Cvičení 16. 2. 2022

Téma: Relevance kvantové mechaniky a lineární algebry

∞ **Vlnová délka hmoty (deBroglie)** (LS: 21.1.:1)

Jedním z důležitých poznatků na počátku 20. století byl Einsteinův vztah mezi energií a frekvencí elektromagnetického vlnění s konstantou úměrnosti h, kterou nyní nazýváme Planckova:

$$E = h\nu\,. \tag{1}$$

Vztah je možné upravit tak, aby se v něm vyskytovala úhlová frekvence $\omega = 2\pi\nu$, přebývajícími 2π podělíme Planckovu konstantu h čímž získáme tzv. redukovanou Planckovu konstantu $\hbar = \frac{h}{2\pi}$:

$$E = h\nu = \frac{h2\pi\nu}{2\pi} = \frac{h}{2\pi}\omega = \hbar\omega\,. \tag{2}$$

Změny děláme hlavně kvůli tomu, že ve Schrödingerově rovnici vystupuje $\hbar$, jak uvidíme. Také výpočty často provádíme v tzv. atomových jednotkách, kde $\hbar = 1$.

Einstein také odvodil vztah $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$. K tomu je možné dojít uvážením energie bezhmotné relativistické částice $E = pc$ a vztahu mezi frekvencí ν, vlnovou délkou λ a rychlostí šíření záření (uvažujeme rychlost světla c pro fotony) $\lambda\nu = c$.

DeBroglie použil vztah $p = \frac{h}{\lambda}$ i pro částice, tedy že i částice mají vlnovou délku. Vlnová délka částice je potom

$$\lambda = \frac{h}{p}\,. \tag{3}$$

Případně uvážením vztahu mezi hybností a kinetickou energií $E = \frac{p^2}{2m}$ dostaneme

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}\,. \tag{4}$$

Pro pochopení významu a důsledků tohoto vztahu uvažujme částici. Pokud volně letí prostorem s energií E, bude jí příslušet vlnová délka λ. To bude relevantní v jevech využívajících interferenci vlnění: průchod štěrbinou nebo mřížkou (výsledek podobný jako u světla) nebo difrakce na krystalu (elektronové mikroskopy). Důležité je, když částice nebude volná, ale bude interagovat s nějakým potenciálem. Pokud bude vlnová délka podobné škály jako změny potenciálu, bude jím ovlivněna, pokud se budou lišit, tak částice ovlivněna nebude.

Uvažujme nyní několik systémů, pro které vlnovou délku vypočteme

▷ Jaká je vlnová délka cvičícího s hmotností 80 kg padajícího z kola rychlostí 10 m/s? Mohl na asfaltu difrakovat?

Pro výpočet budeme potřebovat hodnotu $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ m^2 kg/s.

▷ Vídeňským vědcům se kdysi podařilo změřit difrakci molekul C_{60}, Arndt *et al.*, Nature 401, 680 (1999). Jaká byla vlnová délka molekul, pokud letěly rychlostí 200 m/s?

Uvažujme relativní atomovou hmotnost jednoho atomu uhlíku 12, a hodnotu atomové hmotnostní konstanty $m_\mathrm{u} = 1{,}66 \cdot 10^{-27}$ kg.

Nyní přejdeme k opravu kvantovým systémům, nejprve k elektronům. Přejdeme také k atomovým jednotkám, ve kterých je $\hbar = 1$, hmotnost elektronu $m_\mathrm{e} = 1$ a náboj elektronu $q_\mathrm{e} = 1$. Jednotkou energie je pak Hartree, což je dvojnásobek vazebné energie elektronu v atomu vodíku. Jednotkou vzdálenosti je Bohr, což je vzdálenost, ve které by byli elektron a proton v atomu vodíku, pokud by byly klasické částice.

▷ V kvantové mechanice často pracujeme s energií. Upravte deBrogliho vztah, aby obsahoval energii E místo hybnosti p, uvažujme klasický vztah $E = \frac{p^2}{2m}$.

▷ Uvažujme elektron s energií 1 eV$= \frac{1}{27.2114}$ Ha. Jaká je jeho vlnová délka? (Výpočet proveďte v atomových jednotkách.)

Výsledná vlnová délka je v Bohrech. Měli bychom vidět, že vlnová délka elektronu je větší než 1 Bohr. Pro převod do srozumitelnějších jednotek uvažujme, že 1 Bohr $= 0,529$ Å(ngström), 1 Ångström$= 10^{-10}$ m.

Nyní budeme uvažovat částice o teplotě T se střední energií $E = \frac{3}{2}k_\mathrm{B}T$. Hodnota Boltzmanovy konstanty je $k_\mathrm{B} = 1,3806 \cdot 10^{-23}$ J/K $= 3,1685 \cdot 10^{-6}$ Ha/K.

▷ Nyní chceme získat vztah pro vlnovou délku částice jako funkci teploty a její hmotnosti, ideálně v atomových jednotkách. Dostaneme jej využitím $E = \frac{3}{2}k_\mathrm{B}T$ ve vztahu pro hybnost a dosazením tohoto do deBrogliho rovnice. Měli bychom získat $\lambda = \frac{2038}{\sqrt{mT}}$.

U elektronů nás kvantové chování (vlnová délka podobná velikosti atomů) nepřekvapí, podíváme se nyní na protony.

▷ Jaká je vlnová délka protonu při teplotě 20 K? Hmotnost protonu uvažujme $m_\mathrm{p} = 1836m_\mathrm{e}$.

Ve výsledku je to docela dost. Na druhou stranu, neutrony, které mají podobnou hmotnost jako protony, se využívají také ke zjišťování struktury látek pomocí difrakce. Tedy vlnové délky nutné pro difrakci (cca. 1 Å) musejí být dostupné.

V našem těle probíhá řada reakcí při kterých dochází k přenosu vodíku (protonu) mezi molekulami. Nyní zjistíme, jestli může být vlnové chování protonu důležité pro průběh těchto reakcí.

▷ Uvažujme proton s energií odpovídající teplotě 300 K. Jaká je jeho vlnová délka podle deBrogliho vztahu? Jaká je vlnová délka deuteronu o hmotnosti $m_\mathrm{p} = 3670m_\mathrm{e}$?

∞ **Funkce, operátory a lineární algebra**

Funkce a operátory jsou v kvantové mechanice podstatné. Operátory jsou přiřazení

$$\hat{A}f = g\,, \tag{5}$$

kde f a g jsou prvky (různých) prostorů, například funkce. Příkladem operátoru je derivace, komplexní sdružení, vynásobení konstantou atd. Tedy věci, které známe, jen jsme jim operátory neříkali.

V kvantové mechanice potkáváme operátory, které jsou tzv. lineární, platí pro ně $\hat{A}(f+g) = \hat{A}(f) + \hat{A}(g)$ a $\hat{A}(cf) = c\hat{A}(f)$.

▷ Ověřte, že derivace je linární operátor a operátor $\hat{A}u = 1/u$ lineární není.

V kvantové mechanice často potkáváme funkce normalizované na 1. (Protože obsahují jednu částici.)

Budeme nyní uvažovat funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ na intervalu $(0, 2\pi)$, s $n \in N$.

▷ Ověřte, že funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$ jsou normalizované na 1.

! K tomu, abychom mohli ověřit normalizaci, musíme definovat normu funkce N. Tu definujeme pomocí skalárního součinu následovně

$$N = \int_0^{2\pi} f^*(\phi)f(\phi)\mathrm{d}\phi\,.$$

! K úpravě výrazu $\sin(n\phi)$ a podobných je výhodné využít Eulerova vzorce $e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi$.

! Integrál $\int_0^{2\pi} e^{in\phi}\mathrm{d}\phi$, kde $n \in Z$, je nenulový jen tehdy, když $n = 0$.

U předešlých poznámek jsou vykřičníky, protože jsou důležité a budeme je potkávat a využívat téměř neustále.

▷ Ověřte, že funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos n\phi$ jsou na sebe kolmé.

Tady opět využijeme skalární součin, obecně definovaný jako

$$\langle f|g\rangle = \int f^* g \,.$$

Tím jsme mimojiné zjistili, že funkce tvoří ortonormální bázi. To ještě využijeme, ale předtím se podíváme na akci operátorů na funkce. ("Akcí" není myšleno nic speciálního, jen je prostě na funkce pustíme.)

Uvažujme nyní operátor derivace vynásobený komplexní jednotkou $\hat{A} = i\frac{d}{d\phi}$.

▷ Vypočtěte, jak působí $\hat{A}$ na funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Uvažujme nyní operátor $\hat{B} = \sin\phi$, tedy operátor působící jako $\hat{B}f = \sin\phi f$.

▷ Vypočtěte, jak působí $\hat{B}$ na funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Výsledek přepište pomocí funkcí naší báze, tedy $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Pokud na funkci působí více operátorů postupně, tak nás může zajímat, jestli musíme pořadí dodržet, nebo je možné pořadí upravit. Pokud můžeme operátory prohodit, tedy pokud platí $\hat{C}\hat{D}f = \hat{D}\hat{C}f$, tak spolu operátory komutují.

▷ Ověřte, zda spolu operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ komutují. Jako testovací funkci f použijte např. $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin n\phi$.

Výraz $\hat{C}\hat{D} - \hat{D}\hat{C}$ se nazývá komutátor a značí $[\hat{C}, \hat{D}]$.

▷ Čemu je roven $[\hat{A}, \hat{B}]$ v našem případě?

▷ Ověřte, že shodný výsledek obdržíme i pro testovací funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Toto je obecné a užitečné. Pokud známe komutátor a působení $\hat{C}\hat{D}f$, můžeme $\hat{D}\hat{C}f$ vypočítat jako $\hat{D}\hat{C}f = (\hat{C}\hat{D} - [\hat{C}, \hat{D}])f$. V budoucnu to hodně budeme využívat pro kvantový oscilátor.