

Projekt KEGA

Vyučovanie fyziky programovaním modelov fyzikálnych javov
a pomocou interaktívneho softvéru

Modelovanie javov v kvantovej mechanike



Róbert Andrásy
Jozef Hanč

Košice 2008

Autori: RNDr. Jozef Hanč, PhD.

Róbert Andrásy

Preprint 2008 (L^AT_EXverzia)

Moderné informačno-komunikačné technológie a status preprintu tejto publikácie nám dovoľuje obrátiť sa s prosbou na našich kolegov, spolupracovníkov v oblasti didaktiky fyziky a nielen v nej o zaslanie svojich komentárov a názorov, resp. upozornení na zistené chyby a nedostatky.

Na základe tejto širšej spätnej väzby bude možné v časovom horizonte jeden rok a za nižších nákladov pripraviť, resp. rozšíriť tento preprint do akceptovateľnejšej a kvalitnejšej formy a obsahu v porovnaní so štandardným publikovaním. Informácie o presnom dátume prvého vydania žiadajte na emailovej adrese <jozef.hanc@upjs.sk>.

Prírodovedecká fakulta

Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice

© Jozef Hanč, Róbert Andrásy, 2008

Táto publikácia vznikla s príspevom grantovej agentúry MŠ SR KEGA v rámci projektov 3/3005/05 *Vyučovanie fyziky programovaním modelov fyzikálnych javov a pomocou interaktívneho softvéru* a 3/4320/06 *Interaktívne prednáškové demonštrácie a Peer Instruction - nové interaktívne metódy zvyšujúce efektívnosť prednáškovej formy vzdelávania*.

Všetky práva vyhradené. Žiadna časť tohto dokumentu nemôže byť žiadnym médiom reprodukována a prenášaná bez písomného súhlasu autorov. Autorský kolektív bezplatne poskytne písomné dovoľenie vyhotoviť alebo distribuovať doslovný opis tohto dokumentu alebo jeho časti akýmkoľvek médiom za predpokladu, že bude zachované oznámenie o coryrighte a oznámenie o povolení a že distribútor príjemcovi poskytne povolenie na ďalšie šírenie, a to v rovnakej podobe, v akej ho dostane od autorov.

Obsah

Úvod	3
1 Feynmanova formulácia kvantovej mechaniky a jej aplikácie	6
1.1 Základné pojmy formulácie a kvantový biliard	6
1.2 De Broglieho vlny a monochromatický zdroj	13
1.3 Schrödingerova rovnica	19
2 Modelovanie získaných výsledkov v EJS	22
2.1 Fyzikálny princíp počítačového modelovania	22
2.2 Implementácia v prostredí EJS s ilustračným príkladom	23
Záver	27
Literatúra	29
Zoznam príloh	31
A. Odvodenie de Broglieho vlny pomocou vyššej matematiky	32
B. Štandardný postup pri postulovaní Schrödingerovej rovnice	36
C. Easy Java Simulations	38
D. Aproximácia goniometrických funkcií pomocou geometrie	40

Úvod

Kvantová mechanika sa zaoberá popisom pre nás neviditeľného mikrosveta atómov, molekúl a elementárnych častíc hmoty. Jej základy vybudovali v prvej tretine 20. storočia takí významní fyzici ako Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr, Louis de Broglie, Erwin Schrödinger, či Werner Heisenberg.

Kvantová teória vniesla do fyziky prvok náhody a indeterminizmu, pretože sa ukázalo, že klasický popis polohy pomocou trajektórie a rýchlosti objektov pre mikročastice nefunguje. Vyšlo najavo, že elementárne častice hmoty v skutočnosti nie sú ani časticami ani vlnami. Sú to jednoducho kvantové objekty, ktorých správanie sa vymyká našej bežnej skúsenosti a predstavám. To nám však nebráni toto podivné správanie úspešne popísať pomocou pravidiel kvantovej mechaniky.

Napriek tomu, že sa fyzici museli vzdať spomínaného klasického popisu pohybu častíc pomocou veličín poloha a rýchlosť, prax ukázala, že kvantová mechanika je jednou z najpresnejších vedeckých teórií, aké naša civilizácia vytvorila. Svedčí o tom napr. porovnanie¹ teoreticky určenej prahovej hodnoty vlnovej dĺžky ultrafialového svetla, ktoré už spôsobí ionizáciu atómu hélia, 50.4259310 ± 0.0000020 nm, s experimentálne určenou hodnotou 50.4259299 ± 0.0000004 nm. V rámci neurčitosti merania a výpočtu ide o excelentnú zhodu.

Pre laikov—nefyzikov to znie až neuveriteľne, že s aplikáciami kvantovej mechaniky sa stretávame prakticky každý deň. Táto teória položila základy modernej elektroniky, nanotechnológií, fyziky materiálov či fyzikálnej chémie. Je dôležitým článkom vo vysvetlení vývoja hviezd. Na kvantovej mechanike spočíva fungovanie osobných počítačov, mobilných telefónov, laserov a mnoho ďalších elektronických zariadení. Jednou z aplikácií kvantovej mechaniky je aj zobrazovanie pomocou jadrovej magnetickej rezonancie (MRI), ktorá má nesmierny význam v medicíne.

Z prehľadového článku Styer et al. (2002) sa dozvedáme, že v priebehu 20. storočia bolo vytvorených 9 formulácií kvantovej mechaniky². Medzi najznámejšie patrí

¹Podľa knihy D. Styera (Styer, 2000).

²Heisenbergova, Schrödingerova, Feynmanova, Wignerova, formulácia pomocou matice hustoty,

Schrödingerova, Heisenbergova a Feynmanova. Každá z nich zachytáva jedinečný matematický popis jednej a tej istej fyzikálnej teórie. Jednotlivé formulácie sú nielen matematicky ekvivalentné, ale sa navzájom aj dopĺňajú — kde jedna matematicky príliš komplikuje riešenie problému, iná môže postup značne zjednodušiť.

Feynmanova formulácia bola vypracovaná v roku 1942 geniálnym fyzikom i učiteľom Richardom P. Feynmanom. Táto teória sa nazýva tiež amplitúdová kvantová mechanika, keďže jej základným (primitívnym) pojmom je kvantová amplitúda. Má však aj mnoho iných názvov, ktoré sa odvíjajú od jej hlavnej myšlienky sumácie cez všetky trajektórie, napr. „metóda súčtu cez všetky dráhy“, „metóda súčtu cez všetky histórie“ či „metóda dráhových integrálov“. Matematický aparát Feynmanovej formulácie, metóda dráhových integrálov, má rozsiahle aplikácie aj v kvantovej chromodynamike, štatistickej fyzike, teórii tuhých látok, fyzike polymérom, teórii chaosu či dokonca vo finančnej matematike.

Vďaka významnu a všestrannému využitiu sa Feynmanov prístup stáva štandardným už aj vo vysokoškolských učebniciach kvantovej mechaniky, napr. v USA sa bežne v úvodných kurzoch používa kniha R. Shankara *Principles of Quantum Mechanics* (Shankar, 1994), v európe vyšla učebnica H. J. W. Müller-Kirstena *Introduction to Quantum Mechanics: Schrödinger Equation And Path Integral* (Kirsten, 2006) a v Čechách je Feynmanov prístup zakomponovaný v novej edícii učebníc J. Formánka *Úvod do kvantové teorie I.,II.* (Formánek, 2004).

Feynmanov prístup z pohľadu didaktiky fyziky

Napriek tomu vo väčšine dnes dostupných učebníc kvantovej mechaniky Feynmanovu teóriu nenájdeme. Dôvodom je predstava, že Feynmanov prístup je matematicky veľmi náročný, preto hlavná pozornosť sa vo výučbe stále upriamuje na Schrödingerovu formuláciu. Za posledných 15 rokov však didaktika kvantovej mechaniky s využitím modelovania a simulácií na osobných počítačoch pokročila natoľko (Taylor, 1998; Styer, 2000; Ogborn, 2000, 2001; Hanč, 2005), že hlavné myšlienky Feynmanovej kvantovej mechaniky je možné podať študentom s využitím iba elementárnej (stredoškolskej) algebry a geometrie³.

Z didaktického hľadiska je hlavnou výhodou Feynmanovej formulácie matematická jednoduchosť základných pojmov a princípov, pomocou ktorých je možné formulácia druhého kvantovania, variačná formulácia, formulácia pomocou de Broglieho vln-pilotov, Hamiltonova-Jakobiho formulácia.

³Ako ukazuje doterajší didaktický výskum vo vyššie uvedených publikáciách, vďaka tomu môžu základy kvantovej mechaniky preberať neformálne študenti už v nižších ročníkoch VŠ ako to bolo doteraz a to dokonca s vyšším konceptuálnym porozumením a lepšou fyzikálnou intuíciou.

uskutočniť mnoho kvalitatívnych predpovedí a získať oveľa lepší fyzikálny cit pre správanie sa kvantových objektov ako pri tradičnej výučbe kvantovej mechaniky.

V prípade Schrödingerovej formulácie, ak má študent rozumieť tomu, ako vyplývajú výsledky z použitej teórie, je priam nemožné vyhnúť sa teórii a poznatkom diferenciálneho, integrálneho počtu a diferenciálnych rovníc. Matematizácia a abstraktnosť potom sťažuje chápanie študentom do takej miery, že podrobný prieskum (Singh, Belloni, Christian, 2006) napr. na amerických vysokých školách ukázal, že až 71% študentov po absolvovaní klasického kurzu kvantovej mechaniky⁴ nevedelo správne popísať, kedy je možné použiť bezčasovú Schrödingerovu rovnicu.

V kvantovej mechanike nie je možné uskutočňovať experimenty priamo počas vyučovania tak jednoducho ako vo výučbe klasickej fyziky. Preto je v súčasnosti neodmysliteľnou súčasťou výučby kvantovej mechaniky, a to aj Feynmanovej formulácie, použitie počítačov. Interaktívny softvér dokáže do značnej miery nahradiť reálne experimenty. Navyše použitím počítačového modelu môžeme experiment mnohokrát opakovať za rôznych počiatočných podmienok. Súčasný softvér pre Feynmanovu formuláciu však pochádza zväčša z konca 90. rokov, a teda je už zastaralý, prípadne nefunguje na všetkých platformách (Taylor, 2000; Hanč, 2005).

Práca je rozdelená na dve kapitoly. V prvej kapitole sú stručne sformulované základné pojmy a myšlienky Feynmanovho prístupu na jednoduchom ilustračnom príklade, ktorý sme nazvali kvantový biliard. Nasleduje vysvetlenie, ako vyplývajú de Broglieho vlny z Feynmanovej formulácie. Z lokálneho popisu de Broglieho vlny odvodíme elementárnym geometrickým spôsobom s využitím Pytagorovej vety bezčasovú Schrödingerovu rovnicu pre voľné častice a heuristicky ju rozšírime na prípad častíc v nenulovom potenciáli.

V druhej kapitole získané fyzikálne poznatky aplikujeme pri počítačovom modelovaní — vytvorení java appletu v prostredí EJS, ktorý bude hľadať vlastné hodnoty energie viazaných stavov v prakticky ľubovoľnom jednorozmernom potenciáli a to matematicky nenáročným numerickým riešením bezčasovej Schrödingerovej rovnice založenom na numerickej metóde nazývanej metóda strelby.

Nakoniec je práca doplnená prílohami pre matematicky erudovaného čitateľa z vysokoškolským vzdelaním, v ktorých nájde zodpovedajúce odvodenia s využitím vyššej matematiky a taktiež aj stručný popis EJS s odkazmi na podrobnejšie materiály. Prílohy A, B však nie sú nutné na pochopenie jadra práce, ktoré je použiteľné vo výučbe na špeciálnych seminároch vyšších ročníkov SŠ.

⁴Ide o kurzy na úrovni minimálne zodpovedajúcej štandardnému kurzu kvantovej mechaniky tretích ročníkov našich popredných univerzít, napr. PF UPJŠ alebo FMFI UK.

Kapitola 1

Feynmanova formulácia kvantovej mechaniky a jej aplikácie

1.1 Základné pojmy formulácie a kvantový biliard

V didaktike kvantovej mechaniky cez Feynmanovu formuláciu prelomový krok urobil sám autor formulácie, R.P. Feynman, keď vytvoril sériu štyroch prednášok, formulovaných pre úplných laikov. Odprednášal ich v roku 1979 na Novom Zélande a v roku 1985 vyšli aj v knižnej podobe (Feynman, 1985).



Obr. 1.1: Richard P. Feynman

Vďaka tejto útlej knižke sa vyformoval v priebehu 90. rokov minulého storočia prúd didaktikov, ktorých súčasným cieľom je ukázať študentom na úrovni úvodného kurzu všeobecnej fyziky hlavné myšlienky kvantovej mechaniky, t.j. bez použitia

náročnej matematiky a vysokej miery abstrakcie. Ako príklad môžeme uviesť kurzy E. F. Taylora, *Demystifying Quantum Mechanics* (Taylor, 2000), J. Ogborna, *Advancing Physics* (Ogborn, 2000, 2001), alebo D. F. Styera, *The Strange World of Quantum Mechanics* (Styer, 2000).

V týchto kurzoch Taylor, Ogborn a Styer ukázali, že aplikovaním ich prístupu je možné sa zamerať hlavne na fyzikálnu stránku preberanej problematiky a zbytočne neodvádzať pozornosť študentov používaním abstraktnej matematiky. Samozrejme, v pokročilejších kurzoch sa študent nakoniec bude musieť oboznámiť s matematickou teóriou, avšak na jej pozadí už bude vidieť fyzikálnu interpretáciu daného problému.

V tejto kapitole sa pokúsime stručne¹ sformulovať základné pojmy a princípy Feynmanovej formulácie kvantovej mechaniky.

Kvantový biliard

Kvôli lepšej predstave začneme ilustračným príkladom na reálnom fyzikálnom systéme. Pri sformulovaní využijeme spôsob prezentácie ako je v knihách Styer (2000); Ogborn (2000, 2001), ktorý v svojej pôvodnej podobe pre laikov navrhol Feynman (Feynman, 1985).

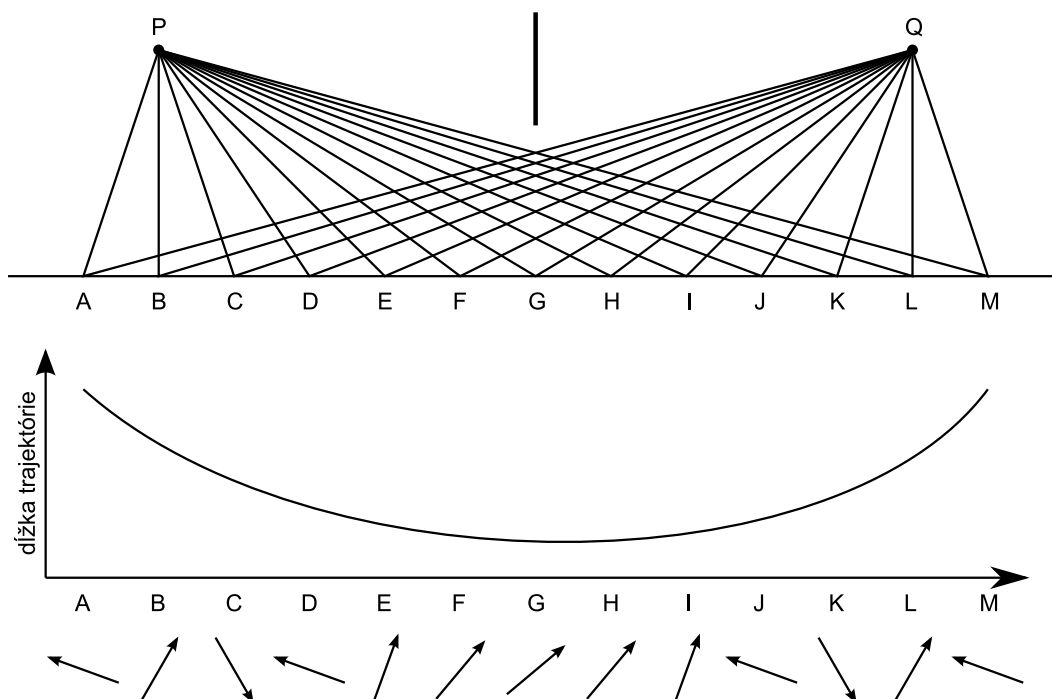
Náš myšlienkový experiment je znázornený na obr. 1.2. Dlhá vodorovná čiara označená bodmi A, B, ..., M predstavuje vyleštený kovový povrch, vedľa ktorého je umiestnený zdroj elektrónov v bode P. Nepoužijeme však „obyčajný“ zdroj, ale špeciálny, tzv. monochromatický zdroj. O ňom sa čitateľ viac dozvie v kapitole 1.2, tu nám zatiaľ stačí vedieť, že všetky elektróny vyslané takýmto zdrojom budú mať rovnakú kinetickú energiu a tým aj rovnakú hybnosť. Elektróny vyletujúce zo zdroja sa budú odrážať od povrchu kovu a registrovať ich budeme detektorom v bode Q. Aby sme im zabránili letieť priamo z P do Q, umiestnili sme medzi zdroj a detektor prekážku, znázornenú zvislou čiarou.

Otázka, ktorá nás zaujíma, znie: „Ako sa odráža elektrón od kovovej steny podľa kvantovej mechaniky? Inými slovami ako vlastne vyzerá kvantový biliard?“

Ak si predstavíme elektrón ako malú guľôčku, správajúcu sa podľa zákonov klasickej fyziky, tak jedinou možnou dráhou od zdroja k detektoru je tá, ktorá sa dotýka kovovej platničky v bode G a platí pre ňu zákon dopadu a odrazu². Z pohľadu klasickej fyziky vieme jasne povedať po akej trajektórii a akou rýchlosťou daný elektrón

¹Didakticky detailne spracované úvody k Feynmanovej kvantovej mechaniky možno nájsť vo vyššie spomenutých kurzoch, resp. v ich slovenskej mutácii (Hanč, 2005).

²Tento zákon je dôsledkom fundamentálnych Newtonových zákonov.



Obr. 1.2: Kvantový biliard.

išiel. Buď elektrón trafi detektor a my ho zaregistrujeme³, alebo ak by bol elektrón vyslaný smerom k „stene biliardového stola“ pod iným uhlom, tak nie je žiadna šanca zachytiť ho v nami uloženom detektore.

V kvantovej mechanike, ako to ukázali fyzikom starostlivo vykonané experimenty, kľúčovým je poznatok, že *výsledky akéhokoľvek experimentu (javu v prírode) nemôžno vo všeobecnosti presne predpovedať*. Vieme vypočítať, resp. zmerať len pravdepodobnosti ich nastatia. T.j. z pohľadu kvantovej fyziky má zmysel len otázka: s akou pravdepodobnosťou nastane jav — elektrón je vyžiarený z monochromatického zdroja v P, dopadne na stenu A,..., M a zaregistruje ho potom detektor v Q. Takúto pravdepodobnosť v kvantovej mechanike vypočítavame na základe šípok, ktoré nazývame kvantové amplitúdy.

Ako vyzerá výpočet pravdepodobnosti pomocou týchto kvantových amplitúd? V prípade kvantovej mechaniky, ako obrazne tvrdí Taylor (Taylor, 1998), „*elektrón, ktorý neprekypuje žiadnou inteligenciou, nemôže vedieť nič o ... Schrödingerovej parciálnej diferenciálnej rovnici. Elektrón je tak tupý, že si pri svojom pohybe nemôže vedieť vybrať jednu dráhu. Potrebuje jednoduchšie inštrukcie ... Feynman stojí rozkročmo ponad Vesmír a vydáva trojslovnú inštrukciu. Je taká jednoduchá, že ju*

³Kvôli jednoduchosti predpokladáme detektor so 100% účinnosťou.

dokáže pochopiť každá častica: Preskúmaj všetky dráhy! Častice sú tak slabomyseľné, že si nedokážu vybrať len jednu dráhu, takže ich radšej preskúmajú všetky.“

Teda z pohľadu Feynmanovej kvantovej mechaniky musíme pre pohyb elektrónu uvažovať vždy všetky možné dráhy, ako je to v hornej časti obr. 1.2. Každý z dráh alebo zo spôsobov, ktorým môže daný jav prebehnúť, je v kvantovej mechanike priradená šípka, ktorú, ako sme spomenuli, nazývame *kvantová amplitúda*. Je určená svojou veľkosťou a uhlom, ktorý zvierá s istým význačným (pevne zvoleným) smerom, napr. vodorovným smerom (smer osi x).

V našom prípade môžeme veľkosti všetkých šípok považovať za rovnaké⁴ a ako neskôr ukážeme, pre uhol jednotlivých šípok platí

$$\begin{pmatrix} \text{uhol} \\ \text{šípky} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \text{dĺžka} \\ \text{trajektórie} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \text{hybnosť} \\ \text{elektrónu} \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

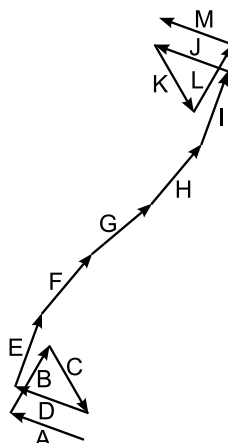
Vďaka tomu, že sme použili monochromatický zdroj, hybnosti na všetkých trajektoriách, ktoré skúma elektrón, sú rovnaké. Uhol šípky tak závisí iba na dĺžke trajektórie elektrónu. Táto závislosť dĺžky trajektórie a tým aj uhla šípok na polohe bodu odrazu je kvalitatívne znázornená na dolnej časti obr. 1.2. Všimnime si, že v okolí bodov A, B, C a K, L, M sa šípky otáčajú veľmi rýchlo, zatiaľ čo v okolí bodu G len pomaly.

Spomenutý princíp „Preskúmaj všetky dráhy“ však ani zďaleka nepripomína poriadok, či zákonitosti, na ktoré sme zvyknutí pri popise častíc v klasickej fyzike. V úvode tejto práce sme spomenuli, že kvantová teória je jedna z najpresnejších teórií, preto sa vynára otázka, akým spôsobom môže dávať kvantovomechanický princíp mikrosвета rozumné predpovede?

Vo Feynmanovej formulácii tento trojslovný príkaz pre všetky mikročastice má matematicky presný súvis so spomenutými šípkami: *prechodu elektrónu zo zdroja v P do detektora v Q je priradená jedna výsledná šípka, ktorej druhá mocnina veľkosti určuje pravdepodobnosť tohto prechodu*. A táto výsledná šípka je súčtom šípok pre všetky alternatívne spôsoby (niektoré sú vyznačené na obr. 1.2), ktorými sa elektrón môže dostať z P do Q.

Šípky sa sčítavajú veľmi jednoducho — rovnako ako vektory, obr. 1.3. Je zrejmé, že v oblastiach, kde sa šípky otáčajú rýchlo, je ich súčet malá šípka. Preto šípky

⁴V skutočnosti v prípade monochromatického zdroja sú nepriamo úmerné dĺžke dráhy. V našom prípade to spôsobuje len jemné rozdiely, ktoré je možné ignorovať. Z fyzikálneho hľadiska však nerobíme žiadne skreslenie alebo zjednodušenie. Rovnako postupujeme aj všeobecne, akurát je výsledok číselne presnejší. Navyše sa tu obmedzíme na dvakrát lomené dráhy, ako je to v obrázku. Viac lomené dráhy, alebo krivky by opäť len spresnili výsledok, ale nezmenili fyzikálnu podstatu problému.



Obr. 1.3: Súčet šípok A, B, ..., M.

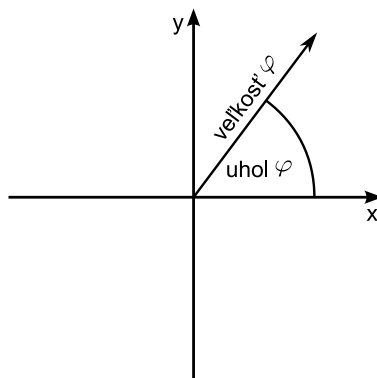
pre dráhy A, B, C a K, L, M sa prakticky zrušia a hlavný príspevok k výslednej šípke budú mať len dráhy blízke k dráhe G — dráhe vyhovujúcej zákonu odrazu a dopadu. Výslednú pravdepodobnosť úmernú druhej mocnine výslednej šípky teda určujú hlavne šípky dráh, pre ktoré približne platí zákon dopadu a odrazu.

Toto je kvantovo-mechanický pohľad na zákon odrazu. V mikrosvete nemá elektrón iba jednu možnosť, ako sa odraziť do detektora. Platí tento popis aj pre reálne biliardové gule? Zdá sa, že v ich prípade by výsledok popieral platnosť klasickej mechaniky. V skutočnosti to tak nie je, zákony kvantovej mechaniky v situáciách, kde sú pre nás bežné hmotnosti, časy, vzdialenosti dávajú rovnaké výsledky, ako zákony klasickej fyziky.

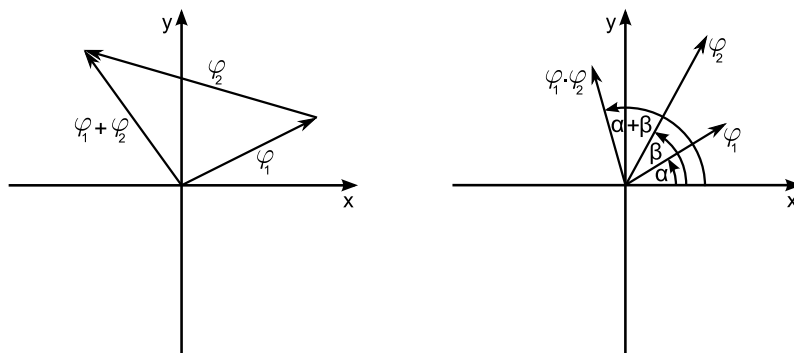
Ako k tomu dôjde v našom príklade biliardu? Pri napísaní úmery (1.1) sme nehovorili nič o konštante úmernosti, od ktorej veľkosti závisí hrúbka zväzku dráh okolo dráhy G. Jej číselná hodnota je približne 10^{34} , čo má za následok, že v prípade reálnych gúl je spomínaný zväzok dráh okolo bodu G extrémne úzky. Použijúc experimentálnu aparatúru pre nás bežných rozmerov — biliardový stôl — budeme pozorovať jedinou dráhu, a to tú, ktorá splňa klasický zákon odrazu.

Základné pravidlá Feynmanovej formulácie

Nakoniec si zhrnieme a upresníme pravidlá a princípy kvantovej mechaniky. Pojem kvantový prechod považujeme za fundamentálny pojem Feynmanovej formulácie kvantovej mechaniky. Chápeme ho ako zmenu stavu kvantového systému s presne určenými začiatočnými i koncovými podmienkami. Napríklad prechod elektrónu z bodu A a času t_A do bodu B a času t_B je kvantový prechod.

Obr. 1.4: Kvantová amplitúda φ znázornená pomocou šípky.

Každému kvantovému prechodu je priradená šípka⁵, ktorú nazývame kvantová amplitúda a je určená svojou veľkosťou (dĺžkou) a uhlom.⁶ Pod uhlom kvantovej amplitúdy rozumieme uhol medzi kladnou polosou x a smerom, do ktorého ukazuje daná kvantová amplitúda, obr. 1.4. Veľkosť kvantovej amplitúdy φ budeme označovať výrazom „veľkosť φ “ a jej prislúchajúci uhol výrazom „uhol φ “.



Obr. 1.5: Súčet (vľavo) a súčin (vpravo) kvantových amplitúd.

Pre kvantové amplitúdy (šípky) definujeme operácie súčtu a súčinu. Súčet kvantových amplitúd je definovaný rovnako, ako súčet vektorov. Súčinom amplitúd φ_1 , φ_2 nazývame šípku $\varphi_1 \cdot \varphi_2$, ktorej veľkosť je rovná súčinu veľkostí šípok φ_1 a φ_2 , a ktorej uhol sa rovná súčtu uhlov šípok φ_1 a φ_2 . Obidve operácie sú ilustrované na obr. 1.5.

Pre kvantové amplitúdy postulujeme nasledovné pravidlá:

⁵Presnejšie komplexné číslo, ktoré môžeme reprezentovať ako šípku, resp. vektor.

⁶V reči komplexných čísel veľkosť šípky zodpovedá modul komplexného čísla a smerovému uhlu argument komplexného čísla.

1. **Pravidlo výpočtu pravdepodobnosti.** Pravdepodobnosť nastania kvantového prechodu, ktorému prislúcha amplitúda φ , je (veľkosť φ)².
2. **Pravidlo skladania (superpozície).** V prípade, že istý kvantový prechod môže nastať dvoma (viacerými) alternatívnymi spôsobmi, ktorým prislúchajú amplitúdy φ_1, φ_2 , tak pre amplitúdu tohoto prechodu platí $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2$.
3. **Pravidlo postupného násobenia (sekvenčnej faktorizácie).** Ak sa nejaký kvantový prechod skladá z dvoch (viacerých) po sebe idúcich prechodov, ktorým prislúchajú amplitúdy φ_1, φ_2 , tak pre amplitúdu tohoto prechodu platí $\varphi = \varphi_1 \cdot \varphi_2$.

Z uvedených pravidiel je zrejmé, že kvantová mechanika sa diametrálne odlišuje od klasickej fyziky. Zatiaľ čo v klasickej dynamike vieme jednoznačne rozhodnúť, či kameň dopadne alebo nedopadne do daného miesta, v kvantovej mechanike podľa prvého pravidla to nie je možné. Dokážeme určiť len pravdepodobnosť s akou dopadne elektrón do daného miesta, resp. vo všeobecnosti pravdepodobnosť nastatia kvantového prechodu.

Druhé a tretie pravidlo nám naznačuje ešte zvláštnejšiu črtu Feynmanovej formulácie, ktorá sa úplne prieči „zdravému rozumu“. Zachytáva ju už spomenutý Feynmanov trojslovný príkaz, ktorý Feynman spresnil do nasledovného postulátu:

Feynmanov postulát: Každá častica prechádza z jedného bodu do druhého súčasne všetkými principiálne možnými spôsobmi, pričom uhol kvantovej amplitúdy pre každý možný spôsob pohybu častice medzi týmito bodmi je daný výrazom⁷:

$$\begin{pmatrix} \text{uhol šípky} \\ \text{pre každú} \\ \text{dráhu} \end{pmatrix} = 2\pi \cdot \frac{1}{h} \cdot \begin{pmatrix} \text{rozdiel priemernej} \\ \text{kinetickej a potenciálnej} \\ \text{energie na dráhe} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \text{doba} \\ \text{prechodu} \\ \text{po dráhe} \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

kde $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$ sa nazýva Planckova konštanta.

V klasickej dynamike vieme jasne určiť, čo sa dialo alebo akým spôsobom nastal prechod kameňa medzi dvoma udalosťami. Inými slovami vidíme trajektóriu telesa, alebo ju vieme vypočítať napr. pomocou Newtonových zákonov. Podľa Feynmanovho postulátu v kvantovej mechanike je to opäť principiálne nemožné, pretože do úvahy pripadajú všetky.

⁷ Ako ukážeme v ďalšej časti, výraz (1.1) použitý pri kvantovom biliarde je dôsledkom, špeciálnym prípadom, tohto výrazu.

1.2 De Broglieho vlny a monochromatický zdroj

V tejto a nasledujúcej časti budeme aplikovať Feynmanovu formuláciu kvantovej mechaniky na prípady — De Broglieho vlna a Schrödingerova rovnica, ktoré neboli doteraz nikým transformované do jednoduchého jazyka Feynmanovej formulácie, resp. didakticky zakomponované do výučby Feynmanovej kvantovej mechaniky na konceptuálnej úrovni, aká je v kurzoch (Taylor, 2000; Ogborn, 2000; Styer, 2000).

Začiatkom 20. storočia bolo známe, že pre energiu a vlnovú dĺžku fotónov platia vzťahy

$$E = hf, \tag{1.3}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{1.4}$$

kde E je energia, f frekvencia, λ vlnová dĺžka a p relativistická hybnosť fotónu. Konštanta h , vystupujúca v oboch vzťahoch, je známa Planckova konštanta. Experimentálne bolo dokázané, že fotóny sa niekedy prejavujú ako častice (fotoelektrický jav, Comptonov rozptyl) a inokedy ako vlny (interferencia, difrakcia).



Obr. 1.6: Louis de Broglie

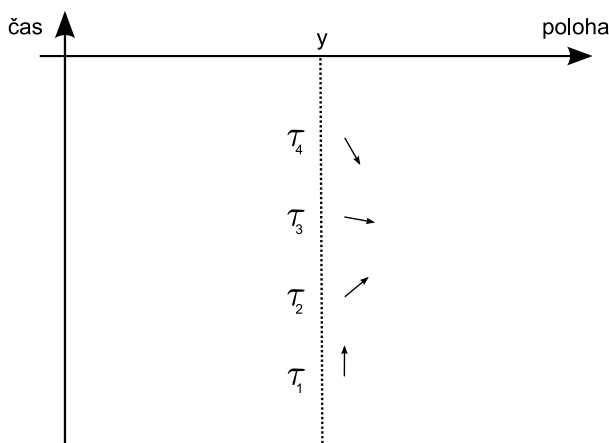
V roku 1923 sformuloval francúzsky fyzik Louis de Broglie hypotézu, podľa ktorej nielen fotónom prislúchajú vlnové a časticové vlastnosti, ale každej elementárnej častici je možné priradiť vlnu s vlnovou dĺžkou

$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{1.5}$$

kde h je Planckova konštanta a p je relativistická hybnosť častice.

O dva roky neskôr, v roku 1925, bola táto hypotéza experimentálne potvrdená pozorovaním interferencie elektrónových vln C. H. Davisonom a L. H. Germerom.

Predstavme si teraz špeciálny zdroj elektrónov, taký, pre ktorý sa šípka — amplitúda vyžiarovania elektrónu otáča rovnomerne v smere hodinových ručičiek s frekven-



Obr. 1.7: Rovnomerná rotácia kvantovej amplitúdy emisie elektrónu.

ciou f , obr. 1.7.⁸ V tejto časti práce ukážeme, že v prípade elektrónov emitovaných takýmto zdrojom je existencia de Broglieho vln priamym dôsledkom Feynmanových postulátov. Vedľajším produktom nasledujúcej úvahy bude zistenie, že všetky emitované elektróny majú rovnakú energiu, t.j. náš „špeciálny“ zdroj je monochromatický a nami zvolený popis nie je ničím iným ako Feynmanovským popisom monochromatického zdroja.

Kvôli jednoduchosti sa budeme zaoberať len jednorozmerným prípadom. Zavedieme taktiež predpoklad, že emitované elektróny sú voľné, t. j. nepôsobia na ne žiadne sily.⁹ Naším cieľom je pomocou Feynmanových pravidiel stanoviť kvantovú amplitúdu („šípku“) $\psi(x, t)$ detekcie elektrónu v ľubovoľnom mieste x pre pevne zvolený čas t , obr. 1.8.

V akom čase τ mohol byť elektrón emitovaný zdrojom? Podľa princípu „Preskúmaj všetky trajektórie!“ nemáme dôvod uprednostňovať žiaden konkrétny čas τ ! Musíme uvažovať všetky¹⁰ možné $\tau < t$.

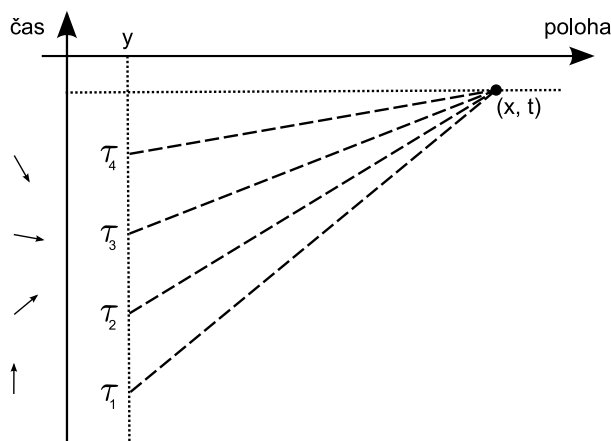
Popíšme teraz jednu konkrétnu alternatívu, ktorou môže náš experiment nastať, napr. možnosť s emisiou elektrónu zo zdroja (ktorého poloha nech je y) v nejakom čase τ , pričom detektor je na pravej strane od zdroja, t.j. $x > y$. Zavedme si efektívnejšie označenie $T = t - \tau > 0$, $r = x - y > 0$, $\omega = 2\pi f$ a $\hbar = h/2\pi$.

Zavedené veličiny majú samozrejme aj fyzikálny význam. Doba T určuje „ako

⁸Ak označíme šíпку emisie elektrónu symbolom $A(t)$, tak platí $A(t) \sim \exp\{-i\omega t\}$, $\omega = 2\pi f$.

⁹Táto aproximácia je prijateľná, ak elektróny sú v priestore rozložené štatisticky rovnomerne, takže na ne pôsobiace sily sa kompenzujú.

¹⁰Predpokladáme, že zdroj začal vyžarovať elektróny omnoho skôr, ako sme ho začali pozorovať, t.j. $\tau \rightarrow -\infty$.



Obr. 1.8: Niekoľko možných spôsobov prechodu elektrónu z (y, τ_i) do (x, t) , šípky znázorňujú kvantovú amplitúdu emisie elektrónu v danom čase τ_i .

dávno“ pred okamihom detekcie bol elektrón emitovaný, r je vzdialenosť od zdroja k detektoru, ω je uhlovou frekvenciou rotačného pohybu šípky emisie a \hbar je konštanta nazývaná taktiež Planckova konštanta.

Podľa definície monochromatického zdroja pre uhol amplitúdy emisie elektrónu rotujúcej v smere hodinových ručičiek v čase $\tau = t - T$ platí

$$\begin{pmatrix} \text{uhol šípky} \\ \text{emisie, ozn. } A(T) \end{pmatrix} = -\omega\tau = \omega(T - t). \quad (1.6)$$

Výsledná amplitúda pre všetky možné prechody elektrónu vyžiareného dobu T pred detekciou v našom detektore, tzv. propagátor pre voľnú časticu, má uhol daný takým istým vzťahom ako je (1.2), pričom stačí uvažovať priamu trajektóriu medzi zdrojom a detektorom ako je to na obr. 1.8. Je ľahké vidieť, že uhol propagátora súvisí s r a T prostredníctvom vzťahu¹¹

$$\begin{pmatrix} \text{uhol šípky} \\ \text{prechodu, ozn. } K(r, T) \end{pmatrix} = \frac{m r^2}{2\hbar T}. \quad (1.7)$$

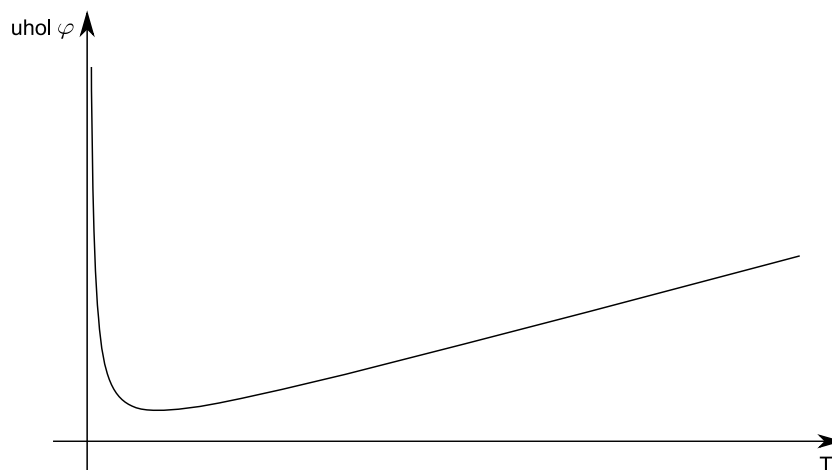
Emisia elektrónu a jeho prechod do miesta detekcie tvorí zloženú udalosť, ktorej amplitúdu určíme podľa tretieho pravidla postupného násobenia ako súčin amplitúd obidvoch podudalostí

$$\varphi(T) = \begin{pmatrix} \text{amplitúda emisie} \\ \text{elektrónu v čase } \tau \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \text{amplitúda prechodu} \\ \text{elektrónu z } (x, t) \text{ do } (y, \tau) \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

¹¹V skutočnosti je tento uhol o $\pi/4$ menší, ale v ďalšom výpočte sa táto „nepresnosť“ fyzikálne nijak neprejaví. Zmení to len obrázky — všetky šípky budú pootočené o spomínaný uhol $\pi/4$, t.j. dĺžky šípok zostanú tie isté a tým aj pravdepodobnosti, ktoré z týchto dĺžok rátame.

Podľa druhého pravidla o skladaní hľadaná výsledná amplitúda potom bude súčtom amplitúd pre všetky spôsoby

$$\psi = \sum_{\text{všetky } T > 0} \varphi(T). \quad (1.9)$$



Obr. 1.9: Priebehu funkcie uhol $\varphi(T)$.

Ak vykonáme súčin naznačený v (1.8), uhly amplitúd $A(T)$ a $K(r, T)$ sa sčítajú a dostaneme

$$\left(\begin{array}{c} \text{uhol} \\ \text{pre } \varphi(T) \end{array} \right) = \frac{m r^2}{2\hbar T} + \omega T - \omega t, \quad (1.10)$$

kde pripomíname, že okamih detekcie t je fixovaný. Tvar tejto funkcie je pre nás dôležitý. Kvalitatívny náčrt jej priebehu je na obr. 1.9. Vidíme, že ide o funkciu s jedným globálnym extrémom.¹² Pre aké T nastane jej minimum?

Minimum môžeme ľahko nájsť pomocou derivácie, ale v tomto prípade je možné diferenciálny počet obísť, ak využijeme stredoškolskú algebraickú úpravu — úpravu kvadratického výrazu na štvorec. Upravme teda pravú stranu rovnice (1.10) na štvorec

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} \text{uhol} \\ \text{pre } \varphi(T) \end{array} \right) &= \frac{m r^2}{2\hbar T} - 2\sqrt{\frac{mr^2}{2\hbar T}}\sqrt{\omega T} + \omega T + 2\sqrt{\frac{mr^2}{2\hbar T}}\sqrt{\omega T} - \omega t \\ &= \left(\sqrt{\frac{m r^2}{2\hbar T}} - \sqrt{\omega T} \right)^2 + \sqrt{\frac{2mr^2\omega}{\hbar}} - \omega t. \end{aligned} \quad (1.11)$$

¹²Funkciu $\varphi(T)$ definujeme len pre $T > 0$, pretože záporné T by znamenalo fyzikálne neprípustnú situáciu — elektrón by bol neskôr vyžiarený ako detekovaný.

Odtiaľto je už jasne vidieť, že minimum funkcie $\varphi(T)$ nastane, keď prvý člen bude nulový (pretože druhý a tretí sú konštanty nezávisiace na T), resp. keď je splnená podmienka

$$\frac{m}{2\hbar} \frac{r^2}{T_{\min}} = \omega T_{\min}. \quad (1.12)$$

Jednoduchou úpravou dostaneme vzťah

$$\frac{1}{2}m \left(\frac{r}{T_{\min}} \right)^2 = \hbar\omega = hf \equiv E. \quad (1.13)$$

Pre výraz hf sme zaviedli označenie E , pretože má rozmer energie. V prípade splnenia tejto podmienky pre uhol amplitúdy $\varphi(T)$ navyše platí

$$\left(\begin{array}{c} \text{minimálny uhol} \\ \text{pre } \varphi(T) \end{array} \right) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\hbar\omega} r - \omega t. \quad (1.14)$$

Ak využijeme práve zavedený symbol E a označíme $p \equiv \sqrt{2mE}$, kde p má rozmer hybnosti, tak nakoniec dostaneme

$$\left(\begin{array}{c} \text{minimálny uhol} \\ \text{pre } \varphi(T) \end{array} \right) = \frac{1}{\hbar} (pr - Et). \quad (1.15)$$

O akú energiu E a hybnosť p však ide? Majú tieto formálne zavedené veličiny a minimálny uhol pre $\varphi(T)$ nejaký fyzikálny význam?

Odpoveď je kladná s nasledovnou interpretáciou. Uvedomme si, že v našom prípade je hľadaná výsledná šípka $\psi(x, t)$ podľa pravidla skladania použitého v rovnici (1.9) súčtom šípok $\varphi(T)$. Potom podobne ako v prípade kvantového biliardu veľké zmeny hodnôt uhla $\varphi(T)$ predstavujú veľké zmeny v smeroch skladajúcich šípok, alebo inak povedané rýchle otáčanie šípok, čo vedie k tomu, že sa tieto šípky v súčte (1.9) navzájom vyrušia (deštruktívna interferencia). Oстане malý interval časov T , v tesnej blízkosti minima funkcie uhol $\varphi(T)$, resp. doby emisie T_{\min} (obr.1.9), kde šípky ukazujú viac-menej tým istým smerom a nastáva konštruktívna interferencia.

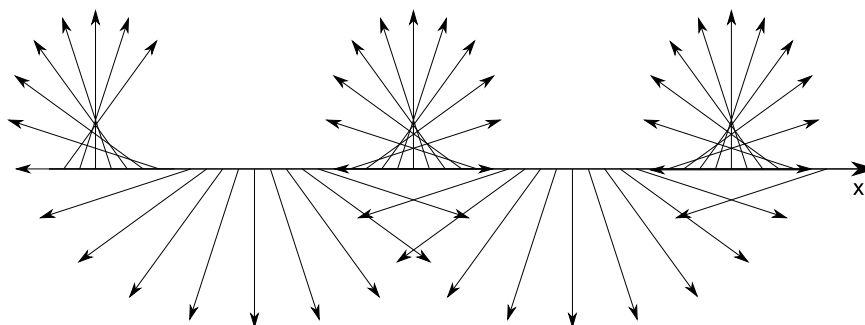
Parametre výslednej amplitúdy $\psi(x, t)$ určujúcej pravdepodobnosť nájdenia elektrónu v bode x a v čase t sú tak dané jedine amplitúdou s minimálnym uhlom, resp. amplitúdami pre veľmi blízke doby emisie, t.j. vďaka interferencii

$$\left(\begin{array}{c} \text{uhol} \\ \text{pre } \psi(x, t) \end{array} \right) \sim \frac{1}{\hbar} (pr - Et). \quad (1.16)$$

Minimálny uhol emisie pritom zodpovedá alternatíve nastatia experimentu, kde sa elektrón medzi zdrojom a detektorom pohybuje po trajektórii s konštantnou

kladnou¹³ rýchlosťou $v = r/T_{\min} = p/m$. Dôsledkom konštruktívnej a deštruktívnej interferencie sa nám teda javí, že elektrón dorazil zo zdroja do detektora po priamej trajektórii rovnomerným pohybom s energiou E určenou podmienkou (1.13) a zodpovedajúcou hybnosťou $p = \sqrt{2mE}$, pretože spôsoby s inými energiami, resp. hybnosťami sa interferenciou rušia. Vyššie spomenutá hodnota energie musí byť pritom energia dodávaná zdrojom. Zo vzťahu $f = E/h$ je potom jasné, prečo sa amplitúda emisie elektrónu musela otáčať proti smeru hodinových ručičiek (energia voľnej častice nemôže byť záporná).

Vďaka interferencii nastane aj to, že výsledná amplitúda $\psi(x, t)$ nezávisí na polohe x . Možno sa presvedčiť o tom jednoducho experimentovaním, ak amplitúdy skladá počítač vo vhodnom programe. Alebo priamo výpočtom s využitím vyššej matematiky (viď Príloha A), kde dostaneme pre veľkosť hodnotu nezávisiacu od x . Odvodenie cez integrálny počet navyše potvrdzuje naše úvahy, že uhol pre $\psi(x, t)$ je naozaj daný vzťahom (1.16).



Obr. 1.10: Priestorový vývoj amplitúdy ψ , znázornenej pomocou šípok.

Obrázok 1.10 je grafickým zobrazením nami získaných výsledkov. Z obrázku možno vidieť, že pravdepodobnosť zachytenia elektrónu v priestore v pevne zvolenom čase t vyslaného z monochromatického zdroja je konštantná, pretože je to druhá mocnina konštatnej dĺžky amplitúd $\psi(x, t)$. Ďalej vidíme, že obrazec, ktorý vytvárajú kvantové amplitúdy, sa opakuje, čo je situácia typická pre vlny. Možno teda hovoriť o vlnovej dĺžke λ , ktorú nájdeme veľmi jednoducho — ak sa x zväčší o λ , tak uhol ψ sa musí zmeniť o 2π , teda

$$2\pi = \left(\begin{array}{c} \text{uhol} \\ \text{pre } \psi(x + \lambda, t) \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{uhol} \\ \text{pre } \psi(x, t) \end{array} \right) = \frac{p\lambda}{\hbar}. \quad (1.17)$$

¹³T.j. v kladnom smere osi x .

Odtiaľ máme $\lambda = 2\pi\hbar/p = h/p$, čo je známy de Broglieho vzťah (1.5). Preto množina zobrazených šípok, amplitúd $\psi(x, t)$, dostala v kvantovej mechanike názov *de Broglieho vlna*.

Čo sa týka časovej závislosti, tak len člen $-Et$ spôsobuje, že šípka v danom mieste s časom rovnomerne rotuje, pričom jej veľkosť ostáva stále konštantná. Z pravidla pre výpočet pravdepodobnosti tak vyplýva, že v čase sa pravdepodobnosť nájdenia elektrónu v priestore nemení, a takéto stavy sa preto nazývajú *stacionárne*.

Na záver pripomenieme, že sme uvažovali zdroj uložený naľavo od regiónu, kde zachytávame elektróny. Ak by to bolo opačne, zopakovaním našej úvahy by sme opäť dostali de Broglieho vlnu s jediným rozdielom. Hybnosť elektrónov by bola opačná t.j. $-p$.

1.3 Schrödingerova rovnica

Z klasickej fyziky i bežnej skúsenosti vieme, že na napnutej strune môžu vznikáť a šíriť sa vlny. Jeden zo spôsobov ich popisu je zadanie výchylky y ako funkcie $y = f(x, t)$ polohy x a času t . Napríklad $y = \sin(kx - \omega t)$ popisuje vlnu, ktorá v danom čase má po určitej vzdialenosti, vlnovej dĺžke, stále ten istý tvar. V štandardnom kurze teórie vln je iným spôsobom ich popisu diferenciálny popis vlny v pružnom prostredí, tzv. vlnová rovnica.

V prípade kvantovej mechaniky sme v rámci Feynmanovej teórie ukázali tzv. De Broglieho hypotézu: kvantová amplitúda akejkoľvek voľnej častice vyžiarenej z monochromatického zdroja je popísaná de Broglieho „vlnou“, t.j. takou množinou šípok, kde sa obrazec kvantovej amplitúdy opakoval tiež po určitej vzdialenosti. Preto vzniká prirodzene otázka, či v analógii s vlnami neexistuje „vlnová rovnica“ pre kvantovú amplitúdu.

Na túto otázku kladne zodpovedal v roku 1926 Erwin Schrödinger, ktorý našiel diferenciálnu vlnovú rovnicu pre kvantovú amplitúdu popisujúcu de Broglieho vlny a ďalej ju rozšíril na prípad častice v ľubovoľnom potenciáli. V jednorozmernom prípade má táto rovnica pre stacionárny stav tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.18)$$

kde m je hmotnosť častice, $V(x)$ jej potenciálna energia a E jej celková energia a $\psi(x, t)$ je množina kvantových amplitúd v danom čase nazývaná *vlnová funkcia*.

Podme teraz bez diferenciálnych rovníc ukázať ako vo Feynmanovom obraze kvantovej mechaniky „vzniká“ bezčasová Schrödingerova rovnica (1.18) popisujúca

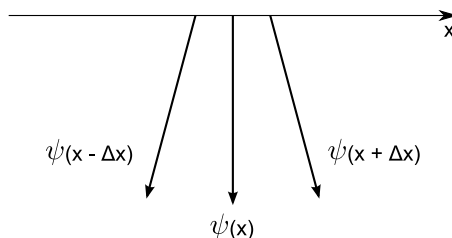
stacionárne stavy častíc, príkladom ktorého pre voľnú časticu bola de Broglieho vlna.

V kapitole venovanej de Broglieho vlnám sme vlastne našli globálny popis vlnovej funkcie prislúchajúcej elektrónom emitovaným monochromatickým zdrojom, pri ktorom bolo jasne vidieť, že amplitúda ψ sa s narastajúcim x rovnomerne otáča proti smeru hodinových ručičiek. Za tých istých predpokladov teraz nájdeme lokálny¹⁴ popis de Broglieho vlny.

Zamerajme sa teda na lokálny popis de Broglieho vlny, inými slovami na veľmi malú oblasť v okolí bodu x v nejakom pevne zvolenom čase¹⁵ Znázorníme si tri šípky, prislúchajúce amplitúdam $\psi(x - \Delta x)$, $\psi(x)$ a $\psi(x + \Delta x)$, obr. 1.11.¹⁶

Pre uhol ε medzi šípkami platí podľa (1.16) vzťah

$$\varepsilon = \frac{p}{\hbar} \Delta r = \frac{p}{\hbar} \Delta x \quad (1.19)$$



Obr. 1.11

Aby sme našli geometrický vzťah medzi uvažovanými troma šípkami, ktorých veľkosť je v de Broglieho vlně rovnaká, stotožníme ich začiatky a doplníme ich na rovnobežník, obr. 1.12. Využitím elementárnej trigonometrie z tohto obrázka už ľahko vidieť, že pre tieto tri šípky platí

$$\psi(x - \Delta x) + \psi(x + \Delta x) = 2\psi(x) \cos(\varepsilon). \quad (1.20)$$

Pripomeňme, že Δx je veľmi malé, teda aj ε musí byť malý uhol. V takomto prípade môžeme použiť približný vzťah¹⁷ pre funkciu $\cos \varepsilon$

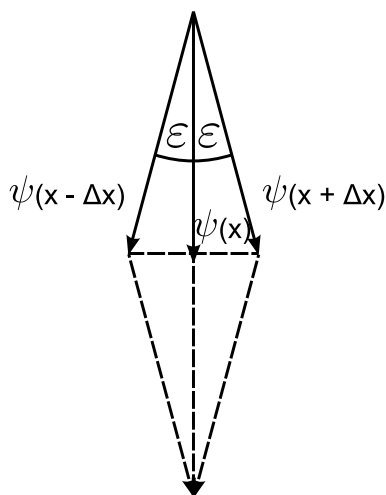
$$\cos \varepsilon \approx 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} = 1 - \frac{1}{2} \frac{p^2}{\hbar^2} \Delta x^2. \quad (1.21)$$

¹⁴Pri použití diferenciálneho počtu by sme dospeli k diferenciálnej rovnici. Pozri prílohu B.

¹⁵Keďže nás zaujíma len priestorová závislosť šípk, tento čas nebudeme vypisovať.

¹⁶Prečo práve tri? Nestačili by napr. dve? Podobným postupom by sme aj pre dve šípky dostali rovnicu popisujúcu vlny. Avšak takto získaná rovnica by nepopisovala de Broglieho vlny s opačnou hybnosťou, u ktorých ψ rotuje opačným smerom s narastajúcim x . Chceme nájsť len jednu rovnicu, jeden fyzikálny zákon, postačujúci pre popis všetkých vln. Zákon, ktorý dostaneme analýzou troch susedných šípk bude mať túto vlastnosť.

¹⁷Zdôvodnenie tohto vzťahu len na základe Pytagorovej vety je v Prílohe D.



Obr. 1.12

Po dosadení do (1.20) a jednoduchej úprave dostaneme

$$\psi(x + \Delta x) = 2\psi(x) - \psi(x - \Delta x) - \frac{p^2 \Delta x^2}{\hbar^2} \psi(x). \quad (1.22)$$

Tento vzťah možno vyjadriť aj pomocou kinetickej energie elektrónu, ktorá je zviazaná s hybnosťou vzťahom $p^2 = 2mE$. V takom prípade dostávame:

$$\psi(x + \Delta x) = 2\psi(x) - \psi(x - \Delta x) - \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} E\psi(x) \quad (1.23)$$

Získaná rovnica sa nazýva *bezčasová Schrödingerova rovnica pre voľnú časticu* v diferencnom tvare, vhodnom na počítačové modelovanie.¹⁸

Túto rovnicu môžeme heuristicky rozšíriť na prípad častice v poli síl s potenciálnou energiou častice $V(x)$. Vieme, že na dostatočne malom okolí bodu x je $V(x)$ približne konštantná. Potom na každom takomto okolí môžeme elektrón považovať za voľnú časticu, pre ktorú platí rovnica (1.23). Kinetická energia častice je teraz $E - V(x)$. Nahradíme preto energiu E v rovnici (1.23) energiou $E - V(x)$

$$\psi(x + \Delta x) = 2\psi(x) - \psi(x - \Delta x) - \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi(x). \quad (1.24)$$

Získali sme tak *bezčasovú Schrödingerovu rovnicu pre časticu v potenciálovom poli*, ktorú prvýkrát postuloval¹⁹ Schrödinger taktiež na základe heuristických argumentov.

¹⁸Z matematickej analýzy vieme, že platí $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\psi(x - \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x + \Delta x)}{\Delta x^2} \equiv \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$. Jednoduchou úpravou rovnica (1.23) potom zodpovedá bezčasovej Schrödingerovej rovnici v diferenciálnom tvare (1.18) s $V(x) = 0$, s ktorým študenta v tomto prístupe nemusíme vôbec oboznámiť.

¹⁹Nie však v diferencnom, ale v diferenciálnom tvare (1.18).

Kapitola 2

Modelovanie získaných výsledkov v EJS

2.1 Fyzikálny princíp počítačového modelovania

Najdôležitejším výsledkom predchádzajúcej kapitoly je diferenčný tvar bezčasovej Schrödingerovej rovnice, ktorý je vlastne rekurentným predpisom (1.24) pre množinu kvantových amplitúd (nazývanú vlnová funkcia) nájdenia častice v priestore v danom čase. Tento tvar nám umožňuje hľadať stacionárne stavy častice s potenciálnou energiou $V(x)$. Od čoho závisí tvar riešenia? Ktoré riešenia sú fyzikálne prípustné?

Pozrime sa, čo všetko nám prezradí rovnica (1.24). Z jej tvaru je zrejmé, že vlnovú funkciu ψ môžeme reprezentovať ako zoznam, resp. postupnosť šípok $\psi(x_i)$. Prepíšme si teda vzťah (1.24) do indexovanej podoby

$$\psi(x_{i+1}) = 2\psi(x_i) - \psi(x_{i-1}) - \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2}[E - V(x_i)]\psi(x_i), \quad (2.1)$$

pričom si budeme pamätať, že medzi každými dvoma bodmi x_i a x_{i+1} je vzdialenosť Δx . Vidíme, že ak chceme určiť zoznam šípok, musíme niekde začať — stanoviť dve hodnoty $\psi(x_0)$ a $\psi(x_1)$. Navyše riešenie bude závisieť aj na výbere celkovej energie častice E .

Ako voliť tieto všetky parametre? Ako sa ukázalo v kvantovej mechanike, jedinou obmedzujúcou podmienkou je len to, či množina šípok dáva, alebo nedáva fyzikálne prípustne situácie. Fyzikálne štvorec veľkosti každej šípky $\psi(x_i)$ určuje pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v malom okolí bodu x_i so šírkou Δx . Potom ale súčet štvorcov všetkých šípok pri viazaných¹ stavoch častíc musí byť rovný 1.

¹Sú to stavy, kde potenciálna energia častice pre x idúce do $\pm\infty$ je väčšia ako celková energia

Je predsa isté, že častica sa niekde nachádza, t.j. s pravdepodobnosťou 1 ju iste nájdeme niekde v priestore! Toto jednoduché obmedzenie pre fyzikálne prípustné vlnové funkcie nazývame normalizačná podmienka.

Dosadením do rovnice (2.1) sa ľahko presvedčíme, že ak ψ je riešením, tak aj jeho ľubovoľný nenulový násobok je riešením. Povedzme, že sa nám podarilo nájsť riešenie ψ , pre ktoré je súčet hodnôt [veľkosť $\psi(x_i)]^2$ konečný. Pomenujme hodnotu tohto súčtu S . Pomocou nej vieme vytvoriť iné riešenie $\psi' = \psi/\sqrt{S}$, ktoré už zrejme spĺňa normalizačnú podmienku. Teda stačí, aby súčet štvorcov všetkých šípok bol konečný. To ale znamená, že pre $x \rightarrow \pm\infty$ musia dĺžky šípok dostatočne rýchlo klesať k nule. Inak by pravdepodobnosť nemohla byť konečná (jednotková).

Samozrejme pomocou počítača Schrödingerovu rovnicu vieme riešiť iba na ohraničených intervaloch. Z predchádzajúceho odstavca vyplýva, že veľmi rozumným priblížením je zvoliť šípku $\psi(x_0)$ nulovú, ak vezmeme x_0 dostatočne ďaleko od skúmanej oblasti. Ale druhú šípku $\psi(x_1)$ už nemôžeme zvoliť nulovú! Schrödingerova rovnica (vzťah 2.1) by potom totiž dávala aj všetky ďalšie $\psi(x_i)$ nulové a to by viedlo k tomu, že pravdepodobnosť nájdenia častice v priestore je nulová, t.j. k neexistencii častice. Vzhľadom na to, že riešenie budeme aj tak normalizovať, môžeme zvoliť dĺžku šípky $\psi(x_1)$ ľubovoľne, ale nenulovo.

Zatiaľ sme nič nevraveli o orientácii šípok $\psi(x_i)$. Zo Schrödingerovej rovnice (vzťah 2.1) je evidentné, že pri voľbe $\psi(x_0) = 0$ sú všetky šípky vo vlnovej rovnici násobkom $\psi(x_1)$, inými slovami sú vždy v paralelných smeroch.² Aby sme mohli výslednú vlnovú funkciu prehľadne zakresliť do grafu, zvolíme uhol všetkých šípok rovný $\pm 90^\circ$.

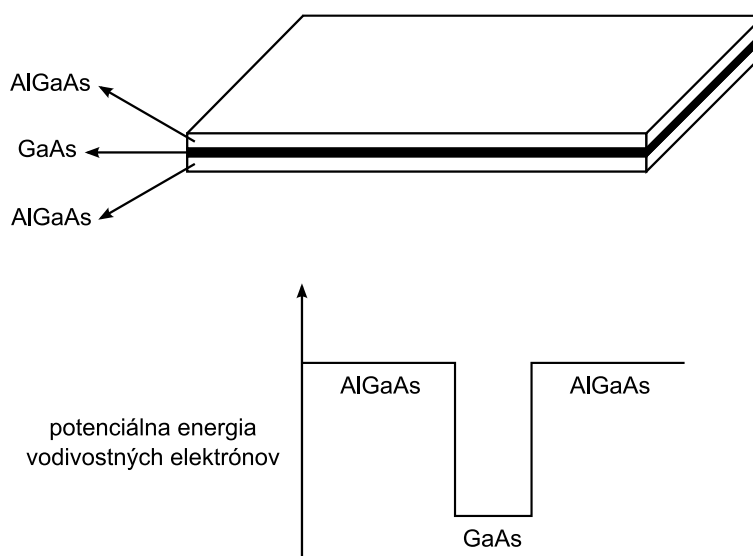
Zostal nám ešte posledný voľný parameter, energia E . Budeme ju hľadať pomocou postupných numerických riešení bezčasovej Schrödingerovej rovnice pre rôzne hodnoty E , opäť tak, aby sme dostali fyzikálne prípustnú situáciu.

2.2 Implementácia v prostredí EJS s ilustračným príkladom

Vyššie spomenutý teoretický model sme aplikovali pri tvorbe programu hľadajúceho stacionárne stavy častíc. Na implementáciu uvedeného algoritmu bolo zvolené častice E . V klasickej fyzike by sa taká častica pohybovala len v obmedzenej časti priestoru, čiže je viazaná, pretože podľa zákona zachovania energie nemôže dosiahnuť oblasti, kde $V(x) > E$.

²Tento poznatok pri viazaných stacionárnych stavoch sa dá ukázať aj za pomoci diferenciálneho počtu zo štandardného diferenciálneho tvaru Schrödingerovej rovnice (Shankar, 1994).

prostredie EJS (viď Príloha C).

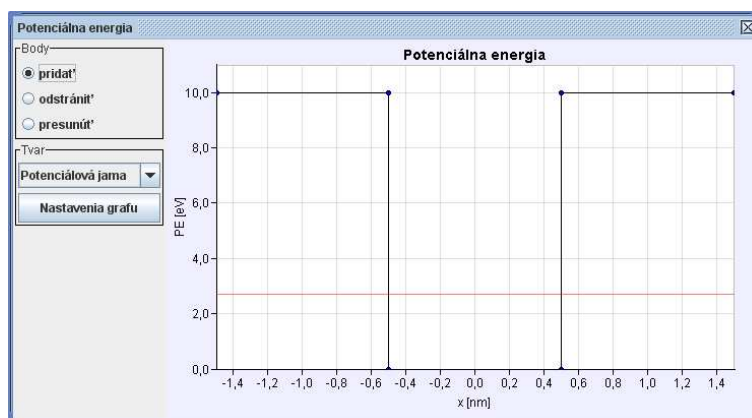


Obr. 2.1: Polovodičová trojvrstva a priebeh potenciálnej energie vodivostných elektrónov v jej priereze.

Spôsob práce s programom si ukážeme na známom jednoduchom príklade elektrónu v potenciálovej jame, v tomto prípade s hĺbkou 10 eV a šírkou 3 nm. Upozorňujeme však, že v programe možno modelovať stacionárne stavy pre ľubovoľný fyzikálne rozumný potenciál.

Vo väčšine odbornej literatúry sa príklad s potenciálovou jamou považuje za akademický, bez praktického využitia. Opak je však pravdou. Potenciálová jama je veľmi dobrým modelom priebehu potenciálu v prípade niektorých polovodičových súčiastok. Na obr. 2.1 je znázornená súčiastka vytvorená z dvoch vrstiev AlGaAs, medzi ktorými sa nachádza veľmi tenká vrstva GaAs. Zobrazený je aj priebeh potenciálnej energie vodivostných elektrónov na rozhraní vrstiev. Takáto trojvrstva sa používa pri výrobe polovodičových laserov, ktoré nájdeme v CD-ROM a DVD-ROM mechanikách, laserových tlačiarňach, či laserových ukazovadlách (Hey a Walters, 2003).

Používateľské rozhranie nášho programu je rozdelené do dvoch logických častí. Okno s názvom „Potenciálna energia“ slúži na vytvorenie funkcie potenciálnej energie častice v závislosti od polohy, obr. 2.2. Funkcia je reprezentovaná lomenou čiarou, pričom používateľ môže interaktívne pridávať, odoberať i presúvať deliace body. Inými slovami môže vytvoriť prakticky akúkoľvek funkciu potenciálnej energie. Pre pohodlnú a rýchlu prácu s programom je taktiež implementovaná možnosť auto-



Obr. 2.2: Okno, v ktorom môže používateľ vytvoriť prakticky ľubovoľnú funkciu potenciálnej energie. Vodorovná čiara naprieč grafom zobrazuje práve nastavenú hodnotu celkovej energie častice.

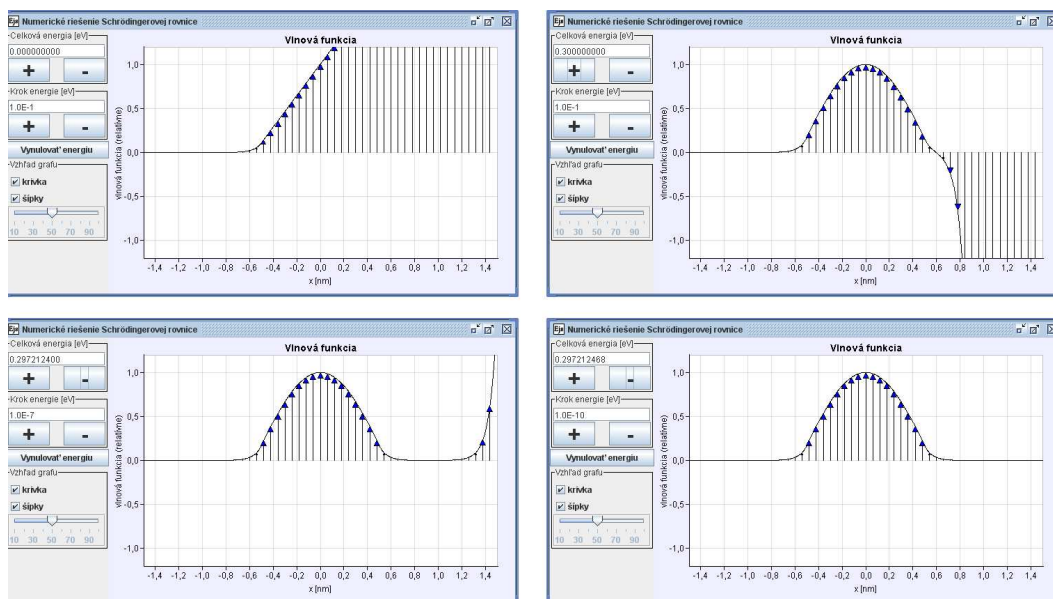
matického vytvorenia niektorých špeciálnych priebehov potenciálnej energie (napr. potenciálová jama, „jednorozmerné coulombovské“ pole ap.). Mierku grafu je možné upraviť po kliknutí na tlačidlo „Nastavenia grafu“.

Druhé okno programu slúži na samotné hľadanie riešenia Schrödingerovej rovnice pre zadaný priebeh potenciálnej energie. Pri štarte programu sa automaticky nastaví nulová celková energia častice. Program vygeneruje priebeh vlnovej funkcie pomocou vzťahu (2.1). Výsledok je znázornený na obr. 2.3 vľavo hore.

Zo zobrazenej časti priebehu je zrejmé, že šípky sa pre veľké hodnoty x predlžujú nad všetky medze, a teda nejde o fyzikálne prípustné riešenie. To je dôležitý výsledok kvantovej mechaniky — viazaná častica nemôže mať nulovú energiu! Pomocou tlačidiel budeme postupne zvyšovať energiu (stlačením tlačidiel „+“ a „-“). Pri energii 0.3 eV nastane opačná situácia — šípky sa budú s narastajúcim x opäť predlžovať, ale tentoraz budú smerovať nadol, obr. 2.3 vpravo hore. Intuitívne vieme, že niekde medzi 0 eV a 0.3 eV musí existovať energia, pre ktorú šípky „neutečú“ ani nahor, ani nadol. Zmenšíme krok energie a budeme ju znižovať, kým šípky opäť nezačnú rásť smerom do kladného nekonečna. Postup opakujeme, koľkokrát je potrebné. Z obr. 2.3 je zrejmé, že tento algoritmus konverguje k hľadanému normalizovateľnému riešeniu.³ Našli sme základný stav elektrónu v potenciálovej jame. Opätovným zvyšovaním energie by sme mohli hľadať vyššie excitované stavy.

Vzhľadom na použitý algoritmus riešenia Schrödingerovej rovnice dosahuje hodnota energie elektrónu určenej programom presnosť okolo 1%, čo je na didaktické

³V numerickej matematike opísaný postup nazýva metóda strelby.



Obr. 2.3: Postupné hľadanie stacionárneho stavu elektrónu v potenciálovej jame.

účely úplne postačujúce. Študent pri práci s týmto softvérom môže:

- naučiť sa posúdiť, či dané riešenie má fyzikálny zmysel, alebo nie
- rozšíriť svoju fyzikálnu intuíciu aj na oblasť kvantovej mechaniky
- získať predstavu o povahe vlnovej funkcie a interpretácii kvantových amplitúd
- prísť k záveru, že najnižšia energia viazanej častice nie je nulová
- zistiť, že energia častice v potenciálovom poli je kvantovaná

Pri experimentovaní s týmto programom študent interaktívne mení parametre riešenia a skúma dôsledky týchto zmien. Podľa známej pyramídy učenia (Hanč, 2005) si pri vlastnej aktívnej činnosti zapamätá až 75% získaných poznatkov. Pre porovnanie úspešnosť klasickej prednášky je približne 5%, resp. klasickej teoretických cvičení 15%. Preto má tento program dobré predpoklady na úspešné využitie vo výučbe kvantovej mechaniky. Túto hypotézu podporuje aj poznatok súčasného výskumu v didaktike fyziky, a to že použitie počítačového softvéru pri výučbe kvantovej mechaniky výrazne pomáha jej zvládnutiu (Ogborn, 2000; Taylor, 2000; Singh, Belloni, Christian, 2006).

Záver

Témou tejto práce bolo vytváranie teoretických i počítačových modelov reálnych fyzikálnych situácií, so zameraním na Feynmanovu kvantovú mechaniku. Na názornom príklade sme ilustrovali postuláty a základný princíp vytvárania kvalitatívnych predpovedí v tejto formulácii kvantovej mechaniky. Aplikáciou získaných poznatkov na prípad elektrónov emitovaných monochromatickým zdrojom sme našli globálny popis de Broglieho vlny. Následne sme pomocou jednoduchých geometrických úvah odvodili lokálny popis tejto vlny a získali tak Schrödingerovu rovnicu, ktorú sme rozšírili na prípad viazanej častice.

Posledná kapitola prezentuje počítačový model, vytvorený v prostredí EJS, ktorý numerickým riešením bezčasovej Schrödingerovej hľadá stacionárne stavy viazanej častice. V práci boli dosiahnuté tieto konkrétne výsledky:

- Ukázali sme, že de Broglieho vlny je možné pomocou Feynmanovej formulácie kvalitatívne vysvetliť len použitím stredoškolskej matematiky. V prílohe A sme navyše uviedli alternatívne matematické odvodenie dvoma rôznymi spôsobmi (metódou stacionárnej fázy a deriváciou integrálu podľa parametra), ktoré úrovňou zodpovedá vyššej matematike používanej na vysokej škole.
- Nájdením a zovšeobecnením lokálneho popisu de Broglieho vlny sme dostali bezčasovú Schrödingerovu rovnicu v rámci Feynmanovej formulácie a ukázali, že študent úvodného kurzu všeobecnej fyziky v časti atómová fyzika nemusí chápať vlnovú funkciu ako abstraktnú komplexnú funkciu, ktorá spĺňa diferenciálnu rovnicu, ale ten istý fyzikálny stav vie popísať ako množinu šípok, ktoré sú generované jednoduchým rekurentným predpisom.
- Získané poznatky sme aplikovali pri vytvorení počítačového modelu v prostredí EJS, ktorý dokáže hľadať stacionárne stavy častice v prakticky ľubovoľnom jednorozmernom potenciáli.
- Vo forme príloh sme uviedli štandardné odvodenie Schrödingerovej rovnice,

ktoré je matematicky ekvivalentné s našim geomterickým, ďalej základné vlastnosti prostredia EJS a stredoškolské geometrické vysvetlenie známych aproximácii funkcie $\sin(\varepsilon) \approx \varepsilon$ a $\cos(\varepsilon) \approx 1 - (\varepsilon^2/2)$ pre $\varepsilon \ll 1$.

Dôležitým výsledkom práce je potvrdenie menšej konceptuálnej i matematickej náročnosti Feynmanovej formulácie v porovnaní s tradičnou Schrödingerovou.

Študenti i učitelia sú na Slovensku pomerne dobre oboznámení s Java appletmi, ktoré dokážu zlepšiť a zefektívniť výučbu, preto vytvorený počítačový program by nemal mať problém uplatniť sa v praxi. Navyše tým, že program bol vyvinutý v prostredí Easy Java Simulations (EJS), jeho zdrojový kód je v jazyku Java, teda je kompatibilný s drvivou väčšinou dnes používaných operačných systémov.

Literatúra

ESQUEMBRE, F.: *Easy Java Simulations, The Manual.*, University of Murcia, Spain, http://www.um.es/fem/Download/Ejs/EjsManual_en.3.4.050914.pdf

FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B., SANDS, M.: *Feynmanove prednášky z fyziky, diel 2.* Alfa: Bratislava, 1982, s. 24, ISBN 6309282

FEYNMAN, R. P., ZEE, A.: *QED, The Strange Theory of Light and Matter.* Princeton University Press, Princeton, 1985 (slovenský preklad, QED, Nezvyčajná teória svetla a látky, Enigma, Nitra, 2000)

FORMÁNEK, J.: *Úvod do kvantovej teórie I., II.* 1. vyd. Praha: Academia, 2004, ISBN 8020011765

HANČ, J.: *Aplikácia Feynmanovho prístupu vo vyučovaní kvantovej mechaniky, dizertačná práca.* UPJŠ, Košice, 2005

HANČ, J.: *Time-independent Schrodinger's equation in the frame of Feynman's version of quantum mechanics.* 11th Workshop on Multimedia in Physics Teaching and Learning, University of Szeged, 2006

HEY, T., WALTERS, P.: *Nový kvantový vesmír.* Praha: Argo, 2003, ISBN 8072036998

MÜLLER-KIRSTEN, H. J. W.: *Introduction to Quantum Mechanics: Schrödinger Equation And Path Integral.* 1. vyd. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2006, ISBN 9812566929

OGBORN, J., WHITEHOUSE, M. (eds.): *Advancing Physics A1.* Bristol: Institute of Physics Publishing, 2000, ISBN 0750305851

OGBORN, J., WHITEHOUSE, M. (eds.): *Advancing Physics A2.* Bristol: Institute of Physics Publishing, 2001, ISBN 0750306777

- SHANKAR, R.: *Principles of Quantum Mechanics*. 3. vyd. New York: Springer publishing, 1994, ISBN 0306447908
- SINGH, Ch., BELLONI, M., CHRISTIAN, W.: *Improving student's understanding of quantum mechanics*. In: *Physics Today*, roč. 59 (2006), s. 43-49
- SKÁLA, L.: *Úvod do kvantovej mechaniky*. 1. vyd. Praha: Academia, 2005. 281 s. ISBN 80-200-1316-4
- STYER, D. F.: *The Strange World of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2000, ISBN 0521667801
- STYER, D. F. et al.: *Nine formulations of quantum mechanics*. In: *American Journal of Physics*, roč. 70 (2002), s. 288-297
- TAYLOR, E. F., VOKOS, S., O'MEARA, J. M., THORNBUR, N. S.: *Teaching Feynman's sum-over-paths quantum theory*. In: *Computers in Physics*, roč. 12 (1998), s. 190-199
- TAYLOR, E. F.: *Demystifying Quantum Mechanics, Workbook*. MIT, Draft version of July 2000, <http://www.eftaylor.com/download.html>

Zoznam príloh

Príloha A: Odvodenie de Broglieho vlny pomocou vyššej matematiky

Príloha B: Štandardný postup pri postulovaní Schrödingerovej rovnice

Príloha C: Easy Java Simulations

Príloha D: Aproximácia goniometrických funkcií pomocou geometrie

Príloha A

Odvedenie de Broglieho vlny pomocou vyššej matematiky

Metóda stacionárnej fázy

Metóda stacionárnej fázy nám umožňuje približne vypočítať hodnotu integrálov tvaru

$$I(\lambda) = \int_a^b g(x) \exp\{i\lambda f(x)\} dx \quad (\text{A.1})$$

kde $a, b, \lambda \in \mathbb{R}$, $f, g \in \mathbb{R}[x]$. Základným predpokladom tejto metódy je existencia práve jedného minima funkcie f v bode $x_0 \in (a, b)$. Pre "veľmi veľké" hodnoty parametra λ potom platí

$$I(\lambda) = g(x_0) \sqrt{\frac{2\pi}{i\lambda f''(x_0)}} \exp\{i\lambda f(x_0)\} \quad (\text{A.2})$$

Pomocou tejto metódy odvodíme presný tvar de Broglieho vlny prislúchajúcej elektrónom emitovaným monochromatickým zdrojom. Budeme vychádzať z predpokladov a označenia zavedeného v kapitole 1.2.

Z definície monochromatického zdroja vyplýva pre kvantovú amplitúdu emisie elektrónu vzťah

$$A(T) = A_0 \exp\{-i2\pi f(t - T)\} = A_0 \exp\{i2\pi fT\} \exp\{-i2\pi ft\} \quad (\text{A.3})$$

Propagátor pre prechod voľného elektrónu z bodu emisie do bodu detekcie má tvar

$$K(r; T) = \sqrt{\frac{m}{i\hbar T}} \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} \frac{mr^2}{T}\right\} \quad (\text{A.4})$$

Amplitúda zloženej udalosti - emisie a prechodu - je daná súčinom komplexných čísel (A.3) a (A.4)

$$\varphi(T) = A_0 \sqrt{\frac{m}{i\hbar T}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m r^2}{2 T} + hfT\right)\right\} \exp\{-i2\pi ft\} \quad (\text{A.5})$$

V spojitom prípade súčet amplitúd pre všetky možné T prejde na integrál

$$\psi = A_0 \sqrt{\frac{m}{i\hbar}} \exp\{-i2\pi ft\} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{T}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m r^2}{2 T} + hfT\right)\right\} dT \quad (\text{A.6})$$

ktorého hodnotu určíme metódou stacionárnej fázy. V našom prípade je (označenie funkcií ako vo vzťahu (A.1))

$$g(T) = \frac{1}{\sqrt{T}} \quad (\text{A.7})$$

$$f(T) = \frac{m r^2}{2 T} + hfT \quad (\text{A.8})$$

$$\lambda = \frac{1}{\hbar} \quad (\text{A.9})$$

Podľa (A.9) je $\lambda \approx 10^{34}$, teda táto metóda by mala poskytnúť veľmi presný výsledok.

Z podmienok pre minimum funkcie f ($f'(T_0) = 0$, $f''(T_0) > 0$) ľahko nájdeme bod T_0

$$T_0 = \frac{m|r|}{\sqrt{2mhf}} \quad (\text{A.10})$$

Určíme ešte potrebné konštanty

$$f(T_0) = \sqrt{2mhf}|r| \quad (\text{A.11})$$

$$f''(T_0) = \frac{\sqrt{(2mhf)^3}}{m^2|r|} \quad (\text{A.12})$$

$$g(\tau_0) = \sqrt[4]{\frac{2mhf}{m^2 r^2}} \quad (\text{A.13})$$

Po dosadení týchto hodnôt do (A.2), následne do (A.6) a úprave dostaneme

$$\psi = \frac{A_0 m}{\sqrt{2mhf}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(\sqrt{2mhf}|r| - hfT\right)\right\} \quad (\text{A.14})$$

V kapitole 1.2 sme ukázali, že hf je energia elektrónu a $\sqrt{2mhf}$ je absolútna hodnota jeho hybnosti. Ďalej si uvedomme, že písmenom r sme označili rozdiel $x - y$. Potom môžeme ψ vyjadriť ako funkciu polohy detektora v priestoročase

$$\psi(x, t) = C \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [p(x - y) - Et]\right\} \quad (\text{A.15})$$

Metóda derivácie integrálu podľa parametra

Na začiatku tejto kapitoly sme spomenuli, že metóda stacionárnej fázy je iba približnou metódou. Ako presný je výsledok, ktorý sme dostali? V prípade integrálu (A.6) existuje aj jeho exaktné riešenie, s využitím derivácie podľa parametra.

Kvôli prehľadnosti označme

$$I = 2A_0 \sqrt{\frac{m}{i\hbar}} \exp\{-i2\pi ft\} I^* \quad (\text{A.16})$$

$$I^* = \int_0^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{T}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m r^2}{2 T} + hfT\right)\right\} dT \quad (\text{A.17})$$

Integrál I^* sa značne zjednoduší substitúciou $z = \sqrt{T}$

$$I^* = \int_0^{\infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m r^2}{2 z^2} + hfz^2\right)\right\} dz \quad (\text{A.18})$$

Zavedením parametrov

$$a = \frac{mr^2}{2\hbar} \quad (\text{A.19})$$

$$b = \frac{hf}{\hbar} \quad (\text{A.20})$$

dostaneme parametrický integrál

$$I^*(a, b) = \int_0^{\infty} \exp\left\{\frac{ia}{z^2} + ibz^2\right\} dz \quad (\text{A.21})$$

Nasleduje použitie metódy derivácie podľa parametra, pričom budeme derivovať podľa parametra a

$$\frac{\partial I^*}{\partial a} = \int_0^{\infty} \frac{i}{z^2} \exp\left\{\frac{ia}{z^2} + ibz^2\right\} dz \quad (\text{A.22})$$

Zdá sa, že sme sa dostali „z blata do kaluže“ Integrál sa deriváciou vôbec nezjednodušil, skôr naopak. Kľúčovým bodom celého výpočtu je zavedenie substitúcie

$$s = \sqrt{\frac{a}{b}} \frac{1}{z} \quad (\text{A.23})$$

$$ds = -\sqrt{\frac{a}{b}} \frac{dz}{z^2} \quad (\text{A.24})$$

Po jednoduchej úprave tak dostaneme

$$\frac{\partial I^*}{\partial a} = i\sqrt{\frac{b}{a}} \int_0^{\infty} \exp\left\{\frac{ia}{s^2} + ibs^2\right\} ds = i\sqrt{\frac{b}{a}} I^* \quad (\text{A.25})$$

Pre hľadaný integrál I^* sme tak získali diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial I^*}{\partial a} = i\sqrt{\frac{b}{a}}I^* \quad (\text{A.26})$$

ktorej riešením sú funkcie tvaru

$$I^* = K \exp\{2i\sqrt{ab}\}, \quad k \geq 0 \quad (\text{A.27})$$

Konštantu K musíme určiť výpočtom integrálu $I^*(a, b)$ v niektorom a . Zrejme bude výhodný bod $a = 0$, v keďže $I^*(0, b)$ je známy Fresnelov integrál

$$K = I^*(0, b) = \int_0^\infty \exp\{ibz^2\} dz = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{i\pi}{b}} \quad (\text{A.28})$$

Teda našim počiatočným podmienkam vyhovuje riešenie

$$I^*(a, b) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{i\pi}{b}} \exp\{2i\sqrt{ab}\} \quad (\text{A.29})$$

Dosadením do (A.16), a úprave dostaneme vzťah (A.14), ktorý sme našli metódou stacionárnej fázy. Vidíme, že v tomto prípade poskytla metóda stacionárnej fázy presný výsledok.

Príloha B

Štandardný postup pri postulovaní Schrödingerovej rovnice

V kapitole 1.3 sme našli tvar Schrödingerovej rovnice pomocou geometrických úvah a jednoduchého matematického aparátu. Na tomto mieste ukážeme, že ten istý výsledok môžeme dosiahnuť oveľa rýchlejšie, ale aj s oveľa vyššou mierou abstrakcie, pomocou diferenciálneho počtu.

Opäť budeme uvažovať zväzok elektrónov emitovaných monochromatickým zdrojom, pre ktoré už poznáme tvar vlnovej funkcie

$$\psi(x, t) = C \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} \quad (\text{B.1})$$

Pokúsime sa nájsť diferenciálnu rovnicu, ktorej riešením je funkcia (B.1). Za týmto cieľom derivujeme funkciu (B.1) dvakrát podľa polohy a raz podľa času.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -C \frac{p^2}{\hbar^2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -C \frac{iE}{\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - Et) \right\} = -i \frac{E}{\hbar} \psi \quad (\text{B.3})$$

Použitím rovnosti $p^2 = 2mE$ pri skombinovaní rovníc (B.2) a (B.3) dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{B.4})$$

Rovnica (B.4) udáva priestorový i časový vývoj de Broglieho vlny. V praktických aplikáciách sa však príliš neuplatní, pretože popisuje iba voľné častice.

Čo sa zmení v prítomnosti silového poľa popísaného potenciálom? Výraz pre hybnosť častice nadobudne tvar $p^2 = 2m[E - V(x)]$, pričom E je celková a $V(x)$ po-

tenciálna energia častice. Skúsme znova skombinovať rovnice (B.2) a (B.3), tentoraz použitím vzťahu pre hybnosť viazanej častice. Získame rovnosti

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi - V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - V\psi \quad (\text{B.5})$$

ktoré vieme zapísať aj v tvare

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \quad (\text{B.6})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{B.7})$$

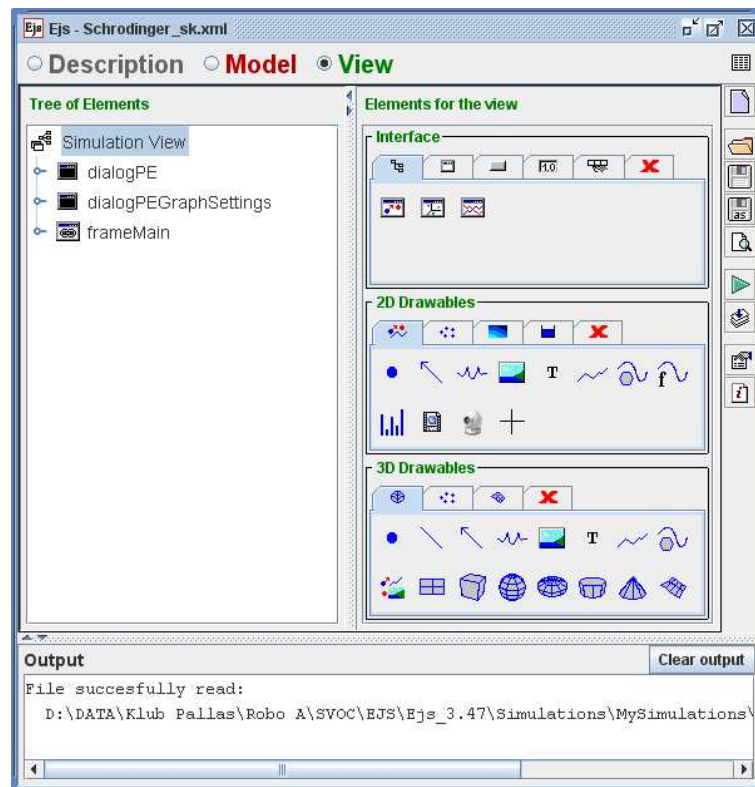
Rovnicu (B.6) nazývame bezčasová Schrödingerova rovnica, pretože popisuje stacionárne stavy. Rovnica (B.7) popisuje priestoročasový vývoj vlnovej funkcie, a tak ju nazývame časová Schrödingerova rovnica.

Rovnako ako v kapitole 1.3 musíme zdôrazniť, že uvedený postup nie je odvodením Schrödingerovej rovnice, pretože pri prechode k prípadu viazanej častice sme porušili pôvodné predpoklady. Napriek tomu doposiaľ uskutočnené experimenty dokazujú, že táto rovnica dáva správne predpovede. Preto ju postulujeme ako základnú axiómu Schrödingerovej formulácie kvantovej mechaniky.

Príloha C

Easy Java Simulations

Počítačové modelovanie je veľmi silným nástrojom, ktorý dokáže zefektívniť výučbu a umožňuje študentom hlbšie vniknúť do preberanej problematiky. V mnohých prípadoch môže nahradiť experiment, najmä ak by bol príliš časovo náročný, či technicky neuskutočniteľný. Ideálna je však kombinácia klasickej výučby, počítačového modelovania a reálneho experimentu.



Prostredie Easy Java Simulations (EJS) na vyššie uvedenom obrázku je určené na efektívnu tvorbu interaktívnych fyzikálnych modelov a simulácií. Jeho autorom je Prof. Francisco Esquembre, ktorý ho naprogramoval v jazyku Java v rámci projektu

Open Source Physics.

EJS je z technického hľadiska program, ktorý značne zjednodušuje tvorbu ďalších programov. Už z názvu je zrejmé, že prostredie EJS používa na tvorbu simulácií programovací jazyk Java, ktorý má oproti iným jazykom množstvo výhod:

- programy v ňom vytvorené bežia na prakticky všetkých dnes používaných platformách
- umožňuje vytvárať tzv. applety, ktoré sa môžu voľne šíriť po sieti internet
- umožňuje vytvorenie programu, ktorý funguje ako applet na web stránke i ako samostatná aplikácia, bez nutnosti rekompilácie
- kompilátor jazyka Java nie je spoplatnený

Samozrejme jazyk Java má aj isté nevýhody, napr. relatívne pomalší beh programov, či väčšia pamäťová náročnosť. V prípade jednoduchých fyzikálnych modelov, na tvorbu ktorých je EJS určené, sú tieto nedostatky nepatrné popri spomínaných výhodách.

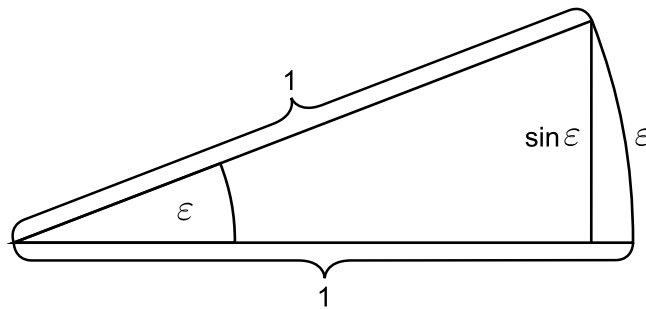
Každý kto sa už niekedy pokúsil naprogramovať hoci aj jednoduchý fyzikálny model vie, že väčšinu času i úsilia musel venovať technickej stránke programu a nie samotnému fyzikálnemu problému. Až tu sa prejaví skutočná sila prostredia EJS, keďže automatizuje mnoho úkonov pri vývoji programu. Je to najmä tvorba grafického používateľského rozhrania (GUI) a zabezpečenie interakcie s používateľom. Navyše má EJS zabudovaný nástroj na riešenie sústav obyčajných diferenciálnych rovníc, ktoré môžu predstavovať napr. pohybové rovnice sústavy hmotných bodov.

Podrobnejšie informácie o možnostiach a postupoch tvorby modelov v prostredí EJS sú obsiahnuté v používateľskej príručke (Esquembre, 2005).

Príloha D

Aproximácia goniometrických funkcií pomocou geometrie

V mnohých teoretických i praktických výpočtoch pracujeme s goniometrickými funkciami veľmi malých uhlov. Ako príklad môžeme uviesť problém určenia trajektórie kyvadla pri malých rozkyvoch, kde nahradenie funkcie sínus lineárnou funkciou značne zjednodušuje postup. Zvyčajný postup aproximácie všeobecnej funkcie tvorí nájdenie jej Taylorovho polynómu okolo vhodne zvoleného stredu a zanedbanie členov vyšších rádov. V prípade goniometrických funkcií existuje aj neporovnateľne jednoduchší postup - využitie geometrie.

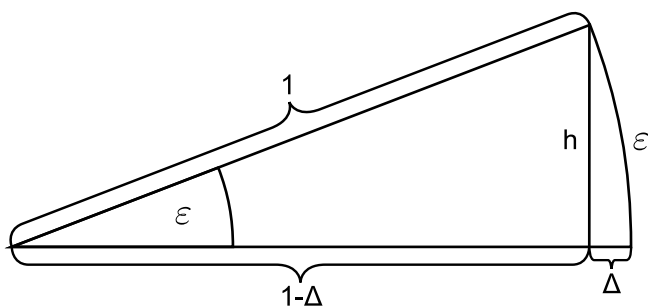


Aproximácia funkcie sínus je triviálna. Dĺžka oblúka na jednotkovej kružnici, zodpovedajúceho uhlu ε , je rovná veľkosti tohto uhlu vyjadreného v radiánoch. Z obrázka vyplýva, že pre veľmi malý uhol ε je dĺžka oblúka prislúchajúca uhlu ε približne rovná jeho sínusu.

$$\sin \varepsilon \approx \varepsilon \quad (\text{D.1})$$

V prípade funkcie kosínus použijeme postup R. P. Feynmana (Feynman, 1982), ktorý využíva platnosť Pytagorovej vety. Z obrázka na ďalšej strane vyplýva rovnosť

$$1^2 - (1 - \Delta)^2 = h^2 \quad (\text{D.2})$$



ktorú vieme ďalej upraviť

$$[1 + (1 - \Delta)] \cdot [1 - (1 - \Delta)] = h^2 \quad (\text{D.3})$$

$$(2 - \Delta) \cdot \Delta = h^2 \quad (\text{D.4})$$

Ak je uhol ε veľmi malý, musí byť malé aj Δ . Preto môžeme približne písať $2 - \Delta \approx 2$. Navyše $h = \sin \varepsilon \approx \varepsilon$.

$$2\Delta = \varepsilon^2 \quad (\text{D.5})$$

$$\Delta = \frac{\varepsilon^2}{2} \quad (\text{D.6})$$

Z obrázka vyplýva, že $\cos \varepsilon = 1 - \Delta$. Pre kosínus sme teda dostali aproximáciu

$$\cos \varepsilon \approx 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \quad (\text{D.7})$$