

Michal Maheľ

FYZIKA III.

Mikrosvet a kvantová fyzika

Makroskopické systémy

Bratislava 2022



FYZIKA III.

Mikrosvet a kvantová fyzika
Makroskopické systémy

Autor:

Michal Maheľ

Univerzita Komenského v Bratislave

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Katedra experimentálnej fyziky

Vydavateľ:

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK

Knižničné a edičné centrum

Bratislava 2022

1. vydanie

Dielo je vydané pod medzinárodnou licenciou Creative Commons CC BY-NC-ND 4.0 (vyžaduje sa: povinnosť uvádzať pôvodného autora diela; len nekomerčné použitie; žiadne odvožené diela). Viac informácií o licencií a použití diela: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>



ISBN:

978-80-8147-119-3

Úvod

Cyklus publikácií *Fyzika I.-III.* predstavuje súhrn poznatkov na úrovni bakalárskeho štúdia fyziky, a je určený ako sprievodný učebný materiál študentom fyziky a príbuzných prírodných a technických vied. Poslúži však aj ako stručný prehľad pre absolventov a praktizujúcich odborníkov. Nejde o štandardnú učebnicu so súvislým textom, ale o súhrn výrokov (matematických aj verbálnych) podstatných pre danú tému, podľa potreby rozšírených o stručný komentár či matematické odvodenie. V tomto zmysle zhruba odpovedá „zápisu“ prednášok na jednotlivé témy. Výber a poradie tém sú zvolené tak, aby navodili syntetizujúci pohľad na fyziku, ktorý mnohým (najmä starším) štandardným učebniciam chýba.

Fyzika I. sa v prvej časti zaoberá základnými formami newtonovského pohybu – translačným a rotačným. Tieto poznatky aplikuje v druhej časti na systémy s veľkým počtom častíc, a formuluje základy molekulovej fyziky, štatistickej fyziky a termodynamiky. V tretej časti ponúka základný opis fundamentálnych klasických polí – gravitačného a elektromagnetického.

Fyzika II. sa venuje kmitom a vlnám, pričom prelínaním sa mechanických a elektromagnetických kmitov/vln v texte sa zdôrazňujú univerzálne fyzikálne zákonitosti tohto druhu pohybu. Posledná časť tohto dielu sa venuje relativistickým aspektom pohybu.

Fyzika III. v prvej časti formuluje základy kvantovej mechaniky, atómovej a jadrovej fyziky. Druhá časť ponúka prehľad základných fyzikálnych mechanizmov určujúcich mechanické, elektrické, magnetické a optické vlastnosti látok.

Text dodržiava istý „farebný kód“: Nové pojmy sú zvýraznené *modrým* textom. Dôležitosť tvrdení je vyjadrená (vo vzostupnom poradí) *fialovým/červeným* zvýraznením textu alebo *modrým/červeným* podčiarknutím/orámovaním. Doplnujúce komentáre a odvodenia sú ohraničené *hnedými* oválnymi rámcami, a matematické vsuvky *zelenými* hranatými rámcami.

Pri najlepšej snahe autora nie je možné vylúčiť nepresnosti či nejasné tvrdenia, za ktoré sa autor ospravedlňuje.

Obsah

Mikrosvet a kvantová fyzika

- Vlnovo-časticový dualizmus, princíp neurčitosti 7*
- Kvantovomechanický stav častice, vlnová funkcia 14*
- Stredné hodnoty, operátory a meranie fyzikálnych veličín 21*
- Schrödingerova rovnica 29*
- Kvantovomechanická častica v elektromagnetickom poli 33*
- Jednoduché jednočasticové stacionárne sústavy 37*
- Atóm vodíka 47*
- Spin 54*
- Poruchy energetického spektra atómu vodíka 57*
- Mnohoelektrónové atómy 62*
- Atómové jadro, elementárne častice 67*
- Rádioaktivita a jadrové reakcie 72*
- Kvantová štatistika 80*
- Molekuly, chemická väzba 90*
- Molekulové spektrá 97*

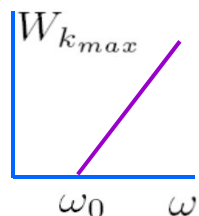
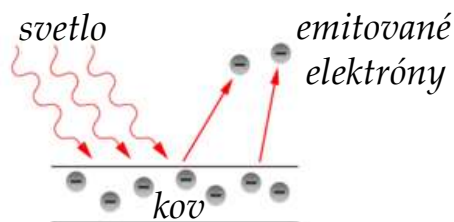
Makroskopické systémy

- Fázové prechody 104*
- Látkové skupenstvá 108*
- Reálne (neideálne) plyny 111*
- Reálne (neideálne) kvapaliny 115*
- Štruktúra tuhých látok 120*
- Elektrické vlastnosti tuhých látok 126*
- Magnetizmus látok 145*
- Prechod elektromagnetickej vlny látkou 153*
- Optické vlastnosti látok 157*

*MIKROSVET
A
KVANTOVÁ FYZIKA*

Vlnovo-časticový dualizmus, princíp neurčitosti

fotoelektrický jav (fotoefekt) – emisia elektrónov pri dopade svetla na povrch kovu



$$W_{k_{max}} = \hbar(\omega - \omega_0)$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Planckova konštanta

- *fotoemisía* nastáva pre frekvencie svetla *väčšie* než určitá *prahová* frekvencia ω_0
- *maximálna* kinetická energia emitovaných fotónov *rastie lineárne* s *frekvenciou* svetla
- *intenzita* svetla ($(\text{amplitúda})^2$) ovplyvňuje *počet* emitovaných elektrónov, *nie ich energiu!*

vysvetlenie: svetlo sa šíri v kvantách („časticách“ svetla) – fotónoch, energia fotónu je $\hbar\omega$

$$W_{k_{max}} = \hbar\omega - \hbar\omega_0$$

energia svetelného kvanta (fotónu)

výstupná práca – min. energia potrebná na vytrhnutie (uvoľnenie) elektrónu z povrchu kovu ($W_k = 0$)

energia fotónov je určená frekvenciou svetla - ak je menšia než výstupná práca z kovu, nestačí na uvoľnenie elektrónu z povrchu (bez ohľadu na intenzitu svetla)

intenzita svetla je daná počtom fotónov (dopadajúcich na jedn. plochu za jedn. času) - počet emitovaných elektrónov závisí od počtu dopadajúcich fotónov (nie od ich frekvencie)

brzdne žiarenie – vyžarovanie elektromagnetických (RTG) vln, tj. emisia fotónov, z povrchu látky bombardovanej rýchlymi elektrónmi (inverzný jav k fotoefektu)

elektróny urýchlené elektrickým napätím U „brzdia“ na povrchu – vyžarujú fotóny, frekvencia fotónov $\sim W_k = eU$ (kinetická energia elektrónov)

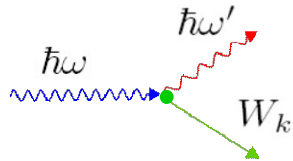
intenzita žiarenia, tj. počet fotónov \sim počtu elektrónov (nie ich energii)

$$\omega_{max} \sim U$$

$$\hbar\omega_{max} = eU$$

$$1eV = 1,6 \cdot 10^{-19} J$$

Comptonov jav – zmena frekvencie elektromagnetickej vlny pri rozptyle na elektrónoch



$$\hbar(\omega - \omega') = W_k \quad \text{- kinetická energia elektrónu}$$

fotón sa šíri rýchlosťou c – nemá pokojovú hmotnosť ($m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ je konečné pre $v = c$ len ak $m_0 = 0$)

$$W = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = pc = \hbar\omega \Rightarrow p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar K = \frac{h}{\lambda}$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{K}$$

$$\hbar\omega = W = mc^2 \Rightarrow \underline{m = \frac{\hbar\omega}{c^2} = \frac{p}{c}}$$

hmotnosť fotónu

(pri rýchlosti c)

hybnosť fotónu

niektoré fyzikálne javy (napr. fotoefekt) sa dajú vysvetliť *len časticovou povahou svetla*, iné (interferencia a difrakcia) *len vlnovou povahou svetla* – oba prístupy sú *komplementárne*

de Broglieho vlny

dualistický charakter vlna-častica nie je vlastný len fotónu ale ľubovoľnej častici (telesu)!

$$p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \boxed{\lambda = \frac{h}{p}} \text{ - de Broglieho vlnová dĺžka} \quad p = mv \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv}, \quad m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

každá častica s danou hybnosťou je de Broglieho vlna s odpovedajúcou vlnovou dĺžkou (... vlna čoho?)

fázová rýchlosť vlny $v_f = \frac{\omega}{K} = \frac{\lambda\omega}{2\pi}$

energia kvanta vlny $W = mc^2 = \hbar\omega$

$$\left. \begin{array}{l} v_f = \frac{\omega}{K} = \frac{\lambda\omega}{2\pi} \\ W = mc^2 = \hbar\omega \end{array} \right\} v_f = mc^2 \frac{\lambda}{h} = \frac{mc^2}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

ak $v < c \Rightarrow v_f > c$! $\boxed{v_f = \frac{c^2}{v}}$ rýchlosť častice

realistickejšia predstava je, že de Broglieho vlna (odpovedajúca voľnej častici) nemá charakter (neko-
nečnej) monochromatickej vlny ale vlnového balíka - častica je lokalizovaná v priestore a čase, tj. nemá „ostrú“ hodnotu ω a K) – šíri sa grupovou rýchlosťou

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} = \frac{\frac{d\omega}{dv}}{\frac{dK}{dv}} \left\{ \begin{array}{l} \omega = \frac{mc^2}{\hbar} = \frac{m_0c^2}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \quad \frac{d\omega}{dv} = \frac{m_0v}{\hbar(1-\frac{v^2}{c^2})^{\frac{3}{2}}} \\ K = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{m_0v}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \quad \frac{dK}{dv} = \frac{m_0}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{array} \right\} \quad \boxed{v_g = v = \frac{p}{m}}$$

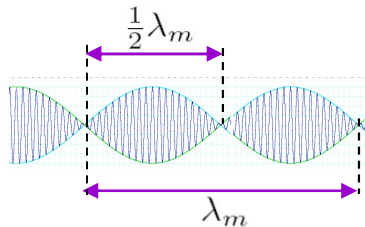
de Broglieho vlna (vlnový balík) sa pohybuje tou istou rýchlosťou ako (klasická) častica
fázová rýchlosť nemá výraznejší fyzikálny zmysel – nepredstavuje šírenie hmoty (energie),
len šírenie fázy (pomyselného „matematického bodu“) vlny (jej veľkosť nie je teda obmedzená
postulátmi teórie relativity)

princíp neurčitosti

makroskopické teleso je presne lokalizované – má svoju polohu

vlnový balík – častica je „niekde v ňom“ – neurčitosť v lokalizácii = šírka vlnového balíka

záznej $\psi = \psi_1 + \psi_2 = A \cos(\omega t - Kx) + A \cos((\omega + \Delta\omega)t - (K + \Delta K)x) =$
 $= 2A \cos(\omega t - Kx) \cos(\frac{1}{2}\Delta\omega t - \frac{1}{2}\Delta K x)$



vlnová dĺžka modulácie

$$\lambda_m = \frac{2\pi}{K_m} = \frac{2\pi}{\frac{\Delta K}{2}} \Rightarrow \frac{\lambda_m}{2} = \frac{2\pi}{\Delta K} = \Delta x$$

šírka vlnového balíka

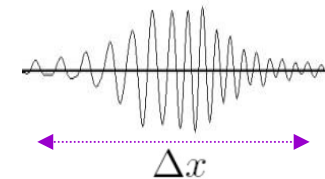
$$K = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \Delta K = \frac{2\pi}{\Delta \lambda}$$

rozptyl vlnových dĺžok v balíku

$$p = \hbar K \Rightarrow \Delta p = \hbar \Delta K$$

$$\underline{\Delta x \Delta K = 2\pi}$$

$$\underline{\Delta x \Delta p = 2\pi \hbar = h}$$



reálna neurčitosť $\underline{\Delta x \Delta p \geq h}$

minimálna neurčitosť

nemôžeme súčasne zmerať polohu aj hybnosť častice s ľubovoľnou presnosťou!

ak chceme zmerať polohu telesa, musíme sa ho „dotknúť“ fotónom (musíme ho vidieť), jeho polohu určíme s presnosťou $\Delta x \cong \lambda$ (vlnová dĺžka svetla) - hybnosť fotónu $\frac{h}{\lambda}$ vnesie pri zrážke s telesom neurčitosť $\Delta p = \frac{h}{\lambda}$ do hybnosti telesa

čím presnejšie chceme určiť polohu telesa, tým menšiu vlnovú dĺžku svetla musíme použiť – tým väčšia bude neurčitosť hybnosti telesa !!!

neurčitosť nesúvisí s nedokonalosťou experimentu, je **principiálna!**

izolovaný vlnový balík je superpozíciou vln so spojite sa meniacou λ v intervale $\Delta\lambda$ (dve vlny s rozdielom vlnových dĺžok $\Delta\lambda$ vytvárajú reťazec vlnových balíkov), šírka izolovaného vlnového balíka je $\Delta x \cong \frac{1}{\Delta K} = \frac{\Delta\lambda}{2\pi}$ (namiesto $\Delta x \cong \Delta\lambda$ pre balík v reťazci)

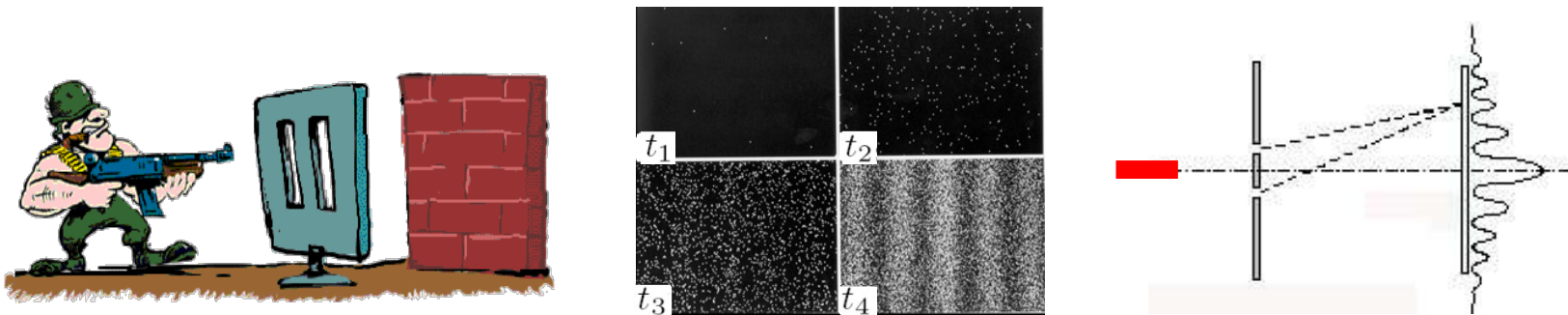
$$\Delta p = \hbar\Delta K \longrightarrow \boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar} \quad \text{— Heisenbergov princíp neurčitosti}$$

neurčitosť v zmeraní frekvencie vlny $\Delta\omega \sim \frac{1}{\Delta t}$ ← doba merania
 odpovedajúca neurčitosť v určení energie $\Delta W = \hbar\Delta\omega \quad \Rightarrow$

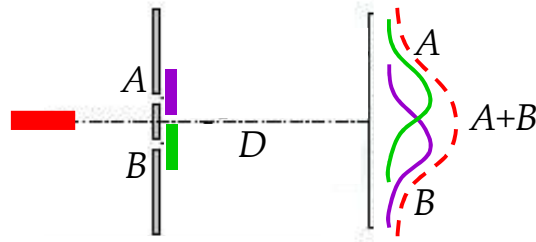
$$\boxed{\Delta W \Delta t \geq \hbar}$$

ΔW je neurčitosť v zákone zachovania energie počas doby merania Δt - fundamentálny význam – na veľmi krátkych časových intervaloch sa energia nemusí zachovávať!

dvojštrbinová interferencia častíc (elektrónov)



štrbinami prechádzajú jednotlivé elektróny, po čase vzniká na detektore interferenčný obrazec



predpoklad: každý elektrón preletí **bud'** otvorom A **alebo** B
pokus: zakryjeme najprv len otvor A, potom len otvor B, detektor zaznamená hustotu dopadov v oboch prípadoch
predpokladaný výsledok: hustota dopadov pri odokrytých oboch otvoroch je súčtom výsledkov A a B (ved' prilietajú **jednotlivo** jedným alebo druhým otvorom)
skutočný výsledok: **interferenčný obrazec!**

*v danom okamihu prechádza sústavou dvoch štrbín vždy **len jeden** elektrón – s čím interferuje? – sám so sebou? - rozdelí sa na dve časti, z ktorých každá prechádza jednou štrbinou? – **kadiaľ vlastne prelietajú elektróny?***

pokus: **lokalizujeme** elektróny prelietajúce otvormi – vložme do okolia otvorov častice, ktoré „zasvietia“ pri „stretnutí“ s prelietajúcim elektrónom – pri každom prelete budeme **vedieť, ktorým otvorom elektrón preletel!** stačí nám **neurčitosť polohy** $\Delta x < \frac{d}{2}$ (d – vzdialenosť otvorov)

výsledok: **poznáme dráhu** každého elektrónu, detektor zaznamená A+B – **žiadna interferencia!!!**

vysvetlenie: „svietiaci“ častica pri interakcii zmení pôvodnú hybnosť elektrónu $p = \frac{h}{\lambda}$ o Δp (veľkosť aj smer), t.j. spôsobí **neurčitosť polohy dopadu** elektrónu na detektor $\delta = \frac{\Delta p}{p} D$

$$p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \delta = \frac{\Delta p \lambda D}{h}$$

$$\left. \begin{array}{l} \Delta p \Delta x \geq \hbar \\ \Delta x < \frac{d}{2} \end{array} \right\} \Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} > \frac{2\hbar}{d}$$

vzdialenosť interfer. maxima od minima

$$\delta > \frac{\lambda D}{\pi d} \cong \frac{\lambda D}{2d}$$

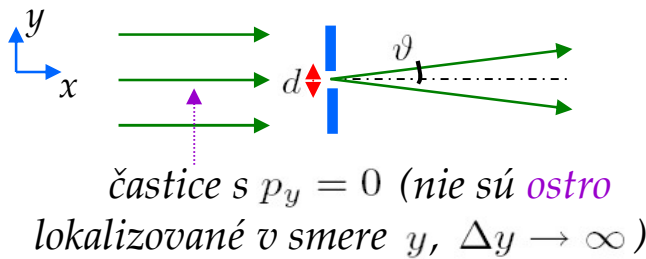
interferencia je nepozorovateľná!

ak *lokalizujeme* elektrón v jednom z otvorov, *zrušíme* interferenciu – *principiálny* záver!
 (vyplýva to z princípu neurčitosti, nejde o nedokonalosť experimentu)

interferencia je vlastnosťou *vln*, *lokalizovaný* elektrón je *častica*
teleso (elektrón) *nemôže súčasne vykazovať vlnové aj časticové vlastnosti!*

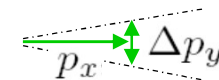
interferujú aj *makroskopické* telesá ako vlny? *áno*, avšak vzdialenosť interferenčných maxím a miním $\frac{D}{2d} \lambda = \frac{D}{2d} \frac{h}{p} = \frac{D}{2d} \frac{h}{mv}$ je nemerateľne malá – *interferencia je nepozorovateľná*

difrakcia (ohyb) častíc na štrbine



v štrbine lokalizujeme častice v smere y : $\Delta y = d$, „získajú“ preto *nenulovú* neurčitosť hybnosti v tomto smere – *ohnú sa*

$$\Delta p_y \cong p_x \Delta \vartheta$$



poloha 1. difrakčného minima $d \frac{\sin \vartheta}{\Delta \vartheta} = \lambda$ $\Delta \vartheta = \frac{\lambda}{d} = \frac{\Delta p_y}{p_x}$ $\Delta y \Delta p_y = p_x \lambda = h$

zmenšením d „spresňujeme“ y -ovú polohu častice ale zväčšujeme nepresnosť jej hybnosti v tomto smere (ak uvažíme aj vyššie difrakčné minimá, neurčitosť p_y ešte *vzrastie* – rovnosť prejde na *nerovnosť*)

z klasickej teórie vln (pozri Vlnový balík, disperzia) vieme, že $\Delta x \Delta K \approx \Delta \omega \Delta t \geq 2\pi$ pre vlnový balík, v kvantovej mechanike $\Delta K \rightarrow \Delta p = \frac{\Delta K}{\hbar}$

akou vlnou je teda častica (teleso) pri interferencii?

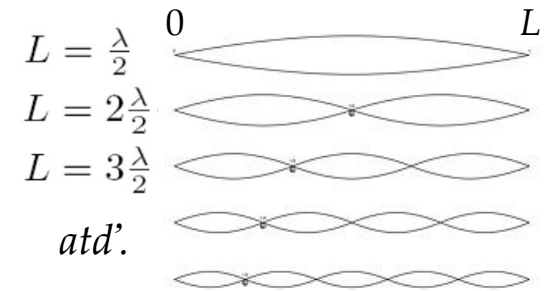
Kvantovomechanický stav častice, vlnová funkcia

častica na úsečke dĺžky L

častici s danou hybnosťou p priradíme de Broglieho vlnu s dĺžkou $\lambda = \frac{h}{p}$, mechanickou analógiou je teda vlnenie struny dĺžky L – akékoľvek vlnenie je **superpozíciou vlastných módov – stojatých vln** - každá stojatá vlna je určená **jedinou** hodnotou frekvencie, resp. vlnovej dĺžky, $\lambda_n = \frac{2L}{n}$, $n = 1, 2, \dots$, ktorej prislúcha (podľa de Broglieho hypotézy) **presne určená hodnota energie častice**

$$W_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

priestorová **lokalizácia** častice (vymedzenie ohraničeného priestoru) nevyhnutne vedie ku **kvantovaniu jej energie**, podobne ako lokalizácia stojatej vlny (na **oboch** koncoch) vedie ku kvantovaniu jej frekvencie, resp. vlnovej dĺžky – len stojaté vlny **určitých** frekvencií sú **stacionárnymi** riešeniami – stojaté vlny majú (pri absencii tlmenia) **v čase nemenný** charakter



stacionárnym stojatým de Broglieho vlnám odpovedajú **stacionárne hodnoty energie častice** – **stacionárne energetické stavy**

kmity **zložené z viacerých** stojatých vln **nemajú presne definovanú jedinú** frekvenciu ani energiu – sú **v čase sa vyvíjajúcimi** – **nestacionárnymi stavmi**

časticu ako vlnu (vlnový balík) popisuje **vlnová funkcia** $\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) \exp\{-i\theta(\vec{r}, t)\}$
amplitúda fáza
vlnovej funkcie

$|\psi|^2 = \mathcal{P}$ - hustota pravdepodobnosti namerania častice (telesa) v mieste \vec{r} a čase t

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P} dV = 1 \quad (\text{častica „určite niekde je“}) \quad \Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1 \quad \begin{array}{l} \text{normovaná} \\ \text{vlnová funkcia} \end{array}$$

vlnová funkcia ψ predstavuje amplitúdu pravdepodobnosti namerania častice v danom mieste a čase

častica na úsečke dĺžky L (pokračovanie)

tvor vlnovej funkcie v základnom stave $n = 1$ (najnižší vlastný mód stojatej vlny) v danom čase, napr. $t = 0$

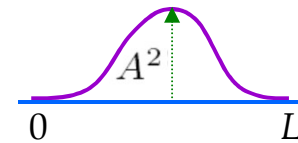
$$\psi(x, t = 0) = A \sin \frac{\pi x}{L}, \quad 0 \leq x \leq L \quad \psi(x, t = 0) = 0, \quad x < 0$$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ - pravdepodobnosť nájdenia častice v objeme dV okolo bodu \vec{r} v čase t

podmienka normovateľnosti $\int_0^L |\psi(x, t = 0)|^2 dx = 1$

$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{A^2}{2} \left\{ \int_0^L dx - \int_0^L \cos \frac{2\pi x}{L} dx \right\} = \frac{A^2 L}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\alpha)$$



predpokladajme harmonickú časovú závislosť vlnovej funkcie na základnej harmonickej frekvencii $\omega_1 = \frac{W_1}{\hbar} = \frac{\pi \hbar}{4mL^2}$

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \cos \omega_1 t$$

v istých okamihoch $t_k = (2k + 1) \frac{\pi}{2\omega_1}$, $k = 0, 1, \dots$ však $\cos \omega_1 t_k = 0 \Rightarrow \psi(x, t_k) = 0$,

tj. častica tam nie je!!!

\Rightarrow neexistuje reálna funkcia (času), ktorá by splňala fyzikálne požiadavky (častica tam vždy niekde musí byť) – časová závislosť musí odpovedať komplexnej funkcii, napr. $e^{i\omega t}$

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{i\omega_1 t}$$

($\int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$)

vlnová funkcia *nie je* to priamo *pozorovateľná* (experimentálne merateľná) veličina - „nevadí“, že *je komplexná*

vlnová funkcia je *komplexná*, naproti tomu pri klasických vlnách je komplexná reprezentácia len matematickou pomôckou a reálny fyzikálny význam má len reálna časť vlny

hustota pravdepodobnosti $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ - *reálna* veličina
- *v stacionárnom stave nezávisí od času*

$$ss^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2$$

kvantovomechanický stav častice, popísanej vlnovou funkciou, *v danom čase* je definovaný priestorovým rozdelením hustoty pravdepodobnosti namerania častice a jej hybnosťou, resp. energiou v tomto čase (stav častice v *klasickej* fyzike je určený jej polohou a hybnosťou) – *vývoj* tohto stavu *v čase* je určený *časovou závislosťou vlnovej funkcie*

ak danému stavu častice prislúcha „*ostrá*“ (tj. jediná) hodnota energie, ide o *stacionárny* - v čase sa nemeniaci stav (trvajúci „nekonečne“ dlho - podľa princípu neurčitosti „ostrej“ hodnote energie prislúcha „*nekonečná*“ neurčitosť času)

ak ide o *voľnú* časticu ($W = W_k$, $W_p = 0$), „*ostrá*“ hodnota *energie* (kinetickej) znamená „*ostrú*“ hodnotu *hybnosti*, a teda „*nekonečnú*“ neurčitosť v určení jej *polohy* (princíp neurčitosti)

„*ostrej*“ hodnote *energie* častice prislúcha „*ostrá*“ hodnota *frekvencie* pravdepodobnostnej vlny (vlnovej funkcie) - ide o *monochromatickú* vlnu (takáto vlna vždy začína a končí „v nekonečne“) – častica teda *nie je lokalizovaná* (môže byť *všade*)

princíp superpozície – lineárne kombinácie (stavových) vlnových funkcií, popisujúcich dostupné stavy, tiež popisujú dostupné stavy

nový dostupný stav $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$ dostupné stavy
 ľubovoľné komplexné koeficienty, spĺňajúce normovaciú podmienku

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sum_m (c_m \psi_m(x))^* \sum_n (c_n \psi_n(x)) dx = \sum_{m,n} c_m^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = 1$$

pri častici na úsečke stacionárne stavy sú (odpovedajúce vlastným módom)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, \dots$$

pre funkcie typu $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ platí $\int_0^L \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ 1, & n = m \end{cases}$

oblasť nenulovosti vlnovej funkcie

podmienka ortonormovanosti

Kroneckerov „delta“-symbol

odtiaľ $\sum_n c_m^* c_n = 1$ pre $n = m$, teda $\sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 = 1$

pri voľnej častici (s ostrou hodnotou energie aj hybnosti) stacionárne stavy tvoria spojité spektrum

$$\psi_K = C e^{iKx}, \quad K = \frac{p}{\hbar} \text{ z intervalu } (\infty, -\infty)$$

novým dostupným stavom je i „spojitá“ superpozícia $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(K) e^{iKx} dK$

ľubovoľný stav, ktorý má nenulové aspoň 2 koeficienty c_n (superpozícia týchto 2 stavov, napr. stacionárnych stavov s ostrou hodnotou energie), má neurčitú energiu

ak je vlnová funkcia $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$ normovaná, $\sum_n |c_n|^2 = 1$, potom vlnové funkcie ψ_n tvoria úplný systém (bázu) – ľubovoľnú vlnovú funkciu, popisujúcu možný stav, možno vyjadriť ako lineárnu kombináciu báзовých vlnových funkcií

podobne ľubovoľný vektor v 3-rozmernom priestore možno vyjadriť ako lineárnu kombináciu 3 jednotkových báзовých vektorov $\vec{a} = a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k}$, pričom báзовé vektory $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ tvoria ortogonálny (pravouhlý) systém $\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j = \delta_{ij}$, $\vec{x}_i = \vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

výber vektorovej bázy (tj. výber súradnicovej sústavy) je vecou praktickej voľby (napr. pri štúdiu priamočiareho pohybu telesa je „rozumné“ zvoliť bázu, kde jeden z vektorov bázy má smer pohybu), prechodom z jednej bázy na inú ($\vec{i}, \vec{j}, \vec{k} \rightarrow \vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$) sa veľkosti vektorov nemenia

$$a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k} \rightarrow a'_x \vec{i}' + a'_y \vec{j}' + a'_z \vec{k}' \quad a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = \sum_n a_n^2 = \sum_n a_n'^2, \quad n = x, y, z$$

rovnako výber bázy vlnových funkcií je otázkou fyzikálne rozumnej voľby (napr. pri častici na úsečke je prirodzenou bázou systém stacionárnych stavových funkcií – vlastných módov stojatých vln)

vlnová funkcia a meranie

výsledkom experimentu je vždy len jedna z dostupných hodnôt ψ_n , merateľná s pravdepodobnosťou $P_n = |c_n|^2$, tj. po meraní je systém v stave ψ_n . pred meraním bol jeho stav superpozíciou všetkých dostupných stavov

v klasickej fyzike vieme vypočítať časový vývoj stavu častice (trajektóriu), ak poznáme jej pohybovú rovnicu a počiatočné podmienky – vieme teda presne vyrátať polohu a hybnosť častice v danom čase, ak ich poznáme v inom čase

v kvantovej mechanike sa „musíme uspokojiť“ s možnosťou vyrátania pravdepodobnosti „nájdania“ častice v danom čase v danom stave, ak poznáme jej stav v inom čase

štatistický charakter pohybu klasického súboru mnohých častíc je daný našou neschopnosťou počítať v reálnom čase „príliš veľa“ závislých pohybových rovníc, naproti tomu štatistický charakter kvantovej mechaniky je principiálny

kvantovomechanická interpretácia viacštrbinovej interferencie

tvrdenie, že častice látky (napr. elektróny) alebo svetla (fotóny) prechádzajú (jednotlivo a v celosti) vždy len jednou zo štrbín, nemá oporu vo fyzike !!! (nemáme na to matematický opis) pokiaľ nejakým experimentom neurčíme, ktorou zo štrbín častica prešla, musíme pripustiť istú pravdepodobnosť prechodu pre každú zo štrbín – tieto pravdepodobnosti matematicky vyjadrujeme prostredníctvom vlnových funkcií – každej možnosti (štrbine) priradíme vlnovú funkciu ako amplitúdu pravdepodobnosti namerania častice (v danom čase a mieste, tj. v danej štrbine), ktorá sa šíri ako vlna – jednotlivé pravdepodobnostné vlny (vyjadrujúce jednotlivé možnosti) spolu interferujú – výsledný interferenčný obrazec (na registračnej ploche, tienidle) určuje pravdepodobnosť dopadu častice na dané miesto – dopad každej jednotlivej častice (mikrostav) je náhodný, „riadi sa“ však výsledným (interferenčným) rozdelením pravdepodobnosti – pri mnohonásobnom dopade častíc je početnosť častíc dopadnutých na dané miesto (tj. intenzita dopadajúceho toku častíc) zhodná s interferenčným obrazcom pravdepodobnostných vln – pravdepodobnostné vlny poskytujú pravdivý popis správania reálnych objektov

ak chceme namerať časticu v jednej zo štrbín, musíme sa tejto častice „dotknúť“ (svetlom, inou časticou) - musíme ju nechať interagovať s našim detektorom pri danej štrbine – táto interakcia však principiálne ovplyvní (Heisenbergov princíp neurčitosti) časticu natoľko, že rozptýl v polohe dopadu prevýši vzdialenosť interferenčných maxím – interferencia bude nepozorovateľná („rozmazaná“)

kvantovomechanická interpretácia Fermatovho princípu

svetlo sa šíri z miesta A do miesta B po opticky najkratšej dráhe – tej, ktorú prejde za najkratší čas fotóny (to isté platí pre voľné častice látky) sa šíria z miesta A do B po všetkých dráhach – existuje nenulová amplitúda pravdepodobnosti „pohybu“ fotónu po ľubovoľnej dráhe medzi A a B (pravdepodobnostná vlna) – výsledná intenzita svetla (prichádzajúceho z A) v B odpovedá superpozícii (interferencii) pravdepodobnostných vln po všetkých dráhach – najväčší (konštruktívny) príspevok k interferencii však dávajú dráhy blízke opticky najkratšej dráhe, príspevky dlhších dráh interferujú deštruktívne

kvantovomechanická interpretácia šírenia svetla v látkovom prostredí

svetlo sa šíri v rôznom prostredí rôznymi rýchlosťami, fotóny sa však šíria rýchlosťou c !!!

šírenie svetla látkou je opakujúcim sa procesom absorpcie a emisie fotónov časticami látky (atómami, molekulami) - fotón (šíriaci sa rýchlosťou c) je absorbovaný časticou látky a následne (s istým časovým oneskorením) je touto časticou emitovaný „iný“ fotón (opäť rýchlosťou c) – stredná rýchlosť „šírenia sa“ fotónu (so zarátaním „zdržania sa“ na časticách látky) odpovedá grupovej rýchlosti šírenia svetla v danom prostredí, tj. rýchlosti šírenia sa hustoty pravdepodobnosti namerania fotónu (rozmer vlnového balíka ako rozloženia amplitúdy pravdepodobnosti namerania fotónu je oveľa väčšia než vzdialenosť medzi časticami v látke)

odraz svetla od povrchu látky je sledom absorpcie dopadajúcich fotónov a emisie nových fotónov časticami látky, deje sa nielen na povrchu – „odrazené“ svetlo odpovedá superpozícii (interferencii) všetkých pravdepodobnostných vln (prislúchajúcich emitovaným fotónom) vystupujúcich z povrchu látky

Stredné hodnoty, operátory a meranie fyzikálnych veličín

pravdepodobnosť namerania častice v intervale dx okolo bodu x $\mathcal{P}(x)dx = |\psi|^2 dx$

stredná poloha (x) častice $\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \mathcal{P}(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(x) dx} = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx$

ľubovoľná funkcia $G(x)$, jej stredná hodnota
(G môže byť $G(x, t)$, napr. $W_p(x, t)$)

$$\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* G(x) \psi dx$$

! pre W, p však *neexistujú* $W(x, t), p(x, t)$, lebo $\Delta p \Delta x \geq \hbar, \Delta W \Delta t \geq \hbar$!

stav klasickej častice (sústavy) je úplne zadaný jej polohou a hybnosťou, v kvantovej mechanike je stav úplne zadaný stavovou vlnovou funkciou, obsahujúcou úplnú informáciu o polohe i hybnosti kvantovomechanickým analógom klasickej trajektórie častice je (časovo závislá) stredná poloha častice („stred“ vlnového balíka) $\langle \vec{r}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) dV$

v stave $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p}} \psi_{\vec{p}}(\vec{r})$, ktorý je superpozíciou (sčítaním cez všetky dostupné hodnoty \vec{p}) rovinných vln $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = C e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} = C e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}}$ a splňa podmienku normovanosti $\sum_{\vec{p}} |c_{\vec{p}}|^2 = 1$, nameriame jednotlivé hodnoty hybnosti s pravdepodobnosťami $\mathcal{P}_{\vec{p}} = |c_{\vec{p}}|^2$, a stredná hodnota hybnosti je daná vzťahom

$$\langle \vec{p} \rangle = \sum_{\vec{p}} \mathcal{P}_{\vec{p}} \vec{p} = \sum_{\vec{p}} |c_{\vec{p}}|^2 \vec{p}$$

dá sa ukázať (pozri napr. J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý: Úvod do kvantovej mechaniky, kap. 2.9), že tento vzťah je identický so vzťahom

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi(\vec{r}) dV$$

nabla operátor

$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$, $\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p} \psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ - operátor $\frac{\hbar}{i} \nabla$ „vylúpne“ z každej de Broglieho vlny príslušnú hybnosť

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = p_x \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \quad \text{atd.} \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x \quad \text{atd.}$$

zložky hybnosti

formálne zosúladenie výrazov pre *stredné hodnoty súradníc a hybností* vedie k výrazom typu

$$\langle a \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{a} \psi(\vec{r}) dV$$

kde \hat{a} je *operátor príslušný k veličine* a ($\vec{r}, x, y, z, \vec{p}, p_x, p_y, p_z$), tj. istý súbor (predpis) úkonov, ktorý pri aplikovaní na vlnovú funkciu z nej „vylúpne“ hodnotu príslušnej veličiny

operátor polohy

$$\hat{r} = \vec{r} \quad \hat{x} = x, \text{ atd. } y, z$$

operátor hybnosti

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \text{ atd. } \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

stredné hodnoty

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{r} \psi(\vec{r}) dV \quad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{x} \psi(\vec{r}) dV$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{p} \psi(\vec{r}) dV \quad \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi(\vec{r}) dV \quad \text{atd.}$$

každý pozorovateľnej veličine G charakterizujúcej systém možno priradiť *kvantovomechanický operátor* \hat{G} tým, že sa G vyjadrí pomocou r a p a potom $p \rightarrow \hat{p}$

stredná hodnota veličiny

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \hat{G} \psi(\vec{r}) dV$$

ak veličina G závisí napr. od x^n , resp. $(p_x)^n$, jej operátor bude obsahovať $(\hat{x})^n = x^n$, resp.

$$(\hat{p}_x)^n = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}$$

pozor na poradie!

$$\hat{x}\hat{p}_x f(x) = -i\hbar x \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x\hat{x} f(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x f(x)) = -i\hbar f(x) - i\hbar x \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

súčin operátorov
nie je komutatívny!

operátory energie

$$\hat{W}_k = \frac{(\hat{p})^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \quad \hat{W}_p = W_p(\vec{r})$$

$$\hat{H} = \hat{W}_k + \hat{W}_p = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + W_p(\vec{r})$$

Hamiltonov (kvantový)
operátor - hamiltonián

operátory momentu hybnosti

$$(\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p})$$

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$(\hat{L})^2 = (\hat{L}_x)^2 + (\hat{L}_y)^2 + (\hat{L}_z)^2$$

ak pre danú funkciu $\psi(x)$ platí $\hat{G}\psi(x) = G\psi(x)$, kde G je číslo, funkcia $\psi(x)$ je *vlastnou funkciou* operátora \hat{G} a G je jeho *vlastnou hodnotou*

operátor môže mať viacero vlastných funkcií a vlastných hodnôt, *súbor* vlastných hodnôt operátora – *spektrum* – môže byť *diskrétne* i *spojité* - vlastné funkcie predstavujú *súbor možných stavov* systému (t.j. stavov, ktoré môžeme *namerať*)

diskrétne spektrum vlastných hodnôt operátora \hat{G} predstavuje *možné* experimentálne *merateľné* hodnoty G_n veličiny G , ku ktorej operátor prislúcha, $\hat{G}\psi_n = G_n\psi_n$

vlastná hodnota operátora, ktorej prislúcha *viacero* vlastných funkcií, sa nazýva (viacnásobne) *degenerovaná*

lineárne hermitovské operátory

ak pre ľubovoľnú funkciu $\psi(x)$ platí $\{\int \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)dx\}^* = \int \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)dx$, potom operátor \hat{A} je *lineárnym hermitovským operátorom*

dve *navzájom komplexne združené* čísla sú si rovné len ak sú *reálne* – *všetky stredné hodnoty lineárnych hermitovských operátorov sú reálne čísla* (to je požiadavka „rozumnej“ teórie)

pre hermitovské operátory platí $\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int (\hat{A} \psi_1)^* \psi_2 dx$

operátor \hat{A}^+ je *hermitovsky združený* k operátoru \hat{A} ak $\int (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx$

$$\text{tj. } (\hat{A}^+)^+ = \hat{A}, (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$$

vlastné hodnoty hermitovského operátora (príslušné k *normovateľným* vlastným funkciám) sú *reálne* čísla

vlastné funkcie príslušné k *rôznym* vlastným hodnotám hermitovského operátora sú navzájom *ortonormované* (ortonormované, $\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}$)

(hermitovským) operátorom dôležitých fyzikálnych veličín prislúchajú *úplné* systémy vlastných funkcií, tj. *každú z týchto veličín možno vyjadriť do radu vlastných funkcií príslušného operátora*

$$A(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

stredná hodnota veličiny G vo vlastnom stave $\psi_n(\vec{r})$ je rovná vlastnej hodnote príslušnej tomuto stavu

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\vec{r}) \hat{G} \psi_n(\vec{r}) dV = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\vec{r}) G_n \psi_n(\vec{r}) dV = G_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) dV = G_n \cdot 1 \text{ (ortonormovanosť vl. f.)}$$

výsledkom merania veličiny G , ktorej prislúcha operátor \hat{G} , môže byť len jedna z vlastných hodnôt tohto operátora

ak sa systém nachádza v stave $\psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r})$ (superpozícia vlastných stavov tvoriacich úplný ortonormovaný systém $\int \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) dV = \delta_{mn}$, tj. platí $\int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV = \sum_n |c_n|^2 = 1$), potom

stredná hodnota veličiny G v stave $\psi(\vec{r})$ je $\langle G \rangle = \sum_n |c_n|^2 G_n$

pravdepodobnosť namerania vlastnej hodnoty G_n v tomto stave je $\mathcal{P}_n = |c_n|^2$

ak sa systém pred meraním nachádza v stave, ktorý je superpozíciou vlastných stavov, bezprostredne po meraní (ktorého výsledkom je jedna z vlastných hodnôt meranej veličiny, príslušná jednému z vlastných stavov), sa systém nachádza v konkrétnom vlastnom stave – meranie teda „ovplyvňuje“ systém (vid' dvojštrbinová interferencia)

ľubovoľné meracie zariadenie na meranie danej veličiny „vylúpne“ zo spektra vlastných hodnôt operátoru príslušného tejto veličine konkrétnu hodnotu (t.j. ovplyvnia systém tak, že ho zo superpozície možných vlastných stavov „preklopia“ do konkrétneho vlastného stavu)

neurčitosť východiskového stavu kvantovomechanického objektu je principiálna, a „zbaviť sa“ jej môžeme len za cenu ovplyvnenia tohto stavu

komutujúce a nekomutujúce operátory

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$ - komutátor operátorov \hat{A}, \hat{B}

ak $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, operátory \hat{A}, \hat{B} navzájom komutujú

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \hat{x}_i = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \hat{p}_i = \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

komutujúce operátory, ktorých vlastné hodnoty jednoznačne určujú stav systému (napr. $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ pre voľnú časticu), nazývame úplným systémom komutujúcich operátorov

ak operátory \hat{A}, \hat{B} komutujú a ich spektrá sú nedegenerované, potom majú spoločné všetky vlastné funkcie

pre klasickú časticu pohybujúcu sa vo vonkajšom poli popísanom potenciálnou energiou $W_p(\vec{r})$ platí Newtonova pohybová rovnica $\frac{d}{dt}\vec{p} = -\nabla W_p(\vec{r}), \frac{d}{dt}\vec{r} = \frac{\vec{p}}{m}$

pre kvantovomechanickú časticu vo vonkajšom poli platia tieto rovnice pre stredné hodnoty odpovedajúcich veličín

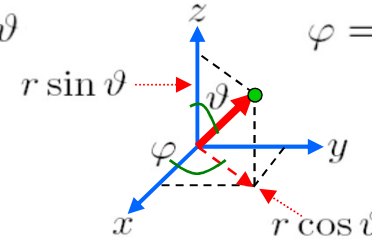
$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = -\langle\nabla W_p(\vec{r})\rangle, \frac{d}{dt}\langle\vec{r}\rangle = \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m} \quad \text{Ehrenfestove vety}$$

(pozri napr. J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý: Úvod do kvantovej mechaniky, kap. 3.3 a 3.4)

operátory momentu hybnosti v sférických súradniciach

moment hybnosti charakterizuje priestorový rotačný pohyb vzhľadom na určitý stred otáčania, pri štúdiu rotačných pohybov je preto často výhodné namiesto kartézskych (pravouhlých) súradníc používať **sférické** s počiatkom zhodným so stredom otáčania

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi \sin \vartheta & r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ y &= r \sin \varphi \sin \vartheta & \vartheta &= \arccos \frac{z}{r} \\ z &= r \cos \vartheta & \varphi &= \arctg \frac{y}{x} \end{aligned}$$



operátory momentu hybnosti majú v sférických súradniciach tvar

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) & \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \hat{L}_y &= i\hbar(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cotg \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}) & \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \end{aligned}$$

komutačné vzťahy pre operátory momentu hybnosti sú

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

nekomutujúce

komutujúce

navzájom komutujúce operátory (napr. \hat{L}^2 a \hat{L}_z) majú **spoločný** systém vlastných funkcií

$$\begin{array}{ccc} \text{vlastné funkcie operátorov} & \hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = L^2 Y(\vartheta, \varphi) & \text{vlastné hodnoty operátorov} \\ & \hat{L}_z Y(\vartheta, \varphi) = L_z Y(\vartheta, \varphi) & \end{array}$$

hľadáme vlastné funkcie v tvare **separovateľných** funkcií $Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$ - dosadením výrazov pre operátory a úpravách (predelením 1. rovnice výrazom $\hbar^2 \Theta \Phi$) dostávame

$$\frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}) \Theta + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} = 0 \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = i \frac{L_z}{\hbar} \Phi \Rightarrow \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -\left(\frac{L_z}{\hbar}\right)^2 \Phi$$

druhá rovnica $\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = i \frac{L_z}{\hbar} \Phi$ má riešenie $\Phi = C e^{i m_l \varphi}$, kde $m_l = \frac{L_z}{\hbar}$ } \Rightarrow m_l musí byť celé číslo

podmienka jednoznačnosti funkcie pri otočení o 2π je $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$

vlastné hodnoty operátora \hat{L}_z : $L_z = m_l \hbar$, $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

prvá rovnica (po dosadení z druhej) $[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{L^2}{\hbar^2}] \Theta = 0$

riešenie tejto rovnice je zložitejšie a vedie na **Legendrove polynómy** (pozri napr. J. Pišút, L. Gomolčák, V. Černý: Úvod do kvantovej mechaniky, kap. 4.9)

$$\Theta(\vartheta) = C_{lm_l} P_l^{|m_l|}(\cos \vartheta), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

vlastné hodnoty operátora \hat{L}^2 : $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$ koeficienty určené normovacou podmienkou

vlastné funkcie (spoločné obom operátorom), odpovedajúce kvantovým (celým) číslam l, m_l , sú

$$Y_{lm_l} = C_{lm_l} P_l^{|m_l|}(\cos \vartheta) e^{i m_l \varphi}$$

kvantovanie vlastných hodnôt oboch operátorov znamená, že pri meraní veličín L^2 a L_z môžeme získať len určité kvantované hodnoty

vlastné hodnoty L_z sa často označujú ako **priemety** vektoru L do makroskopického smeru osi z (pojem „smer“ v kvantovej mechanike nemá jasný zmysel)

vhodnou voľbou súradníc možno ľubovoľný smer označiť ako z – hodnoty L_z sú teda „priemetmi“ vektora L do ľubovoľného význačného (nami zvoleného) smeru

Schrödingerova rovnica

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

Schrödingerova rovnica
(SCHR)

SCHR je *postulovaná* ako *základný zákon nerelativistickej kvantovej mechaniky*, je to *pohybová rovnica* pre *kvantovo-mechanickú* časticu – ak poznáme stav častice (jej vlnovú funkciu) v nejakom čase, vieme ho vypočítať v ľubovoľnom neskoršom čase - Newtonova pohybová rovnica je jej špeciálnym (limitným) prípadom pre *klasickú* časticu (teleso)

vlnová funkcia *voľnej* častice s energiou W a hybnosťou p (rovinná vlna) pohybujúcej sa v smere x

$$\psi(x, t) = A \exp\left\{-i\omega\left(t - \frac{x}{v}\right)\right\} = A \exp\left\{-i\left(\omega t - \frac{2\pi x}{\lambda}\right)\right\} = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Wt - px)\right\}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\frac{W}{\hbar}\psi \quad \Rightarrow \quad W\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \quad \Rightarrow \quad p^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

pre *priestorovo obmedzenú* časticu (pohybujúcu sa *v potenciáli*) $W = \frac{p^2}{2m} + W_p$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + W_p \psi \quad / \cdot \psi \longrightarrow \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - W_p \psi \quad \text{jednorozmerná SCHR}$$

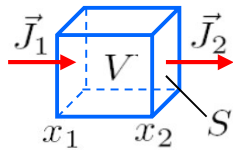
pre *voľnú* časticu možno SCHR „odvodiť“, pre *všeobecný* prípad je *postulovaná*
(postulovanie operátorov \hat{p} a \hat{W} je ekvivalentné postulovaniu SCHR)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + W_p \psi \quad / \cdot \psi^* \quad \text{odčítaním} \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + W_p \psi^* \quad / \cdot \psi$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) \quad / \cdot \frac{-i}{\hbar}, \int_{x_1}^{x_2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \psi^* \psi dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}) dx = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}]_{x_1}^{x_2}$$



výtok pravdepodobnosti

$$\mathcal{S} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x})$$

$$-\mathcal{S} = -(J_2 - J_1)$$

toky pravdepodobnosti
(výskytu častice)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = -(J_2 - J_1) = -\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} J dx \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\frac{\partial}{\partial x} \vec{J}$$

↓(3D)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_S \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx dS = (\int_S \vec{J} \cdot d\vec{S})_{x_1} - (\int_S \vec{J} \cdot d\vec{S})_{x_2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = -\oint \vec{J} \cdot d\vec{S} = -\int_V \text{div} \vec{J} dV \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\text{div} \vec{J}$$

zákon zachovania pravdepodobnosti výskytu častice

pre *voľnú* časticu $\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} A \exp\{-\frac{i}{\hbar}(Wt - px)\} = \frac{ip}{\hbar} \psi$, $\frac{\partial \psi^*}{\partial x} = -\frac{ip}{\hbar} \psi^*$

$$\mathcal{S} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{2ip}{\hbar} \psi^* \psi = \frac{p}{m} \psi^* \psi = v |\psi|^2$$

ak častica nie je voľná, $v(x_1) \neq v(x_2)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = |\psi|^2|_{x_1} v(x_1) - |\psi|^2|_{x_2} v(x_2)$$

hustota častíc

v limite *klasickej fyziky* $|\psi|^2 \rightarrow n$, $\int_{-\infty}^{\infty} n dV = 1$, $\vec{J} = n\vec{v}$, $\frac{\partial}{\partial t} n = -\text{div}(n\vec{v})$

prúdová nábojová hustota

ak má častica *náboj* ($/ \cdot q$)

$$nq\vec{v} = \vec{j} , \quad nq = \rho , \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\text{div} \vec{j}$$

ak $W_p \neq W_p(t)$

$$\psi(x, t) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Wt - px)\right\} = A \exp\left\{-\frac{iWt}{\hbar}\right\} \exp\left\{\frac{ipx}{\hbar}\right\} = \psi(x) \exp\left\{-\frac{iWt}{\hbar}\right\}$$

dosadením do SCHR

$$-W \psi(x) \exp\left\{-\frac{iWt}{\hbar}\right\} = \frac{\hbar^2}{2m} \exp\left\{-\frac{iWt}{\hbar}\right\} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \cancel{W_p} \psi(x) \exp\left\{-\frac{iWt}{\hbar}\right\} \neq W_p(t)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p) \psi = 0$$

$\xrightarrow{3D}$

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p) \psi = 0$$

stacionárna (bezčasová) SCHR

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + W_p \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + W_p\right) \psi = W \psi$$

$$\hat{H} \psi = W \psi$$

\hat{H} (hamiltonián)

riešením *stacionárnej* SCHR dostávame *stacionárne* riešenia energie (ak existujú!) – *vlastné* (charakteristické) *hodnoty energie* (resp. operátora energie), im odpovedajúce *vlňové funkcie* sú *vlastné funkcie*

$$\hat{H} \psi_n = W_n \psi_n$$

vlastným hodnotám operátora energie (riešeniam *stacionárnej* SCHR) prislúchajú *vlastné funkcie* charakterizujúce *vlastné stavy* s „ostrou“ hodnotou energie W_n , tj. *stacionárne stavy* (v čase nemenné – stav s nulovou neurčitostou energie má nekonečnú neurčitosť v trvaní), tieto *vlastné vlňové funkcie* sú *nezávislé od času*, $\phi_n(\vec{r})$, a pomocou počiatočných podmienok $\psi_n(\vec{r}, t = 0) = \phi_n(\vec{r})$ jednoznačne určujú *vlňové funkcie* $\psi_n(\vec{r}, t)$, opisujúce *časový vývoj* stavov (tj. vyhovujúce časovým SCHR $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi_n(\vec{r}, t)$) v tvare

$$\underline{\psi_n(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} \phi_n(\vec{r})}$$

ak stacionárne stavy tvoria úplný systém stavov, tak pre ľubovoľný stav (superpozíciu stac. stavov) platí $\phi(\vec{r}) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r})$, kde $c_n = \int \phi_n^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dV$ - časový vývoj takéhoto stavu je potom

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} \phi_n(\vec{r})$$

(riešenie časovej SCHR pri splnení uvedenej počiatočnej podmienky)

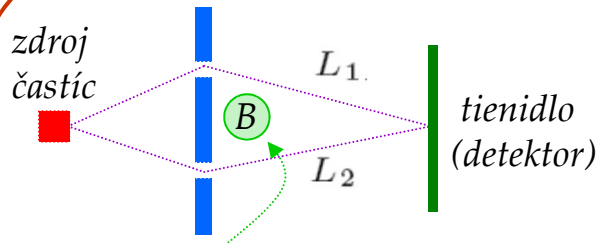
Kvantovomechanická častica v elektromagnetickom poli

sila pôsobiaca na kvantovomechanickú časticu pohybujúcu sa (rýchlosťou \vec{v}) v elektromagnetickom poli

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \neq -\text{grad}W_p(\vec{r}, t)$$

t.j. nedá sa nájsť taká funkcia $W_p(\vec{r}, t)$, lebo magnetická sila (nekonzervatívna) **nekoná prácu** - **nedá sa** teda jednoducho vytvoriť **operátor potenciálnej energie** ako súčasť \hat{H}

Aharonovov – Bohmov jav

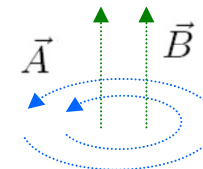


solenoid obopínajúci magnetické pole

dodatočný rozdiel fáz medzi dráhami L_1 a L_2 je teda

$$\Delta\vartheta = \frac{q}{\hbar} \int_{L_1} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \frac{q}{\hbar} \int_{L_2} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{q}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{q}{\hbar} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \frac{q}{\hbar} \Phi$$

magnetický tok plochou obopnutou uzavretou integračnou dráhou



okrem **magnetického** A-B javu existuje aj **elektrický** A-B jav, pri ktorom interferenčný obrazec závisí od rozdielu (konštantných) skalárnych potenciálov pre jednotlivé interferujúce dráhy pri **nulovej** intenzite elektrostatického poľa

$$\vec{E} = -\text{grad}\varphi \quad \varphi = \text{konst} \Rightarrow E = 0$$

(pokračovanie na ďalšej strane)

do fázového faktora $e^{-i\frac{W}{\hbar}t}$ vstupuje skalárny potenciál ako $W_p = q\varphi$, a teda dodatočný rozdiel fáz interferujúcich dráh je

$$\Delta\vartheta = -\frac{q\Delta\varphi}{\hbar}t$$

v oboch prípadoch je *výsledok experimentu* závislý od veličín φ, \vec{A} pri nulových \vec{E}, \vec{B} (pozdĺž dráh interferujúcich zväzkov) – *elektromagnetické potenciály teda predstavujú reálne fyzikálne polia* (napriek ich nejednoznačnosti danej výberom kalibrácie (pozri Elektromagnetické potenciály))

v *kvantovej* mechanike je výhodnejšie popisovať elektromagnetické pole prostredníctvom potenciálov namiesto intenzít (indukcií)

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A} \quad \vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \text{grad}\varphi$$

pre kvantovomechanickú časticu v elektromagnetickom poli je potrebné *mechanickú hybnosť* nahradiť tzv. *kánonickou* (zovšeobecnenou) *hybnosťou* a operátor $-i\hbar\nabla$ priradiť *tejto kánonickej* hybnosti

$$\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}$$

tzv. *elektromagnetická hybnosť* $q\vec{A}$ sa prejaví napr. pri zapínaní magnetického poľa z 0 na B_0 za čas Δt - počas zapínania je nenulové $\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$ a teda aj $\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$ (z 0 na A_0), a teda aj $\vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$

prírastok hybnosti náboja q za čas Δt bude teda $\Delta\vec{p} = \vec{F}\Delta t = q\vec{E}\Delta t = -q\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\Delta t \approx -qA_0$

rozdiel v hybnosti náboja pred a po zapnutí poľa je teda $-qA_0$ - *dodatočná* hybnosť spôsobená *prítomnosťou elektromagnetického poľa*

operátory *mechanickej* hybnosti a energie nabitej častice v elektromagnetickom poli

$$\hat{p}_{mech} = -i\hbar\nabla - q\vec{A}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\vec{A})^2 + q\varphi$$

SCHR pre nabitú časticu
v elektromagnetickom poli

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 + q\varphi \right] \psi$$

kalibračné transformácie potenciálov

elektromagnetické potenciály *nie sú určené jednoznačne*, ich veľkosť možno „nastaviť“ výberom kalibrácie

$$\varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad \vec{A}' = \vec{A} + \text{grad} \Lambda$$

kde Λ je ľubovoľná skalárna funkcia polohy

ľubovoľný výber kalibrácie *neovplyvňuje* hodnoty vektorov \vec{E} , \vec{B}

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \text{grad} \varphi \rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{A} + \text{grad} \Lambda) - \text{grad} (\varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}) = \vec{E}$$

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A} \rightarrow \text{rot} (\vec{A} + \text{grad} \Lambda) = \text{rot} \vec{A} = \vec{B}, \quad \text{rot} \text{grad} \Lambda = 0$$

výber kalibrácie *ovplyvňuje* \hat{H} aj $\psi' = \psi e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}$ - mení sa *len fáza* vlnovej funkcie $\vartheta' = \vartheta + \frac{q}{\hbar}\Lambda$, stav častice tým *nie je ovplyvnený*, a aj SCHR je kalibračne invariantnou

elektromagnetické potenciály, podobne ako vlnovú funkciu, treba chápať ako *reálne fyzikálne objekty* (A-B jav, interferencia elektrónov), *nie sú priamo merateľné* – nevadí teda, že nie sú jednoznačne určené (závisia od výberu kalibrácie), *pohybová rovnica nabitej častice* (SCHR) *aj spektrum jej energií sú kalibračne invariantné*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 + q\varphi \right] \psi = \left[\frac{1}{2m} (-\hbar^2 \nabla^2 + \cancel{q^2 A^2} + i\hbar q \nabla \cdot \vec{A} + i\hbar q \vec{A} \cdot \nabla) + q\varphi \right] \psi =$$

člen $\sim A^2$ je zanedbateľne malý (pozor na poradie!)

$$= \frac{1}{2m} \{ -\hbar^2 \nabla^2 \psi + i\hbar q \nabla \cdot (\vec{A} \psi) + i\hbar q \vec{A} \cdot \nabla \psi \} + q\varphi \psi$$

operátor pôsobí na *všetky veličiny* napravo od neho v príslušnom člene

$$\nabla \cdot (\vec{A}\psi) = (\nabla \cdot \vec{A})\psi + \vec{A} \cdot \nabla\psi \quad \rightarrow \quad \nabla \cdot \vec{A} = 0 \text{ - štandardná vol'ba kalibrácie}$$

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi + \frac{iq\hbar}{m} \vec{A} \cdot \nabla\psi + q\varphi\psi$$

nech $\vec{B}(0,0,B)$, $\vec{B} = \text{rot}\vec{A} \Rightarrow A_x = -y\frac{B}{2}$, $A_y = x\frac{B}{2}$, $A_z = 0$

z-ová zložka operátora momentu hybnosti

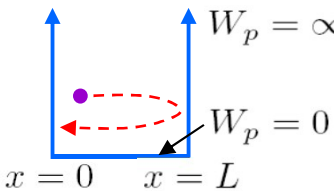
vo zvolenej geometrii $i\hbar \vec{A} \cdot \nabla = \frac{i\hbar B}{2} [x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}] = -\frac{B}{2} [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x] = -\frac{B}{2} \hat{L}_z$

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + q\varphi - \frac{q}{2m} B \hat{L}_z \right\} \psi$$

vo všeobecnej geometrii $i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + q\varphi - \frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} \right\} \psi$

Jednoduché jednočasticové stacionárne sústavy

častica v nekonečne hlbokoj jednorozmernej potenciálovej jame



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + W_p(x)\psi(x) = W\psi(x) \quad \hbar^2 K^2 = p^2$$

vnútri jamy: $W_p = 0$, $W = \frac{p^2}{2m}$ $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mW}{\hbar^2}\psi(x)$

všeob. riešenie: $\psi(x) = A \sin Kx + B \cos Kx$

okrajové podm.: $\psi(0) = \psi(L) = 0 \Rightarrow B = 0$
(A ≠ 0, inak by tam častica nebola)

$\psi(x) = A \sin Kx$, normovacia podmienka (je tam práve 1 častica):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^L |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_0^L \sin^2 Kx dx = |A|^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

okrajová podmienka: $\psi(L) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin KL = 0 \Rightarrow K = n\frac{\pi}{L}$, $n = 1, 2, \dots$

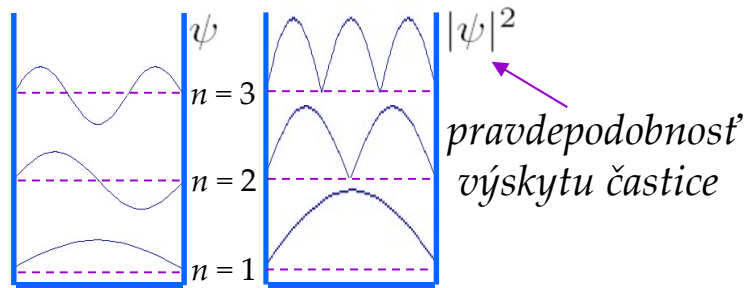
$$\underline{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)} \quad \underline{W_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}} \quad \text{vlastné hodnoty energie sú kvantované}$$

tvar potenciálnej energie (potenciálová jama) spôsobuje *obmedzenie pohybu* častice, to má za následok *diskrétné spektrum* riešení – *kvantované* energetické hladiny

ak $n = 0 \Rightarrow W = 0 \Rightarrow \psi = 0$ všade v jame \Rightarrow častica tam *nie je* \Rightarrow n *nemôže byť 0*
 - *najnižšia možná energia* $W_1 \neq 0$

častica je *lokalizovaná* v jame nenulovej (konečnej) šírky, podľa princípu neurčitosti musí mať nenulovú neurčitosť hybnosti a teda *nenulovú energiu* (rastúcu so zmenšujúcim sa rozmerom jamy)

vlastné funkcie



klasický analóg: struna upevnená na oboch koncoch

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (\text{vlnová rovnica})$$

$$x = 0, L : y = 0 \quad (\text{okrajové podmienky})$$

$\lambda_n = \frac{2L}{n}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ riešením sú *módy stojatých vln*, tj. riešenie existuje *len pre určité hodnoty* λ

de Broglieho vlny:

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

$$W_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

vlastné hodnoty hybnosti častice

$$\frac{p^2}{2m} = W_k = W - \underbrace{W_p}_{=0} = W \Rightarrow p_n = \pm \sqrt{2mW_n^2} = \pm \frac{nh}{2L}$$

stredná hodnota hybnosti

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = \frac{\hbar}{i} \frac{2\pi n}{L^2} \int_0^L \sin \frac{\pi n x}{L} \cos \frac{\pi n x}{L} dx = \frac{\hbar}{iL} [\sin^2 \frac{\pi n x}{L}]_0^L = 0 \quad \langle \hat{p} \rangle = 0$$

$$\int \sin ax \cos ax dx = \frac{1}{2a} \sin^2 ax$$

$$\sin 0 = \sin n\pi = 0$$

pohyb v oboch smeroch je rovnocenný
– *rovnako pravdepodobný*

klasická častica sa v jame pohybuje priamočiarno rovnomerne medzi (pružnými) odrazmi od stien – pravdepodobnosť výskytu takejto častice je *rovnaká všade v jame*

kvantovomechanická častica v jame je stojatou vlnou – pravdepodobnosť namerania častice v jame je *nerovnomerne rozdelená* (ako kvadrát amplitúdy stojatej vlny) *a nemení sa v čase*

rozdiel medzi susednými energetickými hladinami $\Delta W \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} \Rightarrow$ pre *makroskopické* objekty $\Delta W \rightarrow 0$ - *nepozorujeme* kvantovanie hladín

častica v dvojrozmernej jame L_x, L_y
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial y^2} \right) = W \psi(x,y)$$

metóda separácie
premených

$$\psi(x,y) = \psi_x(x)\psi_y(y) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_x(x)}{\partial x^2} \psi_y(y) + \frac{\partial^2 \psi_y(y)}{\partial y^2} \psi_x(x) \right) = W \psi_x(x)\psi_y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} \right) = W \quad \left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} = W_x \psi_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} = W_y \psi_y \end{array} \right\} \quad W = W_x + W_y$$

(pri rovnakých okrajových podmienkach ako 1D jama)

$$\psi_{nx} = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \quad \psi_{ny} = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right)$$

$$\underline{\psi_{nx,ny} = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right)} \quad \underline{W_{nx,ny} = \frac{h^2}{8m} \left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 \right]}$$

častica v trojrozmernej
(pravouhlej) jame

L_x, L_y, L_z

$$\underline{\psi_{nx,ny,nz} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)}$$

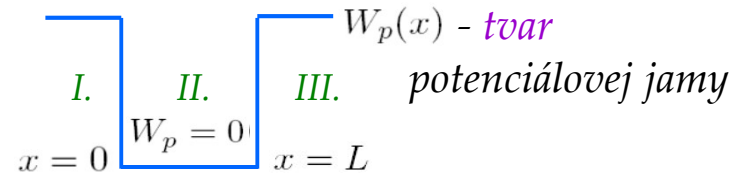
$$\underline{W_{nx,ny,nz} = \frac{h^2}{8m} \left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2 \right]}$$

ak tá istá vlastná hodnota energie môže vzniknúť rôznymi kombináciami n_x, n_y, n_z , táto energetická hladina je *k-násobne degenerovaná* (k – počet možných kombinácií) tieto kombinácie majú rovnakú energiu ale odlišné hodnoty hybnosti – sú teda rozlíšiteľné

napr. ak $L_x = L_y$ v pravouhlej 2D alebo 3D jame, vlastná energia je rovnaká pre $n_x = 1, n_y = 2$ aj $n_x = 2, n_y = 1$ - táto energetická hladina je 2-násobne degenerovaná, atď.

častica v 1D jame konečnej hĺbky

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + W_p(x) \psi(x) = W \psi(x)$$



$$0 < x < L : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{II.}(x)}{dx^2} = W \psi_{II.}(x)$$

$$\psi_{II.} = A \sin Kx + B \cos Kx \quad (A, B \text{ komplexné}), \quad K = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar}, \quad W = \frac{K^2 \hbar^2}{2m}$$

$$x < 0, x > L : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{I.,III.}(x)}{dx^2} = (W - W_p(x)) \psi_{I.,III.}(x)$$

ak $W > W_p$, častica je „volná“ („vyššie než vrch jamy“)

$$\frac{d^2 \psi_{I.,III.}(x)}{dx^2} = -\kappa^2 \psi_{I.,III.}(x), \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(W - W_p)}}{\hbar}$$

$$\psi_{I.,III.} = C_{I.,III.} \sin \kappa x + D_{I.,III.} \cos \kappa x$$

ak $W < W_p$, častica je viazaná („nižšie než vrch jamy“)

$$\frac{d^2 \psi_{I.,III.}(x)}{dx^2} = \alpha^2 \psi_{I.,III.}(x), \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(W_p - W)}}{\hbar}$$

$$\psi_{I.,III.} = F_{I.,III.} e^{-\alpha x} + G_{I.,III.} e^{\alpha x}$$

riešenia musia byť „fyzikálne rozumné“ $\Rightarrow F_I = G_{III.} = 0$ (riešenia nesmú neobmedzene rásť)
okrajové podmienky na rozhraniach I.-II. a II.-III. : riešenia musia byť „zošité“

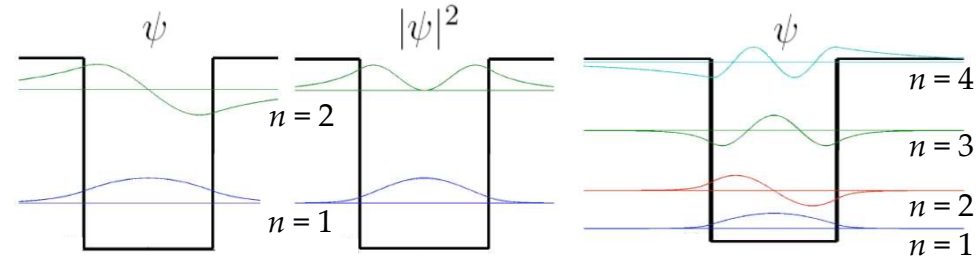
$$\psi_I(0) = \psi_{II.}(0) \qquad \psi_{II.}(L) = \psi_{III.}(L)$$

(analogické rovnosti platia aj pre derivácie vlnových funkcií)

ak $W > W_p$, častica *nie je priestorovo lokalizovaná - viazaná v jame* (môže existovať „nad“ jamou aj „mimo“ nej – priestorovo periodické (harmonické) riešenia) - jej energia *nie je kvantovaná*

ak $W < W_p$, častica je *viazaná na jamu* (priestorovo obmedzená) – energia nadobúda *len kvantované* hodnoty (stacionárne periodické riešenia odpovedajú módom stojatej vlny)

existuje *nenulová* pravdepodobnosť namerania častice aj „za stenami“ potenciálovej jamy (aperiodické riešenia zanikajúce so vzdialenosťou od stien)
 táto pravdepodobnosť narastá s n (teda s energiou častice – častica „má nádej“ uniknúť z jamy)



neexistuje klasická analógia v *časticovej* interpretácii – častica sa nemôže *čiastočne odraziť* od steny a *čiastočne* cez ňu *peniknúť*

klasická vlnová analógia: steny s *konečnou impedanciou* – časť vlny sa odrazí a časť *prejde stenou* (nekonečne hlboká jama odpovedá nekonečnej impedancii steny – celá vlna sa odrazí)

vlna pravdepodobnosti, popisujúca výskyt kvantovomechanickej častice, sa čiastočne odráža (vytvára stojatú vlnu vo vnútri jamy) a čiastočne *peniká* za stenu jamy (a postupne zaniká)

ak $W < W_p$, potom $W_k = W - W_p < 0$ a teda $p^2 = \hbar^2 K^2 < 0$, čo je možné len ak p, K sú *imaginárne*, čo je prípad *tlmenej vlny* (imaginárna hybnosť nemá pre klasickú časticu fyzikálny zmysel, pre kvantovomechanickú časticu predstavuje tlmenu de Broglieho vlnu)

klasická vlna prechodom do prostredia s inou impedanciou (resp. indexom lomu n) mení svoju vlnovú dĺžku $\lambda = \frac{2\pi v_f}{\omega} = \frac{2\pi c}{n\omega}$

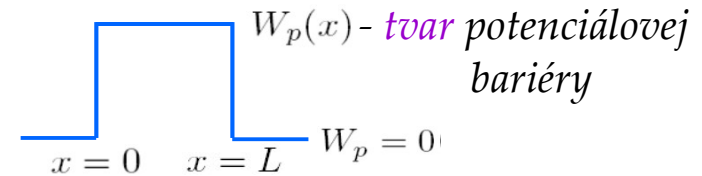
de Broglieho vlnová dĺžka *kvantovomechanickej* častice sa mení s potenciálnou energiou:

$$\lambda = \frac{h}{p_n} = \frac{h}{\sqrt{2mW_n}} \text{ v jame } (W_p = 0), \quad \lambda = \frac{h}{p_n} = \frac{h}{\sqrt{2m(W_n - W_p)}} \text{ mimo jamy konečnej hĺbky}$$

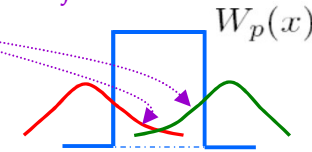
$$\lambda \rightarrow 0 \text{ mimo nekonečne hlbkej jamy } (W_p \rightarrow \infty)$$

prechod častice potenciálovou bariérou

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + W_p(x)\psi(x) = W\psi(x)$$



potenciálovú bariéru si možno predstaviť ako *stenu medzi dvoma potenciálovými jamami* – tlmené pravdepodobnostné vlny prenikajú do tejto steny z jám na *oboch* stranách – ak sa v bariére *prekrývajú* (tj. ak je hrúbka bariéry menšia než vzdialenosť, na ktorej sa vlny utlmia), existuje *nenulová pravdepodobnosť namerania častice naprieč celou bariérou* – bariéra je čiastočne „*priezračná*“ pre šíriacu sa časticu



klasická častica nemôže prekonať („preskočiť“) potenciálovú bariéru vyššiu než je energia častice, kvantovomechanická častica však môže preniknúť *naprieč* takouto bariérou – *tunelový jav*

lineárny kvantovomechanický harmonický oscilátor

klasický harmonický oscilátor $m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx$, $x = A \cos(\omega_0 t + \varphi)$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$, $W_p = \frac{1}{2} kx^2$

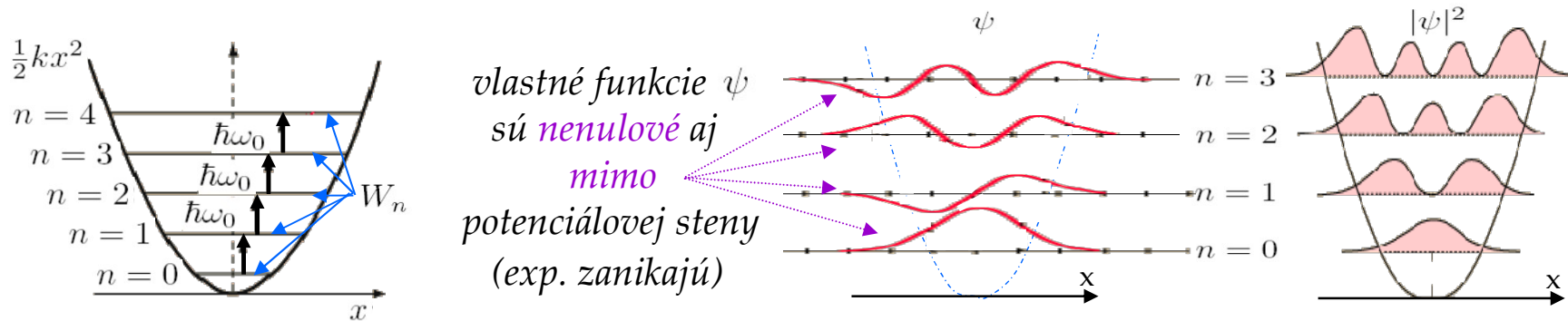
$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} (W - W_p)\psi = 0$ $W_p = \frac{1}{2} kx^2$ - predstavuje *potenciálovú jamu s parabolickými stenami*

podrobné riešenie vid' napr. A. Beiser:
Úvod do modernej fyziky, kap. 8.5

$W_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $n = 0, 1, 2, \dots$ *kvantovanie* energie oscilátora – *diskrétne* spektrum

$n = 0$: $W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ - „*nulová*“ energia (najnižšia hodnota) $\neq 0$!

ak by mal najnižší energetický stav *nulovú* hodnotu, častica v ňom by sa *nehýbala*, tj. *neurčitosť polohy* by bola *nulová* a tým by *neurčitosť hybnosti* musela byť *nekonečná* – častica s nulovou energiou nemôže mať nekonečnú hybnosť!



pravdepodobnosť výskytu častice je v *klasickom* oscilátore *maximálna v amplitúdach* (x_{max} , nulová rýchlosť) a *minimálna v rovnovážnej polohe* ($x = 0$, max. rýchlosť), v *kvantovomechanickom* oscilátore je to presne *naopak* pre $n = 0$, pre veľké n sa pravdepodobnosť približuje ku klasickej

3D harmonický oscilátor

$$W_{n_1, n_2, n_3} = \hbar[\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \omega_2(n_2 + \frac{1}{2}) + \omega_3(n_3 + \frac{1}{2})]$$

častica na kružnici – tuhý rotátor

tuhým rotátorom nazývame *rotujúci hmotný bod* (časticu na kružnici) alebo *sústavu hmotných bodov s nemennými vzájomnými vzdialenosťami*, konajúcich *rotačný pohyb okolo spoločného ťažiska* (analýza pre sústavu bodov je identická ako pri častici na kružnici, len hmotnosť sa nahrádza *redukovanou hmotnosťou*)

častica je „voľná“ - $W_p = 0$, jej „priestor“ je však kružnica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W \psi$$

vzhľadom na *kruhovú symetriu* je rozumné úlohu riešiť v *polárnych* súradniciach

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \rightarrow \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} \text{ (ak sa polomer rotácie nemení, } \frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \frac{d}{d\varphi} \text{)}$$

$$\text{stacionárna SCHR: } -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d^2 \psi(\varphi)}{d\varphi^2} = W \psi(\varphi)$$

$$W > 0: \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} = k^2 \psi, k = \sqrt{\frac{2mr^2 W}{\hbar^2}}, \psi(\varphi) = A e^{ik\varphi} + B e^{-ik\varphi}$$

$$W = 0: \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} = 0, \psi(\varphi) = C + D\varphi$$

$$W < 0: \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} = \kappa^2 \psi, \kappa^2 = -k^2, \psi(\varphi) = E e^{i\kappa\varphi} + F e^{-i\kappa\varphi} = E e^{k\varphi} + F e^{-k\varphi}$$

podmienka *jednoznačnosti* vlnovej funkcie v každom bode kružnice (vlnová funkcia je periodická s 2π)

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

$$C, E, F = 0$$

$$e^{\pm i \frac{r}{\hbar} \sqrt{2mW} \varphi} = e^{\pm i \frac{r}{\hbar} \sqrt{2mW} (\varphi + 2\pi)} \Rightarrow e^{\pm i \frac{r}{\hbar} \sqrt{2mW} 2\pi} = 1$$

$$k = \sqrt{\frac{2mr^2 W}{\hbar^2}} = l, l = 0, 1, 2, \dots$$

podmienka *normovanosti* („častica tam niekde je“)

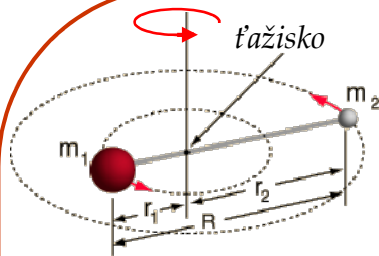
$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1$$

stacionárne riešenie

$$\underline{\psi_l(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-il\varphi}}, l = 1, 2, \dots, \psi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\underline{W_l = \frac{\hbar^2 l^2}{2mr^2}}$$

časovo závislé riešenie = *stacionárne* riešenie $\times e^{-\frac{i}{\hbar} W_l t}$



dvojitómová molekula rotujúca okolo ťažiska

ťažisko $m_1 r_1 = m_2 r_2$, $r_1 + r_2 = R$

moment zotrvačnosti $J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (r_1 + r_2)^2 = m R^2$

redukovaná hmotnosť

hmotný bod (alebo sústava) rotujúci *v rovine* (okolo stredu otáčania) má *jednoznačne určenú súradnicu* v smere kolmom na rovinu rotácie (napr. os z) – podľa princípu neurčitosti musí mať *nekonečnú neurčitosť zložky hybnosti* v tomto smere – takýto systém „nemá dosť dobrý zmysel“ v kvantovej mechanike

tuhý 3D rotátor

v *sférických* súradniciach

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \quad \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

pre *nemennú* radiálnu vzdialenosť $\nabla^2 \rightarrow \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 = \frac{1}{r^2} [\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}] = \frac{-1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2$

stacionárnu SCHR možno teda zapísať v tvare

$$\frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi = W \psi$$

riešeniami (vlastnými funkciami operátora *energie*) sú teda *sférické funkcie* $\psi(\vartheta, \varphi) = Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi)$ (vlastné funkcie operátora *momentu hybnosti*) a pre vlastné hodnoty energie platí

$$\underline{2mr^2 W_l = l(l+1)\hbar^2}$$

každej vlastnej hodnote energie odpovedá $2l+1$ vlastných funkcií (pre všetky dostupné hodnoty m_l) - $2l+1$ -násobná *degenerácia*

častica v sférickom (3D) potenciáli

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + W_p(r)$$

potenciál(na energia) so *sférickou symetriou* (pri takomto hamiltoniáne je vlnová funkcia separovateľná vo sférických súradniciach)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right\}}_{\nabla^2} \psi(r, \vartheta, \varphi) + W_p(r) \psi(r, \vartheta, \varphi) = W \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

riešenie hľadáme v *separovateľnom* tvare $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$

po dosadení riešenia do SCHR a predelení výrazom $\frac{\hbar^2}{2mr^2} R(r)Y(\vartheta, \varphi)$ dostaneme

$$\text{závisí len od } r \quad \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (W - W_p(r)) = \frac{-1}{Y(\vartheta, \varphi)} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y(\vartheta, \varphi) \quad \text{závisí len od } \vartheta, \varphi$$

obe strany rovnice musia byť rovné konštante λ nezávislej od r, ϑ, φ ! rovnica sa rozpadne

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0$$

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y(\vartheta, \varphi) + \lambda Y(\vartheta, \varphi) = 0$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

$$\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi)$$

$$(\text{keďže } \hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2)$$

(SCHR pre radiálnu vlnovú funkciu)

vlastné funkcie $Y(\vartheta, \varphi)$ budú sférickými funkciami $Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi)$ (pozri operátor momentu hybnosti) a $\lambda = l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$

rovnica pre $Y(\vartheta, \varphi)$ *nezávisí od energií* – energetické hladiny sú určené *len* „radiálnou“ SCHR

pre *sféricky symetrický* potenciál platia komutačné vzťahy

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{operátory } \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z \text{ majú } \textit{spoločný} \text{ systém vlastných funkcií}$$

$$\text{odstredivá sila } F_{od} = \frac{mv^2}{r} = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{dW_{od}(r)}{dr} \Rightarrow W_{od}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} \xrightarrow{\text{(QM)}} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad L^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1)$$

„odstredivá“ potenciálna energia

$$\text{radiálnu SCHR možno vyjadriť v tvare} \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (W - W_{pl}(r)) \right] R(r) = 0$$

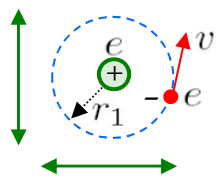
$$W_{pl}(r) = W_p(r) + W_{od}(r)$$

Atóm vodíka

1 protón (jadro) + 1 elektrón (obal)

$\frac{m_p}{m_e} \cong 1836 \Rightarrow$ protón je prakticky nehybný voči elektrónu

klasická predstava: odstredivá sila = coulombovská príťažlivá sila



$$\frac{mv^2}{r_1} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_1^2} \Rightarrow v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r_1}}$$

$$W_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_1}$$

$$W_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$$

$$W = W_k + W_p = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_1} < 0$$

príťažlivá interakcia

väzbová energia elektrónu k jadrú (pre vodík $W = -13,6\text{eV} \Rightarrow r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11}\text{m}$)
elektrón je viazaný k jadrú, na odtrhnutie potrebuje dodať energiu

z ľubovoľného pohľadu v rovine obehu sa kruhový pohyb elektrónu premieta do kmitavého pohybu, kmitajúci elektrón vyžaruje elektromagnetické vlny – stráca energiu (pohybovú) – po špirálovitej dráhe „padá“ na jadro – atóm je nestabilný! (klasická predstava zlyháva)

$$\text{SCHR: } \nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p) \psi = 0$$

$$W_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

sférická symetria – je vhodné riešiť SCHR v sférických súradniciach

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p) \psi = 0$$

$$\nabla^2 \psi$$

riešenie v tvare $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$

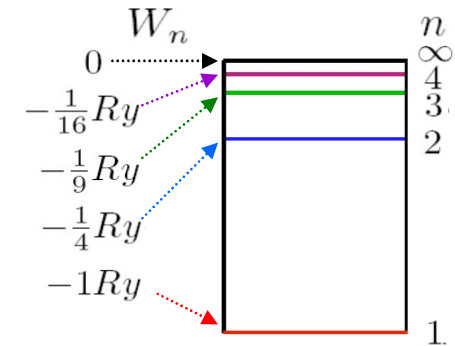
problém odpovedá častici (elektrónu) v sféricky symetrickom potenciáli (jadra) - metódou separácie premenných dostávame tri nezávislé dif. rovnice jednej premennej

(podrobné riešenie vid' napr. A. Beiser: Úvod do modernej fyziky, kap. 9.2., 9.3.)

riešením rovnice pre *radiálnu časť* vlnovej funkcie $R(r)$ dostávame *spektrum vlastných hodnôt energie* – *energetických hladín* elektrónu pohybujúceho sa okolo jadra - *základný stav* ($n = 1$) a *vzbudené (excitované) stavy* ($n > 1$)

$$W_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{hlavné kvantové číslo}$$

záporné vlastné hodnoty energie znamenajú *viazaný stav*
 - na odtrhnutie elektrónu od jadra treba *dodať* energiu,
 $W \rightarrow 0$ pre $n \rightarrow \infty$ (*voľný stav*)



$$\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 1Ry = 13,6eV \quad (\text{Rydberg})$$

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = n^2 r_1 \quad \text{„polomer“ } n\text{-tej dráhy}$$

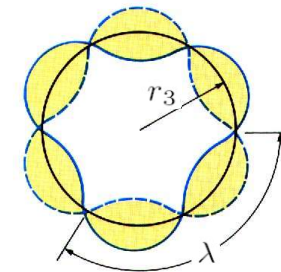
poloklasická predstava (Bohrov model): elektrón ako deBroglieho vlna obieha okolo jadra (klasickou) rýchlosťou

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}}$$

ak má byť obežná dráha elektrónu *stabilná*, musí sa „do nej zmestiť“ *celočíselný* počet elektrónových vlnových dĺžok

$$2\pi r_n = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\lambda = 2\pi r_1 = 3,3 \cdot 10^{-10} m$$



preskoky elektrónu z hladiny W_n na hladinu $W_{n'}$ pri súčasnej *emisii* (vyžiarení) fotónu, ak $W_n > W_{n'}$ ($|W_n| < |W_{n'}|$), alebo *absorpcii* fotónu, ak $W_n < W_{n'}$ ($|W_n| > |W_{n'}|$)

$$|W_n - W_{n'}| = \hbar\omega = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left| \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right|$$

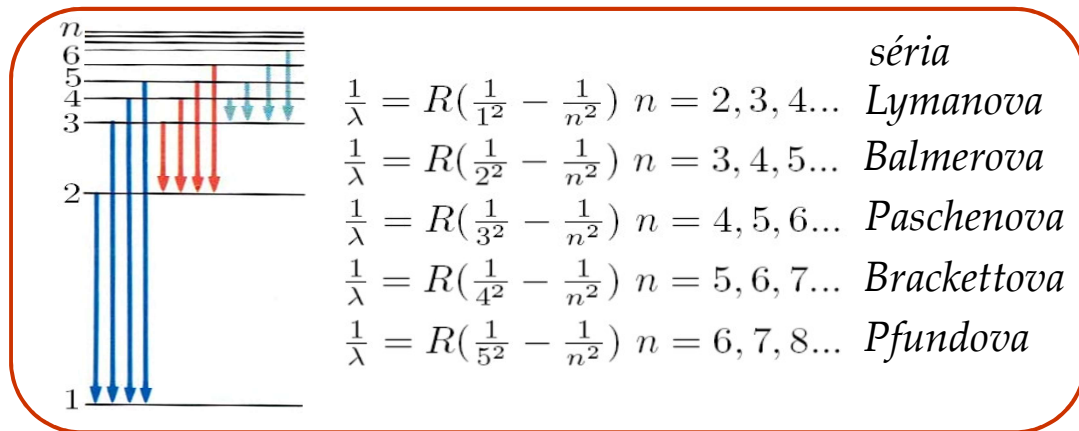
diskrétne spektrum energií atómu má za následok *čiarové - emisné*, resp. *absorpčné spektrum fotónov* (elektromagnetického žiarenia)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left| \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right|$$

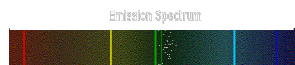
R

Rydbergova konštanta

$$R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$



spojité spektrum elektromagnetického vlnenia (viditeľná časť)



emisné čiarové spektrum atómu (na tmavom pozadí)



absorpčné čiarové spektrum atómu (komplementárne k emisnému spektru)
 – v spojitom spektre (pozadie) chýbajú pohltené vlnové dĺžky (energia absorbovaná atómom sa prakticky okamžite opäť vyžiari, avšak všetkými smermi, tj. v pôvodnom smere ostane takmer tmavá čiara)

riešením dif. rovnice pre *orbitálnu časť* vlnovej funkcie $\Theta(\vartheta)$ dostávame *spektrum vlastných hodnôt* (operátora) *momentu hybnosti* elektrónu (pohybujúceho sa okolo jadra)

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n-1) \quad - \textit{orbitálne kvantové číslo}$$

moment hybnosti elektrónu *sa zachováva* a jeho *veľkosť* je *kvantovaná* – môže nadobúdať len určité diskkrétne hodnoty – *stavy* momentu hybnosti

s ($l = 0$), p ($l = 1$), d ($l = 2$), f ($l = 3$), g ($l = 4$), h ($l = 5$), i ($l = 6$), ...
označenie *stavu elektrónu* – napr. $2s$ ($n = 2, l = 0$), $4f$ ($n = 4, l = 3$)

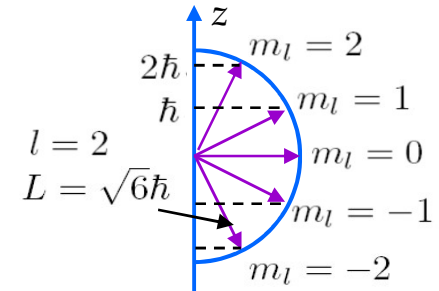
riešením dif. rovnice pre *azimutálnu časť* vlnovej funkcie $\Phi(\varphi)$ dostávame *podmienku* pre *priemet momentu hybnosti* elektrónu *do význačného smeru*

(„význačným“ smerom, označeným napr. ako smer osi z , môže byť napr. smer vonkajšieho magnetického poľa)

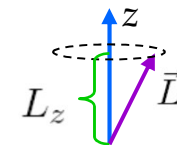
$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad - \textit{magnetické kvantové číslo}$$

($2l + 1$) možných hodnôt

„*smer* momentu hybnosti je *kvantovaný*“ – *priestorové kvantovanie*



klasická interpretácia: vektor \vec{L} vykonáva *precesný* pohyb okolo význačného smeru (s priemetom L_z), pri precesii sa rovina obehu elektrónu ($\perp \vec{L}$) neustále mení, tj. žiadna zo súradníc elektrónu nie je presne určená – elektrón má *konečnú* neurčitosť hybnosti (bez precesie by bola neurčitosť hybnosti nekonečná!)



$L_z < L$ lebo $m_l < \sqrt{l(l+1)}$ (vždy) $\Rightarrow \vec{L}$ *nemôže byť paralelné s význačným smerom*

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2$$

$$L_z = m_l \hbar$$

L a L_z nadobúdajú len určité hodnoty (priestorové kvantovanie momentu hybnosti) – sú to *vlastné hodnoty operátorov* \hat{L}^2 a \hat{L}_z

vlnové funkcie elektrónových stavov sú *vlastnými funkciami* operátorov \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z

$$\hat{H}\psi = \frac{-\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2\hbar^2n^2}\psi}{W_n}$$

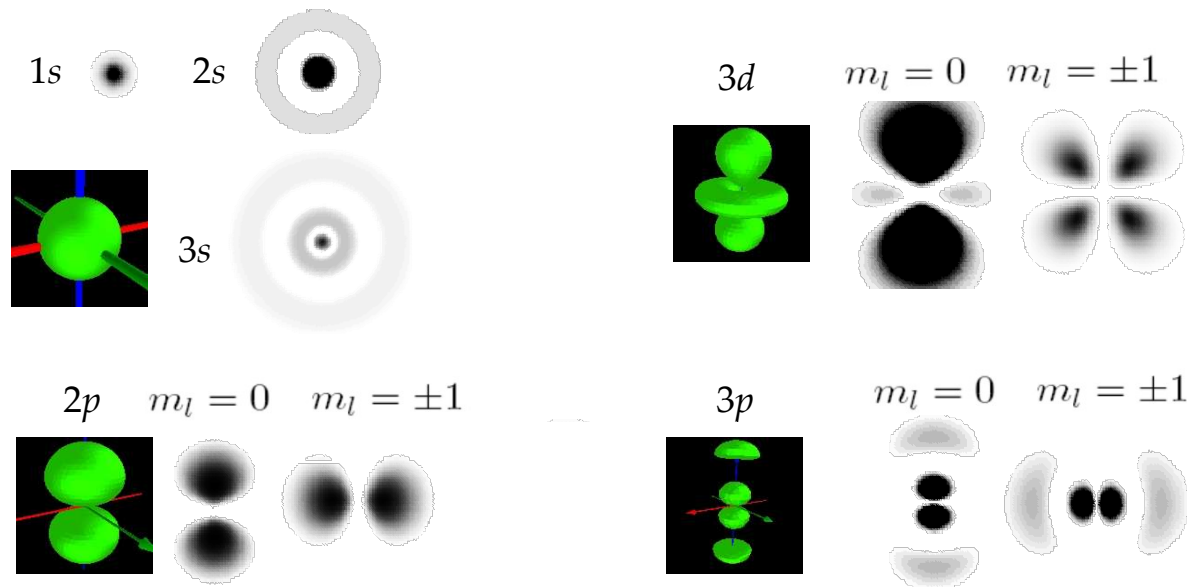
$$\hat{L}^2\psi = \frac{l(l+1)\hbar^2\psi}{L^2}$$

$$\hat{L}_z\psi = \frac{m_l\hbar\psi}{L_z}$$

hustota pravdepodobnosti namerania elektrónu v elemente objemu $\mathcal{P}dV = |\psi|^2 dV$ *nezávisí na čase*

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi) \quad |\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = |R_{n,l}(r)|^2|\Theta_{l,m_l}(\vartheta)|^2|\Phi_{m_l}(\varphi)|^2$$

nemôžeme použiť *klasickú* predstavu elektrónu pohybujúceho sa po *určitej dráhe*, len určitú *oblasť priestoru s najväčšou pravdepodobnosťou výskytu elektrónu* - *orbitál*



energia elektrónového stavu W_n v atóme vodíka je určená len hlavným kvantovým číslom

obmedzenie pohybu elektrónu v atóme vodíka v troch rozmeroch (r, ϑ, ϕ) vedie na tri kvantovacie podmienky (kvantové čísla n, l, m_l) – analógia s 3D potenciálovou jamou - stavy elektrónu s vlastnými energiami W_n sú degenerované – energia je pre dané n rovnaká pre podstavy určené rôznymi kombináciami kvantových čísel l a m_l (celkom n^2 kombinácií: danému n prislúcha n hodnôt orbitálneho kvantového čísla l , a každému l prislúcha $2l+1$ hodnôt magnetického kvantového čísla)
 n^2 -násobná degenerácia je dôsledkom špecifickej symetrie coulombovského potenciálu jadra atómu vodíka

s orbitálnym momentom hybnosti elektrónu \vec{L} je spojený orbitálny magnetický moment

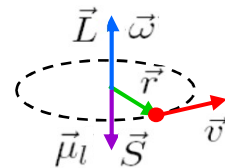
$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m} \vec{L} \quad \frac{e}{2m} - \text{gyromagnetický pomer}$$

elektrón (častica s nábojom $-e$) pohybujúci sa po (klasickej) uzavretej slučke okolo jadra (kruhovej dráhe o ploche S) predstavuje magnetický dipól s dipólovým momentom $\vec{\mu}_l$

$$\vec{\mu}_l = I \vec{S} = -\frac{e\omega}{2\pi} \pi r^2 \vec{\omega} = -\frac{er^2}{2} \vec{\omega} \quad \text{jednotkový vektor} \quad \frac{\omega}{2\pi} - \text{perióda obehu}$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r} \times \vec{v} = m\vec{r} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) = mr^2 \vec{\omega}$$

$$\vec{r} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) = \underbrace{\vec{\omega}(\vec{r} \cdot \vec{r})}_{r^2} - \underbrace{\vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{\omega})}_0 \quad (\vec{r} \perp \vec{\omega})$$



$$\Rightarrow \vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \Rightarrow \mu_l = |\vec{\mu}_l| = \sqrt{l(l+1)}\mu_B$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$$

Bohrov magnetón

$$L_z = m_l \hbar \Rightarrow \mu_{lz} = |\vec{\mu}_l| \cos \vartheta = m_l \mu_B$$

priemet orbitálneho magnetického momentu do význačného smeru (z)

Spin

klasická predstava: *nabitá častica rotujúca okolo svojej osi* má moment hybnosti \vec{S} a s ním súvisiaci magnetický moment $\vec{\mu}_s$

v rámci *modernej* fyziky je táto predstava (napriek istým podobnostiam) *neudržateľná* – spin je chápaný ako *d'alší nezávislý* (rýdzo kvantovomechanický) *stupeň voľnosti častice*, vyznačujúci sa mechanickým i magnetickým momentom (pre *nabitú* časticu)

spinový moment hybnosti \vec{S} danej častice môže nadobúdať veľkosti kde s je *spinové kvantové číslo* charakteristické pre daný druh častice

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

pre elektrón je $s = \frac{1}{2}$ a teda $S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$

analogicky ako orbitálny moment hybnosti, aj spin je *priestorovo kvantovaný* – pre veľkosť jeho *priemetu do ľubovoľného („význačného“) smeru* (napr. smer z) platí kde $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$ je *spinové magnetické kvantové číslo*, ktoré môže nadobúdať $(2s+1)$ hodnôt (teda pre elektrón $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$)

$$S_z = m_s \hbar$$

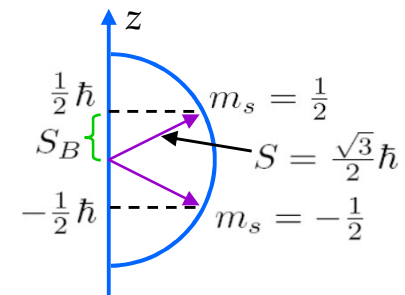
so spinom elektrónu je spojený *spinový magnetický moment*

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{S}$$

spinový gyromagnetický pomer je *dvojnásobkom orbitálneho* gyromagnetického pomeru!

$$\mu_s = |\vec{\mu}_s| = 2\sqrt{s(s+1)}\mu_B$$

$$\mu_{sz} = |\vec{\mu}_s| \cos \vartheta = 2m_s\mu_B = \pm\mu_B$$



amplitúda pravdepodobnosti namerania *elektrónu* v danom čase v mieste x (v jednorozmernom prípade) $\psi(x)$ opisuje teda *dva možné stavy* elektrónu ψ_1, ψ_2 s *dvoma možnými priemetmi spinu* do význačného smeru

$$\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 \quad |\alpha_{1,2}|^2 - \text{pravdepodobnosti nájdenia systému v stavoch 1,2}$$

ψ_1, ψ_2 sú normované a navzájom ortogonálne $\int \psi_i^*(x)\psi_j(x)dx = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$ $\alpha_{1,2} = \int \psi_{1,2}^*(x)\psi(x)dx$

ľubovoľný stav je teda *úplne* určený zadaním koeficientov $\alpha_{1,2}$, $\psi \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$, pričom $\psi_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 = \psi \rightarrow \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad \psi_2 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

takéto dvojkomponentné výrazy sa nazývajú *spinormi* – jednotlivým spinovým stavom sú priradené spinory $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ - akási ďalšia „súradnica“ (stupeň voľnosti)

operátor priemetu spinu do význačného smeru (z) je matica $\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ s vlastnými hodnotami $\pm \frac{\hbar}{2}$

operátory priemetov spinu do smerov x, y, z musia spĺňať komutačné vzťahy $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$, $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$, $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$

operátory spinu sa často vyjadrujú pomocou *Pauliho matic* s vlastnými hodnotami ± 1 (spĺňajúcich komutačné vzťahy $[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z$, atď.) $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$$

operátor priemetu spinu do *ľubovoľného* smeru \vec{n} je $\hat{\sigma} \cdot \vec{n} = \hat{\sigma}_x n_x + \hat{\sigma}_y n_y + \hat{\sigma}_z n_z$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$$

celková vlnová funkcia elektrónu je $\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}, t) \\ \psi_-(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$, kde $|\psi_{\pm}(\vec{r}, t)|^2$ sú hustoty pravdepodobnosti namerania elektrónu s priemetom spinu (do význačného smeru) $\pm \frac{\hbar}{2}$ v okolí \vec{r} v danom čase t

ak pohyb častice, jej interakcia s poľom, atď., *nezávisí od spinu*, možno spinovú časť vlnovej funkcie ignorovať – znamená len *dvojnásobnú degeneráciu* všetkých energetických hladín

častica so spinom $\frac{1}{2}$ v magnetickom poli

potenciálna energia spinového magnetického momentu v magnetickom poli

$$W_p = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \rightarrow \frac{-q\hbar}{2m} \hat{\sigma} \cdot \vec{B}$$

\hat{S} - operátor spinu

po zarátaní tohto príspevku do SCHR pre časticu v elektromagnetickom poli

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + q\varphi - \frac{q}{2m} \vec{B} \cdot (\hat{\vec{L}} + \hbar \hat{\sigma}) \right\} \psi$$

Pauliho rovnica

$$\hat{\vec{L}} + \hbar \hat{\sigma} \neq \hat{\vec{L}} + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma} \quad \leftarrow \text{operátor celkového magnetického momentu}$$

(príspevok potenciálnej energie *orbitálneho* magnetického momentu vo vonkajšom magnetickom poli je obsiahnutý už v SCHR pre *bezspinovú* časticu v elektromagnetickom poli)

Poruchy energetického spektra atómu vodíka

neporušený hamiltonián elektrónu
v centrálnom elektrostatickom poli jadra je

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

riešením SCHR $\hat{H}_0 \psi_{nlm} = W_n \psi_{nlm}$ sú sférické vlastné funkcie $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

rozdiely medzi energetickými hladinami neporušeného hamiltoniánu (atómu bez vonkajšieho poľa) $\Delta W \approx \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = er_1 \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r_1^2}$ pole na 1. Bohrovej dráhe r_1 .

každú poruchu reprezentuje príspevok k pôvodnému hamiltoniánu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

Starkov jav

Starkov jav je posun všetkých energetických hladín atómu vo vonkajšom elektrickom poli

atóm vodíka vo vonkajšom elektrickom poli predstavuje v prvom priblížení tuhý elektrický dipól s dipólovým momentom $p \approx er_1$.

korekcie k energetickým hladinám rádovo odpovedajú energii dipólu vo vonkajšom poli

vonkajšie elektrické pole

$$W_p = -\vec{p} \cdot \vec{E} \approx er_1 E = \delta W$$

$$\frac{\delta W}{\Delta W} \approx \frac{E}{E_1} \approx \frac{E}{10^{10} \text{V m}^{-1}} \quad - \text{lineárny Starkov jav (korekcie } \sim E)$$

v druhom priblížení uvažujeme implicitnú závislosť $\vec{p} \approx \alpha \vec{E}$, čo predstavuje polarizovateľnosť atómu, a teda $W_p = -\vec{p} \cdot \vec{E} \sim E^2$ - kvadratický Starkov jav

v rámci takejto predstavy sú jadro a „elektrónový mrak“ v dôsledku elektrickej sily eE voči sebe posunuté o x , pričom proti tejto sile pôsobí spätná sila ich vzájomnej väzby (ako natiahnutá pružina)

$$eE = kx \Rightarrow x = \frac{eE}{k}$$

$$p = -ex = -\frac{e^2 E}{k}$$

„porucha“ potenciálnej energie pozostáva teda z príspevkov v podobe energie tuhého dipólu vo vonkajšom poli $W_{pe} = -pE = -\frac{e^2 E^2}{k}$ a vnútornej energie napnutého dipólu $W_{pi} = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{e^2 E^2}{2k}$, teda

$$\delta W = -\alpha E^2 + \frac{1}{2}\alpha E^2 = -\frac{1}{2}\alpha E^2$$

korekcia druhého rádu sa od lineárnej korekcie líši o faktor $\approx \frac{E}{E_1} \approx \frac{E}{10^{10} \text{V m}^{-1}}$

spin-orbitálna väzba

spin-orbitálna väzba je vzájomná interakcia orbitálneho a spinového magnetického momentu

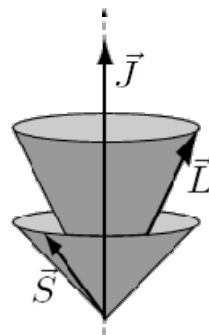
výsledný moment hybnosti atómu pri spin-orbitálnej väzbe je $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ a platia preň kvantovacie podmienky

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$$

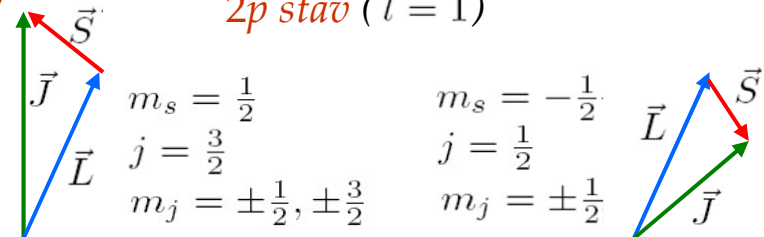
$$J_z = m_j \hbar, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

vektory \vec{L} , \vec{S} , \vec{J} nikdy nie sú navzájom paralelné (ani anti-paralelné)

\vec{L} a \vec{S} vykonávajú precesný pohyb okolo \vec{J}



2p stav ($l = 1$)



magnetické pole vytvárané *orbitálnym* magnetickým dipólom je $\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3\vec{r}(\vec{\mu}_l \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{\mu}_l}{r^3} \right]$ ($\approx 6T!$)
 pre $r \approx r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar}{me^2}$)

spinový magnetický moment interagujúci s týmto poľom vyvoláva energetickú „poruchu“

$$\delta W = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \approx \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_l \mu_s}{r_1^3} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \right)^2 |W_1| \approx 13,6 eV$$

$$\alpha \cong \frac{1}{137} \text{ - konštanta jemnej štruktúry}$$

posun energetických hladín oproti „neporušenému“ spektru je $\approx 10^{-4} eV$

spin-orbitálna väzba *častočne rozštiepi degenerované* hladiny („*sníme*“ degeneráciu) *neporušeného* atómu – vznikne tzv. *jemná štruktúra*

napr. v prípade *2p stavu* dve *opačné* „vzájomné orientácie“ $\vec{\mu}_l$ a $\vec{\mu}_s$ (odpovedajúce $j = \frac{3}{2}$ a $j = \frac{1}{2}$) vytvárajú *2 odlišiteľné* energetické hladiny, posunuté voči pôvodnej neporušenej hladine o $\pm \delta W$

interakcia magnetického momentu elektrónu s *rádovo* menším magnetickým momentom *jadra* vedie k ďalším korekciám energetických hladín – tzv. *hyperjemnej štruktúre*

relativistická korekcia

$$W_k = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 \rightarrow \frac{p^2}{2m_0} - \frac{(p^2)^2}{8m^3 c^2}$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots, x \ll 1$$

relativistická korekcia
 operátora *kinetickej* energie

veľkosť tejto korekcie
 je toho istého rádu ako
 ako spin-orbitálna
 interakcia

Zeemanov jav

Zeemanov jav je štiepenie energetických hladín atómu vo *vonkajšom magnetickom poli*

výsledný magnetický moment atómu $\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m}(\vec{L} + 2\vec{S}) \uparrow \downarrow \vec{J}$ **!!!**

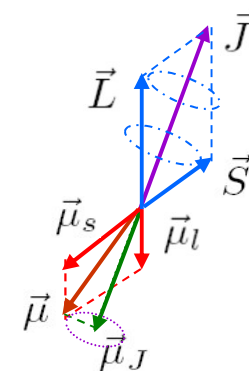
$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $\vec{\mu}_l \uparrow \downarrow \vec{L}$, $\vec{\mu}_s \uparrow \downarrow \vec{S}$, ale $\vec{\mu} \nparallel \vec{J}$ lebo $\frac{\mu_s}{\mu_l} = 2\frac{\mu_l}{L}$

vektory \vec{L} , \vec{S} , a teda aj $\vec{\mu}_l$, $\vec{\mu}_s$ a $\vec{\mu}$ vykonávajú *precesný* pohyb okolo smeru \vec{J}

časové stredné hodnoty vektorov \vec{L} , \vec{S} sú vlastne ich priemetmi do smeru \vec{J}

$$\langle \vec{L} \rangle = \frac{(\vec{L} \cdot \vec{J})\vec{J}}{J^2} \quad \langle \vec{S} \rangle = \frac{(\vec{S} \cdot \vec{J})\vec{J}}{J^2}$$

má zmysel uvažovať *priemet* $\vec{\mu}$ do smeru \vec{J} , $\vec{\mu}_J \uparrow \downarrow \vec{J}$ ako *skutočný* celkový atómový magnetický moment



vonkajšie magnetické pole predstavuje poruchu operátora energie

$$W_p = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m}(\langle \vec{L} \rangle + 2\langle \vec{S} \rangle) \cdot \vec{B}$$

po dosadení $W_p = \frac{\mu_B}{\hbar J^2}(\vec{L} \cdot \vec{J} + 2\vec{S} \cdot \vec{J})\vec{J} \cdot \vec{B}$

$$\vec{L} = \vec{J} - \vec{S} \Rightarrow L^2 = J^2 + S^2 - 2\vec{S} \cdot \vec{J}$$

$$\Rightarrow \vec{S} \cdot \vec{J} = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - L^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

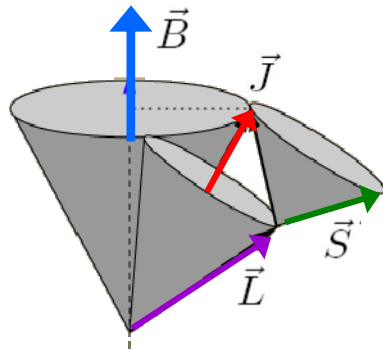
$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

analogicky $\vec{L} \cdot \vec{J} = \frac{1}{2}(J^2 + L^2 - S^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)]$

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

$$W_p = \frac{\mu_B}{\hbar} \left[1 + \frac{j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)}{j(j+1)} \right] \vec{J} \cdot \vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} g J_z B = \mu_B g m_j B \quad \text{pre } \vec{B}(0, 0, B)$$

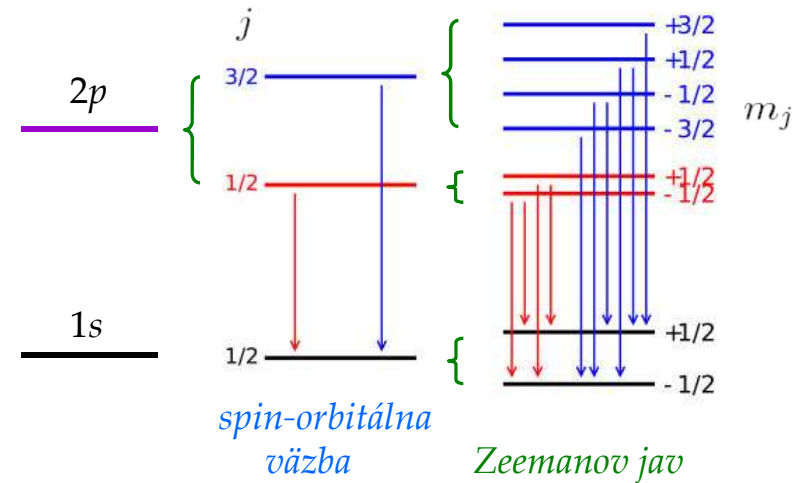
g - Landého faktor



v magnetickom poli navyše \vec{J} vykonáva precesný pohyb okolo smeru magnetického poľa

magnetické pole *sníma* („odstraňuje“) degeneráciu energetických hladín - rozdiel energii podhladín (rozštiepených vo vonkajšom magnetickom poli) je

$$\Delta W_p = g\mu_B B \quad \Delta m_j = 1$$

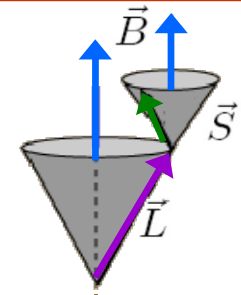


napr. **2p stav** bude rozštiepený na 6 energetických hladín:

$$j = \frac{3}{2} : m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$$

$$j = \frac{1}{2} : m_j = \pm\frac{1}{2}$$

v silnom vonkajšom magnetickom poli sa rozpadá spin-orbitálna väzba väzba orbitálneho a spinového magnetického momentu na vonkajšie pole je silnejšia než spin-orbitálna väzba) a vektory orbitálneho i spinového momentu interagujú s vonkajším poľom *samostatne* (tj. vykonávajú okolo jeho smeru precesný pohyb) - **Paschenov - Backov jav**



Mnohoelektrónové atómy

elektróny v atóme tvoria **elektrónový obal** okolo jadra, **stav každého elektrónu je určený kvantovými číslami** n, l, m_l, m_s

žiadne dva elektróny v atóme sa nemôžu nachádzať v rovnakom stave (nemôžu mať rovnakú kombináciu kvantových čísel) – **Pauliho vylučovací princíp** (postulát)

hlavné kvantové číslo určuje **vrstvu** elektrónového obalu $n = 1(K), 2(L), 3(M), 4(N)...$

danej vrstve (sfére) odpovedajú **vedľajšie** kvantové čísla

$$\left. \begin{array}{l} l = 0(s), 1(p), 2(d), 3(f), 4(g), \dots (n - 1) \quad n \text{ hodnôt} \\ m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l \quad (2l + 1) \text{ hodnôt} \\ m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 \text{ hodnoty} \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} 2(2l + 1) \\ \text{hodnôt} \end{array} \right\} 2n^2 \text{ hodnôt} - \text{možných stavov} \\ \text{v danej vrstve (n)}$$

orbitálne kvantové číslo l (pre danú vrstvu) určuje **podvrstvu** (podsféru) s, p, d, f, g, \dots

zaplnená podvrstva obsahuje 2(s), 6(p), 10(d), 14(f), 18(g), atď. elektrónov

magnetické kvantové číslo m_l určuje **orbitál** v danej podvrstve (pre dané n a l)

zaplnený orbitál obsahuje dva elektróny s **opačnými** spinmi (rôzne m_s)

pravidlá obsadzovania elektrónových stavov (**Hundove pravidlá**)

1. elektróny obsadzujú stavy tak, aby **výsledný spinový** moment hybnosti bol **maximálny**

Pauliho vylučovací princíp + vzájomné elektrostatické odpudzovanie elektrónov \Rightarrow elektróny **prednostne** obsadzujú stavy v prázdnych orbitáloch a s **rovnako** orientovaným spinom

2. elektróny obsadzujú stavy (pri splnení 1.) tak, aby *výsledný orbitálny moment hybnosti* bol *maximálny*

zhodné smery pohybu po uzavretých dráhach okolo jadra vyhovujú podmienke maximálnej vzájomnej vzdialenosti elektrónov, tj. podmienky ich *minimálnej* elektrostatickej energie

podvrstva 4f (n = 4, l = 3) (14 stavov)	m_l -3 -2 -1 0 1 2 3 	— 5 elektrónov v podvrstve — 9 elektrónov v podvrstve
$\sum_{i=1}^5 m_{si} = 5 \times \frac{1}{2} = \frac{5}{2} \qquad \sum_{i=1}^5 m_{li} = 3 + 2 + 1 + 0 - 1 = 5$		
$\sum_{i=1}^9 m_{si} = 7 \times \frac{1}{2} + 2 \times \left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{5}{2} \qquad \sum_{i=1}^9 m_{li} = \underbrace{3 + 2 + 1 + 0 - 1 - 2 - 3}_{0} + 3 + 2 = 5$		

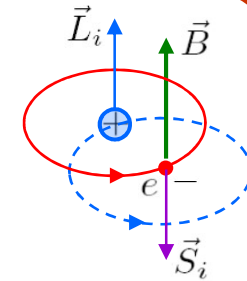
výsledný spinový moment hybnosti $\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$ ← momenty hybnosti jednotlivých elektrónov

výsledný orbitálny moment hybnosti $\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$ ← momenty hybnosti jednotlivých elektrónov

výsledný moment hybnosti $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ - LS-väzba

3. ak je podvrstva zaplnená menej ako do polovice $J = |L - S|$
 ak je podvrstva zaplnená viac ako do polovice $J = L + S$
 (ak je podvrstva zaplnená do polovice $L = 0$, $J = S$)

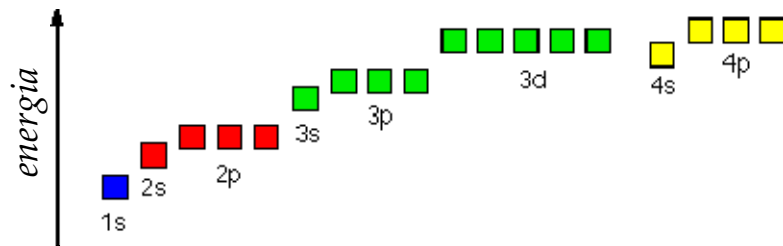
z „pohľadu“ elektrónu kladne nabité jadro obieha okolo neho – vytvára magnetické pole $\vec{B} \uparrow\uparrow \vec{L}_i \Rightarrow$ spinový magnetický moment elektrónu $\vec{\mu}_{si}$ sa orientuje $\uparrow\uparrow \vec{B}$, pritom $\vec{\mu}_{si} \uparrow\downarrow \vec{S}_i \Rightarrow \vec{S}_i \uparrow\downarrow \vec{L}_i$



ak je podvrstva zaplnená *menej* ako do polovice a $\vec{S}_i \uparrow\downarrow \vec{L}_i$ pre každý elektrón $\Rightarrow J = |L - S|$

ak je podvrstva zaplnená *viac* ako do polovice, zaplnená polovica dá $\sum_i \vec{L}_i = 0$, výsledné $\vec{L} \uparrow\uparrow \vec{L}_i$ nadpolovičných elektrónov ($\vec{S}_i \uparrow\downarrow \vec{L}_i, \vec{S}_i \uparrow\downarrow \vec{L}$), výsledné \vec{S} je dané prvou polovicou elektrónov (s opačným spinom) $\Rightarrow \vec{S} \uparrow\uparrow \vec{L} \Rightarrow J = L + S$

poradie zaplňovania podvrstiev 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 6d, ...



nezaplnené podvrstvy

úplne *zaplnené* podvrstvy majú *nulové výsledné* orbitálne aj spinové momenty hybnosti aj magnetické momenty

pre výsledné *atómové* momenty hybnosti platí

atómové kvantové čísla

$$L = \sqrt{L(L + 1)}\hbar$$

$$S = \sqrt{S(S + 1)}\hbar$$

$$J = \sqrt{J(J + 1)}\hbar$$

$$L_z = M_L \hbar$$

$$S_z = M_S \hbar$$

$$J_z = M_J \hbar$$

L, S, J

M_L, M_S, M_J

L a M_L *vždy celočíselné* (vrátane 0), S, J, M_S, M_J *celočíselné* (vrátane 0, pre *párny* počet elektrónov v atóme) *alebo poločíselné* (*nepárny* počet elektrónov)

v atóme teda nie sú možné ľubovoľné orientácie jednotlivých elektrónových „dráh“ a spinov, ale len také, pre ktoré výsledné atómové momenty hybnosti spĺňajú uvedené kvantové podmienky

výsledné *atómové* magnetické momenty $\vec{\mu}_L, \vec{\mu}_S$ $\vec{\mu}_L \uparrow \downarrow \vec{L}$, $\vec{\mu}_S \uparrow \downarrow \vec{S}$

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$ $\vec{\mu} \nparallel \vec{J}$ lebo $\frac{\mu_s}{S} = 2 \frac{\mu_L}{L}$

$$\mu_J = \left[1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right] \sqrt{J(J+1)} \mu_B = g \sqrt{J(J+1)} \mu_B$$

$$\vec{\mu}_J = g \frac{e}{2m} \vec{J}$$

g ← Landého faktor (faktor spektroskopického rozštiepenia)

$$1 < g < 2$$

vždy $\vec{\mu}_J \sim -\vec{J}$

necelé číslo

priemet do smeru magnetického poľa

$$\mu_J \cos \vartheta = g M_J \mu_B$$

$$M_J = J, J - 1, \dots - J$$

interakcia atómu s magnetickým poľom

(Zeemanov jav) - energetická hladina určená

kvantovým číslom J sa rozštiepi na $2J + 1$ podhladin - (rozštiepenie čiarového spektra atómu)

$$W_m = -\vec{B} \cdot \vec{\mu}_J = -B \mu_J \cos \vartheta = -B g M_J \mu_B$$

v ťažkých atómoch alebo v silných magnetických poliach) sa rozrušuje LS-väzba - výsledný atómový moment hybnosti

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i \quad \vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i \quad - JJ\text{-väzba}$$

(výsledné momenty hybnosti jednotlivých elektrónov)

atómové spektrá

elektrón v atóme môže **absorbovaním** energie fotónu alebo pri zrážke s inou časticou „preskočiť“ na vyššiu energetickú hladinu – do **vzbudeného** stavu, vzápätí spätným preskokom **vyžiari** energiu vo forme fotónu – **čiarové** spektrá (emisné alebo absorpčné)

frekvencia vyžiareného alebo pohlteneho fotónu $\omega = \frac{W_{n'} - W_n}{\hbar}$

doba života vzbudeného stavu Δt je spravidla veľmi malá \Rightarrow neurčitosť rozdielu energií

(daná neurčitosťou energie vzbudeného stavu) $\Delta W \geq \frac{\hbar}{\Delta t}$

\Rightarrow **neurčitosť** vo frekvencii, tj. **šírka čiary** $\Delta\omega \geq \frac{\Delta W}{\hbar} = \frac{1}{\Delta t}$

výberové pravidlá

zákony kvantovej mechaniky určujú **dovolené prechody** (preskoky elektrónov medzi stavmi)

- **výberové pravidlá** $\Delta n \geq 1$ $\Delta l = \pm 1$ $\Delta m_l = 0, \pm 1$

napr. prechody $\Delta l = 0$, pri ktorých nedochádza ku zmene momentu hybnosti (kvantové číslo l určuje veľkosť momentu hybnosti) nie sú dovolené

vid' napr. A. Beiser:

Úvod do modernej fyziky, kap. 11.2

Atómové jadro, elementárne častice

atómové jadro

je tvorené **nukleónmi**: protónmi a neutrónmi – sústred'uje prakticky všetku hmotnosť atómu

protón

hmotnosť $m_p = 1,007h.j.$

náboj $q_p = +e$

spin $S = \frac{1}{2}$

neutrón

hmotnosť $m_n = 1,008h.j.$

náboj $q_n = 0$

spin $S = \frac{1}{2}$

hmotnostná jednotka ($\frac{1}{12}$ hmotnosti atómu ${}^1_6\text{C}$) $1h.j. = 1,66 \cdot 10^{-27}kg$

hmotnostné číslo $A = Z + N$
 Z – **atómové číslo** – počet protónov v jadre
 N – **neutrónové číslo** – počet neutrónov v jadre

izotop – prvok s rovnakým atómovým číslom ale odlišným hmotnostným číslom (odlišný počet neutrónov pri zachovanom počte protónov v jadre) - označenie ${}^A_Z\text{X}$ (napr. ${}^1_1\text{H}$)

polomer jadra $r = r_0 A^{\frac{1}{3}}$, $r_0 \cong 1,3 \cdot 10^{-15}m$

hustota jadra $\rho = \frac{m}{\frac{4}{3}\pi r^3} \cong 2 \cdot 10^{17}kgm^{-3}$

hmotnosť jadra < súčet hmotností nukleónov, rozdiel je **hmotnostný úbytok** Δm

väzbová energia jadra $W_b = \Delta mc^2$ (záporná, treba ju **dodať** na „roztrhnutie“ jadra)

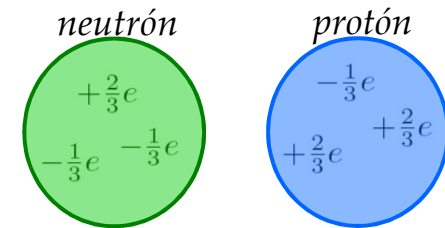
atómové jadro má **diskrétne spektrum** energetických hladín – **základný** a **vzbudené** stavy

elementárne častice

kvarky \longrightarrow tvoria **hadrony** $\left\{ \begin{array}{l} \text{mezóny (z párneho počtu kvarkov, spin celočíselný)} \\ \text{baryóny (z nepárneho počtu kvarkov, spin poločíselný)} \end{array} \right.$
(napr. protón, neutrón)

kvarky sú častice s nábojom $+\frac{2}{3}e$ alebo $-\frac{1}{3}e$, **neexistujú izolované** - len „zabudované“ do hadronov

leptóny $\left\{ \begin{array}{l} \text{elektrón} \\ \text{mión} \\ \text{\(\tau\)-leptón} \end{array} \right.$ + ich **neutrína** $\left\{ \begin{array}{l} \text{elektrónové} \\ \text{miónové} \\ \text{\(\tau\)-leptónové} \end{array} \right.$
(náboj $\pm e$ spin poločíselný) (nulový náboj spin poločíselný)



ku **každéj** častici existuje **antičastica** – častica s rovnakými vlastnosťami (hmotnosť, spin) ale **opačným** nábojom a vzájomnou orientáciou spinu a spinového magnetického momentu

pri zrážke častice so svojou antičasticou obe **anihilujú** („zmiznú“) – premenia sa na pole (napr. fotón) - náboj, hybnosť aj energia sa pritom **zachovávajú**

pár častica-antičastica sa môže **kreovať** (vzniknúť) z kvanta poľa (fotónu)



antičastica k elektrónu je **pozitrón**, niektoré častice sú **sami sebe** antičasticami (napr. fotón)

fundamentálne fyzikálne interakcie

poznáme 4 druhy fyzikálnych interakcií:

gravitačnú – pôsobí medzi **všetkými** telesami, s **nekonečným** dosahom

elektromagnetickú – medzi **elektricky nabitými** telesami, s **nekonečným** dosahom

silnú – medzi **kvarkami**, s **krátkym** dosahom (vnútri jadra atómu, dosah $10^{-15}m$)

slabú – medzi kvarkami a leptónmi, s **krátkym** dosahom (v jadre atómu, dosah $10^{-18}m$)

kvantová teória popisuje interakcie medzi telesami, resp. časticami ako **výmenu kvánt sprostredkujúceho poľa** medzi nimi:

kvantom **gravitačného** poľa je **gravitón** (?) (pôsobí na telesá s **hmotnosťou**)

kvantom **elektromagnetického** poľa je **fotón** (pôsobí častice s **elektrickým nábojom**)

kvantom **silného** poľa je **gluón** (pôsobí na častice s tzv. „**farebným nábojom**“)

kvantom **slabého** poľa je **W-bozón** (pôsobí na častice s tzv. „**slabým nábojom**“)

(kvantá všetkých 4 polí sú častice s celočíselným spinom, $m_0 = 0$)

v **klasickej** teórii poľa sa silová interakcia medzi telesami majúcimi istú vlastnosť (hmotnosť, náboj, atď.) popisuje prostredníctvom interakcie telesa s príslušným fyzikálnym poľom, vytvoreným druhým telesom

v **kvantovej** teórii poľa je táto interakcia popisovaná vzájomnou výmenou kvánt príslušného poľa, **širiacich sa rýchlosťou** c medzi interagujúcimi telesami

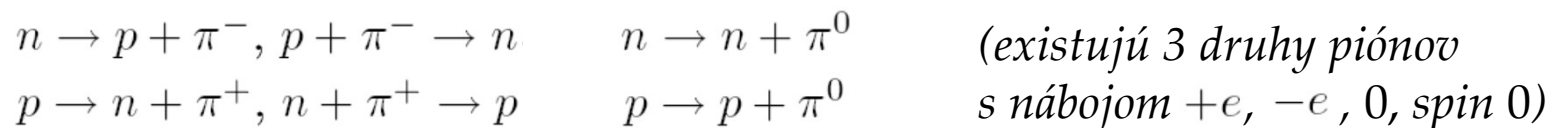
jadrové sily

silná interakcia pôsobí medzi kvarkami (časticami majúcimi farebný náboj) formou výmeny gluónov (kvánt silného poľa) a vedie na vznik hadrónov (o.i. protónov a neutrónov)

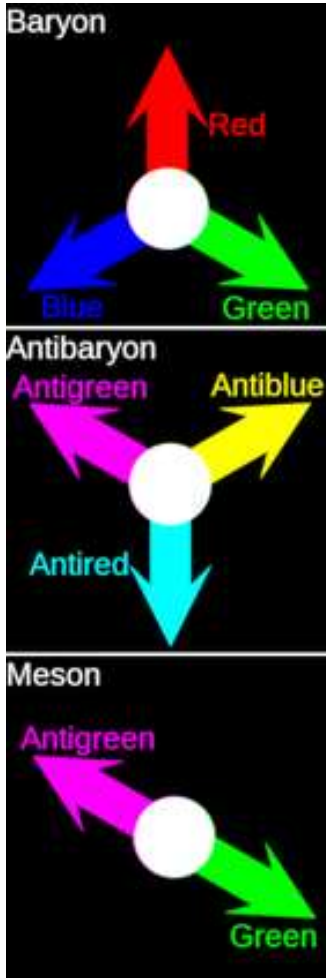
hadróny sú farebne neutrálne – majú vykompenzovaný farebný náboj – neinteragujú s gluónmi

interakcia medzi hadrónmi (o.i. protónmi a neutrónmi) v atómovom jadre je tzv. zvyšková (reziduálna) silná interakcia (oveľa slabšia než skutočná silná interakcia sprostredkovaná gluónmi) – v kvantovej teórii poľa sa popisuje prostredníctvom výmeny mezónov medzi baryónmi – v prípade nukleónov (protónov a neutrónov) ide o výmenu piónov, ktorá vedie na vznik atómových jadier

zvyšková slabá interakcia medzi (farebne vykompenzovanými) nukleónmi v atómovom jadre sa dá prirovnať ku elektromagnetickej interakcii elektroneutrálnych atómov, ktorá vedie na vznik molekúl



úbytok, resp. prírastok hmotnosti pri týchto reakciách (bilancia hmotností na oboch stranách reakcií) je nezistiteľný, lebo doba života piónov (t.j. doba preletu jadrom) $\Delta t \approx \frac{r}{c}$ je tak malá, že odpo-vedajúca neurčitosť energie ΔW ohraničuje presnosť určenia hmotnostného rozdielu na $\Delta m = \frac{\Delta W}{c^2}$



Three Generations of Matter (Fermions)

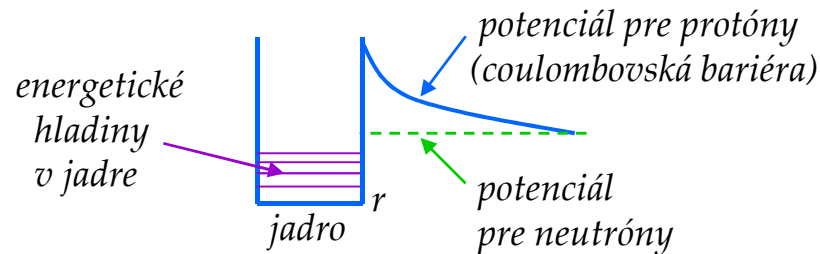
	I	II	III	
mass →	2.4 MeV	1.27 GeV	171.2 GeV	0
charge →	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
spin →	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
name →	u up	c charm	t top	γ photon
Quarks	4.8 MeV	104 MeV	4.2 GeV	0
	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	d down	s strange	b bottom	g gluon
Leptons	<2.2 eV	<0.17 MeV	<15.5 MeV	91.2 GeV
	0	0	0	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	ν_e electron neutrino	ν_μ muon neutrino	ν_τ tau neutrino	Z⁰ weak force
	0.511 MeV	105.7 MeV	1.777 GeV	80.4 GeV
	-1	-1	-1	±1
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	e electron	μ muon	τ tau	W[±] weak force

Bosons (Forces)

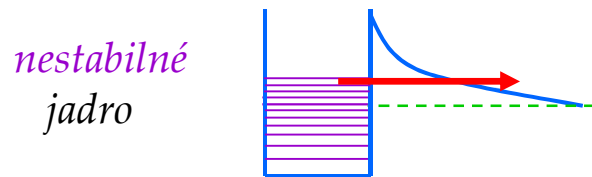
Rádioaktivita a jadrové reakcie

nestabilita jadra

elektrostatické odpudzovanie medzi protónmi je v atómovom jadre výrazne slabšie než príťažlivé sily medzi nukleónmi (krátkodosahové silné jadrové sily), v prípade ťažkých atómov ($A > 210$) však spôsobujú nestabilitu jadra – rozpad



coulombovská bariéra (elektrostatické odpudzovanie) bráni protónom nielen preniknúť k jadru zvonka ale i uniknúť von z jadra



častica môže (podľa zákonov kvantovej mechaniky) preniknúť potenciálovou bariérou konečnej výšky a šírky – tunelový jav

rozpadom sa jadro zbavuje „prebytočných“ častíc a dostáva sa do konfigurácie odpovedajúcej nižšiemu energetickému stavu – väčšej stabilite

možné typy rádioaktívneho rozpadu jadra:

spontánna emisia tzv. α -častice (jadra atómu ${}^4_2\text{He}$) - rozpad α

spontánna emisia elektrónu alebo pozitrónu (?!) - rozpad β

štiepenie na dve menšie jadrá pri záchyte neutrónu

rozpad α

energia uvoľnená pri rozpade



emitovaná častica potrebuje

na prekonanie potenciálovej bariéry *čo najväčšiu* energiu \Rightarrow *čo najmenšie* $(m_2 + m)$

hmotnosť α -častice ${}^4_2\text{He}$ je výrazne *menšia* než súčet hmotností nukleónov, ktoré ju tvoria (2 protóny a 2 neutróny), lebo ${}^4_2\text{He}$ má *veľkú väzbovú energiu*

\Rightarrow pravdepodobnosť emisie α -častice je *oveľa vyššia* než pravdepodobnosť emisie samostatných nukleónov (má *dostatočnú* energiu na prekonanie potenciálovej bariéry)

schéma rozpadu α : ${}^A_Z\text{X} \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}\text{Y} + {}^4_2\alpha$ $A \rightarrow A - 4$ atómová hmotnosť odnášaná α -časticou

\Rightarrow existujú 4 základné *rozpadové rady* $A = 4n, 4n + 1, 4n + 2, 4n + 3$

kinetická energia emitovanej α -častice $W_k \approx \frac{A-4}{A} W_r$ $A \approx 200 \Rightarrow W_k \approx W_r$

spektrum energií emitovaných α -častíc je *diskrétne* (čiarové)

$$W_r = [m_1 - (m_2 + m)]c^2$$

hmotnosť jadra
pred rozpadom po rozpade hmotnosť emitovanej častice

rozpad β

emisía elektrónu alebo pozitrónu z jadra - odkiaľ sa berú elektróny (pozitróny) v jadre?!

rozpad *neutrónu*: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$ - emisía *elektrónu* a *antineutrína*
 ($m_n > m_p$) protón elektrón antineutríno

inverzný rozpad: $p \rightarrow n + e^+ + \nu$ - emisía *pozitrónu* a *neutrína*
 pozitron neutríno

(nemôže nastať voľne (*mimo* jadra), lebo $m_p < m_n$)

K-záchyt: $p + e^- \rightarrow n + \nu$ jadro zachytí elektrón z najhlbšej vrstvy ($n = 1$)
 elektrónového obalu – K-vrstvy

emisía častice \Leftrightarrow absorpcia antičastice

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu \Leftrightarrow p + e^- \rightarrow n + \nu \Leftrightarrow p + \bar{\nu} \rightarrow n + e^+$$

z fyzikálneho hľadiska sú tieto reakcie ekvivalentné – ich pravdepodobnosti sú *rovnaké*

akú úlohu majú v týchto reakciách *neutrína*?

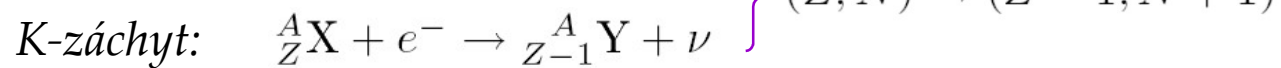
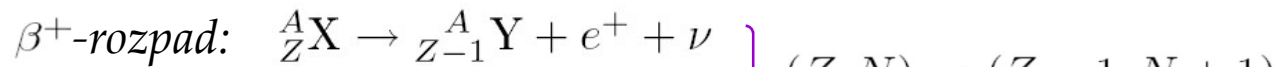
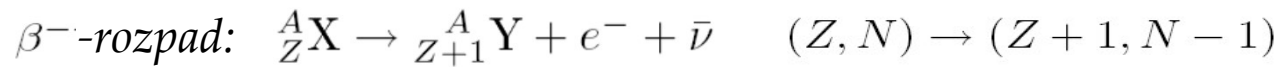
elektrónové neutrína sú leptóny s nulovým elektrickým nábojom, spinom $\frac{1}{2}$ a pokojovou hmotnosťou $m_0 \rightarrow 0$ (?)

účasť neutrín v týchto reakciách zaručuje *zachovanie momentu hybnosti* (spinu) a tzv.

leptónového čísla (1 pre leptón, -1 pre antileptón, 0 pre ostatné častice)

neutrína pôsobia v týchto reakciách prostredníctvom *slabej interakcie*, neutrína inak s hmotou *neinteragujú* (dokážu napr. preletieť naprieč Zemeguľou bez interakcie)

uvedeným 3 mechanizmom vzniku elektrónov (pozitrónov) v jadre odpovedajú základné schémy β -rozpadu:



mení sa počet protónov na úkor počtu neutrónov (alebo naopak)

pri β -rozpade sa zachováva hmotnostné číslo A (nie hmotnosť jadra – klesá pri β^{-} , rastie pri ostatných), súčet pokojových energií výsledných produktov rozpadu je menší než pokojová energia pôvodného atómu, t.j. rozpad vedie k výhodnejšiemu energetickému stavu

uvoľnená energia sa náhodným spôsobom prerozdelení medzi kinetické energie emitovaných elektrónov a neutrín – ich energetické spektrum je spojité

jadrá sa po rádioaktívnom rozpade môžu nachádzať v excitovaných energetických stavoch, preskokmi do základného stavu vyžarujú energiu v podobe fotónov – γ -žiarenie (niekedy nazývané γ -rozpad) - čiarové spektrum

okrem toho:

pozitróny emitované pri β^{+} -rozpade anihilujú s elektrónmi za vzniku fotónov (γ -žiarenie)

do uvoľnených elektrónových stavov pri K-záchyte preskakujú elektróny z vyšších vrstiev obalu za súčasného vyžiarovania prebytočnej energie v podobe fotónov (RTG)

štatistika rádioaktívnych rozpadov

vyplývajú z *pravdepodobnostného* charakteru *tunelovania* emitovaných častíc coulombovskou potenciálovou bariérou

pravdepodobnosť rozpadu jedného jadra za čas dt je λdt λ - *rozpadová konštanta*

za čas dt sa rozpadne dN jadier z celkového počtu N (nerozpadnutých) jadier

$$dN = -N\lambda dt \Rightarrow \frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad / \int \quad \ln N - \ln N_0 = \ln \frac{N}{N_0} = -\lambda t \Rightarrow N = N_0 \exp\{-\lambda t\}$$

$$\int \frac{1}{x} dx = \ln x + C, \quad C = \ln x_0$$

$\tau = \frac{1}{\lambda}$ - *časová konštanta rozpadu – stredná doba života rádionuklidu (rádioaktívneho jadra)*

rádioaktivita $R = -\frac{dN}{dt}$ - *rýchlosť rozpadu* [$Bq = s^{-1}$]

$$R = \lambda N = \lambda N_0 \exp\{-\lambda t\} = R_0 \exp\{-\lambda t\}$$

rádioaktivita (rýchlosť rozpadu) klesá s časom rovnako ako počet nerozpadnutých jadier

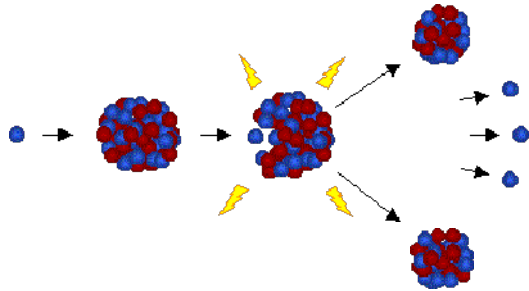
polčas rozpadu $T_{\frac{1}{2}}$ - *doba poklesu rádioaktivity na polovicu* ($\frac{1}{2}R_0$)

$$\frac{1}{2}R_0 = R_0 \exp\left\{-\frac{T_{\frac{1}{2}}}{\tau}\right\} \Rightarrow T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda} \quad \underline{\frac{1}{\lambda} = \tau > T_{\frac{1}{2}}}$$

rozpad jadra má *štatistický* charakter – za čas $T_{\frac{1}{2}}$ sa rozpadne *s pravdepodobnosťou* 50%, jeho *stredná doba života* (v nerozpadnutom stave) je *dlhšia*

štiepenie jadra

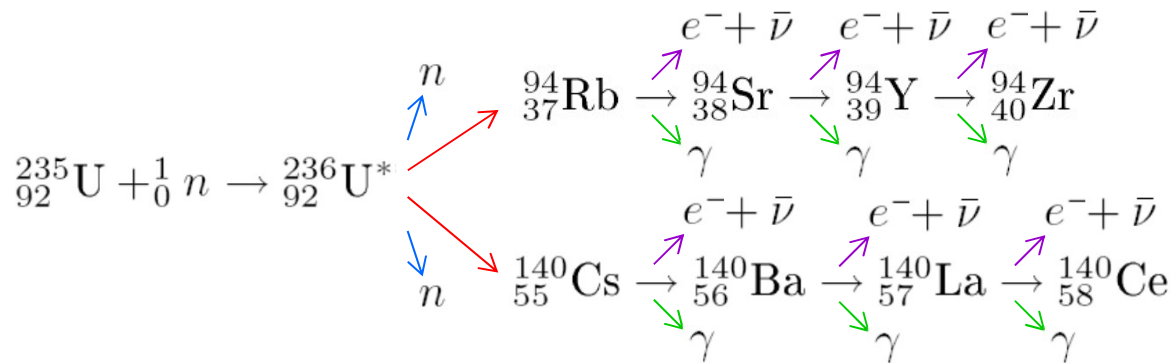
nastáva pri **zrážke** ťažkého jadra s časticou (n , p , e , fotón, α -častica) - jadro prejde do **energeticky nevýhodnejšieho** stavu (príjme n , resp. excituje sa) a následne sa rozpadne na dve **ľahšie jadrá** za súčasnej emisie n (a následného β -rozpadu štiepných produktov)



spontánne štiepenie je **zriedkavé**
(pravdepodobnejší je spontánny α -rozpad)

pri štiepení sa **uvolňuje** obrovská **energia**,
väčšinou vo forme W_k štiepných produktov

jeden z možných
spôsobov
štiepenia ${}_{92}^{235}\text{U}$



následný
 β^- -rozpad
sprevádzaný
 γ -žiarením

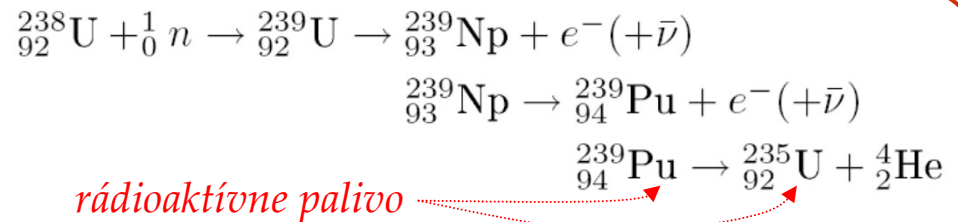
β^- -rozpadom sa jadrá zbavujú prebytočných neutrónov a prechádzajú do stabilnejších stavov

reťazová štiepna reakcia – **vyvolaná** zrážkou s neutrónom, sama **produkuje** tiež neutróny,
aspoň jeden emitovaný neutrón vyvolá **d'alsie** štiepenie

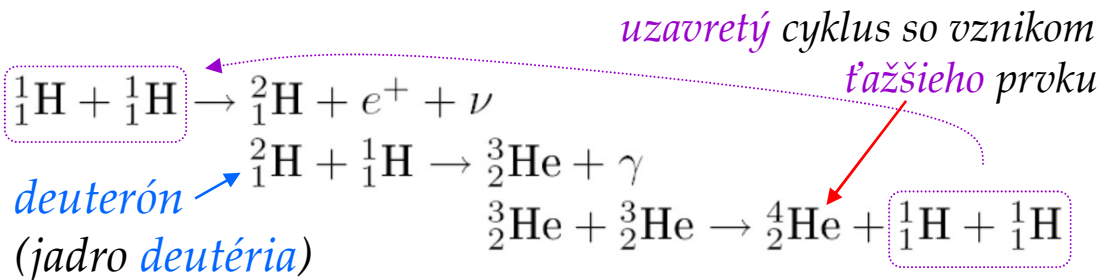
reťazovosť štiepnej reakcie možno dosiahnuť dostatočným množstvom (tzv. *nadkritická hmotnosť*) *rádioaktívneho paliva* a optimalizovaním rýchlosti neutrónov – *moderovaním* (rýchle neutróny nedokážu vyvolať štiepenie jadra)

izotop ${}^{238}_{92}\text{U}$ sa pri zrážke s neutrónom *neštiepi*, preto treba zvyšovať podiel izotopu ${}^{235}_{92}\text{U}$ v prírodnej zmesi 238/235 oproti prirodzenému pomeru (99% izotopu 238) – tzv. *obohacovanie* uránu

transuránové prvky ($Z > 92$)
v prírode sa *nevyskytujú* kvôli svojmu *krátkemu* polčasu rozpadu - *vyrábajú sa* umelo bombardovaním ${}^{238}_{92}\text{U}$ neutrónmi



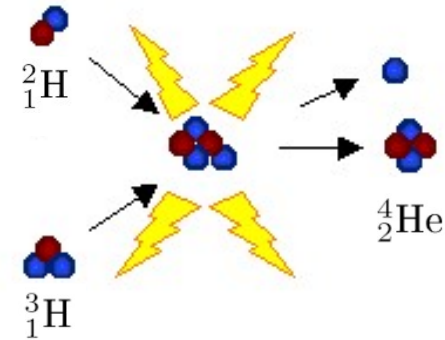
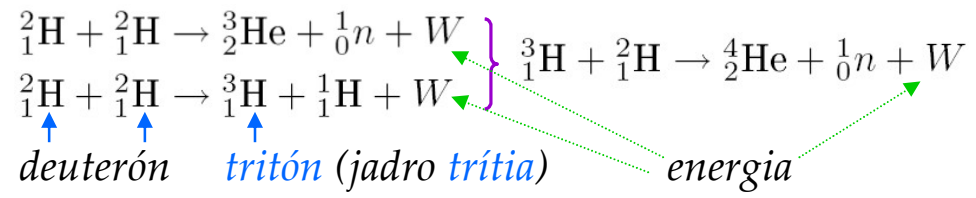
termojadrová syntéza (fúzia)



syntéza vyžaduje prekonanie potenciálovej bariéry pre splynutie nuklidov
reprodukateľnosť vyžaduje extrémne tlaky a teploty
(*hviezdy* - vznik ťažších prvkov)

celková uvoľnená energia Δmc^2 je *obrovská!*
(Δm - rozdiel hmotností vstupných a výstupných produktov)

v laboratórnych podmienkach



Kvantová štatistika

identické kvantovomechanické častice sú principiálne nerozlíšiteľné

v klasickej mechanike je (pohybový) stav každej častice popísaný jej polohou a hybnosťou, identické častice *vieme rozlíšiť na základe ich polohy*

pri bežných hustotách *kvantovomechanických* častíc (mikroskopických častíc s veľkou deBroglieho vlnovou dĺžkou) sa ich vlnové funkcie *prekrývajú* – stávajú sa *priestorovo nerozlíšiteľnými* – *vzájomnou zámenou dvoch častíc nevzniká nový mikrostav* - neplatí Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdelenie

makrostav systému je určený len obsadzovacími číslami jednotlivých energetických hladín

dvojicu *identických* častíc možno popísať „párovou“ vlnovou funkciou $\psi(\xi_1, \xi_2, t)$ spĺňajúcou SCHR

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\xi_1, \xi_2, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\xi_1, \xi_2, t)$$

kde ξ_1, ξ_2 sú množiny všetkých premenných popisujúcich častice 1 a 2 (napr. polohový vektor a projekcia spinu)

tejto rovnici vyhovuje aj vlnová funkcia $\psi(\xi_2, \xi_1, t) = \hat{P} \psi(\xi_1, \xi_2, t)$ (hamiltonián je symetrický voči vzájomnej zámene - permutácii identických premenných), kde \hat{P} je *operátor permutácie* (komutujúci s hamiltoniánom), nadobúdajúci len *dve vlastné hodnoty* $P = \pm 1$

$$\hat{P} \psi(\xi_1, \xi_2, t) = \psi(\xi_2, \xi_1, t) = \pm \psi(\xi_1, \xi_2, t)$$

symetrická
antisymetrická „párová“ vlnová funkcia

symetrické „párové“ funkcie popisujú častice s *celočíselným spinom* – *bozóny*

antisymetrické „párové“ funkcie popisujú častice s *poločíselným spinom* – *fermióny*

ak $\xi_2 = \xi_1$ (dve identické častice v tom istom stave), pre *fermióny* $\psi(\xi_1, \xi_1, t) = -\psi(\xi_1, \xi_1, t)$ a teda $\psi(\xi_1, \xi_1, t) = 0$ - takýto stav je (v ľubovoľnom čase) nerealizovateľný - *dva fermióny sa nemôžu súčasne nachádzať v tom istom kvantovom stave* - *Pauliho vylučovací princíp* - platí *len pre fermióny*, *bozóny* môžu obsadzovať ten istý stav *v ľubovoľnom počte*

rozdelenie 2 identických častíc do 3 dostupných stavov

klasické častice			bozóny			fermióny		
1	2	3	1	2	3	1	2	3
AB	AA	A	A	...
...	AB	AA	...	A	...	A
...	...	AB	AA	...	A	A
A	B	...	A	A	...			
B	A	...	A	...	A			
A	...	B	...	A	A			
B	...	A						
...	A	B						
...	B	A						

rozdiel medzi symetrickou a antisymetrickou „párovou“ funkciou *vymizne* ak sa vlnové funkcie jednotlivých častíc *neprekrývajú* (častice možno považovať za *priestorovo rozlíšiteľné* v klasickom zmysle)

rovnovážny stredný počet *klasických* častíc *otvoreného* systému (tj. takého, ktorý si s okolím môže *vymieňať častice* – každá častica „prinesie do / odnesie zo“ systému energiu μ), obsadzujúcich energetickú hladinu W_i s degeneráciou g_i je

$$\langle n_i \rangle = \frac{g_i}{\exp\left\{\frac{W_i - \mu}{k_B T}\right\}}$$

Maxwellovo – Boltzmannovo rozdelenie

rovnovážny stredný počet *bozónov* otvoreného systému, obsadzujúcich energetickú hladinu W_i s degeneráciou g_i je

$$\langle n_i \rangle = \frac{g_i}{\exp\left\{\frac{W_i - \mu}{k_B T}\right\} - 1}$$

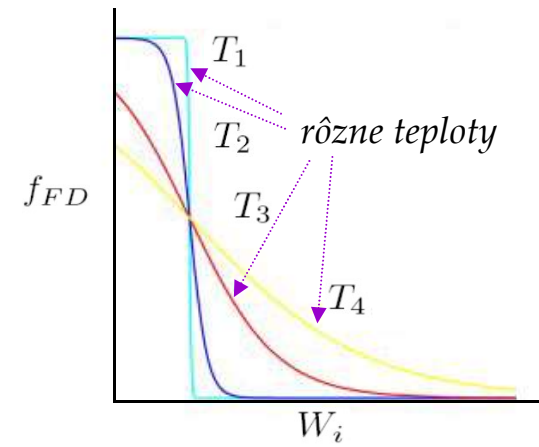
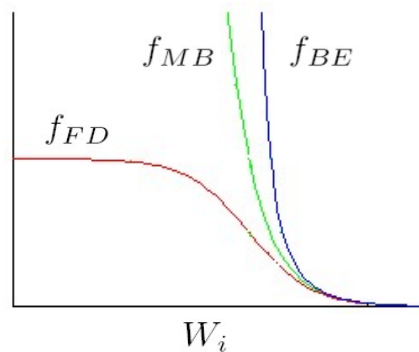
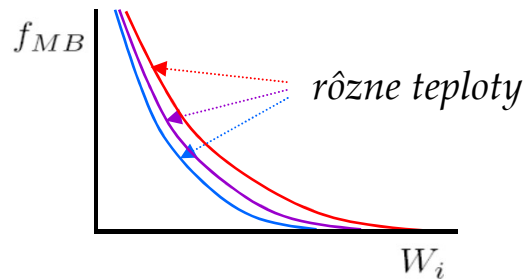
Boseho – Einsteinovo rozdelenie

rovnovážny stredný počet *fermiónov* otvoreného systému, obsadzujúcich energetickú hladinu W_i s degeneráciou g_i je

$$\langle n_i \rangle = \frac{g_i}{\exp\left\{\frac{W_i - \mu}{k_B T}\right\} + 1}$$

Fermiho – Diracovo rozdelenie

príslušné rozdelenie pre $g_i = 1$ nazývame *rozdeľovacou funkciou* f



s *rastúcou teplotou* rastie kinetická energia a teda aj hybnosť častíc, tj. klesá ich de Broglieho vlnová dĺžka – stávajú sa *priestorovo rozlíšiteľnými* - $f_{FD}, f_{BE} \rightarrow f_{MB}$

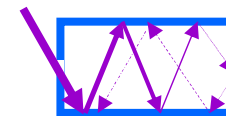
žiarenie absolútne čierneho telesa

prenos tepla medzi telesami sa uskutočňuje niekoľkými mechanizmami: *vedením tepla* (prenos tepelnej energie *bez prenosu látky* - postupným odovzdávaním kinetickej energie medzi časticami látky (pozri Systémy v tepelnom kontakte)), *konvekciou* (*prúdenie častíc látky* - *vynútené* alebo *prirodzené* - teplejšia (napr. ohrievaná) časť látky *zväčšuje svoj objem* (tj. znižuje svoju hustotu) - stáva sa *ľahšou* a stúpa nahor, zatiaľ čo chladnejšia ťažšia časť látky klesá (plyny a kvapaliny), a *tepelným žiarením* - *elektromagnetickým* žiarením z povrchu *každého* telesa (závislým na jeho *teplote*)

absolútne čierne teleso (AČT) - teleso, ktoré *pohltil všetko* dopadajúce žiarenie (nič neodrazí)

pojmem AČT zavádzame preto, aby sme v žiarení vychádzajúcom z povrchu telesa odlišili žiarenie *vyžarované* telesom od žiarenia *odrazeného* od jeho povrchu (pochádzajúceho z vyžarovania okolitých telies) - AČT žiadne dopadajúce žiarenie *neodráža*

AČT možno modelovať dutinou (v telese) s malým otvorom - žiarenie vnikajúce cez otvor sa po mnohonásobných dopadoch a odrazoch na stenách dutiny postupne úplne *pohltil* - žiarenie



vyžarovací zákon pre *reálne* teleso možno odvodiť zo zákona pre AČT, ak poznáme koeficient odrazu a index lomu daného telesa

neustále vyžarovanie a pohlcovanie fotónov stenami dutiny vedie k TD *rovnováhe* žiarenia v dutine, počet fotónov v dutine sa *nezachováva* $\Rightarrow \underline{\mu = 0}$

fotóny sú *bozóny* so spinom $\underline{s = 1}$, $m_s = \pm s = \pm 1$ - *dva* priemety spinu do význačného smeru odpovedajú *dvom smerom kruhovej polarizácie* elektromagnetickej vlny

pohybový stav *každej* mikroskopickej častice systému je určený jeho *súradnicami a hybnosťami* (vo všetkých smeroch pohybu), tj. polohou v 6-rozmernom *fázovom priestore*

princíp neurčitosti modifikuje štruktúru fázového priestoru

$$\left. \begin{array}{l} dx dp_x \geq \hbar \\ dy dp_y \geq \hbar \\ dz dp_z \geq \hbar \end{array} \right\} dV \geq \hbar^3 \quad dV = dx dy dz dp_x dp_y dp_z - \text{element fázového priestoru}$$

„bod“ vo fázovom priestore (určuje stav častice) je bunka s *minimálnym objemom* \hbar^3

predpokladajme AČT ako dutinu v tvare kocky o objeme $L^3 = V$

je tiež rozumné predpokladať v dutine existenciu len takých vln, pre ktoré platí $n \frac{\lambda}{2} = n \frac{h}{2p} = L$, $n = 1, 2, \dots$ (*stojaté vlny*)

hybnosť fotónov je teda $p = \frac{h}{2L} n$, a to vo všetkých smeroch

$$p_{x,y,z} = \frac{h}{2L} n_{x,y,z} \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 4 \left(\frac{L}{h}\right)^2 p^2$$

danej hodnote hybnosti teda odpovedá toľko stavov, koľko kombinácií $n_{x,y,z}$ dáva *tú istú* hodnotu p , na jeden stav teda pripadá v *hybnostnom priestore* objem $\left(\frac{h}{2L}\right)^3 = \left(\frac{\pi \hbar}{L}\right)^3$

intervalu $p, p + dp$ odpovedá v hybnostnom priestore objem $4\pi p^2 dp$ (gul'ová vrstva hrúbky dp),

pre *fotón* $p = \frac{\hbar \omega}{c}$, a teda počet stavov v intervale $(\omega, \omega + d\omega)$ je $2 \frac{1}{8} \frac{4\pi \left(\frac{\hbar \omega}{c}\right)^2 \frac{\hbar}{c} d\omega}{\left(\frac{\pi \hbar}{L}\right)^3} = \frac{V \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$

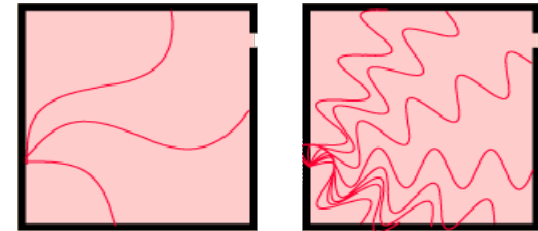
dve rôzne *polarizácie* fotónov

len 1/8 všetkých stavov odpovedá *kladným* hodnotám $p_{x,y,z}$ (1 oktant p -priestoru)

koľkokrát sa $\left(\frac{\pi \hbar}{L}\right)^3$ zmestí do $4\pi p^2 dp$

(počet dostupných stavov (stojatých vln) rastie s frekvenciou (vid' obrázok))

rovnovážne obsadenie týchto stavov *pre energie* fotónov $\hbar \omega$ je určené *Boseho-Einsteinovou* rozdeľovacou funkciou (súčin počtu stavov s danou energiou a rozdeľovacej funkcie)



hustota elektromagnetickej energie na jedn. objemu AČT v intervale frekvencií $(\omega, \omega + d\omega)$

$$w(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1}$$

Planckov zákon
žiarenia AČT

(rovnovážne rozdelenie $\times \frac{\hbar\omega}{V}$)

pre nízke frekvencie $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1$ platí $\frac{1}{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1} \rightarrow \frac{k_B T}{\hbar\omega}$ a $w_P(\omega, T)$ prechádza na klasický

Rayleighov-Jeansov vyžarovací zákon $w_{RJ}(\omega)d\omega = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega$, ktorý vyplýva z klasickej štatistiky (neobsahuje Planckovu konštantu \hbar !)

pre vysoké frekvencie však $w_{RJ}(\omega, T) \rightarrow \infty$ (celková energia vyžiarená telesom na všetkých frekvenciách je nekonečná – nezmysel!)
- tzv. „ultrafialová katastrofa“

- zlyhanie klasickej a nevyhnutnosť kvantovej fyziky

frekvencia, resp. vlnová dĺžka, pri ktorej je hustota vyžiarenej energie maximálna, závisí od teploty $\omega_m \sim T, \lambda_m \sim \frac{1}{T}$

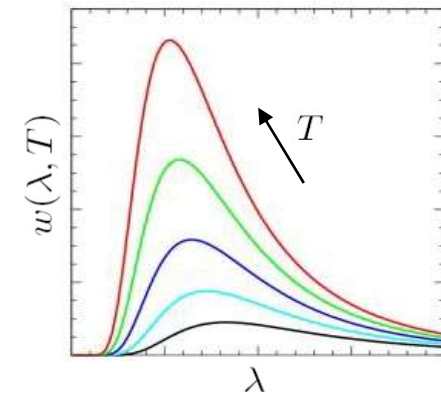
celková intenzita žiarenia (energia vyžiarená jednotkovou plochou telesa do všetkých smerov na všetkých frekvenciách)

$$I = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 c^2 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4$$

Stefanov-Boltzmannov zákon

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ kgs}^{-3} \text{ K}^{-4}$$

Stefanova-Boltzmannova konštanta



teleso zohriate „do žerava“ sa nám javí ako **červené** – maximum vyžiarenej elektromagnetickej energie je pri vlnovej dĺžke odpovedajúcej červenému svetlu (800 nm)

d'alším zohrievaním sa farba žeravého telesa mení do **biela** – vlnová dĺžka maxima vyžiarenej energie $\lambda_m \sim \frac{1}{T}$ sa posunula do **stred**u viditeľného spektra (600 nm) a teleso vyžaruje **celé** viditeľné spektrum, zložením jednotlivých spektrálnych zložiek vzniká vnem bielej farby svetla

vyžiarený výkon (energia za jedn. času) človeka ($37^\circ\text{C} = 310\text{ K}$, plocha tela $\approx 1\text{ m}^2$) je $\approx 500\text{ W}$, v izbe ($20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$) pohltí človek výkon $\approx 400\text{ W}$ vyžiarený okolím (stenami, atď.), tj. výsledný vyžiarený výkon človeka je $\approx 100\text{ W}$ (oblečenie ho znižuje)

fonóny, tepelná kapacita tuhých látok

atómy v **tuhej látke** kmitajú okolo svojich rovnovážnych polôh, sila väzby atómov na **mriežku** je (Hookeov zákon) $F = -kx$, frekvencia kmitov je $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, celková energia harmonického oscilátora je $W = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$ (súčet kinetickej a potenciálnej energie)

amplitúda kmitov, a teda aj energia, **závisia od teploty** – pravdepodobnosť, že oscilátor má pri danej teplote T energiu W , je $\exp\left\{\frac{-W}{k_B T}\right\}$ (Boltzmannov faktor)

na **každý stupeň voľnosti** pripadá energia $\frac{1}{2}k_B T$, potenciálna energia **väzby** atómu na mriežku predstavuje popri kinetickej energii vibračného pohybu „nový“ stupeň voľnosti (v porovnaní s **voľnými** molekulami v plyne)

stredná energia oscilátora pri danej teplote je $\langle W \rangle = \frac{1}{2}k_B T + \frac{1}{2}k_B T = k_B T$

vnútorná energia kryštálu obsahujúceho N atómov, kmitajúcich v **3 nezávislých** smeroch (každý atóm odpovedá **3 nezávislým** 1D harmonickým oscilátorom), je $U = 3Nk_B T$, jeho tepelná kapacita je teda $C_V = 3Nk_B$ ($= 3R$ pre 1 mól látky)

Dulongov – Petitov zákon

podľa **klasického** Dulongovho-Petitovho zákona tepelná kapacita tuhých látok **nezávisí od teploty**, v skutočnosti však tepelná kapacita tuhých látok **pri nízkych teplotách klesá k nule** – je potrebný **kvantovomechanický prístup**

atóm v kryštáli je **kvantovomechanický** harm. oscilátor s energiami $W_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

$W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ pre $n = 0$ je tzv. **nulová energia** (energia „**nulových kmitov**“), **nesúvisiaca s tepelnými kmitmi**, energie tepelných kmitov sú $(W_n)_{kmity} = n\hbar\omega$

v TD rovnováhe je oscilátor v stave n s **pravdepodobnosťou** $\sim \exp\{\frac{-W_n}{k_B T}\}$

počet oscilátorov v stave n je $N_n = N_0 \exp\{\frac{-W_n}{k_B T}\}$ počet oscilátorov v základnom stave $n = 0$

stredná energia pripadajúca na 1 oscilátor $\langle W \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1}$ (namiesto $k_B T$!)

(**Boseho-Einsteinovo** rozdelenie)

$$U = 3N\langle W \rangle = 3N \frac{\hbar\omega}{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1} \Rightarrow C_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\}}{(\exp\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\} - 1)^2}$$

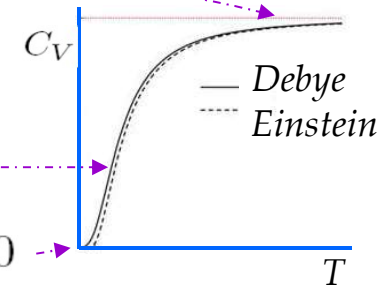
(Einsteinov vzorec)

$$k_B T \gg \hbar \omega: \exp\left\{\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right\} \cong 1 + \frac{\hbar \omega}{k_B T} \Rightarrow C_V \rightarrow 3Nk_B$$

$$e^x = 1 + x + \dots, x \ll 1$$

$$k_B T \ll \hbar \omega: \exp\left\{\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right\} \gg 1 \Rightarrow C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)^2 \exp\left\{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right\}$$

$$T \rightarrow 0: \exp\left\{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right\} \text{ klesá k nule rýchlejšie než narastá } \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)^2 \Rightarrow C_V \rightarrow 0$$



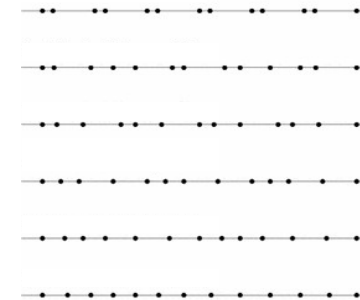
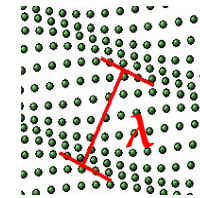
kmity jednotlivých atómov v mriežke kryštálu *nie sú nezávislé*, predstavujú viazané reťazce - *spriahnuté* oscilátory - kmity sa prenášajú, tj. *širia ako vlny*, na okrajoch kryštálu sa odrážajú - vznikajú *stojaté vlny* rozložené v celom kryštáli

Einsteinov vzorec pre tepelnú kapacitu tuhej látky vychádza z predpokladu, že všetky atómy v kryštáli kmitajú s rovnakou frekvenciou ω , spresnenie poskytuje Debyeova teória so zložitým výrazom pre C_V

frekvencie kmitov, resp. vln tvoria *spektrum* s *maximálnou* - *Debyeovou frekvenciou*

rýchlosť šírenia vlny v kryštáli $\omega_D = v \sqrt[3]{\frac{3N}{4\pi V}}$ - počet atómov v kryštáli
- objem kryštálu

maximálnej (Debyeovej) frekvencii odpovedá *minimálna* vlnová dĺžka daná *medziatómovou vzdialenosťou* v kryštáli



$$\hbar \omega_D = k_B \theta$$

- *Debyeova teplota* θ - pod ňou začína tepelná kapacita *prudko klesať*,

prejavujú sa *kvantové* efekty, energetické spektrum kmitov oscilátorov je *diskrétne*, vibračná energia sa šíri sa v podobe *energetických kvánt* - *fonónov*

fonóny sú mechanickým analógom fotónov, sú *bozóny* (celočíselný spin, Boseho-Einsteinova štatistika)

na rozdiel od (len priečnej) elektromagnetickej vlny môžu byť mechanické vlny *priečne aj pozdĺžne* – *transverzálne aj longitudinálne* fonóny – šíria sa mierne odlišnými rýchlosťami

počet fonónov (ani fotónov) v systéme sa *nemusi zachovávať* - hodnotu ich chemického potenciálu (o.i. v rozdeľovacej funkcii) kladieme rovnú *nule*

šírenie tepla *vedením* (tj. prenášaním energie a hybnosti) v *kryštáloch* sprostredkovávajú *vlny-fonóny* v *kovoch* sa *navyššie* na vedení tepla podieľa aj „plyn voľných“ elektrónov (pohyb elektrónov nepredstavuje prenos látky!) – kovy sú preto dobrými vodičmi tepla

Molekuly, chemická väzba

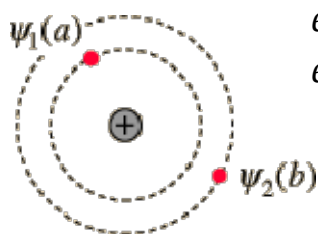
molekuly – vznikajú **chemickou väzbou** atómov

molekula je **stabilná** ak energia molekuly < súčet energii samostatných atómov

kovalentná väzba – atómy tvoriace molekulu **zdieľajú** jednu alebo viac **dvojíc** elektrónov, aby **doplnili** svoje vonkajšie elektrónové vrstvy

Pauliho vylučovací princíp platí pre všetky častice s **poločíselným spinom** – **fermióny**
výsledná vlnová funkcia popisujúca súbor identických fermiónov musí byť **antisymetrická**
vzhľadom na ich vzájomnú **výmennu**

pre častice s **celočíselným** (aj nulovým) spinom – **bozóny** – **neplatí** Pauliho vylučovací princíp,
výsledná vlnová funkcia popisujúca súbor identických bozónov musí byť **symetrická** vzhľadom
na ich vzájomnú výmenu



elektrón 1 v stave a
elektrón 2 v stave b

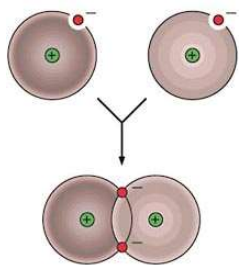
$$\psi = \psi_1(a)\psi_2(b)$$

pravdepodobnosť, že **súčasne**
1 je v stave a a 2 je v stave b

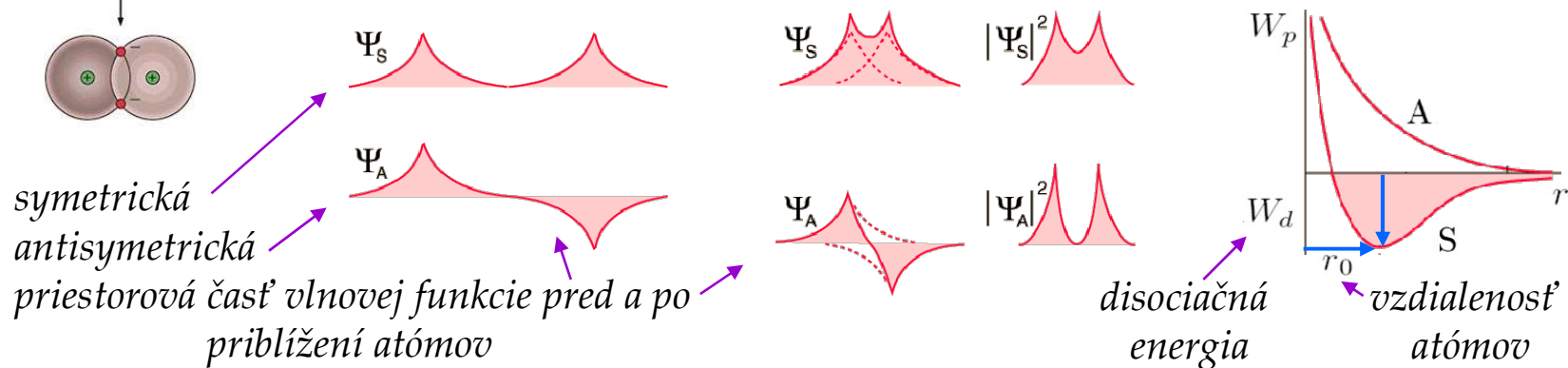
pri takomto zápise možno elektróny **rozlíšiť** na základe stavu, elektróny
sú však **nerozlíšiteľné**, tj. $\psi = \psi_1(a)\psi_2(b) \pm \psi_1(b)\psi_2(a)$ - pravdepodobnosť
obsadenia stavov a,b elektrónmi 1,2 (bez rozlíšenia poradia)

pre bozóny \oplus pre fermióny (pre $a = b$ musí byť $\psi = 0$)

molekula H_2



celková vlnová funkcia elektrónového páru musí byť *antisymetrická*
spinová časť vlnovej funkcie môže byť $\left\{ \begin{array}{l} \text{symetrická (paralelné spiny)} \\ \text{antisymetrická (antiparalelné spiny)} \end{array} \right.$
 \Rightarrow priestorová časť vlnovej funkcie musí byť opačná ako jej spinová časť



symetrická
antisymetrická

priestorová časť vlnovej funkcie pred a po
priblížení atómov

disociačná
energia

vzdialenosť
atómov

po priblížení elektrónov len *symetrická* (priestorová) vlnová funkcia dáva *stabilnú väzbovú* konfiguráciu (tj. prekryvanie vlnových funkcií jednotlivých elektrónov)

prípadný tretí elektrón (tretieho atómu) by bol *vždy* v antisymetrickej priestorovej konfigurácii voči *jednému* z elektrónov (\Rightarrow odpudzovanie) – molekula je *nasýtená*, neexistuje molekula H_3

molekulové orbitály – vznikajú *prekryvaním* atómových orbitálov, dochádza ku *zmene elektrónovej konfigurácie* (oproti izolovaným atómom) vo *vonkajšej nezaplnenej vrstve* (vnútorné vrstvy sú bližšie k jadrú a potenciál jadra je menej odtienený)

výsledkom vzájomného prekryvania atómových orbitálov je *zvýšenie* alebo *zníženie* hustoty pravdepodobnosti výskytu elektrónu – *väzbový* alebo *protiväzbový* molekulový orbitál

označenie molekuloých orbitálov určuje ich *symetria*: σ , π , δ , ... na základe podobnosti (v smere väzby, tj. pozdĺž osi molekuly) s atómovými orbitálmi s, p, d,...

rotácia molekuly okolo pozdĺžnej osi – priemet momentu hybnosti \vec{L} do smeru tejto osi (z)

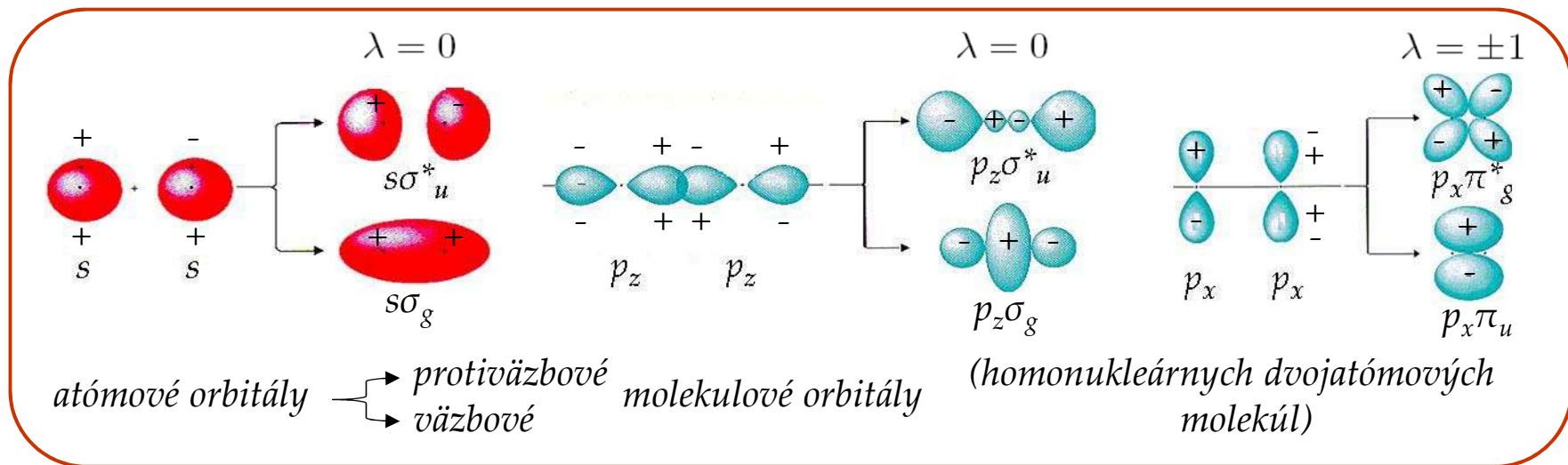
$L_z = \lambda \hbar$, $\lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (analóg m_l)

$\sigma : \lambda = 0$ ($L_z = 0$)

$\pi : \lambda = \pm 1$

$\delta : \lambda = \pm 2$

z akých atómových orbitálov vznikol $1s\sigma_{u,g}^*$ protiväzbový (*) alebo väzbový () orbitál
 symetria molekulového orbitálu či ψ mení (u – ungerade, *nepárny*) alebo nemení (g – gerade, *párny*) znamienko vzhľadom na stred molekuly - má zmysel len pre dvojatómové *homonukleárne* (obsahujúce rovnaké atómy) molekuly



molekulová väzba je *stabilná* ak energia molekulového orbitálu < súčet energií atómových orbitálov

molekula H_2



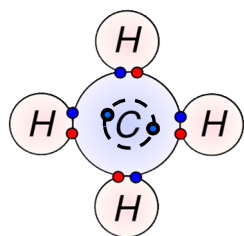
energia väzbového orbitálu < energie atómových orbitálov < energia protiväzbového orbitálu

molekula CH_4

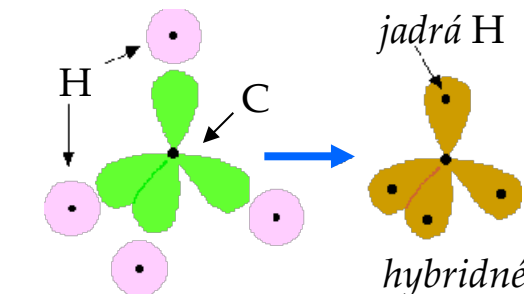
elektrónová konfigurácia v *izolovanom atóme* C: $1s^2 2s^2 2p^2$ (zaplnený orbitál 2s, 2 nespárené elektróny v orbitáloch $2p_x$ $2p_y$)

elektrónová konfigurácia C v *molekule* metánu: $1s^2 2s^1 2p^3$ (4 nezaplnené *hybridné* orbitály $s^1 p^3$)

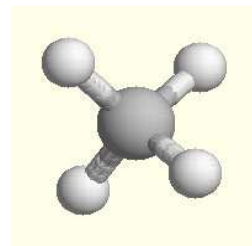
každá kovalentná väzba *znižuje* energiu molekuly, *hybridizácia* nastáva ak energie s a p orbitálov sa líšia *nepatrne*



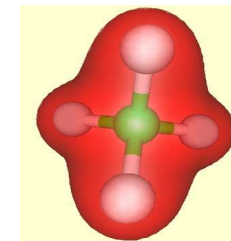
elektrónové
vrstvy



atómové orbitály hybridné
molekulové orbitály



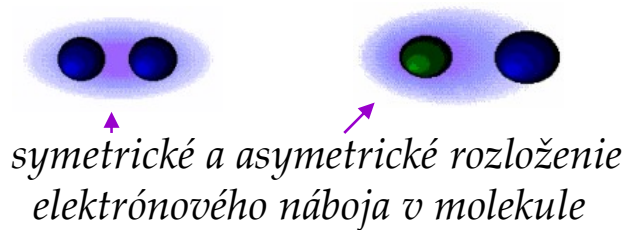
3D



hustota pravdepodobnosti
výskytu elektrónov

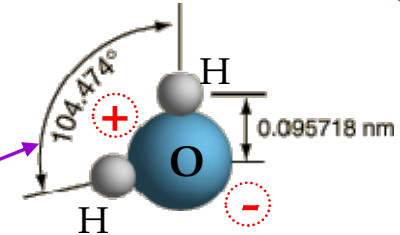
elektronegativita – miera schopnosti atómu v molekule pritiahnúť k sebe väzbové elektróny

polárna kovalentná väzba – ak atómy (v dôsledku *rozdielnych* elektronegativít) *nerovnako* zdieľajú väzbové elektrónové páry - nesymetrické nábojové rozloženie (niektorý atóm „viac kladný“, iný „viac záporný“) – vzniká *elektrický dipól*

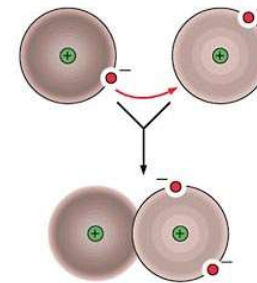


molekula H_2O

väzby H na p_y a p_z orbitály O (obsadené 1 elektrónom) – 90° + elektrostatické odpudzovanie



iónová väzba – jeden alebo viac atómov stráca elektrón (elektróny) v prospech iného atómu, aby mali *zaplnené* vonkajšie vrstvy – vznikajú *kladné a záporné ióny*, ktoré sa *elektrostaticky priťahujú*, vznikajú *polárne molekuly*



ionizačná energia – energia *potrebná* na „odtrhnutie“ elektrónu z *neutrálneho* atómu

ionizačná energia *narastá* v chemickej tabuľke prvkov zľava doprava (v rámci *periódy*) – narastá náboj a teda potenciál jadra pri nezmenenom elektrostatickom tienení jadra, tvorenom zaplnenými elektrónovými vrstvami

ionizačná energia *klesá* v chemickej tabuľke prvkov zhora nadol (v rámci *grupy*) – narastá vzdialenosť od jadra

elektrónová afinita – energia *uvolnená pridaním* elektrónu k *neutrálnemu* atómu (je mierou sily väzby elektrónu na neutrálny atóm)

iónová väzba vzniká medzi atómami s *malou ionizačnou energiou* a atómami s *veľkou elektrónovou afinitou*

molekula NaCl (len v plynnom skupenstve)

Na: jeden 3s elektrón mimo zaplnených vrstiev, ionizačná energia 5,14 eV (treba dodať)

Cl: do zaplnenia vrstvy chýba 1 elektrón, elektrónová afinita 3,62 eV (uvolní sa)

tj. na ich ionizáciu treba dodať

$$5,14 \text{ eV} - 3,62 \text{ eV} = 1,52 \text{ eV}$$

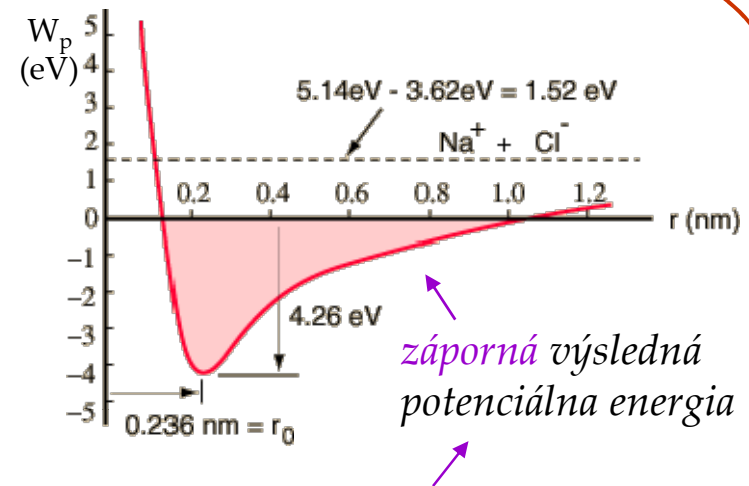
približovaním iónov Na^+ a Cl^- klesá (uvolňuje sa)

$$\text{ich potenciálna energia } \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

pre $r < 1 \text{ nm}$ „uvolnená“ potenciálna energia prevýši energiu potrebnú na ionizáciu

pre $r < r_0$ prevláda odpudzovanie iónov v dôsledku Pauliho vylučovacieho princípu a elektrostatických síl

konfigurácie iónov s *úplne zaplnenými* elektrónovými vrstvami odpovedajú *najvýhodnejšiemu* (najnižšiemu) energetickému stavu, elektrónové orbitály iónov Na^+ a Cl^- sa navzájom *neprekrývajú* (pri prekrývaní by Pauliho vylučovací princíp vyžadoval obsadenie vyšších stavov – zvýšenie energie)



záporná výsledná potenciálna energia

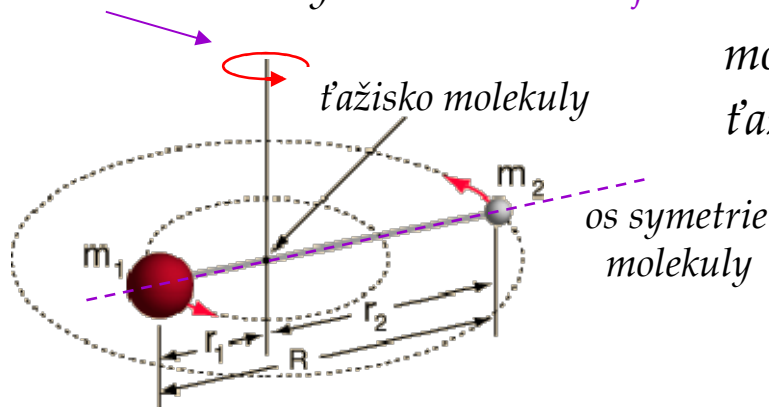


čisto iónová väzba (len elektrostatické priťahovanie bez prekrývania orbitálov, tj. bez zdieľania spoločných elektrónov) je *idealizácia*, každá iónová väzba je do istého stupňa kovalentnou (alebo kovovou) väzbou – s *rastúcim rozdielom elektronegativít* atómov narastá *iónový* charakter väzby

Molekulové spektrá

rotačné energetické hladiny molekuly

rotácia molekuly okolo osi **kolmej** na **os symetrie** molekuly (dvojatómovej)



moment zotrvačnosti molekuly $I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$

ťažisko molekuly: $m_1 r_1 = m_2 r_2$ $r_1 + r_2 = R$

$$\Rightarrow I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (r_1 + r_2)^2 = m' R^2$$

moment hybnosti molekuly: $L = I\omega$

$$L = \sqrt{J(J+1)}\hbar, \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

kinetická energia rotujúcej molekuly: $W_J = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{L^2}{2I} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$ - kvantovaná!

pri rotácii molekuly okolo ťažiska pôsobí na atómy **odstredivá** sila – **rozťahuje** molekulu ($R \rightarrow R'$) - kompenzovaná je **spätou** silou pružnosti

potenciálna (**elastická**) energia

napnutej (rozťahnutej) molekuly $\frac{1}{2}k(R' - R)^2$ - prirátava sa ku kinetickej energii

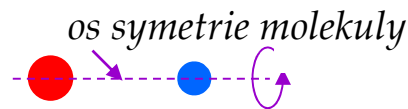
$$k(R' - R) = m'\omega^2 R' \Rightarrow R' = \frac{kR}{k - m'\omega^2}$$

výsledné energetické hladiny

$$W_J \cong \frac{J(J+1)\hbar^2}{2m'R^2} - \frac{J^2(J+1)^2\hbar^4}{2m'R^6 k} \sim \frac{1}{k}$$

↑
nedeformovaná
molekula

↑
korekcia na elastickú
deformáciu (rozťahnutie)



pri *lineárnych* (napr. dvojatómových) molekulách možno rotáciu molekuly okolo *svojej* osi symetrie *zanedbať* (hmotnosť molekuly je sústredená v jadrách atómov - ležia na osi, moment zotrvačnosti I pre takúto rotáciu je malý, $W_J \sim \frac{1}{I}$ sú veľmi veľké pre všetky $J > 0$ – na úrovni *disociačných energií* molekúl – nemusíme o nich uvažovať)

u *zložitejších* molekúl treba uvažovať o rotáciách okolo (navzájom kolmých) osí x, y, z

$$I_x, I_y, I_z \quad L_x, L_y, L_z \quad W_k = \frac{1}{2}(I_x \omega_x^2 + I_y \omega_y^2 + I_z \omega_z^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{L_x^2}{I_x} + \frac{L_y^2}{I_y} + \frac{L_z^2}{I_z} \right)$$

$$L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} = \sqrt{J(J+1)\hbar^2}, \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

ak $L_x \neq L_y \neq L_z$ (asymetrický vlčok), *nie je definovaný význačný smer* pre priestorové kvantovanie L – neexistuje všeobecný výraz pre rotačné energetické spektrum

ak $L_x = L_y$ (symetrický vlčok), význačný smer je z , *priestorové kvantovanie*

$$\left. \begin{array}{l} L_z = M_J \hbar, \quad M_J = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J \\ L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = J(J+1)\hbar^2 \\ (I_x = I_y = I_{xy}) \end{array} \right\} W_{J, M_J} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I_{xy}} + \frac{M_J^2}{2} \left(\frac{\hbar^2}{I_z} - \frac{\hbar^2}{I_{xy}} \right)$$

$$\left. \begin{array}{l} I_{xy} > I_z \\ I_{xy} = I_z \\ I_{xy} < I_z \end{array} \right\} \text{korekcia} \left\{ \begin{array}{l} > 0 \\ = 0 \\ < 0 \end{array} \right.$$

vibračné energetické hladiny molekuly

elastickou deformáciou (dvojatómovej) molekuly sa jej potenciálna energia zmení o $\frac{1}{2}k(R' - R)^2$ a spätná sila pružnosti je $-k(R' - R)$, pohybová rovnica má tvar $m' \frac{d^2x}{dt^2} = -kx$, kde $m' = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

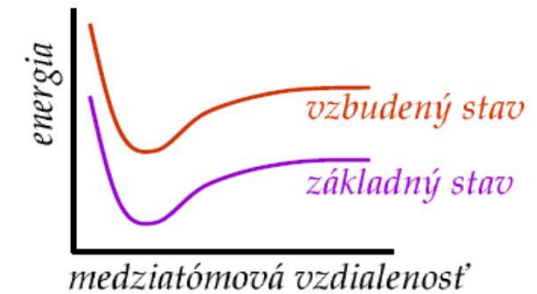
riešením klasického harmonického oscilátora dostávame frekvenciu kmitov $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m'}}$

riešením kvantového oscilátora dostávame energie $W_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $v = 0, 1, 2, \dots$

► (v priblížení parabolickej potenciálovej jamy)

elektrónové energetické hladiny molekuly

rotačné a vibračné energetické hladiny sú viazané na pohyb atómových jadier (sústredujúcich prakticky celú hmotnosť molekuly), existencia elektrónových hladín súvisí so zmenou elektrónovej konfigurácie oproti základnému stavu molekuly, vzбудené (excitované) stavy môžu byť sprevádzané zmenou väzby (molekulových orbitálov) a tým aj zmenou tvaru molekuly



molekulové spektrá

pohltením alebo vyžiarením energie (napr. elektromagnetickej vlny - fotónu) môžu nastať prechody molekuly medzi energetickými hladinami – molekulové spektrá

$$\Delta W \text{ rotačných hladín} \ll \Delta W \text{ vibračných hladín} \ll \Delta W \text{ elektrónových hladín}$$

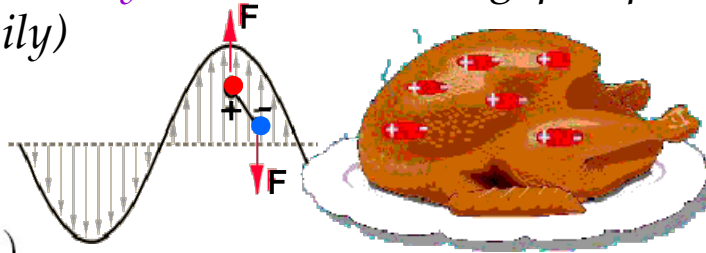
(mikrovlnná oblasť elmag. spektra – 10^9 - 10^{10} Hz) (infračervená oblasť spektra – 10^{13} Hz) (viditeľná a UV oblasť spektra – 10^{14} - 10^{15} Hz)

excitované rotačné stavy vznikajú aj dodaním *tepelnej energie* (energie ekvivalentnej teplote) $k_B T$

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad \text{Boltzmannova konštanta}$$

pri tzv. *izbovej* teplote $300 \text{ K} \cong 27^\circ \text{ C}$ je $\Delta W_v > k_B T > \Delta W_J$, tj. väčšina molekúl sa nachádza v *excitovaných* rotačných stavoch a v základnom vibračnom stave

rotačné spektrum - interakcia *rotačných* hladín s elmag. žiarením (absorpcia alebo emisia fotónu) existuje *len* u *polárnych* molekúl – elmag. pole pôsobí na elektrický dipól molekuly *točivým momentom* (sily)



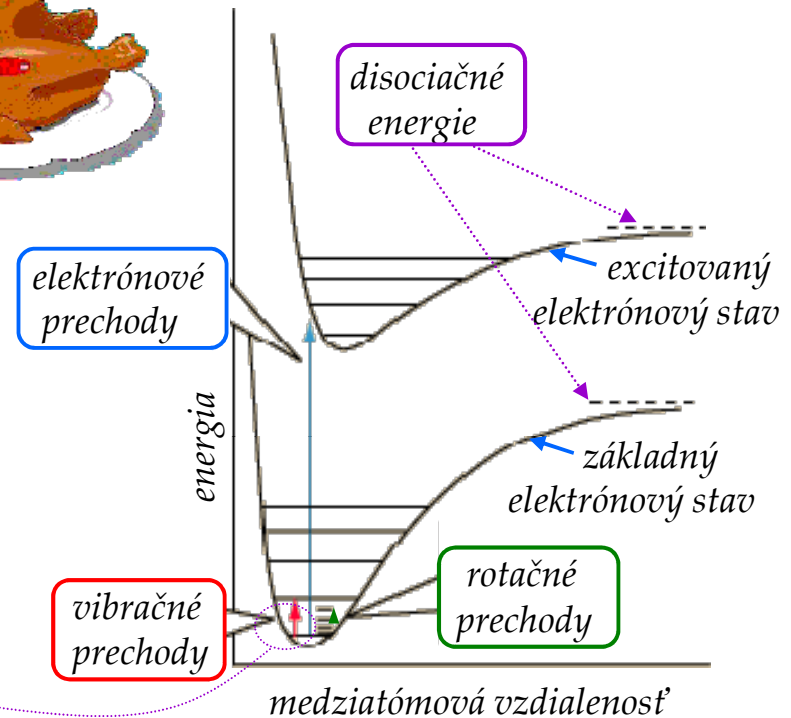
výberové pravidlá:

$$\Delta J = \pm 1 \quad (\Delta l = \pm 1)$$

$$\Delta M_J = 0 \quad (\Delta m_l = 0)$$

M_J určuje rotáciu okolo význačného smeru – *osi symetrie* molekuly, okolo tejto osi *neexistuje* elektrický dipól – elmag. pole nemôže interagovať s touto rotáciou, $\Delta M_J = 0$

$\Delta W_v \gg \Delta W_J$ - rotačné spektrá sú viazané na danú *vibračnú* energetickú hladinu



vibračné spektrá – elektrický dipól *oscilujúci* s frekvenciou ω_0 absorbuje alebo emituje energiu fotónu $\hbar\omega_0$

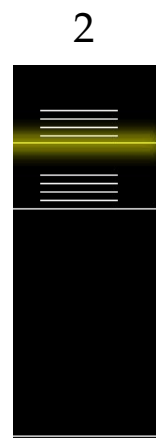
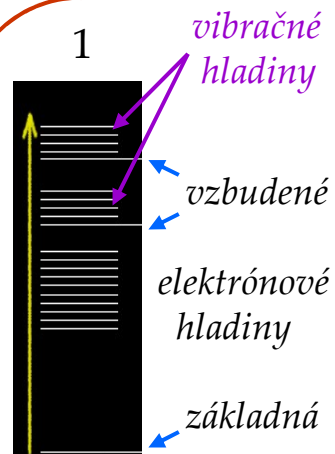
výberové pravidlo: $\Delta v = \pm 1$ (v priblížení harm. oscilátora – parabolický potenciál)

$\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ (pre anharmonický oscilátor)

▼ menej pravdepodobné

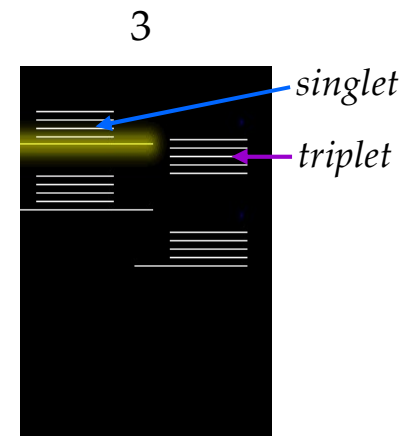
výsledné *rotačno-vibračné spektrum* (približne) $W_{J,v} = (v + \frac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{k}{m'}} + J(J + 1)\frac{\hbar^2}{2I}$
 (rotačné rozložené hladiny husto pri danej vibračnej hladine – tzv. *vibračno-rotačný pás*)

elektrónové spektrá – preskoky *elektrónov* pri pohltení alebo vyžiarení energie fotónu,



1. pohltenie fotónu – prechod molekuly do vzbudeného elektrónového stavu, na jednu z vibračných hladín, následné *nežiarivé* vibračné prechody (odovzdávanie energie susedným molekulám) na *nižšie* hladiny

2. *žiarivý* prechod do základného stavu (z nižšej vzbudenej hladiny než pôvodná) – *fluorescencia*, vyžiarený fotón má menšiu frekvenciu než pohltený („červený“ posuv)



3. *vibračné prechody* môžu viesť ku preklopeniu spinu excitovaného elektrónu zo *singletného* do *tripletného* stavu, následný žiarivý prechod do základného (*singletného*) stavu sa deje s *časovým oneskorením* - *fosforescencia*

zaplnený molekulový orbitál v *základnom* stave obsahuje 2 elektróny s „*opačným*“ spinom (Pauliho vylučovací princíp) – *singlet* (výsledný spin $S = 0$)

prechodom do *excitovaného elektrónového* stavu -1 z elektrónov zo zaplneného orbitálu preskočí do vyššieho prázdneho orbitálu - vzniknú 2 „*nespárené*“ elektróny v 2 napoly zaplnených orbitáloch, pri takomto prechode sa výsledný spin musí *zachovať* ($\Delta S = 0$) – vzbudený stav je tiež *singlet*

vzbudený stav s 2 „*nespárenými*“ elektrónmi (v 2 napoly zaplnených orbitáloch) s „*rovnakým*“ spinom – *triplet* (výsledný spin $S = 1$)

energia excitovaného *tripletného* stavu je (o málo) *nižšia* než energia *singletného* stavu (elektrostatická aj magnetická dipólová interakcia) – prechod zo *singletného excitovaného stavu* do *tripletného* („*preklopenie*“ spinu jedného z elektrónov, v dôsledku spin-orbitálnej interakcie) je energeticky *výhodný*

prechody $\Delta S = \pm 1$ sú však „*zakázané*“ kvantovomechanickým výberovým pravidlom $\Delta S = 0$, „*zakázané*“ prechody *môžu* nastať, ale v dlhých časových škálach (tj. s *oneskorením*)

pri *fosforescencii* dochádza počas *vibračnej relaxácie* (nežiarivých *vibračných prechodov* na nižšie hladiny) k „*zakázanému*“ prechodu (preklopeniu spinu) zo *singletu* do energeticky výhodnejšieho *tripletu*, následný *žiarivý* prechod do základného stavu (*singlet*) je opäť „*zakázaný*“ – nastáva s *oneskorením* (a s „*červeným*“ posuvom)



← fluorescencia
fosforescencia →



MAKROSKOPICKÉ SYSTÉMY

Fázové prechody

fáza látky – určitá fyzikálne a chemicky homogénna modifikácia látky, charakteristická vnútorným *usporiadaním* častíc (napr. skupenstvo, kryštálové usporiadanie, magnetické usporiadanie, a pod.), existencia fázy je určená *mikroskopickými interakciami* a *tepelným pohybom*

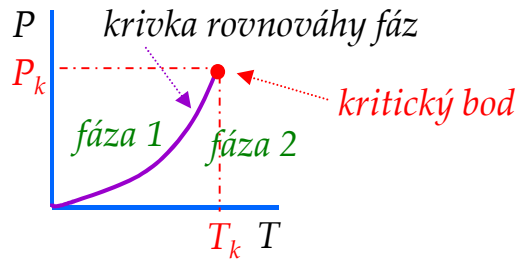
zavedenie pojmu *fáza* má zmysel vtedy, ak sa látka môže nachádzať v rôznych homogénnych modifikáciách *vo vzájomnom kontakte v TD rovnováhe*

fázu látky možno výhodne charakterizovať *makroskopickými* (termodynamickými) veličinami (teplota, tlak, objem,...)

rovnovážny stav sústavy atómov alebo molekúl *čistej látky v 1 fáze* je určený *ľubovoľnou dvojicou nezávislých* TD veličín (napr. T, P) – dvoma „*stupňami voľnosti*“ sústavy – možno ich meniť v istom intervale hodnôt *bez zmeny fázy*

izolovaný systém (teleso) v TD rovnováhe so súčasne existujúcimi 2 fázami toho istého chemického zloženia je ako teleso rozdelené priepustnou stenou na 2 *homogénne* časti s teplotami, tlakmi a počtami častíc T_1, P_1, N_1 a T_2, P_2, N_2
podmienky *rovnováhy fáz* sú $T_1 = T_2 = T$, $P_1 = P_2 = P$ a $\mu_1(T, P) = \mu_2(T, P)$

rovnosť chemických potenciálov dvoch fáz pri určitej teplote a tlaku znamená, že tlak, pri ktorom fázy koexistujú, je určený teplotou (alebo naopak) – dve fázy v TD rovnováhe nemôžu koexistovať pri *ľubovoľnej teplote aj tlaku*



mimo krivky rovnováhy fáz je systém homogénne vyplnený fázou 1 alebo 2
niektoré látky majú tzv. **kritický bod**, pre $T > T_k$ a $P > P_k$ zaniká rozdiel medzi fázami, **celé** teleso je **homogénne**
fázy **s kritickým bodom** na rozhraní fáz sa líšia iba **kvantitatívnymi** charakteristikami (napr. kvapalina a plyn – hustota častíc a veľkosť silovej interakcie medzi časticami)
fázy **bez kritického bodu** sa líšia **kvalitatívne** (napr. kvapalná a tuhé kryštalické skupenstvo – usporiadanie častíc v tuhej látke)

Gibbsovo pravidlo fáz

$$i = n_z - n_f + 2$$

počet stupňov voľnosti systému

počet zložiek v systéme (napr. počet druhov molekúl)

počet fáz existujúcich vedľa seba

jednozložkový systém $n_z = 1$, napr. čistá **voda**

kvapalná voda:

$n_f = 1$, $i = 2$ - existuje v širokom intervale

dvoch na sebe nezávislých premenných (T,P)

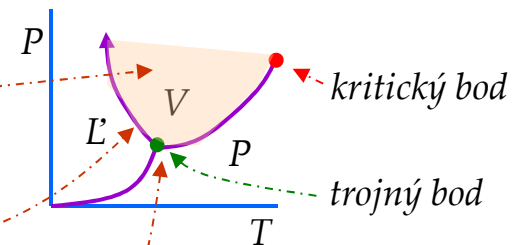
voda + ľad:

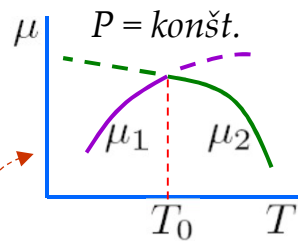
$n_f = 2$, $i = 1$ - existuje len na krivke rovnováhy fáz

(tlak je určený teplotou – **jediná** voľná premenná)

voda + para + ľad:

$n_f = 3$, $i = 0$ - existuje v **jedinom - trojnóm bode** – presne určený (0,01°C, 610Pa), **žiadna** voľnosť)





$T < T_0 : \mu_1 < \mu_2$ - *stabilnejšia* je fáza 1 (*fáza s nižším chem. potenciálom*)
 $T > T_0 : \mu_1 > \mu_2$ - *stabilnejšia* je fáza 2
 $T = T_0 : \mu_1 = \mu_2$ - fázy 1 a 2 sú *v rovnováhe*

fázový prechod – prechod systému z jednej fázy do druhej (s nižším chem. potenciálom), pri fázovom prechode sú fázy v rovnováhe - rovnajú sa ich chem. potenciály aj Gibbsove voľné energie $G = \mu N$ (počet častíc N sa pri fázovom prechode nemení)

fázové prechody klasifikujeme podľa spojitosti 1. derivácií μ , resp. G pri fázovom prechode

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T, \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P \quad \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T, \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P$$

$$G = U - TS + PV \Rightarrow \underline{\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S}, \quad \underline{\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V}$$

fázový prechod 1. druhu - ak sú 1. derivácie G pri fázovom prechode *nespojité*, tj. *objem a entropia systému sa menia skokom*

$$\Delta V = V_2 - V_1 = \left(\frac{\partial(G_2 - G_1)}{\partial P}\right)_T \quad \Delta S = S_2 - S_1 = -\left(\frac{\partial(G_2 - G_1)}{\partial T}\right)_P$$

latentné teplo - teplo, ktoré sa spotrebuje (prijme alebo odoberie) pri fázovom prechode bez zmeny teploty systému

$$Q_l = T \Delta S = T \left(\frac{\partial(G_1 - G_2)}{\partial T}\right)_P$$

pri fázovom prechode 1. druhu $Q_l \neq 0$

system *pohlí* teplo

ak pri T_0 platí $\left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T}\right)_P > \left(\frac{\partial \mu_2}{\partial T}\right)_P \Rightarrow \left(\frac{\partial G_1}{\partial T}\right)_P > \left(\frac{\partial G_2}{\partial T}\right)_P \Rightarrow Q_l > 0$ a naopak

vyparovanie – uvoľňovanie molekúl z objemu kvapaliny

pri zahrievaní kvapaliny sa väčšina dodávaného tepla spotrebuje na *zvýšenie teploty* (kinetickej energie molekúl) kvapaliny a len malá časť na vyparovanie, pri *vare* sa všetko teplo spotrebuje na vyparovanie *pri teplote varu* – *latentné teplo vyparovania*

opačný proces je *kondenzácia* – molekuly pary sú zachytávané kvapalinou

topenie tuhej látky – latentné teplo sa spotrebováva na rozbitie kryštalickej mriežky tuhej látky pri nezmenenej teplote (topenia)

pri opačnom procese – *tuhnutí* – sa latentné teplo uvoľňuje v podobe tzv. kryštalizačného tepla

fázový prechod pri teplote prechodu nastáva, ak sú prítomné (dostatočne veľké) *zárodky vznikajúcej fázy*, inak systém *zotrúva v metastabilnom - podchladenom alebo prehriatom* - stave

fázový prechod 2. druhu - ak sú 1. derivácie G pri fázovom prechode *spojité*, (nespojité sú až derivácie vyšších rádov), latentné teplo $Q_l = 0$

fázovými prechodmi druhého druhu sú napr. prechody medzi rôznymi kryštalickými modifikáciami tuhých látok, prechody medzi paramagnetickým a feromagnetickým usporiadaním, a pod.

Látkové skupenstvá

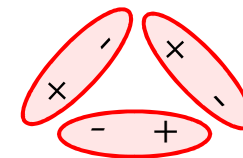
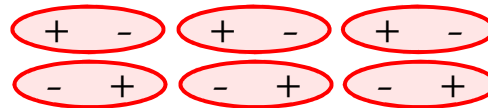
plazma – pri veľmi vysokých teplotách ($T > 10^5 K$) je tepelná energia $k_B T$ dostatočná na rozrušenie väzieb medzi elektrónmi a jadrami atómov ($\approx 10^0 - 10^1 eV$) – látka existuje v stave **ionizovaných častíc** (elektróny, kladné ióny), pre $T > 10^8 K$ dochádza aj k rozrušeniu jadrových síl

plyn – pri „nižších“ teplotách ($T < 10^4 K$) tepelná energia už nebráni vzniku **neutrálnych** atómov a molekúl (iónové a kovalentné väzby $\approx 10^0 eV$)

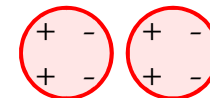
kvapalina – pri „dostatočne“ nízkych teplotách vznikajú **zhluky** molekúl v dôsledku pôsobenia **van der Waalsových síl** medzi molekulami ($\approx 10^{-2} - 10^{-1} eV$), v zhlukoch existujú **zárodky** istého **krátkodosahového usporiadania** atómov alebo molekúl, zhluky sú malé a preto veľmi **pohyblivé**

van der Waalsove sily sú určené **priťahovaním** permanentných alebo indukovaných molekulových **elektrických dipólov**, ich dosah prudko klesá ($\sim r^{-7}$) so vzdialenosťou molekúl

medzi **polárnymi** molekulami
(permanentné dipóly)



medzi **polárnou a nepolárnou** molekulou
(indikovaný dipól nepolárnej molekuly)



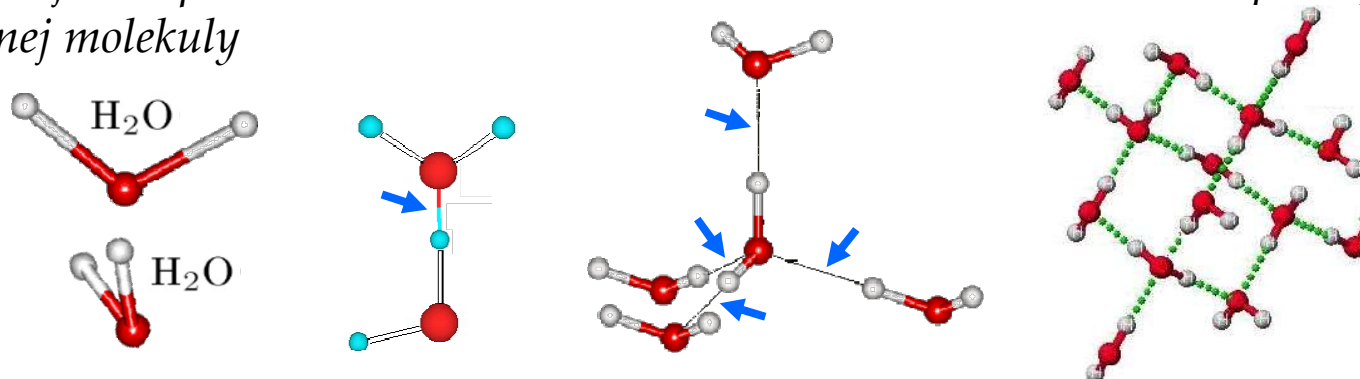
medzi **nepolárnymi** molekulami

(indukované dipóly vznikajú v dôsledku fluktuácií nábojového rozloženia v molekulách)

tuhá látka – pri „nízkych“ teplotách vzniká *d'alekodosahové usporiadanie* atómov, resp. molekúl – *mriežku kryštálu*, väzby môžu byť *iónové*, *kovalentné*, *kovové*, *van der Waalsove* alebo *vodíkové*

kovová väzba – *valenčné elektróny* v kovových prvkoch sú *delokalizované* (nie sú viazané na materské atómy ale sú *zdieľané* všetkými atómami) a vytvárajú „*plyn voľných*“ elektrónov obklopujúci mriežku kladných iónov (ako *nenасыtená* kovalentná väzba – elektróny „*preskakujú*“ *medzi atómami*)

vodíková väzba – *medzi molekulami* tvorenými *vodíkom* a *silne elektronegatívnymi atómami* (napr. H_2O , HF) – v takýchto molekulách existuje *silne nesymetrické rozloženie náboja* - vodík „*odovzdá takmer celý*“ svoj elektrón elektronegatívnemu atómu v molekule, a jeho jadro (protón) ostáva takmer *netienené* a ľahko sa viaže na „*zápornejšiu časť*“ susednej molekuly



molekula H_2O môže vytvoriť väzbu so 4 ďalšími molekulami H_2O - do 2 z nich dodá vlastné protóny a do 2 zvyšných dodajú protóny susedné molekuly, takéto usporiadanie (ľad) má *menšiu hustotu* než tepelne rozrušený stav (voda)

kryštály so *silnou*, tj. *kovalentnou* a *iónovou* väzbou sú *tvrdé* a majú *vysokú teplotu topenia*
väzba v *kovových kryštáloch* je slabšia, sú *menej pevné*, *ľahko deformovateľné* (kujné), *vysoká pohyblivosť* „voľných“ elektrónov zabezpečuje dobrú *elektrickú* aj *tepelnú vodivosť* a *vysokú odrazivosť* (lesk)

molekulárne kryštály so *slabou van der Waalsovou* väzbou sú *mäkké* a majú *nízku teplotu topenia*
vodíková väzba je *silnejšia* než *van der Waalsova*, *kryštály s vodíkovou väzbou* majú preto *vyššiu teplotu topenia*

rozdiel medzi kvapalinou a tuhou látkou nie je celkom ostrý:

- kvapalina vykazuje určité (krátkodosahové) *usporiadanie*
- atómy v kryštáloch tuhej látky majú istú voľnosť pohybu – *môžu difundovať* kryštálom

roztok – homogénna *zmes* látok - jedna látka *rozpustená* (disociácia molekúl) v druhej (*kvapalnom rozpúšťadle*)

zliatina – stuhnutý *roztok* dvoch alebo viacerých látok (z toho aspoň jedna *kovová*)

disperzia – *zmes* drobných častíc jednej látky *rozptýlených* v druhej látke:

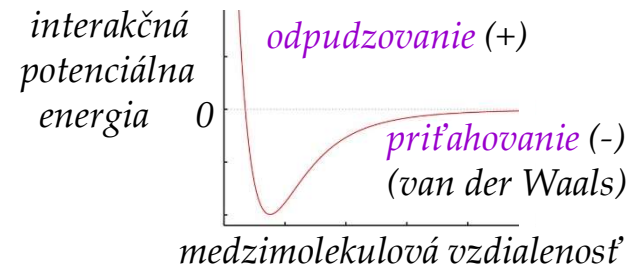
- *suspenzia* - drobné častice *tuhej látky* v *kvapaline*
- *emulzia* - drobné častice *kvapaliny* v *kvapaline*
- *aerosól* - drobné častice *tuhej látky* v *plyne*

Reálne (neideálne) plyny

príbliženie ideálneho plynu zlyháva pri (nízkych) teplotách a (vysokých) tlakoch v blízkosti kondenzácie – prejavujú sa **súdržné (kohézne)** sily medzi molekulami (príťažlivé van der Waalsove sily) a plyn nie je ideálne stlačiteľný

molekuly na vzdialenostiach porovnateľných s ich veľkosťou navzájom **interagujú**:

- pre väčšie vzdialenosti sa priťahujú
- pri ďalšom stláčaní sa odpudzujú



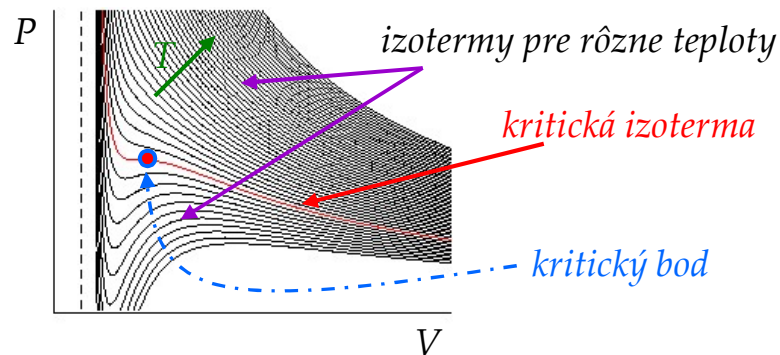
van der Waalsova stavová rovnica reálneho plynu (pre 1 mól)

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

korekcia na kohézne sily

korekcia na nenulový rozmer molekúl

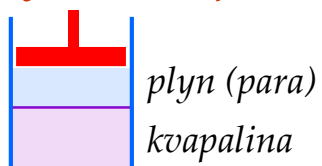
(ak $a, b = 0$, $PV = RT$ - stavová rovnica ideálneho plynu)



izotermy pre **vysoké** teploty odpovedajú stavovej rovnici **ideálneho** plynu
izotermy pre **nižšie** teploty sú popísané **van der Waalsovou** stavovou rovnicou

kritická izoterma obsahuje **kritický bod** – inflexný bod (bod s nulovou 1. i 2. deriváciou, tj. nulovou strmosťou i krivosťou)

system kvapalina - para

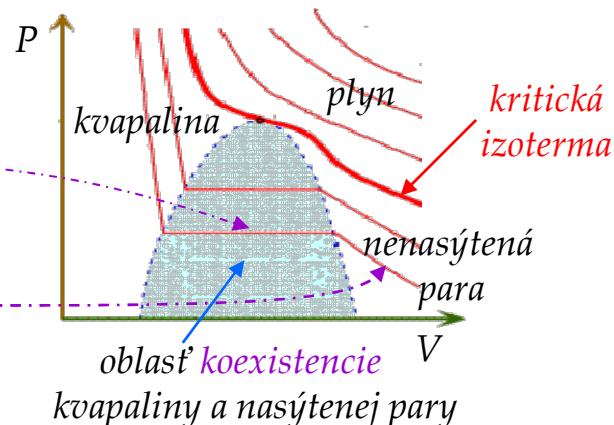


v *rovnovážnom* stave sa počty vyparených a skondenzovaných molekúl (za daný čas) *rovnajú* – para nad hladinou je *nasýtená*, *tlak nasýtených pár závisí len od teploty* (nie od objemu)

zdvihnutím piestu ($dV > 0$) pri konštantnej teplote sa *časť kvapaliny vyparí*, aby sa tlak pary *rovnal tlaku nasýtených pár* (tj. $P = \text{konšt.}$)

až po vyparení *všetkej* kvapaliny sa s nárastom objemu tlak (už nenasýtenej) pary *zmenšuje*

s rastúcou teplotou sa zužuje oblasť koexistencie kvapaliny a nasýtenej pary, nad kritickou izotermou existuje *len* plynné skupenstvo



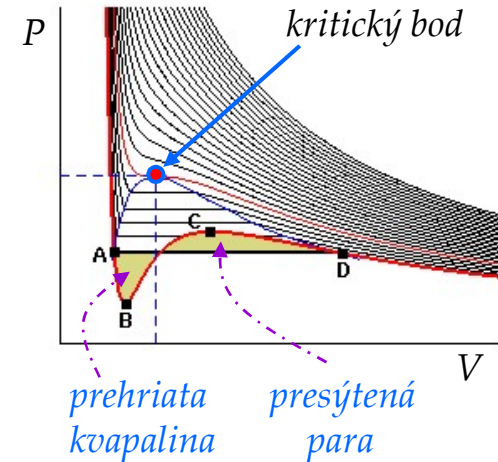
stláčaním piestu ($dV < 0$) pri konštantnej teplote sa tlak pary zvyšuje až kým nedosiahne tlak nasýtených pár, ďalšie stláčanie spôsobuje *kondenzáciu pri nezmenenom tlaku* (koexistencia oboch fáz), po skondenzovaní *všetkej* pary malá zmena objemu kvapaliny znamená obrovskú zmenu tlaku (kvapalina je málo stlačiteľná) – *strmá* časť izotermy

van der Waalova rovnica je rovnicou pre homogénne prostredie, var a skvapalňovanie (koexistencia dvoch fáz) prebieha odlišne od van der Waalových izoterm – po vodorovnej úsečke AD

pri veľmi pomalom rozpínaní kvapaliny, zbavenej drobných nečistôt a bublín, neprebíha vyparovanie po vodorovnej úsečke AD, ale pozdĺž van der Waalovej izotermy AB – vzniká metastabilný jednofázový stav prehriatej kvapaliny, vzniknutím prachovej častice alebo bubliny (pri otrase) nastane prudký var a skok do stabilnejšieho stavu koexistencie dvoch fáz (úsečka AD)

tiež pri pomalom stláčaní očistenej pary neprebíha skvapalňovanie po úsečke DA, ale po van der Waalovej krivke DC do metastabilného stavu presýtenej pary, na prachovom zrníčku začne para kondenzovať a systém skokom prejde do stabilnejšieho stavu koexistencie fáz (DA)

pre plynulú skupenskú zmenu (po úsečke AD) sú preto dôležité zárodky vznikajúcej fázy, tvoriace sa na nehomogenitách systému (nečistoty, bubliny, a pod.)



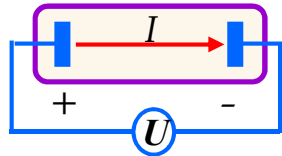
elektrické vlastnosti plynov

plyn, pozostávajúci z neutrálnych molekúl, je elektricky nevodivý, vodivým sa stáva ionizáciou molekúl – vznikom (generáciou) voľného elektrónu a kladného iónu – po dodaní ionizačnej energie vonkajším činiteľom (napr. dodaním tepla, pohltením fotónu, zrážkou s inou časticou, a pod.) – vodivosť je nesamostatná

pri zrážke voľného elektrónu s kladným iónom dochádza k ich rekombinácii – opätovnému vzniku neutrálnej molekuly

voľný elektrón s *dostatočne veľkou kinetickou* energiou (urýchlený elektrickým poľom) môže pri zrážke ionizovať *d'alšiu* neutrálnu molekulu – vodivosť sa stáva *samostatnou*

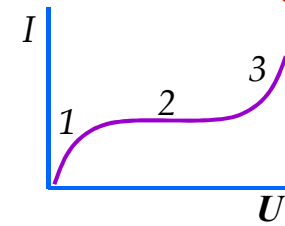
výboj - vedenie elektrického prúdu v plyne pri naloženom napätí na elektródach



veľkosť prúdu závisí od *tlaku* plynu – pri malom tlaku je málo nosičov náboja, pri veľkom tlaku je veľká hustota častíc a teda i zrážok (malá stredná voľná dráha - nosiče prúdu nepreletia priestorom medzi elektródami)

nesamostatný výboj: 1. rýchlosť nabitých častíc (tj. veľkosť prúdu) narastá s rastúcim urýchľujúcim elektrickým poľom (tj. napätím) 2. prúd je limitovaný rýchlosťou ionizácie (vonkajším činiteľom) – nezávisí o napätia

samostatný výboj: 3. s rastúcim napätím narastá rýchlosť i počet ionizovaných častíc

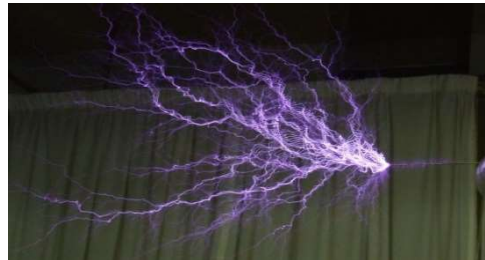


základné typy samostatných výbojov

tlecí výboj



korónový výboj (pri veľkých nehomogenitách el.poľa)



iskrový výboj (krátkodobý)



oblúkový výboj (trvalý)

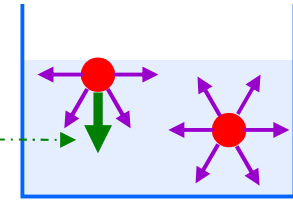
(zváranie)

svetelné efekty výbojov vznikajú v dôsledku emisie viditeľného svetla pri prechodoch molekúl zo vzbuđených stavov na nižšie kvantové energetické hladiny a pri rekombinácii

Reálne (neideálne) kvapaliny

základnými vlastnosťami reálnej kvapaliny (v porovnaní s ideálnou) sú povrchové napätie, kapilárne javy a viskozita

povrchové napätie je dôsledkom **nevykompenzovaných kohéznych síl** (príťažlivých síl susediacich molekúl) **na povrchu kvapaliny**, výsledná sila pôsobí **kolmo na povrch dovnútra** kvapaliny, tj. **povrchová vrstva pôsobí na vnútro kvapaliny tzv. molekulovým tlakom**



pri „prenesení“ molekuly z vnútra kvapaliny na jej povrch **prekonávame** silu molekulárneho tlaku (tj. pôsobíme silou na určitej dráhe), teda **konáme** (mechanickú) **prácu** a tým **zvyšujeme potenciálnu energiu molekuly na povrchu** (oproti vnútru) kvapaliny o tzv. **povrchovú energiu**

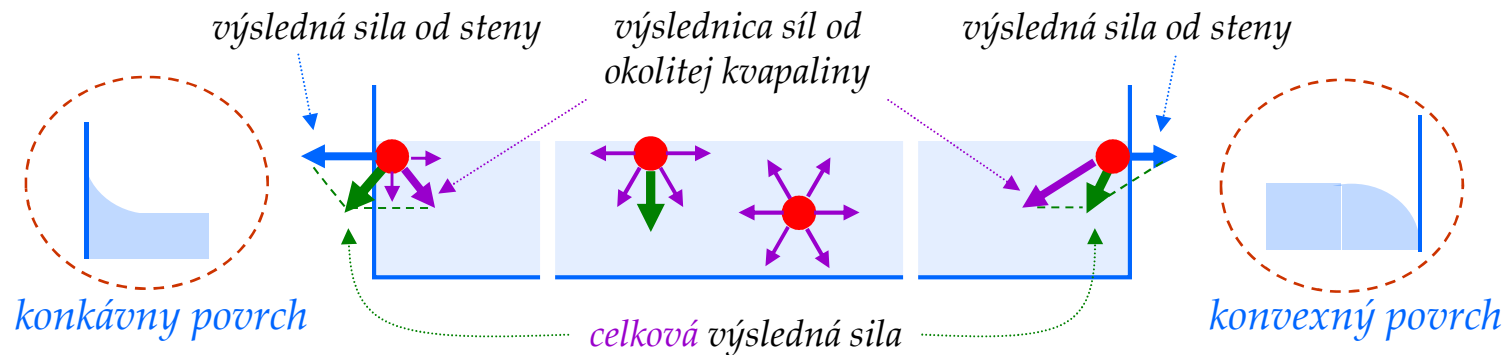
povrchová energia kvapaliny je úmerná počtu molekúl v povrchovej vrstve, teda **ploche povrchu** - kvapalina sa preto „snaží“ **minimalizovať svoj povrch**

kvapka v beztlakovom stave alebo mydlová bublina sú guľaté (pri danom objeme telesa má guľa najmenšiu plochu povrchu) takéto správanie odpovedá tomu, ako keby povrch kvapaliny tvoril pružnú blanu, ktorá sa snaží minimalizovať svoje napnutie (= povrchové napätie) a teda aj plochu povrchu

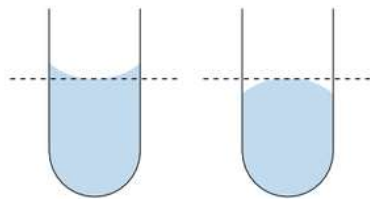


$\text{povrchové napätie} = \text{povrchová energia na jednotku plochy}$

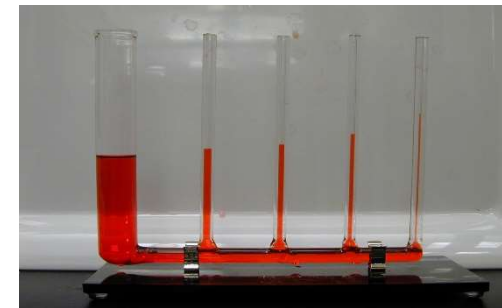
kapilárne javy – zakrivenie povrchu kvapaliny pri stene nádoby - na molekuly kvapaliny tesne pri stenách nádoby pôsobia *nerovnaké* sily zo strany kvapaliny (*kohézne sily* od susedných *molekúl kvapaliny*) a od steny nádoby (*adhézne sily* od *molekúl steny* nádoby), *výsledná* sila spôsobuje zakrivený povrch – *konkávny* (kvapalina zmäčča stenu) alebo *konvexný* (kvapalina nezmäčča stenu)



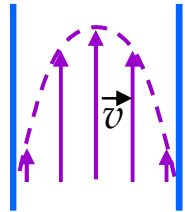
vo veľmi tenkej trubičke – *kapiláre* – vytvára povrch kvapaliny *meniskus* (konvexný alebo konkávny)



kapilárne sily spôsobujú v kapilárach *rôznych* priemerov *kapilárnu eleváciu* (zvýšenie hladiny - v prípade konkávneho menisku) alebo *depresiu* (pokles hladiny - pri konvexnom menisku)



viskozita je mierou *odporu* látky voči *kĺzaniu* (*šmyku*) jej susedných vrstiev po sebe, je to proces vyrovnávania rýchlostí pohybu rôznych vrstiev kvapaliny (aj plynu), rýchlejšie sa pohybujúce vrstvy *prenášajú časť svojej hybnosti* na susedné pomalšie vrstvy, zmene ich hybnosti odpovedá *sila vnútorného trenia* (určená medzimolekulovými *kohéznymi silami*)



vrstva kvapaliny pretekajúca popri stene potrubia je brzdená interakciou so stenami potrubia, takto spomalená (zastavená) vrstva brzdí susednú vnútornú vrstvu, atď.
– výsledné rozloženie rýchlostí (rýchlostné pole) má maximum v strede trubice a minimum pri jej stenách

tuhé teleso pohybujúce sa vo viskózne kvapaline strháva so sebou obklopujúcu ho vrstvu kvapaliny (povrch telesa viaže na seba *adhéznymi silami* okolité molekuly kvapaliny), táto strháva do pohybu (pomalšieho) susednú vrstvu (kohéznymi silami medzi molekulami kvapaliny), atď.

vnútorné trenie jednotlivých vrstiev kvapaliny (strhávaných do pohybu prenikajúcim telesom) je zdrojom *odporu kvapaliny voči pohybu telesa* v nej
prenikanie telesa stojacou kvapalinou je identické obtekaniu stojaceho telesa prúdiacou kvapalinou (*vzájomný pohyb telesa a kvapaliny je relatívny!*)

prúdenie kvapaliny (aj plynu) je *laminárne*, ak sa susedné vrstvy nemiešajú (prúdia jedna pozdĺž druhej), alebo *turbulentné*, ak sa susedné vrstvy navzájom miešajú (vytvárajú víry), charakter prúdenia závisí od *rýchlosti a tvaru* obtekaného telesa

pri *malých rýchlostiach* telesa (hladkého tvaru, bez ostrých výčnelkov) je prúdenie *laminárne* a *sila odporu*, kladená telesu kvapalinou, je *priamo úmerná jeho rýchlosti*

elektrické vlastnosti kvapalín

čisté kvapaliny sú spravidla elektricky **nevodivé**, **vodivé** kvapaliny - **elektrolyty** – sú **roztoky**, v ktorých sú molekuly kyseliny alebo soli rozpustené v rozpúšťadle – rozložené (**disociované**) na kladné (**katióny**) a záporné (**anióny**) ióny

napr. molekuly NaCl s iónovou väzbou v polárnom rozpúšťadle H_2O – molekuly vody svojím elektrickým dipólom rozkladajú molekuly soli na ióny Na^+ a Cl^- a obklopujú ich

vo vonkajšom elektrickom poli sú ióny **urýchľované** silou qE a **brzdené** silou trenia ηv (η - koeficient viskozity), po dosiahnutí **rovnováhy síl** je ich rýchlosť v a teda aj prúdová hustota $j \sim E$ **konštantná** (Ohmov zákon)

s **rastúcou teplotou** rastie počet iónov (stupeň disociácie) aj ich pohyblivosť (klesá viskozita) \Rightarrow **klesá elektrický odpor**

nosičmi prúdu sú ióny s nezanedbateľnou hmotnosťou \Rightarrow **prenos náboja** je spojený s **prenosom látky** – ióny sa **vylučujú** na elektródach (- anióny na + anóde, + katióny na – katóde) - **elektrolýza**

Faradayov zákon elektrolýzy:

prejdením náboja Q elektrolytom sa na elektróde vylúči látka o hmotnosti

$$m = \frac{1}{F} \frac{M}{\nu} Q$$

$F \cong 9,64 \cdot 10^4 \text{Cmol}^{-1}$ - Faradayov náboj mólu

náboj potrebný na vylúčenie 1 **chemického ekvivalentu ľubovoľnej** látky

(chemický ekvivalent = množstvo látky o hmotnosti 1 mólu látky delenej jej mocenstvom)

hmotnosť 1 mólu látky

mocenstvo iónov látky

galvanické články – zdroje elektrického napätia

ponorením kovovej elektródy do elektrolytu sa z elektródy vylučujú do elektrolytu (na jej povrch) kladné ióny, elektróda sa teda nabíja na záporný potenciál (voči elektrolytu), vznikajúce napätie zastaví tento proces na určitej hodnote napätia

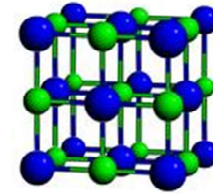
ponorením dvoch rôznych elektród do elektrolytu vzniknú na nich rôzne potenciály (voči elektrolytu a teda aj voči sebe navzájom) – vzniká napätie medzi elektródami

akumulátory

prechodom prúdu elektrolytom medzi dvoma rovnakými elektródami dochádza k elektrolýze (vylučovaniu rôznych iónov na elektródach) a vzniku rozdielu ich potenciálov – nabíjanie akumulátora

Štruktúra tuhých látok

väčšina tuhých látok sa vyznačuje **kryštalickou štruktúrou** – atómy v látke vytvárajú **priestorovú mriežku** – (pomyselné) pravidelné **periodicky sa opakujúce priestorové usporiadanie bodov - uzlov**
v každom uzle mriežky leží **identický atóm alebo zoskupenie atómov - báza**



báza v kovalentných a kovových kryštáloch je tvorená atómom, v iónových kryštáloch iónovým párom, a v molekulových kryštáloch molekulou

kryštalová štruktúra = mriežka + báza

monokryštalické TL – celý objem telesa je usporiadaný do **jedinej** mriežky, dôsledkom sú odlišné vlastnosti materiálu v závislosti od smeru – **kryštalová anizotropia**

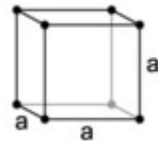
polykryštalické TL – sú tvorené **množstvom malých** monokryštálov (**kryštalitov**) s **rôzne orientovanými** mriežkami, orientácia jednotlivých kryštalitov je **náhodná**, ich anizotropia sa **spriemeruje** – polykryštalická látka (ako celok) je **izotropná**

základná (elementárna) bunka – **najmenšia** objemová štruktúra (pomyselný 3D rovnobežnosten, opakovaním ktorého možno zostaviť úplnú mriežku kryštálu), ktorá **obsahuje úplnú symetriu** kryštálu, na jej objem môže pripadať **viacero** uzlových bodov mriežky, je určená **rozmermi** v troch význačných **priestorových** smeroch mriežky - tzv. **mriežkovými parametrami** a **uhlami** medzi nimi

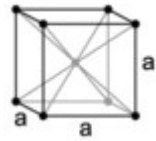
existuje 14 typov základných buniek priestorových mriežok – tzv. **Bravaisových mriežok** v 7 kryštalografických sústavách

Bravaisove mriežky

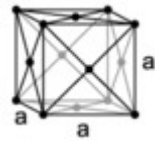
kubická



prostá

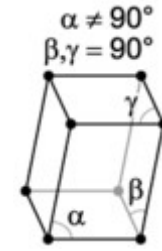


priestorovo
centrovaná

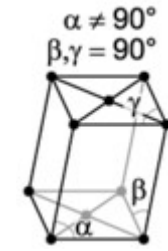


plošne
centrovaná

monoklinická

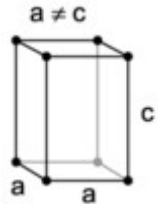


prostá

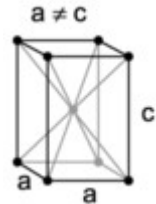


bazálne
centrovaná

tetragonálna

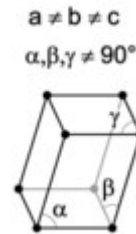


prostá

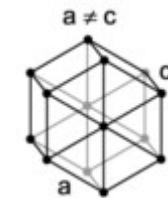


priestorovo
centrovaná

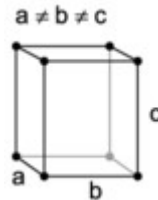
triklinická



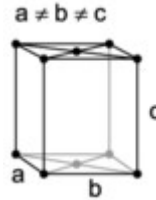
hexagonálna



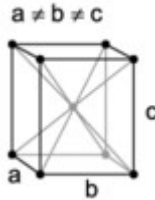
ortorombická



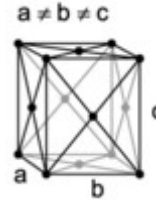
prostá



bazálne
centrovaná

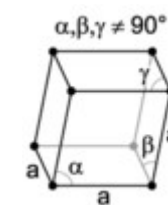


priestorovo
centrovaná

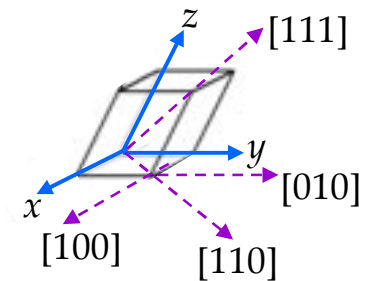


plošne
centrovaná

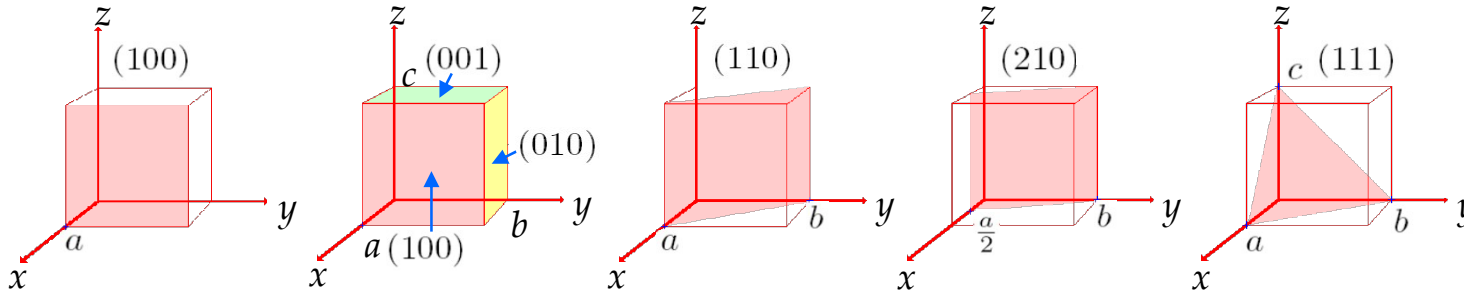
trigonálna
(romboedrálna)



smery v kryštáli [hkl]: určíme zložky ľubovoľného vektora v danom smere na kryštalografických osiach v jednotkách mriežkových parametrov (napr. 4,6,2), indexami daného smeru sú **najmenšie** celé čísla v rovnakom pomere (2,3,1), smer rovnobežný s kryštalografickou osou má príslušný index rovný 1 a ostatné indexy nulové



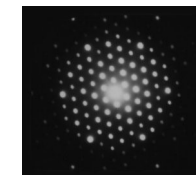
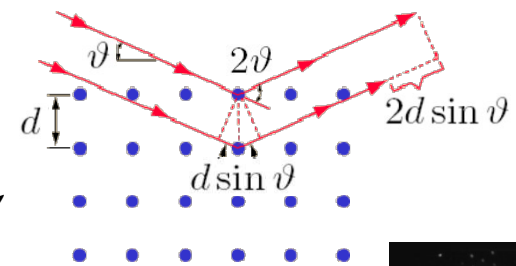
orientáciu *rovín* v kryštáli určujeme pomocou *Millerových indexov* (hkl):
 nájdeme hodnoty priesečníkov danej roviny s kryštalografickými osami (v jednotkách mriežkových parametrov – napr. 1,4,2), určíme ich prevrátané hodnoty ($1, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$) a prevedieme na pomer celých čísel (4,1,2), rovina rovnobežná s kryštalografickou osou má príslušný Millerov index rovný 0



kryštálovú štruktúru možno študovať pomocou *difrakcie vln* s *vlnovou dĺžkou porovnateľnou s mriežkovými parametrami* (RTG fotóny, elektróny, neutróny)
 vlny „odrazené“ od rovnobežných atómových rovín *interferujú*, *konštruktívna* interferencia (maximum) nastáva pre

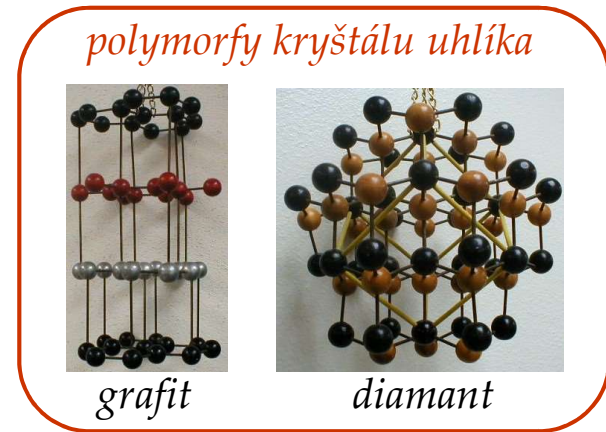
$$\underline{2d \sin \vartheta = n\lambda} \quad n - \text{celé číslo (Braggov zákon)}$$

$2d \sin \vartheta$ ← vzdialenosť rovín
 ϑ ← uhol dopadu voči atómovej rovine
 $n\lambda$ ← vlnová dĺžka



typ kryštálovej mriežky je určený *typom väzby* medzi atómami

látky *toho istého* chemického zloženia môžu existovať v *rôznych* kryštalických modifikáciách – *polymorfizmus*, polymorfy sa okrem kryštálovej stavby líšia aj vlastnosťami (mechanickými, elektrickými, atď.)

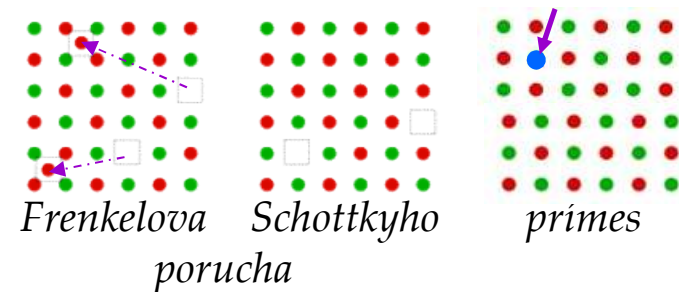


poruchy kryštálovej mriežky

narušenie usporiadania atómov v mriežke, môžu *výrazne* ovplyvniť vlastnosti látok

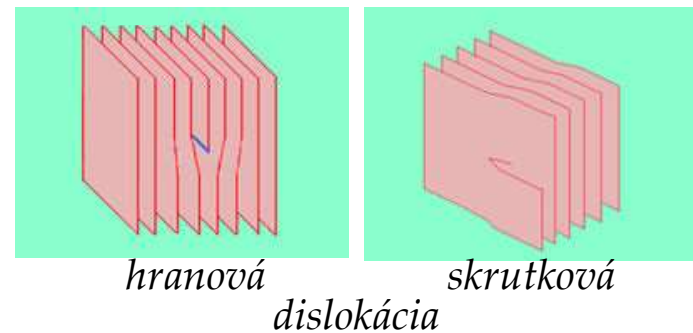
bodové poruchy:

- *Schottkyho porucha* – *vakancia* (nezaplnená atómová poloha)
- *Frenkelova porucha* – atóm opustí svoju pravidelnú polohu (vznikne vakancia) a prejde do *intersticiálnej* (nepravidelnej) polohy
- *prímes* - pravidelná poloha je zaplnená *iným* atómom



čiarové poruchy – *dislokácie*:

- *hranové*
- *skrutkové*

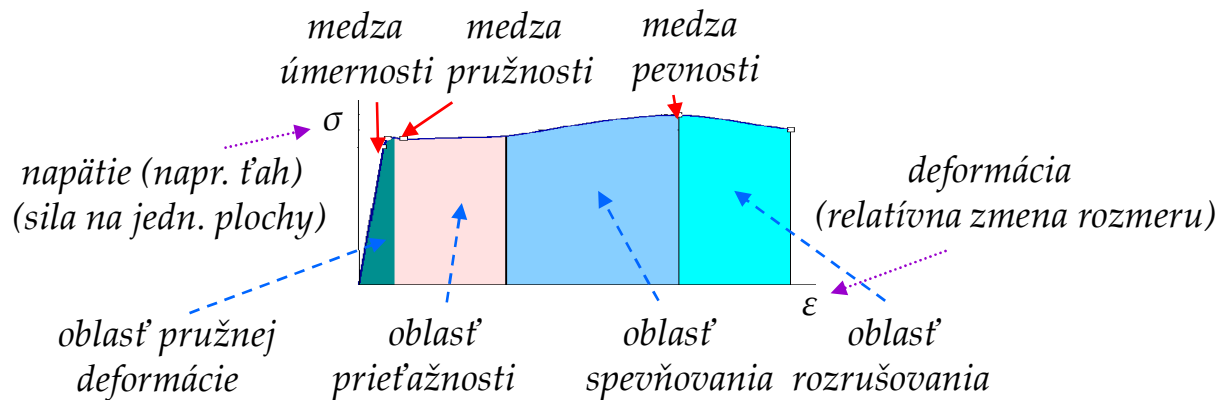


deformácia tuhých látok

pôsobením vonkajšej sily na tuhé teleso sa stavebné častice (atómy) vysúvajú zo svojich rovnovážnych polôh – nastáva **deformácia** – **zmena rozmerov** telesa, vnútorné (medziatómové) sily pôsobia **proti** deformácii

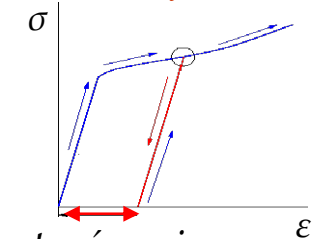
pri **malých** deformáciách je **deformácia priamo úmerná sile**, ktorá ju spôsobila – **Hookov zákon**, po **odstránení** tejto sily deformácia **zanikne** – **elastická (pružná) deformácia**

pôsobením **väčších** síl vznikajú **plastické (nepružné) deformácie**, ktoré **pretrvávajú** aj po odstránení týchto síl



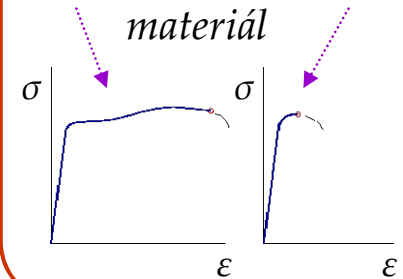
v **oblasti priedažnosti** sa jednotlivé atómové vrstvy **kľžu** po sebe aj **bez nárastu napätia** – materiál „tečie“ v dôsledku **pohybu dislokácií**
pokračujúca deformácia má za následok **nárast počtu dislokácií**, pri istej koncentrácii si dislokácie začnú „prekážať“ v pohybe a ďalšia deformácia si vyžaduje **nárast napätia** – materiál sa **spevňuje** – **oblasť spevňovania**

plastická deformácia



pretrváva aj po odstránení napätia

kujný (ťažný) a krehký materiál



amorfná tuhá látka - ak sa viskózna kvapalina rýchlo schladí pod teplotu tuhnutia, viskozita (malá pohyblivosť) bráni vzniku kryštalickej štruktúry - vznikne podchladená stuhnutá kvapalina (viskozita narastá s klesajúcou teplotou) bez kryštalickej štruktúry (izotropná) - sklo, zahrievaním začne sklo tiecť - nejde o topenie, len sa zmenší viskozita!

Elektrické vlastnosti tuhých látok

pásová teória tuhých látok

malé vzájomné vzdialenosti atómov v mriežke kryštálu spôsobujú, že ich elektrónové obaly sa navzájom ovplyvňujú (tvoria *jednotný systém*), Pauliho vylučovací princíp bráni elektrónom *v odpovedajúcim si orbitáloch susediacich atómov* zaujať *rovnaký* kvantový stav – *každá energetická hladina* (odpovedajúca orbitálu izolovaného atómu, obsadená 2 elektrónmi s opačnými spinmi) *sa rozštiepi na toľko podhladin, koľko je atómov v kryštáli* ($10^{23} - 10^{24}$ atómov v cm^3), podhladiny na seba nadväzujú - tvoria *energetický pás*

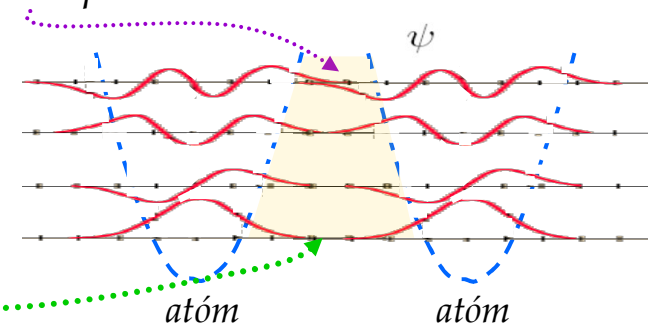
kryštál tvorený N atómami s atómovým číslom Z (Z elektrónov v atóme):

ak Z *párne* - $\frac{Z}{2}$ *obsadených* pásov v kryštáli (v každom páse po 2 elektrónoch z každého atómu, tj. $2N$ elektrónov v každom páse)

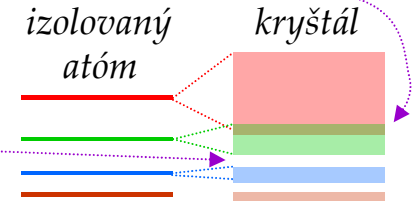
ak Z *nepárne* - $\frac{Z-1}{2}$ *obsadených* a 1 *čiastočne obsadený* pás (po 1 elektróne z každého atómu)

šírka daného pásu závisí od schopnosti elektrónu *tunelovať* potenciálovou bariérou medzi atómami

hladiny „*hlbokých*“ elektrónov majú *zanedbateľné* štiepenie (elektróny sú *lokalizované* v atóme, vlnové funkcie elektrónov susedných atómov sa neprekrývajú) - ich pásy sú *úzke*



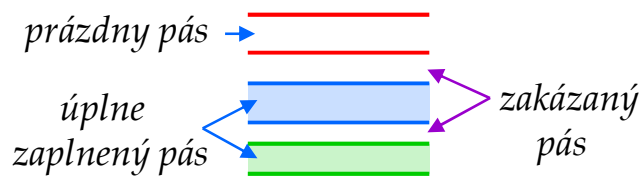
energetické pásy (tzv. *dovolené pásy*) sa môžu *prekrývať* alebo môžu byť *oddelené energetickými medzerami* (*zakázanými pásmi*)



tok elektrického prúdu kryštálom odpovedá usmernenému pohybu elektrónov od atómu k atómu, tj. prechodom elektrónov *do iných kvantových stavov v rámci daného dovoleného energetického pásu*

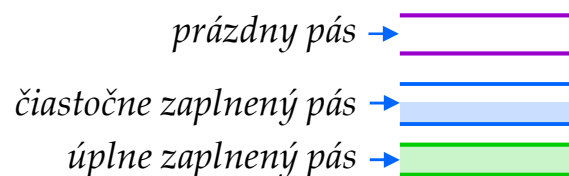
prechod elektrónu do iného kvantového stavu (v inom atóme) v dovolenom páse je možný len vtedy, ak tento nový stav je *voľný* (neobsadený iným elektrónom) – *elektrický prúd tečie len v čiastočne zaplnených pásoch*

vnútorné vrstvy (úplne zaplnené) elektrónového obalu atómu tvoria v kryštáli *zaplnené pásy*, o elektrických vlastnostiach kryštálu rozhoduje štruktúra *najvyšších* energetických pásov, vytvorených z *valenčných* elektrónov



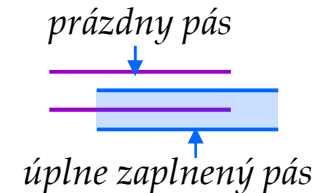
(elektricky) *nevodivý* kryštál

v úplne zaplnenom páse nie je možný voľný pohyb elektrónov



vodivý kryštál

v čiastočne zaplnenom páse, alebo ak sa úplne zaplnený pás prekrýva s prázdny dovoleným pásom, môžu elektróny zo zaplnených stavov obsadzovať voľné stavy

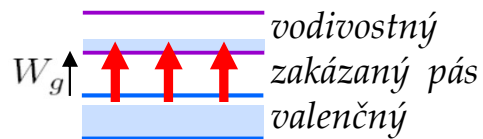


vodivý kryštál

vodivé kryštály – *kovy* – majú *nepárny* počet elektrónov v *mriežkovej báze* (atóme, resp. molekule) a *najvyšší obsadený* energetický pás zaplnený len *čiastočne*, alebo *párny* počet elektrónov v báze a *úplne zaplnený* pás *prekrývajúci sa* s *prázdny* nasledujúcim (vyšším dovoleným) pásom, elektróny v takýchto pásoch – *vodivostné elektróny* – môžu voľne prechádzať kryštálom

nevodivé kryštály – *dielektriká, izolanty* – majú *úplne zaplnený* najvyšší obsadený pás *oddelený* od ďalšieho (vyššieho) dovoleného pásu *zakázaným pásom*, valenčné elektróny sú *lokalizované* v materských atómoch – nemôžu viesť prúd kryštálom

v dielektrikách s *úzkym zakázaným pásom* (šírky W_g) medzi najvyšším zaplneným, tzv. *valenčným* a nasledujúcim prázdny, tzv. *vodivostným pásom* môže istý počet elektrónov z valenčného pásu pri bežných teplotách pohltením tepelnej energie $k_B T \approx W_g$ „*preskočiť*“ zakázaný pás do voľných stavov vo vodivostnom páse a viesť elektrický prúd – *polovodiče* (pri nízkych teplotách $T \rightarrow 0$ sú všetky polovodiče izolantmi)



<i>merný odpor</i> (pri 300K)	<i>kovy</i>	$\rho \approx 10^{-6} \Omega cm$
	<i>polovodiče</i>	$\rho \approx 10^{-2} - 10^9 \Omega cm$
	<i>izolanty</i>	$\rho \approx 10^{14} - 10^{22} \Omega cm$

kovy

vodivostné elektróny v kove sú *takmer voľné* – správajú sa ako *elektrónový plyn* pohybujúci sa v *periodickom potenciáli mriežky*

system N identických častíc možno aproximovať riešením N rovníc pre 1 časticu za predpokladu, že častice navzájom **neinteragujú** (nezrážajú sa)

vplyv periodického potenciálu na pohyb častice možno zaradiť **periodickými okrajovými podmienkami** do pohybovej rovnice (pričom potenciálnu energiu elektrónu v poli mriežky neuvažujeme)

$$\hat{H}\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n = W_n\psi_n, \quad \psi_n(x) = \psi_n(x+L), \quad y, z \text{ rovnako}$$

riešením je **elektrónová vlna** $\psi_n = A \sin(K_x x) \sin(K_y y) \sin(K_z z)$ s (deBroglieho) vlnovou dĺžkou spĺňajúcou podmienku $L = n\lambda$, $n = 1, 2, \dots$ (mriežkou sa môže šíriť len taká elektrónová vlna, ktorá „rešpektuje“ periodicitu mriežky), vlnový vektor o veľkosti $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ nadobúda teda len **určité dovolené hodnoty** $K_{x,y,z} = \pm \frac{2\pi n}{L}$

vlastné hodnoty energie (dovolené stavy) sú $W_n = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m}K^2$

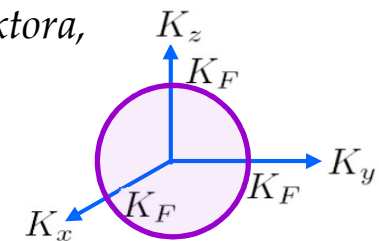
elektróny v kove v **základnom stave** ($T = 0$) obsadzujú dovolené stavy až do (maximálnej) energie $W_F = \frac{\hbar^2}{2m}K_F^2 = \frac{p_F^2}{2m}$ - tzv. **Fermiho energia**

maximálnej energii elektrónov odpovedá maximálna veľkosť vlnového vektora, elektróny sa teda nachádzajú v stavoch vo vnútri gule o polomere K_F v \vec{K} -priestore - tzv. **Fermiho guľa**

z podmienky $K_{x,y,z} = \pm \frac{2\pi n}{L}$ vyplýva, že na 1 dovolenú hodnotu vlnového vektora (1 stav) pripadá „objem“ $(\frac{2\pi}{L})^3$ v \vec{K} -priestore

v „objeme“ Fermiho gule $\frac{4}{3}\pi K_F^3$ je N častíc (pri $T = 0$) v $\frac{N}{2}$ stavoch (2 elektróny s opačným spinom v každom stave určenom vektorom \vec{K})

počet častíc = $2 \frac{\text{„objem“ Fermiho gule}}{\text{„objem“ pripadajúci na 1 stav}} : \frac{\frac{4}{3}\pi K_F^3}{(\frac{2\pi}{L})^3} = \frac{V K_F^3}{3\pi^2} = N, \quad V = L^3$ (objem kryštálu)



$$K_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$W_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

závisia len od koncentrácie častíc $\frac{N}{V}$
(nie od teploty!)

Fermiho hladina je najvyššia zaplnená hladina v základnom stave (pri $T = 0$), všetky stavy pod W_F sú zaplnené

pridaním (alebo odobraním) elektrónu do systému v základnom stave sa energia systému zmení o W_F (pridať elektrón môžeme len do voľných stavov – tesne nad W_F)

– Fermiho energia je totožná s chemickým potenciálom elektrónového plynu pri $T = 0$

počet jedoelektrónových stavov (tj. aj s rozlíšením spinu) s energiou $\leq W$:

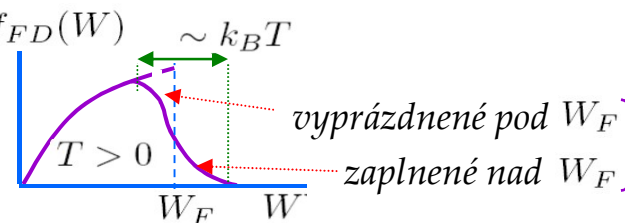
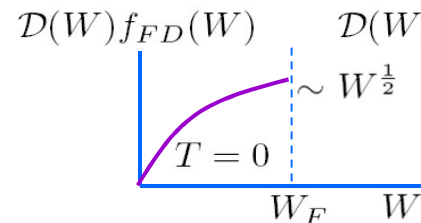
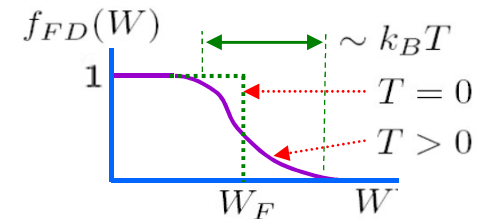
(= počet elektrónov pri $T = 0$, lebo všetky stavy sú obsadené)

$$N(W) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mW}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

hustota stavov $\mathcal{D}(W) = \frac{dN}{dW} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} W^{\frac{1}{2}}$ určuje počet dovolených stavov (na jedn. energie), nie ich obsadenosť!

obsadenosť stavov s danou energiou elektrónmi určuje

rozdeľovacia funkcia $f_{FD}(W) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{W-\mu}{k_B T}\right\} + 1}$, $\mu_{T=0} = W_F$



len táto časť elektrónov môže byť vzbudená do vyššieho stavu prijatím tepelnej energie

\Rightarrow len časť $\sim \frac{k_B T}{W_F}$ elektrónov (v okolí W_F) môže akumulovať teplo

\Rightarrow tepelná kapacita kovového kryštálu (namiesto $\sim N k_B$) je $C_V \approx N k_B \frac{k_B T}{W_F} \sim T$
(oveľa menšia než pre nekovy)

pri koncentrácii $n \approx 10^{22} \text{cm}^{-3}$ je $W_F \approx 1 \text{eV}$ } $\Rightarrow W_F \gg k_B T$ pri **všetkých bežných**
 pri teplote $T = 300 \text{K}$ je $k_B T \approx 0,025 \text{eV}$ } **teplotách**

v **základnom** stave ($T = 0$) sú všetky stavy vo vnútri Fermiho gule **obsadené** – ku každému obsadenému stavu určenému vektorom \vec{K} existuje obsadený stav $-\vec{K} \Rightarrow$ **výsledná** hybnosť ($\vec{p} = \hbar \vec{K}$) systému elektrónov je **nulová** – netečie elektrický prúd

vonkajšie elektrické pole \vec{E} pôsobí na **každý voľný** elektrón v kove silou $\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\vec{E}$ a udeľuje jej zrýchlenie, až do **zrážky s poruchami mriežky alebo kmitmi mriežky** (fonónmi), pri ktorých elektrón stráca nadobudnutú hybnosť

$m \frac{d\vec{v}}{dt} \rightarrow m \frac{v_d}{\tau}$ ← stredná rýchlosť medzi zrážkami $\tau = \frac{l}{v_F}$ ← stredná voľná dráha medzi zrážkami
 ← stredná doba medzi zrážkami ← rýchlosť na povrchu Fermiho gule

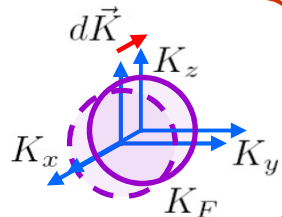
driftová rýchlosť v_d - rýchlosť **makroskopického**

prenosu náboja pod vplyvom vonkajšieho elektrického poľa $\vec{v}_d = -\frac{e\tau}{m} \vec{E} = -\frac{el}{mv_F} \vec{E}$

$v_F = \left(\frac{2W_F}{m}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar K_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$

$v_F \approx 10^6 \text{ms}^{-1}$ } $v_d \ll v_F$
 $v_d \approx 10^{-4} \text{ms}^{-1}$ } (cca 10 rádov !)

makroskopický prenos náboja (drift) v kryštáli znamená posun celej Fermiho gule v \vec{K} -priestore o vektor $d\vec{K} = \frac{m\vec{v}_d}{\hbar}$



prúdová hustota

$\vec{j} = -ne\vec{v}_d = \frac{ne^2 l}{mv_F} \vec{E} = \sigma \vec{E}$

(Ohmov zákon)

merná (elektrická) vodivosť a odpor

$\sigma = \frac{ne^2 l}{mv_F}$ $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{mv_F}{ne^2 l}$

stredná voľná dráha **klesá s rastúcou teplotou!**

merný odpor kovov je pri *bežných* teplotách určený zrážkami vodivostných elektrónov s *tepelnými kmitmi mriežky – fonónmi* (ich energia je úmerná teplote) \Rightarrow s *klesajúcou teplotou merný odpor klesá*, pri *nízkych* teplotách dominuje *teplotne nezávislý zvyškový odpor* v dôsledku zrážok s *defektami mriežky* (závisí od koncentrácie porúch), v *čistých* kovoch $\rho \rightarrow 0$ pre $T \rightarrow 0$

merný odpor kovov nezávisí od intenzity vonkajšieho elektrického poľa !

tepelná vodivosť kovov je okrem *fonónovej* vodivosti, vlastnej všetkým tuhým látkam, určená aj *elektrónovou* vodivosťou – vodivostné elektróny prenášajú kinetickú energiu (teplo) kryštálom (preto sú kovy lepšie vodiče tepla ako nekovy)

elektrónová zložka tepelnej vodivosti $\rightarrow l_e \sim \sigma T$ elektrická vodivosť

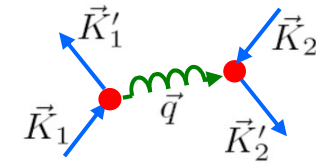
supravodiče

v plyne vodivostných elektrónov v kove môže pri dostatočne nízkej teplote – nižšej než tzv. *kritická teplota* T_c - existovať *príťažlivá interakcia medzi dvojicami elektrónov*, *prevyšujúca odpudivú* elektrostatickú interakciu (medzi nábojmi rovnakej polarita)

vodivostný elektrón pri prechode kryštálom elektricky interaguje s mriežkou – „deformuje“ (polarizuje) ju, iný elektrón „cíti“ takúto „deformovanú“ mriežku a „*prispôsobuje*“ jej svoj stav (znižuje svoju energiu) – dva elektróny teda *vzájomne* interagujú *prostredníctvom „deformácie“ mriežky*, vzniká *viazaný elektrónový pár* s *nižšou výslednou energiou* než bez uvedenej interakcie

takouto „deformáciou“ mriežky je **vybudenie** kvanta kmitu mriežky - fonónu elektrónom, druhý elektrón tento fonón **pohlí**

pri rozptyle (vyžiarení, pohltení) elektrónov na fonóne sa ich vlnové vektory zmenia, platí **zákon zachovania hybnosti** (a vlnového vektora, $\vec{p} = \hbar\vec{K}$)



vyžiarenie fonónu : $\vec{K}_1 = \vec{K}'_1 + \vec{q}$ **pohltenie** fonónu : $\vec{K}_2 + \vec{q} = \vec{K}'_2$

$$\vec{K}'_1 + \vec{K}'_2 = (\vec{K}_1 - \vec{q}) + (\vec{K}_2 + \vec{q}) = \vec{K}_1 + \vec{K}_2$$

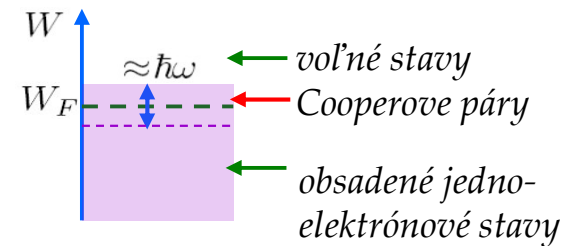
celková hybnosť (vlnový vektor) dvojice elektrónov po rozptyle je rovnaká ako pred rozptylom

elektrický odpor v kovoch je spôsobený rozptylom vodivostných elektrónov na fonónoch ak každý rozptyľujúci sa elektrón je **korelovaný** s iným elektrónom podľa uvedenej schémy, takýto **elektrónový pár** si pri rozptyle **zachováva svoju celkovú hybnosť** (nestráca kinetickú energiu), tj. šíri sa kryštálom (a prenáša náboj) **bez elektrického odporu**

Cooperov pár – **korelovaná** dvojica **súčasne obsadených jednoelektrónových** stavov $\vec{K}_\uparrow, -\vec{K}_\downarrow$ (z $k_B T_c$ - okolia Fermiho hladiny) s navzájom **opačnými hybnosťami** (ak netečie prúd), **antiparalelnými projekciami spinov**, a **permanentnou** vzájomnou **príťažlivou** interakciou ak kryštálom tečie prúd s **driftovou** hybnosťou (vlnovým vektorom) $d\vec{K}$, Cooperov pár je tvorený obsadenými stavmi $\vec{K}_\uparrow + d\vec{K}, -\vec{K}_\downarrow + d\vec{K}$

celkový náboj Cooperovho páru je $-2e$ a celkový spin je celočíselný (0) – **pár je bozón!** (riadi sa BE štatistikou, hoci elektróny, ktoré ho tvoria, (fermióny) sa riadia FD štatistikou) - **pre Cooperove páry neplatí Pauliho vylučovací princíp!**

podmienkou existencie Cooperovho páru (príťažlivej interakcie medzi párom elektrónov) je **možnosť neustáleho rozptylu** na fonónoch do **nových neobsadených stavov** – takéto voľné stavy sa nachádzajú len **nad** Fermiho hladinou, pri (teplotne závislej) energii fonónov $\hbar\omega$ sú voľné stavy dosiahnuteľné len elektrónmi z $\hbar\omega$ ($\approx k_B T_c$) okolia W_F



v oblasti (v okolí Fermiho hladiny) obsadenej Cooperovými párami **neexistujú jednoelektrónové stavy** (všetky elektróny sa podieľajú na tvorbe Cooperových párov) – pre nespárené elektróny je to zakázaný pás – tzv. **energetická medzera**, so šírkou 2Δ ($\approx k_B T_c \approx 10^{-3} \text{ eV}$) **šírka energetickej medzery predstavuje väzbovú energiu Cooperovho páru** (zníženie energie Cooperovho páru oproti energii dvojice nespárených elektrónov) – energiu potrebnú na rozbitie Cooperovho páru a vytvorenie **excitácií** zo **základného stavu** – dvoch obsadených jednoelektrónových stavov nad energetickou medzerou (Δ nad Fermiho hladinou)

supravodič vložený do **vonkajšieho magnetického poľa** vytvára na svojom **povrchu cirkulujúci supravodivý prúd** - prúdovú slučku vytvárajúcu vlastné magnetické pole (**opačné** voči vonkajšiemu poľu), ktoré **kompensuje** vonkajšie pole, **výsledné pole vo vnútri** supravodiča **je nulové** – supravodič je **ideálnym diamagnetikom**

po **prekročení** tzv. **kritického magnetického poľa** H_c (odpovedajúca magnetická energia sústredená v objeme supravodiča $\int \frac{\mu_0 H_c^2}{2} dV \approx k_B T_c$ pri $T \rightarrow 0$, s rastúcou teplotou H_c klesá) diamagnetizmus i supravodivosť **zanikajú**

elektrodynamika supravodičov (na fenomenologickej úrovni) je popísaná dvojicou *Londonových rovníc*, nahrádzajúcich Ohmov zákon (ktorý pre supravodiče stráca zmysel, $\rho \rightarrow 0$)

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \vec{E} \quad \nabla \times \vec{j} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \vec{B}$$

Londonove rovnice

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n e^2}}$$

magnetická hĺbka vniku

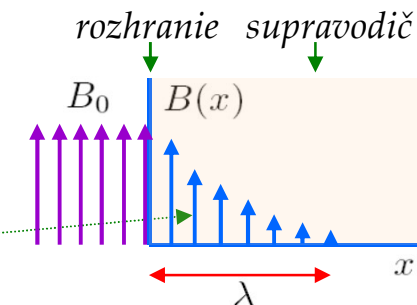
prvá z Londonových rovníc vyjadruje základnú *elektrickú* vlastnosť supravodičov – *nulový elektrický odpor* (nulové napätie) pri prechode *jednosmerného* (v čase nemenného) prúdu, a *induktívny* charakter pre časovo *premenný* prúd (supravodič predstavuje indukčnosť)

druhá z Londonových rovníc vyjadruje základnú *magnetickú* vlastnosť supravodičov – *ideálny diamagnetizmus*

kombináciou s jednou z Maxwellových rovníc $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}$
(pre kvázistacionárny prípad $\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \rightarrow 0$)

dostávame pre magnetické pole v supravodiči $\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda^2} \vec{B}$

riešením v jednorozmernom prípade je $B(x) = B_0 \exp\{-\frac{x}{\lambda}\}$



magnetické pole v supravodiči exponenciálne *zaniká* (od povrchu smerom do hĺbky supravodiča) s charakteristickou hĺbkou vniku $\lambda \approx 10^{-7} - 10^{-6} m$, *vo vnútri* supravodiča $B = 0$

pokles magnetického poľa pri povrchu je zviazaný (Maxwellovou rovnicou) s prúdom $\vec{j} \perp \vec{B}$ *circulujúcim* povrchovou vrstvou $\approx \lambda$ a *odtieňujúcim* vnútro supravodiča

supravodivé prúdy (tieniace aj transportné) tečú len povrchom ($\approx \lambda$) supravodiča !

magnetický tok prenikajúci uzavretým supravodivým prstencom (hrúbky $> \lambda$) *je kvantovaný*

$$\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = n\Phi_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \cong 2 \cdot 10^{-15} \text{Wb}$$

elementárne kvantum magnetického toku

magnetický tok prstencom je $\Phi = LI$ ← prúd cirkulujúci v prstenci
← indukčnosť prstenca (daná jeho geometriou)

podmienka kvantovania magnetického toku *znemožňuje* prúdu v prstenci *spojite zanikať* v čase (ak by prstenec mal *nenulový* elektrický odpor, prúd indukovaný v ňom by spojite zanikal)

s kvantovaním magnetického toku súvisí existencia tzv. *supravodičov II. typu*, v ktorých magnetické pole môže vnikať *do vnútra* supravodičov v podobe *tokotrubíc (vírov)* nesúcich *jedno* elementárne kvantum Φ_0 , prúd v týchto supravodičoch môže vtedy tieť ich *vnútrom*

kvantovanie magnetického toku spolu s tzv. *Josephsonovými javmi* s supravodičoch sú základom *kvantovej interferometrie*, ktorá umožňuje konštrukciu senzorov magnetického poľa s unikátnou citlivosťou

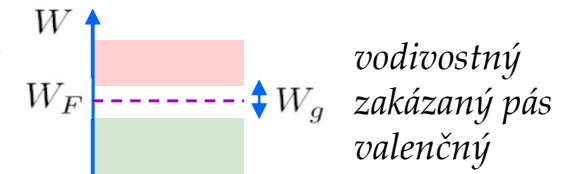
existencia Cooperových párov predstavuje *vyššie usporiadanie* v porovnaní s elektrónovým plynom – supravodivý stav je stav *s nižšou entropiou* ako normálny stav kovu
prechod medzi supravodivým a normálnym stavom je fázovým prechodom (2. druhu pri T_c , 1. druhu pri H_c)

schopnosť Cooperových párov šíriť sa kryštálom bez odovzdávania energie okoliu (nulový elektrický odpor) súčasne znamená *neschopnosť odovzdať teplo* – v supravodičoch *absentuje elektrónová zložka tepelnej vodivosti*, typická pre kovy – *supravodiče sú veľmi zlými vodičmi tepla*

vlastné polovodiče

vlastnými polovodičmi sú čisté atomárne látky (napr. 4-mocné Si, Ge) alebo zlúčeniny (napr. SiC (IV-IV), GaAs, InSb (III-V), ZnS (II-VI))

zakázaný pás medzi valenčným a vodivostným pásom má šírku $W_g \approx 0,1 - 2\text{eV}$ (šírka dovolených pásov je $\approx 20\text{eV}$)
Fermiho hladina leží *v strede* zakázaného pásu



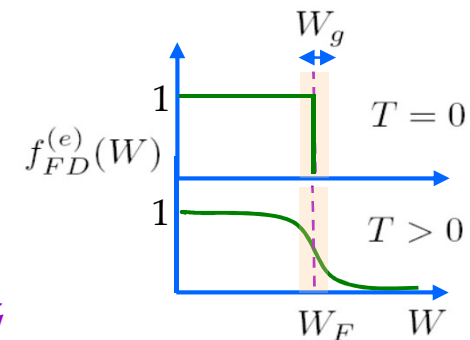
Fermiho energia odpovedá *chemickému potenciálu* pri $T = 0$ (tj. energii spojenej s pridaním, resp. odobraním 1 častice systému)

pri $T = 0$ je valenčný pás *úplne obsadený* a vodivostný pás *úplne prázdny* – časticu možno pridať len do voľného stavu *nad* a odobrať len zo zaplneného stavu *spod* zakázaného pásu – priemer z týchto dvoch energií leží *v strede* zakázaného pásu

pri $T > 0$ môžu elektróny z vrchu valenčného pásu prijatím tepelnej energie $k_B T$ prejsť do vodivostného pásu, na vrchu valenčného pásu ostanú po nich *nezaplnené* stavy - *diery*

pravdepodobnosť *obsadenia* stavu s danou energiou elektrónom určuje rozdeľovacia funkcia $f_{FD}^{(e)}(W)$

pravdepodobnosť, že daný stav je *neobsadený* (resp. je „*obsadený dierou*“), je $f_{FD}^{(d)}(W) = 1 - f_{FD}^{(e)}(W)$



počet častíc s energiou W (tj. v malom intervale energií okolo W) je určený súčinom rozdeľovacej funkcie a *hustoty stavov* – v zakázanom páse je hustota stavov *nulová*

koncentrácia elektrónov vo vodivostnom páse = koncentrácia dier vo valenčnom páse

($n_d = n_e$, platí len pre *vlastné* polovodiče)

vonkajšie elektrické pole spôsobuje *usmernený* pohyb *vodivostných* elektrónov i elektrónov *na vrchu valenčného pásu* do voľných stavov (dier)

usmernený tok *valenčných* elektrónov do prázdnych stavov interpretujeme ako *pohyb dier s nábojom +e opačným smerom*

celkový elektrický prúd polovodičom teda pozostáva z prúdu *elektrónov i dier*

(smer prúdu je podľa konvencie smerom toku *kladných* nábojov – obe zložky majú teda *rovnaký smer!*)


$$\underline{\sigma = \sigma_n + \sigma_d = \left(\frac{ne^2l}{mv_F}\right)_e + \left(\frac{ne^2l}{mv_F}\right)_d} \quad \underline{\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_n + \sigma_d}}$$

mechanizmus elektrického odporu v polovodičoch je obdobný ako v kovoch, v polovodičoch však *koncentrácia voľných nosičov náboja narastá s rastúcou teplotou – elektrický odpor klesá !*

prímesné polovodiče

prímesné polovodiče vznikajú zabudovaním *malého počtu prímesných* atómov do mriežky vlastného polovodiča (*dotovanie, legovanie*)

(napr. 1 atóm B na 10^5 atómov Si zvýši vodivosť pri 300K až 1000-krát !)

Si: $3s^23p^2$  As: $4s^24p^3$ 4 valenčné elektróny vstupujú do kovalentných väzieb, 1 *navyš*
B: $2s^2p^1$ 1 valenčný elektrón *chýba* do nasýtenia kovalentných väzieb, vzniká *diera*

donor – prímiesny atóm s prebytkom valenčných elektrónov

akceptor – prímiesny atóm s nedostatkom valenčných elektrónov

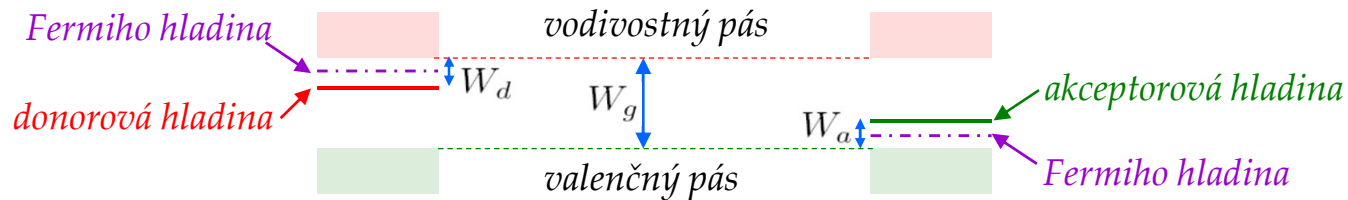
prebytočný *elektrón* je viazaný na materský atóm *redukovanou* Coulombovou silou $\frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2}$ (ϵ -krát *slabšia* väzba ako v izolovanom atóme) – dodaním *malej* energie W_d sa uvoľní (delokalizuje) a stáva vodivostným

permitivita kryštálu

prebytočná diera je k dispozícii na preskok valenčného elektrónu dodaním *malej* energie W_a (je voľnou dierou)

$$W_d, W_a \approx 10\text{meV} \ll W_g$$

prímiesi vytvárajú dodatočné – tzv. *prímiesné hladiny v zakázanom páse* materského kryštálu (na uvoľnenie prímiesných nosičov náboja treba oveľa menšiu energiu než na uvoľnenie materských)



v prítomnosti *donorov* sa Fermiho energia posúva do stredu medzi *donorovú* hladinu a dno *vodivostného pásu*, v prítomnosti *akceptorov* do stredu medzi *akceptorovú* hladinu a vrch *valenčného pásu* (v oboch prípadoch stred medzi energiou odobratej a pridanej častice – elektrónu alebo diery)

pri izbových teplotách je $W_d, W_a \approx k_B T$ a vodivosť je ovládaná *prímiesnými* nosičmi náboja – elektrónmi (*vodivosť typu n*) alebo dierami (*vodivosť typu p*), ktorých koncentrácia prevláda – tzv. *majoritné* (väčšinové) *nosiče*

$$n_e > n_d \text{ - polovodiče typu n}$$

$$n_e < n_d \text{ - polovodiče typu p}$$

Hollov jav

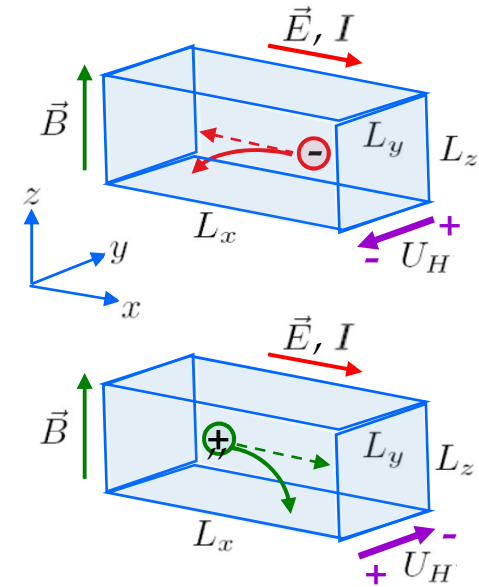
predpokladajme materiály s vodivosťou typu n a p v **skrížených** elektrických a magnetických poliach ($\vec{E} \perp \vec{B}$), \vec{E} v smere osi x (má len zložku E_x), \vec{B} v smere x (len B_z)

Lorentzova sila pôsobiaca na voľné nosiče náboja $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ urýchľuje elektróny i diery v smere x ($\vec{v}_{x(e)} \uparrow \downarrow \vec{E}$, $\vec{v}_{x(d)} \uparrow \uparrow \vec{E}$) a súčasne **zakrivuje** ich dráhu v smere kolmom na \vec{B} aj \vec{v}

prenosom prúdu I v smere x sa stene v rovine xz v smere magnetickej zložky sily hromadí náboj majoritných nosičov a teda na protiahlej stene opačný náboj – vzniká elektrické napätie v smere y – **Hallovo napätie** U_H , ktorého **polarita závisí od typu nosičov náboja** (Hallovo napätie **kompenzuje** magnetickú zložku Lorentzovej sily)

$$v_x = \frac{j_x}{nq}, \quad j_x = \frac{I}{L_y L_z}, \quad E_y = v_x B_z = \frac{j_x B_z}{nq} = R j_x B_z = \frac{R I B_z}{L_y L_z}$$

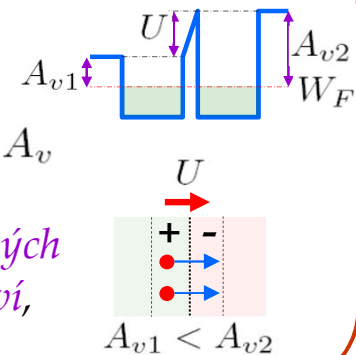
$$U_H = \int_0^{L_y} E_y dy = \frac{R I B_z}{L_y L_z} \int_0^{L_y} dy = \frac{I R B_z}{L_z} \quad R = \frac{1}{nq} \begin{cases} q_e = -e \\ q_d = e \end{cases}$$



kontaktné napätie

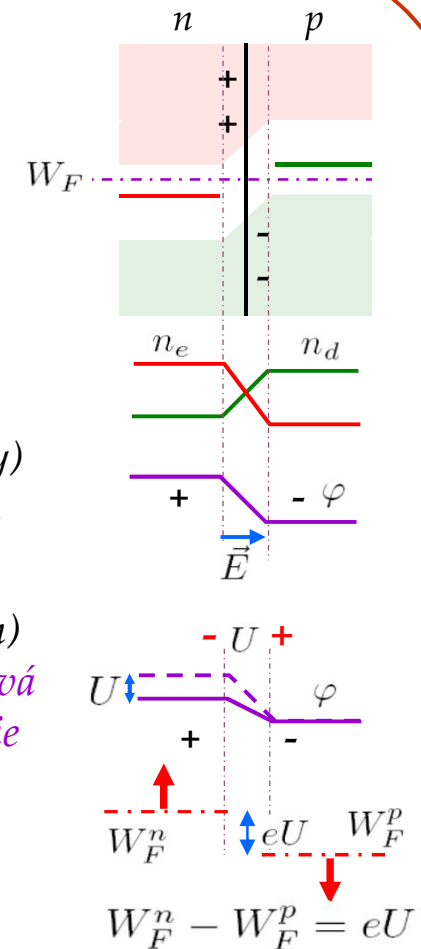
výstupná práca je rozdiel energií voľného elektrónu mimo materiálu a na Fermiho hladine v materiáli, tj. energia potrebná na vytrhnutie elektrónu z materiálu

pri kontakte dvoch materiálov (kovov i polovodičov) s **rôznou výstupnou prácou** A_v dochádza k **toku** elektrónov z materiálu s **menšou** výstupnou prácou do druhého materiálu, tým vznikajú pri rozhraní **oblasti nevykompenzovaného náboja opačných polarít** a teda elektrické **kontaktné napätie** $U = \frac{A_{v1} - A_{v2}}{e}$, ktoré ďalší tok **zastaví**, súčasne sa **vyrovnajú Fermiho hladiny** na oboch stranách rozhrania



pn - prechod

- pri materiálovom kontakte polovodičov typu p a n dochádza k **difúzii majoritných nosičov cez rozhranie** (elektrónov z oblasti s vyššou koncentráciou v polovodiči typu n do oblasti s nižšou koncentráciou v polovodiči typu p, dier naopak)
- tým sa však **narúša elektroneutralita** v oblasti rozhrania – povrch polovodiča typu n sa nabíja kladne a typu p záporne, vzniká elektrické pole (potenciálová bariéra pre majoritné nosiče) – **kontaktné napätie**, ktoré ďalšiu difúziu **zastaví**
- po dosiahnutí **TD rovnováhy** sú chemické potenciály (Fermiho hladiny) na oboch stranách **vyrovnané**, čo nutne vedie k zakriveniu energetických pásov v oblasti rozhrania
- priložením elektrického napätia U v **priepustnom smere** (+ na p, - na n) sa výška potenciálovej bariéry pre majoritné nosiče **zniži** o U a **celá pásová štruktúra** (vrátane W_F) na oboch stranách rozhrania sa **voči sebe posunie** o eU , rozhraním **potečie prúd majoritných nosičov** - elektrónov z n do p a dier naopak (v prítomnosti makroskopických tokov systém nie je v TD rovnováhe – chemické potenciály častí systému nie sú vyrovnané)
- priložením elektrického napätia v **závernom smere** (+ na n, - na p) sa výška potenciálovej bariéry pre **majoritné** nosiče **zvýši**, tým sa však **zniži** pre **minoritné** (menšinové) nosiče (diery v n a elektróny v p) a rozhraním **potečie prúd minoritných nosičov** - dier z n do p a elektrónov naopak – tento **záverný prúd** je však **zanedbateľne malý** (počet nosičov je malý)
vzniká **usmerňovací efekt** (pn – prechod prepúšťa prúd len v jednom - priepustnom smere)



dielektriká

v dielektrikách je zakázaný pás medzi úplne zaplneným valenčným pásom a prázdnyim vodivostným pásom *oveľa širší* než $k_B T$ pri bežných teplotách, takže v dielektriku prakticky *niet voľných nosičov náboja*

vplyvom vonkajšieho elektrického poľa vznikajú v *nepolárnych* dielektrikách *elektrické dipóly*, v *polárnych* látkach sa elektrické dipóly molekúl orientujú do smeru vonkajšieho poľa - dielektriká sa *polarizujú*, vznikajú priestorovo *viazané náboje*

objemovú hustotu a orientáciu *dipólových momentov* \vec{p} popisuje *vektor polarizácie*

$$\vec{P} = \sum_i n_i \vec{p}_i \quad (\text{sčítavame cez koncentrácie všetkých druhov dipólov v látke})$$

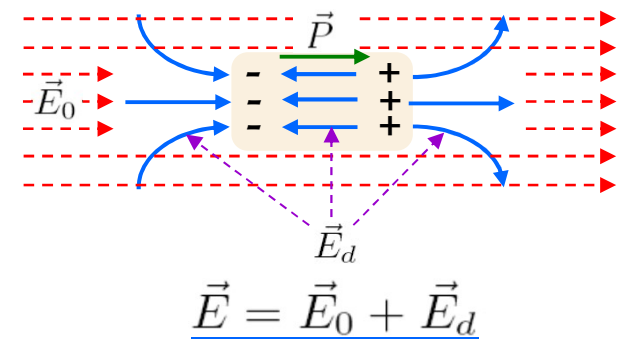
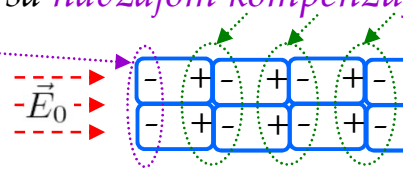
makroskopické (stredné) elektrické pole \vec{E} *vo vnútri dielektrika* súvisí s vektorom polarizácie prostredníctvom permitivity, resp. elektrickej susceptibility prostredia

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E} = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \vec{E}$$

(v *anizotropných* látkach sú ϵ_r, χ zložitými funkciami smeru, a vektory \vec{E}, \vec{P} *nemusia byť rovnobežné*)

makroskopické pole \vec{E} v dielektriku sa líši od vonkajšieho poľa \vec{E}_0 o *pole vytvárané polarizáciou* látky - tzv. *depolarizačné pole* \vec{E}_d

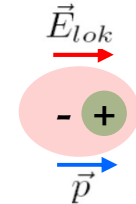
viazané náboje v objeme dielektrika sa *navzájom kompenzujú*, *nevykompenzované* sú náboje na *čelných povrchoch* vzorky (v smere vonkajšieho poľa) tieto *povrchové náboje* sú zdrojom depolarizačného poľa



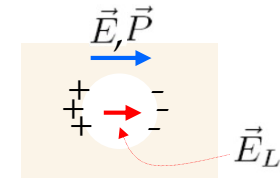
pre *homogénne* spolarizovanú látku $\underline{\vec{E}_d = -\mathcal{N} \frac{\vec{P}}{\epsilon_0}}$ vo vnútri látky (mimo nej sa toto pole v priestore mení)

\mathcal{N} - depolarizačný faktor, $\mathcal{N} = 0$ až 1 v závislosti od tvaru vzorky (napr. $\mathcal{N} = \frac{1}{3}$ pre guľu)

elektrónová polarizácia – elektrónový obal atómov sa vplyvom vonkajšieho poľa k posúva (proti smeru poľa) voči jadru, vznikajú elektrické dipóly, veľkosť dipólových momentov \vec{p} závisí od lokálneho poľa \vec{E}_{lok} v mieste atómov



$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{p} = \alpha \vec{E}_{lok} \quad \text{polarizovateľnosť atómu} \quad \vec{P} = \sum_i n_i \alpha_i \vec{E}_{lok} \\ \vec{E}_{lok} = \vec{E}_0 + \vec{E}_d + \vec{E}_L \quad \text{Lorentzovo pole pôsoiace na vybraný dipól vo vnútri vzorky od okolitých dipólov} \\ \vec{E}_d + \vec{E}_L = \sum_i \frac{3(\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i) \vec{r}_i - r_i^2 \vec{p}_i}{4\pi\epsilon_0 r_i^5} \quad \text{(zdrojom týchto polí je súčet polí dipólov v látke)} \\ \underline{\vec{E}_L = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}} \quad \text{vid' napr. A. Tirpák: Elektromagnetizmus, kap. 4.8} \\ \epsilon_r = \frac{\epsilon_0 E + P}{\epsilon_0 E} \quad \text{Clausiusov - Mossottiho vzťah} \\ \underline{\sum_i \frac{\vec{P}}{n_i \alpha_i} = \frac{\vec{P}}{\epsilon_0(\epsilon_r - 1)} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}} \Rightarrow \underline{\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_i n_i \alpha_i} \end{array} \right.$$



Clausiusov – Mossottiho vzťah dáva do súvisu *fenomenologický materiálový* parameter ϵ_r s *mikroskopickou polarizovateľnosťou*, ktorá je vlastnosťou konkrétnych atómov
vzťah s dobrou presnosťou platí pre kubické iónové kryštály a pre nepolárne kvapaliny a plyny

pri elektrónovej polarizácii *permitivita látky nezávisí od teploty*

orientačná polarizácia – elektrické dipóly v *polárnych* látkach, dôsledkom tepelného pohybu chaoticky orientované do všetkých smerov, sa vplyvom vonkajšieho elektrického poľa *orientujú do smeru poľa* – výsledné usporiadanie dipólov závisí od veľkosti vonkajšieho poľa a tepelného pohybu dipólov (tj. teploty)

pot. energia dipólu v elektrickom poli $W_p = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -pE \cos \vartheta$ uhol natočenia dipólu voči smeru poľa
 pravdepodobnosť natočenia dipólu pod daným uhlom $\sim \exp\left\{-\frac{W_p}{k_B T}\right\} = \exp\left\{\frac{pE \cos \vartheta}{k_B T}\right\}$

$\cos \vartheta$ klesá s $\vartheta \Rightarrow$ pravdepodobnosť väčších odchýlení dipólov od smeru \vec{E} je malá, vplyv zvýšenia teploty na usporiadanie dipólov možno kompenzovať zvýšením el. poľa

Curieho zákon

$$\chi = \epsilon_r - 1 = \frac{np^2}{3\epsilon_0 k_B T} = \frac{C}{T}$$

Curieho konštanta

pri *orientačnej* polarizácii *permitivita látky závisí od teploty*

feroelektriká – polárne látky, ktoré si pri dostatočne nízkych teplotách (pod *Curieho teplotou* T_c , charakteristickou pre danú látku) zachovávajú *usporiadanie elektrických dipólov aj bez prítomnosti vonkajšieho elektrického poľa* v rámci *makroskopických* oblastí – *domén*, orientácia elektrických momentov domén bez prítomnosti poľa je *náhodná* – závisí od predchádzajúceho polarizovania látky a teploty, vo vonkajšom poli sa rozrastajú domény orientované v smere poľa na úkor ostatných

piezoelektriká (piezokryštály) – polárne (zväčša feroelektrické) látky, v ktorých možno *mechanickým napätím meniť ich polarizáciu* a naopak

Magnetizmus látok

magnetizmus látok sa prejavuje ich *nenulovým výsledným magnetickým momentom*

zdrojmi magnetického momentu látok sú:

- *zmena orbitálnych* momentov elektrónov v atómoch látky vplyvom vonkajšieho magnetického poľa (vo *všetkých* látkach)
- *nevykompenzovaný orbitálny* alebo *spinový* moment atómov látky (len v atómoch s *čiasťočne zaplnenými* elektrónovými vrstvami)
- *nevykompenzovaný jadrový* moment atómov látky
- *makroskopické* tieňiace prúdy v *supravodičoch*

diamagnetizmus

diamagnetizmus (všetkých) látok vzniká v dôsledku „snahy“ elektrónov v atómoch *odtieniť* vnútro atómov od vonkajšieho magnetického poľa

magnetické pole pôsobí na *pohybujúci* sa elektrón Lorentzovou silou $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$ a *zakrivuje* jeho dráhu do kružnice s takým polomerom r , pri ktorom sú odstredivá a Lorentzova sila v *rovnováhe* (pre jednoduchosť predpokladajme $\vec{v} \perp \vec{B}$)

$$mvr = mr\omega^2 = evB = er\omega B \quad v = \omega r$$

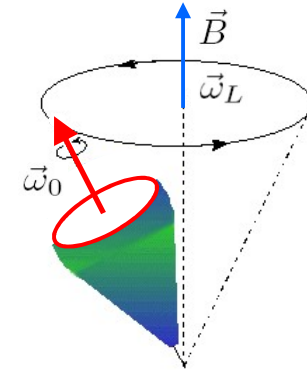
moment hybnosti a magnetický moment elektrónu sú

$$\omega = \frac{eB}{m} \text{ - cyklotrónová frekvencia}$$

$$\vec{L} = mr^2\vec{\omega} \quad \vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L} = -\frac{er^2}{2}\vec{\omega} = -\frac{e^2r^2}{2m}\vec{B}$$

$\vec{\mu} \uparrow \downarrow \vec{B}$ - magnetické pole zakrivením dráhy elektrónu vytvára magnetický moment, ktorý *zoslabuje* účinky tohto poľa

pohyb elektrónu okolo atómového jadra *v magnetickom poli* odpovedá *superpozícii* pohybu *bez* magnetického poľa a *precesie* osi otáčania okolo smeru magnetického poľa s Larmorovou frekvenciou $\omega_L = \frac{eB}{2m}$ (Larmorov teorém)



tejto precesii odpovedá *dodatočný* (dia-)magnetický moment

$$\vec{\mu}_{(d)} = -\frac{er^2}{2}\vec{\omega}_L = -\frac{e^2r^2}{4m}\vec{B}$$

pre *klasickú dráhu* elektrónu okolo atómového jadra *v neprítomnosti* magnetického poľa je odstredi-
vá sila v rovnováhe s Coulombovskou príťažlivou silou $mr\omega_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2}$ $\omega_0 = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon mr^3}}$

v magnetickom poli (kolmom na rovinu elektrónovej dráhy) do rovnováhy síl vstupuje Lorentzova
sila, ktorá zmení pohyb elektrónu, $\omega_0 \rightarrow \omega$ $mr\omega^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2} - er\omega B$

$$\left. \begin{aligned} \omega^2 + \frac{eB}{m}\omega - \omega_0^2 &= 0 \\ \omega &= -\frac{eB}{2m} \pm \sqrt{\left(\frac{eB}{2m}\right)^2 + \omega_0^2} \end{aligned} \right\} \text{pre } \omega_0 \gg \frac{eB}{2m}: \quad \omega = \pm\omega_0 - \frac{eB}{2m} = \pm\omega_0 - \omega_L \quad \omega_L = \frac{eB}{2m}$$

superpozícia dvoch rotačných pohybov
($\omega_0 \gg \omega_L$)

(polomer dráhy elektrónu sa nemení, lebo je viazaný kvantovacou podmienkou)

celkový príspevok všetkých elektrónov v atóme so Z elektrónmi dostaneme sčítaním cez všetky polo-
mery $r^2 \rightarrow \sum_{i=1}^Z r_i^2$ a náhradou všetkých možných hodnôt r_i^2 strednou hodnotou $\langle r^2 \rangle$, teda
 $\rightarrow \sum_{i=1}^Z \langle r^2 \rangle \rightarrow Z \langle r^2 \rangle$ (a kvantovou korekciou $\frac{1}{4} \rightarrow \frac{1}{6}$)

objemová hustota *celkových atómových* diamagnetických momentov určuje *magnetizáciu*, resp. *(dia-)magnetickú susceptibilitu* materiálu

$$\vec{M}_{(d)} = n\vec{\mu}_{(d)} = \chi_{(d)}\vec{H} \quad (\vec{B} = \mu_0\vec{H})$$

$$\chi_{(d)} = -\frac{\mu_0 n Z e^2}{6m} \langle r^2 \rangle$$

diamagnetická susceptibilita látok *nie je teplotne závislá*

diamagnetizmus látok sa prejavuje len ak *celkové atómové momenty sú nulové*, tj. orbitálne (v našom odvodení rotačné pohyby s ω_0) aj spinové momenty elektrónov sú *vykompenzované*

paramagnetizmus

paramagnetizmus sa prejavuje v látkach s *nevykompenzovanými* atómovými alebo molekulovými magnetickými momentami (spinovými alebo orbitálnymi)

bez vonkajšieho magnetického poľa sú jednotlivé magnetické momenty v dôsledku tepelného pohybu *orientované náhodne* – *výsledná magnetizácia je nulová*

v magnetickom poli sa magnetické dipóly „*orientujú do smeru poľa*“, tepelný pohyb narušuje dokonalé usporiadanie $W_p = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \mu B \cos \vartheta$ ($\ll k_B T$ pri bežných teplotách)

pravdepodobnosť orientácie dipólu v danom smere $\sim \exp\left\{-\frac{W_p}{k_B T}\right\} = \exp\left\{\frac{\mu B \cos \vartheta}{k_B T}\right\}$

magnetizácia vzorky je daná koncentráciou dipólov, resp. ich *priemetov do smeru poľa*

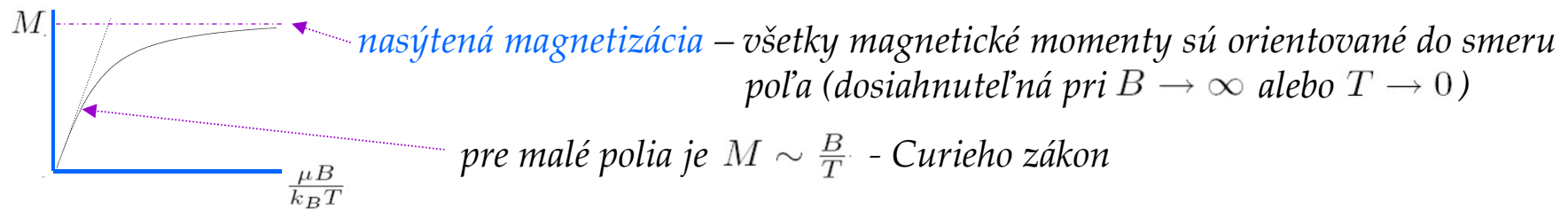
$$M = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3k_B T} H$$

pre *malé* polia

(para-)magnetická susceptibilita

$$\chi = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3k_B T} = \frac{C}{T}$$

(*klasický*) Curieho zákon



presnejší *kvantovomechanický* prístup vychádza z *kvantovanej* veľkosti *atómového* magnetického momentu a jeho priemetu do smeru poľa

$$\mu_J = g \sqrt{J(J+1)} \mu_B \quad |\vec{\mu}_J| \cos \vartheta = g M_J \mu_B \quad M_J = J, J-1, \dots, -J \quad (2J+1 \text{ hodnôt})$$

Landého faktor

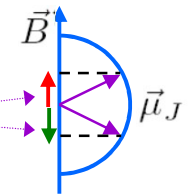
$$W_p = -\vec{\mu}_J \cdot \vec{B} = -g M_J \mu_B B$$

$$\chi = \frac{\mu_0 n J(J+1) g^2 \mu_B^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T}$$

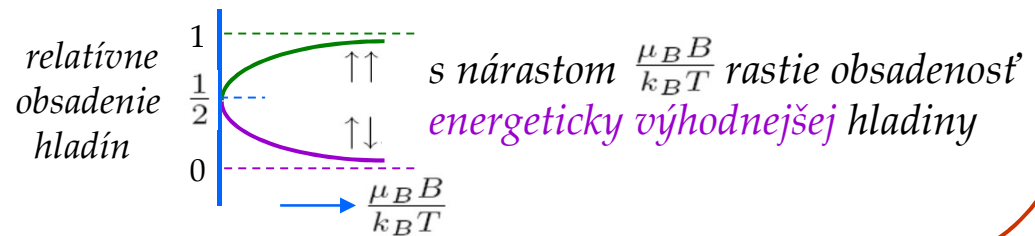
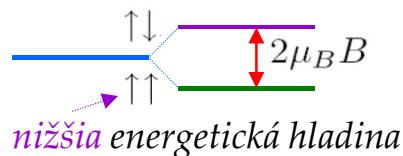
napr. látka s *nevykompenzovaným spinovým* magnetickým momentom – 1 spin na atóm

$J = S = \frac{1}{2}$ ($L = 0$) $g = 2$, $M_J = \pm \frac{1}{2}$ - v magnetickom poli sú možné (*dovolené*)

2 priemetu atómového magnetického momentu do smeru poľa $|\vec{\mu}_J| \cos \vartheta = \pm \mu_B$ s energiami $W_p = \pm \mu_B B$



2-násobne *degenerovaná* energetická hladina elektrónu v atóme (2 rôzne orientácie spinu s *rovnakou* energiou bez magnetického poľa) sa v magnetickom poli štiepi na 2 podhladiny s *rôznymi* energiami - *magnetické pole sníma degeneráciu*

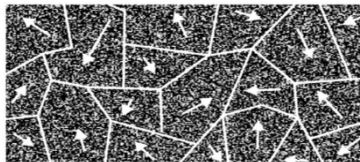


väčšina vodivostných elektrónov v *v kovoch* nemôže orientovať svoje spinové magnetické momenty do smeru \vec{B} , pretože odpovedajúce stavy pod Fermiho hladinou sú obsadené - len časť $\frac{k_B T}{W_F}$ sa podieľa na paramagnetizme

$$\chi = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3k_B T} \frac{k_B T}{W_F} = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3W_F} \quad \text{Pauliho paramagnetizmus vodivostných elektrónov}$$

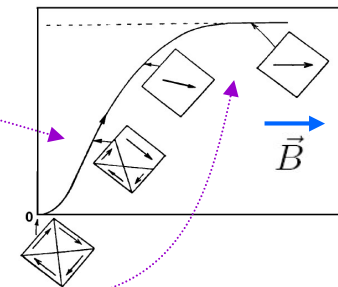
feromagnetizmus

v niektorých látkach s *dostatočne veľkou hustotou* nevykompenzovaných magnetických momentov (tj. v niektorých tuhých látkach) dochádza k *interakcii medzi magnetickými momentami navzájom*, ktorá pri *dostatočne nízkych teplotách* – pod *Curieho teplotou* T_C vedie k *energeticky výhodnému spontánnemu paralelnému usporiadaniu* magnetických momentov v *makroskopických oblastiach* - *doménach*



bez vonkajšieho poľa je orientácia domén určená *teplotou* (tepelná energia spôsobuje náhodnú orientáciu) a *predchádzajúcim magnetizovaním* látky – magnetizácia látky *nie je jednoznačnou funkciou* $\frac{\mu B}{k_B T}$ ale závisí od jej „*magnetickej histórie*“ (*nemusí byť nulová!*)

vo vonkajšom magnetickom poli *narastá objem domén s „priaznivou“ orientáciou* voči poľu (tj. so smerom magnetických momentov *blízkym* smeru vonkajšieho poľa) na úkor domén s *nepriaznivou* orientáciou *v silnom* magnetickom poli dochádza k *natáčaniu smeru magnetizácie* „*priaznivo*“ orientovaných domén *do smeru poľa*

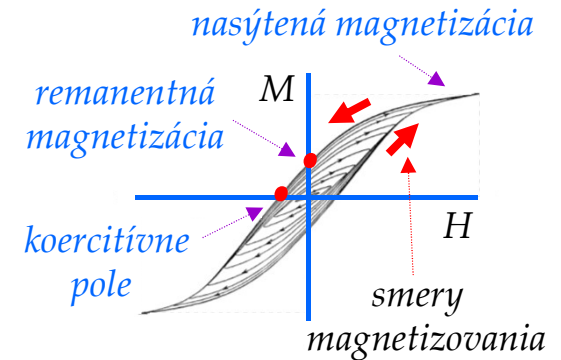


pri **zмене smeru** magnetizovania látky (napr. pokles vonkajšieho poľa po predchádzajúcom náraste) sa magnetizácia látky mení po **inej** krivke – **magnetická hysteréza**

pri **cyklickom** magnetizovaní vznikajú **hysterézne slučky**

remanentná magnetizácia – magnetizácia látky v **nulovom** vonkajšom poli (vzorka je **permanentným magnetom**)

koercitívne pole – hodnota vonkajšieho poľa, pri ktorom je magnetizácia látky **nulová**



pri T_C dochádza k **fázovému prechodu** (2. druhu) z feromagnetického (pod T_C) do **paramagnetického** (nad T_C) stavu so susceptibilitou

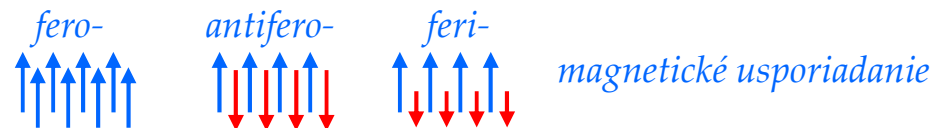
(v slabých poliach)

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}$$

Curieho – Weissov zákon

kvantovomechanická výmenná interakcia, spôsobujúca spontánne **feromagnetické** usporiadanie nevykompenzovaných magnetických momentov, vedie v niektorých látkach k **antiferomagnetizmu** – **antiparalelnému usporiadaniu** magnetických momentov, **výsledná** magnetizácia antiferomagnetík je **nulová**, pri tzv. **Néelovej teplote** T_N dochádza k **fázovému prechodu** (2. druhu) do **paramagnetického** stavu (nad T_N)

v niektorých kryštáloch, pozostávajúcich z **rôznych** magnetických iónov (tj. iónov s nevykompenzovaným magnetickým momentom), dochádza k **nevykompenzovanému antiferomagnetickému** usporiadaniu - **ferimagnetizmu**



jadrový magnetizmus

jadrový (para-)magnetizmus sa prejavuje v látkach s nevykompenzovaným jadrovým magnetickým momentom

protóny (a podobne aj neutróny) v atómovom jadre majú spin (vlastný moment hybnosti) s kvantovanou veľkosťou $L = \hbar\sqrt{I(I+1)}$, $I = \frac{1}{2}$ pre protón, a odpovedajúci magnetický moment $\vec{\mu} = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{L}$, $g_p = 5,58$ $\vec{\mu} \uparrow \uparrow \vec{L}$
(antiparalelné pre elektrón !)

hmotnosť protónu

jadrový magnetón $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,05 \cdot 10^{-27} \text{ Am}^2 \quad (\ll \mu_B)$

priemet $\vec{\mu}$ (do význačného smeru) je $|\vec{\mu}| \cos \vartheta = g_p m_I \mu_N$, $m_I = \pm \frac{1}{2}$.

v magnetickom poli sa (2-násobne degenerovaná) energetická hladina štiepi na 2 podhladiny $W_p = \pm \frac{1}{2} g_p \mu_N B$ s rozdielom energií $\Delta W_p = g_p \mu_N B$

jadrový magnetizmus je 10^3 -krát slabší než magnetizmus elektrónového obalu !

jadrová magnetická rezonancia vzniká pri rezonančnom pohltení elektromagnetickej energie $\hbar\omega$ pri „preklápaní“ jadrových momentov z nižšej ($\uparrow\uparrow\vec{B}$) obsadenejšej do vyššej ($\uparrow\downarrow\vec{B}$) energetickej hladiny pri frekvencii $\omega = \gamma_p B$ $\gamma_p = \frac{g_p \mu_N}{\hbar}$ - gyromagnetický pomer pre protón

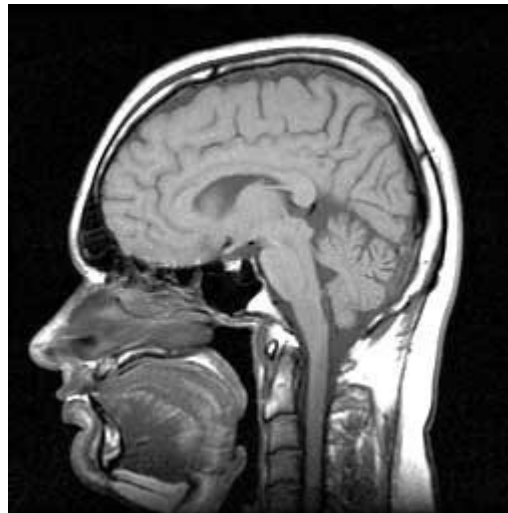
po „vypnutí“ elektromagnetickeho poľa nastáva relaxácia do rovnovážneho obsadenia hladín (pri danom B a T)

rezonančná frekvencia JMR (NMR) odpovedá cca 40MHz na 1T

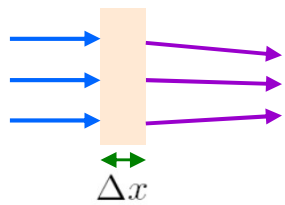


elektrónová paramagnetická rezonancia (EPR, ESR) vzniká pri rezonančnom pohltení elektromagnetickej energie pri „preklápaní“ nevykompenzovaných elektrónových momentov z nižšej do vyššej hladiny pri frekvencii $\omega = \gamma_e B$, $\gamma_e = \frac{g_e \mu_B}{\hbar}$ - gyromagnetický pomer pre elektrón ($g_e = 2$) rezonančná frekvencia EPR odpovedá cca 28GHz na 1T

šírka a tvar (jemná štruktúra) rezonančnej čiary, jej frekvenčný posun voči normálu, ako aj relaxačné časy pri JMR aj EPR súvisia s interakciou jadra, resp. elektrónového obalu s okolím (tienenie, spin-orbitálne interakcie, typ chemickej väzby, spôsob zabudovania v mriežke, anizotropia, a pod.)



Prechod elektromagnetickej vlny látkou



(platí pre látky s malým indexom lomu)

P • bod *dostatočne vzdialený* od platne (lúče prichádzajúce z rôznych bodov platne môžeme považovať za približne *paralelné*)

index lomu n [bezrozmern.] - vyjadruje vplyv látkového prostredia na rýchlosť šírenia vlny

$$v_f = \frac{c}{n}$$

elektrické pole v bode P *bez prítomnosti platne* $E = E_0 \cos \omega(t - \frac{x}{c}) \rightarrow E_0 e^{i\omega(t - \frac{x}{c})}$

v platni s $n > 1$ sa vlna šíri *pomalšie*, prejde platňou za čas $\frac{n\Delta x}{c} \Rightarrow$ *oneskorenie* vlny prechodom cez platňu (oproti prípadu $n = 1$) je $\Delta t = (n - 1) \frac{\Delta x}{c}$

pole v bode P *po prechode platňou* $E_0 e^{i\omega(t - \underbrace{(n-1)\frac{\Delta x}{c}}_{t \rightarrow t - \Delta t} - \frac{x}{c})} = \underbrace{E_0 e^{i\omega(t - \frac{x}{c})}}_{\text{vlna „bez platne“}} \underbrace{e^{-i\omega(n-1)\frac{\Delta x}{c}}}_{\text{„vyvolaný“ platňou}}$

$n \rightarrow 1, \Delta x$ malé $\Rightarrow e^{-i\omega(n-1)\frac{\Delta x}{c}} \cong 1 - i\omega(n-1)\frac{\Delta x}{c}$

$$e^x \cong 1 + x, x \ll 1$$

$$E = \underbrace{E_0 e^{i\omega(t - \frac{x}{c})}}_{\text{pôvodné pole}} - \underbrace{\frac{i\omega(n-1)\Delta x}{c} E_0 e^{i\omega(t - \frac{x}{c})}}_{\text{pole vyvolané platňou?}}$$

fázový posun

výsledné elektrické pole (vlnu) za platňou môžeme vnímať ako *superpozíciu* pôvodného poľa (bez platne) a akéhosi *poľa vytvoreného platňou* (princíp superpozície umožňuje *výsledné reálne pole* rozložiť na ľubovoľnú *fyzikálne rozumnú kombináciu pomyselných polí*) - v ďalšom postupe hľadáme vlastnosti tohto poľa

pole dopadajúce na platňu ($x = 0$) $E_0 e^{i\omega t}$ pôsobí na elektróny v atómoch *na povrchu* platne – *rozkmitáva* ich (v smere kmitajúceho poľa, tj. *priečne* na smer šírenia dopadajúcej vlny) – dochádza k harmonickým *osciláciám* elektrónov okolo atómových jadier

hmotnosť, výchylka a vlastná frekvencia kmitajúceho elektrónu

$$m \left(\frac{d^2 y}{dt^2} + \omega_0^2 y \right) = F = e E_0 e^{i\omega t} \quad \text{náboj elektrónu}$$

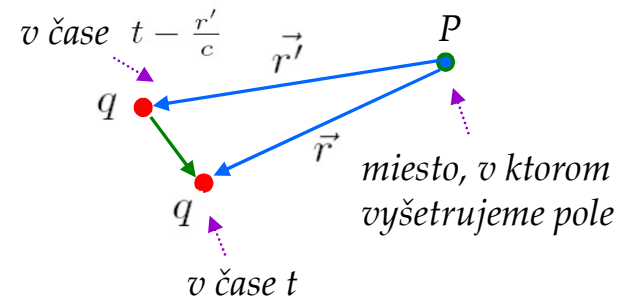
riešenie $\begin{cases} y = y_0 e^{i\omega t} \\ y_0 = \frac{e E_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \end{cases}$

pole „vytvorené“ platňou (pri prechode pôvodnej vlny) je *superpozíciou* polí od *všetkých* rozkmitaných elektrónov

aké je elektrické pole kmitajúceho, resp. pohybujúceho sa náboja? platí Coulombov zákon?

ak sa elektrický náboj pohybuje, „pohybuje sa“ s ním aj elektrické pole, ktoré okolo seba vytvára, tj. pole v danom mieste sa mení s časom, akákoľvek zmena poľa sa však šíri priestorom (ako vlna) *konečnou rýchlosťou* c – do vzdialenosti r od náboja teda „dorazí“ za čas $\frac{r}{c}$, za túto dobu však pohybujúci sa náboj už zmenil svoju polohu

elektrické pole *pohybujúceho sa* náboja v *danom čase a mieste* (\vec{r}) závisí od polohy a pohybového stavu náboja *v čase predchádzajúcom* o dobu potrebnú na prekonanie vzdialenosti medzi miestom náboja v *tom* (predchádzajúcom - *retardovanom*) čase (\vec{r}') a *daným miestom v danom čase* (\vec{r}) rýchlosťou c



$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\vec{r}'}{r'^3} + \frac{r'}{c} \frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{r}'}{r'^3} \right) + \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \frac{\vec{r}'}{r'} \right]$$

ak by $c \rightarrow \infty$ - Coulombov zákon

časové oneskorenie (*retardácia*)

v - rýchlosť zmeny retardovaného poľa

zrýchlenie

1. člen $\sim \frac{1}{r^2}$

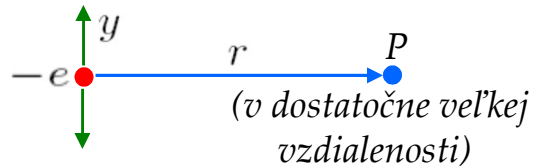
2. člen $\sim \frac{1}{r^2} v$ - korekcia Coulombovho zákona na „predpokladanú“ polohu náboja q v danom

3. člen $\sim \frac{1}{r} a_{\perp}$ - úmerný *priečnemu zrýchleniu* náboja ($\perp \vec{r}$) čas t

1. a 2. člen klesajú s rastúcou vzdialenosťou *rýchlejšie* než 3. člen - na *veľkých* vzdialenostiach sa prejavuje len 3. člen ($\sim \frac{1}{r}$), daný *priečnym zrýchlením* náboja

(priečne) kmitajúci elektrón

priečne zrýchlenie v *oneskorenom* čase



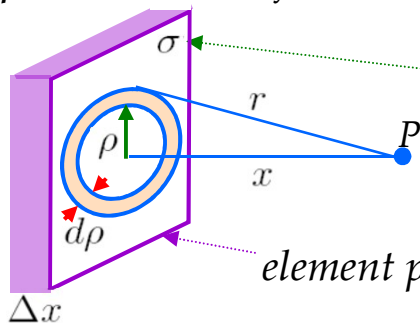
$$E_y(t) = \frac{-e}{4\pi\epsilon_0 c^2 r} a_y \left(t - \frac{r}{c} \right) \quad (\text{vo veľkej vzdialenosti})$$

oneskorený čas (kým dorazí vlna do bodu P)

$$y = y_0 e^{i\omega t} \Rightarrow a_y = -\omega^2 y_0 e^{i\omega t}$$

$$E_y = \frac{e\omega^2 y_0}{4\pi\epsilon_0 c^2 r} e^{i\omega(t - \frac{r}{c})}$$

platňa s kmitajúcimi elektrónmi



plošný náboj platne $\sigma = eN\Delta x$

počet atómov v jedn. objemu (predpokladáme 1 kmitajúci elektrón na každý atóm)

náboj plošného elementu
 $2\pi\rho d\rho\sigma = 2\pi\rho d\rho\Delta x N e$

element plochy $2\pi\rho d\rho$

$$r^2 = \rho^2 + x^2, \quad 2r dr = 2\rho d\rho$$

$$E_{(celk)} = \frac{2\pi\Delta x N e \omega^2 y_0}{4\pi\epsilon_0 c^2} e^{i\omega t} \int_0^\infty \frac{e^{-i\omega \frac{r}{c}}}{r} \rho d\rho = \frac{\Delta x N e \omega^2 y_0}{2\epsilon_0 c^2} e^{i\omega t} \int_x^\infty e^{-i\omega \frac{r}{c}} dr$$

(integrál cez celú plochu) $\rho = 0 \Rightarrow r = x$

$$\int_x^\infty e^{-i\omega \frac{r}{c}} dr = -\frac{c}{i\omega} [e^{-i\infty} - e^{-i\omega \frac{x}{c}}] = -\frac{c}{i\omega} e^{-i\omega \frac{x}{c}}$$

$$\boxed{\frac{1}{i} = -i}$$

$$E = -i \frac{\Delta x N e \omega}{2\epsilon_0 c} y_0 e^{i\omega(t-\frac{x}{c})} \quad \text{dosadením } y_0 \quad E = -i \frac{\Delta x N e^2 \omega E_0}{2\epsilon_0 c m (\omega_0^2 - \omega^2)} e^{i\omega(t-\frac{x}{c})}$$

výraz pre pole „vyvolané platňou“:

$$E = -i \frac{\omega(n-1)\Delta x}{c} E_0 e^{i\omega(t-\frac{x}{c})}$$

index lomu

$$\boxed{n = 1 + \frac{N e^2}{2\epsilon_0 m (\omega_0^2 - \omega^2)}}$$

$n = n(\omega)$ n rastie s ω - *disperzia*
(rozklad)

ak $\omega \ll \omega_0$, n prakticky *nezávisí* od ω

ak $\omega > \omega_0$, $n < 1 \Rightarrow \underline{v_f = \frac{c}{n} > c!}$

hmota ani energia ani signál sa nemôže šíriť rýchlejšie než rýchlosťou c !

neporušená monochromatická vlna nemá začiatok ani koniec, nepredstavuje signál (nenesie informáciu), na prenos signálu treba *nosnú* vlnu *modulovať*, modulácia (aj energia) sa šíri *grupovou* rýchlosťou $v_g (\leq c)$

v reálnom látkovom prostredí existuje útlm (tlmené kmity)

$$(\omega_0^2 - \omega^2) \rightarrow (\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega) \quad \text{- komplexný index lomu (straty energie vlny)}$$

atóm môže mať viacero rezonančných frekvencií ω_i :
$$\underline{n = 1 + \frac{e^2}{2\epsilon_0 m} \sum_i \frac{N_i}{\omega_i^2 - \omega^2 + i\gamma_i \omega}}$$

pre $\omega \rightarrow \omega_i$ oblasti *anomálnej* disperzie - n *klesá* s rastúcou ω

Optické vlastnosti látok

šírenie rovinatej elektromagnetickej vlny (svetla) v látke je popisane vlnovými rovnicami

$$\Delta \vec{E} - \sigma \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\vec{H} \text{ analogicky})$$

v 1D prípade (vlna šíriaca sa v smere x)

s riešením v tvare $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r})e^{i(\omega t - \vec{K} \cdot \vec{r})}$

$$\vec{K} \cdot \vec{r} \rightarrow Kx \quad \Delta \vec{E} \rightarrow \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2}$$

rovnica platí pre **kovy**, **polovodiče** i **dielektriká**, s ohľadom na **veľký rozptyl** hodnôt mernej vodivosti σ pre **supravodiče** je prúdová hustota, vystupujúca v Maxwellových rovniciach, vo všeobecnosti daná superpozíciou jedoelektrónového prúdu (pre ktorý platí Ohmov zákon) a prúdu Cooperových párov (Londonove rovnice) – vo vlnovej rovnici pribudne člen $\frac{\vec{E}}{\lambda^2}$ odpovedajúci supravodivému prúdu

dosadením predpokladaného riešenia do rovnice dostávame

$$-K^2 \vec{E}_0 e^{i(\omega t - Kx)} - i\sigma\mu\omega \vec{E}_0 e^{i(\omega t - Kx)} + \varepsilon\mu\omega^2 \vec{E}_0 e^{i(\omega t - Kx)} = 0$$

vzhľadom na prítomnosť **stratového člena** je vo všeobecnosti vlnový vektor **komplexný**

$$\tilde{K}^2 = \varepsilon\mu\omega^2 - i\sigma\mu\omega = -i\mu\omega(\underbrace{\sigma + i\omega\varepsilon}_{\tilde{\sigma}}) = \mu\omega^2(\underbrace{\varepsilon - i\frac{\sigma}{\omega}}_{\tilde{\varepsilon}})$$

preto je užitočné definovať **komplexné materiálové funkcie**

$$\tilde{\sigma} = \sigma' + i\sigma'' = \sigma + i\omega\varepsilon$$

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon' - i\varepsilon'' = \varepsilon - i\frac{\sigma}{\omega}$$

reálna časť permitivity a **imaginárna časť vodivosti** popisujú schopnosť materiálu sa **polarizovať**, **reálna časť vodivosti** a **imaginárna časť permitivity** popisujú **ohmické straty** v materiáli

v **kvalitných dielektrikách** prakticky **niet voľných** nosičov náboja, $\sigma \rightarrow 0$, permitivita i vlnový vektor sú **reálne**, **stratový** člen vo vlnovej rovnici **vypadne** (podobne ako vo **vákuu**)

materiál možno charakterizovať aj (komplexnou) impedanciou $\tilde{Z} = \frac{E}{H} = \frac{\mu\omega}{\tilde{K}} = \sqrt{\frac{\mu}{\tilde{\epsilon}}}$

$$\tilde{K} = \frac{\omega}{\tilde{v}_f} \quad \tilde{v}_f = \frac{c}{\tilde{n}} \quad \tilde{K} = \frac{\omega}{c} \tilde{n} = \omega \sqrt{\tilde{\epsilon}\mu} \quad c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$$

komplexná fázová rýchlosť komplexný index lomu $\tilde{n} = \sqrt{\mu_r \tilde{\epsilon}_r}$

$$\tilde{n} = n - i\kappa$$

koeficient extinkcie

$$\tilde{n}^2 = \mu_r \tilde{\epsilon}_r = \mu_r \epsilon_r \left(1 - i \frac{\sigma}{\omega \epsilon}\right)$$

$$\tilde{n}^2 = n^2 - \kappa^2 - 2in\kappa$$

$$\left. \begin{array}{l} n^2 - \kappa^2 = \mu_r \epsilon_r \\ n\kappa = \frac{\mu_r \sigma}{2\omega \epsilon_0} \end{array} \right\}$$

$$\kappa^2 = \frac{\mu_r \epsilon_r}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2 \epsilon^2}} - 1 \right)$$

dosadením do riešenia $\vec{E}(x, t) = \vec{E}_0(x) e^{-\frac{\omega\kappa}{c}x} e^{i(\omega t - \frac{\omega\tilde{n}}{c}x)}$ tlmená vlna fázová rýchlosť

reálna časť vlnového vektora i indexu lomu popisujú rýchlosť šírenia vlny v prostredí, imaginárne časti (koeficient extinkcie) útlm (absorpciu) vlny v látke
v bezstratovom prostredí ($\sigma \rightarrow 0$) je $\kappa \rightarrow 0$ a index lomu je reálny

vo všeobecnosti $\tilde{n} = \tilde{n}(\omega)$, $\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}(\omega)$ - disperzia, všeobecnejší názov pre permitivitu je dielektrická funkcia

$$\tilde{\epsilon}(\omega, \tilde{K}) = \frac{\tilde{K}^2}{\mu\omega^2}$$

ak $\epsilon > 0$ (reálne), K je reálne – vlna sa šíri látkou fázovou rýchlosťou $v_f = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}}$

ak $\epsilon < 0$ (reálne), K je imaginárne – vlna sa nešíri látkou (totálny odraz na jej povrchu)

ak ϵ je komplexné, K je komplexné – látkou sa šíri tlmená vlna

kovy

v kovoch platí $\sigma \gg \omega\epsilon$ až do *veľmi vysokých* frekvencií, $\tilde{\sigma} \rightarrow \sigma$, $\tilde{\epsilon} \rightarrow -i\frac{\sigma}{\omega}$

$$\tilde{K}^2 = -i\mu\omega\sigma$$

$$\tilde{K} = (1 - i)\sqrt{\frac{\mu\omega\sigma}{2}} = \frac{1-i}{\delta}$$

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu\omega\sigma}}$$

$$\sqrt{\pm i} = \frac{1 \pm i}{\sqrt{2}} = e^{\pm i\frac{\pi}{4}}$$

$$\underline{\vec{E}(x, t) = \vec{E}_0(x)e^{-\frac{x}{\delta}}e^{i(\omega t - \frac{x}{\delta})}}$$

skinová hĺbka

elektromagnetická vlna (vektory \vec{E} , \vec{H} aj \vec{j}) v kove je *tlmená* s charakteristickou skinovou hĺbkou δ , tj. *zaniká v povrchovej vrstve* o hrúbke $\approx \delta$ - *skin efekt*, koeficient extinkcie $\kappa \rightarrow \frac{c}{\omega\delta}$

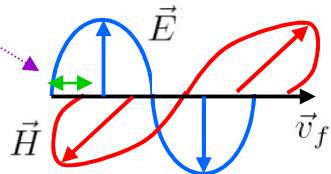
napr. pre meď pri izbovej teplote ($\sigma \approx 10^7 \text{ Sm}^{-1}$, $\mu \cong \mu_0 \approx 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$) je $\delta \approx 10^{-5} \text{ m}$ pri frekvencii 1MHz a *klesá s rastúcou frekvenciou*, pre nízke frekvencie δ *neobmedzene* rastie

v *supravodičoch* existuje obdobný skin efekt, skinová hĺbka s rastúcou frekvenciou klesá od hodnoty magnetickej hĺbky vonku λ pre nulovú frekvenciu

$$\tilde{Z} = \sqrt{\frac{\mu}{\tilde{\epsilon}}} = \sqrt{\frac{i\mu\omega}{\sigma}} = \frac{1+i}{\sigma\delta} = \frac{\sqrt{2}}{\sigma\delta} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

$$e^{\pm i\frac{\pi}{4}} = \cos \frac{\pi}{4} \pm i \sin \frac{\pi}{4} = (1 \pm i) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

člen $e^{i\frac{\pi}{4}}$ vo výraze pre $\tilde{Z} = \frac{E}{H}$ znamená *fázový posuv magnetickej zložky vlny voči elektrickej* o $\frac{\pi}{4}$



koeficient odrazu látky (pri kolmom dopade)

$$R = \frac{E'}{E} = \left| \frac{\tilde{n}-1}{\tilde{n}+1} \right| \quad n_{\text{vzduch}} = 1$$

(pozri Fresnelove vzorce)

pre kovy $|\tilde{n}| \gg 1 \Rightarrow R \rightarrow 1$, takmer všetko svetlo sa *odráža* – povrch je *lesklý* (matný povrch kovu je len dôsledkom jeho drsnosti)

„volné“ vodivostné elektróny v kove **nemôžu absorbovať** svetlo (fotóny)

ak **volná častica** s rýchlosťou v_0 pohltí fotón, zmení sa jej rýchlosť na v , pritom platí **zákon zachovania energie aj hybnosti**:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2}mv_0^2 + \hbar\omega &= \frac{1}{2}mv^2 &\Rightarrow m(v - v_0) &= \frac{2\hbar\omega}{v+v_0} \\ mv_0 + \frac{\hbar\omega}{c} &= mv &\Rightarrow m(v - v_0) &= \frac{\hbar\omega}{c} \end{aligned} \right\} \underline{v + v_0 = 2c} \quad \boxed{a^2 - b^2 = (a - b)(a + b)}$$

ak pred zrážkou $v_0 < c$, potom po zrážke $v > c$ (alebo naopak) – **nezmysel!**

„volné“ vodivostné elektróny v kove **môžu odrážať** fotóny

v kvantovej fyzike „odraz“ fotónu znamená jeho **pohltenie a následné vyžiarenie**, pričom doba medzi oboma procesmi Δt určuje podmienku neurčitosti energie $\Delta W \Delta t \geq \hbar$ (Heisenbergov princíp neurčitosti), tj. „**presnosť zachovania**“ energie
pohltenie fotónu s energiou $\hbar\omega < \frac{\hbar}{\Delta t}$ ($\omega \Delta t < 1$) teda **neznamená porušenie** zákona zachovania energie

elektrická zložka elektromagnetickej vlny $E = E_0 e^{i\omega t}$ urýchľuje „volné“ elektróny kovu

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE \quad x = x_0 e^{i\omega t} \quad x_0 = \frac{eE_0}{m\omega^2}$$

kmitajúci elektrón (okolo rovnovážnej polohy) predstavuje kmitajúci **dipólový moment**

$$p = -ex \quad P = -Nex = -\frac{Ne^2 E_0}{m\omega^2} e^{i\omega t} \quad \begin{array}{l} \text{počet volných elektrónov v jedn. objeme} \\ \text{(tj. objemová koncentrácia (obvykle značená } n)) \end{array}$$

$$\epsilon_r = n^2 = 1 + \chi = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E} = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m\omega^2} \quad \mu_r \cong 1 \quad \begin{array}{l} \text{pre optické frekvencie} \\ \text{(v nemagnetických látkach)} \end{array}$$

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m}} \quad \text{elektrónová} \\ \text{plazmová frekvencia}$$

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

ak $\omega < \omega_p$, potom $n^2 < 0$, $K^2 < 0$ (n a K imaginárne) - svetlo sa **odráža** od povrchu

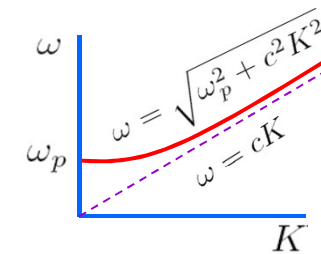
ak $\omega > \omega_p$, potom $n^2 > 0$, $K^2 > 0$ (n a K reálne) - svetlo sa **láme** na povrchu a **prechádza** do látky

v kovoch $N \approx 10^{30}$ v 1m^3 (1 elektrón na atóm, pri vzdialenosti atómov v mriežke $\approx 10^{-10}\text{m}$) $\Rightarrow \frac{\omega_p}{2\pi} \approx 10^{17}\text{Hz}$ - pre všetky **optické** frekvencie nastáva odraz, RTG lúče prechádzajú kovmi

$$\epsilon(\omega, K) = \frac{K^2}{\mu\omega^2}, \quad \epsilon = \epsilon_0\epsilon_r, \quad \mu \cong \mu_0$$

$$\omega^2 = \omega_p^2 + c^2 K^2$$

disperzný vzťah



v **kovoch** (vodičoch) vložených do **statického** (v čase sa nemeniaceho) vonkajšieho elektrického poľa je **pole vo vnútri kovu nulové** - vonkajšie pole je kompenzované poľom povrchového náboja

pri **pomalej** zmene vonkajšieho poľa sa pohyblivé vodivostné elektróny okamžite preskupia tak, aby $E = 0$ vo vnútri kovu - elektromagnetická vlna nie príliš vysokej frekvencie sa **nemôže šíriť kovom**

za čas t prejde elektrón urýchlený vonkajším poľom E_{ext} vzdialenosť $x = \frac{1}{2}at^2 = \frac{eE_{ext}}{2m}t^2$

N elektrónov (na jedn. objemu) tak vytvorí pole (povrchového náboja) $E_{int} = \frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{Nex}{\epsilon_0} \cong \frac{Ne^2 E_{ext} t^2}{m\epsilon_0}$

polia sú **vykompenzované** ($E_{int} = E_{ext}$) pre $\frac{1}{t^2} = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} = \omega_p^2$, tj. pre frekvenciu, resp. periódu vonkajšieho poľa platí

$$\omega^2 = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2 < \omega_p^2$$

ak $\omega > \omega_p$, elektróny „nestíhajú“ kompenzovať zmeny vonkajšieho poľa, elektromagnetická vlna môže v kove existovať – šíriť sa

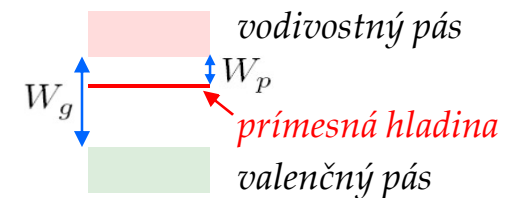
ak $\omega \rightarrow \omega_p$, $K \rightarrow 0$, $\lambda \rightarrow \infty$, $n = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rightarrow 0$, vlna sa nešíri prostredím, všetky náboje kmitajú rovnako na tejto frekvencii a vo fáze (najnižší mód vlastných kmitov) – tzv. plazmové kmity

dielektriká

elektromagnetická vlna (svetlo) preniká dielektrikami, k absorpcii fotónov viazanými elektrónmi dochádza ak sú dovolené stavy pre ich rozptyl neobsadené ak nedochádza k absorpcii, látka je priesvitná a číra

napr. šírka zakázaného pásu v kryštáli NaCl je $W_g \approx 6\text{eV}$, viditeľné svetlo ($\hbar\omega < 4\text{eV}$) preniká kryštálom bez absorpcie

prímesi v dielektrikách vytvárajú prímesné hladiny v zakázanom páse, fotóny s frekvenciou $\hbar\omega = W_p$ sa pohlcujú – odpovedajúce zložky (farby) svetla chýbajú v prechádzajúcom svetle – látka je farebná (v bielom svetle)



elektrická zložka elektromagnetickej vlny rozkmitáva viazané elektróny v dielektriku

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} + kx = -eE_{lok}$$

koeficient tlmenia (časť kinetickej energie sa mení na teplo) koeficient väzby elektrónu na atóm

$$E_{lok} = E_{0lok} e^{i\omega t}$$

$$E_{lok} = -\frac{Nex}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{\chi} + \frac{1}{3} \right)$$

$$\begin{cases} E_{lok} = E + \frac{P}{3\epsilon_0} E_L \\ E = \frac{P}{\epsilon_0 \bar{\chi}} \\ P = -Nex \end{cases}$$

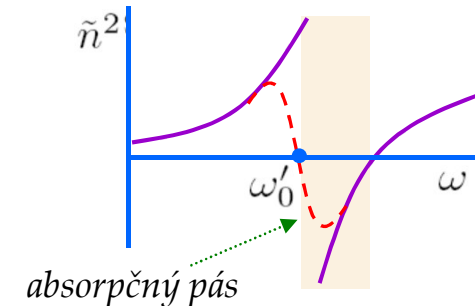
dipólový moment

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \left(\frac{1}{\tilde{\chi}} + \frac{1}{3} \right) x \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad \text{riešenie v tvare } x = x_0 e^{i\omega t}$$

$$-\omega^2 + i\omega\gamma + \omega_0^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \left(\frac{1}{\tilde{\chi}} + \frac{1}{3} \right) \Rightarrow \tilde{\chi} = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0(\omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3m\epsilon_0} - \omega^2 + i\omega\gamma)}$$

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_r} = \sqrt{1 + \tilde{\chi}} = \sqrt{1 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0(\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma)}}, \quad (\mu_r \cong 1)$$

$$\omega_0'^2 = \omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3m\epsilon_0} \quad \text{vlastná (rezonančná) frekvencia kmitajúceho elektrónu}$$



pre látky s **malým** indexom lomu $n \rightarrow 1$ platí

$$1 \gg \frac{Ne^2}{m\epsilon_0(\omega_0'^2 - \omega^2 + i\omega\gamma)} \Rightarrow n \cong 1 + \frac{Ne^2}{2m\epsilon_0(\omega_0'^2 - \omega^2 + i\omega\gamma)}$$

$$(1 + x)^{\frac{1}{2}} \cong 1 + \frac{1}{2}x + \dots, \quad x \ll 1$$

(výsledok z kap. Prechod elmag. vlny látkou)

pre $\omega \rightarrow \omega_0'$ je $\omega\gamma \gg \omega_0'^2 - \omega^2 (\rightarrow 0)$ - oblasť **anomálnej disperzie** (n klesá s rastúcou ω)
 - v okolí rezonančnej frekvencie existuje **absorpčný pás** - oblasť **rezonančného pohlcovania** elektromagnetickej vlny (napr. pre sklo je ω_0' v ultrafialovej oblasti), látka môže mať **viacero** absorpčných pásov

pre frekvencie nie príliš blízke ω_0' môžeme imaginárny člen zanedbať (predpokladáme malé γ)

pre $\omega < \omega_0'$ je $n^2 > 1$ - oblasť **normálnej disperzie** (index lomu **rastie** s frekvenciou), $v_f < c$
 - výchylky (tj. polarizácie atómov) sledujú budenie (sú **vo fáze**) a nimi spôsobené **dodatočné** polarizačné pole **zmenšuje** vonkajšie elektrické pole (**zmenšuje** sa „spätná sila“ polarizovaných atómov)

(pokračovanie)

pre $\omega > \omega'_0$ je $0 < n^2 < 1$ - oblasť *normálnej* disperzie (index lomu *rastie* s frekvenciou), $v_f > c$ - výchyľky (polarizácie atómov) „nestíhajú“ sledovať budenie (sú *v protifáze*), vzniknuté polarizačné pole *zosilňuje* vonkajšie elektrické pole (*zväčšuje* sa „spätná sila“ polarizovaných atómov)

pre ($0 <$) $\omega^2 - \omega'^2_0 < \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}$ je $n^2 < 0$ ($K^2 < 0$) - *tlmená* (exponenciálna) vlna - oblasť *anomálnej* disperzie (index lomu *klesá* s frekvenciou)

podmienka $n^2 = 0$, $K^2 = 0$ je splnená pre $\omega^2 = \omega'^2_0 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} = \omega'^2_0 + \omega_p^2$ - prostredím sa vlna *nešíri*, prostredie *kmitá vlastnými charakteristickými* kmitmi

pozn.: v prostredí s *voľnými* nábojmi - *plazme* alebo kove je $\omega'^2_0 \rightarrow 0$ a teda dolná hraničná frekvencia pre šírenie elektromagnetickej vlny je $\omega_{kr} = \omega_p$ (odtiaľ názov *plazmová frekvencia*)

model tlmeného harmonického oscilátora je klasickým priblížením, pôvod rezonančných pásov je v *dovolených kvantovomechanických prechodoch elektrónov* v atómoch *do vyšších energetických hladín* pri pohltení fotónu

v *polovodičoch* je pri optických frekvenciách $\hbar\omega \approx W_g$. valenčné elektróny pohltením svetla prechádzajú do vodivostného pásu a zvyšujú vodivosť materiálu

fotobunka – svetlocitlivý polovodič zapojený v elektrickom obvode - pri osvetlení je *dobře vodivý*, po prerušení osvetlenia sa stáva prakticky *nevodivým* – prúd v obvode sa *preruší*

foto(voltaický) článok – pn-prechod zapojený do vonkajšieho elektrického obvodu so záťažou (prvkom, ktorý odoberá a premieňa elektrickú energiu), pri osvetlení vznikajú voľné majoritné nosiče náboja v oboch typoch polovodiča a na ich rozhraní *kontaktné napätie*, ktoré je zdrojom elektrického prúdu do obvodu (záťaže)

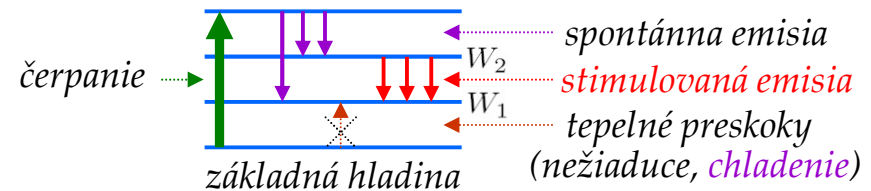
lasery

inverzný stav – TD nerovnovážny stav, pri ktorom sú *vyššie* energetické hladiny elektrónov W_2 *početnejšie obsadené* než nižšie (alebo základné) hladiny W_1 , dosahujeme ho tzv. *čerpaním* – dodaním potrebnej energie (napr. ožiarením, bombardovaním, elektrickými pulzami, a pod.)

pri interakcii elektrónu na *vyššej* energetickej hladine W_2 s fotónom s energiou $\hbar\omega = W_2 - W_1$ nastáva *pri inverznom stave* preskok elektrónu na *nižšiu* hladinu W_1 a *stimulovaná emisia* fotónu *rovnakej frekvencie* – *zdvojnásobenie* počtu fotónov - *zosilnenie* svetla

(ak *neexistuje* inverzný stav, tj. ak sú *početnejšie obsadené nižšie* hladiny, *pravdepodobnejším* procesom je *pohltenie* fotónov pri preskoku elektrónov na *vyššie* hladiny – *zoslabenie* svetla)

4-hladinový laser – ľahko dosiahnuteľný inverzný stav medzi hladinami W_1 a W_2 (už pri nie príliš intenzívnom čerpaní)



čím viac fotónov *s rovnakou fázou* sa nachádza v systéme, tým viac ich elektromagnetické pole podnecuje emisiu fotónov *s tou istou fázou* – *laserové žiarenie je koherentné*

zosilňovače elektromagnetického žiarenia na princípe stimulovanej emisie existujú aj v *mikrovlnnej* oblasti spektra - *masery*

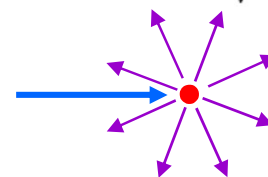
rozptyl svetla, optický vzhl'ad látok

intenzita žiarenia - energia prenášaná jednotkovou plochou za jednotku času

$$\frac{\text{energia}}{\text{plocha} \cdot \text{čas}} \text{ - odpovedá Poyntingovmu vektoru } \langle |\vec{S}| \rangle = \varepsilon_0 c \langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z_0} \langle E^2 \rangle$$

$$(\varepsilon_0 c = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} = \frac{1}{Z_0})$$

energia elektromagnetickej vlny dopadajúcej na atómy látky sa rozptyľuje na všetky strany v dôsledku žiarenia rozkmitaných elektrónov v atómoch – rozptyl



pole vyvolané kmitajúcim nábojom
zrýchlenie a výchylka náboja

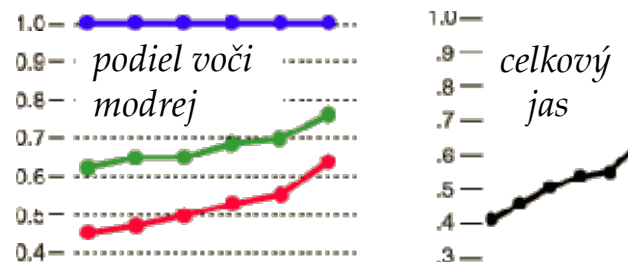
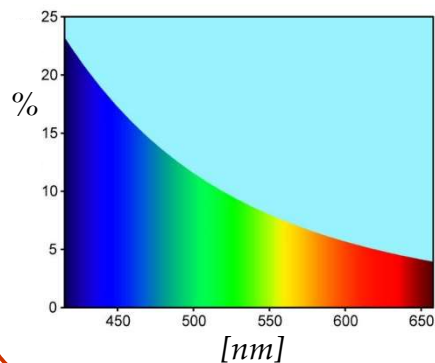
$$E \sim a \quad y = y_0 e^{i\omega t} \Rightarrow a_y = -\omega^2 y_0 e^{i\omega t} \sim \omega^2 \Rightarrow \underline{S \sim \omega^4}$$

intenzita rozptýleného žiarenia

vlnenie vyššej frekvencie sa rozptyľuje *oveľa viac* než vlnenie nižšej (Rayleighov rozptyl)

farba oblohy

obloha v smere k Slnku je **biela**, s narastajúcim odklonom od tohto smeru narastá podiel **modrej** farby - fialový koniec spektra sa rozptyľuje do všetkých strán *oveľa viac* ($\sim (\frac{\omega_{fial}}{\omega_{cerv}})^4$) než červený



(pokračovanie)

pri prechode hrubou vrstvou rozptyľujúceho prostredia (napr. svetlo prichádzajúce z horizontu pri západe slnka) je žiarenie ochudobnené o (viac sa rozptyľujúce) zložky s vyššou frekvenciou - obloha je **červená**



zhluky atómov pri sebe (napr. kvapky vody) zvyšujú rozptyľ (aj pre nižšie ω) – **biele** oblaky, hmla

farba predmetu – je určená **farbou svetla** dopadajúceho na predmet, **vlastnosťami predmetu** vzhľadom na odrazené, resp. prechádzajúce svetlo (rozptyľ, absorpcia) a **subjektívnym vnemom** (v prípade žeravého telesa o jeho farbe rozhoduje aj jeho teplota)

látkam **homogénnym na rozmeroch výrazne prevyšujúcich vlnové dĺžky viditeľného svetla** možno priradiť index lomu, ktorý o.i. určuje množstvo svetla odrazeného od makroskopického povrchu aj prechádzajúceho do látky, a použiť zákonitosti **geometrickej optiky** (zákony odrazu a lomu) (pojmy **odrazené** a **prechádzajúce** svetlo sú **fikcie** (použiteľné len v rámci geometrickej optiky) – v skutočnosti sú len výslednicami interferencie svetla generovaného **všetkými vrstvami homogénnej látky** (vid' Interferencia a difrakcia))

látky, ktoré **neabsorbujú žiadnu zložku** viditeľného spektra **prechádzajúceho** svetla, sa nám javia ako **číre** (priehľadné bezfarebné) – pri pohľade naň vnímame (popri **odrazenom** svetle od povrchu) svetlo **prechádzajúce** látkou (tj. vychádzajúce z predmetov ležiacich za skúmanou čírou látkou)

látky, ktoré **absorbujú niektorú zložku** viditeľného spektra prechádzajúceho svetla, sa nám javia ako **priehľadné farebné**

častice o veľkostiach **porovnateľných** s vlnovými dĺžkami viditeľného svetla (alebo aj väčšie) v čírej látke (napr. voda) **rozptyľujú** prechádzajúce svetlo, ktoré tým stráca „geometrickú informáciu“

(pokračovanie)

o predmetoch, z povrchu ktorých vychádza – daná látka sa nám javí ako *biela nepriehľadná* (napr. mlieko) – striktné delenie svetla na odrazené a prechádzajúce *stráca zmysel* (*nehomogenita* prostredia bráni úplnej deštruktívnej interferencii svetla z *vnútorných vrstiev* látky)

podobný efekt nastáva na *zmatnenom* povrchu čírej látky (napr. sklo) – matný povrch vzniká zdrsnením – pozostáva z malých plôšok *náhodnej orientácie* (rozptyl smerov odrazu i lomu) – „geometrická informácia“ sa stráca v odrazenom i lomenom svetle

podobný je rozdiel aj medzi *čírym* kryštálom kuchynskej soli a *bielou* rozdrvenou soľou

Michal Maheľ

FYZIKA III.

Mikrosvet a kvantová fyzika

Makroskopické systémy

Vydavateľ:

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK

Knižničné a edičné centrum

Bratislava 2022

1. vydanie

Dielo je vydané pod medzinárodnou licenciou Creative Commons CC BY-NC-ND 4.0 (vyžaduje sa: povinnosť uvádzať pôvodného autora diela; len nekomerčné použitie; žiadne odvožené diela). Viac informácií o licencií a použití diela: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>



ISBN:

978-80-8147-119-3