

alebo, keď rýchlosť elektrónov v katódových lúčoch vyjadríme pomocou ich urýchľujúceho napätia u , $\frac{1}{2}mw^2 = eu$, $w = \sqrt{\frac{2eu}{m}}$,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2emu}} \quad (6)$$

Vlny s touto vlnovou dĺžkou môžu sa odrážať len na povrchu tých kryštálikov, ktoré pri svojej vhodnej polohe splňujú Braggových rovnicu

$$2d \sin \varphi = n\lambda$$

v ktorej d je mriežková konštanta a n celé číslo. Podľa obr. 17.17 polomer prvého difrakčného kruhu elektrónových lúčov na určitom systéme mriežkových rovín je $r_1 = l \operatorname{tg} 2\varphi$, pričom uhol φ treba vypočítať z dvoch rovníc predošlých. Keď sa pre vznik katódových lúčov použilo urýchľujúce napätie 100 volt, podľa vzorca (6) pre vlnovú dĺžku materiálnych vln vychádza:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2emu}} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 10^2}} m = 1,2 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

teda hodnota rádu mriežkovej konštanty kryštálov, takže difrakcia príslušných materiálnych vln je v tom prípade dobre viditeľná. Dnes sa difrakcie elektrónov v kovoch používa na štúdium ich štruktúry práve tak ako Röntgenových lúčov.

17.10. Schrödingerova rovnica. L. de Broglie ukázal, že práve tak ako teória relativity prisudzuje elementu elektromagnetického vlnenia, fotónu, hmotnosť m , danú vzťahom $h\nu = mc^2$, možno aj naopak pohyb hmotného bodu rýchlosťou w považovať za nerozlučne spojený s vlnením frekvencie ν a vlnovej dĺžky λ , ktoré sú určené vzorcami (17.9.2),

$$\nu = \frac{mc^2}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{mw} \quad (1)$$

v ktorých m značí hmotnosť hmotného bodu.

V čase de Broglie-ovho objavu bolo už bezpečne dokázané, že Bohrove a Sommerfeldove kvantové podmienky nepostačujú na vysvetlenie všetkých atomárnych javov, ba vedú niekedy aj k nesprávnym výsledkom. O niektorých z nich bola zmienka už v predošlých článkoch. Za týchto okolností rakúsky fyzik Erwin Schrödinger (1887—1961) r. 1926 použil vlastnosti de Broglie-ho vlnenia k vybudovaniu novej teórie, *vlnovej mechaniky*, ktorá nemá nedostatky teórie vybudovanej na kvantových postulátoch Bohra a Sommerfelda.

Ako už vieme, parciálna diferenciálna rovnica netlmeného vlnenia mechanického alebo elektromagnetického je rovnica

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} = v^2 \Delta P \quad (2)$$

v ktorej t značí čas, v fázovú rýchlosť vlnenia a P je označenie vlnenia vhodne charakterizujúcej funkcie času a miesta. Schrödinger vyslovil predpoklad, že materiálne vlnenie L. de Broglie-ho, jestvujúce v okolí hmotného bodu v pohybe alebo aj v pokoji, spĺňa tú istú rovnicu a veličinu, ktorá sa pri ňom vlnivým spôsobom mení, označil písmenom Ψ . Funkciu Ψ napísal Schrödinger v komplexnom tvare

$$\Psi = A \cdot e^{-i(\omega t - \varphi)} \quad (3)$$

s tým, že veličiny A a φ sú funkcie len miesta. Za týchto predpokladov možno písať

$$\Psi = A \cdot e^{-2\pi v i t} \cdot e^{i\varphi} = \psi(\mathbf{r}) \cdot e^{-2\pi v i t}$$

Ak do rovnice (2) dosadíme

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -4\pi^2 v^2 \psi(\mathbf{r}) \cdot e^{-2\pi v i t}$$

$$\Delta \Psi = e^{-2\pi v i t} \cdot \Delta \psi(\mathbf{r})$$

dostávame rovnicu

$$-4\pi^2 v^2 \psi(\mathbf{r}) = v^2 \Delta \psi(\mathbf{r})$$

čiže

$$\Delta \psi + \frac{4\pi^2 v^2}{v^2} \psi = 0$$

alebo

$$\Delta \psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0$$

Vlnovú dĺžku λ vyjadril Schrödinger pomocou druhého zo vzorcov (1), čím získal rovnicu

$$\Delta \psi + \frac{4\pi^2 m^2 \omega^2}{\hbar^2} \psi = 0$$

ktorú, keďže $m^2 \omega^2 = 2m \cdot \frac{1}{2} m \omega^2 = 2mK$, možno písať aj takto

$$\Delta \psi + \frac{8\pi^2 m K}{\hbar^2} \psi = 0$$

Práve napísaná rovnica, keďže sa vzťahuje na pohyb voľného hmotného bodu v priestore, ktorý nie je silovým poľom, je len istým matematickým vyjadre-

ním predstáv L. de Broglie-ho. V takomto prípade možno však písať tiež $K = E - U$, kde E značí celkovú energiu hmotného bodu, lebo jeho energia polohová U sa rovná nule. Tým však, že Schrödinger v poslednej rovnici vystupujúcu kinetickú energiu K vyjadril rozdielom $E - U$ a takto získanú rovnicu

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 \quad (4)$$

prehlásil za platnú pre pohyb hmotného bodu aj v silových poliach, v ktorých U sa nerovná nule, ju podstatne zovšeobecnil. Rovnica (4) je tzv. *amplitúdová* alebo aj *bezčasová Schrödingerova rovnica* a je základnou rovnicou vlnovej mechaniky. Platí pre deje v čase ustálené.

Rovnicu (4) sme dostali z parciálnej diferenciálnej rovnice vlnenia (2), platnej pre prostredie, v ktorom rýchlosť šírenia sa rozruhu je nezávislá od jeho charakteru, teda v prípade monochromatického vlnenia od jeho frekvencie. Pretože de Broglie-ho materiálne vlny túto vlastnosť nemajú, nemá rovnica (2) pre toto vlnenie všeobecnú platnosť. To značí však, že aj rovnica (4) je správna len pre materiálne vlnenie monochromatické.

Rovnicu (4), ktorá sa vzťahuje na jeden hmotný bod, možno zovšeobecniť na sústavu n hmotných bodov takto: Pre i -tý z n hmotných bodov platí rovnica

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m_i} \Delta_i\psi_i + (E_i - U_i) \psi_i = 0$$

Ak každú z n takýchto rovníc znásobíme súčinom $\prod_{j=1}^n \psi_j$, $j \neq i$, a utvoríme ich súčet, dostávame rovnicu

$$\sum_i \frac{\hbar^2}{8\pi^2m_i} \Delta_i\psi + (E - U) \psi = 0 \quad (5)$$

v ktorej $\psi = \prod_{i=1}^n \psi_i$, E je celková energia sústavy a U jej polohová energia.

V rovnici (5) vystupujúca polohová energia U je závislá od polôh všetkých n bodov sústavy, takže je funkciou spolu $3n$ súradníc. V dôsledku toho aj jej riešenia majú túto vlastnosť. To však značí, že ψ je amplitúda vlnenia, ktoré jestvuje len v myslenom $3n$ rozmernom tzv. *konfiguračnom priestore*. Takéto vlnenie v trojrozmernom priestore si ovšem nemôžeme predstaviť. Vlnová mechanika je teda vo všeobecnosti nenázorná fyzikálna teória, jej názorné výsledky sa však vynikajúco zhodujú so skutočnosťou.

V tejto súvislosti treba sa ešte pokusiť nájsť fyzikálny význam aspoň amplitúdy ψ materiálneho vlnenia, ktorá je funkciou len miesta. Za tým účelom majme na mysli napríklad difrakciu zväzku elektrónových lúčov

v tenkej kovovej fólii, s ktorou sme sa zaoberali už v predošlom článku. Keď si elektróny predstavujeme len ako elektrický náboj nesúce hmotné častice s veľmi malými rozmermi, povieme, že emulzia pri štúdiu tohoto javu použitej fotografickej platne po jej vyvolaní na niektorých miestach sčernie preto, že na toto miesto dopadlo mnoho elektrónov. Keď si však uvedomíme, že jav má charakter ohybového javu, povieme, že platňa sčernie na niektorých miestach preto, že na tieto miesta dopadalo pri pokuse vlnenie s veľkou intenzitou, ktorá — ako vieme — pri harmonických vlneniach klasickej fyziky je úmerná druhej mocnine amplitúdy. Nie je teda neprirodené vysloviť predpoklad, že druhá mocnina amplitúdy materiálneho vlnenia by mohla byť úmerná objemovej hustote elektrónov vo zväzku elektrónových lúčov určitej energie. Avšak v dôsledku toho, ako bola zavedená, amplitúdová funkcia ψ je vo všeobecnosti komplexná. Obstojí preto len predpoklad, že nie druhá mocnina amplitúdy vlnovej funkcie, ale druhá mocnina jej absolútnej hodnoty je úmerná objemovej hustote v našom prípade elektrónov, teda aj pravdepodobnosti, že vo zvolenom jednotkovom objemovom elemente sa elektrón nachádza. Pretože Schrödingerova rovnica je homogenná, jej riešenie ψ možno vždy voliť tak, aby konštanta úmernosti k vo vzťahu $|\psi|^2 = \psi\psi^* = kP$, v ktorom P značí pravdepodobnosť, sa rovnala číslu 1.

Pri používaní Schrödingerovej rovnice na riešenie rozličných atomárnych alebo aj iných dejov hľadáme len také jej riešenia, ktoré môžu mať fyzikálny význam, riešenia konečné, jednoznačné a spojité. Nazývajú sa vlastnými funkciami Schrödingerovej rovnice. Veľmi často Schrödingerova rovnica má práve uvedeným tzv. štandardným podmienkam vyhovujúce riešenie len pre niektoré, tzv. vlastné hodnoty v nej vystupujúcej celkovej energie E . Touto matematickou cestou dochádza vlnová mechanika k záveru, že energia rozličných systémov môže sa meniť len nespojite. V Bohrovej—Sommerfeldovej teórii zloženia atómov ako aj v Planckovej teórii žiarenia absolútne čierneho telesa je tento záver predpokladom. Treba si však uvedomiť, že vo vlnovej mechanike touto vlastnosťou sa vyznačuje Schrödingerova rovnica sama.

Príklad 1. Lineárny oscilátor. Budeme sa zaoberať pohybom *lineárneho harmonického oscilátora*, čiže pohybom na priamku viazaného hmotného bodu, ktorý pri výchylke x zo svojej základnej polohy podlieha sile $f = -k^2x$.

Ako vieme zo základov mechaniky, kruhová frekvencia kmitania takto upevneného hmotného bodu je ω , pričom $\omega^2 = k^2/m$, a jeho energia polohová $U = k^2x^2/2 = m\omega^2x^2/2 = 2\pi^2m\nu^2x^2$. V tomto prípade Schrödingerova vo všeobecnosti parciálne diferenciálna rovnica sa mení na obyčajnú

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E - 2\pi^2m\nu^2x^2) \psi = 0 \quad (\text{a})$$

Budeme hľadať jej riešenie vyhovujúce štandardným podmienkam. Zavedieme substitúciu

$$u = 2\pi \sqrt{\frac{mv}{h}} x$$

z ktorej vyplýva

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2\psi}{du^2} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 = 4\pi^2 \frac{mv}{h} \frac{d^2\psi}{du^2}$$

Tieto vzťahy dosadené do predošlej rovnice dávajú

$$\frac{4\pi^2 mv}{h} \frac{d^2\psi}{du^2} + \frac{4\pi^2 mv}{h} \left(\frac{2E}{h\nu} - \frac{4\pi^2 mv x^2}{h}\right) \psi = 0$$

a ďalej

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (A - u^2) \psi = 0, \quad A = \frac{2E}{h\nu} \quad (b)$$

Skúsme návrh na riešenie

$$\psi_0 = C_0 e^{-u^2/2}$$

Derivovaním dostávame

$$\frac{d\psi_0}{du} = -u\psi_0, \quad \frac{d^2\psi_0}{du^2} = -\psi_0 + u^2\psi_0 = (u^2 - 1)\psi_0$$

Funkcia ψ_0 vyhovuje diferenciálnej rovnici

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (1 - u^2) \psi = 0$$

teda aj rovnici (b), ak je $A = 1$, t. j. $E = \frac{h\nu}{2}$.

Skúsme, či rovnici (b) nevyhovuje zložitejšia funkcia premennej u a tým aj premennej x

$$\psi_1 = C_1 2u e^{-u^2/2}$$

Jej derivácie sú

$$\frac{d\psi_1}{du} = \left(\frac{1}{u} - u\right) \psi_1, \quad \frac{d^2\psi_1}{du^2} = (u^2 - 3) \psi_1$$

takže funkcia ψ_1 vyhovuje diferenciálnej rovnici

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (3 - u^2) \psi = 0$$

a teda aj rovnici (b), ak je $A = 3$, teda $E = \frac{3h\nu}{2} = \frac{1}{2}h\nu + h\nu$.

Podobným postupom by sme sa mohli presvedčiť, že rovnici (b) vyhovuje funkcia

$$\psi_n = C_n H_n(u) \cdot e^{-u^2/2}$$

v ktorej

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

je tzv. *Hermitov polynóm* n -tého stupňa, ak v nej $A = 2n + 1$, na čo je potrebné, aby energia oscilátora bola $E = \frac{1}{2} h\nu + nh\nu$, kde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Z teórie diferenciálnych rovníc vyplýva, že rovnica (a) pre iné hodnoty energie E fyzikálne prijateľné, t. j. už nám známym štandardným podmienkam vyhovujúce riešenie nemá. Na rozdiel od zákonov a predstáv klasickej fyziky, podľa ktorej energia lineárneho oscilátora môže byť akákoľvek, zo Schrödingerovej rovnice takto vyplýva, že energia lineárneho oscilátora môže byť len

$$E = \frac{1}{2} h\nu + nh\nu \quad (6)$$

Nemôže sa teda rovnať ani nule.

Príklad 2. Elektrón v potenciálovej jame. Predstavme si, že elementárna častica, napríklad elektrón, pre nejakú príčinu musí ostávať na osi X , pričom jeho polohová energia U závisí od jeho polohy na nej podľa tabuľky:

Obor	Hranice	Polohová energia
I	$-\infty < x < 0$	$U = \infty$
II	$0 < x < a$	$U = 0$
III	$a < x < \infty$	$U = \infty$

Pri týchto podmienkach sa elektrón nemôže nachádzať inde ako v obore 3 a hovoríme, že sa nachádza v *potenciálovej jame*. Keďže potom jeho potenciálna energia $U = 0$, príslušná Schrödingerova rovnica je

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} E\psi = 0$$

Po zavedení označenia $\frac{2\pi}{\lambda} = \sqrt{\frac{8\pi^2m}{\hbar^2} E}$ predošlá rovnica je tiež $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi$, ktorej všeobecný integrál — ako vieme — je

$$\psi(x) = C_1 e^{2\pi ix/\lambda} + C_2 e^{-2\pi ix/\lambda} = (C_1 + C_2) \cos \frac{2\pi}{\lambda} x + i(C_1 - C_2) \sin \frac{2\pi}{\lambda} x$$

Integračné konštanty nájdeme touto úvahou. Pretože na okrajoch jamy ($x = 0$, $x = a$) stáva sa polohová energia nekonečnou, pravdepodobnosť, že elektrón z oboru *II* prenikne do oboru *I* alebo *III*, sa rovná nule. S ohľadom na už prijatý význam amplitúdovej funkcie musí teda byť $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Z požiadavky $\psi(0) = 0$ vyplýva $C_1 + C_2 = 0$, alebo $C_2 = -C_1$, čo značí, že

$$\psi(x) = 2iC_1 \sin \frac{2\pi}{\lambda} x$$

Požiadavka $\psi(a) = 0$ dáva $\frac{2\pi}{\lambda} a = k\pi$, alebo

$$a = k \frac{\lambda}{2}, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

výsledok platný aj pre stojaté vlny na strune dĺžky a .

Zo vzťahu, ktorým sme vlnovú dĺžku λ v tomto príklade zaviedli, pre energiu E elektrónu v jeho potenciálovej jame vychádza

$$E = \frac{\hbar^2}{8a^2m} k^2 \quad (7)$$

Podľa Schrödingerovej rovnice energia elektrónu v potenciálovej jame nemôže byť teda akákoľvek. Je kvantovaná. Podobný výsledok by sme dostali, ak by potenciálová jama nebola úsečkou konečnej dĺžky na osi X , ale napríklad kockou s hranou dĺžky a v trojrozmernom priestore.

Príklad 3. Prienik elektrónu cez potenciálovú bariéru (tunelový efekt). Na rozdiel od predošlého príkladu v tomto príklade polohová energia na os X viazaného elektrónu nech je daná tabuľkou:

Obor	Hranice	Polohová energia
1	$-\infty < x < 0$	$U = 0$
2	$0 < x < a$	$U = U_0$
3	$a < x < \infty$	$U = 0$

Za predpokladu, že elektrón s energiou $E < U_0$ v istom čase bol v obore 1, budeme hľadať pravdepodobnosť, že ho neskoršie napriek tomu nájdeme v obore 3. Pre jednotlivé obory platné Schrödingerove rovnice sú:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} E\psi_1 &= 0 \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E - U_0)\psi_2 &= 0 \\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} E\psi_3 &= 0\end{aligned}$$

Zavedme veličiny λ a k vzťahmi

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \sqrt{\frac{8\pi^2m}{h^2} E}, \quad k = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}} = \kappa i \quad (\text{a, b})$$

Všeobecné riešenia predošlých rovníc sú potom

$$\begin{aligned}\psi_1 &= a_1 e^{-2\pi ix/\lambda} + b_1 e^{+2\pi ix/\lambda} \\ \psi_2 &= a_2 e^{-2\pi ikx/\lambda} + b_2 e^{+2\pi ikx/\lambda} \\ \psi_3 &= a_3 e^{-2\pi ix/\lambda} + b_3 e^{+2\pi ix/\lambda}\end{aligned}$$

Prvé členy týchto troch funkcií sú zrejme amplitúdy materiálnych vlnení postupujúcich proti smeru osi X a členy druhé amplitúdy vlnení postupujúcich so smerom osi X súhlasne rovnobežne. Keď elektrón v nejakom čase bol v obore 1, v obore 3 môže sa neskoršie pohybovať len s osou X súhlasne rovnobežne, čo značí, že $a_3 = 0$. Pomer ostatných piatich integračných konštánt vyplýva zo spojitosti funkcie ψ a jej prvých derivácií aj v bodoch $x = 0$ a $x = a$, teda z rovníc

$$\begin{aligned}a_1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\ a_2 e^{-2\pi ika/\lambda} + b_2 e^{+2\pi ika/\lambda} &= b_3 e^{+2\pi ia/\lambda} \\ a_1 - b_1 &= k(a_2 - b_2) \\ ka_2 e^{-2\pi ika/\lambda} - kb_2 e^{+2\pi ika/\lambda} &= -b_3 e^{+2\pi ika/\lambda}\end{aligned}$$

Píšme ďalej $u = e^{-2\pi ia/\lambda}$. Predošlé rovnice zjednodušujú sa tým na tvar:

$$\begin{aligned}a_1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\ a_1 - b_1 &= k(a_2 - b_2) \\ a_2 u^k + b_2 u^{-k} &= b_3 u^{-k} \\ ka_2 u^k - kb_2 u^{-k} &= -b_3 u^{-k}\end{aligned}$$

Z týchto algebraických rovníc vyplýva:

$$b_3 = \frac{4kb_1 e^{-2\pi ia/\lambda}}{(1+k)^2 e^{-2\pi ika/\lambda} - (1-k)^2 e^{+2\pi ika/\lambda}}$$

Nech je energia elektrónu ($m = 0,91 \cdot 10^{-30}$ kg) $E = 1$ eV, jeho polohová energia v potenciálovej bariére $U_0 = 5$ eV a jej hrúbka $a = 10^{-7}$ cm = $= 10^{-9}$ m. Potom, keďže podľa vzťahu (a) $\lambda = \hbar/\sqrt{2mE}$, exponent

$$-2\pi ika/\lambda = 2\pi ka/\lambda = \frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \doteq 1,2 \cdot 10^{10}$$

Podľa číselného vyhodnotenia tohto dosť typického prípadu v prípade elektrónu možno druhý člen v menovateli predošlého zlomku prakticky vždy zanedbať a písať

$$b_3 = \frac{4kb_1}{(1+k)^2} e^{-2\pi ia/\lambda} \cdot e^{-2\pi a \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar} = C \cdot e^{-\frac{2\pi a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

Pravdepodobnosť toho, že elektrón nájdeme za potenciálovou bariérou napriek tomu, že v určitom čase bol pred ňou, úmerná druhej mocnine absolútnej hodnoty amplitúdovej funkcie ψ_3 a teda aj druhej mocnine absolútnej hodnoty veličiny b_3 , je teda

$$P = P_0 e^{-\frac{4\pi a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}} \quad (8)$$

Získaný výsledok, ktorý je v dobrej zhode s pozorovaním, hovorí, že elektrón môže prejsť cez potenciálovú bariéru, aj keď v zmysle klasickej fyziky nemá k tomu potrebnú energiu, o ktorej sme v tomto príklade predpokladali, že spĺňa nerovnosť $E < U_0$.

17.11. Heisenbergov princíp neurčitosti. Matematickým vyjadrením základných zákonov mechaniky, napr. Newtonovho zákona sily, sú diferenciálne rovnice. Ich platnosť možno overiť tak, že sa z nich vypočíta priebeh deja pri daných počiatočných podmienkach a výsledok výpočtu sa porovná s pozorovaním. V prípade pohybu hmotného bodu v známom silovom poli sú počiatočnými podmienkami jeho počiatočná poloha a počiatočná rýchlosť alebo počiatočná hybnosť. W. Heisenberg ako prvý poznal, že takéto overovanie fyzikálnych zákonov v atómovej fyzike zásadne nie je možné. Možno sa o tom presvedčiť napr. touto úvahou:

Vo fyzikálnej optike sa dokazuje, že dva body v predmetovej rovine mikroskopu možno od seba rozlíšiť len vtedy, ak ich vzájomná vzdialenosť Δx sa rovná alebo je väčšia ako vlnová dĺžka λ k pozorovaniu použitého svetla.