

Universita J.E.Purkyně v Brně

Fakulta přírodovědecká

ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY

pro chemiky

I. PRINCIPY

J a n C e l ý

Brno 1981

© Jan Celý, Univerzita J. E. Purkyně v Brně

PŘEDMLUVA

Podnětem k napsání skriptu byly zkušenosti, které jsem v posledních letech získal při přednášení (a zkoušení) základů kvantové teorie ve druhém ročníku odborné chemie. Abych však předešel možným nedorozuměním, chci hned úvodem zdůraznit, že jsem se nesnažil napsat text, který by se přesně, jak rozsahem tak i pořadím probíraných témat, kryl s přednáškou. Proč a k jakému účelu bylo tedy skriptum napsáno?

Pro současného (a tím spíše pro budoucího) chemika se stala znalost kvantové mechaniky, jakožto fundamentální fyzikální teorie mikrosvěta, nutností. Má-li ji však používat uvědoměle, bez neustálých pochyb o oprávněnosti úvah a správnosti výpočtů které provádí, pak se nemůže omezit na naučení několika pouček a vzorečků a na mechanické přejímání výpočetních "receptů", ale musí s pochopením zvládnout základní ideje a metody této teorie. To je skutečnost, na které nemohou, myslím, pranic změnit něčí názory nebo přání.

Běžnou chybou začátečníků je, že se snaží rázem pochopit vše. Studium je však dlouhodobý proces (nekončící zkouškou) a k pochopení látky dochází postupně, podle toho jak rychle přivykáme novým faktům a pojmům. Prvním předpokladem, k úspěšnému završení tohoto procesu, je dostatek vhodné literatury, ke které je možné se opětovně vracet. Dostupná literatura, kterou jsem mohl studentům nabídnout, se mně však nezdála pro ekonomické, a přitom v ničem podstatném neošizené, zvládnutí vytčeného cíle, vhodná. Buď je příliš elementární a nevyužívá vše, co by studenti (alespoň podle osnov) měli již znát, nebo naopak, je určena pro výuku profesionálních fyziků a proto jak rozsahem, tak i pojetím, stěží přijatelná pro řadového chemika. Společným znakem téměř všech knih je, že poměrně rychle přecházejí rozbor základních idejí teorie a jejich vztah k matematickému formalismu a soustřeďují se především na aplikace. Protože navíc zpravidla tyto dvě oblasti jasně neoddělují, činí začátečníkům značné potíže jasně odlišit prvořadé od druhořadého, základní principy od aplikací. To byl také jeden z důvodů, proč jsem se rozhodl rozdělit skriptum do dvou dílů, nazvaných: I. Principy a II. Aplikace.

První tři kapitoly tohoto dílu mají vysloveně úvodní charakter. Na elementární úrovni mají objasnit zvláštnosti a charakteristické rysy mikrosvěta a napomoci tak zvládnutí základního formalismu nerelativistické kvantové mechaniky částic, který je náplní zbývajících tří kapitol. Text jsem se snažil formulovat tak, aby, alespoň v první fázi studia, nevyžadoval příliš odkazů na literaturu. Pokud by se někomu zdálo, že některým, zdánlivě triviálním, pojmům a úvahám věnuji nezvykle mnoho místa, byl to pravděpodobně výsledek působení dojmů, které jsem, paralelně s psaním těchto partií, získával při zkoušení půl stovky studentů. Doufal jsem přitom, že práce, kterou do skriptu vkládám, se mně v budoucnu vrátí v zážitcích příjemnějších.

OBSAH

I. POČÁTKY KVANTOVÉ FYZIKY	7
1. Některé "neřešitelné" problémy klasické fyziky	7
1.1) Záření černého tělesa a Planckova konstanta	7
1.2) Fotoefekt a Einsteinovy fotony	10
1.3) Optická čarová spektra a stavba atomů	12
2. Stará kvantová teorie	14
2.1) Bohrovy postuláty	15
2.2) Atom vodíku v Bohrově teorii	15
2.3) Princip korespondence	17
2.4) Úspěchy, potíže a meze použitelnosti staré kvantové teorie	19
II. VLNOVÁ FUNKCE	20
1. Úvodem k nové kvantové teorii	20
2. Částice a vlny	21
2.1) De Broglieho hypotéza	21
2.2) Experimentální potvrzení vlnových projevů elektronu	22
2.3) Částice nebo vlny ?	23
3. Interpretace vlnové funkce	26
3.1) Bornova pravděpodobnostní interpretace	27
3.2) Normalizace vlnové funkce	29
3.3) Vlnová funkce soustavy částic	29
3.4) Vlastnosti vlnových funkcí	30
4. Princip superpozice	31
4.1) Princip superpozice kvantových stavů	31
4.2) Normalizace de Broglieho vlnové funkce	32
4.3) Interpretace koeficientů v superpozici stavů	35
5. Vlnová klubka a relace neurčitosti	36
5.1) Vlnová klubka	36
5.2) Relace neurčitosti pro souřadnici a impuls	39
5.3) Časový vývoj vlnového klubka	44
5.4) Příklady použití relací neurčitosti	46
5.5) Relace neurčitosti pro energii a čas	49

<u>III. SCHRÖDINGEROVA VLNOVÁ MECHANIKA</u>	53
1. Schrödingerova rovnice	53
1.1) Potřeba vlnové rovnice a její vlastnosti	53
1.2) Schrödingerova rovnice	55
1.3) Stacionární Schrödingerova rovnice	57
2. Jednorozměrné pravoúhlé potenciály	59
2.1) Fyzikální smysl pravoúhlých potenciálů	59
2.2) Optická analogie	60
2.3) Potenciálový val. Tok pravděpodobnosti	61
2.4) Potenciálová bariéra. Tunelový jev	69
2.5) Potenciálová jáma. Vázané a volné stavy. Parita	75
2.6) Vlnová klubka v oblasti změny potenciálu	81
<u>IV. ÚVOD DO FORMALISMU KVANTOVÉ MECHANIKY</u>	86
1. Matematický aparát	86
1.1) Prostor vlnových funkcí \mathcal{F}	86
1.2) Operátory v \mathcal{F}	89
1.3) Hermitovské operátory	92
1.4) Prostor stavových vektorů a Diracova symbolika	95
1.5) Matice v kvantové mechanice	100
2. Základní postuláty kvantové mechaniky	105
3. Několik obecných závěrů z postulátů	111
3.1) Souřadnicová a impulsová reprezentace	111
3.2) Střední hodnota	115
3.3) Současná měřitelnost a úplný soubor kvantových čísel	116
<u>V. SPIN A SOUSTAVY SE DVĚMA STAVY</u>	120
1. Spin elektronu	120
1.1) Experimentální podněty k zavedení spinu	120
1.2) Komutační relace pro operátor momentu hybnosti	123
1.3) Prostor spinových stavových vektorů a Pauliho matice	124
1.4) Spinové vlnové funkce	127
2. Soustavy se dvěma stavy	129
2.1) Obecná úvaha o soustavách se dvěma stavy	129
2.2) Statické hledisko: vliv interakce na stacionární stavy soustavy	130
2.3) Dynamické hledisko: oscilace soustavy mezi dvěma stacionárními stavy	133

2.4) Příklady soustav se dvěma stavy. Kvantová rezonance	135
2.4.1 Molekula NH_3	135
2.4.2 Iont H_2^+	138
2.4.3 Molekula benzenu	140
<u>VI. SOUSTAVY STEJNÝCH ČÁSTIC</u>	142
1. Problém stejných částic	142
1.1) Nerozlišitelnost identických mikročástic	142
1.2) Symetrické a antisymetrické stavy	144
1.3) Jak najít symetrické a antisymetrické vlnové funkce	147
2. Soubory neinteragujících stejných částic. Pauliho princip	149
3. Soustava dvou částic se spinem $\frac{1}{2}$	154
4. Stručně o reprezentaci obsazovacích čísel	158
<u>DODATKY</u>	165
A) Několik potřebných matematických vztahů	165
B) Lineární vektorové prostory	168
C) δ - funkce	170
D) Fourierova transformace	172
E) Diferenciální operátory z vektorové analýzy	174
LITERATURA	176