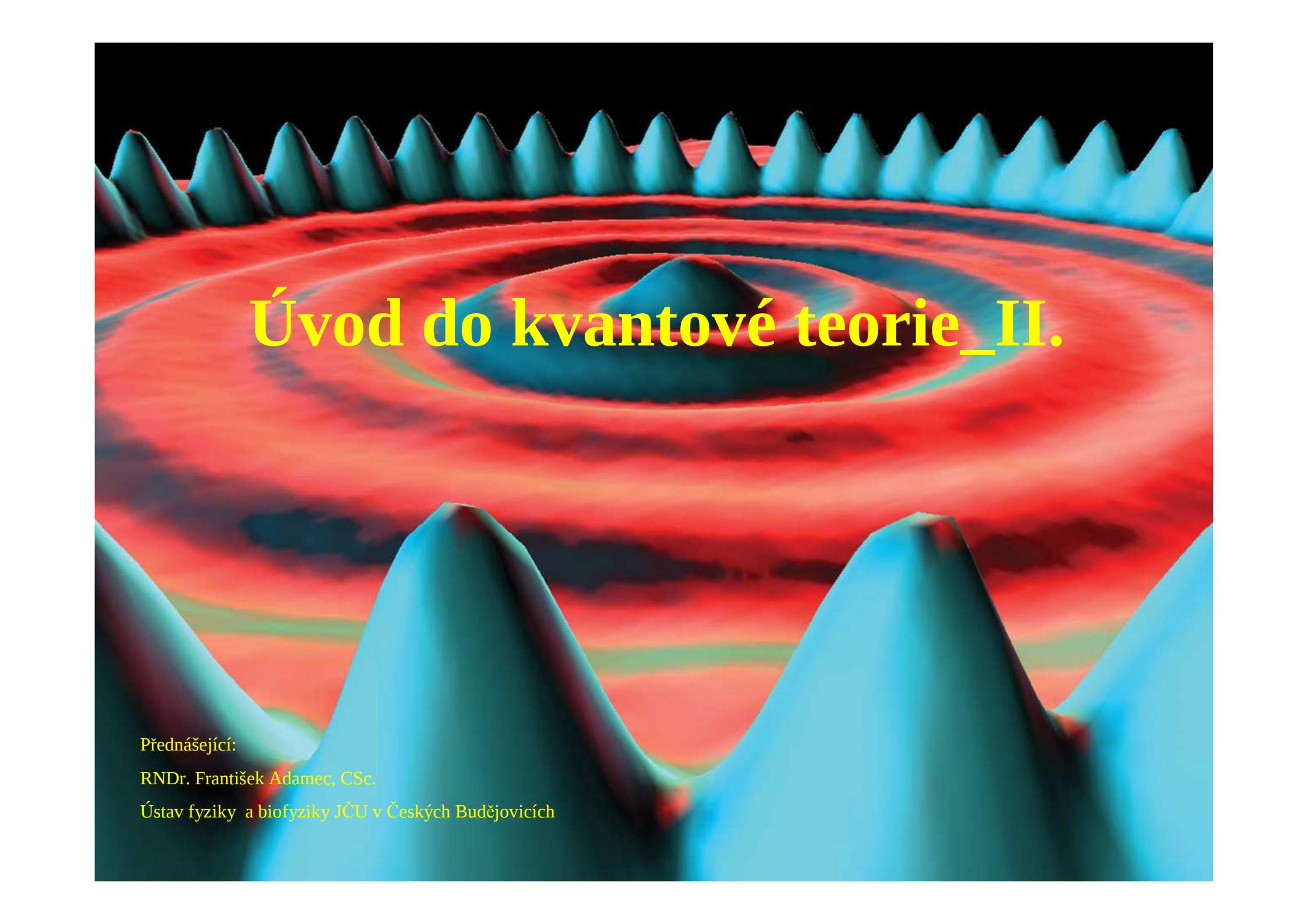


The background image is a 3D visualization of a quantum potential landscape. It features a central, deep blue well surrounded by concentric red and orange rings. In the foreground and background, there are several sharp, blue, conical peaks. The overall color scheme is dominated by reds, oranges, and blues, set against a black background.

Úvod do kvantové teorie_II.

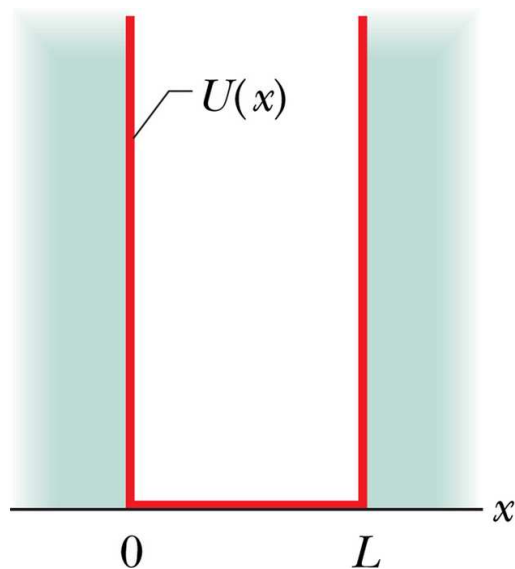
Přednášející:

RNDr. František Adamec, CSc.

Ústav fyziky a biofyziky JČU v Českých Budějovicích

Částice v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě.

Hledáme stacionární stavy částice o hmotnosti m pohybující se v potenciálovém poli pravoúhlé potenciálové jámy.



$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{všude jinde} \end{cases}$$

Všechny stacionární stavy pohybu hmotné částice najdeme vyřešením [S. rovnice](#):

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right\} \psi = 0$$

Uvažujeme-li energii od dna potenciálové jámy, pak jsou všechny hodnoty energie $E \leq 0$. Zavedeme označení:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Pak zapíšeme rovnici pro stacionární stavy :

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi = 0, \quad 0 \leq x \leq L$$

Vlastní rovnice: $\lambda^2 + k^2 = 0$

Řešení vlastní rovnice: $\lambda = \pm ik$

Obecné řešení [S. rovnice](#) pak píšeme ve tvaru:

$$\psi_I(x) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}$$

Vlnová funkce musí být všude spojitá, to znamená že vzhledem k platnosti:

$$\psi(x) = 0, \quad x < 0 \text{ a } x > L$$

musí vlnová funkce na okrajích jámy splňovat okrajové podmínky:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0$$

První podmínku splníme tak, že položíme: $A = -B$

To znamená, že vlnová funkce bude mít tvar (N je normovací konstanta):

$$\psi(x) = N \sin(kx)$$

Druhá podmínka bude spěna je-li: $kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

n je přirozené číslo - kvantové číslo, Vlnový vektor je tedy může nabývat pouze diskrétních hodnot:

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Energie E částice v nekonečné potenciálové jámě jsou diskrétní a jejich hodnoty jsou dány vztahem:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Vlnové funkce příslušné energiím E_n jsou dány vztahem:

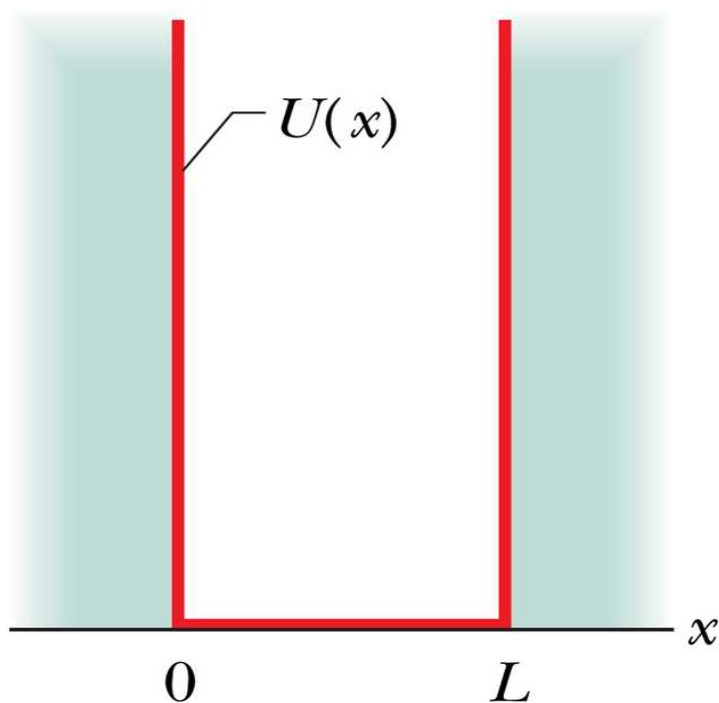
$$\psi_n(x) = N \sin\left(\frac{\pi x}{L} n\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Normovací konstantu N určíme z podmínky:

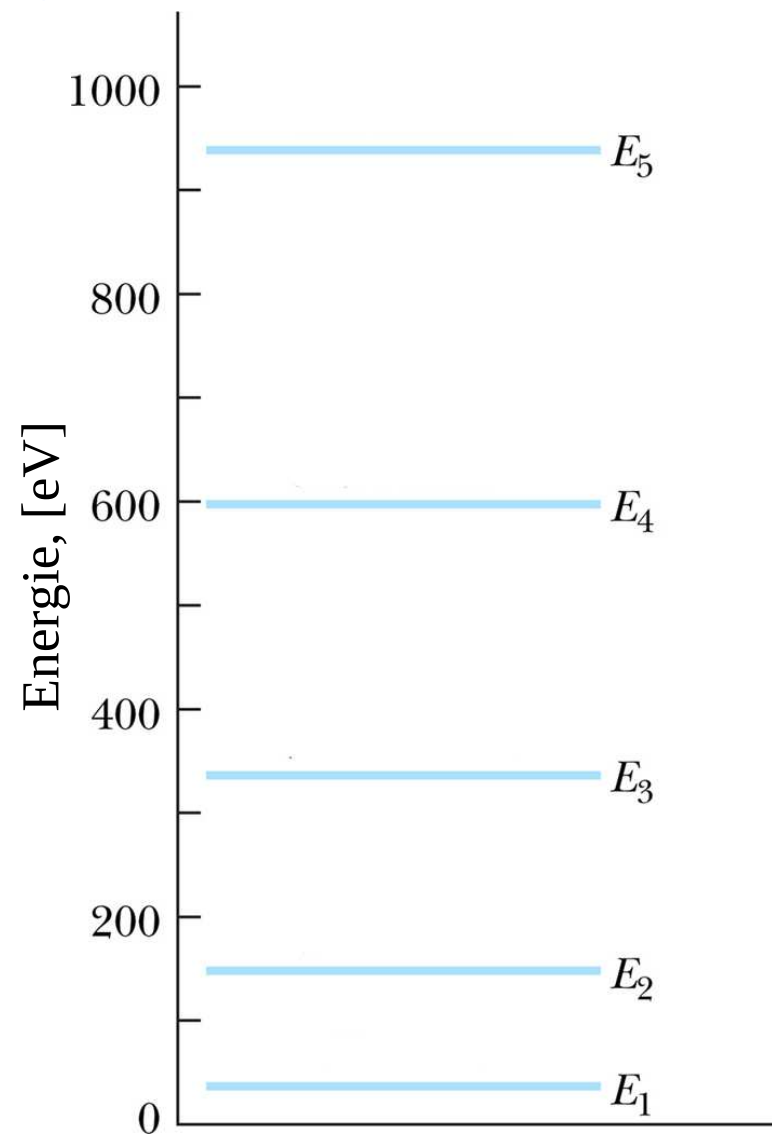
$$\int |N|^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{L} n\right) dx = 1 \quad \rightarrow \quad N = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\alpha}$$

Vlnová funkce je tedy určena s přesností na fázový faktor $\exp(i\alpha)$, který obvykle pokládáme rovný 1.

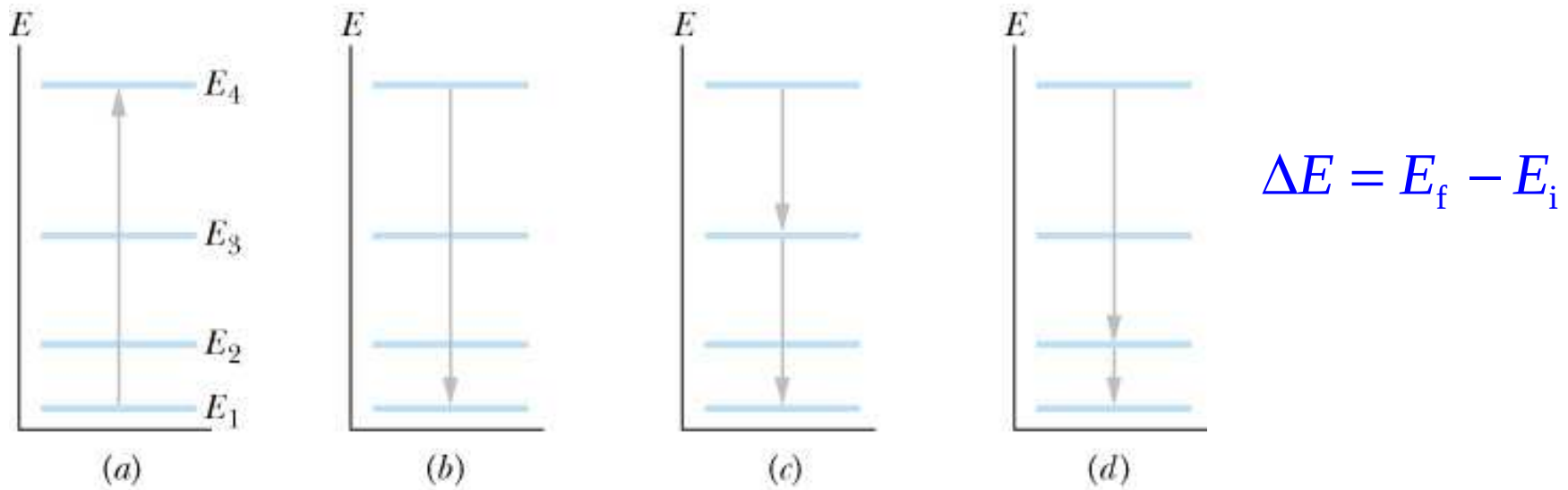
Energie elektronu v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě.



$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



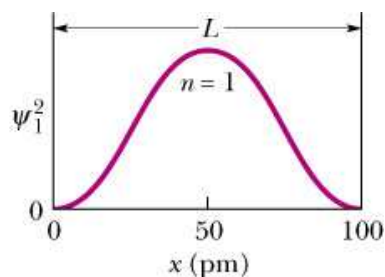
Změna energie elektronu v potenciálové jámě.



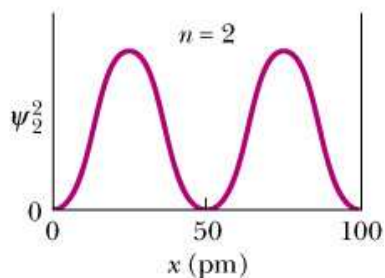
Elektron v potenciálové jámě může absorbovat energii fotonu, je-li energie fotonu $h\nu = \Delta E$, rozdíl energií je dán rozdílem energií konečného a výchozího stavu:

$$h\nu = \Delta E = E_f - E_i$$

Vlnové funkce částice v potenciálové jámě.

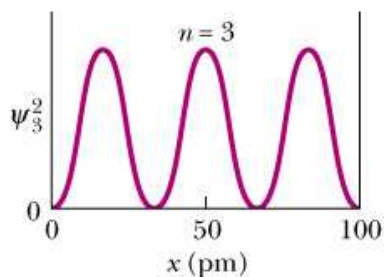


$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n=1, 2, 3, \dots$$

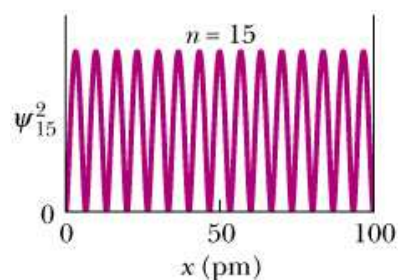


Měříme pouze pravděpodobnosti:

$$\left(\begin{array}{c} \text{pravděpodobnost } P(x) \\ \text{výskytu v } dx \\ \text{se středem v } x \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{hustota pravděpodobnosti } |\psi_n(x)|^2 \\ \text{v poloze } x \end{array} \right) dx$$



$$P(x) = |\psi_n(x)|^2 dx$$

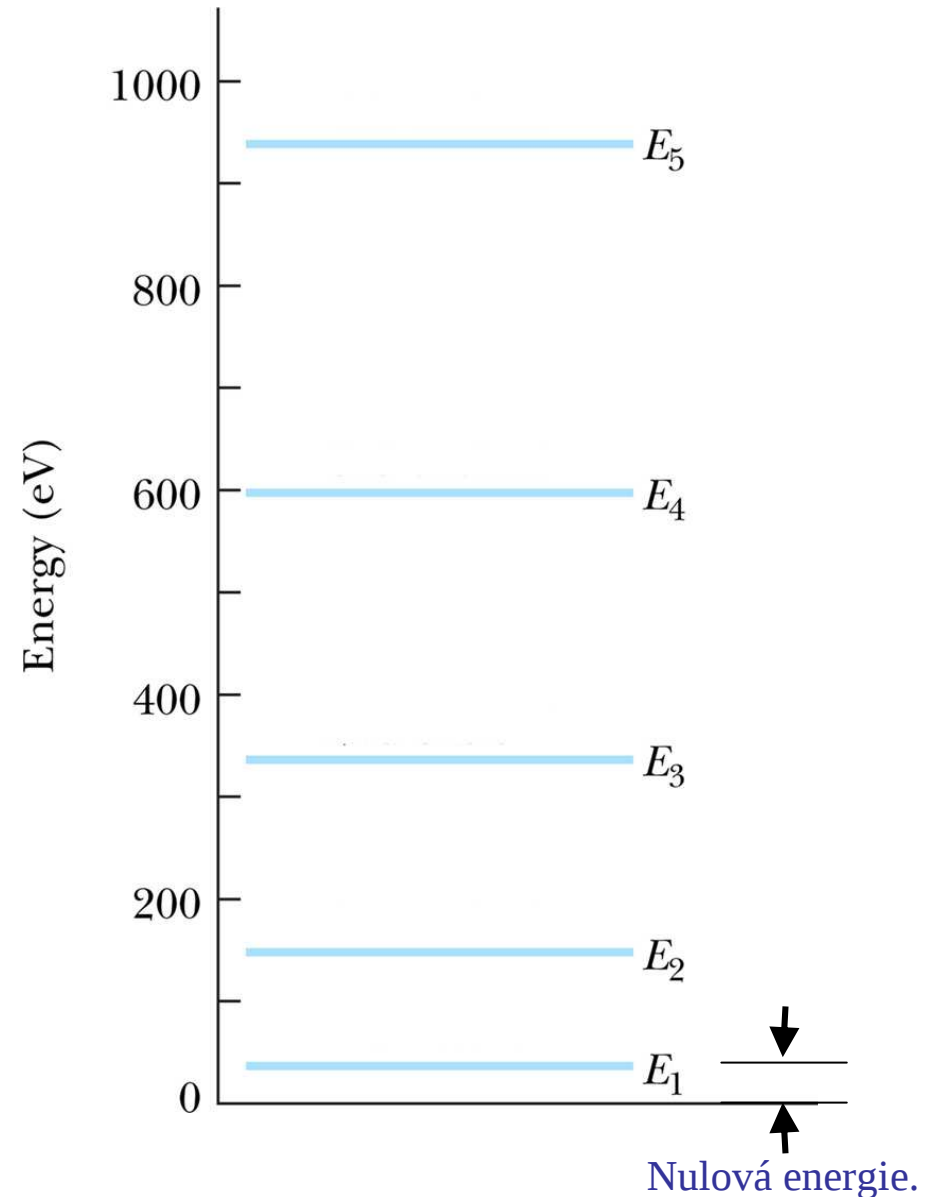


$$|\psi_n(x)|^2 = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad n=1, 2, 3, \dots$$

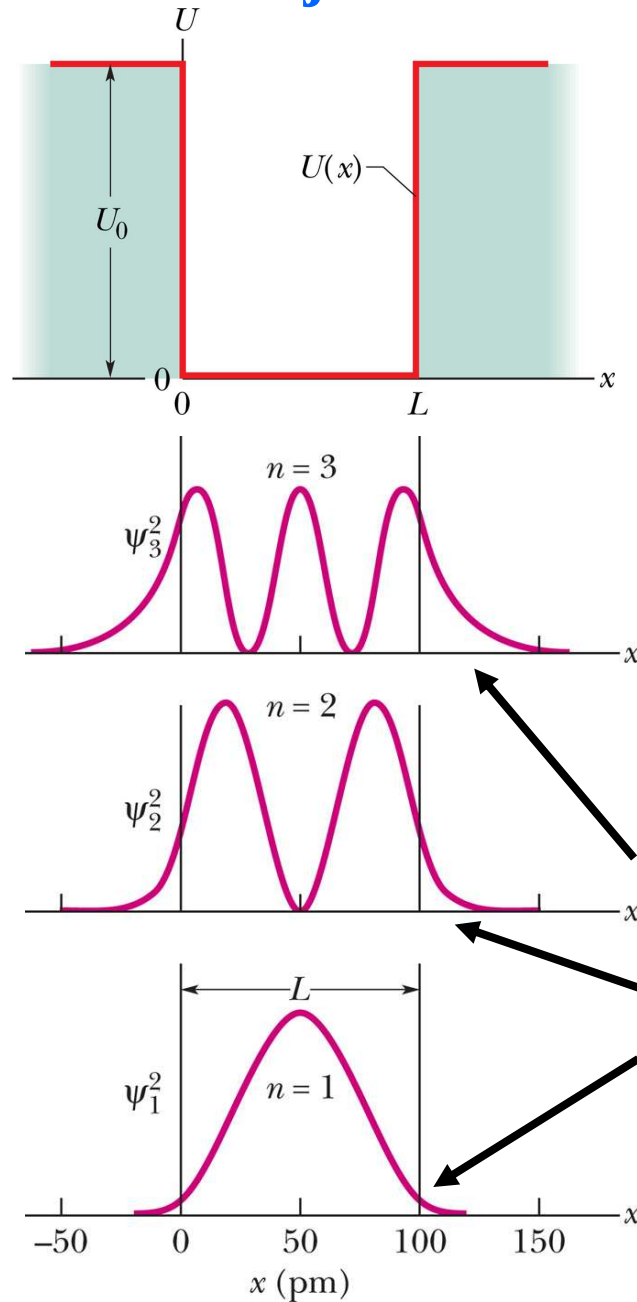
Nulová energie.

Nulová energie: V kvantové jámě je nejnižším kvantovým stavem $n = 1$ ($n = 0$ znamená to, že zde není elektron), tedy nejnižší energie (energie základního stavu) je E_1 , která je nenulová.

- částice omezená potenciálovou jámou musí mít vždy minimální určité nenulové množství energie!
- jelikož je potenciální energie částice v jámě nulová, znamená to, že veškerá nulová energie je kinetickou energií.
- částice v potenciálové jámě není nikdy v klidu.



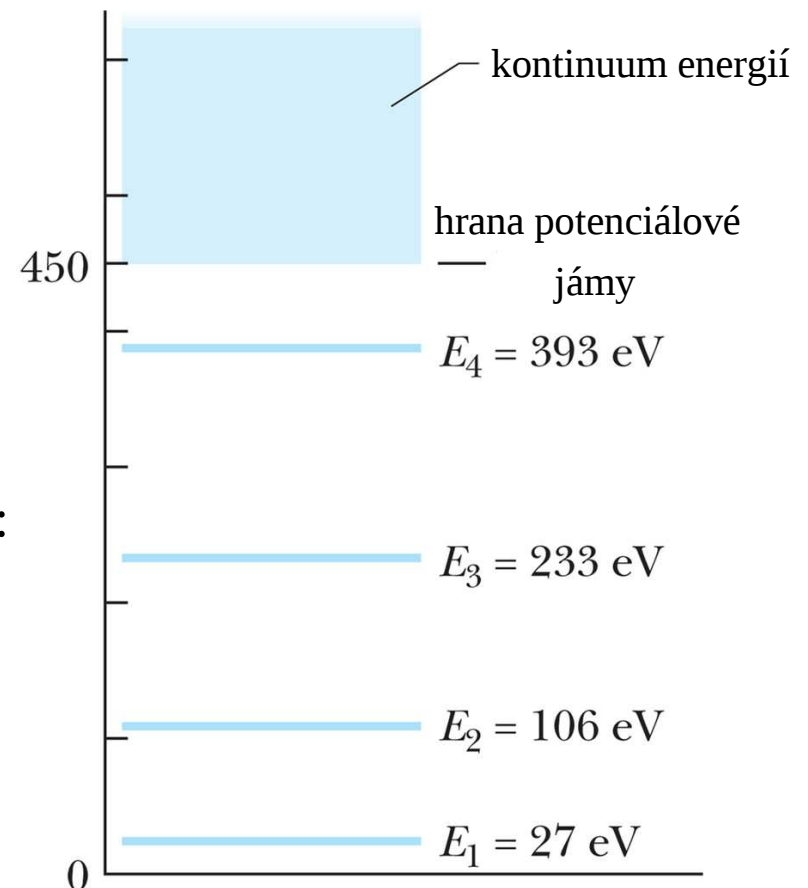
Částice v jednorozměrné potenciálové jámě konečné hloubky.



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)] \psi = 0$$

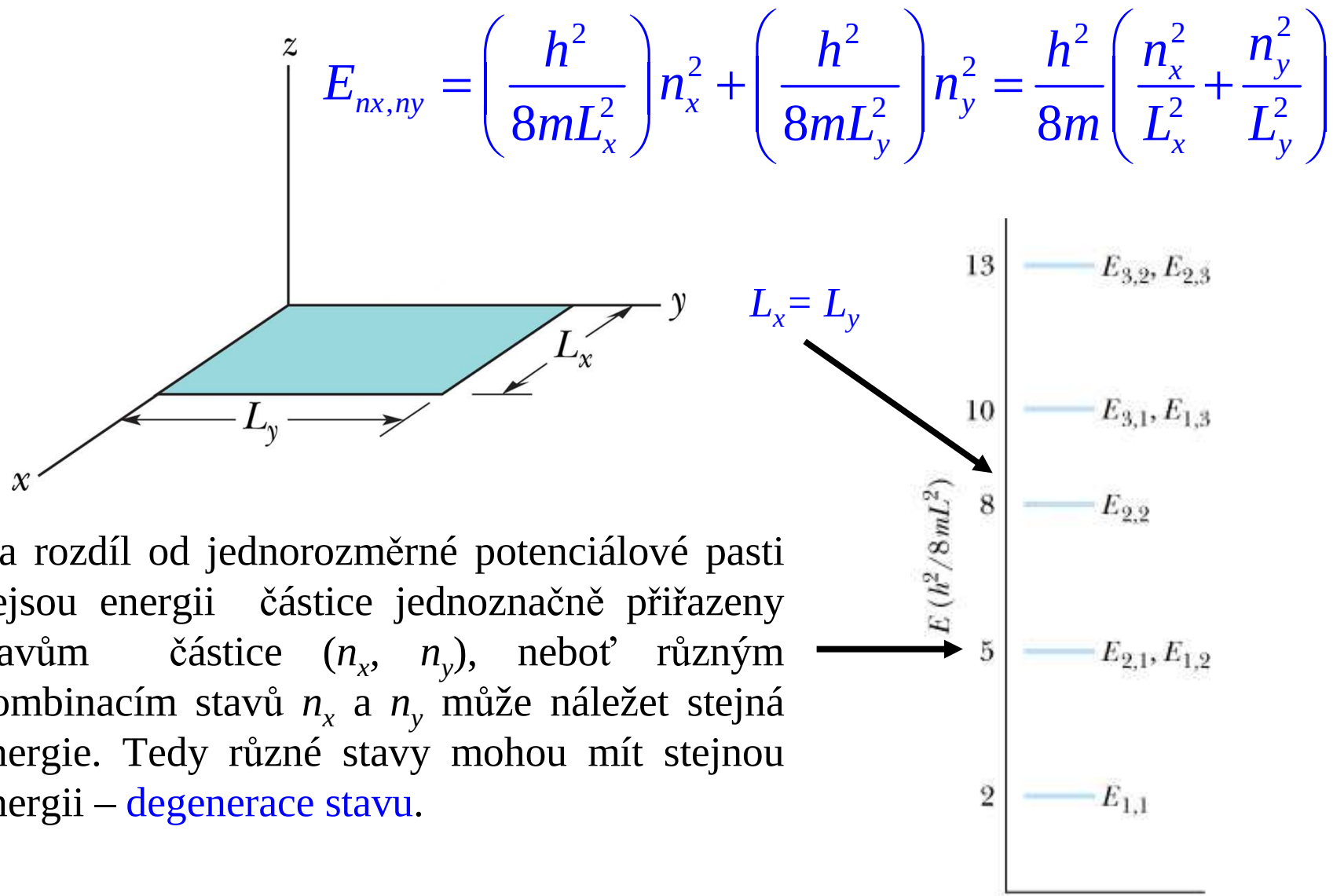
Průnik bariérou:

$$\psi(|x| \geq L)$$



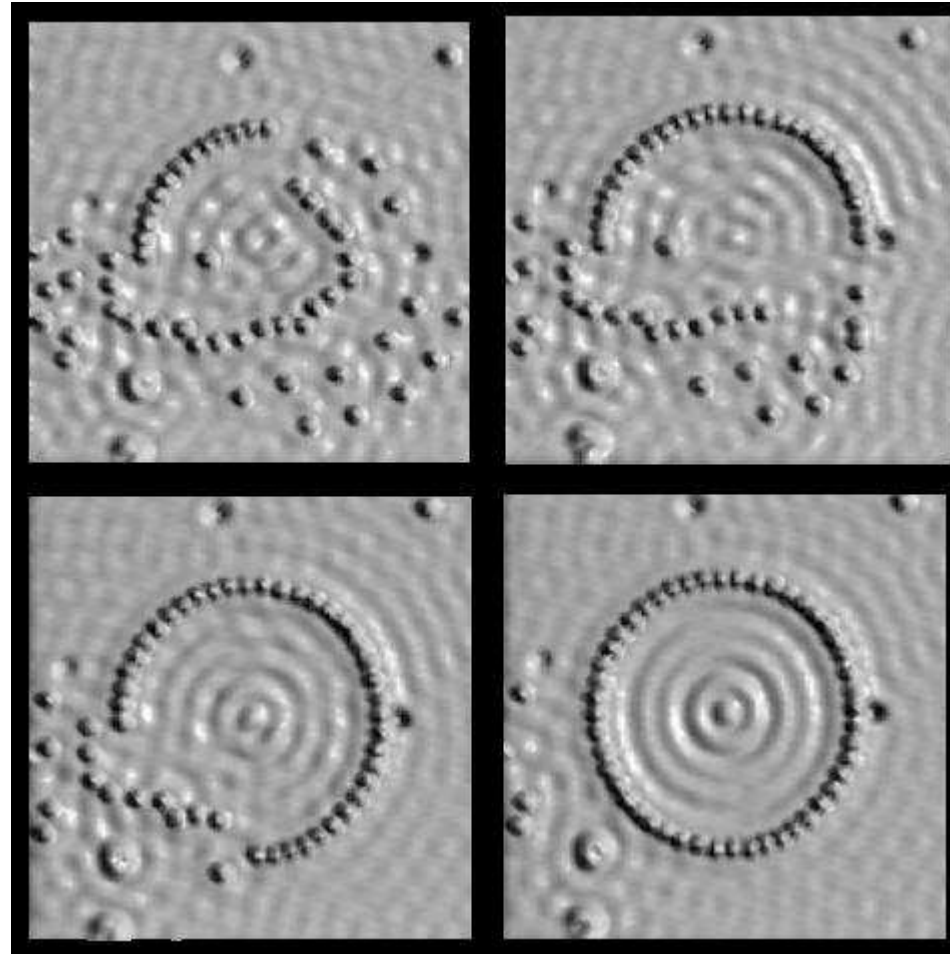
Dvou dimenzionální potenciálová bariéra.

Nekonečná potenciálová bariéra ve směru os x a y.



Na rozdíl od jednorozměrné potenciálové pasti nejsou energii částice jednoznačně přiřazeny stavům částice (n_x, n_y) , neboť různým kombinacím stavů n_x a n_y může náležet stejná energie. Tedy různé stavy mohou mít stejnou energii – **degenerace stavu**.

**Elektron zachycený v 2D potenciálové jámě vytvořené
bariérrou železných atomů na povrchu měďného krystalu.**



M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler, Confinement of Electrons to Quantum Corrals on a Metal Surface: Science, Vol.:262, 1993, 219-220.

Harmonický oscilátor.

Potenciální energie harmonického oscilátoru v okolí minima $x = x_0$ rozvineme v mocninou řadu.

$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{dV(x)}{dx} \right)_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V(x)}{dx^2} \right)_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots$$

Jelikož v minimu je první derivace rovna nule, pak vztahujeme-li změny potenciální energie k energii minima $V(x_0)$ a bereme-li v úvahu člen druhého řádu dostaneme potenciální energii ve tvaru:

$$V(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V(x)}{dx^2} \right)_{x=x_0} (x - x_0)^2$$

Dosazením dostaneme [S. rovnici](#) pro lineární harmonický oscilátor:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\} \psi(x) = E \psi(x)$$

Zaved'me proměnné: $\xi = \frac{x}{x_0}$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

Dosazením proměnných do [S. rovnice](#) dostaneme:
$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0$$

Prozkoumejme, jaké je asymptotické chování vlnové funkce pro $\xi \rightarrow \pm \infty$, to znamená, že můžeme zanedbat člen λ . Řešením asymptotické [S. rovnice](#)

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = 0$$

je vlnová funkce:
$$\psi(\xi) = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{\frac{\xi^2}{2}}$$

kde A a B jsou libovolné konstanty.

Exponenciála při koeficientu B roste pro $\xi \rightarrow \pm \infty$ nade všechny meze a vlnovou funkci v tomto tvaru nelze normovat. Bez ohledu na energii E se asymptoticky chová pouze první člen vlnové funkce:

$$\psi(\xi) = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Obecné řešení *S. rovnice* hledáme ve tvaru: $\psi(\xi) = v(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Hledejme neznámou funkci $v(\xi)$. Dosazením vlnové funkce do *S. rovnice* dostaneme rovnici pro hledanou funkci $v(\xi)$:

$$(*) \quad \frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1)v(\xi) = 0$$

Funkci $v(\xi)$ budeme hledat ve tvaru mocninné řady: $v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$

Spočtěme první a druhou derivaci funkce $v(\xi)$:

$$v'(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k \xi^{k-1} \quad v''(\xi) = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) \xi^{k-2}$$

Po dosazení do rovnice (*) a úpravě získáme vztah:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (\lambda - 1)a_k] \xi^k = 0$$

Tento vztah musí platit pro všechny ξ , to znamená, že výraz v závorce se musí rovnat nule. Z výrazu v závorce pak získáme vztah:

$$a_{k+2} = \frac{2k + (\lambda - 1)}{(k + 2)(k + 1)} a_k$$

Zvolíme-li $a_0 = 1, a_1 = 0$ je odpovídající funkce sudá, naopak zvolíme-li $a_0 = 0, a_1 = 1$ pak je odpovídající funkce lichá, obě funkce jsou však **S. rovnice**. Vlnová funkce musí splňovat podmínky:

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \psi(x) = \lim_{\xi \rightarrow \pm \infty} \psi(\xi) = 0$$

Řada $\nu(\xi)$ se pro velká ξ chová jako funkce $\exp(\xi)^2$, která je divergentní. Což znamená, že i vlnová funkce pro $\xi \rightarrow \pm \infty$ diverguje. Funkce $\nu(\xi)$ tedy nemůže být ve tvaru nekonečné řady, ale musíme předpokládat, že funkce $\nu(\xi)$ je ve tvaru polynomu, tj. že od určitého indexu n platí $a_{n+2} = 0$. To znamená, že doposud libovolné λ musí nyní splňovat podmínku:

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Z podmínky pro hodnoty λ vyplývá kvantování energie harmonického oscilátoru:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Polynomy $\nu(\xi)$ se zapisují ve tvaru tzv. **Hermitových polynomů**:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

Hermitovy polynomy jsou ortogonální polynomy. Vlnové funkce splňují normovací podmínku a mají tvar:

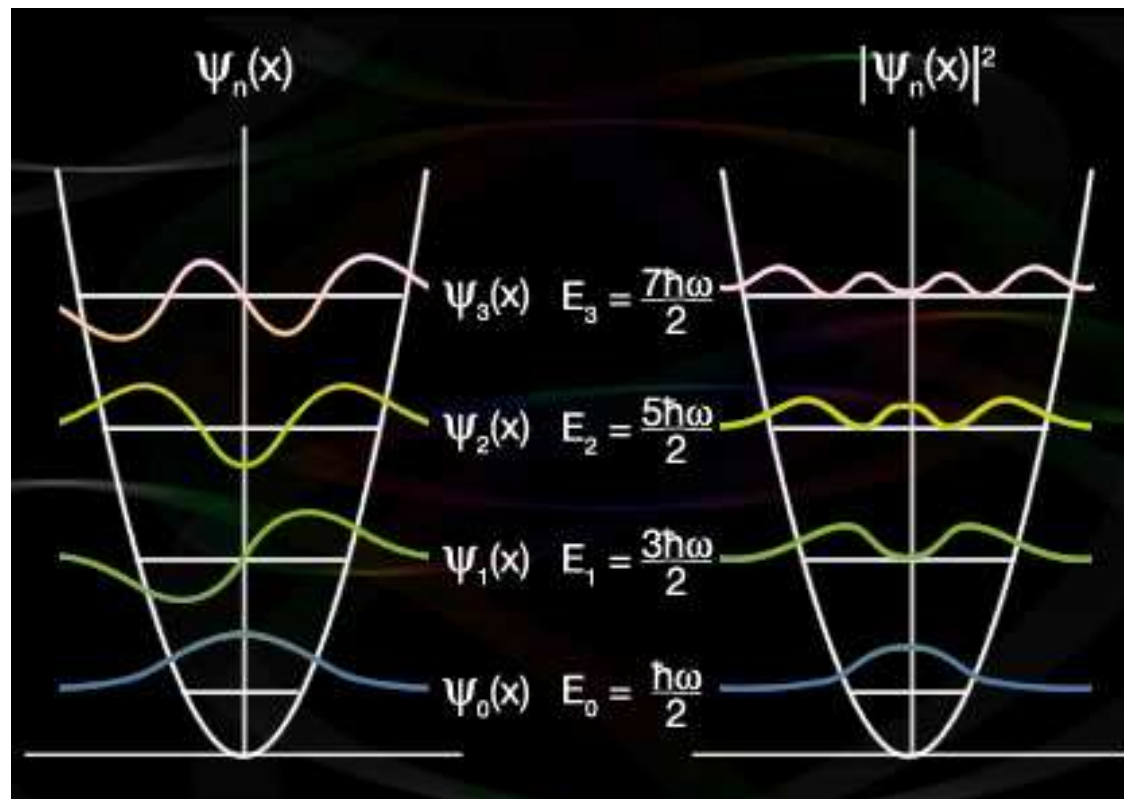
$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

kde $\xi = x/x_0$. Energie základního stavu, (pro $n = 0$), je nenulová:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Nenulová hodnota základního stavu je podstatným rozdílem oproti klasickému oscilátoru který může mít nulovou energii v minimu potenciální energie $U(x)$. Nenulovost energie oscilátoru v základním stavu souvisí s relacemi neurčitosti, podle které je v základním stavu při prostorovém omezení pohybu nenulová hodnota impulsu a tedy i energie.

Energie oscilátoru jsou ekvidistantní a mají charakter vázaných stavů, pro něž je částice lokalizována v prostoru. Energetické spektrum je v jednorozměrném případě nedegenerované.



Vodíku podobný atom.

Vodíku podobným atomem rozumíme atom v němž se elektron o náboji $-e$ a hmotnosti m_e pohybuje v centrálním poli atomového jádra o náboji Ze , kde $Z = 1, 2, \dots$. Hamiltonův operátor vodíku podobného atomu je dán vztahem:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

Coulombovský potenciální závisí pouze na souřadnici r (jde o pohyb v centrálním poli) a je proto vhodné použít Hamiltonián vyjádřený ve sférických souřadnicích (r, θ, φ) :

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{\theta, \varphi}}{r^2} \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

kde

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

To znamená, že stavy vodíku podobného atomu lze klasifikovat podle kvantových čísel l a m charakterizující stavy kvadrátu impuls momentu a z-ové složky impulsu.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

Hamiltonián vytváří společně s operátory kvadrátu impuls momentu a jeho z-ové komponenty navzájem komutují. To znamená, že mají společný systém vlastních funkcí:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta \varphi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Operátory kvadrátu impuls momentu a z – ové komponenty impulsu nezávisí na proměnné r . Vlnové funkce potom separujeme na část radiální a část závislou na úhlových souřadnicích (θ, φ) :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$R(r)$ je radiální část vlnové funkce, dosud neurčená, vlnové funkce $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ jsou vlastní funkce operátoru kvadrátu impuls momentu a operátoru průmětu impuls momentu do směru osy z :

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m = -l, \dots, l$$

Dosazením do $S.$ rovnice získáme $S.$ rovnici pro neznámou radiální část vlnové funkce $R(r)$:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} R = ER$$

kde E je vlastní energie. $S.$ rovnici zjednodušíme rovnicí zavedením následující proměnné:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} u(r) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} u(r) = Eu(r)$$

Zavedeme následující jednotku, které nám umožní další významné zjednodušení předchozí rovnice. Vzdálenost budeme vyjadřovat v bezrozměrných jednotkách (a_B je [Bohrův poloměr](#)):

$$\rho = \frac{r}{a_B}, \quad a_B = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Energii budeme vyjadřovat pomocí bezrozměrné veličiny ϵ ([Ry](#) je [1 Rydberg](#)):

$$\epsilon = \frac{E}{Ry}, \quad Ry = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_B}$$

Výsledná rovnice jejíž řešení hledáme má tvar:

$$\frac{d^2 u(r)}{d\rho^2} + \left[\epsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(r) = 0$$

Nejprve najdeme asymptotické řešení pro $r \rightarrow \infty$ tj. $\rho \rightarrow \infty$. Rovnice přejde na tvar:

$$\frac{d^2 u(r)}{d\rho^2} + \epsilon u(r) = 0$$

Řešení splňující podmínku $u \rightarrow 0$ pro $\rho \rightarrow 0$ zapíšeme ve tvaru:

$$u(\rho) = \text{const } e^{-\alpha\rho}, \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon}$$

Obecné řešení na celém intervalu hodnot $0 < \rho < \infty$ zapíšeme ve tvaru:

$$u(\rho) = f(\rho)e^{-\alpha\rho}, \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon}$$

Dosazení do $S.$ rovnice dostaneme rovnici pro neznámou funkci $f(\rho)$

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left[\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f = 0$$

Funkci $f(\rho)$ hledáme ve tvaru mocninné řady:

$$f(\rho) = \rho^\gamma \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$$

Konstantu γ najdeme z požadavku na konečnost funkce f pro $\rho \rightarrow 0$: $\gamma = l + 1$

Pak dostaneme pro funkci f vztah: $f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu}$

Dosazením do rovnice: $\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left[\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f = 0$

dostaneme:

$$\sum [a_{\nu+1}((\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1) + a_{\nu}(2Z - 2\alpha(\nu+l+1))) \rho^{\nu+l} = 0$$

Z této rovnice pak určíme vztah pro koeficienty řady.

$$a_{\nu+1} = \frac{2\alpha(\nu+l+1) - 2Z}{(\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)} a_{\nu}, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Řada s uvedenými koeficienty je divergentní. Z požadavku na konvergenci radiální část vlnové funkce vyplývá, že musíme požadovat, aby koeficienty od určitého indexu byly nulové, tedy, aby řada přešla v polynom.

Koeficienty budou od jistého indexu nulové, pokud bude pro čítelel ve vztahu pro koeficienty řady platit:

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2Z, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

Tato podmínka je kvantovací podmínkou pro přípustné hodnoty energie.

$$\alpha = \frac{Z}{(n_r + l + 1)}$$

Namísto n_r zavedeme hlavní kvantové číslo n vztahem:

$$n = n_r + l + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Pro povolené hodnoty energie stacionárních stavů vodíku podobného atomu dostaneme vztah:

$$E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Energie stavů jsou záporné, to znamená, že k ionizaci atomu je třeba dodat energii.

Pro hodnoty orbitálního kvantového čísla l platí: $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

Magnetické kvantové číslo m může nabývat hodnot: $m = -l, \dots, l$

Energie základního stavu E_1 není degenerovaná, vyšší energie E_n , $n > 2$, jsou degenerované, přísluší jim stavové funkce s různými hodnotami kvantových čísel l a m . Degenerace hladiny E_n je dána vztahem

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Dosazením vztahů pro kvantové číslo n a pro α do vztahu pro koeficienty řady dostaneme pro koeficienty vztah:

$$a_{\nu+1} = -\frac{2Z}{n} \frac{n-(\nu+l+1)}{(2l+\nu+2)(\nu+1)} a_{\nu}, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

Dosazením do rozvoje funkce $f(\rho)$ získáme vztah pro radiální část vlnové funkce:

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \quad \xi = \frac{2Z\rho}{n} = \frac{2Zr}{na_B}$$

Funkce $L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$ jsou tak zvané přidružené Laguerrovy polynomy.

Celkové vlnové funkce vázaných stavů jsou dány vztahem:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Tyto funkce pro:

$$n = 1, 2, \dots$$

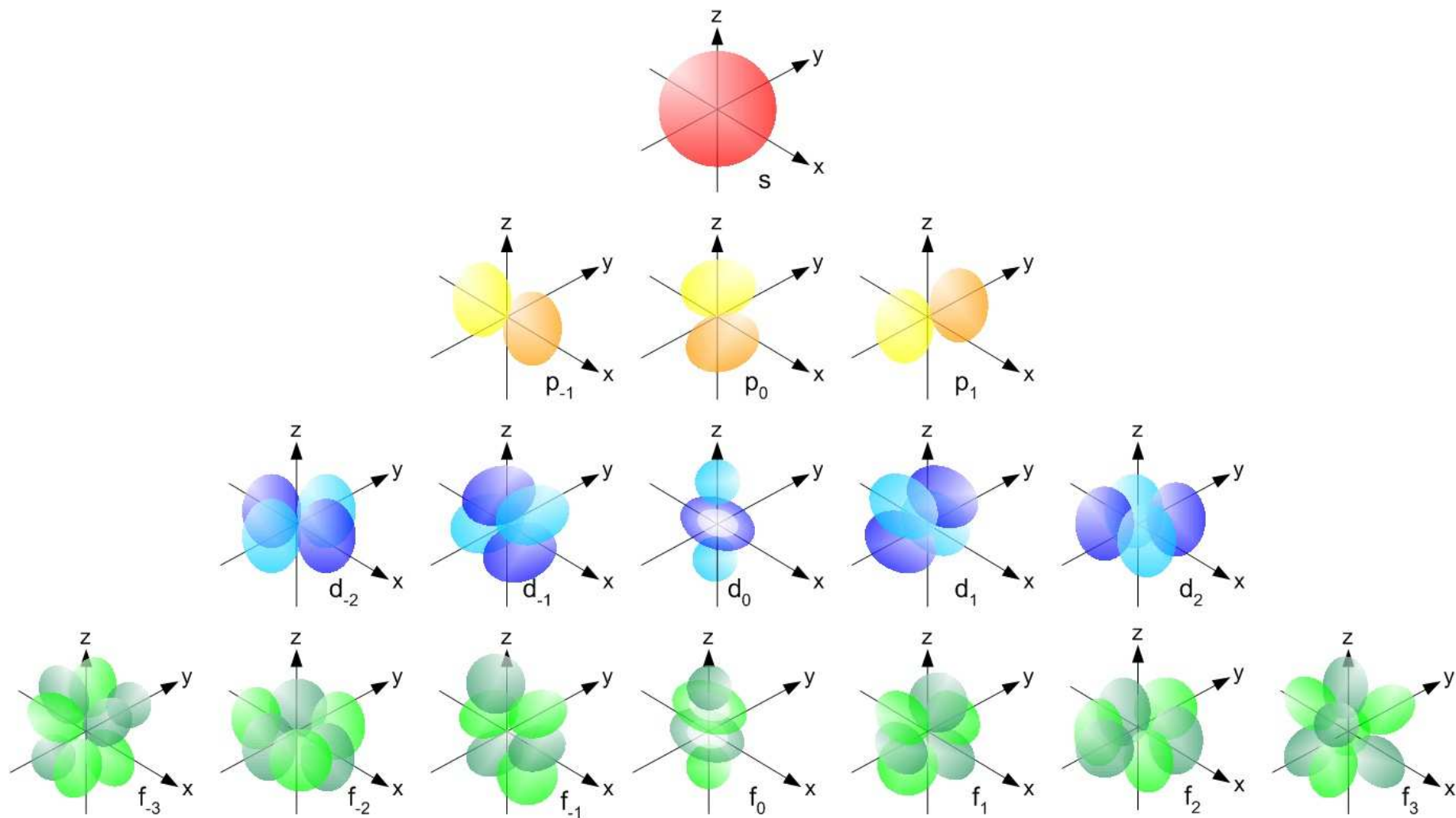
$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, l$$

tvoří úplný ortonormální systém funkcí, do něhož můžeme rozvinout obecné řešení nečasové [S. rovnice](#).

Atomové orbitaly.

Tvary atomových orbitalů jsou dány úhlovou částí vlnové funkce $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:



Magnetický moment a moment hybnosti elektronu.

Podle klasické fyziky vzniká pohybem elektronu okolo jádra proudová smyčka. Lze tedy předpokládat, že s touto proudovou smyčkou je spojen určitý magnetický moment. Pohybuje-li se elektron v magnetickém poli pak potenciální energie takové proudové smyčky v magnetickém poli je dána skalárním součinem magnetického dipólového momentu a magnetické indukce vnějšího pole:

$$U = -\vec{B} \cdot \vec{M} = -BM_z$$

Operátor z-tové složky magnetického momentu elektronu souvisí s jeho orbitálním momentem vztahem:

$$\hat{M}_z = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}_z$$

pro stacionární stavy ψ_{nlm} pro něž platí $\hat{L}_z \psi_{nlm} = \hbar m \psi_{nlm}$, $m = -l, \dots, l$ nabývá magnetický moment hodnot $-m\mu_B$ kde μ_B je tzv. **Bohrův magneton**.

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_e}$$

Energie spojená s orbitálním pohybem elektronu ve vodíku podobném atomu je dána vztahem:

$$\Delta E = mB\mu_B, \quad m = -l, \dots, l$$

Spolu s výběrovým pravidlem $\Delta m = 0, \pm 1$ pro pravděpodobnost přechodu elektronu mezi odpovídajícími hladinami dostáváme, že spektrální čára přechodu mezi dvěma hladinami E_n se v magnetickém poli rozštěpí na tři hladiny. Tento jev nazýváme Zeemanův jev.

Spin elektronu.

V roce 1925 navrhli George Uhlenbeck a Samuel Goudsmit hypotézu podle níž má elektron vlastní vnitřní impuls momentu. Tato hypotéza významně zjednodušovala interpretaci emisních spekter atomu vodíku. Velikost kvantového čísla vnitřního momentu je $1/2$, s dvěma možnými stavy $+1/2$ a $-1/2$. Tento vnitřní impuls moment nazýváme **spin**.



George Eugene Uhlenbeck
6.12. 1900, Batavia, Dutch
East Indies – 31.10. 1988,
Boulder, Colorado



Samuel Abraham Goudsmit
The Hague, 11.7. 1902 —
Reno, 4.12. 1978

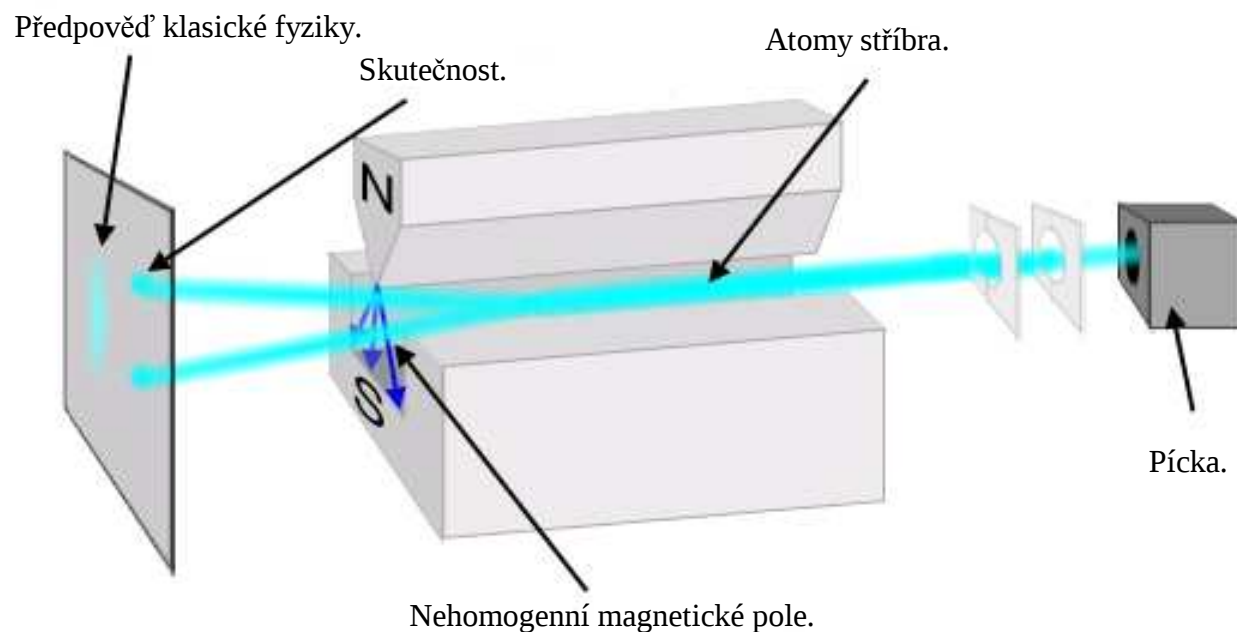


Otto Stern
(17.2. 1888 – 17. 8. 1969)



Walther Gerlach
(1.8. 1889 – 10. 8. 1979)

Stern - Gerlachův experiment.



Experiment provedli v roce 1925, s atomy stříbra a potvrdily hypotézu o vnitřním momentu hybnosti elektronu. Atomy stříbra mají ve valenční slupce jeden nespárovaný elektron, atom stříbra se pak ve vnějším magnetickém poli chová podobně jako samotný elektron.

Spin elektronu.

Zavádíme operátor spinu $\hat{S}$ a vedle kvantových čísel n , l , m zavádíme **spinové kvantové číslo** m_s , které nabývá hodnot $m_s = \pm 1/2$. Operátor spinu souvisí s magnetickým momentem vztahem:

$$\hat{M} = -\frac{e}{m_e} \hat{S}$$

K nalezení operátoru spinu, vyjděme z komutačních relací pro operátore impuls momentu:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

Vzhledem k tomu, že hodnota průmětu spinu do libovolného směru je vždy rovna $\pm \hbar/2$ zavedeme pro operátory $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ hermitovské matice druhého řádu, které zapíšeme ve tvaru:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

Pro tyto matice platí vztahy: $\sigma_x^2 = 1$, $\sigma_y^2 = 1$, $\sigma_z^2 = 1$ (*)

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (**)$$

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x, \quad \sigma_x \sigma_z = -\sigma_z \sigma_x, \quad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y \quad (***)$$

Z rovnic (*), (**) a (***) pak dostaneme následující matice:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vlastní funkce operátoru z -ové složky spinu jsou:

$$\uparrow \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \downarrow \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Symbol $\uparrow$ označujeme „spin nahoru“, $\downarrow$ značí „spin dolů“ .

Soubory stejných částic.

Máme systém více částic jemuž je přiřazen Hamiltonův perátor:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \dots, \vec{x}_N) + \hat{W}$$

$\hat{V}$ je operátor potenciální energie interakce mezi částicemi, $\hat{W}$ je operátor charakterizující interakci mezi impuls momentem a spinem částice (**spin-orbitální interakce**).

Jestliže jsou všechny částice stejné, to znamená že jsou nerozlišitelné, pak Hamiltonův operátor se při záměně libovolných dvou částic nezmění. Zaved'me operátor $\hat{P}_{kl}$ transpozice částic (výměny částic) k a l .

Podmínka nerozlišitelnosti částic při záměně znamená, že operátor transpozice komutuje s Hamiltonovým operátorem:

$$\hat{P}_{kl} \hat{H} = \hat{H} \hat{P}_{kl}$$

Vezmeme dvě částice, vlastní funkce a vlastní hodnoty operátoru transpozice musí splňovat rovnici:

$$\hat{P}_{kl} \psi(1, 2) = \lambda \psi(1, 2)$$

Vlastní číslo λ je reálné číslo. Aplikujme operátor transpozice na rovnici ještě jednou, pak dostaneme:

$$\hat{P}_{kl}^2 \psi(1, 2) = \lambda^2 \psi(1, 2)$$

Působením operátoru transpozice dostaneme: $\hat{P}_{kl} \psi(1, 2) = \psi(2, 1)$

To znamená, že platí: $\hat{P}_{kl}^2 \psi(1, 2) = \psi(2, 1)$

A tedy: $\lambda^2 = 1 \rightarrow \lambda = \pm 1$

Operátor transpozice má tedy dvě vlastní hodnoty ± 1 . Vlastní funkce odpovídající kladné vlastní hodnotě nazýváme **symetrické funkce** a je dána rovnicí:

$$\hat{P}_{12} \psi_s(1, 2) = \psi_s(1, 2)$$

Vlastní funkce odpovídající záporné vlastní hodnotě nazýváme **antisymetrické funkce** a je dána rovnicí:

$$\hat{P}_{12} \psi_a(1, 2) = -\psi_a(1, 2)$$

Soustava dvou elektronů, protonů a neutronů, je vždy popsána antisymetrickými funkcemi. Na druhou stranu soustava dvou α -částic je popsána symetrickou vlastní funkcí. Vlastnost symetrie vzhledem k transpozici je platná i v soustavách složených z libovolného počtu částic.

Soustavy částic popsané antisymetrickou vlnovou funkcí jsou soustavy složené z elektronů, protonů a neutronů a jiných částic složených z částic s poločíselným spinem. Takové částice nazýváme **fermiony**.

Soustavy částic popsané symetrickou vlnovou funkcí jsou soustavy složené z částic s celočíselným spinem, nazýváme je **bosony**.

To také znamená, že ne každá lineární kombinace libovolných řešení **S. rovnice** je možným stavem soustavy částic. Možné stavy soustavy částic musí být popsány takovými lineárními kombinacemi vlnových funkcí, které nemění vlastnosti symetrie vzhledem k transpozici dvojic částic.