

Kapitola 10

Matematické dodatky

10.1 Komplexní čísla

10.2 Kroneckerovo delta a Levi-Civitův symbol

10.3 Einsteinova sumační konvence

Obsah

| | |
|---|-----------|
| 1 Úvod | 5 |
| 1.1 Cesta ke kvantové fyzice | 5 |
| 1.1.1 Záření absolutně černého tělesa | 6 |
| 1.1.2 Fotoelektrický jev | 7 |
| 1.1.3 Comptonův rozptyl | 9 |
| 1.1.4 Existence čárových emisních spekter atomů | 10 |
| 1.1.5 Korpuskulárně-vlnový dualismus | 11 |
| 1.2 V čem je kvantovka „jiná“ než klasická fyzika | 11 |
| 2 Základní postuláty kvantové mechaniky | 15 |
| 2.1 Popis stavu částice | 16 |
| 2.1.1 Vlnová funkce | 16 |
| 2.1.2 Statistická interpretace vlnové funkce | 18 |
| 2.1.3 Princip superpozice stavů | 21 |
| 2.1.4 Skalární součin vlnových funkcí | 23 |
| 2.1.5 Hilbertův prostor | 26 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.2 | Reprezentace fyzikálních veličin | 27 |
| 2.2.1 | Co je to operátor? | 27 |
| 2.2.2 | Lineární operátory | 29 |
| 2.2.3 | Hermitovské sdružení a hermitovský operátor | 30 |
| 2.2.4 | Operátory fyzikálních veličin | 33 |
| 2.2.5 | Komutační relace | 37 |
| 2.2.6 | Vlastní čísla a vlastní funkce operátoru | 45 |
| 2.3 | Měření v kvantové mechanice a relace neurčitosti | 55 |
| 2.3.1 | Vztah mezi komutativitou a společnými vlastními funkcemi | 59 |
| 2.3.2 | Relace neurčitosti | 62 |
| 2.4 | Časový vývoj stavu kvantového systému | 68 |
| 2.4.1 | Nestacionární Schrödingerova rovnice | 68 |
| 2.4.2 | Stacionární Schrödingerova rovnice | 69 |
| 2.4.3 | Rovnice kontinuity | 74 |
| 3 | Jednodimenzionální jednoduché systémy | 93 |
| 3.1 | Jak zobrazit vlnovou funkci | 93 |
| 3.2 | Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro konstantní potenciální energii | 95 |
| 3.3 | Po částech konstantní potenciální energie – napojování řešení | 98 |
| 3.4 | Potenciálový schod (stupeň) | 100 |
| 3.5 | Potenciálová bariéra a tunelový jev | 107 |

| | |
|---|------------|
| <i>OBSAH</i> | 325 |
| 3.6 Pravoúhlá konečně hluboká potenciálová jáma | 113 |
| 3.7 Pravoúhlá nekonečně hluboká potenciálová jáma | 119 |
| 3.8 Lineární harmonický oscilátor (LHO) | 127 |
| 3.9 Volná částice, řešení ve tvaru vlnového klubka | 136 |
| 3.10 Separace proměnných – převod vícerozměrných úloh na jednorozměrné . . | 136 |
| 4 Shrnutí a doplnění základních postulátů kvantové mechaniky | 141 |
| 5 Atom vodíku | 143 |
| 5.1 Problém dvou těles | 143 |
| 5.1.1 Hamiltonián atomu vodíku | 146 |
| 5.2 Schrödingerova rovnice pro atom vodíku | 148 |
| 5.2.1 Odvození tvaru některých operátorů ve sférických souřadnicích . . . | 148 |
| 5.2.2 Hamiltonián atomu vodíku ve sférických souřadnicích | 154 |
| 5.2.3 Hledání společného systému vlastních funkcí operátorů \hat{H} , \hat{L}^2 a \hat{L}_z . | 154 |
| 5.2.4 Celkové řešení | 159 |
| 5.3 Vlnové funkce stacionárních stavů atomu vodíku | 160 |
| 5.3.1 Sférická část vlnové funkce | 161 |
| 5.3.2 Radiální část vlnové funkce | 165 |
| 5.3.3 Tvar orbitalů atomu vodíku | 169 |
| 5.3.4 Kvantová čísla | 170 |
| 5.4 Další přiblížení modelu atomu vodíku | 172 |

| | |
|---|------------|
| 6 Spin | 185 |
| 6.1 Zavedení spinu do QM | 185 |
| 6.1.1 Popis spinového stavu a operátory spinu | 185 |
| 6.1.2 Spinový magnetický moment | 193 |
| 6.1.3 Spin a postulát o měření | 194 |
| 6.1.4 Spinová vlnová funkce | 197 |
| 6.1.5 Pauliho rovnice | 199 |
| 6.2 Zeemanův jev | 202 |
| 7 Přibližné metody | 211 |
| 7.1 Variační metoda | 211 |
| 7.1.1 Vzorově vyřešená úloha: Základní stav v nekonečně hluboké potenciálové jámě | 215 |
| 7.1.2 Úlohy k samostatnému řešení | 220 |
| 7.1.3 Ritzova variační metoda | 221 |
| 7.2 Poruchové metody | 227 |
| 7.2.1 Stacionární poruchová metoda pro nedegenerovaný stav | 228 |
| 7.2.2 Vzorově řešená úloha: Nekonečná jáma s nerovným dnem | 234 |
| 7.2.3 Vzorově řešená úloha: Poruchová metoda v maticovém formalismu | 237 |
| 7.2.4 Úlohy k samostatnému řešení | 237 |
| 7.2.5 Stacionární poruchová metoda pro degenerovaný stav | 238 |
| 7.2.6 Starkův jev | 243 |

| | |
|---|------------|
| <i>OBSAH</i> | 327 |
| 7.2.7 Nestacionární poruchová metoda | 243 |
| 7.2.8 Úlohy k procvičení | 247 |
| 8 Vícečásticové systémy | 249 |
| 8.1 Rozšíření postulátů kvantové mechaniky na systém s více částicemi | 249 |
| 8.1.1 Vlnová funkce vícečásticových systémů | 249 |
| 8.1.2 Operátory fyzikálních veličin | 251 |
| 8.1.3 Schrödingerova rovnice vícečásticových systémů | 253 |
| 8.2 Nerozlišitelnost částic | 260 |
| 8.2.1 Princip nerozlišitelnosti částic | 260 |
| 8.2.2 Pauliho vylučovací princip | 264 |
| 8.2.3 „Výměnná interakce“ | 266 |
| 8.3 Přidání spinu | 272 |
| 8.3.1 Skládání spinu $\frac{1}{2}$ | 273 |
| 8.3.2 Soustava dvou nerozlišitelných částic se spinem $1/2$ | 275 |
| 9 Chemická vazba | 285 |
| 9.1 Bornova–Oppenheimerova aproximace | 285 |
| 9.2 Shrnutí poznatků o elektronovém obalu | 286 |
| 9.2.1 Přechod od fyzikální k chemické bázi u orbitalů p | 289 |
| 9.3 Teorie valenční vazby | 294 |
| 9.3.1 Jednoduché anorganické molekuly | 295 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 9.3.2 | Hybridizace | 302 |
| 9.4 | Teorie molekulových orbitalů | 319 |
| 10 | Matematické dodatky | 321 |
| 10.1 | Komplexní čísla | 321 |
| 10.2 | Kroneckerovo delta a Levi-Civitův symbol | 321 |
| 10.3 | Einsteinova sumační konvence | 321 |