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 by ale měla existovat mezi klasickou fyzikou a kvantovou fyzikou souvislost. A ta skutečně existuje. Budeme-li přecházet od částic k makroskopickým tělesům, budou se vlnové délky de Broglieových vln a Planckova konstanta h jevit nekonečně malé a zákony kvantové fyziky by měly přecházet v zákony klasické mechaniky. Tak tomu skutečně je a tento přechod se nazývá **princip korespondence**.

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.

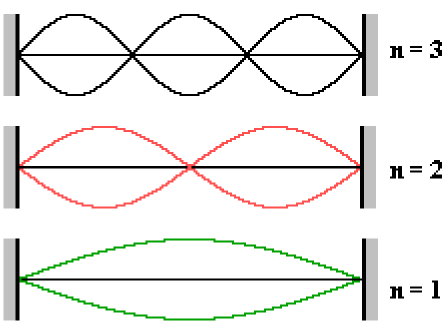
Uvažujme volnou částici, která se bude pohybovat podél osy x podle Newtonova zákona setrvačnosti rovnoměrným přímočarým pohybem. Podle de Broglieovy hypotézy lze na tuto částice pohlížet jako na nekonečnou rovinnou vlnu. Částici nyní uzavřeme mezi dvěma rovnoběžnými, nekonečně vysokými stěnami kolmými k ose x a vzdálenými o délku L, od nichž se může částice pružně odrážet. Říkáme, že částice se nachází uvnitř nekonečně hluboké potenciálové jámy a její pohyb je vázán na úsečku.

Stěny musí být „nekonečně vysoké“, jinak by se částice „protunelovala“ ven - nastal by tunelový jev.

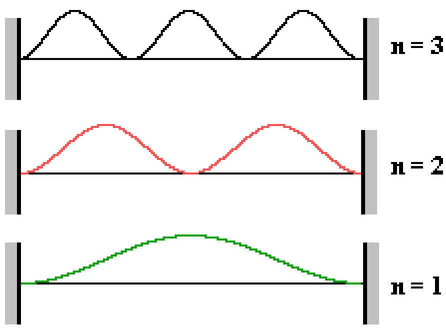
Z hlediska klasické fyziky může mít taková částice libovolnou rychlost a energii. Při pružných odrazech se její energie nebude měnit a částice se bude pohybovat rychlostí o téže velikosti střídavě oběma směry. „Pravděpodobnost výskytu“ této klasické částice bude stejná ve všech bodech úsečky.

Jinými slovy: z hlediska klasické fyziky neexistují na uvažované úsečce žádné privilegované body, v nichž by se měla částice vyskytovat častěji (resp. méně častěji) než v ostatních bodech.

Z hlediska vlnového charakteru částic bude situace jiná. Po odrazech částice na stěnách potenciálové jámy vznikne stojaté vlnění na základě interference odraženého a přímého vlnění.



Obr. 21



Obr. 22

Situace je analogická vzniku vlny na napnuté struně u kytary. Struna přitom ale nemůže kmitat jakkoliv, ale jen tak, aby se po celé délce struny rozložil celočíselný počet půlvln; v místech upevnění struny jsou přitom uzly vzniklého stojatého vlnění.

Musí tedy platit: $L = n\frac{\lambda_n}{2}; n \in \mathbb{N}$ a tedy $\lambda_n = \frac{2L}{n}$. Struna se tedy nachází v kmitavých stavech, které jsou charakterizovány určitou frekvencí a rozložením kmiten a uzlů podél struny (viz obr. 21).

Analogicky se bude chovat elektron jakožto objekt mikrosvěta. Elektron vázaný na úsečku se bude nacházet jen v určitých stavech charakterizovaných celými čísly *n*. V každém takovém stavu bude mít 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. 22.

Určit energii E_n a pravděpodobnosti výskytu částice je možné pouze řešením příslušné kvantově mechanické rovnice. Ukazuje se ale, že správné hodnoty energie je možné dostat i tehdy, použijeme-li výraz pro de Broglieho vlnovou délku $\lambda = \frac{h}{mv}$ platnou pro volně se pohybující částici. Kinetická energie částice pak bude $E = \frac{1}{2}mv^2$. Vyjádříme-li ze vztahu pro vlnovou délku velikost rychlosti *v* a dosadíme-li do vztahu pro energii, dostaneme $E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$. Dosadíme-li za vlnovou délku podmínku udávající rozložení kmiten a uzlů stojatého vlnění, dostaneme pro možné hodnoty energie vztah $E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$.

Vzhledem k tomu, že uvažujeme volnou částici (tj. částici, na kterou nepůsobí žádné vnější síly), je potenciální energie částice nulová. Proto má veškerá energie částice formu kinetické energie.

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*. V **základním stavu** pro $n = 1$ je energie částice, jejíž pohyb je vázán na úsečku délky *L*, rovna $E = \frac{h^2}{8mL^2}$. S rostoucím *n* se pak energetické hladiny od sebe vzdalují. Vyšší stavy než základní stav se nazývají **vzbuzené stavy** (**excitované stavy**).

Na rozdíl od pohybu klasického tělesa (kulička, pingpongový míček, ...) budou na úsečce místa, kde bude výskyt částice nejpravděpodobnější, kde se bude těleso „zdržovat nejvíce“. Tato místa odpovídají polohám 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 na dně nekonečně hluboké potenciálové jámy (obr. 22) se během času nemění - je **stacionární** a částice neztrácí žádnou energii.

Analogicky je v čase stálé rozložení kmiten a uzlů na kmitající struně. V makrosvětě je ovšem každý pohyb vždy postupně utlumen třením a odporem prostředí, a proto např. rozkmitaná struna brzy dozní.

Částice mikrosvěta 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 rozdílu energetických hladin. Přechází-li částice z kvantového stavu s energií E_n do kvantového stavu s nižší energií E_m vyzáří, pohltí 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 elektrostatických sil, jaderných sil, ...) tím, že řeší vlnovou tzv. **Schrödingerovu rovnici** (pojmenovaná podle rakouského fyzika Erwina Rudolfa Josefa Alexandera Schrödingera (1887 - 1961, Nobelova cena za fyziku z roku 1933)). Pomocí této rovnice je možné určit vlnové funkce a pravděpodobnosti výskytu částice v prostoru. Tato rovnice má řešení právě jen pro určité hodnoty energie (tzv. 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.

Budeme-li zvětšovat délku úsečky *L*, po níž se částice pohybuje mezi dvěma rovnoběžnými nekonečně vysokými stěnami kolmými k ose *x*, energie daného stavu bude klesat v souladu se vztahem $E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$ a rozdíly mezi sousedními energetickými hladinami se budou zmenšovat. Pro nekonečné *L* bude již částice volná a její energie přestane být kvantována.

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 $10^{-10}\ \mathrm{m}$ odpovídají energie v řádech elektronvoltů, jádrům s rozměry $10^{-15}\ \mathrm{m}$ energie v řádech megaelektronvoltů, částicím s ještě menšími rozměry pak energie v řádech gigaelektronvoltů.

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