videli pri našom myslenom experimente s urýchlovacou trubicou, pravouhlý potenciál sa ani nedá vyrobiť. Na druhej strane v reálnych výpočtoch musíme často uvažovať iný ako (približne) pravouhlý potenciál. Pochopiteľne vždy by sa mala vyriešiť Schrödingerova rovnica do ktorej "vložíme" zodpovedajúci tvar potenciálu. Pri jej riešení však mnohokrát narazíme na neprekonateľné technické ťažkosti. Preto boli vyvinuté približné metódy riešenia. Keďže ide o približné riešenie treba mať vždy na pamäti oblasť ich použitia.



Obr. 4.13: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou konečnej výšky. Vidieť, že cez tenkú bariéru častica čiastočne prechádza. Bariera je znázornená plnou čiarou, ako obdĺžnik.

Predstavme si, že máme nejako definovaný potenciál pre ktorý potrebujeme určiť koeficienty R a T pre konkrétny vlnový balík a potenciál určený funkciou U(x). Ukazali sme, že vlnový balík sa dá rozložiť do radu rovinných vĺn, a to dokonca v každom prípade. Skúsme urobiť niečo podobné aj s potenciálom U(x) tak, že ho rozdelíme na veľký počet pravouhlých potenciálov:

$$U(x) = \sum_{n} U_n(x_n, \Delta x) \tag{4.44}$$

kde x_n znamená polohu n-tého pravouhlého potenciálu a Δx jeho šírku. Na obrázku 4.14 je znázornená aproximácia pomocou postupného pridávania pravouhlých potenciálov.

Technickú realizáciu tejto aproximácie si možno predstaviť ako postupné urýchlovanie (prípadne brzdenie) častice v sústave kovových prstencov ako je nakreslené na obrázku 4.15. V kvaziklasickom priblížení predpokladáme, že častica interaguje s potenciálom len v oblasti medzi bodmi obratu a a b(pozri obrázok 4.14), tak že na vzdialenosti Δx po prechode potenciálu U_n poklesne amplitúda vlnovej funkcie o:

$$\delta_n = \exp\{-\frac{2m}{\hbar^2} \left[U_n(x_n, \Delta x) - E\right]^{1/2}\}$$
(4.45)

kde U_n je výška n-tej pravouhlej bariéry. Pokles amplitúdy na n bariérach je



Obr. 4.14: Rozdelenie obecného potenciálu V(x) do radu pravouhlých potenciálov podľa vzťahu (6.1). Vodorovná čiara označuje energiu a smer interagujúcej častice. Body a a b označujú body v ktorých by sa klasická častica odrazila hovoríme im body obratu.

potom daný súčinom jednotlivých poklesov:

$$\delta \equiv \prod_{n} \delta_{n} = \prod_{n} \exp\{-\frac{2m}{\hbar^{2}} \left[U_{n}\left(x_{n}, \Delta x\right) - E\right]^{1/2}\}$$
(4.46)

Posledný výraz použitím vzťahu:

$$\prod_{n} \exp\{-\alpha_n\} = \exp\{-\sum_{n} \alpha_n\}$$
(4.47)

upravíme:

$$\delta = \exp\{-\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{n} \left[U_n \left(x_n, \Delta x \right) - E \right]^{1/2} \}$$
(4.48)

V limitnom prípade ak $x_n \to 0$ prejde sumácia na integrovanie a vzťah (4.48) prepíšeme:

$$\delta = \exp\{-\frac{2m}{\hbar^2} \int_a^b \left[U(x) - E\right]^{1/2} dx\}$$
(4.49)

kde integrujeme v intervale medzi bodmi obratu. Naznačený postup riešenia Schrödingerovej rovnice je odvodený z výpočtov, ktoré uskutočnili P.Wentzel, H.A.Kramers a L.Brillouin a názov metódy pochádza z počiatočných písmen mien autorov - WKB priblíženie. Toto priblíženie je kváziklasické. Preto je jeho platnosť obmedzená na oblasti ďaleko od bodov obratu, kde dáva dobré výsledky. Vo vzťahu (4.49) však vystupuje integrál v hraniciach medzi bodmi obratu. Priblíženie sa dá použiť v prípade ak okolia bodov obratu tvoria len malú časť celého potenciálu. To je splnené pre potenciály široké (vzhľadom na vlnovú dĺžku častice) a málo strmé. Istú analógiu obmedzenia oblasti použitia možno nájsť na obrázku 4.15. Ak v našom experimentálnom zariadení chceme aproximovať strmo sa meniaci potenciál, budeme zvyšovať napätie



Obr. 4.15: Zariadenie na postupné urýchlovanie častice v sústave prstencov (a) tak aby sme aproximovali postupný nárast potenciálu U(x) (b).

medzi prstencami ΔU . Pri určitej hodnote napätia medzi prstencami nastane výboj. Ak chceme ísť s napätím nad túto hodnotu, musíme zväčšiť medzeru $\Delta(x)$ Tým však deformujeme pôvodne "pravouhlý" potenciál a WKB aproximácia nedá dobrý výsledok.

4.4 Presnejšie odvodenie WKB priblíženia

WKB metóda ja na rozdiel od metódy prenosových matíc analytická metóda, ktorá sa používa na riešenie diferenciálnych rovníc. Ide v podstate o hlľadanie oscilucúceho riešenia, ktorého vlnová dĺžka sa malo mení na vzdialenosti jednej vlnovej dĺžky. Matematicky možno tento fakt vyjadriť nasledovne:

$$\delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\delta x \to \delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\lambda \tag{4.50}$$

WKB metódu je možné použiť v prípade ak:

$$\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| \equiv \left|\frac{\delta\lambda}{\delta x}\right| \lll 1 \tag{4.51}$$

Schématicky je tento predpoklad zobrazený na obrázku 4.16. Z predchádza-



Obr. 4.16: Schématické naznačenie zmeny vlnovej dĺžky vlny (horný obrázok) na pomaly sa meniacom potenciáli (dolný obrázok).

júceho výkladu o princípoch kvantovej mechaniky je známe, že zmena vlnovej dĺžky vlnovej funkcie zúvisí od tvaru potenciálu s ktorým interaguje. Na základe takéhoto poznania skúsme teraz odhadnúť podmienku pre zmenu potenciálu, pre ktorý je možné WKB priblíženie použiť. Pre hybnosť p platí:

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{4.52}$$

Po povýšení oboch strán rovnice (4.52) na druhú:

$$p^{2} = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^{2} \equiv 2m(E - U) \tag{4.53}$$

Použijúc rovnicu (4.50) možno napísať ak zmeníme λ za druhú mocninu λ :

$$\frac{d(\lambda^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} \frac{d(p^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} (-2m\frac{dV(x)}{dx})$$
(4.54)

Alebo po úprave:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{mh}{p^3} \frac{dV(x)}{dx} \tag{4.55}$$

Takže podmienka (4.50) pre použitie WKB priblíženia v závislosti od tvaru potenciálu má tvar:

$$\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| = \left|\frac{mh}{p^3}\frac{dV(x)}{dx}\right| \ll 1 \tag{4.56}$$

Z podmienky (4.56) vidno, že WKB priblíženie s naprostou istotou nefunguje v blízkosti skokového potenciálu, kde $\left|\frac{dV(x)}{dx}\right| = \infty$. Ukážme riešenie pomocou WKB priblíženia na prípade Schrödingerovej rov-

Ukážme riešenie pomocou WKB priblíženia na prípade Schrödingerovej rovnice:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\psi(x) = E\Psi(x)$$
(4.57)

ktorú budeme uvažovať v tvare (po malej úprave):

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\Psi(x)$$
(4.58)

Keďže uvažujeme len málo sa meniaci potenciál, možno riešenie hľadať v tvare voľnej častice, ktoré neskôr rozvinieme do radu.

$$\Psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar}\Phi(x)} \tag{4.59}$$

kde $\Phi(x) = px$. Po dosadení (4.59) do rovnice (4.58) dostaneme:

$$-i\hbar \frac{d^2 \Phi(x)}{dx^2} + (\frac{d\Phi}{dx})^2 = p^2(x)$$
(4.60)

kde:

$$p^{2} = 2m(E - V(x))$$
(4.61)

Rozvinieme tera
z $\varPhi(x)$ do radu, za predpokladu, že $\hbar\to 0$:

$$\Phi(x) = \Phi_0(x) + \hbar \Phi_1(x) + \frac{\hbar^2}{2} \Phi_2(x) + \cdots$$
 (4.62)

Po dosadení do rovnice (4.60) a malej úprave dostaneme:

$$0 = \{ (\frac{d\Phi_0(x)}{dx})^2 - p(x)^2 \}$$

+ $2\hbar \{ \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_1(x)}{dx} - \frac{i}{2} \frac{d^2 \Phi_0(x)}{dx^2} \}$
+ $\hbar^2 \{ \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_2(x)}{dx} + (\frac{\Phi_1(x)}{dx})^2 - i \frac{d^2 \Phi_1(x)}{dx^2}) + O(\hbar^3 \}$ (4.63)

Táto rovnica musí byť splnená pre ľubovolnú hodnotu \hbar . Toho vyplývajú naslodujúce rovnice:

$$(\frac{d\Phi_0(x)}{dx})^2 = p^2(x) \tag{4.64}$$

$$\frac{d\Phi_0(x)}{dx}\frac{d\Phi_1(x)}{dx} = \frac{i}{2}\frac{d^2\Phi_0(x)}{dx^2}$$
(4.65)

$$\frac{\Phi_0(x)}{dx}\frac{d\Phi_2(x)}{dx} + \left(\frac{d\Phi_1(x)}{dx}\right)^2 = i\frac{d^2\Phi_1(x)}{dx^2}$$
(4.66)

Integrovaním rovnice (4.64) dostaneme vzťah pre $\Phi_0(x)$:

$$\Phi_0(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x')dx'$$
(4.67)

Alebo vo vyjadrení pre vlnový vektor $k(x) = p(x)/\hbar$:

$$\frac{\Phi_0(x)}{\hbar} = \pm \int_{x_0}^x k(x') dx'$$
(4.68)

Po dosadení rovnice (4.68) do rovnice (4.65) dostaneme vzťah pre $\Phi_1(x)$:

$$\Phi_1(x) = \frac{i}{2} \ln(\frac{d\Phi_0(x)}{dx})$$
(4.69)

alebo vo vyjadrení pre pre vlnový vektor $k(x) = p(x)/\hbar$:

$$\Phi_1(x) = \frac{i}{2}\ln(\hbar k) \tag{4.70}$$

V exponenciálnom vyjadrení poslednú rovnicu napíšeme takto:

$$e^{i\Phi_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} \tag{4.71}$$

Vyjadrenie pre $\Phi_2(x)$ dostaneme integrovaním rovnice (4.66) tak, že postupne použijeme rovnice (4.68) pre $\Phi_0(x)$ a (4.71) pre $\Phi_1(x)$:

$$\Phi_2(x) = \frac{1}{2} \frac{m}{p(x)^3} \frac{dV(x)}{dx} - \frac{1}{4} \int \{\frac{m^2}{p(x)^5} (\frac{dV}{dx})^2\} dx$$
(4.72)

Vidíme, že druhý člen rozvoja (4.62) je vyjadrený, ako logaritmus derivácie prvého člena rozvoja a preto ho vo všeobecnosti nemožno zanedbať. Tretí člen rozvoja $\Phi_2(x)$ obsahuje deriváciu potenciálu V(x) a možno ho zanedbať, ak je splnená podmienka kvaziklasického priblíženia (4.56). Ak teda vložíme

vyjadrenia pre $\Phi_0(x)$ a $\Phi_1(x)$ do substitúcie (4.59) dostaneme pre riešenie Schödingerovej rovnice $\Psi(x)$ vo WKB priblížení vzťah:

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} e^{(i \int k(x')dx')} + \frac{B}{\sqrt{k}} e^{(-i \int k(x')dx')}$$
(4.73)

Keďže druhý člen v poslednej rovnici pre integrovanie vo veľkej vzdialenosti od bodov obratu možno zanedbať dostaneme výsledný vzťah:

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} e^{(i \int k(x')dx')}$$
(4.74)

Pre výpočet koeficientu transmisie vnočastice cez barieru z definície:

$$T = \left|\frac{\Psi_{III}}{\Psi_I}\right|^2 \tag{4.75}$$

kde Ψ_I je vlna ďaleko pred bariérou a Ψ_{III} je vlna ďaleko za bariérou. Ak ešte dosadíme správny výraz pre výpočet vlnového vektora k:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}$$
(4.76)

dostaneme pre koeficient transmisie vo WKB priblížení:

$$T = e^{-2\int_{a}^{b} \{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^{2}}(V(x) - E)}\}dx}$$
(4.77)

kde a a b sú body obratu.

4.5 Porovnanie presného a približného (WKB) riešenia

Predpokladajme existenciu jednorozmerného zariadenia v ktorom v smere osi x napätia rovnomerne narastá od bodu a do bodu s. Od bodu s napätia rovnomerne klesá, až v bode b dosiahne nulovú hodnotu. Priebeh napätia U(x) je schématicky naznačený na obrázku 4.17.

V prípade symetrického trojuholníkového priebehu si ďalší opis zjednodušíme, ak posunieme x-sovú os tak, aby bola nula v strede bariery. Potom lahko matematicky popíšeme priebeh potenciálu (napätia) takto:

$$U(x) = 0 \qquad x < -a \tag{4.78}$$

$$U(x) = U_0(1 + \frac{x}{a}) \qquad -a \le x < 0 \tag{4.79}$$

$$U(x) = U_0(1 - \frac{x}{a}) \qquad 0 \le x < a \tag{4.80}$$

$$U(x) = 0 \qquad x \ge a \tag{4.81}$$



Obr. 4.17: Schématické znázornenie priebehu brzdného napätia v jednorozmernom zariadení, v ktorom tunelujú elektrňy. Zariadenie je rozdelené na štyri oblasti; I. oblasť pred bariérou; II. oblasť nárastu napätia; III. oblasť poklesu napätia; IV. oblasť za bariérou. Body -L a L označujú body obratu. Ich poloha závisí od energie interagyjúcej častice.

Pre d'alšie zjednodušenie zaved'me nové premenné:

$$k_0^2 = \frac{2mE}{hbar^2} \qquad q_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \tag{4.82}$$

kde E je energia častice. Teraz môžeme v jednotlivých oblastiach napísať Schödingerovu rovnicu v príslušnom tvare:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k_0^2\Psi(x) = 0 \qquad x < -a \tag{4.83}$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - (q_0^2 - k_0^2 + q_0^2 \frac{x}{a})\Psi(x) = 0 \qquad -a \le x < 0 \qquad (4.84)$$

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} - (q_0^2 - k_0^2 - q_0^2 \frac{x}{a})\Psi(x) = 0 \qquad 0 \le x < a \tag{4.85}$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k_0^2\Psi(x) = 0 \qquad x \ge a$$
(4.86)

Z dôvodu ďalšieho zjednodušenia zaveď me v rovniciach (4.84) a (4.85) sub-





Obr. 4.18: Priebeh Airy-ho funkcií Ai(x) a Bi(x).

stitúcie:

$$\zeta = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{2}{3}} \left(q_0^2 - k_0^2 + q_0^2 \frac{x}{a}\right) \tag{4.87}$$

$$\eta = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{2}{3}} \left(q_0^2 - k_0^2 - q_0^2 \frac{x}{a}\right) \tag{4.88}$$

Použjúc tieto substitúcie môžeme rovnice (4.84) a (4.85) napísať v tvare:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \zeta\Psi(x) = 0 \tag{4.89}$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \eta\Psi(x) = 0$$
 (4.90)

Ide o dve rovnice, ktoré sú formálne podobné harmonickým rovniciam. Podstatný rozdiel je v znamienku - v harmonickej rovnici je plus a tu je mínus. Riešením rovníc (4.89) a (4.90) sú Airyho funkcie Ai(x) a Bi(x). Ich priebeh je znázornený na obrázku 4.18. Riečnie budeme, tak ako v prípade potenciálového skoku hľadať v rozličnom tvare podľa toho v ktorej oblasti sa nachádzame.

$$\Psi(x) = e^{ik_0x} + \alpha e^{-ik_0x} \qquad x < -a \tag{4.91}$$

$$\Psi(x) = \beta Ai(\zeta) + \gamma Bi(\zeta) \qquad -a \le x < 0 \qquad (4.92)$$

$$\Psi(x) = \delta Ai(\eta) + \epsilon Bi(\eta) \qquad 0 \le x < a \qquad (4.93)$$

$$\Psi(x) = \qquad \vartheta e^{ik_0 x} \qquad \qquad x \ge a \qquad (4.94)$$

kde $\alpha, \beta, \gamma, \epsilon, \vartheta$ sú konštanty, ktoré treba určiť. Pri ich určovaní budeme postupovať štandardne. Položíme do rovnosti riešenia a ich derivácie v hraniciach oblastí - v bodoch pre ktoré platí x = -a, x = 0 a x = a. Po dlhšom výpočte dostaneme šesť rovnć pre šesť premenných:

$$e^{-ik_0a} + \alpha e^{ik_0a} = \beta Ai(-\varrho) + \gamma Bi(-\varrho)$$
(4.95)

$$i\sqrt{\varrho}(e^{-k_0a} - \alpha e^{ik_0a}) = \beta Ai'(-\varrho) + \gamma Bi'(-\varrho)$$
(4.96)

$$\beta Ai(\mu) + \gamma Bi(\mu) = \delta Ai(\mu) + \epsilon Bi(\mu)$$
(4.97)

$$\beta Ai'(\mu) + \gamma Bi'(\mu) = -\delta Ai'(\mu) - \epsilon Bi'(\mu)$$
(4.98)

$$\delta Ai(-\varrho) + \epsilon Bi(-\varrho) = \vartheta e^{ik_0 a} \tag{4.99}$$

$$\delta Ai'(-\varrho) + \epsilon Bi'(-\varrho) = -i\sqrt{\varrho}\vartheta e^{ik_0a} \qquad (4.100)$$

kde: $Ai'(x) = \frac{dAi(x)}{dx}$ a $Bi'(x) = \frac{dBi(x)}{dx}$. Pre zjednodušenie zápisu rovníc (4.95) až (4.100) sme zaviedli nasledujúce premenné:

$$\varrho \equiv k_0^2 a^{\frac{2}{3}} q_0^{-\frac{4}{3}} = (q_0 a)^{\frac{2}{3}} (\frac{k_0}{q_0})^2$$
(4.101)

$$\mu \equiv a^{\frac{2}{3}} q_0^{-\frac{4}{3}} (q_0^2 - k_0^2) = (q_0 a)^{\frac{2}{3}} (1 - \frac{k_0^2}{q_0^2})$$
(4.102)

Rovnice (4.95) až (4.100) tvoria sítavu rovnć, kde počet rovnć sa rovná počtu premenných a teda sú vo všeobecnosti riešitelné. Ak ešte použijeme identitu platnú pre Airyho funkcie:

$$Ai'(x)Bi(x) - Ai(x)Bi'(x) = 1$$
(4.103)

(čo je neič, ako $sin^2(x) + cos^2(x) = 1$ pre harmonické funkcie), môžeme napísať záverečný vzťah pre pravdepodobnosť tunelovania:

$$T \equiv |\vartheta|^2 = \frac{\varrho}{\{[Bi(\mu)Ai'(-\varrho) - Ai(\mu)Bi(-\varrho)]^2 + \varrho[Bi(\mu)Ai(-\varrho) - Ai(\mu)Bi(-\varrho)]^2\}} \times \frac{1}{\{[Bi'(\mu)Ai'(-\varrho) - Ai'(\mu)Bi(-\varrho)]^2 + \varrho[Bi'(\mu)Ai(-\varrho) - Ai'(\mu)Bi(-\varrho)]^2\}} (4.104)$$

Tento vzťah je pomerne komplikovaný, ale s pomocou počítača pomerne jednoducho rieštelný.



Obr. 4.19: Pravdepodobnosť tunelovania cez tenkú (1 nm) trojuholníkovú barieru. Plná čiara znázorňuje presný výpočet podľa vzťahu (4.104), čiarkovaná čiara predstavuje WKB priblíženie.

Teraz sa pozrime ako možno riešenie vyjadrené vzťahom (4.104) zjednodušiť, ak uvažjeme s pomaly sa meniacim potenciálom, alebo (čo je ekvivalentné) s málo sa meniacou vlnovou dźkou - kritérium (4.51). Vlnovú dĺžku v závislosti od energie vlnočastice E a potenciálu U(x) s ktorým interaguje možno napísať takto:

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - U(x)]}} \tag{4.105}$$

Za predpokladu málo sa meniacej vlnovej dĺžy na vzdialenosti jednej vlnovej dĺžky. To platí v oblastiach x < -a a x > a kde moźno použť kváziklasické priblíženie. V tejto oblasti možno prijať tieto predpoklady:

$$\lambda(x) = \frac{1}{k_0} \quad \to \quad \frac{d\lambda(x)}{dx} = 0 \tag{4.106}$$

v oblasti $-a \le x \le a$ pre zmenu vlnovej dĺžky platí:

$$\lambda(x) = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{i\sqrt{\zeta}} \quad \to \quad \frac{d\lambda}{dx} \equiv \frac{d\lambda}{d\zeta} \frac{d\zeta}{dx} = -\frac{1}{2i\zeta^{\frac{3}{2}}} \tag{4.107}$$

$$\lambda(x) = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{i\sqrt{\mu}} \quad \rightarrow \quad \frac{d\lambda}{dx} \equiv \frac{d\lambda}{d\mu} \frac{d\mu}{dx} = -\frac{1}{2i\mu^{\frac{3}{2}}} \tag{4.108}$$

Z podmienky kváziklasickosti $|\frac{d\lambda}{dx}| \lll 1$ dostaneme:

$$\begin{aligned} |\zeta| \gg 1 \\ |\eta| \gg 1 \end{aligned} \tag{4.109}$$

Použijúc podmienky (4.109) môžeme pre Airyho funkcie vystupujúce vo vzžahu (4.104) použiť asymptotické rozvoje ($t \gg 1, x \equiv \frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}}$):

$$\begin{aligned} Ai(t) &\approx t^{-\frac{1}{4}} e^{x} & Ai'(t) \approx t^{\frac{1}{4}} e^{x} \\ Bi(t) &\approx \frac{1}{2} t^{-\frac{1}{4}} e^{-x} & Bi'(t) \approx -\frac{1}{2} t^{-\frac{1}{4}} e^{-x} \\ Ai(-t) &\approx t^{-\frac{1}{4}} cos(x + \frac{\pi}{4}) & Ai'(-t) \approx t^{\frac{1}{4}} sin(x + \frac{\pi}{4}) \\ Bi(-t) &\approx t^{-\frac{1}{4}} sin(x + \frac{\pi}{4}) & Bi'(-t) \approx -t^{\frac{1}{4}} cos(x + \frac{\pi}{4}) \end{aligned}$$
(4.111)

Po dosadení asymptotických rozvojov do (4.104) dostaneme:

$$T \approx e^{-\frac{8}{3}\mu^{\frac{3}{2}}} = e^{-\frac{8}{3}\frac{a\sqrt{2m}}{\hbar U_0}(U_0 - E)^{\frac{3}{2}}}$$
(4.112)

Vzťah (4.112) možno upraviť na známy tvar:

$$T \approx e^{-2\int_{-L}^{L} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |U(x) - E|} dx}$$
(4.113)

Na obrázku 4.19 je priebeh pravdepodobnosti T ako funkcia energie vlnočastice počítanej podľ vzťahu (4.113) vynesený prerušovanou čiarou. Pre úzky potenciál vidíme podstatný rozdiel medzi presným riešením a WKB priblížením.

Kapitola 5

Rozličné reprezentácie v kvantovej mechanike

V tejto časti veľmi stručne zhrniem niektoré črty kvantovo-mechanického formalizmu a pripomeniem hlavné vlastnosti kvantového systému. V našom prípade budeme predpokladať diskrétne spektrum, ktorému je priradený samozdružený operátor $\hat{\mathbf{A}}$. Vlastné hodnoty tohto operátora určujú možné výsledky merania A. Predpokladajme, že na začiatku merania máme kvantový systém po prechode filtrom, ktorý upravil sústavu do stavu popísanom normalizovaným vektorom $|a_n\rangle$. Stav sústavy je plne popísaný vlnovou funkciou

$$|\psi\rangle = \sum_{n} \langle a_n |\psi\rangle |a_n\rangle \tag{5.1}$$

Pripomínam ,že vektory $|a_n\rangle$ tvoria ortonormálnu bázu Hilbertovho priestoru, ktorý charakterizuje daný systém. Ďalej, amplitúda pravdepodobnosti najdenia stavu φ popísaného normalizovaným vektorom $|\varphi\rangle$ v stave ψ je vyjadrená vektorovým súčinom

$$\langle \varphi | \psi \rangle$$
 (5.2)

Podstatou kvantového formalizmu je priradenie operátora pozorovatelnej veličine $A \rightarrow \hat{\mathbf{A}}$ a normalizovanému vektoru priradit stav $\psi \rightarrow |\psi\rangle$. Samozrejme, existuje nekonečne mnoho možností, ako poskladať vlny a operátory, tak aby sme dosiahli rovnaké predpovede vývoja a stavu systému. Stačí ak si uvedomíme, že každý podobnostný operátor $\hat{\mathbf{U}}$, ak k nemu existuje inverzný operátor, aplikovaný na sústavu A, vytvorí sústavu A' vedie na rovnaké vlastné hodnoty.

$$\hat{\mathbf{A}}' = \hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}^{-1} \tag{5.3}$$

Dá sa ukázať, že predpovede kvantovej teórie sa nezmenia ani po takejto transformácii a platí:

$$A \to \hat{\mathbf{A}}' \equiv \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{U}}^{-1} \tag{5.4}$$

a tiež

$$\psi \to |\psi'\rangle \equiv \hat{\mathbf{U}}|\psi\rangle$$
 (5.5)

a na záver z unitarity operátora $\hat{\mathbf{U}}$ vyplýva:

$$\langle \varphi' | \psi' \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \tag{5.6}$$

takže dostávame rovnaké spektrum vlastných hodnôt a výsledkov meraní, ale aj rovnaké predpovede vývoja sústavy. Tieto úvahy sú dôležité na správne pochopenie nasledujúceho výkladu.

5.1 Schrödingerova reprezentácia

Priraď me ku konkrétnemu fyzikálnemu systému evolučný operátor $\hat{\mathbf{U}}$, ktorý je riešením evolučnej rovnice:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}(t)\hat{\mathbf{U}}(t, t_0)$$
(5.7)

s príslušnou okrajovou podmienkou

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0, t_0) = 0$$
 (5.8)

Vývoj systému, ak v časovom intervale $\langle t_0, t \rangle$, ak nenastala zmena v samotnej sústave, vyjadríme zmenou stavového vektoru:

$$|\psi\rangle = \hat{\mathbf{U}}(t_0, t) |\psi(t_0\rangle \tag{5.9}$$

Príslušná dynamika systému je daná zmenou stavových vektorov. Operátory, ktoré zodpovedajú pozorovanej veličine sú síce tiež funkciami času, ale ich časový vývoj je dopredu daný a nezávisí na dynamike systému.

5.2 Heisenbergova reprezentácia

V Heisenbergovej reprezentácii je časový vývoj sústavy popísaný zmenou operátora, ktorý vyhovuje diferenciálnej rovnici:

$$\frac{d\hat{\mathbf{A}}^{H}(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{\mathbf{U}}(t,t_{1})^{+}(t,t_{1})}{\partial t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}(t,t_{1}) + \hat{\mathbf{U}}^{+}(t,t_{1})\hat{\mathbf{A}}\frac{\partial\hat{\mathbf{U}}(t,t_{1})}{\partial t}$$
(5.10)

alebo v skrátenej forme, ktorú budem použivať:

$$\frac{d\hat{\mathbf{A}}^{H}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}^{H}(t), \hat{\mathbf{H}}^{H}(t)]$$
(5.11)

s počiatočnou podmienkou

$$\hat{\mathbf{A}}^{H}(t_{1}) = \hat{\mathbf{A}} \tag{5.12}$$

5.3 Diracova - interakčná reprezentácia

V prípade, ak máme dočinenia so sústavou, ktorá sa skladá s niekoľkých podsústav, ktoré spolu interagujú, je výhodné použiť interakčnú reprezentáciu. V tejto reprezentácii vyjadríme hamiltonov operátor, ako súčet dvoch členov:

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}} + \hat{\mathbf{V}} \tag{5.13}$$

kde $\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}$ je hamiltonov operátor v ktorom nie je započítaná interakcia a $\hat{\mathbf{V}}$ je operátor vzájomného pôsobenia. To je obvykle prípad interakcie medzi kvantovými sústavami. Prechod od Schrödingerovej reprezentácie k interakčnej reprezentácii vztiahnutej na vlnovú funkciu $\psi_{Sch} \rightarrow \psi_{Int}$ zabezpečí unitárny operátor závisiaci na čase, ktorý vyjadríme v tvare:

$$\hat{\mathbf{S}}(t) = exp\{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}t\}$$
(5.14)

potom pre transformáciu vlnovej funkcie platí:

$$\psi_{Sch}(\mathbf{r},t) = \mathbf{\hat{S}}(t)\psi_{Int}(\mathbf{r},t)$$
(5.15)

po dosadení tejto funkcie do Schrödingerovej rovnice dostaneme rovnicu v interakčnej reprezentácii:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{Int}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{V}}_{Int}(t)\psi_{Int}(\mathbf{r},t)$$
(5.16)

kde

$$\hat{\mathbf{V}}_{Int}(t) = \hat{\mathbf{S}}(t)\hat{\mathbf{V}}_{Int}\hat{\mathbf{S}}^{+}(t) \equiv exp\{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}t\}\hat{\mathbf{V}}exp\{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}t\}$$
(5.17)

Tu je treba poznamenať, že v interakčnej reprezentácii sa všetky operátory menia s časom a teda pre ľubovolný operátor $\hat{\mathbf{A}}$ v interakčnej reprezentácii platí:

$$\hat{\mathbf{A}}_{Int} = exp\{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}t\}\hat{\mathbf{A}}exp\{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{0}}t\}$$
(5.18)

Ostatnú rovnicu vyjadrujeme obvykle v skrátenej forme takto:

$$\frac{d\hat{\mathbf{A}}_{Int}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}_{Int}, \hat{\mathbf{H}}_0]$$
(5.19)

Interakčná reprezentácia tvorí istý medzistupeň medzi Schrödingerovou a Heinsenbergovou reprezentáciou, keď časová zmena stavového vektora je ovplyvňovaná len operátorom vzájomného pôsobenia.

5.4 Diferenciálna rovnica operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti $\hat{\varrho}$

Diferenciálna rovnica popisujúca časový vývoj operátora rozdelenia hustoty pravdepodovnosti $\hat{\varrho}$ v interakčnej reprezentácii má tvar:

$$i\hbar\frac{d\hat{\varrho}}{dt} = [\hat{\mathbf{V}}, \hat{\varrho}] \tag{5.20}$$

kde: $\hat{\mathbf{V}}$ je porucha Hamiltonovho operátora závislá na čase, vyjadrena v interakčnej reprezentácii. časový vývoj operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti je dôležitý z pohľadu vyjadrenia strednej hodnoty pozorovateľného operátora $\langle \hat{\mathbf{O}} \rangle$. Ide o veličinu, ktorú dokážeme pozorovať v makroskopickom meraní. Matematicky možno túto veličinu určiť z nasledujúceho vzťahu:

$$\langle \hat{\mathbf{O}} \rangle = \operatorname{Tr}(\hat{\varrho}\hat{\mathbf{O}})$$
 (5.21)

V ďalšom výklade sa sústredíme na metódy, ktoré nám umožnia vypočítať tieto hodnoty.

5.5 Rozbor kvantovej sústavy, ktorá obsahuje rozličné podsústavy

V tejto chvíli sme pripravení urobit kvalitatívne úvahy a kvantitatívne výpočty vývoja sústavy, ktorá obsahuje sústavu fermiónov, bozónov a pôsobí na sústavu vonkajšie elektrické pole. Sústava samotná navyše stvorí disipatívny systém, s ktorým musíme pri výpočtoch počítať. Zamyslime sa najskôr, ako možno rozvinúť do radu časový vývoj operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti $\hat{\varrho}$, ktorý je výsledkom riešenia diferenciálnej rovnice (5.20). V ďalšom budeme predpokladať, že porucha vyjadrená operátorom $\hat{\mathbf{V}}$ je málá a
možno ju vyjadriť, ako poruchu prvého rádu. Prislúchajúci operátor $\hat{\varrho}$ možno vyjadriť v tvare:

$$\hat{\varrho} = \sum_{k} \hat{\varrho}^{(k)} \tag{5.22}$$

kde $\hat{\varrho}^{(k)}$ je malá veličina k-teho rádu v porovnaní k hodnote $\hat{\mathbf{V}}$. Po dosadení do rovnice (5.20) dostaneme:

$$i\hbar \sum_{k} \frac{d\hat{\varrho}^{(k)}}{dt} = \sum_{k} [\hat{\mathbf{V}}, \hat{\varrho}^{(k)}]$$
(5.23)

Porovnaním pravej a ľavej strany predchádzajúcej rovnice podľa rádu veľkosti poruchy dostaneme:

$$i\hbar \frac{d\hat{\varrho}^{(k)}}{dt} = [\hat{\mathbf{V}}, \hat{\varrho}^{(k-1)}]$$
(5.24)

ako nulté priblíženie pre operátor rozdelenia hustory pravdepodobnosti obvykle berieme operátor $\hat{\rho}$ v čase t. Rovnicu (5.24) riešime formou postupných aproximácii:

$$\hat{\varrho}(t+\tau) = \hat{\varrho}^{(0)}(t) + \hat{\varrho}^{(1)}(t+\tau) + \dots$$
 (5.25)

túto rovnicu ďalej rozpíšeme takto:

$$\hat{\varrho}(t+\tau) = \hat{\varrho}^{(0)}(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{0}^{\tau} [\hat{\mathbf{V}}(t+\tau'), \hat{\varrho}(t)] d\tau' - \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} [\hat{\mathbf{V}}(t+\tau'), [\hat{\mathbf{V}}(t+\tau''), \hat{\varrho}(t)]] d\tau'' \cdots \quad (5.26)$$

Treba pripomenúť, že týmto vzťahom je určená časová závislosť operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti s presnosťou počtu členov rozvoja. Ak na pravej strane uvážime len dva členy, tak máme rozvoj s presnosťou do druhého rádu. Rovnicu (5.26) použijeme ako zjednodušené riešenie vo všeobecnosti nelineárnej rovnice (5.20) prevedením buď na linearizovaný tvar, alebo na sústavu diferenciálnych rovníc s konštantnými koeficientami.

Definujme, že sústavu skladajúcu sa z niekoľkých podsústav možno charakterizovať v určitom kvantovom stave pomocou ketvektora $|\mathbf{n}\rangle$. Zamerajme sa teraz na konkrétnu sústavu, ktorá sa skladá z aktívnych častíc (zatiaľ bozónov), ktoré interagujú s disipatívnou sústavou. Na opis použijeme rozvoj (5.26) a pojdeme do druhého priblíženia. Je to trošku pracné, ale výsledok bude stáť za to:

$$\hat{\varrho}(t+\tau) = \hat{\varrho}^{(0)}(t) - \frac{i}{\hbar} \int_{0}^{\tau} [\hat{\mathbf{V}}(t+\tau'), \hat{\varrho}(t)] d\tau' - \\
- \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} \hat{\mathbf{V}}(t+\tau') \hat{\mathbf{V}}(t+\tau'') \hat{\varrho}(t) d\tau'' + \\
+ \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} \hat{\mathbf{V}}(t+\tau') \hat{\varrho}(t) \hat{\mathbf{V}}(t+\tau'') d\tau'' + \\
+ \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} \hat{\mathbf{V}}(t+\tau'') \hat{\varrho}(t) \hat{\mathbf{V}}(t+\tau') d\tau'' + \\
+ \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} \hat{\varrho}(t) \hat{\mathbf{V}}(t+\tau'') \hat{\mathbf{V}}(t+\tau') d\tau'' + (5.27)$$

Pripomíname, že operátor $\hat{\mathbf{V}}(t)$ je v tejto reprezentácii závislý na čase a preto ho možno rozložiť do Fourierovho radu:

$$\hat{\mathbf{V}}(t) = \sum_{r} \mathbf{V}^{r} exp[i(\omega_{r})\mathbf{F}^{(r)}(t)]$$
(5.28)

kde $\mathbf{F}^{(r)}(t)$ je časť väzobného operátoru, ktorý prislúcha disipatívnej podsústave. Po dosadení (5.28) do rozvoja (5.27) a rozdelení na aktívnu a disipatívnu podsústavu,

$$\varrho(t) = \sigma(t)\varrho_B \tag{5.29}$$

kde ρ_B je časť operátora rozdelenia hustoty vztiahnutého na disipatívnu podsústavu, dostaneme (znovu dosť komplikovaný) nasledujúci rozvoj:

$$\sigma(t+\tau) = \sigma(t) + \operatorname{Tr}_{B} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{r} \int_{0}^{\tau} exp[i\omega_{r}(t+\tau')] [\mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'), \varrho(t)] d\tau' - \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{r} \sum_{s} \int_{0}^{\tau} d\tau' \int_{0}^{\tau'} d\tau'' exp[i\omega_{r}(t+\tau')] \times \left\{ + \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau') \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') \varrho(t) - \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau') \varrho(t) \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') - \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') \varrho(t) \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau') + \varrho(t) \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau') \right\} \right\}$$

$$(5.30)$$

Tento nesmierne dlhý výraz vznikol postupným aplikovaním pravidiel pre $[\cdot, \cdot]$ notáciu a obsahuje päť členov, ktoré označíme I_1 až I_5 . V ďalšom bu-

deme postupne upravovať a analyzovať tieto členy:

$$I_{1} = Tr_{B} \sum_{r} \left\{ \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') \varrho(t) - \varrho(t) \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'') \right\} exp[i\omega_{r}(t+\tau')]$$
$$= \sum_{r} \left\{ exp[i\omega_{r}(t+\tau')] \mathbf{V}^{(r)} \sigma(t) \operatorname{Tr}_{B}[\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau') \varrho_{B}] - exp[i\omega_{r}(t+\tau')] \sigma(t) \mathbf{V}^{(r)} \operatorname{Tr}_{B}[\varrho_{B} \mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')] \right\}$$
(5.31)

V tomto vzťahu môžeme urobiť ešte jednu úpravu:

$$\operatorname{Tr}_{B}[\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\varrho_{B}] = \operatorname{Tr}_{B}\left[exp(i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar})\mathbf{F}^{(r)}(0)exp(i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar})\varrho_{B}\right] = \\ = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}\left\{\langle\alpha|exp(i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar})|\beta\rangle\langle\beta|\mathbf{F}^{(r)}|\gamma\rangle\langle\gamma|exp(i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar})|\delta\rangle\langle\delta|\varrho_{B}|\alpha\rangle\right. \\ = \sum_{\alpha}exp(i(t+\tau')\frac{F_{\alpha}}{\hbar})F_{\alpha\alpha}^{(r)}exp(-i(t+\tau')\frac{F_{\alpha}}{\hbar})\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)} \\ = \sum_{\alpha}F_{\alpha\alpha}^{(r)}\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)}$$
(5.32)

Tu sme predpokladali, že disipatívna podsústava je termostatická a teda platí:

$$\varrho_{B;\alpha\alpha} = \frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_BT)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_BT)}$$
(5.33)

kde F_{α} je vlastné číslo operátora $\hat{\mathbf{F}}$ v stave α . Toto číslo zodpovedá energii v danom stave. Teda prvý člen rozvoja (5.30) I_1 možno napísať v pomerne kompaktnom tvare:

$$I_1 = \sum_{\alpha} \sum_{r} exp[i\omega_r(t+\tau')]F_{r;\alpha\alpha} \frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_BT)}{\sum_{\beta} g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_BT)} [\mathbf{V}^{(r)}, \sigma(t)] \quad (5.34)$$

Pozrime sa teraz na druhý člen rozvoja (5.30) I_2 :

$$I_{2} = \operatorname{Tr}_{B}\left(\sum_{r}\sum_{s}exp[i\omega_{r}(t+\tau')]exp[i\omega_{s}(t+\tau'')]\mathbf{V}^{(r)}\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\mathbf{V}^{(s)}\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau'')\varrho(t)\right) = \sum_{r}\sum_{s}exp[i\omega_{r}(t+\tau')]\mathbf{V}^{(r)}\mathbf{V}^{(s)}exp[i\omega_{s}(t+\tau'')]\sigma(t)\operatorname{Tr}_{B}\left[\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau'')\varrho_{B}\right]$$

$$(5.35)$$

Zamerajme sa teraz na poslednú casť $\operatorname{Tr}_B[\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau'')\varrho_B]$ druhého člena I_2 rozvoja (5.30):

$$\operatorname{Tr}_{B}\left[\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau'')\varrho_{B}\right] =$$

$$= \operatorname{Tr}_{B}\left[exp\left(i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar}\right)\mathbf{F}^{(r)}(0)exp\left(-i(t+\tau')\frac{\mathbf{F}}{\hbar}\right)\times exp\left(i(t+\tau'')\frac{\mathbf{F}}{\hbar}\right)\mathbf{F}^{(s)}(0)exp\left(-i(t+\tau'')\frac{\mathbf{F}}{\hbar}\right)\right]$$

$$= \sum_{\alpha}\sum_{\alpha'}exp(i\Omega_{\alpha\alpha'}(t'-t'')F_{r;\alpha\alpha'}F_{s;\alpha'\alpha}\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)} (5.36)$$

V ostatnom vzťahu (5.36) sme pre prehľadnosť použili označenie :

$$\Omega_{\alpha\alpha'} = \frac{(F_{\alpha} - F_{\alpha'})}{\hbar} \tag{5.37}$$

Na záver, po dosadení výrazu (5.36) do vzťahu (5.35) dostaneme vyjadrenie pre druhý člen $I_2:$

$$I_{2} = \sum_{r,s} \sum_{\alpha,\alpha'} exp \Big[i(\omega_{r} + \omega_{s})t \Big] exp \Big[i(\omega_{r} + \Omega_{\alpha\alpha'})\tau' \Big] exp \Big[i(\omega_{r} + \Omega_{\alpha'\alpha})\tau'' \Big] \times F_{r;\alpha\alpha'} F_{s;\alpha'\alpha} \frac{g_{\alpha} exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta} g_{\beta} exp(-F_{\beta}/k_{B}T)} \mathbf{V}^{(r)} \mathbf{V}^{(s)} \sigma(t)$$
(5.38)

Podobne možno ukázať, že pre ďalšie členy ${\cal I}_3$ až ${\cal I}_5$ platí:

$$I_{3} = \operatorname{Tr}_{B}\left(\sum_{r}\sum_{s}exp[i\omega_{r}(t+\tau')]exp[i\omega_{s}(t+\tau'')]\mathbf{V}^{(r)}\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau')\varrho(t)\mathbf{V}^{(s)}\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau'')\right) = \sum_{r,s}\sum_{\alpha,\alpha'}exp\Big[i(\omega_{r}+\omega_{s})t\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha\alpha'})\tau'\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha'\alpha})\tau''\Big] \times F_{r;\alpha\alpha'}F_{s;\alpha'\alpha}\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)}\mathbf{V}^{(r)}\sigma(t)\mathbf{V}^{(s)}$$

$$(5.39)$$

$$I_{4} = \operatorname{Tr}_{B}\left(\sum_{r}\sum_{s}exp[i\omega_{r}(t+\tau'')]exp[i\omega_{s}(t+\tau')]\mathbf{V}^{(r)}\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'')\varrho(t)\mathbf{V}^{(s)}\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau')\right) = \sum_{r,s}\sum_{\alpha,\alpha'}exp\Big[i(\omega_{r}+\omega_{s})t\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha'\alpha})\tau''\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha\alpha'})\tau'\Big] \times F_{s;\alpha'\alpha}F_{r;\alpha\alpha'}\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)}\mathbf{V}^{(s)}\sigma(t)\mathbf{V}^{(r)}$$
(5.40)

$$I_{5} = \operatorname{Tr}_{B}\left(\sum_{r}\sum_{s}exp[i\omega_{r}(t+\tau'')]exp[i\omega_{s}(t+\tau')]\varrho(t)\mathbf{V}^{(r)}\mathbf{F}^{(r)}(t+\tau'')\mathbf{V}^{(s)}\mathbf{F}^{(s)}(t+\tau')\right) = \sum_{r,s}\sum_{\alpha,\alpha'}exp\Big[i(\omega_{r}+\omega_{s})t\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha'\alpha})\tau''\Big]exp\Big[i(\omega_{r}+\Omega_{\alpha\alpha'})\tau'\Big] \times F_{s;\alpha'\alpha}F_{r;\alpha\alpha'}\frac{g_{\alpha}exp(-F_{\alpha}/k_{B}T)}{\sum_{\beta}g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)}\sigma(t)\mathbf{V}^{(s)}\mathbf{V}^{(r)}$$
(5.41)

Nuž, celkom dobrá kláda. Treba dať veľmi dobrý pozor na poradie členov, pretože pri kreačných anihilačných operátorov budú niektoré členy obsahovať derivácie. Na záver dosadíme všetky členy I_1 až I_5 do rovnice (5.30) a po integrácii jednotlivých členov pre limitu $\tau \to \infty$ dostaneme upravený rozvoj pre $\sigma(t + \tau)$

$$\begin{aligned} \sigma(t+\tau) &= \sigma(t) + \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{r,\alpha} F_{r;\alpha\alpha} \Xi_{\alpha} [\mathbf{V}_{\omega_r \to 0}(\omega_r, \sigma(t)]] \\ &- \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{r,\alpha} F_{r;\alpha\alpha} \Xi_{\alpha} [\mathbf{V}(\omega_r), \sigma(t)] \zeta_{\omega_r \neq 0}(\omega_r) \\ &- \frac{\tau}{\hbar^2} \sum_r \sum_{\alpha\alpha'} \left\{ F_{r;\alpha\alpha'} F_{-r;\alpha'\alpha} \Xi_{\alpha} [\mathbf{V}(\omega_r) \mathbf{V}(-\omega_r) \sigma(t) - \mathbf{V}(-\omega_r) \sigma(t) \mathbf{V}(\omega_r)] \right\} \\ &+ F_{r;\alpha\alpha'} F_{-r;\alpha'\alpha} \Xi_{\alpha'} [\sigma(t) \mathbf{V}(-\omega_r) \sigma(t) \mathbf{V}(\omega_r) - \mathbf{V}(-\omega_r) \mathbf{V}(\omega_r)] \right\} \\ &\times \left\{ \frac{i\tau}{-\omega_r - \Omega_{\alpha\alpha'}} + 2\pi\tau \delta(-\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'}) \frac{i\sin\{\tau(\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'})}{(-\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'})^2} \\ &- \frac{1}{\omega_s + \Omega_{\alpha'\alpha}} \zeta(\omega_r + \omega_s) + \frac{1}{\omega_s + \Omega_{\alpha'\alpha}} \zeta(\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'}) \right\} \end{aligned}$$

$$(5.42)$$

kde: $\omega_r + \omega_s \neq 0$ a $\Xi_{\alpha} = \frac{g_{\alpha} exp(-F_{\alpha}/k_BT)}{\sum_{\beta} g_{\beta} exp(-F_{\beta}/k_BT)}$ zodpovedá pôsobeniu disipatívnej sústavy. Ďalej budeme zanedbávať členy , ktoré obsahujú singulárnu funkciu ζ . Tu treba poznamenať, že funkcia $\zeta(x)$ je definovaná takýmto vzťahom:

$$\zeta(x) = i \lim_{K \to \infty} \int_0^K exp(i\omega x) d\omega \equiv \lim_{K \to \infty} \frac{1 - e^{iKx}}{x}$$
(5.43)

a pre súčin funkcie $\zeta(x)$ s ľubovolnou funkciou f(x), ktorá spĺňa Jordanovu podmienku na polkružnici s nekonečným polomerom, dostaneme:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\zeta(x)dx = \int_{\textcircled{}} \frac{f(x)}{x}dx \qquad (5.44)$$

kde \boxplus označuje, že integračná cesta krivkového integrálu sa vyhýba pólu pre $x \to 0$. V ďalšom prejdime k limite $\tau \to 0$ a dostaneme pre rozvoj (5.30) pomerne povzbudivý tvar:

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{r} \sum_{\alpha} F_{r;\alpha\alpha} \Xi_{\alpha} [\mathbf{V}(\omega_{r}), \sigma(t)]
- \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{r} \sum_{\alpha\alpha'} \Xi_{\alpha} F_{-r;\alpha\alpha'} F_{r;\alpha'\alpha} [\mathbf{V}(\omega_{r}), \mathbf{V}(-\omega_{r})\sigma(t)] 2\pi \delta(-\omega_{r} + \Omega_{\alpha\alpha'})
- \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{r} \sum_{\alpha\alpha'} \Xi_{\alpha} F_{r;\alpha\alpha'} F_{-r;\alpha'\alpha} [\sigma(t)\mathbf{V}(\omega_{r}), \mathbf{V}(-\omega_{r})] 2\pi \delta(-\omega_{r} + \Omega_{\alpha\alpha'})$$
(5.45)

označme teraz pre lepšiu prehladnosť:

$$K_{r;\alpha\alpha'}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar^2} F_{r;\alpha\alpha'} F_{-r;\alpha'\alpha}$$
$$K_{r;\alpha\alpha'}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar^2} F_{-r;\alpha\alpha'} F_{r;\alpha'\alpha}$$

Disipatívna sústava je sústava s vysokým stupňom voľnosti, čo nám umožňuje prechod od sumácie k integrovaniu:

$$\sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} K_{r;\alpha\alpha'}^{(1)} \Xi_{\alpha} \delta(-\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'}) \rightarrow$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_r^{(1)}(F_{\alpha}, F_{\alpha'}) \Xi_{\alpha} \delta(-\omega_r + \Omega_{\alpha\alpha'}) dF_{\alpha'} dF_{\alpha}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} K_r^{(1)}(F_{\alpha}, F_{\alpha} + \hbar\omega_r) \Xi_{\alpha} dF_{\alpha} = A_1^{(r)}$$
(5.46)

a veľmi podobne odvodíme ďalší koeficient, treba si však dať pozor na zmenu hladín v disipatívnej sústave:

$$\begin{split} &\sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} K_{r;\alpha\alpha'}^{(2)} \Xi_{\alpha} \delta(-\omega_{r} + \Omega_{\alpha\alpha'}) \rightarrow \\ &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_{r}^{(2)}(F_{\alpha}, F_{\alpha'}) \Xi_{\alpha} \delta(-\omega_{r} + \Omega_{\alpha'\alpha}) dF_{\alpha} dF_{\alpha'} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} K_{r}^{(2)}(F_{\alpha}, F_{\alpha} + \hbar\omega_{r}) \frac{g(F_{\alpha'} + \hbar\omega_{r})exp\{-(F_{\alpha'}/k_{B}T) + (\hbar\omega_{r}/k_{B}T)\}}{\sum_{\beta} g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)} dF_{\alpha'} \\ &= exp\left(\frac{\hbar\omega_{r}}{k_{B}T}\right) \int_{-\infty}^{\infty} K_{r}^{(2)}(F_{\alpha}, F_{\alpha} + \hbar\omega_{r}) \frac{g(F_{\alpha'} + \hbar\omega_{r})exp\{-(F_{\alpha'}/k_{B}T)\}}{\sum_{\beta} g_{\beta}exp(-F_{\beta}/k_{B}T)} dF_{\alpha'} \\ &= exp\left(\frac{\hbar\omega_{r}}{k_{B}T}\right) A_{2}^{(r)} \end{split}$$
(5.47)

Takže teraz môžeme napísať rovnicu (5.45) v kompaktnom tvare:

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\sum_{r=1}^{\infty} A_1^{(r)} \left([\mathbf{V}_r, \mathbf{V}_r^+ \sigma] + [\sigma \mathbf{V}_r, \mathbf{V}_r^+] \right)
-\sum_{r=1}^{\infty} A_2^{(r)} \left(\frac{\hbar \omega_r}{k_B T} \right) \left([\mathbf{V}_r^+, \mathbf{V}_r \sigma] + [\sigma \mathbf{V}_r^+, \mathbf{V}_r] \right)$$
(5.48)

kde $\mathbf{V}(-\omega_r) = \mathbf{V}^+(\omega_r) = \mathbf{V}^+_r$. Takže sme dostali konečný tvar diferenciálnej rovnice (5.45), ktorá určuje časový vývoj operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vztiahnutého na dynamickú podsústavu, ktorá je súčasťou inej disipatívnej podsústavy. Tu treba zdôraznit, že uvedená rovnica platí len, ak disipatívna podsústava je termostatická.

Rovnicu (5.48) prevedieme na rovnicu, ktorá obsahuje maticové členy σ_{nm} :

$$\frac{d\sigma_{nm}}{dt} = -\sum_{r=1}^{\infty} \sum_{j} \left\{ \sigma_{nm} [(V_{r;nj}V_{r;jn}^{*} + V_{r;mj}^{*}V_{r;jm})] A_{1}^{(r)} + (V_{r;nj}^{*}V_{r;jn} + V_{r;mj}^{*}V_{r;jm})] A_{2}^{(r)} exp(\hbar\omega_{r}/k_{B}T)] - \sigma_{jj} [_{n=m} (V_{r;nj}V_{r;jn}^{*} + V_{r;mj}^{*}V_{r;jm})] A_{1}^{(r)} + _{n=m} (V_{r;nj}^{*}V_{r;jn} + V_{r;mj}^{*}V_{r;jm})] A_{2}^{(r)} exp(\hbar\omega_{r}/k_{B}T)] \right\} (5.49)$$

Teraz môžeme napísať v kompaktnom tvare maticové elementy operátora hustoty pravdepodobnosti vzťiahnutého na dynamickú podsústavu v interakcii s termostatickou disipatívnou podsústavou. Najskôr napíšme vzťah pre diagonálne členy.

$$\frac{d\sigma_{nn}}{dt} = \sum_{j} (w_{jn}\sigma_{nn} - w_{nj}\sigma_{nn})$$
(5.50)

kde:

$$w_{jn} = \sum_{r=1}^{\infty} \left\{ (V_{r;nj}V_{r;jn}^{*} + V_{r;nj}^{*}V_{r;jn})] A_{1}^{(r)} + (V_{r;nj}^{*}V_{r;jn} + V_{r;nj}^{*}V_{r;jn})] A_{2}^{(r)} exp(\hbar\omega_{r}/k_{B}T)] \right\}$$
(5.51)
$$w_{nj} = \sum_{r=1}^{\infty} \left\{ (V_{r;nj}V_{r;jn}^{*} + V_{r;nj}^{*}V_{r;jn})] A_{1}^{(r)} \right\}$$

+
$$(V_{r;nj}^*V_{r;jn} + V_{r;nj}^*V_{r;jn})]A_2^{(r)}exp(\hbar\omega_r/k_BT)]\Big\}$$
 (5.52)

Veličiny w_{jn} a w_{nj} nazývane pravdepodobnosť prechodu z energetickej hladiny n na hladinu j a obrátene vztiahnuté na časovú jednotku. Vďaka prin-

cípu mikroskopickej rovnováhy platí:

$$w_{jn} = w_{nj}^* \tag{5.53}$$

Pre nediagonálne členy platí rovnica:

$$\frac{d\sigma_{nm}}{dt} = -\frac{1}{\mathcal{T}_{nm}}\sigma_{nm} \tag{5.54}$$

kde:

$$\frac{1}{\mathcal{T}_{nm}} = \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{j} \left\{ (V_{r;nj} V_{r;jn}^* + V_{r;mj}^* V_{r;jm})] A_1^{(r)} + (V_{r;nj}^* V_{r;jn} + V_{r;mj}^* V_{r;jm})] A_2^{(r)} exp(\hbar \omega_r / k_B T)] \right\}$$
(5.55)

Veličina $1/\mathcal{T}_{nm}$ zodpovedá prevrátenej relaxačnej dobe vyplývajúcej z nediagonálnych členov matice σ_{nm} .

Kapitola 6

Multy-stavové kvantové sústavy

V tejto časti použijeme výsledky z predchádzajúcej kapitoly, ktoré aplikujeme na konkrétne podsústavy, ktoré obsahujú fotóny, fonóny alebo fermióny. Skôr, ako to urobíme, musíme si objasniť jednu zváštnu metódu nazývanú *druhé kvantovanie*. Pomocou tejto metódy nám bude umožnené študovať sústavy pozostávajúce z rovnakých častí (fotónov, fonónov a fermiónov), ktoré sú v interakcii s disipatívnou sústavou. Podstata tejto metódy spočíva v tom , že na popis sústavy identických častíc sa nevolí úplný súbor (kvantovo)mechanických veličín, tak ako sme navyknutí z jednočasticového opisu kvantovej sústavy, ale popisuje sa počet častíc v jednotlivých stavoch. V ďalšom výklade si postupne priblížime princíp a vlastnosti fotónov - kvantovaním vlnovej rovnice, fonónov - kvantovaním harmonického oscilátora a následne elektrónov - kvantovaním Schödingerovho poľa. Je to pomerne zĺhavý postup, ale pre dobré pochopenie interakcie jednotlivých podsústav s disipatívnou podsústavou, sa ukazuje ako veľmi vhodným.

6.1 Kvantovanie vlnovej rovnice

V tejto časti sa pozrieme, ako možno matematicky opísať kvantum elektromagnetického poľa - fotón a tiež, ako musíme s daným formalizmom kreačných a anihilačných operátorov pracovať. Na základe istých úvah , ktoré je treba urobiť vrámci opisu elektromagnetického poľa je jasné, že na objasnenie kvantovania poľa musíme použiť vektorový potenciál **A**. Tento potenciál vystupuje v definícii intenzít poľa (nasledujúce úvahy sú urobené v Gaussových jednotkách):

$$\mathbf{E} = -c^{-1}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi \tag{6.1}$$

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{6.2}$$

Vlnová rovnica pre vektorový potenciál A

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A}$$
 (6.3)

opisuje trojicu vlnových rovníc pre jednotlivé zložky vektorového potenciálu. (pripomínam, že $\varepsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$) Na túto rovnicu v ďalšom aplikujeme recepty kvantovania. Najskôr však potrebujeme určiť Lagrangeovu funkciu v tvare:

$$L = \int \mathcal{L}(\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)d^3x \tag{6.4}$$

kde \mathcal{L} označuje hustotu lagrangiánu, ktorú pre tento prípad vyjadríme v tvare:

$$\mathcal{L} = \frac{\varepsilon_0}{2} \dot{\mathbf{A}}^2 - \frac{1}{\mu_0} ((\nabla A_x)^2 + (\nabla A_y)^2 + (\nabla A_z)^2)$$
(6.5)

V ďalšom vyjadríme kanonicky združené (podotýkam klasické) hybnosti:

$$\Pi_x(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{A}_x(\mathbf{x})} = \varepsilon_0 \dot{A}_x(\mathbf{x}) \tag{6.6}$$

$$\Pi_y(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{A}_y(\mathbf{x})} = \varepsilon_0 \dot{A}_y(\mathbf{x})$$
(6.7)

$$\Pi_z(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{A}_z(\mathbf{x})} = \varepsilon_0 \dot{A}_z(\mathbf{x})$$
(6.8)

Dalším krokom v našom odvodzovaní je rozloženie vektorového potenciálu $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ podľa rovinných vĺn:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = \sum_{\mathbf{w},j} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{w}}\varepsilon_0}} (\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j} + \mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j}^+)$$
(6.9)

kde sme zaviedli bezrozmernú amplitúdu $b_{\mathbf{w},j}$ (pre $b_{\mathbf{w},j}^+$ je vzťah podobný) podla transformačného vzťahu:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{w},j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{w}}\varepsilon_0} \frac{1}{V}} \mathbf{e}_{\mathbf{w},j} b_{\mathbf{w},j}$$
(6.10)

kde: pribudol index j = 1, 2 z dôvodu polarizácie a $\mathbf{e}_{\mathbf{w},j}$ je jednotkový vektor. Z dôvodu prehľadnosti sme vynechali čas t. Stále sa nachádzame v klasickej oblasti takže $b_{\mathbf{w},j}$ a $b_{\mathbf{w},j}^+$ zodpovedajú klasickým amplitúdam. Vzhľadom na tranzverzálnosť vektorového potenciálu $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ platí:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \cdot \mathbf{w} = 0 \tag{6.11}$$

kde j = 1, 2. Predpokladajme ď Tu sme použili rovnosť alej, že smery polarizácie sú na seba kolmé a teda platí:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{w},1} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{w},2} = 0 \tag{6.12}$$

Použijúc tento rozvoj dostaneme pre kanonicky združené hybnosti nasledujúci vzťah:

$$\Pi(\mathbf{x}) \equiv \varepsilon_0 \dot{A} = i \sum_{\mathbf{w},j} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{w}} \varepsilon_0}{2}} (\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j} + \mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j}^+) \quad (6.13)$$

Teraz máme urobenú dobrú prípravu na kvantovanie poľa. Začneme komutátormi medzi zložkami vektorového potenciálu a kanonicky združenej hybnosti. Na základe kolmosti polarizácie možno ukázať bez újmy na všeobecnosti, že platia nasledujúce komutačné vzťahy:

$$\begin{bmatrix} A_k(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}') \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} \Pi_k(\mathbf{x}), \Pi_j(\mathbf{x}') \end{bmatrix} = 0$$
(6.14)

kde k = x, y, z a j = x, y, z. Zamyslime sa teraz, ako vyzerajú komutačné vzťahy i-tej zložky kanonicky združenej hybnosti Π a j-tej zložky amplitúdy poľa **A**. Pokusne navrhnime tvar komutacie, tak ako by sme ho očakávali:

$$[\Pi_k(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}')] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$
(6.15)

Teraz je potrebné vyskúšať, či vzťah (6.15) je v súľade s predpokladom divergencie poľa rovnej nule:

$$\nabla_{\mathbf{x}'} \cdot [\Pi_k(\mathbf{x}), \mathbf{A}(\mathbf{x}')] \equiv [\Pi_k(\mathbf{x}), \nabla_{\mathbf{x}'} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}')] = 0$$
 (6.16)

Operáciu divergencie aplikujeme na pravú stranu rovnice (6.15) a dostaneme vzťah:

$$\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x'_{j}} \delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{\partial}{\partial x'_{k}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \neq 0$$
(6.17)

Tento výraz je rôzny od nuly, čo je v rozpore s predpokladom (6.16). Aby sme dostali "správny" vzťah pre komutáciu, musíme upraviť komutačný vzťah (6.15). Skúsme teda *preskúmať* dôvod divergencie výrazu:

$$\delta_{kj}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathbf{w} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} d^3\mathbf{w}$$
(6.18)

Urobme za týmto účelom nasledujúcu matematickú operáciu:

$$\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x'_{j}} \delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int -iw_{k} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} d^{3}\mathbf{w}$$
(6.19)

Teraz sa pozrime na to, ako treba pozmeniť δ -funkciu, aby sme na pravej strane komutačného vzťahu (6.15) dostali nulovú divergenciu, ktorú požadujeme vo vzťahu (6.16). Keďže okrem δ_{kj} máme už len jeden tenzor druhého rádu (vyjadrený diádou $w_k w_j$), potom treba výraz $\delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ zmeniť takto:

$$\delta_{kj}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \to F_{kj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathbf{w}e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} (\delta_{kj}-w_k w_j f(w)) d^3\mathbf{w} \quad (6.20)$$

kde f(w) je zatiaľ neznáma funkcia, ktorá závisí len od w. Túto funkciu budeme hľadať tak, že urobíme divergenciu z upravenej funkcie $F_{kj}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$:

$$\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x'_{j}} F_{kj}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} (-iw_{k} + iw_{k}(w_{1}^{2} + w_{2}^{2} + w_{3}^{2})f(w) \quad (6.21)$$

Dostačujúcim dôvodom na to, aby sa pravá strana rovnala nule je:

$$f(w) = \frac{1}{w^2} \tag{6.22}$$

Tento výsledok nás vedie k tomu, aby sme pravú stranu komutačného vzťahu (6.15) pozmenili tak, že nahradíme $\delta_{kj}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ "tranzverzálnou δ -funkciou":

$$\delta_{kj}''(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} (\delta_{kj} - \frac{w_k w_j}{w^2})$$
(6.23)

Integral (6.23) sa dá pomerne ľahko vypočítať, keď w_k a w_j vyjadríme pomocou derivácie exponenciálnej funkcie podľa x_k a x_k . Potom možno (6.15) vyjadriť v tvare:

$$\delta_{kj}^{\prime\prime}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\prime}) = \delta_{kj}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\prime}) + \frac{\delta}{\delta x_k} \frac{\delta}{\delta x_j} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\prime})} \frac{1}{w^2} d^3 \mathbf{w}\right)$$
(6.24)

Integrál v zátvorkách sa dá vypočítať a tak po istej námahe dostaneme:

$$\int e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \frac{1}{w^2} d^3 \mathbf{w} = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$
(6.25)

Nakoniec dosaď me výraz (6.25) do výrazu (6.24) a ten použime na pravej strane komutačného výrazu (6.15) a dostaneme vzťah medzi kanonicky združenou hybnosťou Π a poľom \mathbf{A} v požadovanom tvare:

$$[\Pi_k(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}')] \equiv \frac{\hbar}{i} \delta_{kj}''(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{\hbar}{i} \left(\delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \frac{1}{4\pi} \frac{\delta^2}{\delta x_k \delta x_j} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right)$$
(6.26)

Po istej námahe dostaneme komutačné vzťahy:

$$\begin{bmatrix} b_{\mathbf{w},j}, b_{\mathbf{w}',j'}^+ \end{bmatrix} = \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{w}\mathbf{w}'} \begin{bmatrix} b_{\mathbf{w},j}, b_{\mathbf{w}',j'} \end{bmatrix} = 0 \begin{bmatrix} b_{\mathbf{w},j}^+, b_{\mathbf{w}',j'}^+ \end{bmatrix} = 0$$

$$(6.27)$$

V ďalšom sa pokúsime napísať Hamiltonov operátor pomocou rozvojov pre A (6.9) a Π (6.13) vychádzajúc z klasickeho vyjadrenia energie elektromagnetického poľa:

$$U = \frac{1}{2} \int (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) d^3 \mathbf{x}$$
 (6.28)

Po dosadení z rovníc pre intenzitu elektrického poľ
a ${\bf E}$ (poznamenávam, že je uvedená v Gaussových jednotkách)

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi - c^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \tag{6.29}$$

a intenzitu magnetického poľa ${\bf H}$

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{6.30}$$

dostaneme:

$$U = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \int \dot{\mathbf{A}}^2 d^3 \mathbf{x} + \frac{1}{2\mu_0} \int (\nabla \times \mathbf{A})^2 d^3 \mathbf{x}$$
(6.31)

Ak teraz rozpíšeme výraz $(\nabla \times \mathbf{A})^2$ po jednotlivých zložkách a uvážime, že $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ a následne použijeme integráciu *per partes* dostaneme vyjadrenie pre U, ktoré je zhodné s vyjadrením pre Hamiltonovu funkciu:

$$U \equiv H = \int \frac{\varepsilon_0}{2} \dot{\mathbf{A}}^2 d^3 \mathbf{x} - \int \frac{1}{\mu_0} ((\nabla A_x)^2 + (\nabla A_y)^2 + (\nabla A_z)^2) d^3 \mathbf{x} \quad (6.32)$$

Po tomto malom odbočení dosaď me do ostatnej rovnice (6.32) rozvoje A (6.9) a Π (6.13), tak ako sme si to naplánovali na začiatku vyjadrenia pre energiu. Takto možno prejsť od Hamiltonovej funkcie v klasickom vyjadrení ku Hamiltonovmu operátoru v kvantovo-mechanickom vyjadrení:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{w},j} \hbar \omega_{\mathbf{w}} \left(\hat{b}_{\mathbf{w},j}^{+} \hat{b}_{\mathbf{w},j} + \frac{1}{2} \right)$$
(6.33)

Dostali sme úplne identické vyjadrenie pre Hamiltonov operátor, ako sme zvyknutí pre bozóny. výraz $\sum_{\mathbf{w},j}(1/2)\hbar\omega_{\mathbf{w}}$ predstavuje energiu nulových kmitov. V tomto vyjadrení frekvencie s narastajúcim **w** rastú a suma vo vyjadrení (6.33) prebieha bez ohraničenia do nekonečna, ostatný vyraz diverguje.

Vďaka tejto vlastnosti sa niekedy energia nulových kmitov zanedbáva, čo nemusí byť vo všeobecnosti možné. Počet častíc možno vyjadriť pomocou operátora počtu častíc, ktorý je v tomto formalizme vyjadrený nasledovne:

$$\hat{n}_{\mathbf{w},j} = \hat{b}_{\mathbf{w},j}^+ \hat{b}_{\mathbf{w},j} \tag{6.34}$$

Pripomíname, že pre tento operátor platí nasledujúca operátorová rovnica:

$$\hat{n}_{\mathbf{w},j}|\phi_{\mathbf{w},j}\rangle = n_{\mathbf{w},j}|\phi_{\mathbf{w},j}\rangle \tag{6.35}$$

kde $n_{\mathbf{w},j}$ vyjadruje vlastné čislo operátora $\hat{n}_{\mathbf{w},j}$, ktoré určuje počet jednomódových (fiktívnych) častíc v sústave. V pripade skalárneho elektromagnetického poľa tieto častice nazývame fotóny. Index \mathbf{w},j je v tomto prípade jednoznačne daný vlnovým vektorom \mathbf{w} a indexom polarizácie j. Pre úplnosť ešte uveďme tvar mnohomódovej vlnovej funkcie ϕ :

$$\phi = \prod_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{w},j}!}} (\hat{b}_{\mathbf{w},j}^+)^{n_{\mathbf{w},j}} \phi_0 \tag{6.36}$$

kde ϕ_0 označuje vákuový stav. Celková energia žiarenia elektromagnetického poľa sa rovná súčtu elektrickej a magnetickej energie (6.28).

6.2 Kvantovo-mechanické kmity

Teraz sa pozrime, ako podliehajú kvantovomechanickým zákonom kmity jednotlivých atómov, uväznených v kryštálovej mriežke. Na začiatok si predstavme jeden atóm, ako malé závažie umiestnené medzi dvojicou strún. Struny sú lineárne, čo znamená, že výchylka atómu je priamoúmerná pôsobiacej sile. V mechanike označujeme takúto sústavu za harmonickú (obrázok 6.1). V



Obr. 6.1: Závažie umiestnené medzi dvojicou lineárnych pružín

našom prípade použijeme tento príklad, ako model jedného atómu umiestneného medzi dvojocou susedov, kde interakciu spôsobenú medziatómovými silami nahradíme dvojicou pružín. Z klasického pohľadu, dokážeme túto sústavu opísať pomocou kinetickej $T = \frac{p^2}{2m}$ a potenciálnej $U = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ energie. Kompletný opis sústavy je daný Hamiltonovou funkciou:

$$H \equiv T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$
 (6.37)

Ku kvantovo-mechanickému formalizmu prejdeme tak, že hybnosť a polohu nahradíme prislúchajúcimi operátormi podľa nasledujúceho pravidla:

$$p \rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$
$$x \rightarrow \hat{x} = x$$

pripomínam, že tieto operátory spĺňajú komutačný vzťah:

$$[\hat{p}, \hat{x}] \equiv \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = \frac{\hbar}{i}$$
(6.38)

Tento komutačný vzťah treba samozrejme chápať tak, že vysledok dostaneme, keď operátory aplikujeme na lubovolnú (prípustnú) funkciu $\psi(x)$.

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(x\psi\right) - x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi\right) = \frac{\hbar}{i}\psi$$

Po dosadení operátorových vyjadrení do rovnice (6.37) dostaneme:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2\right\}\psi(x) = E\psi(x)$$
(6.39)

Ostatnú rovnicu treba chápať v operátorovom tvare a tak bola aj odvodená. O tom sme už, ale hovorili v predchádzajúcej časti venovanej úvodu do kvantovej mechaniky. Z hľadiska zjednodušenia zápisu rovnice a ďalších manipulácií zavádzame bezrozmernú veličinu ξ , ktorú definujeme takto:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi\tag{6.40}$$

a pomocou tejto bezrozmernej veličiny nadobudne rovnica (6.39) tvar:

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} \psi(\xi) = E\psi(\xi) \tag{6.41}$$

Teraz budeme predpokľadať, že s operátormi ξ a $\frac{d}{d\xi}$ môžeme manipuľovať, ako s čislami, takže výraz v ostatnej rovnici budeme chápať, ako dvojčlen:

$$-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \to (-a^2 + b^2) = (-a + b) \times (a + b)$$
(6.42)

Teraz pokusne dosadíme namiesto ľavej strany rovnice (6.41) výraz:

$$\hbar\omega \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \times \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \psi \tag{6.43}$$

Teraz nás čaká roznásobenie zátvoriek , ale musíme si dávať pozor na to, aby sme dodržali správne poradie operátorov, keďže tieto sa správajú ako derivácie.

$$\underbrace{\frac{\hbar\omega}{2}\left\{-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right\}\psi(\xi)}_{I.}-\underbrace{\frac{\hbar\omega}{2}\left\{\frac{d}{d\xi}\xi-\xi\frac{d}{d\xi}\right\}\psi(\xi)}_{II.}\tag{6.44}$$

Vidíme, ze prvý výraz sa zhoduje s ľavou stranou rovnice (6.41) . Druhý výraz sa vzhľadom na vlastnosť operácie derivácie (komutačný vzťah):

$$\frac{d}{d\xi}\xi - \xi \frac{d}{d\xi} = 1 \tag{6.45}$$

upravíme na tvar:

$$II = -\frac{\hbar\omega}{2}\psi \tag{6.46}$$

Teraz si pripomeňme, že výrazy vystupujúce v rovnici (6.43) sú operátory. Pre úplnosť si ich vypíšme znovu:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) = \hat{b}^+$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) = \hat{b}$$

kde sme označili \hat{b}^+ kreačný operátor a \hat{b} anihilačný operátor. Ich algebraické vlastnosti sú rovnaké, ako v prípade operátorov pre vznik a zánik kvanta elektromagnetického poľa (fotónu), ktoré sme odvodili v predchádzajúcej časti. Malým problémom je energia sústavy, ktorá vychádza posunutá vzhľadom na pôvodnú rovnicu (6.41) o $\frac{\hbar\omega}{2}$, takže je potrebné zaviesť *novú* (posunutú) energiu:

$$E' = E - \frac{\hbar\omega}{2} \tag{6.47}$$

pripomínam, že posunutie energie súvisí s existenciou nulových kmitov. Tento výsledok síce vznikol na základe matematickej špekulácie, ale perfektne sedí s

experimentálnym faktom existencie nulových kmitov. To je aj hlavný rozdiel oproti predchádzajúcej časti, kde sme hovorili o fotónoch, kde nedochádza ku vzniku nulových kmitov.

Aplikovaním kreačných a anihilačných operátorov možno napísať rovnicu (6.41) (Schrödingerovu) vo veľmi elegantnom (matematicky korektnom) tvare:

$$\hbar\omega\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\psi = E'\psi \tag{6.48}$$

Správny komutačný vzťah medzi operátormi \hat{b}^+ a \hat{b} dostaneme použitím vzťahu (6.45) v nasledujúcom tvare:

$$\hat{b}\hat{b}^{+} - \hat{b}^{+}\hat{b} = 1 \tag{6.49}$$

Pripomínam, že operátory, ktoré spĺňajú ostatný komutačný vzťah nazývame Boseho operátory. Tiež treba mať na pamäti, že ostatný vzťah vznikol tak, že sme operátory aplikovali na ľubovoľnú prípustnú funkciu. (Odporúčam vyskúšať).

Operátory \hat{b}^+ a \hat{b} majú vi aímv'vlstnosť. Možno pomocou nich *vytvoriť* vlastné stavy harmonického operátora. Pripominam, že vznikli z rovnice opisujúcej vlasnosti kvantovomechanického oscilátora. Takže pri odvádzaní vlastných stavov kvantovomechanického oscilátora budeme vychádzať z tejto rovnice a príslušných vlastných energií. Označme stav prislúchajúci najnižšej energii E'_0 ako ψ_0 a dosaď me túto funkciu do rovnice (6.48):

$$\hbar\omega\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\psi_0 = E'_0\psi_0 \tag{6.50}$$

Ostatnú rovnicu vynásobme (štandardný krok používaní pri riešení rovníc, len tu treba mať na pamäti, že sa jedná o derivácie a teda poradie je veľmi dôležité) zľava operátorom \hat{b} , takže dostaneme:

$$\hbar\omega(\hat{b}\hat{b}^+\hat{b})\psi_0 = E_0'\hat{b}\psi_0 \tag{6.51}$$

Použitím komutačného vzťahu (6.49) možno ostatnú rovnicu upraviť nasledovne (taktiež odporúčam vyskúšať):

$$\hbar\omega (1 + \hat{b}^{+} \hat{b}) \hat{b} \psi_{0} = E_{0}' \hat{b} \psi_{0} \tag{6.52}$$

a po malej úprave dostaneme:

$$\hbar\omega(\hat{b}^+\hat{b})\hat{b}\psi_0 = (E'_0 - \hbar\omega)\hat{b}\psi_0 \tag{6.53}$$

Ostatná rovnica však hovorí, že energia prislú Chajúca vlastnému stavu
 $b\psi_0$ sa rovná $E_0'-\hbar\omega$, čo je menej ako energia základného stavu. Samo
zrejme, že enegia nejakého stavu nemôže byť nižšia, ako energia základného stavu. Tento rozpor odstránime definovaním , že stav s energiou nižšou, ako základnou , je rovný nule. Teda:

$$\hat{b}\psi_0 \equiv \psi_{-1} = 0$$
 (6.54)

Táto rovnica slúži , ko definícia základného stavu. Po dosadení derivácií, ktoré sa skrývajú v operátore \hat{b} , dostaneme diferenciálnu rovnicu:

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\psi_0 = 0 \tag{6.55}$$

Táto rovnica má riešenie v tvare:

$$\psi_0(\xi) = C e^{-\xi/2} \tag{6.56}$$

Vlnovú funkciu v n-tom exitovanom stave dostaneme n-násobným aplikovaním kreačného operátora na základný stav. Matematicky vyjadrené to napíšeme takto:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n \psi_0 \tag{6.57}$$

Normovaciu podmienku $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ sme dostali z podmienky rozdelenia hustoty pravdepodobnosti:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_n(\xi) d\xi = 1 \tag{6.58}$$

V predchádzajúcich častiach sme videli, čo sa dá matematicky s Boseho operátormi robiť a hlavne, ako vznikli. Tieto poznatky použijeme v nasledujúcej časti.

6.3 Pohybová rovnica operátora $\hat{\sigma}$ vztiahnutého na podsústavu elektromagnetického poľa

V tejto časti použijeme formalizmus kvantovania vlnovej rovnice (6.3), vlastnosti operátorov $\hat{b}_{\mathbf{w},j}^+$ a $\hat{b}_{\mathbf{w},j}$ ktoré dosadíme do rovnice (5.48). Budeme to robiť s cieľom napísania pohybovej rovnice operátora $\hat{\sigma}$ vztiahnutého na podsústavu elektromagnetického poľa. V tejto rovnici použijeme nasledujúcu zámenu:

$$\begin{array}{rccc} \mathbf{V}_r & \to & \hat{b}_{\mathbf{r}} \\ \mathbf{V}_r^+ & \to & \hat{b}_{\mathbf{r}}^+ \end{array}$$

poznamenávam, že nebudeme uvažovať polarizáciu. Takže po dosadení a správnom usporiadaní dostaneme:

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\sum_{r=1}^{\infty} A_1^{(r)} \left([\hat{b}_r, \hat{b}_r^+ \sigma] + [\sigma \hat{b}_r, \hat{b}_r^+] \right) \\
-\sum_{r=1}^{\infty} A_2^{(r)} \left(\frac{\hbar \omega_r}{k_B T} \right) \left([\hat{b}_r^+, \hat{b}_r \sigma] + [\sigma \hat{b}_r^+, \hat{b}_r] \right)$$
(6.59)

kde $A_1^{(r)}$ a $A_2^{(r)}$ sú určené vzťahmi (5.46) a (5.47). Diferenciálna rovnica (6.59) predstavuje pohybovú rovnicu operátora rozdelenia hustoty pravdepodobnosti σ vztiahnutého na podsústavu elektromagnetického poľa. Pomocou tohto operétora môžeme určiť strednú hodnotu operátora $\hat{b}_{\mathbf{r}}^+$ a strednú hodnotu operátora počtu fotónov $\hat{b}_{\mathbf{r}}^+\hat{b}_{\mathbf{r}}$. Na výpočet použijeme známy vzťah (5.21), ktorý prepíšeme pre σ :

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \operatorname{Tr}(\sigma \mathbf{O})$$
 (6.60)

z ktorého vyplýva nasledujúca diferenciálna rovnica:

$$\frac{d\langle \mathbf{O} \rangle}{dt} = \operatorname{Tr}\left(\mathbf{O}\frac{d\sigma}{dt}\right) \tag{6.61}$$

V ďalších úvahách budeme uvažovať jednovidovú sústavu a teda v rovnici (6.61) po rozpísaní pre $\mathbf{o}\to \hat{b}^+$ dostaneme

$$\frac{d\langle b^{+}\rangle}{dt} = -A_{1} \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\hat{b},\hat{b}^{+}\sigma] + \hat{b}^{+}[\sigma\hat{b},\hat{b}^{+}]) - A_{2} exp(-\hbar\omega/k_{B}T) \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\hat{b}^{+},\hat{b}\sigma] + \hat{b}^{+}[\sigma\hat{b}^{+},\hat{b}])$$
(6.62)

Postupne upravíme jednotlivé členy rovnice (6.62) takto:

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\hat{b},\hat{b}^{+}\sigma]) = \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma)$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma)$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma) = -\langle \hat{b} \rangle$$
(6.63)

v predchádzajúcej rovnici sme použili komutačný vzťah $\hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b} = 1.$

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\sigma\hat{b},\hat{b}^{+}]) = \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma\hat{b}\hat{b}^{+}) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma\hat{b})$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma\hat{b}\hat{b}^{+}) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma\hat{b})$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma\hat{b}) - \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma)$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\sigma) = 0 \qquad (6.64)$$

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\hat{b}^{+},\hat{b}\sigma]) = \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma\hat{b}^{+})$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma) = 0 \qquad (6.65)$$

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}[\sigma\hat{b}^{+},\hat{b}]) = \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma\hat{b}^{+}\hat{b}) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma\hat{b}^{+})$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma\hat{b}^{+}) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma)$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}^{+}\hat{b}\sigma)$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma) - \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}\sigma) + \operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\sigma) = \langle \hat{b}^{+} \rangle$$

$$(6.66)$$

Ostatné štyri rozvoje dosadíme do rovnice (6.62) a dostaneme pomerne jednoduchú diferenciálnu rovnicu pre vyjadrenie časovej zmeny operátora \hat{b}^+ :

$$\frac{d\langle \hat{b}^+ \rangle}{dt} = \left[A_2 exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - A_1 \right] \langle \hat{b}^+ \rangle \tag{6.67}$$

Riešením diferenciálnej rovnice (6.67) je exponencionálna funkcia

$$\langle \hat{b}^+ \rangle = \langle \hat{b}^+ \rangle_0 exp(-\kappa t) \tag{6.68}$$

kde sme označili :

$$A_2 exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - A_1 = \kappa \tag{6.69}$$

a kde je $\langle \hat{b}^+ \rangle_0$ stredná hodnota operátora \hat{b}^+ v dobe t = 0. V ďalšom určíme veľmi dôležitú časovú zmenu strednej hodnoty počtu fotónov v jednovidovej sústave, pre ktorú platí $\mathbf{O} = \hat{b}^+ \hat{b}$:

$$\frac{\langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle}{dt} = \text{Tr}\left(\hat{b}^+ \hat{b} \frac{d\sigma}{dt}\right) \tag{6.70}$$

Budeme postupovať podobne, ako v rovnici (6.62), kde dosadíme namiesto $\langle \hat{b}^+ \rangle$ výraz $\langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle$:

$$\frac{d\langle \hat{b}^{+}\hat{b}\rangle}{dt} = -A_{1}\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}[\hat{b},\hat{b}^{+}\sigma] + \hat{b}^{+}\hat{b}[\sigma\hat{b},\hat{b}^{+}]) - A_{2}exp(-\hbar\omega/k_{B}T)\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}[\hat{b}^{+},\hat{b}\sigma] + \hat{b}^{+}\hat{b}[\sigma\hat{b}^{+},\hat{b}])$$
(6.71)

Po vzore rovnice (6.62) upravíme jednotlivé členy:

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}[\hat{b},\hat{b}^{+}\sigma]) = -1 - \langle \hat{b}^{+}\hat{b} \rangle$$
(6.72)
$$\operatorname{Tr}(\hat{i}^{+}\hat{i}[\hat{b},\hat{i}^{+}]) = -1 - \langle \hat{b}^{+}\hat{b} \rangle$$
(6.72)

$$\operatorname{Tr}(b^+b[\sigma b, b^+]) = -\langle b^+b\rangle - 1 \tag{6.73}$$

$$\operatorname{Tr}(\hat{b}^{+}\hat{b}[\hat{b}^{+},\hat{b}\sigma]) = \langle \hat{b}^{+}\hat{b} \rangle \tag{6.74}$$

$$\operatorname{Tr}(b^+b[\sigma b^+, b]) = \langle b^+b \rangle \tag{6.75}$$

Tak, ako v predchádzajúcom prípade, dosadíme ostatné rovnice do rovnice (6.71) a dostaneme:

$$\frac{\langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle}{dt} = 2A_1 - 2 \Big[A_2 exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - A_1 \Big] \langle \hat{b}^+ \hat{b} \rangle \tag{6.76}$$

Kapitola 7

Záver

V našom rozprávaní o princípoch kvantovej mechaniky sme prešli síce krátke časové ale z pohľadu ľudského ducha nesmierne dôležité obdobie objavovania a vysvetlovania veľmi podstatných vlastností sveta v ktorom žijeme. Ukázalo sa, že matematický aparát a výsledky experimentov pripravených v 19. storočí boli schopné podať vyčerpávajúce vysvetlenie hlbokých zákonitostí mikrosveta, sveta ktorý je vzdialený našim každodenným skúsenostiam. Formovanie predstáv kvantovej mechaniky sa líši od formovania predstáv klasickej mechaniky. Klasická mechanika je deterministická a kauzálna teória. Deterministická preto, lebo pri danom stave sústavy vieme jednoznačne určiť hodnotu ľubovoľnej veličiny, bez toho aby sme menili v procese skúmania stav sústavy (ak samozrejme v procese merania neopatrnosťou nespôsobíme požiar alebo výbuch - ale za to klasická teória nemôže). Kauzálna je v tom, že z presnej a úplnej informácie o stave sústavy vieme určiť jej vývoj do budúcnosti ale aj jej chovanie sa v minulosti. Známy je výrok d´Alemberta, ktorý v nadšení s vývojom teoretickej mechaniky, povedal "Dajte mi polohy a hybnosti všetkých atómov vo vesmíre a ja vám vypočítam dejiny sveta od jeho stvorenia až do chvíle keď na hore Golgota postavia kríž (súdny deň)". Na dobu v ktorej d'Alembert žil to bolo do istej miery odôvodnené vyhlásenie. Ale aj do istej časti pesimistický, pretože predpovedal že osud každého z nás je určený čiste mechanickými princípmi a v budúcnosti ho bude možné "vypočítať". Neskorší vývoj vo fyzike ukázal na obrovskú variabilitu pravdepodobností, ktorá "riadi" svet okolo nás.

V našom rozprávaní sme sa zamerali na pohyb mikroskopickej častice v jednom rozmere. Je to tak ako by sme mechaniku telesa obmedzili len na rovnomerný pohyb po priamke. Vôbec sme nespomenuli pohyb po kružnici (až na pár argumentov o stabilnej dráhe elektrónu pri jeho pohybe po atómovom orbitáli), moment hybnosti a spin elektrónu. To ani nebolo naším cieľom. Zamerali sme sa na niektoré súvislosti medzi optikou a kvantovou mechanikou a čiastočnou inerpretáciou výsledkov. Hlavne sme spomenuli tunelovanie - fascinujúcu vlastnosť mikrosveta, ktorá však práve použitím matematických (Fourierova transformácia) a optických (Kirchhoffových) objavov 19. storočia môže byť dobre pochopená a akceptovaná.