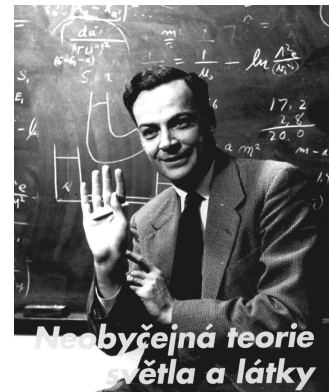


### 3. cvičení ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY

„Where did we get that equation from?  
Nowhere. It is not possible to derive it from anything  
you know. It came out of the mind of Schrödinger.”

Richard Feynman (1918 – 1988)



- Vlnová funkce a Schrödingerova rovnice
- Heisenbergovy relace neurčitosti
- Částice a potenciálová bariéra – tunelování
- Částice v potenciálové jámě – kvantování
- Atom vodíku

Prostudujte: HRW - kap. 39, čl. 7 až 9, a kap. 40 *Více o de Broglieho vlnách* a zodpovězte otázky k této kapitole

#### Z historie

- ⇒ 1925 *Werner Heisenberg*: zrod kvantové mechaniky („Über quantenteoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen“. Zeitschrift für Physik **33** (1925), 879-893)
- ⇒ 1926 *Drei-Männer-Arbeit* – maticová mechanika
- ⇒ 1926 *Erwin Schrödinger*<sup>1</sup>: vlnová mechanika (čtyřdílná sekvence článků „*Quantisierung als Eigenwertproblem*“ a článek „Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen“ v *Annalen der Physik*, )
- ⇒ 1926 *P. M. A. Dirac*: sjednocení maticového a vlnového přístupu v jednotnou kvantovou mechaniku
- ⇒ 1926 *Max Born*: pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce
- ⇒ 1928 *P. M. A. Dirac*: relativistická vlnová rovnice pro elektron (Diracova rovnice)
- ⇒ 1930 první vydání proslulé knihy *P. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon: Oxford)
- ⇒ 1931-1936 diskuse mezi Einsteinem a Bohrem o úplnosti kvantové mechaniky a kvantověmechanickým popisem reality (kanonizace kodaňské interpretace)
- ⇒ 1948 *Richard P. Feynman*: třetí formulace kvantové mechaniky (ekvivalentní maticové a vlnové mechanice) založená na Feynmanových dráhových integrálech

<sup>1</sup> Schrödinger je také autorem knihy *Co je život?* (viz <http://www.vutium.vutbr.cz/aktuality.php> a [http://www.vutbr.cz/uploads/aktuality297/2696\\_prezes.pdf](http://www.vutbr.cz/uploads/aktuality297/2696_prezes.pdf)), která patří nepochybně mezi nejvlivnější vědecké spisy tohoto století. Představuje působivý pokus pochopit některé z podstatných záhad života, pokus fyzika, jehož vlastní hluboké jasnozřivé poznatky se tolik zasloužily o změnu našeho chápání světa.

### Problém č. 1 Schrödingerova rovnice

- a) Dokažte, že pokud potenciál  $V(\mathbf{r})$  nezávisí na čase, lze řešení Schrödingerovy rovnice psát ve tvaru  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i(E/\hbar)t}$ , kde  $\psi(\mathbf{r})$  hová (bezčasové Schrödingerově) rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

- b) Volná částice – postupná vlna: HRW - kap. 39: 72 Ú  
c) Volná částice – stojatá vlna: HRW - kap. 39: 73 Ú

### Problém č. 2 Heisenbergovy relace neurčitosti

S užitím Heisenbergových relací neurčitosti odhadněte

- a) energii základního stavu (tj. stavu s nejnižší energií) částice uvězněné v jednorozměrné schránce s nepropustnými stěnami (hovoříme také o částici uvězněné v pravoúhlé nekonečně hluboké potenciálové jámě),  
b) energii základního stavu lineárního harmonického oscilátoru,  
c) velikost atomu vodíku a energii jeho základního stavu.

O Heisenbergovi viz <http://www.aip.org/history/heisenberg/>

### Problém č. 3 Tunelování

- a) Koeficient průchodu: HRW - kap. 39: 79 Ú, 81 Ú  
b) Pravoúhlá potenciálová bariéra – řešení Schrödingerovy rovnice: HRW - kap. 39: 84 Ú, 85 Ú a také např. <http://physics.fme.vutbr.cz/files/opory/pdf/QM/QM.pdf>

### Problém č. 4 Elektronové pasti

- a) 1D: HRW - kap. 40: 13 Ú  
b) 2D: HRW - kap. 40: 24 Ú  
c) Řešení Schrödingerovy rovnice pro pravoúhlé potenciálové jámy (viz např. <http://physics.fme.vutbr.cz/files/opory/pdf/QM/QM.pdf>)

Problém č. 5 Atom vodíku

- a) **Rydbergova konstanta.** Roku 1889 ukázal J. R. Rydberg, že spektrum vodíku může být popsáno empirickým vztahem

$$\bar{\nu} = R_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m, \quad n, m = 1, 2, \dots,$$

kde  $\bar{\nu} = 1/\lambda$  je vlnčet a  $R_H$  je Rydbergova konstanta, kterou lze vzhledem k možnostem optické spektroskopie stanovit s vysokou přesností.

Ukažte, že Rydbergův vztah plyne z kvantové teorie atomu vodíku, a vypočítejte hodnotu Rydbergovy konstanty. Vypočtenou hodnotu srovnajte se současnou nejpřesnější hodnotou této konstanty (viz <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>).

- b) Energiové spektrum: HRW – kap. 40: 31C, 35 C, 42 Ú, 45 Ú
- c) Vlnové funkce: HRW – kap. 40: 48 Ú, 50 Ú, 57 Ú
- d) **Izotopický efekt.** Jak se budou lišit vlnové délky čar  $H_\alpha$  Balmerovy série vodíku a tritia?

Problém č. 6 Lineární harmonický oscilátor

(viz např. <http://physics.fme.vutbr.cz/files/opory/pdf/QM/QM.pdf>)

- a) *Klasický HO*

Ukažte, že pravděpodobnost výskytu *klasické* částice o energii  $E$  v parabolickém potenciálovém poli

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

je rovna

$$w_{\text{klas}}(x) = \frac{1}{\pi A} \frac{1}{\sqrt{1 - (x/A)^2}},$$

kde  $A = \sqrt{2E/m\omega^2}$ .

- b) *Kvantový HO*

Ukažte, že funkce  $\varphi_0(x) = A_0 \exp(-\alpha x^2)$  je vlastní funkce hamiltoniánu HO, a přitom najděte odpovídající vlastní hodnotu energie a konstanty  $\alpha$  a  $A_0$ .

Dodatek k 3. cvičení Dvouladlinová soustava