Kvantová teória pre gymnazistov

Peter Vanya a kolektív FX

December 2014

Na začiatok trochu politickej filozofie, alebo načo je dobrá veda. Čo je cieľom fyziky? Klasická mechanika rieši pohybovú rovnicu $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, z ktorej možno matematickou metódou menom integrácia zistiť polohu $\mathbf{x}(t)$ a rýchlosť $\mathbf{v}(t)$ v čase, napr. pre obiehajúcu planétu alebo kameň letiaci vzduchom. Tieto veličiny sú zo zrejmých dôvodov praktické pre život.[1] Sem-tam z riešení pohybových rovníc možno vypozorovať rôzne obrazoborné javy, ako napr. že planéty sa pohybujú po elipsách, alebo všeobecne kužeľosečkách.

V kvantovke pre zmenu zisťujeme energie v závislosti od *kvantového čísla*. Čo je kvantové číslo? Ako je všeobecne známe z ničnehovoriacich populárnych prednášok, častice sú vlny, a vlny spolu interferujú, občas pozitívne a občas negatívne. Konkrétnejšie, častice sú stojaté vlny, podobne ako struny na gitare. Takéto struny majú presne definovanú vlnovú dĺžku, ktorá závisí od vzdialenosti medzi miestom, kde sme prstami chytili strunu, a jedným koncom gitary. Označme túto vzdialenosť L a vlnovú dĺžku λ. Na obrázku 1 vidno, že len niektoré vlnové dĺžky sú *povolené*, resp. len pri nich nastáva konštruktívna interferencia, a to

$$\lambda = 2L, L, \frac{2}{3}L, \frac{1}{2}L, \ldots = \frac{2}{n}L.$$

Toto n je vhodné kvantové číslo, pretože nám čísluje existujúce *stavy* (funckie výchylky v závislosti od polohy), v ktorých sa struna môže nachádzať.

Matematicky vzato, výchylka struny sa riadi vlnovou rovnicou, s ktorou sa možno zoznámiť (okrem všadeprítomných knižiek a internetov) napr. v príkade FX E3 zo zbierky:[2]

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}.$$

Riešením takejto rovnice je hocijaká funkcia v tvare $\psi(x - vt)$ (overte si dosadením), ktorá má na koncoch nulovú výchylku, teda $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Takáto funkcia s nulami na konci sa dá rozložiť do presne daných sínusov a kosínusov, $\sin(k(x - vt))$ a $\cos(k(x - vt))$,[3] kde $k = 2\pi/\lambda$ je tzv. vlnové číslo. Tieto sínusy a kosínusy nazývame *vlastnými funkciami/stavmi*. Keď ich dvakrát poderivujeme podľa polohy a času, vypadne nám, podľa očakávania, rýchlosť (overte si).

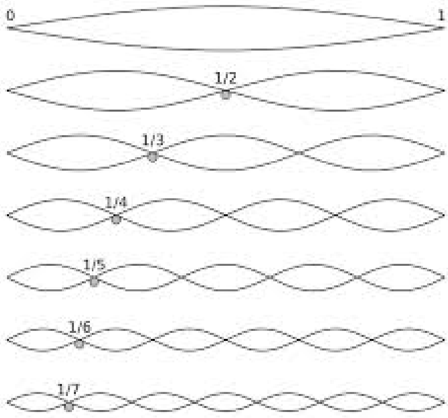
1 „Pohybová rovnica"

Takto približne vyzerá mikrosvet, len trochu komplikovanejšie. Vlnovú rovnicu trochu pozmeníme, primiešame komplexné čísla, hmotnosť skúmanej častice a nejaké konštanty. Vznikne

[1] Napríklad keď po nás nepriateľ vo vojne vystrelí guľu z dela, my vieme na základe odhadov o jej rýchlosti a uhle spočítať, kde presne v našom meste dopadne. A to je (bola) pre život kľúčová zručnosť.

[2] Link na zbierku tuto.

[3] Odborne sa tomu hovorí Fourierov rozvoj.



Obr. 1: Vlny na strune gitary.

tak rovnica Schrodingerova:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t).$$

Ešte môžeme primiešať potenciál (napr. elektrické pole $V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{r}$), čím vznikne

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\Big)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi.$$

Ako teda zistíme tie energie? V prvom rade sa vykašleme čas a budeme sa sústrediť len na polohu. A spravíme jeden veľký mentálny krok bez podrobného vysvetlenia, na ktorý treba kus nezáživnej matiky: pravú stranu s časovou deriváciou vymeníme za $E\psi$. Tú veľkú vec v zátvorke na ľavej strane voláme *hamiltonián*,

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x),$$

$\psi(x)$ voláme vlastný stav a E vlastná hodnota. Vlastné hodnoty sú pozorovateľné, ktoré možno odmerať.[4] Vlastné stavy $\psi(x)$ možno interpretovať tak, že ich veľkosť $|\psi(x)|^2$ dáva hustotu pravdepodobnosti výskytu častice v bode x. To nám naznačuje, že častica sa nikdy na 100% nenachádza v jednom bode, ako je to v prípade hmotného bodu v klasickej mechanike, ale je tak trochu všade, jej poloha neurčitá. Filozoficky fascinujúci, ale pre reálne výsledky relatívne nepodstatný fakt, takže ideme ďalej.

Vznikol nám sexi vzorec na tričko:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi.$$

Prvý člen hamiltoniánu možno považovať za kvázi kinetickú energiu, druhý za potenciálnu. Ako to celé intuitívne uchopiť? Potenciálna energia hovorí sama za seba, o kinetickej možno povedať, že je úmerná gradientu d/dx (na druhú), pretože čím je vlna (napríklad na oceáne) strmšia, tým viac má energie, alebo tým rýchlejšie sa pohybuje (pripomíname, že aj stojaté vlny sa pohybujú).

[4]Odmerať ich možno len veľmi komplexnými spôsobmi – predsa len ide o maličké atómy, nie mesiace a padajúce jablká ako v makrosvete – ktorých vysvetľovanie by nám zabralo aspoň jednu knihu, keby sme im sami rozumeli. Spomedzi všetkých metód spomeňme aspoň spektroskopiu, čo je ožiarenie nejakého plynu svetlom a pozorovanie úzkych čiernych čiar v spektre na druhej strane, čo sú energie, resp. vlnové dĺžky, absorbované týmto plynom.

Cieľom kvantovky je teda pre konkrétny hamiltonián nájsť vlastné čísla a vlastné stavy. Samozrejme, toto je analyticky možné len pre najjednoduchšie systémy. Väčšinou ide o teoretické myšlienkové experimenty, medzi tie praktické radíme napríklad atóm vodíka.[5] Teraz si zoberieme na mušku najjednoduchší teoretický systém.

2 Častica v nekonečnej potenciálovej jame

Týmto zdanlivo uleteným modelom sa začína asi každý vysokoškolský kurz kvantovky. Majme jamu o šírke L, ktorá má všade vnútri nulový potenciál, $V(x) = 0$, a za svojimi hranicami nekonečný. Jediné riešenie Schrödingerovej rovnice mimo jamy, v nekonečnom potenciáli, je nulová funcia ψ (premyslite). Vnútri jamy vyzerá rovnica takto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x).$$

Pozorný čitateľ si všimne, že táto rovnica sa podobá na harmonický oscilátor: $\ddot{y}(t) = -\omega^2 y(t)$, ktorého vlastné funkcie sú sínusy a kosínusy, alebo vo všeobecnom prípade $y(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$, kde A, B sú konštanty, ktoré si určíme z počiatočných podmienok. (Overte si, že toto $y(t)$ naozaj rieši rovnicu harmonického oscilátora!)

Ďalej platí, že $\psi(0) = \psi(L) = 0$, pretože funkcia musí byť spojitá (inak by bola derivácia nekokečná, a s ňou aj kinetické energia.) Keďže kosínus je v nule nenulový, zostávajú nám len sínusy, ktoré upravíme tak, aby boli v $x = L$ nulové. Teda $\psi(x) = \sin(\frac{n\pi x}{L})$, kde $n = 1, 2, 3, ...$ je kvantové číslo.

Tipli sme si vlastné stavy, zostáva nám nájsť energiu. V tomto prípade ide o priamočiary proces – dvakrát poderivujeme stav a porovnáme konštanty na ľavej a pravej strane rovnice (cvičenie). Vyjde nám

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}.$$

Gratulujem, práve sme vyriešili prvý kvantovomechanický problém! Našli sme všetky povolené energetické stavy v závislosti od parametrov systému (tuto jedine L) a kvantového čísla n. Lepšie raz vidieť ako stokrát počuť, preto prikladáme obrázok 2a. A čo teraz s tým? Makači sa môžu pustiť do ťažších problémov s nenulovým potenciálom $V(x)$, kde nie je ľahké/možné tipnúť si vlastný stav a nájsť vlastné číslo, literatúry je na to dosť. My sa najskôr pozrime na viacrozmerné systémy, ktoré sa v reálnom svete vyskytujú častejšie.

Hamiltonián dvojrozmernej potenciálovej jamy je jednoducho

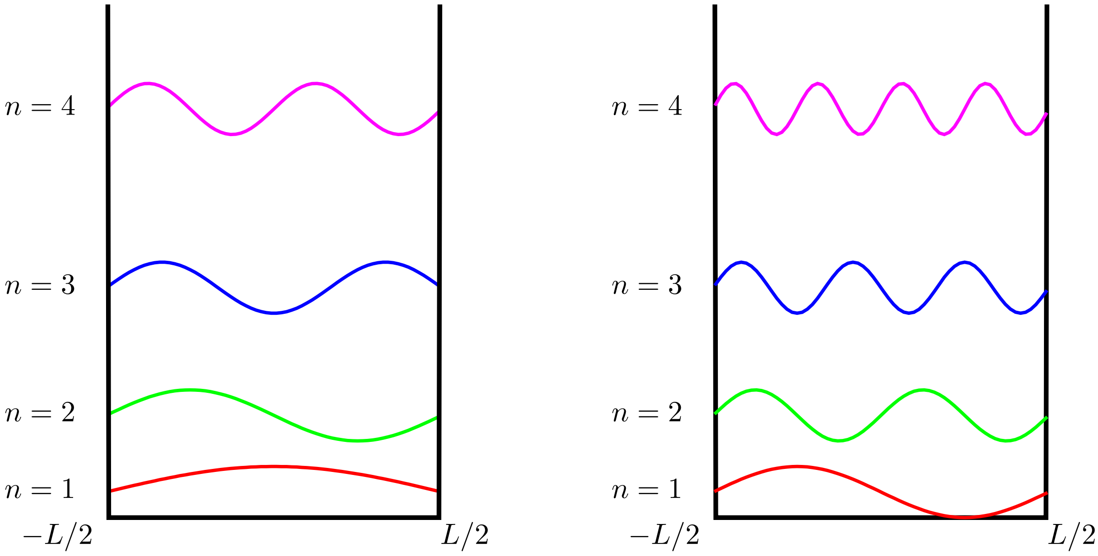
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x) = E\psi(x).$$

Ľahko si overíte, že vlastné funkcie sú súčinmi jednorozmerných vlastných funkcií, $\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y)$, a vlastné čísla sú

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2(n_x^2 + n_y^2)}{2mL^2}.$$

A na trojrozmerný systém už prídete aj sami. Teraz sa konečne môžeme zamyslieť, na čo reálne je dobrý takýto model nekonečnej potenciálovej jamy.

[5] Dva atómy vodíka alebo atóm hélia sú už príliš komplikované, pretože obsahujú dve častice, i.e. elektróny, a tie spolu interagujú vysoko netriviálnym spôsobom, ktorý nezahŕňa len elektrické odpudzovanie, a ktorého vysvetlenie a pochopenie by reálne zabralo desiatky strán. Čitateľ hladný po vzdelaní môže gúgliť pojmy *exchange* a *correnation*. Ide o mnohočasticový problém, a kvantová teória mnohočasticových systémov je horúca téma už posledných 80 rokov, o ktorej by sa dalo básniť donekonečna.



(a) Potenciálová jama...

(b) ... s periodickými okrajovými podmienkami.

Obr. 2: Vertikálna pozícia vlnových funkcií je čisto ilustratívna, za účelom prehľadnosti.

3 Elektróny v kovoch

Konečne sa dostávame k príkladu *FX 6 Elektrónový plyn*. Majme kov, teda materiál s periodickou štruktúrou. Zanedbajme jadrá a zoberme len valenčné elektróny z každého atómu, a taktiež zanedbajme ich vzájomnú interakciu. Tieto zanedbania môžu pôsobiť ako pritiahnuté za vlasy, ale uvidíme, že to nie je zlý štart pri aplikovaní kvantovej teórie na reálne problémy. Ako fyzikálny argument pre zanedbanie jadier a väčšiny elektrónov povedzme, že pôsobenie týchto dvoch prvkov na valenčné elektróny sa (takmer) vzájomne vyruší. Tie vidia len odtienený potenciál, ktorý nie je zďaleka taký silný ako štandardný coulombovský úmerný $1/r$. Čo nám zostane? No predsa nekonečná potenciálová jama.

V kove je kvôli absencii jadier nulový potenciál, a za jeho stenami pre zmenu nekonečný, keďže elektónom sa moc nechce vyskakovať. Pre pohodlie ešte pridajme jeden abstraktný koncept: *periodické okrajové podmienky* (obrázok 2b), $\psi(x+L) = \psi(x)$. Akokoľvek absurdne to pôsobí (elektrón zanikajúci na jednom konci a objavujúci sa na druhom?), ide o praktické opatrenie. Jednak nemusíme rozmýšľať nad tým, čo sa deje na okrajoch nášho kovu, dvak periodické okrajové podmienky dávajú rovnaké výsledky ako neperiodické, a po tretie zjednodušujú matiku.[6] To znamená, že rozdiel medzi stavmi nie sú násobky polovice vlnovej dĺžky, ale celej, teda vlnové funkcie majú tvar $\sin(\frac{2\pi n x}{L})$, alebo všeobecne e^{ikx}. Teraz sa možno s chuťou pustiť do riešenia príkladu.

[6] Teraz možno vlastné stavy popísať miesto sínusov a kosínusov oveľa krajšou (rozumej praktickejšou) funkciou zlučujúcou jedno aj druhé, a to e^{ikx}. Z tvaru k vidno, že $e^{ik(x+L)} = e^{ikx}$, pretože $e^{ikL} = 1$ (overte si).

4 Ešte pár populárnych riadkov o kvantovke

4.1 Pre fajnšmekrov...

... ktorí by radi vedeli, aké hamiltoniány sa ešte v prírode vyskytujú, pridajme stručný motivačný zoznam:

1. Kvantový harmonický oscilátor, ako keby hmotný bod na pružinke:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

   Po vyriešení tejto obyčajnej diferenciálnej rovnice pre vlastné funkcie/stavy $\psi(x)$ a vlastné hodnoty/energie E možno zistiť fascinujúci fakt, a to že energia najnižšieho stavu, $E_0 = \hbar\omega/2$, nie je nulová.

2. Atóm vodíka:

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

   kde $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$. Tento model aj reálne niečo predpovedá, tj. vlnové dĺžky svetla pohlcovaného vodíkovým plynom, a tiež slúži ako základný stavebný kameň pre popis energií molekúl a elektrónovej štruktúry materiálov.

3. Hubbardov model interagujúcich elektrónov v periodickej mriežke:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t\sum_{\langle mn\rangle}\sum_{\sigma} c^\dagger_{m\sigma}c_{n\sigma} + U\sum_{m}\hat{n}_{m\uparrow}\hat{n}_{m\downarrow}.$$

   Ak nerozumiete ani jedinému písmenku, nezúfajte. Aj najchytrejší fyzici si nad ním lámu hlavu už posledných 50 rokov. Okrem toho, toto už nie je kvantová mechanika, ale kvantová teória poľa, kde častice vznikajú a zanikajú. Krátky opis na nabudenie: energia sa znova delí na kinetické a potenciálne členy, $c^\dagger$ a c sú tzv. kreačné a anihilačné operátory, ktoré nám na pozícii m na mriežke vytvárajú/zabíjajú častice, a potom zabíjajú/vytvárajú na susednej pozícii n. $\hat{n}_{m\uparrow}$ je hustota elektrónov na pozícii m so spinom nahor, ktorá interaguje s elektrónmi na tej instej pozícii, ale so spinom nadol $\hat{n}_{m\downarrow}$ (v podstate Coulombov zákon), a U je sila tejto interakcie. No a čo nám model vlastne chce povedať? Cieľom je zistiť, pre aké U, alebo pomer U/t, je materiál vodivý alebo izolujúci, prípadne identifikovať ďalšie fázy (napr. paramagnetická, feromagnetická, supravodivá a mnoho iných).

   Pre extrémnych makačov, ktorým tento model nedá spávať, odporúčame gúgliť termín *kvantová teória mnohočasticových systémov*,[7] prípadne otravovať Tomáša Bzdušeka, Kuba Imrišku alebo autora tohto dokumentu.

4.2 Matematika

Jeden dôvod (možno najpodstatnejší), prečo sa kvantovka neučí už na strednej škole, je množstvo nevyhnutného matematického aparátu. Pri klasickej mechanike a elektromagnetizme stačí vedieť trochu derivovať a integrovať a zaujímavé výsledky sa rýchlo dostavia. Pri kvantovke treba vedieť:

[7] Po anglicky *Many-body quantum theory*.

- *dobre* derivovať a integrovať,
- riešiť komplikované diferenciálne rovnice, obyčajné aj parciálne,
- ovládať lineárnu algebru, ktorá prináša štruktúry ako matice a vektory a pojmy ako kolmosť vektorov a funkcií a hľadanie vlastných vektorov a čísel matíc,
- neskôr aj komplexne integrovať.

Na záver dodajme, že ovládanie matematiky sa v žiadnom prípade nerovná hlbokému fyzikálnemu pochopeniu! A preto treba čo? V prvom rade si lámať hlavu nad klasickými problémami z FKS a FX.

4.3 Literatúra

Literatúry pre ďalšie štúdium je neúrekom. Spomeňme niektoré zdroje podľa dôležitosti:

1. Seriál FYKOSU o kvantovej mechanike od Jaroslava Trnku, link tu. Miestami príliš teoretický a matematický, ale asi jediný zdroj (okrem tohto) cielený na stredoškolákov.
2. Vysokoškolské skriptá. Každá (zahraničná) univerzita má skriptá k úvodnému kurzu kvantovky, ktorý sa ju snaží vyložiť čo najzrozumiteľnejšie. Stačí si ich vypýtať od organizátorov FX.
3. Tučné staré knihy, za všetky spomeňme slovenský *Úvod do kvantovej mechaniky* (Pišút, Gomolčák, Černý), český *Uvod do kvantové teorie* (Formánek), a spomedzi nekonečna zahraničných *Modern Quantum Mechanics* (Sakurai).