

Vznik a základy kvantové mechaniky

Kvantová mechanika je část kvantové fyziky, která se zabývá mechanickým pohybem částic v mikrosvětě pod vlivem působících sil. Na rozdíl od klasické, Newtonovy mechaniky, bere v úvahu vlnový a pravděpodobnostní charakter pohybu částic. Proto její rovnice a zákony vypadají úplně jinak než zákony klasické fyziky. Přesto existuje mezi klasickou a kvantovou fyzikou souvislost. **Princip korespondence** říká, že při přechodu od částic k makroskopickým tělesům přecházejí zákony kvantové fyziky v zákony klasické mechaniky, protože vlnové délky de Broglieových vln a Planckova konstanta h se jeví nekonečně malé.

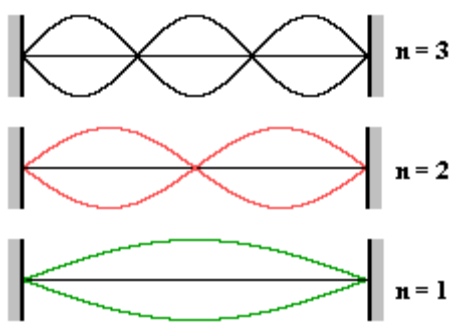
Poznámka: Analogicky pak zákony relativistické fyziky přecházejí v zákony klasické (nerelativistické) fyziky v případě, že jsou velikosti rychlosti částic mnohem menší než je rychlost světla ve vakuu, tj. lze považovat velikost rychlosti světla za nekonečně velkou vůči velikosti rychlosti částic.

Uvažujme volnou částici, která se bude pohybovat podél osy x podle Newtonova zákona setrvačnosti rovnoměrným přímočarým pohybem. Podle de Broglieovy hypotézy přísluší částici o hmotnosti m vlnová délka $\lambda = \frac{h}{mv}$, můžeme na ni tedy pohlížet jako na nekonečnou

rovinnou vlnu. Částici nyní uzavřeme mezi dvěma rovnoběžnými, nekonečně vysokými stěnami kolnými k ose x a vzdálenými o délku L , od nichž se může částice pružně odrážet. Stěny musí být „nekonečně vysoké“, jinak by se částice „protunelovala“ ven. Říkáme, že částice se nachází uvnitř nekonečně hluboké potenciálové jámy a její pohyb je vázán na úsečku.

Z hlediska klasické fyziky může mít taková částice libovolnou rychlost a energii. Při pružných odrazech se její energie nebude měnit a částice se bude pohybovat rychlostí o téže velikosti střídavě oběma směry. „Pravděpodobnost výskytu“ této klasické částice bude stejná ve všech bodech úsečky.

obr.1

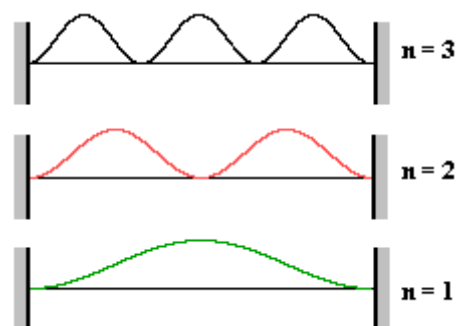


Z hlediska vlnového charakteru částic bude situace jiná. Po odrazech na stěnách dojde díky skládání odraženého a přímého vlnění ke vzniku stojatého vlnění (naprosto analogicky jako na napjaté struně). Struna ale nemůže kmitat jakkoliv, ale jen tak, aby se po celé délce struny rozložil celočíselný počet půlvln. Musí tedy platit: $L = n \frac{\lambda}{2}; n \in \mathbb{N}$
 $\Rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$. Struna se tedy nachází v kmitavých stavech,

kteří jsou charakterizovány určitou frekvencí a rozložením kmiten a uzlů podél struny (obr.1).

obr. 2

Částice, chovající se podle de Broglieovy hypotézy, vykazuje vlastnosti vlny. Experimentem se např. potvrzuje, že elektron vázaný na úsečce se bude nacházet jen v určitých stavech charakterizovaných celými čísly n . V každém takovém stavu bude mít zcela určitou energii E_n a jeho pohyb bude popsán vlnovou funkcí Ψ_n s příslušným rozložením pravděpodobnosti výskytu podél úsečky. Toto rozložení hustoty pravděpodobnosti $|\Psi_n|^2$ je znázorněno na obr. 2.



Určit energii E_n a pravděpodobnosti výskytu částice je možné pouze řešením příslušné kvantově mechanické rovnice. Ukazuje se ale, že postup lze použít i pro volně se pohybující částici, použijeme-li výraz pro de Broglieho vlnovou délku $\lambda = \frac{h}{mv}$. Energie částice pak bude

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}, \text{ po dosazení tedy dostaneme pro možné hodnoty energie } E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2.$$

Vlnové chování částice, která se pohybuje v určité omezené oblasti prostoru, vede tedy ke **kvantování energie**. Částice se může nacházet pouze na určitých **energetických hladinách** určených **kvantovým číslem n** . **Základním stavem** je pro $n=1$, vyšší stavy se nazývají **vzbuzené (excitované) stavy**. S rostoucím n se energetické hladiny od sebe vzdalují.

Na rozdíl od pohybu klasické kuličky (např. pingpongového míčku, ...) budou na úsečce místa, kde bude výskyt částice nejpravděpodobnější, kde se bude „zdržovat nejvíce“. Tato místa odpovídají poloze kmiten chvějící se struny. Naproti tomu v místech, která odpovídají uzlům bude pravděpodobnost výskytu částice nulová. Je ale zbytečné, chtít si zde představit, „jak to částice dělá“.

Rozložení pravděpodobnosti výskytu částice se během času nemění, tj. je **stacionární** (analogicky jako rozložení kmiten a uzlů na struně). Navíc v tomto stavu částice neztrácí energii - zůstává na své energetické hladině. V makrosvětě, jak víme, je každý pohyb vždy postupně utlumen třením a odporem prostředí, a tedy rozkmitaná struna brzy dozní.

Částice mikrosvětla může ztrácet nebo získávat energii pouze tak, že přejde skokem z jednoho kvantového stavu do druhého. Při přechodu z vyššího stavu do nižšího se energii vyzáří (např. v podobě fotonu), při opačném přechodu částice energii pohltí. Energie se může předávat i jiným způsobem než zářením - např. srážkou částic, ... ale vždy pouze v kvantech odpovídajících rozdílů energetických hladin. Přechází-li částice z kvantového stavu s energií E_n do kvantového stavu s nižší energií E_m , vyzáří nebo jinak předá kvantum energie o frekvenci f_{nm} takové, že $hf_{nm} = E_n - E_m$.

Kvantová mechanika zkoumá obecný pohyb částic v prostoru pod vlivem různých sil (Coulombovských sil elektrického přitahování, jaderných sil, ...) tím, že řeší vlnovou tzv. **Schrödingerovu rovnici**. Z ní je možné určit vlnové funkce a pravděpodobnosti výskytu částice v prostoru. Tato rovnice má řešení právě jen pro určité hodnoty energie (energetické hladiny), které odpovídají **kvantovým stacionárním stavům**. Pokud je částice v tomto stavu, nijak se navenek neprojevuje. Teprve při přechodech mezi stacionárními stavy vydává nebo přijímá energii.

Při zvětšování délky úsečky L bude energie daného stavu klesat, rozdíly mezi sousedními energetickými hladinami se budou zmenšovat. Pro nekonečné L bude již částice volná a její energie přestane být kvantována.

Poznámka: Může nastat i situace, kdy částice bude konat neomezený pohyb, ale musí přitom překonávat bariéry periodicky rozložené podél přímky. Takovýto „překážkový běh“ vykonává např. elektron při pohybu v krystalu kovu nebo polovodiče. Jeho energie je přitom kvantována tak, že může nabývat hodnot uvnitř určitých energetických pásů.

Naopak bude-li se délka L zmenšovat, tj. budeme-li se snažit částici sevřít stěnami na stále kratší vzdálenosti, energie částice poroste. To je v souladu s tím, co víme o energii atomů, atomových jader a částic. Atomům s rozměry řádově 10^{-10} m odpovídají energie řádově 1eV, jádrům s rozměry 10^{-15} m energie řádově 10^6 eV, částicím s ještě menšími rozměry pak energie v řádech 10^9 eV.

Toto je projevem dalšího zákona kvantové mechaniky, který nemá obdobu v makrosvětě - tzv. **Heisenbergových relací neurčitosti**.

Heisenbergovy relace neurčitosti

První Heisenbergova relace neurčitosti

Při měření polohy částice si na ni „posvítíme“ světlem (zářením) o vlnové délce λ . Při použití tohoto záření není možné rozeznat předměty menší, než $\frac{\lambda}{2}$, přesnost měření polohy (neurčitost polohy) Δx je tedy $\Delta x \geq \frac{\lambda}{2}$. Dopadem záření (tj. fotonů) na částici dojde zároveň k předání hybnosti ve stejném směru, v jakém dopadá záření. Nejmenší předání hybnosti nastává v případě dopadu jednoho fotonu, jehož velikost hybnosti je $p = \frac{h}{\lambda}$. Po „srážce“ fotonu a částice změní hybnost částice o velikost $\Delta p = \frac{h}{\lambda}$ (částice byla před dopadem fotonu v klidu). Dostáváme tedy: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\lambda}{2} \cdot \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2}$. Tento vztah platí obecně, při přesném odvození se však ukazuje, že spodní mezí uvedeného součinu je $\frac{h}{4\pi}$. Zavedením označení $\hbar = \frac{h}{2\pi}$,

přičemž $\hbar = 1,0545 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \doteq 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ dostáváme: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ **součin nepřesností, jichž**

se dopouštíme při současném měření polohy a hybnosti částice, je roven nejméně $\frac{\hbar}{2}$.

Právě odvozená relace neurčitosti říká, že čím přesněji známe polohu částice, tím neurčitější je informace o její hybnosti (a tedy je i větší rozptyl v určení kinetické energie) a naopak. Zvětšuje-li se Δx , klesá Δp a naopak. „Svíráme-li částici v hrsti“ víc a více, je stále neklidnější, pohyblivější a chová se bouřlivěji.

Podle zákonů kvantové mechaniky částice nemůže mít současně přesnou polohu a přesně určenou hybnost. Nemá smysl mluvit o tom, že se částice pohybuje po nějaké trajektorii nějakou rychlostí, mluvíme jen o pravděpodobnostech výskytu částice v prostoru.

Poznámka: Vzhledem k tomu, že částice, která byla při odvozování brána v úvahu, byla na začátku „pozorování“ v klidu, začala se pod vlivem srážky s fotonem pohybovat po přímce (ne po zakřivené trajektorii). Proto ve zcela správném zápisu 1. Heisenbergovy relace nevystupuje velikost hybnosti p , ale pouze velikost její x-ové složky p_x .

Druhá Heisenbergova relace neurčitosti

Měříme-li frekvenci f po dobu Δt , zjišťujeme, kolikrát za tuto dobu nastal určitý jev, tj. $f = \frac{n}{\Delta t}$. Minimální chyby v určení frekvence se dopustíme, změříme-li co nejpřesněji počet n , což lze s (maximální) přesností $\Delta n = 1$, takže je vždy $\Delta f \geq \frac{1}{\Delta t}$. energii $E = hf$ můžeme měřit s přesností $\Delta E = h \cdot \Delta f \geq \frac{h}{\Delta t}$, odkud dostáváme: $\Delta E \cdot \Delta t \geq h$. Také tato relace má obecnou platnost

a při přesnějším odvození vyjde dolní mez chyby $\frac{\hbar}{2}$ takže: $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ - **součin chyby**

v určení energie a časového intervalu, po který provádíme měření, je roven nejméně $\frac{\hbar}{2}$.

Zásadní rozdíl od první relace neurčitosti je ten, že Δt není chyba v určení času, ale časový interval, po který se měření provádí.

Jak je vidět z právě nastíněných odvození Heisenbergových relací neurčitosti, měřící metoda ovlivňuje výsledky měření. Tuto skutečnost (interakci měřícího přístroje s měřeným objektem), je třeba při všech měření v mikrosvětě brát v úvahu. Kdybychom tato omezení nerespektovali, dostali bychom užitím různých metod různé výsledky pro tutéž veličinu (odtud plynou názory, že „mikroobjekty nelze objektivně pozorovat“, ...). Mikroobjekty jsou objektivně plně pozorovatelné (v mezích daných relacemi neurčitosti), ale pro každé měření je třeba vypracovat přesnou teorii měření.

Příklady dokazující platnost relací neurčitosti v mikrosvětě:

1. vybereme-li ze svazku světelných paprsků jeden foton, je možné změřit snadno přesně jeho frekvenci f a tím i jeho energii E a hybnost p , ale ne jeho polohu
2. u elektronu v katodových trubicích - můžeme přesně určit jeho energii a hybnost, ale nikoliv polohu
3. při dopadu elektronu na fluorescenční stínítko lze určit přesně jeho polohu, ale ne energii a hybnost

Schrödingerova rovnice

Schrödingerova rovnice je deterministickou rovnicí, tak jako Newtonovy nebo Einsteinovy pohybové rovnice. Jestliže tedy zadáme hodnotu vlnové funkce v daném časovém okamžiku, dá se přesně předpovědět, jaké hodnoty nabude vlnová funkce v budoucnosti, nebo jakou hodnotu měla v minulosti (viz např. analogii s Newtonovými pohybovými rovnicemi, které popisují pohyb planet ve Sluneční soustavě, ...). Rovnice tedy popisuje chování, které je vůči času zcela vratné.

Představme si určitou vlnovou funkci, která matematicky reprezentuje chování elektronu, na který se zrovna nedíváme. Tato funkce v sobě zahrnuje všechny možnosti, které mohou nastat, když budeme elektron sledovat pomocí nějakého měřícího zařízení (fluorescenční stínítko, ...). To vlastně neznamená nic jiného, než že Schrödingerova rovnice umožňuje předpovědět všechny možné případy vývoje chování elektronu, pokud ho v budoucnosti budeme sledovat. A co je důležitější: dovoluje zpětně určit všechny možné historie chování elektronu, které by při jeho pozorování v minulosti nastaly.

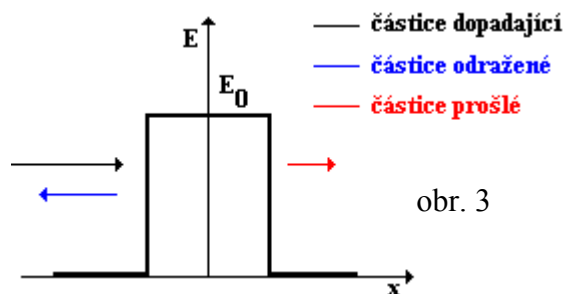
Je přirozené přejít od vlnové funkce, která obsahuje všechny potenciální možnosti vývoje systému, k určení toho, co se skutečně stane při experimentu. Jinými slovy je třeba přejít k samotnému procesu měření. Jestliže provedeme jedno konkrétní měření, elektron bude zaznamenán tak, jako když dopadne právě do jednoho bodu stínítka. Takže časově symetrická vlnová funkce, a tím i samotný systém, projde během procesu měření jistou transformací. Dojde k okamžitému a nespojitému zúžení z jedné formy vlnové funkce, které v sobě obsahovala všechny možnosti dalšího vývoje, na jednu jedinou konkrétní, která odpovídá jedné hodnotě zaznamenané během měření.

Tato transformace, která z hromady pravděpodobných možností vybere jednu, se nazývá **zúžení (kolaps) vlnové funkce**. Ze všech možností vyskočí z „krabičky“ právě jedna, když „zatáhneme“ za vlnovou funkci.

Tunelový jev

Typickým příkladem vlnových vlastností částic je tzv. **tunelový jev**. Uvažujme částici, která má překonat nějakou bariéru - dostat se přes svah, z nějaké (potenciálové) jámy, ... Z klasické fyziky víme, že je to možné pouze tehdy, pokud bude mít částice dostatečně velkou energii. (Např. kmitající kuličky v hladké misce tuto miskou nemohou opustit, pokud nezískají dostatečnou energii k překonání okraje misky.) Vlny se ale na rozdíl od částic mohou dostat díky ohybu i za překážku a pokračovat v dalším šíření prostorem. Mikročástice podle zákonů kvantové fyziky mohou skutečně proniknout bariérou, aniž by k tomu měly dostatečnou energii - mohou se „protunelovat“ a najednou se ocitnou za překážkou.

Uvažujme částici s energií E_1 , která se blíží k potenciálovému valu, jehož „výška“ je $E_0 > E_1$, tj. klasicky je k jeho překonání třeba energie E_0 (schematicky znázorněno na obr.3). Tímto potenciálovým valem ve skutečnosti je např. kovová destička, silové pole, povrch vodiče, „hranice“ atomového jádra, ... Většina částic se od valu odrazí zpět (relativní množství odražených a prošlých částic znázorňují různé dlouhé šipky). V klasické fyzice, by se do prostoru za valem nedostala žádná částice.



obr. 3

V kvantové fyzice existuje nenulová pravděpodobnost nalezení částice za potenciálovým valem. To znamená, že částice se na druhou stranu valu dostala, přestože její energie je nižší, než je energie nutná na překonání potenciálového valu. Částice se na druhou stranu valu „protunelovala“.

Poznámka: Tunelový jev lze přirovnat k situaci, kdy vezmeme malý kámenek a lehce jej hodíme proti skleněnému oknu. V klasické představě se kámenek od skla odrazí a spadne na zem. V kvantovém případě kámenek projde sklem a na druhé straně spadne na podlahu pokoje, aniž by porušil skleněné okno.

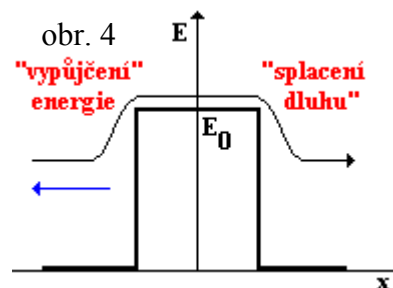
Pro hrubé vysvětlení tunelového jevu je možné si představit, že částice dokáže svoji energii nějakým způsobem měnit, třebaže vždy jen na krátko. K tomuto tvrzení nám dává oprávnění 2. Heisenbergova relace neurčitosti: v mezích hranic stanovených touto relací může velikost energie částice spontánně přeskokovat z jedné hodnoty na druhou. Jinými slovy, částice si na příslušnou pevně stanovenou dobu může energii nutnou na překonání potenciálového valu „vypůjčit“.

Čím kratší je lhůta návratnosti takové půjčky, tím větší je její povolený rozsah.

Poznámka: V rámci relace neurčitosti tedy nemusí platit zákon zachování energie.

Tímto způsobem byla energie částici „půjčena“ za přísných podmínek. Pokud se částice nedokáže dostat na druhou stranu bariéry dříve, než vyprší výpůjční lhůta, bude se muset vrátit zpátky. Takové částice se od bariéry, do které stihly proniknout jen zčásti, jednoduše odrazí. Proces „půjčování“ energie je nahodilý (jako ostatně většina kvantových jevů), takže při interpretaci tunelového jevu je nutné používat statistiku a pravděpodobnost. Obecně platí, že čím je potenciálový val širší, tím méně jsou částice při jeho „protunelování“ úspěšné, tj. tím větší část jejich počtu se od něj odrazí.

Tímto způsobem může docházet v elektrickém poli k emisi elektronů z kovů, přestože energie elektronů je nižší než příslušná výstupní práce. Díky tunelovému jevu vylétají např. částice α z atomových jader, je na něm založena řada polovodičových prvků i citlivých měřících metod. Výklad tunelového jevu je možné provést na základě pravděpodobnosti: než se částice podaří uvolnit se např. z kovu, musí nejprve vykonat řadu neúspěšných pokusů.



obr. 4